Письма в ЖЭТФ, том 122, вып. 10, с. 685 – 692

Орбитальный магнетизм в $\mathrm{Sr_2VO_4}$: конкуренция антиферрооктупольного и ферромагнитного упорядочений

Д. Е. Чижов, П. А. Игошев[1)]

Институт физики металлов, 620990 Екатеринбург, Россия

Поступила в редакцию 23 сентября 2025 г.
После переработки 17 октября 2023 г.
Принята к публикации 23 октября 2023 г.

Выведена эффективная модель типа Кугеля–Хомского, применимая к описанию магнитного и орбитального порядка в соединении $\mathrm{Sr_2VO_4}$. Для случая бесконечно большого параметра кристаллического поля (разница энергий xy- и xz, yz-состояний) построена фазовая диаграмма основного состояния в переменных "спин-орбитальное взаимодействие – хундовский обмен". Описан квантовый фазовый переход и выведено уравнение фазовой границы состояния со скрытым магнитным и орбитальным дальним порядком и слабоферромагнитного состояния с сопутствующим согласованным антиферроорбитальным порядком с той же амплитудой. Дано описание этих дальних порядков в терминах октупольных моментов, построенных через компоненты полного момента.

DOI: 10.31857/S0370274X25110217

Введение. Явление дальнего орбитального порядка, формирующегося в сильнокоррелированных системах с орбитальным вырождением, привлекает внимание исследователей, начиная с 1970-х гг. [1]. Актуальная конфигурация орбитального порядка определяется конкуренцией взаимодействий различного типа: спин-орбитального взаимодействия, расщепления в кристаллическом поле и хундовского обмена. Так, последний является причиной орбитально-альтернированного ферромагнитного состояния с максимальным значением параметра порядка. Наличие орбитального вырождения и сильного спин-орбитального взаимодействия приводит к "размораживанию" орбитального момента, что может приводить к интересным эффектам – метамагнитному переходу в $\mathrm{Sr_2IrO_4}$ [2] и состоянию топологического моттовского изолятора в $R_2\mathrm{Ir_2O_7}$ [3], где R – редкоземельный ион в состоянии 3+.

Перовскит $\mathrm{Sr_2VO_4}$, изоструктурный $\mathrm{La_2CuO_4}$ и $\mathrm{Sr_2IrO_4}$, содержащий один валентный d-электрон на узел (d^1-конфигурация t_{2g}-мультиплета), – антиферромагнитный изолятор с исчезающе низкой температурой антиферромагнитного упорядочения [4–6]. Экспериментально обнаружена аномалия магнитной восприимчивости при $\sim 100\,\mathrm{K}$, однако эксперименты по нейтронному рассеянию не обнаруживают магнитного момента даже при температуре $5\,\mathrm{K}$ [7–10]. Это соединение демонстрирует свойства как антиферромагнетика, так и слабого ферромагнетика при температурах ниже $100\,\mathrm{K}$ [11]. Для объяснения оптических [12] и магнитных [13] свойств была предложена идея о существовании орбитального порядка в плоскости $\mathrm{VO_2}$ при температуре $\lesssim 120\,\mathrm{K}$. Измерения магнитной восприимчивости и теплоемкости указывают не только на переход в состояние с орбитальным порядком при понижении температуры ниже $100\,\mathrm{K}$, но и на еще один переход в слабоферромагнитное состояние при $T \lesssim 10\,\mathrm{K}$ [14, 15]. Эксперименты по нейтронному рассеянию указывают на существование скрытого магнитного порядка, образованного крамерсовскими дублетами, при низких температурах [16]. Эксперименты по мюонной спиновой спектроскопии (μSR) свидетельствуют о формировании немагнитного дальнего порядка при $T \lesssim 100\,\mathrm{K}$ и антиферромагнитного порядка ниже $8\,\mathrm{K}$ [17] или неоднородного ферромагнитного состояния [18]. Расхождения в поведении магнитной восприимчивости [11] и [13] могут интерпретироваться как следствие в различии параметра решетки для направления, перпендикулярного плоскости $\mathrm{VO_2}$ [19]. Таким образом, дальний порядок в $\mathrm{Sr_2VO_4}$ может быть чувствителен к параметрам электронного спектра.

Для объяснения наблюдаемых свойств были предложены следующие состояния: димеризованное решение эффективной модели Кугеля–Хомского с зависящими от направления обменными интегралами [20], двухподрешеточный дальний порядок, соответствующий максимуму проекции полного электронного момента [21], двухподрешеточный порядок октуполей или изоспинов, стабилизованный

[1)]e-mail: igoshev_pa@imp.uran.ru

сильным спин-орбитальным взаимодействием [22], см. также [23, 24].

Комбинация методов функционала плотности (DFT) и ренормгруппы предсказывает сложный дальний спин-орбитальный порядок с увеличенным размером магнитной элементарной ячейки [25–27]. Чувствительность решения по отношению к параметру расщепления в кристаллическом поле $\Delta_{\rm CF}$ [28] может дать возможность управления скрытым порядком через изменение параметра решетки c [29].

В данной работе будет сформулирована и исследована эффективная трехорбитальная модель типа Кугеля–Хомского и определен тип дальнего порядка в двухподрешеточном приближении в зависимости от параметров спин-орбитального взаимодействия и хундовского обмена в случае большого расщепления кристаллическим полем между xy- и xz, yz-состояниями.

Модель. Рассмотрим гамильтониан вырожденной модели Хаббарда для t_{2g}-мультиплета на квадратной решетке: $\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{H}}_{\rm tr} + \hat{\mathcal{H}}_{\rm CF} + \hat{\mathcal{H}}_{\rm so} + \hat{\mathcal{H}}_{\rm Coulomb}$. $\hat{\mathcal{H}}_{\rm tr} = \sum_{\langle i,j\rangle,m,\sigma} t^m_{ij} c^\dagger_{im\sigma} c_{jm\sigma}$ описывает перенос электронов между узлами квадратной решетки. Здесь i, j – индексы узла решетки, $m = xz, xy, yz$ – орбитальный индекс, $\sigma \in \{\uparrow, \downarrow\}$ – спиновый, $c^\dagger_{im\sigma}$ и $c_{im\sigma}$ – операторы рождения и уничтожения электрона, $t^m_{ij} = -t\left(a^{xz}_{ij}\left(\delta_{m,xy} + \delta_{m,xz}\right) + a^{yz}_{ij}\left(\delta_{m,xy} + \delta_{m,yz}\right)\right)$ – интеграл перескока, a^{xz}_{ij} $\left(a^{yz}_{ij}\right) = 1$, если i и j – ближайшие соседи по оси x (y), иначе $= 0$. $\hat{\mathcal{H}}_{\rm CF} = \Delta_{\rm CF}\sum_i n_{i,xy}$ описывает расщепление одноэлектронных уровней кристаллическим полем, $\hat{\mathcal{H}}_{\rm so} = -\lambda \sum_{i,m,m'} \hat{\boldsymbol{\mathcal{S}}}_{imm'} \mathbf{l}_{mm'}$ – спин-орбитальное взаимодействие. Здесь $n_{im} = \sum_\sigma n_{im\sigma}$, $n_{im\sigma} = c^\dagger_{im\sigma} c_{im\sigma}$, λ – параметр спин-орбитального взаимодействия $(\lambda \geq 0)$, $\hat{\boldsymbol{\mathcal{S}}}_{imm'}$ – трехмерная часть (без нулевой компоненты) четырехмерного вектора операторов плотности-спина, обобщенного на многоорбитальный случай: $\hat{\mathcal{S}}^{(o)}_{imm'} = \frac{1}{2}\sum_{\sigma,\sigma'} c^\dagger_{im\sigma}\sigma^{(o)}_{\sigma\sigma'} c_{im'\sigma'}$, где $o = 0, x, y, z$, $\sigma^{(o)}$ – матрица Паули; $\mathbf{l}_{mm'}$ – трехмерный вектор матричных элементов эффективного орбитального момента $l = 1$ [30]: $l^{(o)}_{mm'} = -\mathrm{i}\varepsilon_{\tilde{o}mm'}$, где ε – тензор Леви–Чевита, $\tilde{x} = yz, \tilde{y} = xz, \tilde{z} = xy$.

