Устойчивость фазы сосуществования киральной сверхпроводимости и неколлинеарного спинового упорядочения с нетривиальной топологией при сильных электронных корреляциях¹⁾

В. В. Вальков, А. О. Злотников²⁾

Институт физики им. Л.В.Киренского, Федеральный исследовательский центр "Красноярский научный центр Сибирского отделения РАН", 660036 Красноярск, Россия

> Поступила в редакцию 5 марта 2019 г. После переработки 19 апреля 2019 г. Принята к публикации 22 апреля 2019 г.

Показано, что квантовые зарядовые и спиновые флуктуации в сильно коррелированной 2D-системе с треугольной решеткой, значительно ренормируя параметр магнитного упорядочения, не разрушают фазу сосуществования киральной d + id сверхпроводимости и 120-градусного спинового упорядочения. При этом сохраняется и область реализации нетривиальной топологии, определяемой на основе топологического индекса \tilde{N}_3 . Продемонстрировано, что для топологически нетривиальной фазы среди краевых состояний присутствует майорановская мода, для которой определена пространственная структура. Учет спиновых и зарядовых флуктуаций смещает значения критических концентраций электронов, при которых происходят квантовые топологические переходы. Показано, что увеличение межузельного кулоновского отталкивания вызывает уменьшение числа этих переходов.

DOI: 10.1134/S0370274X19110092

1. Введение. В последнее время предложено несколько сверхпроводящих систем, в которых возможна реализация майорановских краевых состояний. К их числу, например, относятся сверхпроводники с киральным *p*-типом симметрии [1, 2], контакты сверхпроводника и топологического диэлектрика [3, 4], системы со спин-орбитальным взаимодействием и наведенной сверхпроводимостью [5–9]. В эксперименте наибольший прогресс достигнут для полупроводниковых нанопроволок InAs, InSb, эпитаксиально покрытых сверхпроводящим Al. Для них обнаружен квантованный пик кондактанса при нулевом напряжении смещения по мере увеличения внешнего магнитного поля [10].

Недавно установлено, что майорановские моды могут реализовываться в материалах, допускающих сосуществование синглетной сверхпроводимости и дальнего магнитного порядка [11, 12]. Перспективность такого сценария связана с возможностью появления майорановских мод в твердом теле, в котором нет спин-орбитального взаимодействия и которое не находится во внешнем магнитном поле. В рамках такой концепции существование майорановских мод продемонстрировано в сверхпроводящих системах с геликоидальным магнитным упорядочением (таких как, например, $HoMo_6S_8$, $ErRh_4B_4$) [11].

Известно, что краевые и майорановские моды возникают в системе с открытыми границами, если в той же системе при периодических граничных условиях основному состоянию соответствует фаза с нетривиальной топологией. Классификация таких фаз проводится по значению топологического инварианта. В простых случаях, когда гамильтонианы 1D или 2D сверхпроводящих систем с нарушенной симметрией по отношению к инверсии времени (системы класса D по классификации [13]) описываются квадратичными формами по операторам вторичного квантования, топологическими инвариантами являются Z_2 -инвариант (число Майорана [2]), или Zинвариант соответственно. Связь между двумя инвариантами на примере нецентросимметричных сверхпроводников была описана в работе [14]. Переход между фазами с разными значениями топологического инварианта индуцируется при закрытии щели в спектре элементарных возбуждений [15].

В работе [12] было предсказано, что майорановские моды могут наблюдаться в 2D системах с треугольной решеткой в фазе сосуществования киральной $d_1 + id_2$ сверхпроводимости и страйпового магнитного порядка. Однако, дальнейший анализ показал [16], что киральная сверхпроводимость не может

 $^{^{1)}{\}rm Cm.}$ дополнительные материалы к данной статье на сайте нашего журнала www.jetpletters.ac.ru

²⁾e-mail: zlotn@iph.krasn.ru

сосуществовать со страйповым упорядочением спинов, но сосуществует с магнитным порядком, соответствующим 120° структуре. Для этой фазы сосуществования были определены условия реализации майорановских мод [17]. В рамках квадратичного гамильтониана были рассчитаны Z_2 - и Z-инварианты и показано, что топологически нетривиальные области с нечетным значением Z-инварианта хорошо согласуются с найденными областями реализации майорановских мод.

В последнее время возрос интерес к проблеме электронных корреляций в топологических фазах, поскольку корреляции могут приводить к изменению топологической классификации [18]. При этом в системах с четной размерностью, описываемых Zинвариантом (например, класс D, к которому относятся упомянутые системы с треугольной решеткой), классификация сохраняется [19].

Топологическая классификация систем со взаимодействием может быть основана на универсальном методе, в котором топологический индекс определяется через функции Грина [15]. Для 2D систем, в которых спектр возбуждений имеет энергетическую щель, Z-инвариант представлен через матричную функцию Грина [20]. В [15] этот инвариант обозначен посредством \tilde{N}_3 . Его использование позволило продемонстрировать нетривиальную топологию систем с квантовым эффектом Холла [20], различных фаз жидкого гелия ³He-A [21], ³He-B [22]. Позднее было показано [23], что для описания топологических фаз можно ограничиться знанием функции Грина при нулевой частоте.

