

Wojciech Brzezicki

1 Dyplomy i stopnie naukowe

- Czerwiec 2012 – stopień doktora za pracę doktorską pt. “Ground states and excitations in spin models with orbital degrees of freedom” obronioną z wyróżnieniem na Uniwersytecie Jagiellońskim w Krakowie. Promotor: prof. dr hab. Andrzej M. Oleś.
- Czerwiec 2008 – stopień magistra za pracę magisterską pt. “Quantum phase transitions in spin chains” obronioną z wyróżnieniem na Uniwersytecie Jagiellońskim w Krakowie. Promotor: prof. dr hab. Andrzej M. Oleś.

2 Informacje o dotychczasowym zatrudnieniu

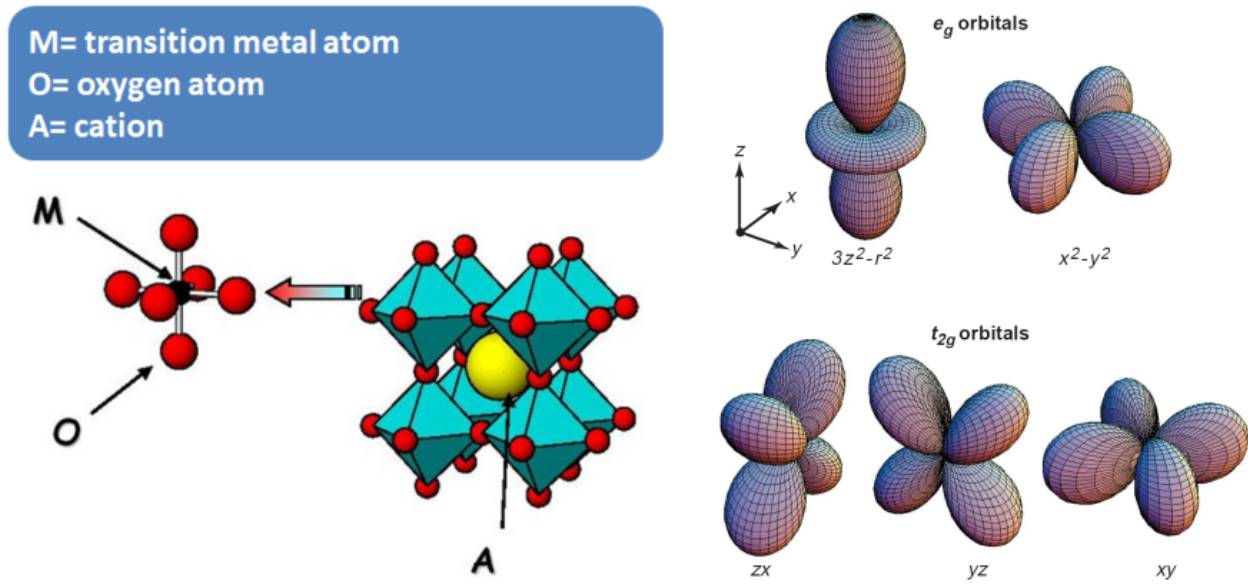
- Październik 2017 – adiunkt w Fundacji Badawczej MagTop - Międzynarodowe Centrum Badania Sprzężenia Magnetyzmu i Nadprzewodnictwa z Materiał Topologiczną w Warszawie.
- Kwiecień 2017 – Wrzesień 2017 – postdoc w grupie Dr Mario Cuoco w Instytucie CNR-SPIN w Fisciano (Salerno) we Włoszech.
- Kwiecień 2015 – Marzec 2017 – stypendium Marii Skłodowskiej-Curie Komisji Europejskiej, w ramach europejskiego programu badawczo-innowacyjnego Horyzont 2020, w grupie Dr Mario Cuoco w Instytucie CNR-SPIN w Fisciano (Salerno) we Włoszech. Realizacja projektu UFOX: Unveiling complexity in Functional hybrid Oxides, nr grantu 655515.
- Kwiecień 2014 – Marzec 2015 – postdoc w grupie Dr Mario Cuoco w Instytucie CNR-SPIN w Fisciano (Salerno) we Włoszech.
- Październik 2012 – Sierpień 2017 – zatrudnienie w grupie profesora Andrzeja M. Olesia w ramach projektu badawczego NCN MAESTRO na Uniwersytecie Jagiellońskim w Krakowie.

3 Osiągnięcie naukowe: Spinowy, orbitalny i topologiczny porządek w modelach silnie skorelowanych elektronów

3.1 Cykl publikacji powiązanych tematycznie

1. **W. Brzezicki**, J. Dziarmaga and A.M. Oleś, Physical Review Letters 109, 237201 (2012), “Noncollinear magnetic order stabilized by entangled spin-orbital fluctuations”.
2. **W. Brzezicki**, J. Dziarmaga and A.M. Oleś, Physical Review B 87, 064407 (2013), “Exotic spin orders driven by orbital fluctuations in the Kugel-Khomskii model”.
3. **W. Brzezicki**, J. Dziarmaga and A.M. Oleś, Physical Review Letters 112, 117204 (2014), “Topological Order in an Entangled $SU(2) \otimes XY$ Spin-Orbital Ring”.
4. **W. Brzezicki**, I. Hagymási, J. Dziarmaga and Ö. Legeza, Physical Review B 91, 205137 (2015), “Second-order Peierls transition in the spin-orbital Kumar-Heisenberg model”.
5. **W. Brzezicki**, A.M. Oleś and M. Cuoco, Physical Review X 5, 011037 (2015), “Spin-Orbital Order Modified by Orbital Dilution in Transition-Metal Oxides: From Spin Defects to Frustrated Spins Polarizing Host Orbitals”.

6. **W. Brzezicki**, M. Cuoco and A.M. Oleś, Journal of Superconductivity and Novel Magnetism 29, 563 (2016), “Novel Spin-Orbital Phases Induced by Orbital Dilution”.
7. **W. Brzezicki**, M. Cuoco and A.M. Oleś, Journal of Superconductivity and Novel Magnetism 30, 129 (2017), “Exotic Spin-Orbital Physics in Hybrid Oxides”.
8. **W. Brzezicki**, C. Noce, A. Romano and M. Cuoco, Physical Review Letters 114, 247002 (2015), “Zigzag and Checkerboard Magnetic Patterns in Orbitally Directional Double-Exchange Systems”.
9. **W. Brzezicki** and M. Cuoco, Physical Review B 95, 155108 (2017), “Topological Gapless Phases in Non-Symmorphic Antiferromagnets”.
10. **W. Brzezicki**, A.M. Oleś and M. Cuoco, Physical Review B: Rapid Communications 95, 140506(R) (2017), “Driving topological phases by spatially inhomogeneous pairing centers”.
11. **W. Brzezicki**, M. Cuoco, F. Forte and A.M. Oleś, Journal of Superconductivity and Novel Magnetism (2017), <https://doi.org/10.1007/s10948-017-4416-7>, “Topological Phases Emerging from Spin-Orbital Physics”.



Rysunek 1: Perowskitowa struktura tlenków metali przejściowych (po lewej); jony metali otoczone są oktaedrami tlenowymi i tworzą sieć kubiczną. Widok orbitali d w otoczeniu kubicznym (po prawej); dublet orbitali e_g i tryplet orbitali t_{2g} .

3.2 Wprowadzenie

Bezpośrednią lub pośrednią motywacją prac [1-11] są zjawiska obserwowane w tlenkach metali przejściowych o tzw. strukturze perowskitowej, jak na Rys. 1, w której jony metali zamknięte są w oktaedrach tlenowym tworzących sieć kubiczną. Atomy metali przejściowych charakteryzują się nie do końca wypełnioną powłoką d , co decyduje o ich własnościach chemicznych. Orbitale typu d posiadają orbitalną liczbę kwantową $l = 2$, a więc pięć możliwych stanów o określonej wartości magnetycznej liczby kwantowej m . Wszystkie te stany w przypadku izolowanego atomu metalu są zdegenerowane, ale w przypadku atomu w otoczeniu kubicznym multiplet ten rozpada się na trzy stany o symetrii t_{2g} , mające niższą energię, i dwa stany e_g o wyższej energii, por. Rys. 1. Pozostaje więc w kryształach degeneracja orbitalna. Stany t_{2g} zwyczajowo oznaczają się jako; $|zx\rangle$, $|yz\rangle$ i $|xy\rangle$, a stany e_g jako; $|3z^2 - r^2\rangle$ i $|x^2 - y^2\rangle$. Wygodną konwencję oznaczania orbitali t_{2g} , stosowaną w pracach [1-11], jest $|a\rangle \equiv |zx\rangle$, $|b\rangle \equiv |yz\rangle$ i $|c\rangle \equiv |xy\rangle$ – jej sens stanie się jasny później.