Для t_{2g}-орбиталей оператор локального кулоновского взаимодействия $\hat{\mathcal{H}}_{\rm Coulomb}$ имеет вид: $\hat{\mathcal{H}}_{\rm Coulomb} = (U/2)\sum\limits_{i,m,\sigma} n_{im\sigma} n_{im\bar{\sigma}} + (U'/2)\sum\limits_{i,m\neq m'} n_{im} n_{im'} - (J/2)\sum\limits_{i,m\neq m';\sigma,\sigma'} c^\dagger_{im\sigma} c_{im\sigma'} c^\dagger_{im'\sigma'} c_{im'\sigma} - (J_d/2)\sum\limits_{i,m\neq m';\sigma} c^\dagger_{im\sigma} c_{im'\bar{\sigma}} c^\dagger_{im\bar{\sigma}} c_{im'\sigma}$, где $U = U' + 2J$, $J = J_d$ (параметризация Канамори [31]); U, U' – параметры Хаббарда, J – параметр хундовского обменного взаимодействия, J_d – параметр парного переноса; $\bar{\uparrow} = \downarrow, \bar{\downarrow} = \uparrow$.

В случае, когда имеется один электрон на узел, прямое применение теории возмущений во втором порядке по параметру t/U дает следующий эффективный обменный гамильтониан [28, 32]:

$$
\begin{aligned}
\hat{\mathcal{H}}_{\rm exch} = &-\frac{1}{2}\left(\frac{3}{U-3J} + \frac{1}{U-J}\right)\sum_{i,j,m} t^m_{ij} t^m_{ji} \hat{\mathcal{S}}^{(0)}_{imm} - \\
&-\left(\frac{1}{U-3J} - \frac{1}{U-J}\right)\sum_{i,j,m} t^m_{ij} t^m_{ji} \hat{\boldsymbol{\mathcal{S}}}_{imm} \hat{\mathbf{s}}_j + \\
&+\frac{2J}{(U+2J)(U-J)}\sum_{i,j,m,m'}\Big(t^m_{ij} t^{m'}_{ji} \cdot \\
&\cdot\left(\hat{\mathcal{S}}^{(0)}_{imm'}\hat{\mathcal{S}}^{(0)}_{jmm'} - \hat{\boldsymbol{\mathcal{S}}}_{imm'}\hat{\boldsymbol{\mathcal{S}}}_{jmm'}\right)\Big) + \\
&+\left(\frac{3}{U-3J} - \frac{1}{U-J}\right)\sum_{i,j,m,m'} t^m_{ij} t^{m'}_{ji} \hat{\mathcal{S}}^{(0)}_{imm'}\hat{\mathcal{S}}^{(0)}_{jm'm} + \\
&+\left(\frac{1}{U-3J} + \frac{1}{U-J}\right)\sum_{i,j,m,m'} t^m_{ij} t^{m'}_{ji} \hat{\boldsymbol{\mathcal{S}}}_{imm'}\hat{\boldsymbol{\mathcal{S}}}_{jm'm},
\end{aligned}
\tag{1}
$$

где $\hat{\mathbf{s}}_j = \sum_m \hat{\boldsymbol{\mathcal{S}}}_{jmm}$ – полный спин узла j.

При выводе гамильтониана мы пренебрегаем членами порядка $\lambda t^2/U^2$ и $\Delta_{\rm CF} t^2/U^2$, что соответствует случаю $\lambda, \Delta_{\rm CF} \ll U - 3J$ – несущественному изменению энергии возбужденных состояния, вызванного влиянием $\hat{\mathcal{H}}_{\rm CF}$, $\hat{\mathcal{H}}_{\rm so}$, и дает эффективный обменный гамильтониан (*effective exchange model*, EEM)

$$\hat{\mathcal{H}}_{\rm eff} = \hat{\mathcal{H}}_{\rm exch} + \hat{\mathcal{H}}_{\rm CF} + \hat{\mathcal{H}}_{\rm so}. \tag{2}$$

Эта модель хорошо подходит для описания орбитального порядка в таких слоистых перовскитах, как $\mathrm{Sr_2VO_4}$, с вырождением орбитального состояния и сильным кулоновским взаимодействием $W \ll U$ (W – ширина электронной зоны).

Рассмотрим случай большого параметра расщепления кристаллическим полем $\Delta_{\rm CF} \gg \lambda, t^2/(U-3J)$. При $\Delta_{\rm CF} = t$ заселенность xy-состояния мала, но конечна. В случае $\Delta_{\rm CF} = \infty$ xy-орбиталь всегда свободна (однако нужно помнить, что гамильтониан (2) выведен в приближении $\Delta_{\rm CF} \ll U - 3J$, что вполне реалистично для $\mathrm{Sr_2VO_4}$). Пусть орбиталь xz (yz) соответствует псевдоспину вверх (вниз), тогда суммы по m, m' фактически берутся только по этим двум орбиталям (проекциям псевдоспина) [33]. В этом случае удобно использовать представление $\hat{\mathcal{S}}^{(o)}_{imm'} = \frac{1}{2}\sum_r \sigma^{(r)}_{m'm}\hat{S}^{(o)}_{i,r}$, $r \in \{0, x, y, z\}$, причем $r = 0$ описывает зарядовые, как и ранее для o, а

$r = x, y, z$ – псевдоспиновые (орбитальные) степени свободы. Для единичного заполнения $\hat{S}^{(0)}_{i,0} = 1/2$.