Развитие метода топологической классификации сильно коррелированных материалов с треугольной решеткой, находящихся в фазе сосуществования киральной сверхпроводимости и неколлинеарного спинового упорядочения, сопряжено с предварительным исследованием устойчивости такой фазы по отношению к зарядовым и спиновым флуктуациям. Это связано с тем, что в условиях пониженной размерности и фрустрированного характера обменных связей в треугольной решетке существенно возрастает роль квантовых флуктуаций в механизме разрушения упорядоченной фазы.

В данной работе установлено, что в экспериментально исследуемой области допирования кобальтита натрия происходит сильная ренормировка величины магнитного параметра порядка, однако структура спинового упорядочения сохраняется. Для фазы сосуществования киральной сверхпроводимости и спиновой 120° структуры найдены функции Грина и на основе инварианта \tilde{N}_3 определены топологические характеристики этой фазы. Рассмотрено изменение топологических свойств системы при увеличении концентрации и величины кулоновского отталкивания электронов. При этом обнаружено уменьшение числа топологических переходов при возрастании величины параметра кулоновского взаимодействия. На основе решения системы уравнений для функций Грина при открытых граничных условиях вдоль одного направления 2D решетки продемонстрирована структура майорановской моды в топологически нетривиальной области.

2. Модель. Исследование фазы сосуществования киральной сверхпроводимости и 120° спинового упорядочения при учете спиновых и зарядовых флуктуаций в условиях сильных электронных корреляций проведем в рамках t - J - V-модели. Для определенности будем рассматривать электроннодопированные системы. Примером подобных систем может служить сверхпроводник Na_xCoO₂ [24]. Гамильтониан такой системы в атомном представлении определяется выражением:

$$H = \sum_{f\sigma} (\varepsilon - \mu) X_f^{\sigma\sigma} + \sum_f (2\varepsilon + U - 2\mu) X_f^{22} + \sum_{fm\sigma} t_{fm} X_f^{2\bar{\sigma}} X_m^{\bar{\sigma}2} + \frac{V}{2} \sum_{f\delta} n_f n_{f+\delta} + \sum_{fm} J_{fm} \left(X_f^{\uparrow\downarrow} X_m^{\downarrow\uparrow} - X_f^{\uparrow\uparrow} X_m^{\downarrow\downarrow} \right),$$
(1)

где ε – затравочная энергия электрона, μ – химпотенциал, U – величина внутриатомного кулоновского отталкивания, t_{fm} – интенсивность перескоков электронов, V – параметр межузельного кулоновского взаимодействия, $n_f = X_f^{\uparrow\uparrow} + X_f^{\downarrow\downarrow} + 2X_f^{22}$ – оператор числа электронов на узле, J_{fm} – параметр обменного взаимодействия.

3. Условия реализации бесщелевых фермиевских возбуждений в фазе сосуществования. Как известно [15], в системах с нетривиальной топологией реализация топологических переходов возможна при условиях, когда фермиевские элементарные возбуждения, вычисленные для периодических граничных условий становятся бесщелевыми. В неколлинеарной магнитной фазе спектр возбуждений является бесщелевым на контуре Ферми (линии в 2D зоне Бриллюэна) при любом уровне допирования. В сверхпроводящей фазе с киральной $d_1 + id_2$ симметрией параметра порядка бесщелевые возбуждения реализуются только в отдельных точках зоны Бриллюэна (нодальных точках), положение которых зависит от концентрации электронов [25]. Условия реализации бесщелевых возбуждений в фазе сосуществования нетрудно установить на основе выражения для фермиевского спектра [26]:

$$E_{1,2p} = \left[\frac{1}{2} \left(\xi_p^2 + \xi_{p-Q}^2 + |\Delta_p|^2 + |\Delta_{-p+Q}|^2\right) + R_p R_{p-Q} \mp \lambda_p\right]^{1/2}, \qquad (2)$$

где

. .

$$\lambda_p = \left\{ \frac{1}{4} \left(\xi_p^2 - \xi_{p-Q}^2 + |\Delta_p|^2 - |\Delta_{-p+Q}|^2 \right)^2 + R_p R_{p-Q} \left[\left(\xi_p + \xi_{p-Q} \right)^2 + |\Delta_p + \Delta_{-p+Q}|^2 \right] \right\}^{1/2}.$$

Введены обозначения $\xi_p = \varepsilon + U - \mu + J_0(1 - n/2) + V_0n + nt_p/2 = \xi_0 + nt_p/2, n = \langle n_f \rangle$ – концентрация электронов в расчете на один узел, J_0 , J_Q – значения фурье-образа обменного интеграла для вектора (0,0) и вектора **Q** магнитной структуры, $V_0 = 6V$, $R_p = M(t_p - J_Q), R_{p-Q} = M(t_{p-Q} - J_Q), M$ – амплитуда неоднородного магнитного параметра порядка, через которую определяется спиновая структура: $\langle \mathbf{S}_f \rangle = M(\cos(\mathbf{Qf}), -\sin(\mathbf{Qf}), 0), \Delta_p$ – сверхпроводящий параметр порядка, выражаемый через киральные инварианты $d_1 + id_2$ - и $p_1 + ip_2$ -типов.