Elektrony w tlenkach metali przejściowych mogą się poruszać przede wszystkim poprzez przeskoki z jonu metalu na tlen i vice versa, co wynika z przekrywania się atomowych funkcji falowych. Elektrony te podlegają także odpychaniu kulombowskiemu, które na skutek zjawiska ekranowania w tego typu układach przyjmuje się jako ściśle lokalne, tzn. elektrony oddziałują ze sobą tylko jeśli oba znajdują się na tym samym atomie. W określonych przypadkach, które zależą od struktury pasm elektronowych [30], oddziaływania na atomach tlenu nie są istotne dla stanu podstawowego i opis układu można ograniczyć do samej sieci jonów metali przejściowych, między którymi przeskok możliwy jest poprzez hybrydyzację z tlenami. Przypadek ten dotyczy wszystkich prac [1-11]. Elektrony będąc na tym samym atomie, czyli węzle sieci, mogą oddziaływać będąc w tym samym stanie orbitalnym i różnych stanach spinowych, wtedy mówimy o oddziaływaniu U Hubbarda, lub oddziaływać będąc w różnych stanach orbitalnych i wówczas oddziaływanie kulombowskie zależy od konfiguracji spinowej elektronów poprzez oddziaływanie wymienne Hunda J_H i ulega obniżeniu o J_H dla dwóch jednakowych spinów [31]. Generyczny hamiltonian oddziaływań dla jonów metali przejściowych ma postać,

$$H_{int} = \sum_i \left\{ U \sum_{\mu} n_{i\mu\uparrow} n_{i\mu\downarrow} + \left(U - \frac{5}{2} J_H \right) \sum_{\substack{\mu < \nu \\ \sigma \sigma'}} n_{i\mu\sigma} n_{i\nu\sigma'} - 2 J_H \sum_{\mu < \nu} \mathbf{S}_{i\mu} \cdot \mathbf{S}_{i\nu} + J_H \sum_{\mu \neq \nu} d_{i\mu\uparrow}^{\dagger} d_{i\mu\downarrow}^{\dagger} d_{i\nu\downarrow} d_{i\nu\uparrow} \right\}, \quad (1)$$

gdzie operator fermionowy $d_{i\mu\sigma}^{\dagger}$ tworzy elektron o spinie σ w orbitalu μ , a $\mathbf{S}_i$ to operator spinu zdefiniowany jako $\mathbf{S}_i = \frac{1}{2} \sum_{\mu, \alpha, \beta} d_{i\mu\alpha}^{\dagger} \sigma_{\alpha, \beta} d_{i\mu\beta}$. Wartości U i J_H różnią się dla różnych metali przejściowych, ale sprzężenie J_H zawsze faworyzuje stan z maksymalnym spinem, co jest treścią reguły Hunda. Z kolei hamiltonian kinetyczny można zapisać jako,

$$H_t = - \sum_{\langle i, j \rangle \parallel \gamma} t_{\mu\nu}^{\gamma} \left(d_{i\mu\sigma}^{\dagger} d_{j\nu\sigma} + d_{j\nu\sigma}^{\dagger} d_{i\mu\sigma} \right), \quad (2)$$

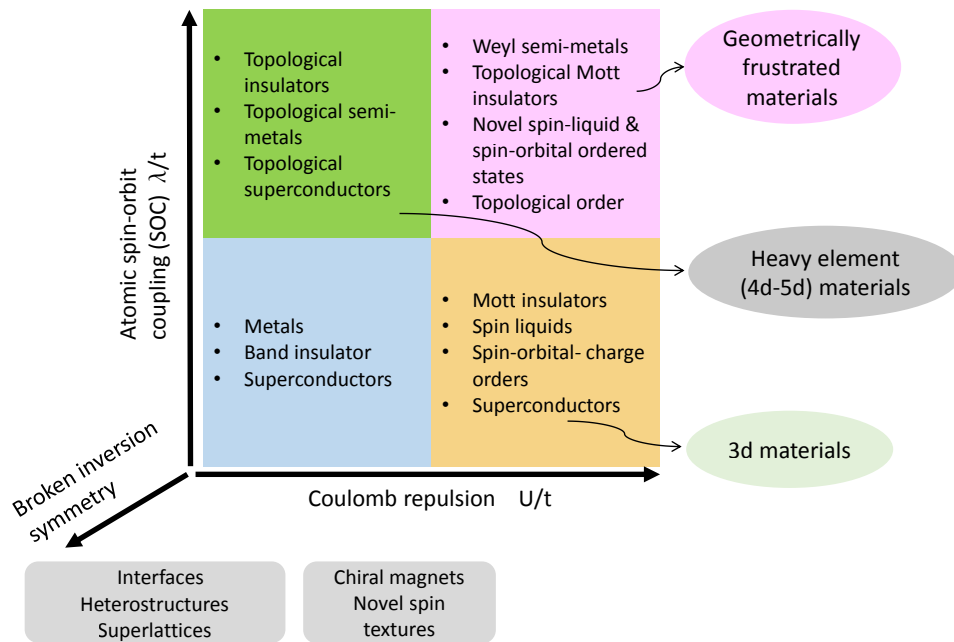
gdzie suma jest po najbliższych sąsiadach $\langle i, j \rangle$, a amplituda przeskoku $t_{\mu\nu}^{\gamma}$ zależy od kierunku $\hat{\gamma}$ wiązania $\langle i, j \rangle$ oraz od pary orbitali pomiędzy którymi następuje przeskok. Wynika to stąd, że orbitale istnieją w przestrzeni rzeczywistej (w przeciwieństwie do spinów) i ich przekrywanie zależy od kierunku wiązania $\hat{\gamma}$. Na przykład, w przypadku orbitali t_{2g} , dla wiązania w kierunku $\hat{a}$ jedyne niezerowe amplitudy przeskoku to $t_{bb} = t_{cc} = t$ i, uogólniając, dla dowolnego kierunku $\hat{\gamma}$ nie ma przeskoku między dwoma orbitalami γ . Wynika to z ich symetrii oraz symetrii sieci kubicznej, którą można zmienić np. poprzez dystorsje, jak również z udziału orbitali tlenowych $2p_{\pi}$ w procesach przeskoku $d-d$.

W przypadku, kiedy oddziaływania między elektronami są silne i brak jest domieszkowania, zmieniającego ilość elektronów na węzłach sieci, wtedy możliwa jest tzn. lokalizacja Motta [32], czyli przejście do stanu izolatora jedynie na skutek korelacji między elektronami. Izolator taki można opisać modelem efektywnym, w którym ładunkowe stopnie swobody są nieobecne. Ruch ładunków możliwy jest tylko dzięki wirtualnym wzbudzeniom ładunkowym prowadzącym do nadwymiany, kiedy elektron przeskakuje z jednego jonu metalu na drugi (poprzez tlen) i wraca na to samo miejsce. Wyprowadzenie efektywnego modelu nadwymiany sprowadza się to do rozwinięcia perturbacyjnego gdzie zaburzeniem jest hamiltonian kinetyczny H_t , a stany niezaburzone to spinowo i orbitalnie zdegenerowane stany własne hamiltonianu H_{int} . W efekcie otrzymujemy model oddziałujących spinów i orbitali opisywany tzw. modelem Kugela-Khomskii'ego [31] postaci,

$$\mathcal{H} = \sum_{\langle i, j \rangle} \left\{ J_{i,j} \left(\vec{T}_i, \vec{T}_j \right) \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j + K_{i,j} \left(\vec{T}_i, \vec{T}_j \right) \right\}, \quad (3)$$

gdzie spin $\vec{S}_i$ oznacza całkowity spin na jonie metalu przejściowego wynikający z zasady Hunda, $\vec{T}_i$ to operatory pseudospinowe opisujące orbitalne stopnie swobody, a $J_{i,j}$ i $K_{i,j}$ to pewne dwuliniowe funkcje tych operatorów, zależne od kierunku wiązania $\langle i, j \rangle$. Dodatkowo, należy też uwzględnić możliwe skończone sprzężenie spin-orbita λ na jonach metali przejściowych, które staje się istotne dla orbitali t_{2g} w przypadku metali o wysokiej głównej liczbie kwantowej, czyli np. o konfiguracji $4d$ i $5d$. Sprzężenie takie można dodać do hamiltonianu nadwymiany (3) jako wyraz $\lambda \sum_i \vec{S}_i \cdot \vec{L}_i$, gdzie $\vec{L}_i$ to operator krętu wyrażający się przez składowe $\vec{T}_i$ [5], pod warunkiem że $\lambda \ll J_H$ - w przeciwnym wypadku opis wysokospinowy wynikający z hamiltonianu (1) nie jest poprawny i trzeba zaczynać od lokalnie splątanych stanów spinowo-orbitalnych wynikających z λ [33].