В случае $\Delta_{\mathrm{CF}} = \infty$ получаем гамильтониан в терминах операторов $\hat{S}^{(o)}_{i,r}$:

$$\hat{\mathcal{H}}^{\Delta_{\mathrm{CF}}=\infty}_{\mathrm{exch}} = NE_0 + \frac{J_{\mathrm{ex}} u_z(J/U)}{2} \sum_{\langle i,j\rangle} \hat{S}^{(0)}_{i,z} \hat{S}^{(0)}_{j,z} + \\ + \frac{J_{\mathrm{ex}} v_0(J/U)}{2} \sum_{\langle i,j\rangle} \hat{\mathbf{S}}_{i,0} \hat{\mathbf{S}}_{j,0} + \frac{J_{\mathrm{ex}} v_z(J/U)}{2} \sum_{\langle i,j\rangle} \hat{\mathbf{S}}_{i,z} \hat{\mathbf{S}}_{j,z} + \\ + J_{\mathrm{ex}} \left(1 - \frac{J/U}{1+2J/U}\right) \sum_{\langle i,j\rangle} s_{ij} \hat{\mathbf{S}}_{i,z} \hat{\mathbf{S}}_{j,0}, \quad (3)$$

где N – число узлов решетки, $E_0 = -\frac{J_{\mathrm{ex}}}{8}\left(3 + \frac{2}{1-3J/U} + \frac{1}{1+2J/U}\right)$ – постоянный вклад в энергию, $J_{\mathrm{ex}} = t^2/(U-J)$, $u_z(x) = 1/(1-3x) + x/(1+2x)$, $v_0(x) = (1-4x)/(1-3x) - x/(1+2x)$, $v_z(x) = (1-2x)/(1-3x) - x/(1+2x)$, $s_{ij} = a^{xz}_{ij} - a^{yz}_{ij}$.

Используя представление $\hat{S}^{(o)}_{i,r} = 2\hat{s}^{(o)}_i \hat{\tau}^{(r)}_i$ через операторы псевдоспина $\hat{\tau}^{(r)}_i$, с точностью до членов порядка $(J/U)^2$ и постоянных вкладов получаем:

$$\hat{\mathcal{H}}^{\Delta_{\mathrm{CF}}=\infty}_{\mathrm{exch}} = \frac{t^2}{2U} \sum_{\langle i,j\rangle} \left((1 + 4\hat{\mathbf{s}}_i \hat{\mathbf{s}}_j) \left(\frac{1}{2} + s_{ij}\hat{\tau}^{(z)}_i\right) \cdot \right. \\ \left. \cdot \left(\frac{1}{2} + s_{ij}\hat{\tau}^{(z)}_j\right)\right) + \frac{J}{U} \cdot \frac{t^2}{2U} \sum_{\langle i,j\rangle} \left(5\hat{\tau}^{(z)}_i \hat{\tau}^{(z)}_j + \right. \\ \left. + 4\hat{\mathbf{s}}_i \hat{\mathbf{s}}_j \left(-\frac{1}{4} + \hat{\tau}^{(z)}_i \hat{\tau}^{(z)}_j + s_{ij}\left(\hat{\tau}^{(z)}_i + \hat{\tau}^{(z)}_j\right)\right)\right). \quad (4)$$

В случае сильного спин-орбитального взаимодействия удобно ввести операторы изоспина: $\hat{I}^{(x)}_i = \hat{S}^{(x)}_{i,z}$, $\hat{I}^{(y)}_i = \hat{S}^{(y)}_{i,z}$, $\hat{I}^{(z)}_i = \hat{s}^{(z)}_i$ [22]. Легко видеть, что коммутационные соотношения для изоспиновых операторов совпадают с обычными для спиновых. Также в этом случае удобно ввести квантовое число *псевдоорбитали*: $\zeta = +\ (-)$, если z-проекция орбитального момента сонаправлена (противоположно направлена) с z-проекцией спина – мы имеем базис $|\sigma\rangle_\zeta \equiv \left|l^{(z)} = \zeta\sigma\right\rangle \otimes |\sigma\rangle$, где $\left|l^{(z)} = \pm 1\right\rangle = (\mp|yz\rangle - \mathrm{i}\,|xz\rangle)/\sqrt{2}$. Для каждого значения ζ подпространство $L_\zeta \equiv \left\langle |\uparrow\rangle_\zeta, |\downarrow\rangle_\zeta \right\rangle$ инвариантно относительно действия любой компоненты оператора изоспина $I^{(o)}_i$ (в отличие от обычного оператора спина) и является собственным для оператора спин-орбитального взаимодействия $\hat{\mathcal{H}}_{\mathrm{so}}$. Псевдоорбитальный индекс заменяет псевдоспиновый. Оператор $\hat{\sigma}^{(x)}_i = 2\hat{\tau}^{(z)}_i$ меняет знак псевдоорбитали (не меняя изоспин), $\hat{\sigma}^{(z)}_i = -4\hat{s}^{(z)}_i \hat{\tau}^{(y)}_i$ дает знак псевдоорбитали.

Тогда гамильтониан (4) можно переписать в терминах операторов изоспина:

$$\hat{\mathcal{H}}^{\Delta_{\mathrm{CF}}=\infty}_{\mathrm{exch}} = \frac{t^2}{2U} \sum_{\langle i,j\rangle} \left(\left(1 + 4\hat{\mathbf{I}}_i \hat{\mathbf{I}}_j\right) \left(\frac{1}{2} + s_{ij}\hat{\tau}^{(z)}_i\right) \cdot \right. \\ \left. \cdot \left(\frac{1}{2} + s_{ij}\hat{\tau}^{(z)}_j\right)\right) + \frac{J}{U} \cdot \frac{t^2}{2U} \sum_{\langle i,j\rangle} \left(5\hat{\tau}^{(z)}_i \hat{\tau}^{(z)}_j + \right. \\ + 4 \sum_{o=x,y,z} \hat{I}^{(o)}_i \hat{I}^{(o)}_j \left((1 - 2\delta_{o,z}) \left(\frac{1}{4} - \hat{\tau}^{(z)}_i \hat{\tau}^{(z)}_j\right) + \right. \\ \left. \left. + s_{ij}\left(\hat{\tau}^{(z)}_i + \hat{\tau}^{(z)}_j\right)\right)\right). \quad (5)$$

Видно, что в нулевом порядке по J/U всем компонентам изоспина соответствует одинаковый обменный интеграл, то есть изоспиновый обмен полностью изотропен (анизотропия "легкая плоскость"). В первом порядке по J/U поправка к обменному интегралу становится анизотропной: для x, y компонент она усилена благодаря вкладу, пропорциональному $1/4 - \hat{\tau}^{(z)}_i \hat{\tau}^{(z)}_j \geq 0$.

Для гамильтониана спин-орбитального взаимодействия при $\Delta_{\mathrm{CF}} = \infty$ получаем: $\hat{\mathcal{H}}_{\mathrm{so}} = -\lambda \sum_{i,m\neq m'} \hat{\mathcal{S}}^{(z)}_{imm'} l^{(z)}_{mm'} = -\frac{\lambda}{2}\sum_i \hat{\sigma}^{(z)}_i$.