Из (2) следует, что нодальные точки спектра в фазе сосуществования определяются уравнениями:

$$\operatorname{Im}\left(\Delta_p \Delta^*_{-p+Q}\right) = 0,\tag{3}$$

$$|\xi_p \Delta_{-p+Q} - \xi_{p-Q} \Delta_p| = 0, \qquad (4)$$

$$R_p R_{p-Q} - \xi_p \xi_{p-Q} - \operatorname{Re}\left(\Delta_p \Delta^*_{-p+Q}\right) = 0.$$
 (5)

Спиновое 120° упорядочение на треугольной решетке задается вектором $\mathbf{Q} = (2\pi/3, 2\pi/3)$. Здесь и далее координаты волновых векторов приведены в базисе элементарных векторов обратной решетки. В этом случае равенства $\Delta_p = \Delta_{-p+Q} = 0$, при которых выполняются условия (3), (4), имеют место в центре гексагональной зоны Бриллюэна (точка $\Gamma = (0,0)$) и на ее границах (точки K = Q, K' = -Q). Значения параметров, определяющих реализацию бесщелевых возбуждений в точке K', находятся из уравнения:

$$M(n) = \left| \frac{-\tilde{\mu}(n,M) - 3n/2(t_1 - 2t_2 + t_3)}{-3(t_1 - 2t_2 + t_3) + 3(J_1 - 2J_2)} \right|, \quad (6)$$

где $\tilde{\mu}(n, M) = \mu(n, M) - J_0(1 - n/2) - V_0 n; t_1, t_2, t_3$ – интегралы перескоков для трех координационных сфер; J_1 и J_2 – константы обменных взаимодействий между ближайшими спинами и следующими за ближайшими соответственно.

Если выполняется уравнение:

Письма в ЖЭТФ том 109 вып. 11-12 2019

$$M^{2}(n) - \left(\frac{-\tilde{\mu}(n,M) - 3n/2(t_{1} - 2t_{2} + t_{3})}{-3(t_{1} - 2t_{2} + t_{3}) + 3(J_{1} - 2J_{2})}\right) \times \\ \times \left(\frac{-\tilde{\mu}(n,M) + 3n(t_{1} + t_{2} + t_{3})}{6(t_{1} + t_{2} + t_{3}) + 3(J_{1} - 2J_{2})}\right) = 0,$$
(7)

то в точках Γ и K одновременно реализуется бесщелевой спектр фермиевских возбуждений.

Приведенные условия реализации бесщелевого спектра фермиевских квазичастиц, а значит, и условия реализации топологических переходов при изменении концентрации электронов, показывают, что необходимо получить выражение для M, ренормированное за счет спиновых и зарядовых флуктуаций. Эта задача решается в следующем параграфе.

4. Ренормировка амплитуды М. Теоретическое рассмотрение магнетиков со 120° упорядочением локализованных спинов проводилось в работах [27–31]. Электронный ансамбль на треугольной решетке изучался в рамках модели Хаббарда при использовании среднеполевого приближения [32], а также слейв-бозонного представления [33]. Были получены фазовые диаграммы, показавшие возможность существования спинового и зарядового упорядочений. Существенно, что основное состояние со 120° спиновым упорядочением сохранялось при допировании вблизи половинного заполнения. В [34] методом Монте-Карло продемонстрирована реализация фазы сосуществования сверхпроводимости и 120° спинового упорядочения вблизи n = 1.1.

Для упрощения процедуры решения задачи о нахождении ренормировок для *M* проведем преобразование гамильтониана

$$H \to \tilde{H} = U H U^{\dagger}, \qquad (8)$$
$$U = \prod_{f} \left[\exp\left(i\frac{\pi}{2}S_{f}^{y}\right) \exp\left(i\theta_{f}S_{f}^{z}\right) \right], \ \theta_{0} = -\mathbf{Q}\mathbf{f},$$

соответствующее переходу к системе координат, в которой ось z сонаправлена с $\langle \mathbf{S}_f \rangle$ на каждом узле. Законы преобразования для операторов имеют вид:

$$\begin{split} S_f^x &\to \tilde{S}_f^x = \cos(\theta_f) S_f^z - \sin(\theta_f) S_f^y, \\ S_f^y &\to \tilde{S}_f^y = \cos(\theta_f) S_f^y + \sin(\theta_f) S_f^z, \\ S_f^z &\to \tilde{S}_f^z = -S_f^x, \\ X_f^{\sigma\sigma} &\to \tilde{X}_f^{\sigma\sigma} = \sum_{s=\uparrow,\downarrow} X_f^{ss}/2 - \eta_\sigma \left(X_f^{\uparrow\downarrow} + X_f^{\downarrow\uparrow} \right)/2, \end{split}$$

$$X_f^{\bar{\sigma}2} \to \tilde{X}_f^{\bar{\sigma}2} = \exp(i\eta_{\bar{\sigma}}\theta_f/2) \left(X_f^{\bar{\sigma}2} - \eta_{\bar{\sigma}}X_f^{\sigma2}\right)/\sqrt{2}, \quad (9)$$

при этом $X_f^{\uparrow\downarrow} = S_f^x + iS_f^y, \, \eta_\sigma = +1, -1,$ если $\sigma = \uparrow, \downarrow,$ соответственно.