Równanie (3) definiuje wysoce nietrywialny kwantowy problem wielu ciał, którego złożoność rośnie eksponencjalnie z wielkością układu. Dodatkowym problemem jest też to, że oddziaływania spinowo-orbitalne są generycznie sfrustrowane, tzn. w klasycznym rozumieniu nie można tak poukładać spinów i orbitali, że każde wiązanie miało minimalną energię, a stopnie swobody są ze sobą splątane, tzn. w opisie kwantowym nie można faktoryzować funkcji falowej na część spinową i orbitalną [34]. Ścisłe rozwiązanie (poza bardzo szczególnymi przypadkami) jest więc wykluczone, a podejścia przybliżone są ograniczone przez frustrację i splątanie. Niemniej jednak, w pewnych granicach parametrów, możliwe jest określenie przybliżonych własności modelu opisywanego równaniem (3), takich jak uporządkowanie spinów i orbitali oraz podstawowych typów wzbudzeń. Znane są np. zasady Goodenough-Kanamori, mówiące, że porządkowi ferro/anyferromagnetycznemu

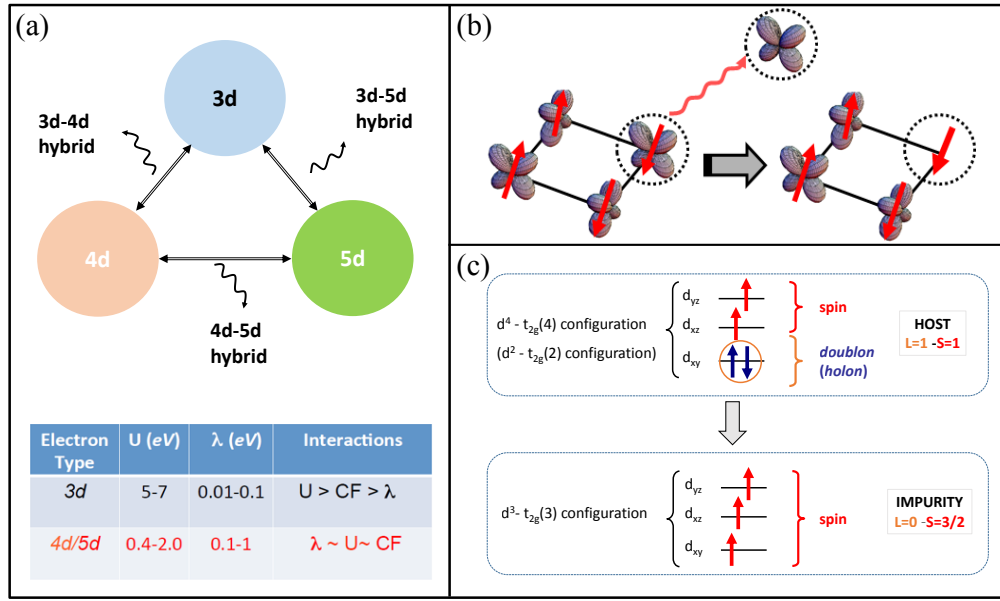


Rysunek 2: Schemat możliwych stanów materii dla tlenków metali przejściowych w funkcji parametrów mikroskopowych, odpychania kulombowskiego U i sprzężenia spin-orbita λ , mierzonych względem wartości całki przeskoku t . Wielkości te można zmienić dobierając odpowiednie metale przejściowe, od lżejszych i silnie skorelowanych $3d$ po cięższe i większym sprzężeniu spin-orbita $4d$ i $5d$. Dodatkowym parametrem mogą być czynniki sprawiające, że układ jest niecentrosymetryczny.

w danym kierunku odpowiada porządek antyferro/ferro-orbitalny (czyli dla orbitali t_{2g} parze spinów $\{\uparrow\downarrow\}$ na danym wiązaniu odpowiada para orbitali $\{c, c\}$, a parze spinów $\{\uparrow\uparrow\}$ odpowiada para orbitali $\{a, b\}$). Jest to jednak tylko przybliżona zasada ponieważ silne splątanie kwantowe może ją unieważnić [35].

Tlenki metali przejściowych są obiektem intensywnych badań ze względu na wielość możliwych nietrywialnych zjawisk i stanów materii jakie można w nich zaobserwować. Wynika to z konkurencji między energią kinetyczną ładunków $\propto t$ a różnymi typami uporządkowań stabilnymi w granicy dużych oddziaływań $\propto U$. Rys. 2 schematycznie przedstawia niektóre z tych stanów w funkcji oddziaływania kulombowskiego U i sprzężenia spin-orbita λ względem amplitudy przeskoku t . Niska wartość λ odpowiada metalom $3d$ [36] i takim związkom jak miedziowce lub pniktydki żelazowe, znane ze zjawisk nadprzewodnictwa wysokotemperaturowego, czy manganity, w których obserwuje się kolosalny magneto-opór. W zależności od siły oddziaływań, dla małych U/t możemy otrzymać nisko skorelowane stany typu metal, izolator pasmowy lub nadprzewodnik, a dla większych U/t izolatory skorelowane opisywane modelami spinowo-orbitalnymi typu (3). Z kolei dla większych wartości sprzężenia spin-orbita, odpowiadającym cięższym metalom $4d$ i $5d$, pojawiają się tzw. stany topologiczne w granicy niskich oddziaływań i porządek topologiczny w granicy dużego U/t – ponieważ metale o większej głównej liczbie kwantowej mają większe orbitale które silniej się przekrywają, co efektywnie zwiększa t , potrzeba geometrycznej frustracji sieci żeby efektywnie uzyskać wysoką wartość U/t [37]. Innym czynnikiem dającym nowe uporządkowania magnetyczne może być złamana symetria odbicia względem punktu, która prowadzi do wyrazów typu $\vec{S}_i \times \vec{S}_j$, i w efekcie niekolinearnych, chiralnych porządków spinowych. Takim układem ze złamaną symetrią może być np. powierzchnia styku dwóch różnych tlenków.

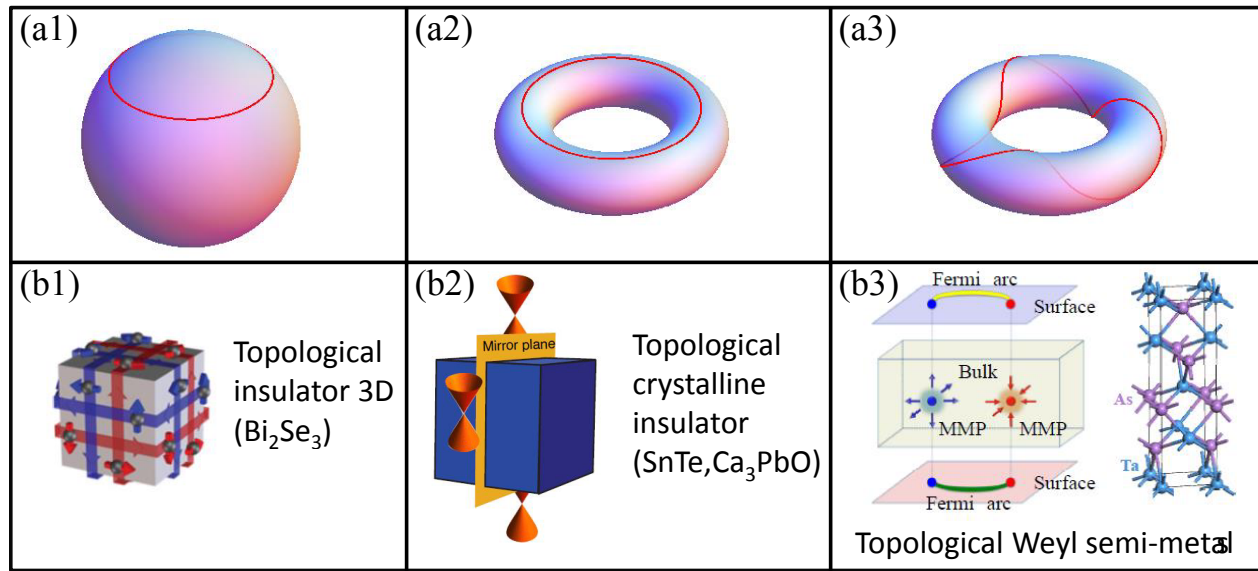
Nowym sposobem na otrzymywanie interesujących zjawisk i uporządkowań jest tworzenie tlenków hybrydowych, czyli takich gdzie na przypadkowych węzłach sieci podstawione są inne jony metali przejściowych. W ten sposób można tworzyć hybrydy gdzie skale energii oddziaływań kulombowskich, sprzężenia spin-orbita



Rysunek 3: (a) Schematyczny widok różnych hybryd tlenkowych i typowych skal energii dla metali $3d$, $4d$ i $5d$, tzn. odpychanie kulombowskie, sprzężenie spin-orbita i rozszczepienie w polu krystalicznym. (b) Rozrzedzenie orbitalne w wyniku domieszkowania tlenku typu $4d^4$ przez metal $3d^3$ – efektywnie orbitalny stopień swobody znika na domieszkowanym węźle sieci. (c) Spinowo-orbitalny atomowy stan podstawowy dla atomów $4d^4$ (lub $4d^2$) matrycy i domieszki $3d^3$.