Результаты. Мы исследуем основное состояние гамильтониана (2) в двухподрешеточном приближении: $|\Psi\rangle = \prod_s \prod_{i\in s} \sum_{m\sigma} \alpha^s_{m\sigma} c^\dagger_{im\sigma} |\mathrm{VAC}\rangle$, где $|\mathrm{VAC}\rangle$ – состояние пустой решетки (вакуум), $\alpha^s_{m\sigma}$ – нормированные коэффициенты ($\sum_{m\sigma} |\alpha^s_{m\sigma}|^2 = 1$), $s \in \{\mathrm{A}, \mathrm{B}\}$ – индекс подрешетки. В этом приближении задача поиска основного состояния рассматриваемой модели эквивалентна задаче минимизации средней энергии $E = \langle\Psi|\hat{\mathcal{H}}_{\mathrm{eff}}|\Psi\rangle$ по коэффициентам $\alpha^s_{m\sigma}$. При этом E представляется в виде вещественной биквадратичной формы этих коэффициентов. Задача оптимизации такой формы эквивалентна задаче поиска наибольшего M-сингулярного значения матрицы, алгоритмы для решения этой задачи известны. Нами использовался итерационный алгоритм, описанный в работах [35, 36].

Для $E_{\mathrm{exch}} = \left\langle \hat{\mathcal{H}}^{\Delta_{\mathrm{CF}}=\infty}_{\mathrm{exch}} \right\rangle / N$, опуская постоянный вклад E_0, в двухподрешеточном приближении из выражения (3) получаем: $E_{\mathrm{exch}} = E_{\mathrm{exch},T} + E_{\mathrm{exch},M} + E_{\mathrm{exch},I}$, где $E_{\mathrm{exch},T} = 2J_{\mathrm{ex}} u_z(J/U) T_{\mathrm{A}} T_{\mathrm{B}}$, $E_{\mathrm{exch},M} = 2J_{\mathrm{ex}} v_0(J/U) \mathbf{M}_{\mathrm{A}} \mathbf{M}_{\mathrm{B}}$, $E_{\mathrm{exch},I} = 2J_{\mathrm{ex}} v_z(J/U) \mathbf{I}_{\mathrm{A}} \mathbf{I}_{\mathrm{B}}$, $T_s = \left\langle \hat{\tau}^{(z)}_s \right\rangle = \frac{1}{2}(N_{s,xz} - N_{s,yz})$ – среднее значение z-проекции псевдоспина, $N_{s,m} = 2\hat{\mathcal{S}}^{(0)}_{smm}$ – заселенность орбитали m на подрешетке s, $\mathbf{M}_s = \langle\hat{\mathbf{s}}_s\rangle$ ($\mathbf{I}_s = \left\langle \hat{\mathbf{I}}_s \right\rangle$) – вектор среднего спина (изоспина) на подрешетке s. Аналогично определим для средней энергии оператора $\hat{\mathcal{H}}_{\mathrm{so}}$, приходящейся на один узел:

$E_{\text{so}} = \left\langle \hat{\mathcal{H}}_{\text{so}} \right\rangle / N$. В двухподрешеточном приближении $E_{\text{so}} = -\frac{\lambda}{4}\sum_s \left\langle \hat{\sigma}_s^{(z)} \right\rangle$. Три члена, пропорциональные $u_z(J/U)$, $v_0(J/U)$ и $v_z(J/U)$, соответствуют обменному взаимодействию трех типов: псевдоспиновому (зарядовому), спиновому и изоспиновому соответственно. При этом константы связи по-разному зависят от J, см. рис. 1b: с ростом J зарядовый обмен растет быстрее, чем изоспиновый, а спиновый обмен убывает и меняет знак при $J \sim 0.24U$.

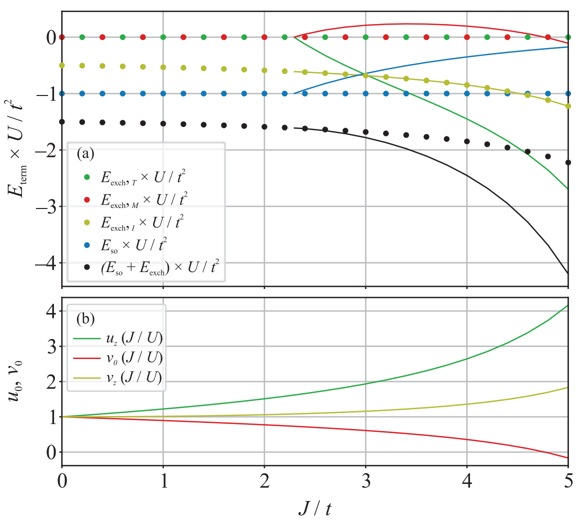

Рис. 1. (Цветной онлайн) $\lambda = 0.1t$, $\Delta_{\text{CF}} = +\infty$, $U = 20t$. Зависимость от J (a) – вкладов в энергию $E_{\text{exch},T} + E_{\text{exch},M} + E_{\text{exch},I} + E_{\text{so}}$, (b) – функций $u_z(J/U)$, $v_0(J/U)$ и $u_z(J/U)$. На панели (a) линиями из отдельных точек показаны значения для фазы AFOct, сплошными линиями – для FM-AFOct

Так как изоспин аналогичен спину, узельную волновую функцию электрона можно представить в виде линейной комбинации *изоспиноров*:

$$\psi = \sum_{\zeta} z_\zeta \left|\mathbf{n}_\zeta\right\rangle_\zeta , \tag{6}$$

где, по аналогии с обычными спинорами, введена стандартная параметризация в сферической системе координат

$$\left|\mathbf{n}_\zeta\right\rangle_\zeta = \cos\left(\frac{\Theta_\zeta}{2}\right)\left|\uparrow\right\rangle_\zeta + \sin\left(\frac{\Theta_\zeta}{2}\right) e^{\mathrm{i}\Phi_\zeta}\left|\downarrow\right\rangle_\zeta , \tag{7}$$

$\mathbf{n}_\zeta\,(\sin\Theta_\zeta\cos\Phi_\zeta, \sin\Theta_\zeta\sin\Phi_\zeta, \cos\Theta_\zeta)$ – единичный вектор, указывающий направление изоспина для данного ζ, $z_+ = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right)$, $z_- = \sin\left(\frac{\theta}{2}\right)e^{\mathrm{i}\phi}$, $0 \le \Theta_\zeta, \theta \le \pi$, $-\pi < \Phi_\zeta, \phi \le +\pi$. Таким образом, параметр θ определяет степень занятости псевдоорбитали “+” (“−”).