Преобразованный гамильтониан после выделения среднеполевых поправок приобретает вид:

$$\begin{split} \tilde{H} &= \sum_{f\sigma} \tilde{\xi}_{\sigma} X_{f}^{\sigma\sigma} + \sum_{f} \left(2\varepsilon + U + 2nV_{0} - 2\mu \right) X_{f}^{22} + \\ &+ \sum_{fm\sigma} t_{fm} \cos \frac{\mathbf{Q}}{2} \left(\mathbf{f} - \mathbf{m} \right) X_{f}^{2\bar{\sigma}} X_{m}^{\bar{\sigma}2} - \\ &- i \sum_{fm\sigma} t_{fm} \sin \frac{\mathbf{Q}}{2} \left(\mathbf{f} - \mathbf{m} \right) X_{f}^{2\sigma} X_{m}^{\bar{\sigma}2} + \\ &+ \sum_{fm} \frac{J_{fm}}{2} \left(1 + \cos \mathbf{Q} \left(\mathbf{f} - \mathbf{m} \right) \right) X_{f}^{\uparrow\downarrow} X_{m}^{\downarrow\uparrow} + \\ &+ \sum_{fm} \frac{J_{fm}}{4} \left(1 - \cos \mathbf{Q} (\mathbf{f} - \mathbf{m}) \right) \left(X_{f}^{\uparrow\downarrow} X_{m}^{\uparrow\downarrow} + X_{f}^{\downarrow\uparrow} X_{m}^{\downarrow\uparrow} \right). \end{split}$$

При записи слагаемых, описывающих обменное взаимодействие, приведены только те, которые приводят к флуктуационным поправкам в однопетлевом приближении. При этом $\tilde{\xi}_{\sigma} = \varepsilon - \mu - (1 - n/2)J_0 + nV_0 - v_0$ $-\eta_{\sigma}h_Q$, где $h_Q = -MJ_Q$.

Из условия полноты одноионных состояний и связи концентрации электронов с числами заполнения следует удобное при вычислениях выражение для амплитуды магнитного параметра порядка: M = $=n/2-1+N_{\uparrow}$. Здесь $N_{\uparrow}=\left\langle X_{f}^{\uparrow\uparrow}
ight
angle$ — число заполнения состояния с проекцией спина 1/2. Для нахождения этого числа используется графическая форма теории возмущений в атомном представлении. На рисунке 1 показано диаграммное представление для



 N_{\uparrow} при учете первых вкладов, обусловленных спиновыми и зарядовыми флуктуациями. Во второй диаграмме α обозначает тип элементарного возбуждения (корневой вектор [35, 36]). Если $\alpha = (\uparrow \downarrow)$, то диаграмма определяет вклады от спиновых флуктуаций. При этом второй корневой вектор принимает два значения $\beta = (\uparrow \downarrow), (\downarrow \uparrow)$ [36, 37]. Вклады от зарядовых флуктуаций описываются двумя вкладами в соответствии с тем, что корневой вектор фермиевского типа $\alpha = (\uparrow 2)$, а β принимает два значения: († 2), (\downarrow 2). По правилам диаграммной техники [35– 37] в пределе $T \to 0$ получаем выражение для M:

$$M(n) = \frac{n}{2} + \frac{1}{2} - \sum_{q} \frac{A_{q}^{+}/2 - J_{Q}}{2\gamma_{q}} - \frac{1}{2} \sum_{p} (f_{1p} + f_{2p}) - M \sum_{p} \frac{J_{Q} - t_{p}^{+}}{\varepsilon_{2p} - \varepsilon_{1p}} (f_{1p} - f_{2p}), (11)$$

где $A_q^+ = J_q + (J_{q-Q} + J_{q+Q})/2$, а величина γ_q связана со спектром спин-волновых возбуждений

$$\omega_{0q} = 2M\gamma_q = 2M\sqrt{(J_q - J_Q)\left[\frac{J_{q-Q} + J_{q+Q}}{2} - J_Q\right]},$$

 $f_{jp} \equiv f(arepsilon_{jp}/T)$ – функции Ферми–Дирака. Ветви фермиевского спектра определяются выражениями:

$$\varepsilon_{1,2p} = \xi_0 + nt_p^+/2 \mp \sqrt{\left(nt_p^-/2\right)^2 + R_{p-Q/2}R_{p+Q/2}}$$