i rozszczepienia w polu krystalicznym nie są jednorodne przestrzennie, por. Rys. 3(a). Przykładem hybryd $3d-4d$ są domieszkowane manganem warstwowe tlenki rutenu z rodziny $\text{Sr}_{n+1}\text{Ru}_n\text{O}_{3n+1}$ (n odpowiada liczbie warstw), gdzie zmiany własności fizycznych silnie zależą od n . Dla $n \rightarrow \infty$, czyli związku kubicznego, domieszkowanie manganem prowadzi układ ze stanu metalicznego ferromagnetyka do antyferromagnetycznego izolatora [38], podczas gdy dla $n = 2$ to samo domieszkowanie daje izolator z porządkiem zygzakowym – spin porządkują się w ferromagnetycznie wzdłuż zygzaków na płaszczyźnie [39]. Z kolei dla podobnej hybrydy $3d-4d$, jednowarstwowego tlenku Ca_2RuO_4 , domieszkowanie chromem prowadzi do niekolinearnego porządku spinowego z tendencją do ferromagnetyzmu oraz do nietypowej ujemnej rozszerzalności cieplnej w obszarze parametrów gdzie układ wykazuje porządek spinowy i orbitalny [40]. Domieszkowanie tlenków rutenu manganem w konfiguracji $3d^3$ ma szczególnie prostą interpretację w granicy silnych korelacji, kiedy poprawny jest efektywny opis spinowo-orbitalny według Hamiltonianu (3). Jest to efektywne rozrzedzenie orbitalnych stopni swobody, jak pokazano na Rys. 3(b)-(c), o którym traktują prace [5] i [6]. Jony rutenu, czyli matrycy, mają konfigurację $4d^4$ zatem ich stan atomowy ma spin $S = 1$, zgodnie z regułą Hunda, i moment orbitalny $L = 1$, gdzie orbitalnym stopniem swobody jest podwójne obsadzenie (dublon) jednego z orbitali t_{2g} . Z kolei jony domieszki mają konfigurację elektronową $3d^3$, więc ich stan atomowy to stan z maksymalnym spinem $S = 3/2$. Ponieważ wszystkie orbitale są zajęte przez jeden elektron, efektywnie jony te nie mają orbitalnych stopni swobody. W tym kontekście, domieszkowanie chromem $3d^2$ jest zupełnie innym przypadkiem, ponieważ analogicznie do jonów matrycy ma on spin $S = 1$ i moment orbitalny $L = 1$ realizowany przez zerowe obsadzenie (holon) jednego z orbitali t_{2g} – por. Rys. 3(c). Nie występuje więc rozrzedzenie orbitalne, a jedynie ładunkowe [7].

Zupełnie innym typem uporządkowania jest porządek topologiczny. Odnosi się on do układów periodycznych i jest widoczny tylko wtedy jeśli obiegamy układ dookoła. Na przykład, obiegając powierzchnię sfery, jak na Rys. 4(a1), nie widzimy nic szczególnego, bo każdą pętlę na jej powierzchni można w sposób ciągły



Rysunek 4: Ilustracja związku topologii z fizyką materii skondensowanej; (a1-a3) topologiczna różnica między sferą a torusem zobrazowana przy pomocy pętli na ich powierzchni, (b1-b3) przykłady ciał stałych w których nietrywialna topologia stanu podstawowego przejawia się poprzez metaliczne stany brzegowe.

ścisnąć aż do punktu. Natomiast robiąc to samo na powierzchni torusa, por. Rys. 4(a2-3), widzimy, że pętłe mogą się od siebie w sposób nietrywialny różnić; możemy obiegać torus n razy po większym okręgu i niezależnie m razy po mniejszym i nie da się przejść w sposób ciągły między pętlami o różnych (n, m) . Oznacza to, że torus ma nietrywialną pierwszą grupę homotopii, w przeciwieństwie do sfery. Wynika to oczywiście z faktu, że sfera i torus mają inną topologię. Ma to swoje konsekwencje w fizyce ciała stałego – dla nieoddziałującego hamiltonianu fermionowego przestrzeń pędów pełni rolę pętli natomiast przestrzeń stanów własnych hamiltonianu powierzchni po której tę pętlę prowadzimy.

Fazy topologiczne możemy charakteryzować niezmiennikami topologicznymi, które przyjmują wartości całkowite, podobnie jak powierzchnie na Rys. 4(a) możemy scharakteryzować całkami z krzywizny Gaussa równymi co do wartości liczbie otworów w powierzchni (0 dla sfery, 1 dla torusa). Jest to swego rodzaju kwantowanie, które ma konsekwencje w fizyce – na przykład w kwantowym efekcie Halla, gdzie odpowiada za liczbę stanów brzegowych i w efekcie kwantyzację przewodnictwa Halla. W zależności od podstawowych (nieprzestrzennych) symetrii hamiltonianów, czyli symetrii odwrócenia czasu $\mathcal{T}$, symetrii cząstka-dziura $\mathcal{C}$ i chiralności $\mathcal{S}$ (iloczyn $\mathcal{T}$ i $\mathcal{C}$), oraz wymiaru układu, można sklasyfikować ich stany podstawowe jako zawsze trywialne, nietrywialne z indeksem topologicznym $\mathbb{Z}$ (dowolna liczba całkowita przy czym 0 to stan trywialny) oraz z indeksem topologicznym $\mathbb{Z}_2$ (tylko 0 albo 1) [41]. Symetrie $\mathcal{T}$ ($\mathcal{C}$) są antyunitarne i układ może ich nie mieć wcale, mieć takie że $\mathcal{T}^2 = 1$ ($\mathcal{C}^2 = 1$), albo że $\mathcal{T}^2 = -1$ ($\mathcal{C}^2 = -1$). Z kolei chiralność (inaczej symetria podsieci) jest unitarna, więc układ może ją mieć albo nie. W sumie daje to dziesięć kanonicznych klas symetrii zwanych klasami Altlanda-Zirnbauera, dla których istnieje sześć uniwersalnych przepisów na liczenie indeksów topologicznych, chiralny i niechiralny indeks $\mathbb{Z}$ oraz dwa typy indeksu $\mathbb{Z}_2$ w wersji chiralnej niechiralnej. Klasyfikacje te stosują się do wszystkich hamiltonianów nieoddziałujących fermionów, zarówno z przerwą energetyczną (izolatory, nadprzewodniki nienodalne) jak i bez przerwy (półmetale, metale i nadprzewodniki nodalne) [42]. W przypadku istnienia przerwy energetycznej mówimy, że jest ona chroniona topologicznie jeśli układ ma niezerowy indeks topologiczny – jest on zdefiniowany w pełnej przestrzeni energii-pędu. Z kolei dla D -wymiarowych układów bez przerwy mówimy, że powierzchnia Fermiego o wymiarze d jest chroniona topologicznie, jeśli ma ona niezerowy ładunek topologiczny – jest to indeks topologiczny zdefiniowany na

p -wymiarowej sferze otaczającej powierzchnię Fermiego w przestrzeni energii-pędu, gdzie $p = D - d$.

Z istnieniem indeksów i ładunków topologicznych wiąże się bardzo ważna właściwość; korespondencja między objętością i brzegiem. Można w sposób ścisły pokazać, że jeśli układ ma brzeg (z próżnią lub innym układem) i jest topologicznie nietrywialny (jako układ periodyczny bez brzegu), to na tym brzegu pojawiają się stany zamykające przerwę energetyczną lub łączące punkty Fermiego w przestrzeni pędów. W ten sposób można pokazać, że każda zmiana indeksu topologicznego układu musi się wiązać z zamknięciem przerwy, jeśli układ ją ma, lub otwarciem jej, jeśli jej nie ma [43]. Ponieważ indeks jest dany liczbą całkowitą, to małe zaburzenie nie jest w stanie go zmienić, o ile nie zmienia symetrii układu, więc nie jest też w stanie zamknąć lub otworzyć przerwy. Na tym polega topologiczna ochrona przerwy lub powierzchni Fermiego. Symetrią te mogą być nieprzestrzenne ($\mathcal{T}$, $\mathcal{C}$ i $\mathcal{S}$) jak i przestrzenne, związane z symetriami kryształu takimi jak symetria odbicia lustrzanego, odbicia względem punktu lub obrotu względem osi, co dodatkowo komplikuje klasyfikację stanów topologicznych [44]. Przykładowe układy topologiczne i ich stany brzegowe pokazane są na Rys. 4(b1-3); (b1) – trójwymiarowy izolator topologiczny Bi_2Se_3 z metalicznymi tzw. helikalnymi stanami brzegowymi [45], (b2) – krystaliczny izolator topologiczny chroniony przez symetrię odbicia lustrzanego, stanami brzegowymi są fermiony Diraca [46], (b3) – topologiczny półmetal Weyla TaAs z tzw. łukami Fermiego będącymi stanami brzegowymi [47].