В общем случае для средних имеем: $\mathbf{I}(\psi) = \langle\psi|\,\hat{\mathbf{I}}\,|\psi\rangle = \frac{1}{2}\sum_\zeta |z_\zeta|^2\,\mathbf{n}_\zeta$, $\mathbf{M}(\psi) = \langle\psi|\,\hat{\mathbf{s}}\,|\psi\rangle = \frac{1}{2}\mathbf{e}_z\sum_\zeta |z_\zeta|^2\,\mathbf{n}_\zeta\mathbf{e}_z + \frac{1}{2}\sum_\zeta z^*_{\bar\zeta} z_\zeta \langle\mathbf{n}_{\bar\zeta}|\hat{\mathbf{s}}_\perp|\mathbf{n}_\zeta\rangle\langle\mathbf{n}_{\bar\zeta}|\mathbf{n}_\zeta\rangle$, $T(\psi) = \langle\psi|\,\hat{\tau}^{(z)}\,|\psi\rangle = \frac{1}{2}\sum_\zeta z^*_{\bar\zeta} z_\zeta \langle\mathbf{n}_{\bar\zeta}|\mathbf{n}_\zeta\rangle$, где $\hat{\mathbf{s}}_\perp = \hat{s}_x\mathbf{e}_x + \hat{s}_y\mathbf{e}_y$.

Решение оптимизационной задачи показывает, что в основном состоянии:

1. $\mathbf{n}_+ = \mathbf{n}_-$ и можно выбрать фазы так, чтобы $|\mathbf{n}_+\rangle = |\mathbf{n}_-\rangle$. Таким образом, электронное состояние подрешетки может быть охарактеризовано одним единичным вектором $\mathbf{n} = \mathbf{n}_\pm$, совпадающим с направлением изоспина. Обозначим такое состояние как $\psi_{\mathbf{n}}(\theta, \phi)$.

2. При $\lambda \ne 0$, $\mathbf{n}$ полностью лежит в плоскости xOy, так что $I^{(z)}(\psi_{\mathbf{n}}(\theta,\phi)) = M^{(z)}(\psi_{\mathbf{n}}(\theta,\phi)) = 0$, это соответствует антиферромагнитному изоспиновому порядку.

3. $\phi = 0, \pi$ в зависимости от подрешетки.

Имеем следующие решения:

FM-AFO$_{xz/yz}$ (ferromagnetic – antiferrorbital phase) – фаза с ферромагнитным спиновым и антиферроорбитальным относительно xz и yz-орбиталей дальним порядком. Эта ферромагнитная фаза была впервые описана в 1970-х и является первым примером орбитального порядка [1]. Суммарная величина спина в этой фазе – максимально возможная (насыщенный ферромагнетизм). В [28] такая фаза рассматривалась для случая, когда средний спин направлен вдоль оси Oz (назовем ее FM-AFO$^{\parallel}_{xz/yz}$); она реализуется только при $\lambda = 0, J > 0$. При увеличении λ волновая функция получает примесь орбитали противоположной подрешетки, а орбитальные и спиновые степени свободы остаются незапутанными.

AFOct (antiferrooctupole phase) – фаза с антиферрооктупольным (скрытым) дальним порядком, впервые найденная в работе [22] для модели слоистого перовскита Sr_2VO_4 в пределе большого кристаллического поля, что соответствует нашей модели при $J = 0$. При любом значении параметров в этой фазе для каждой подрешетки $\theta = 0$ (ϕ, Θ_-, Φ_- не определены), $\Theta_+ = \frac{\pi}{2}$. Это означает, что электрон занимает псевдоорбиталь “+” и изоспин лежит в плоскости xOy. $e^{\mathrm{i}\Phi_+}$ имеет разные знаки на подрешетках, по углу $\Phi_+ = \Phi$, определяющему направление спинов и изоспинов в плоскости xOy, имеется вырождение. Таким образом, волновые функции подрешеток в фазе AFOct можно записать в виде $\psi^{\text{AFOct}}_{\text{A,B}} = \left(|\uparrow\rangle_+ \pm e^{\mathrm{i}\Phi}|\downarrow\rangle_+\right)/\sqrt{2}$ с разными знаками на подрешетках. В этой фазе на каждой подрешетке дипольные, квадрупольные спиновый и орбитальный моменты равны нулю; прямой расчет показывает, что ненулевыми остаются только четыре компоненты октупольного момента $T_x^\alpha = 5n_x/8$, $T_y^\alpha = -5n_y/8$, $T_{x,y}^\beta = 3\sqrt{15}n_{x,y}/8$ [37]. Они имеют противоположные знаки на подрешетках, т.е. реализуется антиферрооктупольный порядок.

FM-AFOct – ферромагнитная фаза (относительно октупольного порядка – ферриоктупольная), по заселенностям орбиталей промежуточная между фазами AFOct и FM-AFO$_{xz/yz}$, т.е. имеется слабый антиферроорбитальный порядок. Волновые функции также зависят от J и λ, но, в отличие от FM-AFO$^{\parallel}_{xz/yz}$, орбитальные и спиновые степени свободы в фазе FM-AFOct запутаны. При любом значении параметров в фазе FM-AFOct для каждой подрешетки $\Theta_\pm = \pi/2$. θ совпадает для подрешеток, $e^{\mathrm{i}\phi}$ и $e^{\mathrm{i}\Phi_+} = e^{\mathrm{i}\Phi_-} = e^{\mathrm{i}\Phi}$ имеют разные знаки на подрешетках, $e^{\mathrm{i}\phi} = \pm 1$, аналогично AFOct по углу Φ имеется вырождение; θ зависит от параметров J, λ. Таким образом, для FM-AFOct волновые функции подрешеток можно записать в виде $\psi_{\mathrm{A,B}}^{\mathrm{FM-AFOct}} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\cos\frac{\theta}{2}\left(|\uparrow\rangle_+ \pm e^{\mathrm{i}\Phi}|\downarrow\rangle_+\right) + \sin\frac{\theta}{2}\left(e^{\mathrm{i}\Phi}|\downarrow\rangle_- \pm |\uparrow\rangle_-\right)\right)$ с разными знаками на подрешетках. В пределе малого параметра $\lambda \ll t^2 J/U^2$ как частный случай фазы FM-AFOct при $\theta \sim \pi/2$ реализуется насыщенная ферромагнитная фаза со средним спином, лежащим в плоскости xOy, которую мы будем называть FM-AFO$^{\perp}_{xz/yz}$.