и $t_p^{\pm} = (t_{p-Q/2} \pm t_{p+Q/2})/2.$ При выводе уравнения (11) учитывается связь среднего $\langle X_f^{22} \rangle$ с электронными функциями Грина $G_{\sigma 2,\sigma 2}(p,i\omega_n)$. Это приводит к уравнению, из которого находится химпотенциал:

$$n - 1 = \frac{n}{4} \sum_{p} (f_{1p} + f_{2p}) + M^2 \sum_{p} \frac{J_Q - t_p^+}{\varepsilon_{2p} - \varepsilon_{1p}} (f_{1p} - f_{2p}).$$
(12)

Из (11) следует, что уменьшение намагниченности за счет спиновых флуктуаций не зависит от концентрации электронов. При половинном заполнении (n = 1), когда перескоки не вносят вклад, намагниченность 120° структуры определяется известным выражением [27]. Включение антиферромагнитного обмена J₂ между следующими за ближайшими соседями приводит к фрустрациям и уменьшению М.

Зависимость намагниченности от концентрации для параметров $J_1 = 0.5t_1, J_2 = 0.02t_1$ показана на рис. 2 сплошной линией. Видно, что процессы перескоков вблизи половинного заполнения приводят к более сильному уменьшению намагниченности с ростом концентрации по сравнению с тривиальным результатом 1 – n/2 (штриховая линия). Вертикальные линии обозначают концентрации $n_1 = 1.014$ и $n_2 = 1.033$, при которых в фазе сосуществования будут реализовываться бесщелевые возбуждения. Особенность данных концентраций проявляется и при рассмотрении энергетического спектра фермиевских состояний для неколлинеарного спинового упорядочения. При концентрациях $1 < n < n_1$, как видно из рис. 3, происходит заполнение состояний вблизи точки K'. При концентрациях $n_1 < n < n_2$ наряду с



Рис. 2. (Цветной онлайн) Зависимость намагниченности M от концентрации электронов (сплошная линия) для $J_1 = 0.5t_1$, $J_2 = 0.02t_1$. Вертикальные линии определяют концентрации n_1 , n_2 , при которых в фазе сосуществования реализуются топологические переходы



Рис. 3. (Цветной онлайн) Контуры Ферми для концентраций $1 < n < n_1, n_{11} = 1.005, n_{12} = 1.013$

отмеченным заполнением происходит заполнение состояний вблизи точек Γ и K (см. рис. 4). Возникающие в процессе такой концентрационной эволюции вклады в намагниченность приводят к излому зависимости M(n) при $n = n_1$. Выше концентрации n_2 начинает заполняться верхняя зона с минимумом в точке K'. Ее спектр описывается выражением ε_{2p} . При этом возникающие вклады в намагниченность приводят к уменьшению наклона зависимости M(n)и возникновению излома в точке $n = n_2$.

На рисунках 5, 6 показан фермиевский спектр при концентрациях $n = n_1$ и $n = n_2$, соответственно.



Рис. 4. (Цветной онлайн) Контуры Ферми для концентраций $n_1 < n < n_2, n_{21} = 1.015, n_{22} = 1.025$



Рис. 5. (Цветной онлайн) Фермиевский спектр в неколлинеарной магнитной фазе для направления K'-Г-K зоны Бриллюэна для концентрации $n = n_1$. Отсчет ведется от уровня химпотенциала

Спектр определяет возможность реализации бесщелевых возбуждений в фазе сосуществования. Отмеченные эффекты свидетельствуют о том, что указанием на реализацию бесщелевых возбуждений и, соответственно, топологических переходов может служить поведение намагниченности и связанных с ней характеристик.

На рисунке 7 показаны концентрационные зависимости для амплитуды Δ_{21} , описывающей спаривания за счет обменного взаимодействия в первой координационной сфере. Соответствующие уравнения самосогласования приведены в работе [26]. В следующем параграфе будет показано, что при реализа-



Рис. 6. (Цветной онлайн) Фермиевский спектр для концентрации $n=n_2$



Рис. 7. (Цветной онлайн) Зависимость Δ_{21} от концентрации при различных значениях параметра кулоновского взаимодействия: V = 0 (сплошная линия), $V = 0.3t_1$ (штриховая линия), $V = 0.6t_1$ (пунктирная линия)

ции бесщелевых возбуждений в фазе сосуществования сверхпроводимости и 120° упорядочения происходит топологический переход с изменением топологического инварианта.