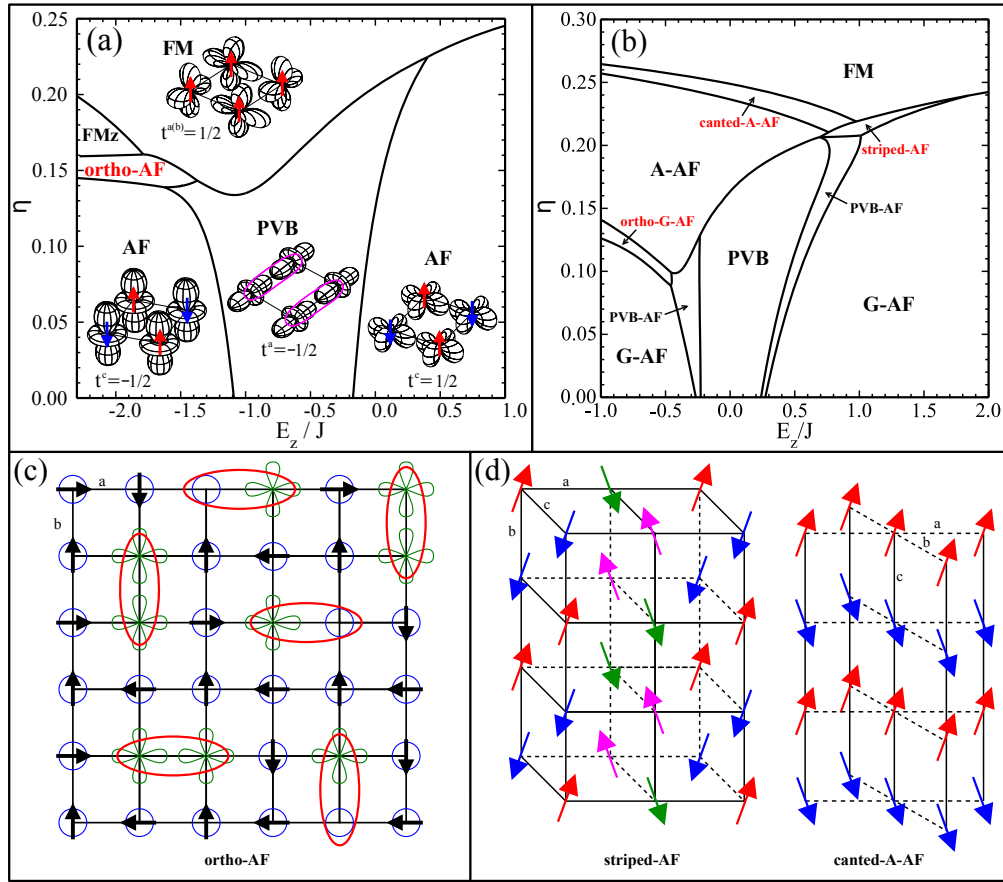
Ogólne klasyfikacje stanów topologicznych istnieją tylko dla układów fermionowych bez oddziaływań, niemniej przepisy na liczenie indeksów topologicznych działają także w obecności oddziaływań, ponieważ są zdefiniowane przez jednocząstkową funkcję Greena. Symetrie $\mathcal{T}$, $\mathcal{C}$ i $\mathcal{S}$ także można uogólnić dla układu z oddziaływaniem. Można więc pokazać nietrywialność topologiczną generycznego układu fermionowego, z tym że nie musi się to przekładać na obecność stanów brzegowych, ponieważ oddziałująca funkcja Greena może mieć nie tylko bieguny ale też zera [43]. W tym sensie więc oddziaływanie może efektywnie sprawić, że układ topologiczny stanie się trywialny, choć dotyczy to tylko spektrum jednocząstkowego. Nieco innym przypadkiem jest hamiltonian typu (3), gdzie nie ma fermionowych stopni swobody, a jedynie oddziałujące spiny i orbitale. W takim przypadku mówimy o porządku topologicznym, który jest pewnym uporządkowaniem nielokalnym mającym wpływ na degenerację stanu podstawowego. Jeśli nie jest jasne na czym polega ten porządek, to w modelach jednowymiarowych o topologicznej nietrywialności układu może świadczyć parzysta degeneracja w tzw. spektrum splątania [48]. Inną metodą szukania porządku topologicznego w tego typu układach jest narzucenie tzw. skręconych warunków brzegowych [49] i badanie fazy Berry’ego stanu podstawowego w funkcji skręcenia.

3.3 Omówienie wyników

Niekolinyarny porządek magnetyczny stabilizowany przez fluktuacje orbitalne

Prace [1-2] dotyczą egzotycznych faz spinowo-orbitalnego modelu Kugela-Khomskii’ego (3) dla silnie skorelowanych tlenków metali przejściowych z konfiguracją elektronową d^9 na jonach metali przejściowych. Efektywnie oznacza to pojedynczą dziurę w multipiecie orbitali d , a więc spin $S = 1/2$ i orbitalne stopnie swobody realizowane przez dziurę zajmującą jeden z orbitali e_g , zatem pseudospin orbitalny $T = 1/2$. Rozważane są modele na sieciach kubicznych dwu- [1] i trójwymiarowych [2], mających zastosowanie do opisu związków miedziowych, odpowiednio K_2CuF_4 i KCuF_3 (o analogicznej strukturze jak rozważane tu tlenki). Badanie tych związków jest jakościowo prostsze, jako że wystarczy ograniczyć się do modelu spinowo-orbitalnej nadwymiany, ponieważ sprzężenie spin-orbita nie występuje. Najważniejszym wynikiem obu tych prac jest odkrycie faz z niekolinyarnym porządkiem magnetycznym, takich jak na Rys. 5(c-d). Mechanizmem, który stabilizuje taki porządek są splątane fluktuacje spinowo-orbitalne na wiązaniach sieci. Mechanizm taki nie był znany wcześniej i jego opis jest zasadniczą częścią prac [1-2].

Fazy niekolinyarne zaobserwowano na spinowo-orbitalnych diagramach fazowych otrzymanych metodą klastrowego pola średniego (metoda Bethgo-Peierlsa-Weissa), pokazanych na Rys. 5(a-b). Parametrami są: wartość pola krystalicznego E_z względem stałej nadwymiany $J = 4t^2/U$ (t jest amplitudą przeskoku pomiędzy parą orbital $|3z^2 - r^2\rangle$ wzdłuż osi c), gdzie dodatnia wartość E_z oznacza, że stany orbitalne $|x^2 - y^2\rangle$ mają niższą energię niż $|3z^2 - r^2\rangle$, a ujemna że jest odwrotnie oraz wartość $\eta = J_H/U$, czyli stosunku



Rysunek 5: Najważniejsze wyniki dla spinowo-orbitalnego modelu Kugela-Khomskii’ego w dwóch i trzech wymiarach. Diagramy fazowe w funkcji pola krystalicznego E_z/J i sprzężenia Hunda $\eta = J_H/U$ dla; (a) dwóch i (b) trzech wymiarów. (c) Artystyczny widok stanu podstawowego w fazie ortho-AF w dwóch wymiarach, strzałki to spiny, okręgi i kokardki to orbitale $|3z^2 - r^2\rangle$ i $|x^2 - y^2\rangle$, a elipsy to singlety spinowe. (d) Schemat porządku magnetycznego w fazach striped-AF i canted-A-AF w trzech wymiarach, strzałki to spiny.

stałej Hunda J_H do oddziaływania Hubbarda U . Główne fazy magnetyczne to fazy z porządkiem antyferromagnetycznym (AF) we wszystkich kierunkach, oznaczanej jako G-AF w układzie trójwymiarowym, fazy z porządkiem ferromagnetycznym we wszystkich kierunkach (FM) oraz w przypadku trójwymiarowym faza która jest ferromagnetyczna w płaszczyznach ab i antyferromagnetyczna w kierunku c (A-AF). W przypadku tych faz sprawdza się reguła Goodenough-Kanamori, a więc porządek orbitalny w kierunkach wiązań antyferromagnetycznych jest ferro-orbitalny i vice versa – por. Rys. 5(a). Wyjątkiem jest tu faza FMz w układzie dwuwymiarowym, gdzie orbitale nie alternują mimo porządku ferromagnetycznego. Widać więc, że o tendencji do ferromagnetyzmu decyduje wielkość η , z kolei o tym jaka jest polaryzacja orbitalna decyduje E_z . Te relatywnie proste fazy, których istnienie można przewidzieć w granicy klasycznej, nie są jednak jedynymi. W sytuacji kiedy skale energii konkurują i układ nie może się zdecydować na żadne proste uporządkowanie, pojawiają się fazy z silnymi fluktuacjami kwantowymi, jak faza singletowa PVB lub właśnie z uporządkowaniem niekolinearnym opisane na czerwono na diagramach 5(a-b). Są to odpowiednio, faza ortho-AF w układzie dwuwymiarowym i oraz fazy ortho-G-AF, canted-A-AF i striped-AF w trójwymiarowym schemata-

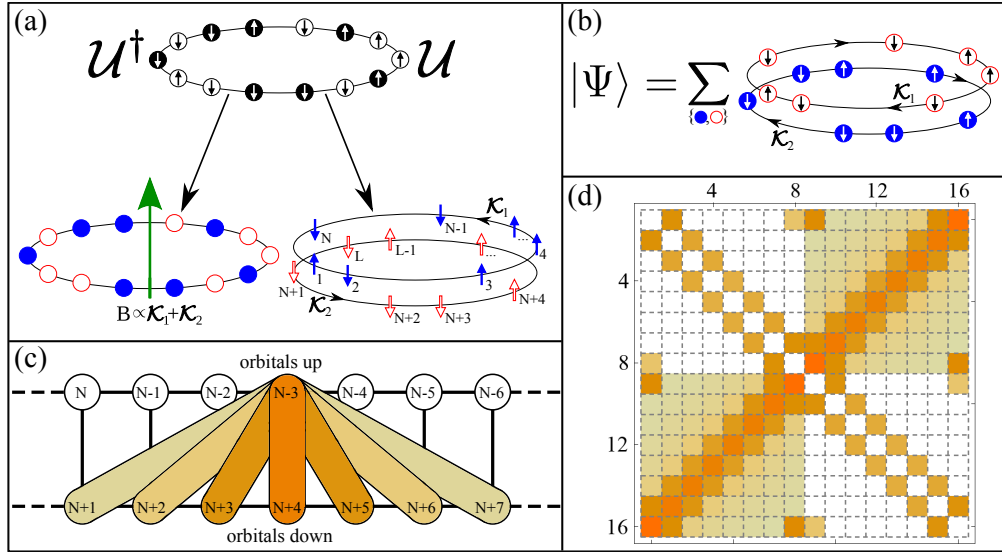
tycznie pokazane na Rys. 5(c-d).