Для средних в состоянии $\psi = \psi_{\mathbf{n}}(\theta,\phi)$ получаем: $\mathbf{I}(\psi) = \frac{\mathbf{n}}{2}$, $\mathbf{M}(\psi) = \frac{\mathbf{n}}{2}\sum_\zeta z_\zeta^* z_\zeta = \pm\frac{\mathbf{n}}{2}\sin\theta$, $T(\psi) = \frac{1}{2}\sum_\zeta z_{\bar\zeta}^* z_\zeta = \pm\frac{1}{2}\sin\theta$, $\langle\psi|\,\hat\sigma^{(z)}\,|\psi\rangle = \sum_\zeta |z_\zeta|^2 = \cos\theta$. Видно, что появление магнитного момента $\mathbf{M}$ на узле происходит одновременно с заселением электроном псевдорбитали "–", т.е. с появлением орбитального порядка – разница заполнения орбиталей совпадает с величиной узельного магнитного момента. Подставляя эти выражения, для энергии получаем: $E = -\frac{\lambda}{2}\cos\theta - \frac{1}{2}J_{\mathrm{ex}}\left((u_z(J/U) - v_0(J/U))\sin^2\theta + v_z(J/U)\right)$. Минимуму энергии соответствует

$$\cos\theta_{\mathrm{c}}(\lambda, J) = \frac{\lambda}{4J_{\mathrm{ex}}}\cdot\frac{1}{J/U}\cdot\frac{(1-3J/U)(1+2J/U)}{3+J/U}. \quad (8)$$

Для любых U, J, λ при $0 < J/U < 1/3$ функция от J/U в правой части монотонно изменяется от $+\infty$ до нуля. Так как $\cos\theta_{\mathrm{c}}$ не может быть больше 1, существует точка квантового фазового перехода: если J/U больше, $\cos\theta_{\mathrm{c}}$ меняется по формуле (8), если меньше – $\cos\theta_{\mathrm{c}} = 1$.

В результате уравнение для фазовой границы имеет вид

$$\lambda_{\mathrm{c}}(J) = 4J_{\mathrm{ex}}\frac{J/U(3+J/U)}{(1-3J/U)(1+2J/U)}. \quad (9)$$

На рисунке 2a показаны фазовые диаграммы основного состояния в переменных $J - \lambda$ для двух подходов. Видно, что область существования фазы AFOct в модели EEM (формула (2)) меньше, чем для модели Хаббарда в приближении Хартри–Фока [28]. После перехода через фазовую границу при увеличении J реализуется ферромагнитная фаза FM-AFOct. Критическое значение J, при котором происходит переход, увеличивается с ростом λ, и это значение ниже, чем для модели Хаббарда в приближении Хартри–Фока. На рисунке 2b показаны фазовые границы между AFOct и FM-AFOct при различных значениях U для бесконечного Δ_{CF}. Видно, что увеличение U при фиксированных J и λ приводит к увеличению области фазы AFOct.

При переходе между фазами AFOct и FM-AFOct заселенности орбиталей изменяются непрерывно, см. рис. 3a, что отличается от более ранних результатов уже качественно: переходы в подходе [28] происходят всегда со скачком заселенностей орбиталей. Фаза FM-AFOct характеризуется значительной величиной полного магнитного момента, увеличивающегося с J, одинакового для обеих подрешеток и лежащего в плоскости xOy, см. рис. 3b. Кроме того, фазы AFOct и FM-AFOct можно характеризовать с помощью введенного ранее вектора среднего изоспина $\mathbf{I}$, модуль которого, в отличие от среднего спина, сохраняет максимальное значение 1/2 для обеих фаз, при этом на одной из подрешеток он сонаправлен магнитному моменту (см. рис. 3c), на другой – противоположно направлен.

Отличия результатов для двух подходов обусловлены тем, что приближение Хартри–Фока для модели Хаббарда не учитывает локальные корреляционные эффекты, которые могут быть важны для некоторых фаз в сильнокоррелированном ($U \gg t$) изоляторе.

На рисунке 1a показаны вклады в энергию $E_{\mathrm{exch},T}$, $E_{\mathrm{exch},M}$, $E_{\mathrm{exch},I}$, E_{so} в зависимости от J для фаз AFOct и FM-AFOct. Для AFOct вклад, связанный с энергией спин-орбитального взаимодействия, всегда равен своему минимально возможному значению: $E_{\mathrm{so}} = -\lambda/2$, для FM-AFOct – увеличивается с J, начиная с точки фазового перехода. Преимущество фазе FM-AFOct обеспечивает вклад E_{exch}; объясним это подробнее. Для обеих фаз скалярное произведение изоспинов на подрешетках минималь-

Таблица 1. Оценки параметров t, U, J, Δ_{CF} для Sr_2VO_4, полученные или используемые в различных работах, и рассчитанные для $\Delta_{\text{CF}} = +\infty$ значения $\cos\theta$ и $\sin\theta$. В случае различных интегралов переноса для разных m мы полагаем $t = t^{xz} = t^{yz}$, в скобках указано t^{xy}

Reference	t, eV	U, eV	U/t	J, eV	J/t	Δ_{CF}, eV	Δ_{CF}/t	$\cos\theta$	$\sin\theta$
[25, 26]	0.19 (0.22)	2.6	14	0.65	3.4	0.08	0.4	0.2	1
[29]	0.26	4.2	16	0.7	3	$\lvert\Delta_{\text{CF}}\rvert < 0.5$	$\lvert\Delta_{\text{CF}}\rvert/t < 2$	0.5	0.9
[34]	0.24 (0.28)	4–6	20–30	0.7	3	–	–	0.5–1	0–0.9
[28]	0.25	5	20	0.4	1.6	0.04	0.16	1	0

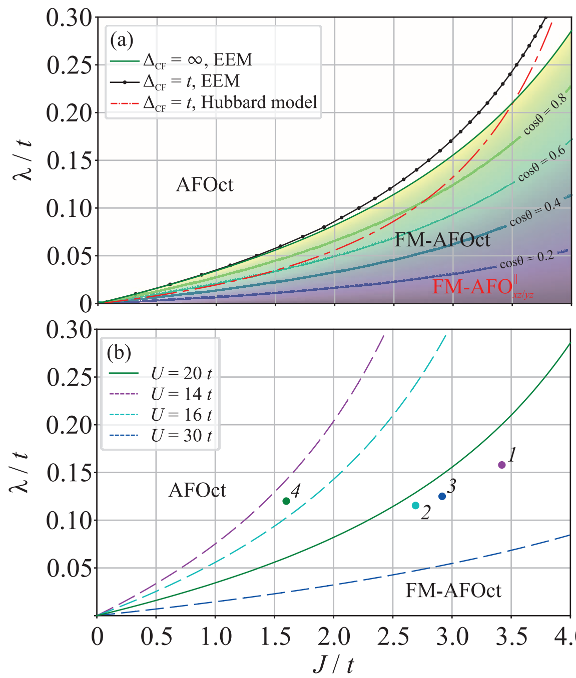

Рис. 2. (Цветной онлайн) (a) – $U = 20t$. Фазовая диаграмма основного состояния в переменных J–λ для модели (2) при $\Delta_{\text{CF}} = t$ и $\Delta_{\text{CF}} = +\infty$. Для сравнения приведены результаты для модели Хаббарда в приближении Хартри–Фока [28]. AFOct — фаза со скрытым антиферрооктупольным порядком, FM-AFOct – ферромагнитная фаза, см. текст, FM-AFO$^{\parallel}_{xz/yz}$ – найденная ранее ферромагнитная антиферроорбитальная фаза [28] (область этой фазы для модели Хаббарда ограничена штрих-пунктирной линией, в EEM эта фаза не реализуется). Цветом и числами на линиях уровня показаны значения $\cos\theta$. (b) – Фазовая граница между AFOct и FM-AFOct при различных значениях U, $\Delta_{\text{CF}} = \infty$. Точками показаны оценки параметров λ/t и J/t для Sr_2VO_4: *1* – в [25, 26]; *2* – в [29]; *3* – в [34]; *4* – в [28], см. табл. 1