5. Топологический инвариант \tilde{N}_3 и майорановские моды. Для решения вопроса о реализации нетривиальной топологии фазы сосуществования сверхпроводимости и неколлинеарного магнетизма при сильных электронных корреляциях воспользуемся методом, основанном на анализе целочисленного топологического инварианта \tilde{N}_3 [15]:

$$\tilde{N}_{3} = \frac{\varepsilon_{\mu\nu\lambda}}{24\pi^{2}} \times \\ \times \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \int_{-\pi}^{\pi} dk_{1} dk_{2} \operatorname{Sp}\left(\widehat{G}\partial_{\mu}\widehat{G}^{-1}\widehat{G}\partial_{\nu}\widehat{G}^{-1}\widehat{G}\partial_{\lambda}\widehat{G}^{-1}\right).$$
(13)

По повторяющимся индексам μ , ν , $\lambda = 1, 2, 3$ подразумевается суммирование, $\varepsilon_{\mu\nu\lambda}$ – символ Леви-Чивиты, $\partial_1 \equiv \partial/\partial k_1$, $\partial_2 \equiv \partial/\partial k_2$, $\partial_3 \equiv \partial/\partial \omega$. $\hat{G}(i\omega,k)$ – матричная функция Грина, полюса которой определяют спектр элементарных фермиевских возбуждений системы (подробности приведены в дополнительном материале).

Значение $\tilde{N}_3 = 0$ соответствует случаю, когда фаза является топологически тривиальной. В топологически нетривиальной фазе $\tilde{N}_3 \neq 0$. Переходы между фазами с различными значениями \tilde{N}_3 являются топологическими переходами.

Расчет числа \tilde{N}_3 показывает, что интересующая нас фаза сосуществования сверхпроводимости и 120° спинового упорядочения является топологически нетривиальной с $\tilde{N}_3 \neq 0$. При V = 0 фаза сосуществования реализуется в достаточно широкой области концентраций (см. рис. 7), однако конкретное значение \tilde{N}_3 может быть различным. Последовательность изменения \tilde{N}_3 при возрастании концентрации фермионов видна из диаграммы:

$$(\tilde{N}_3 = -1) \xrightarrow{n=n_1} (\tilde{N}_3 = 3) \xrightarrow{n=n_2} (\tilde{N}_3 = 2).$$
 (14)

Топологические переходы реализуются при тех же параметрах, при которых объемный спектр элементарных возбуждений становится бесщелевым. Существенно, что эти условия реализации топологических переходов не зависят от величины сверхпроводящего параметра порядка.

Из рисунка 7 видно, что в фазе сосуществования в зависимости от параметра V реализуется различное число топологических переходов: если V = 0, то два таких перехода происходят при концентрациях n_1 и n_2 ; увеличение V до $V = 0.3t_1$ приводит к исчезновению перехода при $n = n_1$, но сохраняется топологический переход при концентрации n_2 ; если же $V = 0.6t_1$, то топологические переходы отсутствуют.

Для нахождения структуры майорановской моды воспользуемся методикой, аналогичной той, которая применялась для моделей без учета взаимодействий [17]. Будем считать, что рассматриваемая система с треугольной решеткой содержит конечное число (N_1) узлов вдоль направления вектора трансляции **a**₁, тогда как вдоль направления **a**₂ реализуются периодические граничные условия (геометрия цилиндра). Из решения системы уравнений в координатно-импульсном представлении следует, что низкоэнергетическая "квазичастичная" функция Грина представима в виде:

$$(i\omega_m - \varepsilon_{jk_2}) G_{\alpha_j,\downarrow 2} (k_2; n'; i\omega_m) = \left(S^{\dagger}\right)_{in'}, \qquad (15)$$

где ε_{jk_2} — ветви спектра возбуждений с $j = 1, 2, \ldots N_1$, S — матрица преобразования, диагонализующая исходную матрицу системы уравнений.

Связь между найденной из (15) функцией Грина и исходными функциями Грина в координатноимпульсном представлении позволяет определить операторы элементарных возбуждений для фазы сосуществования в геометрии цилиндра через операторы фермионов Хаббарда:

$$\alpha_{jk_2} = \sum_{l=1}^{N_1} u_{jl} X_{k_2,l,\uparrow} + w_{jl} X_{k_2-Q_2,l,\downarrow} + z_{jl} X_{-k_2+Q_2,l,\uparrow}^{\dagger} + v_{jl} X_{-k_2,l,\downarrow}^{\dagger}.$$
 (16)

Из этого определения и симметрийных соображений [17] следует, что майорановская мода в геометрии цилиндра реализуется при $K_2 = -K_2 + Q_2 + G$, т.е. при $K_2 = -Q_2 = -2\pi/3$, для которого, как видно из рис. 8, энергия возбуждения равна нулю.

Несколько ветвей спектра возбуждений системы в зависимости от квазиимпульса k_2 при концентрации n = 1.025 и V = 0 приведены на рис. 8. Остальные параметры те же, что использовались



Рис. 8. (Цветной онлайн) Спектр фермиевских возбуждений в фазе сосуществования для геометрии цилиндра

для рис. 2 и 7. Штриховой линией показаны границы объемного спектра возбуждений при периодических граничных условиях вдоль обоих направлений треугольной решетки. Видно, что в этом случае в спектре возбуждений реализуется энергетическая щель. Для геометрии цилиндра внутри щели спектра появляются краевые состояния (жирная сплошная линия). Тонкими линиями выборочно показаны ветви, лежащие в области объемного спектра.