W pracy [1] wykazano, że stan podstawowy w fazie ortho-AF, Rys. 5(c), w granicy klasycznej składa się z wzajemnie prostopadłych sąsiadujących spinów i wszystkich orbitali w stanie $|3z^2 - r^2\rangle$. Stan ten jest ubrany we fluktuacje kwantowe mające postać mające postać singletów sprzężonych z parą lub z pojedynczym orbitalem $|x^2 - y^2\rangle$. Niekolonna konfiguracja spinowa w tym przypadku związana jest ze splątaniem spinowych i orbitalnych stopni swobody na wiązaniach sieci, co można udowodnić poprzez rozwinięcie perturbacyjne. Przyjmując wyraz oddziaływania z polem krystalicznym E_z , a więc hamiltonian czysto orbitalny, za środek rozwinięcia, a resztę hamiltonianu (zawierającą spiny) za zaburzenie, można pokazać, że w pierwszym rzędzie otrzymuje się efektywne oddziaływania spinowe między drugimi sąsiadami na sieci kwadratowej. Dwie podsieci są więc rozprężone i porządkują się antyferromagnetycznie, jedna niezależnie od drugiej. Stan orbitalny pozostaje niezaburzony. W drugim rzędzie pojawiają się fluktuacje orbitalne, takie jak na Rys. 5(c), oraz efektywne oddziaływania czterospinowe, które sprzęgają dwie podsieci w ten sposób, że po zaniedbaniu fluktuacji sąsiednie spiny orientują się do siebie prostopadle.

Mechanizm ten, opisany w pracy [1], jest nowym, nieopisanym wcześniej, sposobem otrzymania niekolonnego porządku magnetycznego, który nie wymaga silnych efektów relatywistycznych, a więc ciężkich metali przejściowych. Warunkiem są silne fluktuacje orbitalne, które w tym przypadku wynikają z bliskości orbitalnego przejścia fazowego od uporządkowania ferro-orbitalnego w fazie AF do alternujących orbitali w fazie FM. Podobny efekt można też zaobserwować w układzie trójwymiarowym, gdzie realizuje się faza ortho-G-AF, będąca trójwymiarowym analogiem fazy ortho-AF [2], oraz fazy canted-A-AF i striped-AF pokazane na Rys. 5(d). Wszystkie one pojawiają się jako niekolonne fazy przejściowe pomiędzy fazami o konwencjonalnym porządku magnetycznym. Na przykład, będąc na diagramie 5(b) w fazie G-AF po lewej, korelacje spinowe są antyferromagnetyczne we wszystkich kierunkach, a orbitale są spolaryzowane jako $|3z^2 - r^2\rangle$. Zwiększając η zmieniamy korelacje spinowe w płaszczyznach ab na ferromagnetyczne i orbitale na częściowo alternujące przechodząc przez fazę ortho-G-AF. Zwiększając dalej η zamieniamy wszystkie korelacje spinowe na ferromagnetyczne, czyli wiązania w kierunku c muszą się przeorientować o 180 stopni. To przeorientowanie odbywa się poprzez fazę canted-A-AF, por. Rys. 5(d), gdzie kąt między spinami wzdłuż kierunku c zmienia się w sposób ciągły od 180 do 0 stopni przy zwiększaniu η . Proces ten można opisać poprzez podobne rozwinięcie perturbacyjne jak w przypadku fazy ortho-AF, z tym, że środkiem rozwinięcia jest część hamiltonianu nadwymiany stabilizująca alternujące orbitale [2]. Z kolei fazę striped-AF, także na Rys. 5(d), można otrzymać poprzez to samo rozwinięcie co ortho-AF, z tym, że dla dodatniego pola krystalicznego E_z , a więc stanu ze spolaryzowanymi orbitalami $|x^2 - y^2\rangle$. Efekt rozwinięcia jest więc zupełnie inny, korelacje spinowe są we wszystkich kierunkach ujemne, ale pojawia się odchylenia od kąta 180 stopni między sąsiednimi spinami wzdłuż jednego kierunku sieci i w efekcie porządek z czterema podsieciami magnetycznymi. Prace [1-2] są więc istotnym wkładem w zrozumienie złożoności możliwych uporządkowań spinowych i orbitalnych w tlenkach metali przejściowych z zaniedbywalnym sprzężeniem spin-orbita, które mimo to okazują się nietrywialne.

Model spinowo-orbitalny z porządkiem topologicznym i spontaniczną dimeryzacją

Jeszcze bardziej nietypowym porządkiem charakteryzuje się jednowymiarowy model spinowo-orbitalny $SU(2) \otimes XY$ opisany po raz pierwszy przez Kumara [50] w kontekście separacji spinowo-orbitalnej. Model ten ma generyczną postać równania (3) ze spinami $S = 1/2$ i pseudospinami orbitalnymi $T = 1/2$, będziemy więc mówić zarówno o spinach w górę i w dół jak i o orbitalach 'w górę' i 'w dół'. Kumar pokazał, że dla układu z otwartym brzegiem można zdefiniować transformację unitarną $\mathcal{U}$, która w sposób ścisły rozdziela spinowe i orbitalne stopnie swobody. Efektem tej transformacji jest to, że spiny stają się polem cechowania przyczepionym do orbitali i po transformacji znikają całkowicie z hamiltonianu. W artykule [50] nie ma natomiast odpowiedzi na pytanie co się dzieje, jeśli układ ma periodyczny brzeg. Okazuje się to niezwykle interesujące – w pracy [3] udało się pokazać, że transformacja $\mathcal{U}$ nadal prowadzi do niemal całkowitej separacji spinów i orbitali, ale spiny zaabsorbowane jako pole cechowania przez orbitale pojawiają się na ostatnim wiązaniu łączącym ostatni i pierwszy węzeł łańcucha. Pojawiają się jako bardzo specyficzny, nielokalny operator, który prowadzi do porządku topologicznego i wzbudzeń topologicznych. Główną wartością pracy [3] jest więc



Rysunek 6: Jakościowe wyniki dla spinowo-orbitalnego modelu $\text{SU}(2) \otimes \text{XY}$ bez (a-b) i z wyrazem Heisenberga (c-d) dla oddziaływań między spinami. (a) Schemat rozszczepienia spinowo-orbitalnego realizowanego transformacją $\mathcal{U}$. Początkowy pierścień spinowo-orbitalny (góra) rozszczepia się na część czysto orbitalną (lewo) i czysto spinową (prawo). (b) Schemat stanu podstawowego. Stany o określonej liczbie orbitali 'w górę' (puste kółka) i 'w dół' (pełne kółka) tworzą orbitalne morze Fermiego (suma po orbitalach). Każdy taki stan ubrany jest w prądy spinowe $\mathcal{K}_{1,2}$, płynące przez podukład orbitali 'w górę' i 'w dół'. (c) Schemat wiązań spinowych pomiędzy dwoma podukładami (dwie nogi drabiny) w modelu $\text{SU}(2) \otimes \text{XY}$ z wyrazem Heisenberga traktowanym perturbacyjnie, gdzie $N = L/2$, a L to wielkość całego układu. Zaznaczono wiązania łączące węzeł $l = 4$ podukładu z orbitalami 'w górę' z węzłami podukładu z orbitalami 'w dół'. Ich nasycenie koloru odpowiada sile efektywnych wiązań J_{ij} (zawsze $J_{ij} \geq 0$). (d) Macierz efektywnych wiązań spinowych J_{ij} dla $L = 16$, znaczenie kolorów jak w panelu (c).

odkrycie porządku topologicznego w układzie silnie oddziałującym, który daje się rozwiązać w sposób ścisły.