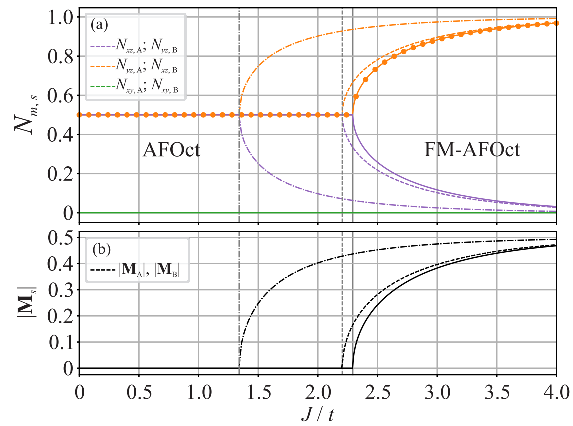

Рис. 3. (Цветной онлайн) $U = 20t$. Зависимость от J (a) – заселенностей $N_{s,m}$ орбиталей на подрешетках, (b) – модуля магнитного момента $\mathbf{M}_s$ на подрешетках. Сплошными линиями показаны результаты при $\Delta_{\text{CF}} = +\infty$, $\lambda = 0.1t$, пунктирными (штрих-пунктирными) – при $\Delta_{\text{CF}} = t$, $\lambda = 0.1t$ ($\lambda = 0.05t$)

но: $\mathbf{I}_{\text{A}}\mathbf{I}_{\text{B}} = -\frac{1}{4}$, совпадает для обеих фаз и сам вклад $E_{\text{exch},I}$, изменяющийся только как функция J. Кроме того, для обеих фаз $\mathbf{M}_{\text{A}}\mathbf{M}_{\text{B}} = -T_{\text{A}}T_{\text{B}}$; для AFOct эта величина, как и связанные с ней вклады $E_{\text{exch},T}$ и $E_{\text{exch},M}$, равна нулю, для FM-AFOct – положительна и также увеличивается с J, начиная с точки фазового перехода. Тогда вклад $E_{\text{exch},T}$, связанный с разностью заселенностей орбиталей xz и yz, для этой фазы отрицателен; множитель перед ним положителен и растет с J быстрее других множителей, что и обеспечивает преимущество фазе FM-AFOct.

Несмотря на то, что узельный средний спиновой и орбитальный момент равны нулю, наблюдение антиферрооктупольного (мультипольного) порядка возможно экспериментально, например, с помощью нейтронного рассеяния [38]. Полученный антиферрооктупольный порядок интересно сравнить с ферромагнитным орбитальным антиферрооктупольным дальним порядком на комплексных орбитальных состояниях на основе базисных функций e_g-мультиплета, предложенным для описания свойств манганитов $\text{La}_{1-x}\text{M}_x\text{MnO}_3$ (M – легирующий элемент) [39]. Причиной стабилизации этого упорядочения является механизм двойного обмена, ему соответствует насыщенное ферромагнитное состояние, то есть оно существенно отличается от исследованного в настоящей работе и формируется только при конечном легировании x.

Обсудим роль кристаллического поля. При конечном $\Delta_{\rm CF}$ аналитический подход, описанный выше, уже не применим, однако возможна численная оптимизация. На рисунке 2a, b при $\Delta_{\rm CF} = t$ имеется некоторый количественный сдвиг фазовой границы, ранее этот случай был исследован в работе [40]. Можно ожидать, что конечное $\Delta_{\rm CF}$ приводит к появлению выделенного направления спина (изоспина) в базисной плоскости xOy – появляется анизотропия "легкая ось". Причиной этого является кооперативное действие $\hat{\mathcal{H}}_{\rm so}$ и $\hat{\mathcal{H}}_{\rm CF}$. Однако детальное объяснение требует дополнительного исследования. Величина этой анизотропии зависит от параметров J, λ, $\Delta_{\rm CF}$.

Применим полученные результаты к описанию свойств $\rm Sr_2VO_4$. Для него параметры гамильтониана Хаббарда могут быть оценены на основе метода функционала плотности. Для ионов $\rm V^{4+}$ параметр спин-орбитального взаимодействия λ составляет около 30 мэВ [41]. Согласно [28], параметры t, U, J, $\Delta_{\rm CF}$, λ находятся на границе фазы с антиферрооктупольным порядком AFOct с полностью свободной xy-орбиталью. Для исследования этой фазы оправдано выбрать $\Delta_{\rm CF}$ достаточно большим – порядка t, что много больше энергетических масштабов системы $J_{\rm ex}$, λ. Оценки параметров t, U, J и $\Delta_{\rm CF}$, получаемые значения $\cos\theta$ (см. (8)) и $\sin\theta$, рассчитанные для $\Delta_{\rm CF} = +\infty$, приведены в табл. 1. Видно, что для оценок параметров всех работ, кроме [28] и, в какой-то мере, [34], получается слабоферромагнитное состояние FM-AFOct с сопутствующим орбитальным порядком. Величина магнитного момента на узле видна из таблицы – ей соответствуют значения $\sin\theta$.

Заключение. Для эффективной обменной модели, построенной для t_{2g}-мультиплета в случае сильного кристаллического поля, отщепляющего xy-орбиталь, численно и аналитически исследована фазовая диаграмма основного состояния. Аналитически получено описание решения в терминах изоспинорной волновой функции для двух псевдоорбиталей – собственных функций операторов спин-орбитального взаимодействия. Тип дальнего порядка определяется конкуренцией хундовского и спин-орбитального взаимодействия. Найденная фазовая диаграмма в переменных $J-\lambda$ показывает, что для заданного значения λ малое значение J приводит к формированию антиферрооктупольного (скрытого) порядка с равной заселенностью двух орбиталей xz и yz, а увеличение J – к непрерывному переходу в слабоферромагнитное состояние с сопутствующим орбитальным порядком, причем его амплитуда равна величине узельного магнитного момента. Обе полученные фазы интерпретируются в терминах октупольных моментов. Показано, что в фазе со скрытым порядком отличны от нуля октупольные моменты, преобразующиеся при поворотах системы координат как изоспин (для $T^{\beta}_{x,y}$) и его отражение в плоскости, перпендикулярной xOy (для $T^{\alpha}_{x,y}$). Таким образом, наличие достаточно большого параметра кристаллического поля и заметного спин-орбитального взаимодействия стабилизирует скрытый порядок. Применение полученных результатов к описанию свойств $\rm Sr_2VO_4$ показывает, что для этого соединения возможно формирование слабоферромагнитного состояния с сопутствующим антиферроорбитальным порядком малой амплитуды.

Авторы благодарят С. В. Стрельцова и В. Ю. Ирхина за плодотворные обсуждения.