Письма в ЖЭТФ том 109 вып. 11-12 2019

Для наглядности изображения пространственной структуры майорановской моды ($K_2 = -Q_2$) воспользуемся подходом Китаева. С этой целью введем два самосопряженных оператора $b' = \alpha_1 + \alpha_1^{\dagger}$ и $b'' = i(\alpha_1^{\dagger} - \alpha_1)$. Затем, на основе разложения (16), эти операторы выразим через майорановские операторы в атомном представлении

$$\gamma_{Al\sigma} = X_{l\sigma} + X_{l\sigma}^{\dagger}, \quad \gamma_{Bl\sigma} = i \left(X_{l\sigma}^{\dagger} - X_{l\sigma} \right).$$
(17)

В результате таких преобразований находим

$$b' = \sum_{l=1}^{N_1} \left\{ \operatorname{Re}(u_{1l} + z_{1l})\gamma_{Al\uparrow} + \operatorname{Re}(w_{1l} + v_{1l})\gamma_{Al\downarrow} \right\} - \sum_{l=1}^{N_1} \left\{ \operatorname{Im}(u_{1l} - z_{1l})\gamma_{Bl\uparrow} + \operatorname{Im}(w_{1l} - v_{1l})\gamma_{Bl\downarrow} \right\},$$

$$b'' = \sum_{l=1}^{N_1} \left\{ \operatorname{Im}(u_{1l} + z_{1l})\gamma_{Al\uparrow} + \operatorname{Im}(w_{1l} + v_{1l})\gamma_{Al\downarrow} \right\} + \sum_{l=1}^{N_1} \left\{ \operatorname{Re}(u_{1l} - z_{1l})\gamma_{Bl\uparrow} + \operatorname{Re}(w_{1l} - v_{1l})\gamma_{Bl\downarrow} \right\}.$$

Зависимость от номера узла коэффициентов A_l = $\operatorname{Re}(u_{1l} + z_{1l})$ и $B_l = \operatorname{Im}(u_{1l} + z_{1l})$ разложений операторов b' и b'' по операторам Майорана в атомном представлении продемонстрирована на рис. 9. Видно,



Рис. 9. (Цветной онлайн) Зависимость $A_l = \text{Re}(u_{1l} + z_{1l})$ и $B_l = \text{Im}(u_{1l} + z_{1l})$ от номера узла для концентрации $n = 1.025, N_1 = 400$

что зависимость этих коэффициентов от номера узла носит характер локализации вблизи разных краев. Аналогичной локализацией обладают и другие коэффициенты разложения, и поэтому они не приводятся.

После топологического перехода в область с $N_3 = 2$ для концентраций $n > n_2$ в спектре возбуждений ограниченной системы при $K_2 = -Q_2$ открывается

щель для ветви краевых состояний и майорановской моды нет. В узкой области концентраций $n < n_1$ фазы сосуществования с $N_3 = -1$ также реализуется майорановская мода при $K_2 = -Q_2$. В данной области, в отличие от области с $N_3 = 3$, ветвь краевых состояний формируется только вблизи $K_2 = -Q_2$. Однако такая топологическая фаза представляет малыми значениями сверхпроводящей щели даже без учета межузельного кулоновского взаимодействия.

6. Заключение. Изложенные в статье результаты показывают, что сильные электронные корреляции, приводя к значительной ренормировке параметра спиновой структуры, не разрушают фазу сосушествования киральной сверхпроволимости и неколлинеарного магнитного упорядочения. Установление того факта, что при этом сохраняется и нетривиальная топология имеет важное значение для реализации в такой фазе при открытых граничных условиях майорановских мод. Доказательство утверждения о нетривиальности топологии проводилось на основе топологического инварианта \tilde{N}_3 , вычисляемого через функции Грина, определенные с помощью операторов Хаббарда. Применение атомного представления позволило не только корректно описать эффекты сильных электронных корреляций, но и на основе введения операторов Майорана в атомном представлении изучить структуру майорановской моды для сильно коррелированной фазы сосуществования киральной сверхпроводимости и неколлинеарного спинового упорядочения. Применение диаграммной техники для операторов Хаббарда дало возможность рассчитать вклады спиновых и зарядовых флуктуаций в макроскопическую характеристику магнитной структуры. Проведя конкретные вычисления вблизи половинного заполнения в рамках t - J - V-модели, было установлено изменение топологического инварианта \tilde{N}_3 при изменении концентрации электронов. При этом характер изменения \tilde{N}_3 оказался зависимым от значения межузельного кулоновского взаимодействия. Существенно, что из вида зависимости N₃ установлен важный вывод: в зависимости от значения параметров модели и внешних условий в фазе сосуществования могут формироваться либо краевые состояния, являющиеся майорановскими связанными состояниями, либо краевые состояния, не относящиеся к майорановскому типу. Переход между двумя такими режимами реализуется посредством квантового топологического перехода по концентрашии.