W wyniku działania nielokalnego wyrazu brzegowego na podukład spinów generowane są cykliczne przesunięcia, tzn., każdy spin na węźle z orbitalem 'w górę' ('w dół') przesuwają się w prawo na najbliższy węzeł z orbitalem 'w górę' ('w dół'), przy czym całkowita ilość orbitali 'w górę' ('w dół') jest dobrą liczbą kwantową. Z kolei podukład orbitali odczuwa te cykliczne prądy jako efektywne pole magnetyczne przepływające przez zamknięty łańcuch – pierścień. Schemat tego specyficznego rozszczepienia spinowo-orbitalnego spowodowanego przez transformację $\mathcal{U}$ pokazany jest na Rys. 6(a), a schematyczny widok stanu podstawowego $|\Psi\rangle$ z porządkiem topologicznym na Rys. 6(b). W stanie tym położenie poszczególnych orbitali 'w górę' i 'w dół' fluktuuje w morzu Fermiego w ten sposób, że średnio każdy orbital 'w górę' ma za sąsiada orbital 'w dół'. Jednocześnie w każdym ze stanów składowych tej superpozycji są prądy spinowe o kwazipędzie $\mathcal{K}_1$ i $\mathcal{K}_2$ płynące przez podukłady 'w górę' i 'w dół'. Porządek spinowy w stanie $|\Psi\rangle$ jest więc całkowicie nielokalny i polega na zamkniętej topologii periodycznego łańcucha – stąd jest to porządek topologiczny [3].

Minimalną energię stanu podstawowego $|\Psi\rangle$ otrzymujemy kiedy $\mathcal{K} = \mathcal{K}_1 + \mathcal{K}_2 = 0$, a najniższe wzbudzenia dla $\mathcal{K} \neq 0$, przy czym energia tych wzbudzeń jest kwadratowa w $\mathcal{K}$ a przerwa energetyczna między nimi skaluje się jak L^{-3} , gdzie L to wielkość układu. Wzbudzenia takie można nazwać wzbudzeniami topologicznymi, w odróżnieniu od wzbudzeń orbitalnych, których przerwa skaluje się jak L^{-1} . W przypadku otwarcia łańcucha stany rozszczepione przez $\mathcal{K}$ zapadają się do pojedynczego multipletu o degeneracji 2^L . Widać więc, że w modelu $\text{SU}(2) \otimes \text{XY}$ topologia decyduje o degeneracji d stanu podstawowego, która dla dużych układów wynosi $d \simeq 2^{L+1}/L$ w przypadku zamkniętego łańcucha i $d = 2^L$ dla otwartego. W przypadku izolatorów

topologicznych taka zmiana degeneracji wynika z obecności stanów brzegowych o zerowej energii. Model $SU(2) \otimes XY$ nie jest jednak modelem swobodnych fermionów i nie ma stanów jednocząstkowych, więc trudno w jego kontekście mówić o stanach brzegowych. Niemniej topologicznie chroniona degeneracja i porządek nielokalny spinów są tu wyznacznikiem porządku topologicznego.

Model $SU(2) \otimes XY$ ma dość szczególną postać, w której nie występują oddziaływania między samymi spinami, a jedynie oddziaływania między parą spin-orbital na sąsiednich węzłach. Naturalnym jest więc pytanie co się stanie, jeśli dodamy do niego zaburzenie polegające na dodatkowych oddziaływaniach Heisenberga między spinami i jakie to da uporządkowanie [4]. Kluczową kwestią jest tu przedstawienie czysto spinowego hamiltonianu zaburzenia w bazie zdefiniowanej przez transformację $\mathcal{U}$, która powoduje rozszczepienie spinowo-orbitalne jak na Rys. 6(a), oraz wyprowadzenie jego efektywnej postaci poprzez rachunek zaburzeń w podobnym duchu jak w pracach [1-2]. W efekcie tego podejścia otrzymujemy stan podstawowy, w którym występuje zdimeryzowany porządek magnetyczny – korelacje $\langle \vec{S}_i \vec{S}_{i+1} \rangle$ między sąsiednimi spinami alternują między wysoką a niską wartością. Jest to jeden z zasadniczych wyników pracy [4], który jest nietrywialny, ponieważ w wyjściowym hamiltonianie wszystkie wiązania mają taką samą siłę. Nietypowy porządek magnetyczny wynika tu wprost z fluktuacji orbitalnych, podobnie jak w przypadku modelu Kugela-Khomskii'ego [1-2]. Fluktuacje te prowadzą do efektu znanego w kontekście oddziaływania elektron-fonon jako dimeryzacja Peierlsa [4], tu jednak dzieje się to w zerowej temperaturze.

Mechanizm dimeryzacji w modelu $SU(2) \otimes XY$ z wyrazem Heisenberga ma związek ze specyficznym działaniem transformacji $\mathcal{U}$ na spinowe stopnie swobody. Pod jej działaniem spiny stają się niejako przyczepione do orbitali, więc delokalizacja orbitali pociąga za sobą także delokalizację spinów. Spiny nie są już przynależne do węzłów sieci, ale do położenia pierwszego, drugiego, trzeciego, itd. orbitalu 'w dół'. W ten sposób otrzymujemy efektywny hamiltonian spinowy postaci $\mathcal{H}_{\text{eff}} = \sum_{i,j} J_{ij} \vec{S}_i \vec{S}_j$, gdzie na skutek delokalizacji orbitali sprzężenia J_{ij} nie dotyczą tylko najbliższych sąsiadów, lecz są one rozmyte tak, jak pokazano na Rys. 6(c) i 6(d). Mamy więc na Rys. 6(c) podukład spinów $\{\vec{S}_1, \vec{S}_2, \dots, \vec{S}_N\}$ przyczepiony do orbitali 'w górę' (gdzie $N = L/2$) oraz podukład spinów $\{\vec{S}_{N+1}, \vec{S}_{N+2}, \dots, \vec{S}_{2N}\}$ przyczepiony do orbitali 'w dół' przedstawione jak dwie nogi drabiny. Dominujące sprzężenia J_{ij} to te na szczeblach drabiny – gdyby stan orbitalny był klasycznym stanem Néela, to byłyby to jedyne skończone J_{ij} . Na skutek fluktuacji orbitali pojawiają się też sprzężenia dla dalszych sąsiadów na różnych nogach drabiny oraz sprzężenia wzdłuż nóg dla najbliższych sąsiadów, których nie pokazano na Rys. 6(c) – wszystkich wartości J_{ij} dla układu wielkości $L = 16$ przedstawiono na Rys. 6(d) (obecność skończonych $J_{1,N}$ wynika tu z okresowych warunków brzegowych). Dominujące sprzężenia są na antydiagonali macierzy $\mathbf{J}$ i dla stanu podstawowego spinów niezłym przybliżeniem jest uwzględnienie tylko tych wyrazów w hamiltonianie efektywnym $\mathcal{H}_{\text{eff}}$. Uporządkowanie spinów jakie wtedy dostajemy w bazie fizycznej, po wykonaniu odwrotnej transformacji $\mathcal{U}$, to stan zdimeryzowany, gdzie na każdym nieparzystym wiązaniu mamy $\langle \vec{S}_i \vec{S}_{i+1} \rangle < 0$, natomiast na wiązaniach parzystych $\langle \vec{S}_i \vec{S}_{i+1} \rangle = 0$.

Rozważania perturbacyjne mają ograniczone zastosowanie w granicy termodynamicznej $L \rightarrow \infty$, ponieważ przerwa energetyczna w układzie (otwartym) zanika jak L^{-1} . Do opisu dużych układów potrzebne więc były obliczenia numeryczne wychodzące poza ograniczenia rachunku zaburzeń. Najbardziej odpowiednią metodą dla układów jednowymiarowych jest metoda renormalizacji macierzy gęstości (DMRG) [51], pozwalająca w tym przypadku na obliczenia dla maksymalnej wielkości układu $L = 600$. Obliczenia te wykazały, że nieco wbrew intuicji perturbacyjnej istnieje ciągle kwantowe przejście fazowe między układem z zerowym a dodatnim (antyferromagnetycznym) sprzężeniem Heisenberga między spinami. Co ciekawe, dla zamkniętego łańcucha realizowany jest stan rezonujący, będący superpozycją dwóch ekwiwalentnych stanów zdimeryzowanych, który nie łamie symetrii translacyjnej układu i który podlega spontanicznemu łamaniu symetrii w granicy $L \rightarrow \infty$. Z kolei efektem perturbacyjnym, lecz wyższego rzędu niż $\mathcal{H}_{\text{eff}}$, jest dimeryzacja stanu orbitalnego, będąca konsekwencją dimeryzacji spinów, obserwowana w obliczeniach DMRG [4]. Wszystkie te egzotyczne efekty kwantowe obserwuje się jedynie dla antyferromagnetycznego sprzężenia Heisenberga, podczas gdy dla sprzężenia ferromagnetycznego stan podstawowy spinów jest trywialny (klasyczny). Dla efektu dimeryzacji potrzebne więc jest splątanie spinowych i orbitalnych stopni swobody.