Финансирование работы. Работа выполнена в рамках государственного задания Минобрнауки России для Института физики металлов Уральского отделения Российской академии наук; численный расчет фазовых диаграмм поддержан проектом Российского научного фонда 23-42-00069.

Конфликт интересов. Авторы данной работы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

1. К. И. Кугель, Д. И. Хомский, УФН **136**, 621 (1982) [K. I. Kugel and D. I. Khomskii, Soviet Phys.-Uspekhi **25**, 231 (1982)].
2. B. J. Kim, H. Ohsumi, T. Komesu, S. Sakai, T. Morita, H. Takagi, and T. Arima, Science **323**, 1329 (2009).
3. D. Pesin and L. Balents, Nature Phys. **6**, 376 (2010).
4. M. Rey, P. Dehaudt, J. Joubert, B. Lambert-Andron, M. Cyrot, and F. Cyrot-Lackmann, J. Solid State Chem. **86**, 101 (1990).
5. M. Itoh, M. Shikano, H. Kawaji, and T. Nakamura, Solid State Commun. **80**, 545 (1991).
6. V. Giannakopoulou, P. Odier, J. Bassat, and J. Loup, Solid State Commun. **93**, 579 (1995).
7. M. Cyrot, B. Lambert-Andron, J. L. Soubeyroux, M. J. Rey, P. H. Dehauht, J. Beille, and J. L. Tholence, J. Solid State Chem. **85**, 321 (1990).
8. W. Gong, J. Greedan, G. Liu, and M. Bjorgvinsson, J. Solid State Chem. **95**, 213 (1991).
9. S. Tóth, *Magnetism of 3d frustrated magnetic insulators: α-CaCr2O4, β-CaCr2O4 and Sr2VO4*, Ph.D. thesis, TU Berlin (2012).
10. J. Teyssier, E. Giannini, A. Stucky, R. Černý, M. Eremin, and D. van Der Marel, Phys. Rev. B **93**, 125138 (2016).

11. A. Nozaki, H. Yoshikawa, T. Wada, H. Yamauchi, and S. Tanaka, Phys. Rev. B **43**, 181 (1991).
12. J. Matsuno, Y. Okimoto, M. Kawasaki, and Y. Tokura, Phys. Rev. Lett. **95**, 176404 (2005).
13. H. Zhou, B. Conner, L. Balicas, and C. Wiebe, Phys. Rev. Lett. **99**, 136403 (2007).
14. R. Viennois, E. Giannini, J. Teyssier, J. Elia, J. Deisenhofer, and D. van der Marel, J. Phys.: Conf. Ser. **200**, 012219 (2010).
15. H. Sakurai, Phys. Procedia **75**, 829 (2015).
16. H. Zhou, Y. Jo, J. Fiore Carpino, G. Munoz, C. Wiebe, J. Cheng, F. Rivadulla, and D. Adroja, Phys. Rev. B **81**, 212401 (2010).
17. J. Sugiyama, H. Nozaki, I. Umegaki, W. Higemoto, E. J. Ansaldo, J. H. Brewer, H. Sakurai, T. Kao, H. Yang, and M. Martin, Phys. Rev. B **89**, 020402 (2014).
18. I. Yamauchi, K. Nawa, M. Hiraishi, M. Miyazaki, A. Koda, K. M. Kojima, R. Kadono, H. Nakao, R. Kumai, Y. Murakami, H. Ueda, K. Yoshimura, and M. Takigawa, Phys. Rev. B **92**, 064408 (2015).
19. T. Ueno, J. Kim, M. Takata, and T. Katsufuji, J. Phys. Soc. Jpn. **83**, 034708 (2014).
20. G. Jackeli and D. Ivanov, Phys. Rev. B **76**, 132407 (2007).
21. M. V. Eremin, J. Deisenhofer, R. M. Eremina, J. Teyssier, D. V. D. Marel, and A. Loidl, Phys. Rev. B **84**, 212407 (2011).
22. G. Jackeli and G. Khaliullin, Phys. Rev. Lett. **103**, 067205 (2009).
23. G. Khaliullin, Prog. Theor. Phys. Supplement **160**, 155 (2005).
24. A. Oleś, Spin-orbital entanglement in Mott insulators, in *Orbital Physics in Correlated Matter*, Modeling and Simulation, ed. by E. Pavarini and E. Koch, Autumn School on Correlated Electrons, Forschungszentrum Jülich GmbH Zentralbibliothek, Verlag, Jülich (2023), v. 13, p. 6.1.
25. Y. Imai, I. Solovyev, and M. Imada, Phys. Rev. Lett. **95**, 176405 (2005).
26. Y. Imai and M. Imada, J. Phys. Soc. Jpn. **75**, 094713 (2006).
27. Y. Imai, Y. Otsuka, and M. Imada, J. Phys.: Condens. Matter **19**, 365230 (2007).
28. P. A. Igoshev, D. E. Chizhov, V. Y. Irkhin, and S. V. Streltsov, Phys. Rev. B **110**, 115110 (2024).
29. R. Arita, A. Yamasaki, K. Held, J. Matsuno, and K. Kuroki, J. Phys.: Condens. Matter **19**, 365204 (2007).
30. С. В. Стрельцов, Д. И. Хомский, УФН **187**, 1205 (2017) [S. V. Streltsov and D. I. Khomskii, Soviet Physics Uspekhi **60**, 1121 (2017).
31. A. Georges, L. d. Medici, and J. Mravlje, Annu. Rev. Condens. Matter Phys. **4**, 137 (2013).
32. P. A. Igoshev, S. V. Streltsov, and K. I. Kugel, J. Magn. Magn. Mater. **587**, 171315 (2023).
33. К. И. Кугель, Д. И. Хомский, ЖЭТФ **15**, 629 (1972) [K. I. Kugel and D. I. Khomskii, ZhETF **15**, 629 (1972).
34. N.-O. Linden, *Dynamical mean-field theory studies on real materials*, Ph.D. thesis, LMU (2019).
35. Y. Wang, L. Qi, and X. Zhang, Numer. Linear Algebra Appl. **16**, 589 (2009).
36. S. Li, L. Lu, X. Qiu, Z. Chen, and D. Zeng, J. Glob. Optim. **90**, 323 (2024).
37. P. Santini, S. Carretta, G. Amoretti, R. Caciuffo, N. Magnani, and G. H. Lander, Rev. Mod. Phys. **81**, 807 (2009).
38. A. Urru, J.-R. Soh, N. Qureshi, A. Stunault, B. Roessli, H. M. Rønnow, and N. A. Spaldin, Phys. Rev. Research **5**, 033147 (2023).
39. J. van den Brink and D. Khomskii, Phys. Rev. B **63**, 140416 (2001).
40. D. E. Chizhov and P. A. Igoshev, Bull. Russ. Acad. Sci.: Phys. **89**, 2140 (2025).
41. А. Абрагам, Б. Блини, *Электронный парамагнитный резонанс переходных ионов*, Мир, М. (1972).