Авторы благодарят М.С.Шустина за полезные обсуждения работы.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (гранты #19-02-00348-а и 18-32-00443-мол-а) и совместного гранта Российского фонда фундаментальных исследований, Правительства Красноярского края и Краевого фонда науки: "Проявление спиннематических корреляций в спектральных характеристиках электронного строения и их влияние на практические свойства купратных сверхпроводников" (проект #18-42-243002), а также Программы Президиума РАН I.12 "Фундаментальные проблемы высокотемпературной сверхпроводимости".

А.О.Злотников выражает благодарность за поддержку в рамках гранта Президента РФ МК-3594.2018.2.

- 1. N. Read and D. Green, Phys. Rev. B 61 10267 (2000).
- 2. A. Yu. Kitaev, Physics-Uspekhi, Suppl. 44, 131 (2001).
- L. Fu and C. L. Kane, Phys. Rev. Lett. 100 096407 (2008).
- M. Snelder, A. A. Golubov, Y. Asano, and A. Brinkman, J. Phys.: Condens. Matter 27, 315701 (2015).
- J. D. Sau, R. M. Lutchyn, S. Tewari, and S. Das Sarma, Phys. Rev. Lett. **104**, 040502 (2010).
- R. M. Lutchyn, J. D. Sau, and S. Das Sarma, Phys. Rev. Lett. 105, 077001 (2010).
- M. Sato and S. Fujimoto, Phys. Rev. Lett. 105, 217001 (2010).
- В. В. Вальков, В. А. Мицкан, М. С. Шустин, Письма в ЖЭТФ 106, 762 (2017).
- A. A. Kopasov, I. M. Khaymovich, and A. S. Mel'nikov, Beilstein J. Nanotechnol. 9, 1184 (2018).
- H. Zhang, Ch.-X Liu, S. Gazibegovic et al. (Collaboration), Nature 556, 74 (2018).
- I. Martin and A. F. Morpurgo, Phys. Rev. B 85, 144505 (2012).
- Y.-M. Lu and Z. Wang, Phys. Rev. Lett. **110**, 096403 (2013).
- A. P. Schnyder, S. Ryu, A. Furusaki, and A. W. W. Ludwig, Phys. Rev. B 78, 195125 (2008).
- P. Ghosh, J. D. Sau, S. Tewari, and S. Das Sarma, Phys. Rev. B 82, 184525 (2010).
- G.E. Volovik, The Universe in a Helium Droplet, Oxford Press, N.Y. (2003).
- В. В. Вальков, А.О. Злотников, Письма в ЖЭТФ 104, 512 (2016).
- V. V. Val'kov, A.O. Zlotnikov, and M.S. Shustin, J. Magn. Magn. Mater. 459, 112 (2018).
- L. Fidkowski and A.Yu. Kitaev, Phys. Rev. B 81, 134509 (2010).
- T. Morimoto, A. Furusaki, and Ch. Mudry, Phys. Rev. B 92, 125104 (2015).
- K. Ishikawa and T. Matsuyama, Nucl. Phys. B 280, 523 (1987).

- G. E. Volovik and V. M. Yakovenko, J. Phys. Condens. Matter 1, 5263 (1989).
- 22. G.E. Volovik, JETP Lett. 90, 398 (2009).
- Z. Wang and S.-C. Zhang, Phys. Rev. B 86, 165116 (2012).
- 24. G. Baskaran, Phys. Rev. Lett. 91, 097003 (2003).
- V. V. Val'kov, T. A. Val'kova, and V. A. Mitskan, J. Magn. Magn. Mater. 440, 129 (2017).
- 26. В. В. Вальков, А. О. Злотников, Φ TT **59**, 2100 (2017).
- A. V. Chubukov, S. Sachdev, and T. Senthil, J. Phys.: Condens. Matter. 6, 8891 (1994).
- Д. М. Дзебисашвили, А. А. Худайбердыев, Письма в ЖЭТФ 108, 189 (2018).
- L. Capriotti, A.E. Trumper, and S. Sorella, Phys. Rev. Lett. 82, 3899 (1999).

- S. R. White and A. L. Chernyshev, Phys. Rev. Lett. 99, 127004 (2007).
- А. F. Barabanov and A. V. Mikheyenkov, Письма в ЖЭТФ 56, 470 (1992).
- K. Pasrija and S. Kumar, Phys. Rev. B 93, 195110 (2016).
- 33. K. Jiang, S. Zhou, and Z. Wang, Phys. Rev. B 90, 165135 (2014).
- 34. C. Weber, A. Lauchli, F. Mila, and T. Giamarchi, Phys. Rev. B 73, 014519 (2006).
- 35. Р.О. Зайцев, ЖЭТФ **68**, 207 (1975).
- 36. Р.О. Зайцев, ЖЭТФ 70, 1100 (1976).
- В. В. Вальков, С. Г. Овчинников, Квазичастицы в сильнокоррелированных системах, Изд-во СО РАН, Новосибирск (2001).