Niejednorodne modele spinowo-orbitalne; rozrzedzenie orbitalne i ładunkowe

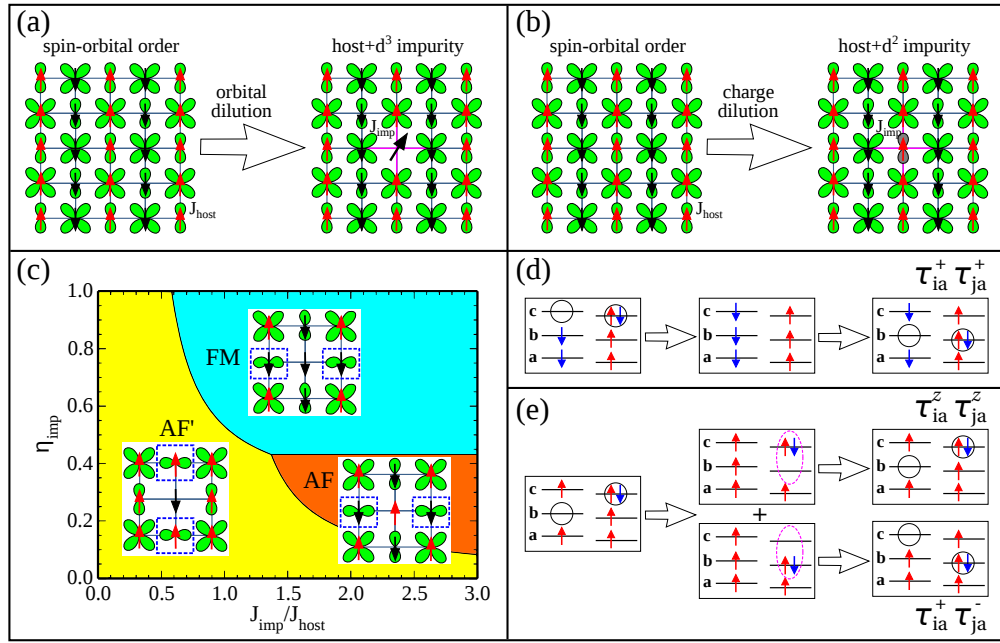
Do tej pory rozważane modele spinowo-orbitalne dotyczyły układów jednorodnych i bez sprzężenia spin-orbita. Mimo tej pozornej prostoty udało się otrzymać interesujące uporządkowania spinowe i orbitalne, łączenie z porządkiem topologicznym w jednym wymiarze. Interesującą perspektywą wydają się więc układy hybrydowe, takie jak warstwowe tlenku rutenu $4d^4$ domieszkowane manganem w konfiguracji $3d^3$. Domieszkowanie takie, jak stwierdzono we wprowadzeniu, stanowi rozrzedzenie orbitalnych stopni swobody, pokazane na Rys. 3(b) i 7(a).

W granicy silnych korelacji efektywny model spinowo-orbitalny typu (3) dla wiązań łączących jony d^4 , a więc hamiltonian matrycy, jest znany. Zawiera on oddziałujące spiny $S = 1$ i pseudospiny orbitalne $T = 1$, opisujące dublon w jednym z trzech orbitali t_{2g} , jak na Rys. 3(c). Z kolei dla wiązań hybrydowych, pomiędzy jonami matrycy d^4 a domieszkami d^3 , hamiltonian nadwymiany opisujący oddziaływania między parą spin-pseudospin $S = T = 1$ a pojedynczym spinem $S = 3/2$ nie był wcześniej znany. Wyprowadzenie go jest jednym z głównych wyników pracy [5], której tematem jest zmiana porządku spinów i orbitali na skutek domieszkowania w matrycy o dość typowym porządku spinowo-orbitalnym znanym jako C-AF, pokazanym na Rys. 7(a). Rozważania te dotyczyły zarówno pojedynczej domieszki jak i skończonego domieszkowania z periodycznym rozmieszczeniem domieszek. Dla przypadków tych wyznaczono diagramy fazowe zawierające różne uporządkowanie spinowo-orbitalne wokół domieszek w funkcji parametrów mikroskopowych modelu, takie jak na Rys. 7(c). Z kolei praca [6] jest rozszerzeniem tych rozważań na inne konfiguracje i koncentracje domieszek, których nie uwzględniono wcześniej. Podsumowując, prace [5-6] pokazują jak poprzez czysto magnetyczną domieszkę można wpływać zarówno na porządek magnetyczny jak i orbitalny, co stanowi inspirację dla grup doświadczalnych.

Wiązania hybrydowe wokół domieszek w sposób istotny różnią się od wiązań w matrycy. W przypadku wiązań w matrycy procesy wirtualne prowadzące do oddziaływań spinowo-orbitalnych angażują wzbudzenia ładunkowe związane z oddziaływaniem U , tzn. najniższe stany wzbudzone $d^3 - d^5$ pary jonów $d^4 - d^4$ mają przerwę energetyczną rzędu U . W przypadku wiązań hybrydowych par jonów $3d^3 - 4d^4$ przerwa do najbliższych stanów wzbudzonych nie jest dana przez U , ale przez energię jonizacji I_e będącą gołą różnicą energii między poziomami d manganu i rutenu, wynikającą choćby z różnych głównych liczb kwantowych. Jak pokazano w pracy [5], ta goła różnica energii w stanach wzbudzonych $3d^4 - 4d^3$ jest dodatkowo ubrana przez różnice w oddziaływaniu Hubbarda i Hunda pomiędzy jonami $3d^3$ i $4d^4$. Otrzymujemy więc skalę energii wzbudzeń ładunkowych $\Delta = I_e + 3(U_1 - U_2) - 4(J_1^H - J_2^H)$, gdzie $U_{1(2)}$ i $J_{1(2)}^H$ to oddziaływanie Hubbarda i Hunda dla jonów $3d^3(4d^4)$. Stała nadwymiany J dla wiązań matrycy jest więc dana tak jak zwykle przez $J_{\text{host}} \propto t_{\text{host}}^2/U_2$, gdzie t_{host} jest amplitudą przeskoku pomiędzy jonami $4d^4$ (w rzeczywistości jest to iloczyn dwóch amplitud przeskoku, z rutenu na tlen i z tlenu na ruten). Z kolei dla wiązań hybrydowych stała nadwymiany to $J_{\text{imp}} \propto t_{\text{imp}}^2/\Delta$, gdzie t_{imp} jest amplitudą przeskoku pomiędzy jonami $4d^4$ a $3d^3$. Dla wiązań matrycy dodatkowym parametrem decydującym o tendencji do ferro/antyferromagnetyzmu jest, tak jak w przypadku modelu Kugela-Khomskii'ego dla jonów d^9 [1-2], parametr $\eta_{\text{host}} = J_2^H/U_2$. Dla wiązań hybrydowych analogicznym parametrem jest $\eta_{\text{imp}} = J_1^H/\Delta$.

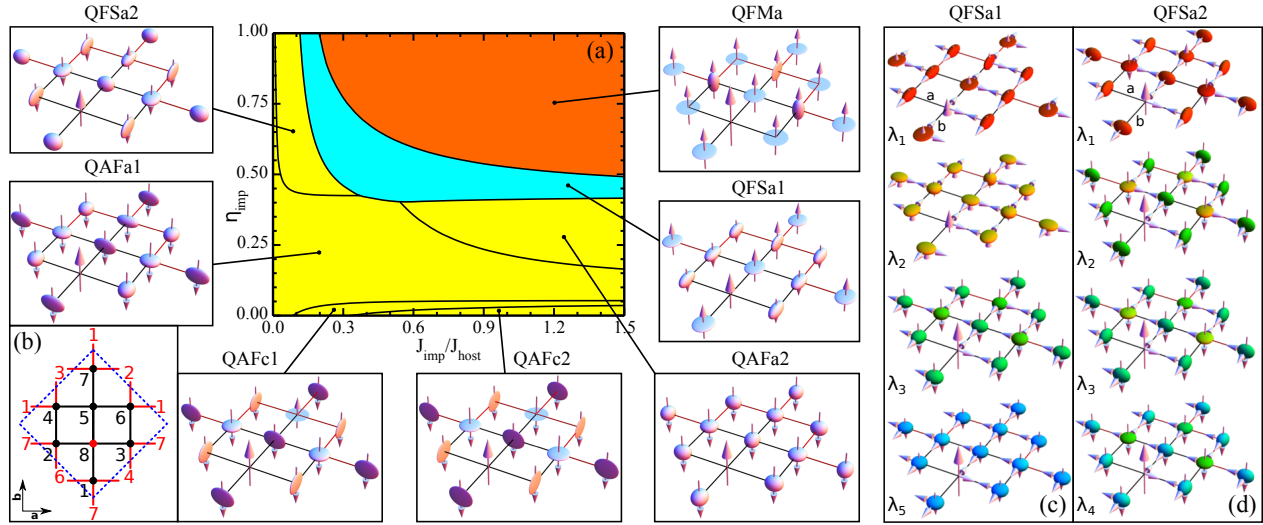
Rysunek 7(c) przedstawia diagram, otrzymany z pominięciem fluktuacji kwantowych, w funkcji $J_{\text{imp}}/J_{\text{host}}$ oraz η_{imp} (przy ustalonym $\eta_{\text{host}} = 0.1$). Pojedyncza domieszka umieszczona na węźle sieci, w którym wcześniej był dublon matrycy w orbitalu c , sprzęga się swoim spinem albo ferro albo antyferromagnetycznie do otaczających ją spinów matrycy (fazy FM lub AF, AF') i jednocześnie albo polaryzuje orbitale matrycy 'do siebie' (fazy FM i AF), albo jest przez nie ignorowana (faza AF'). Polaryzacja orbitali matrycy możliwa jest wtedy, gdy J_{imp} jest odpowiednio duże w porównaniu do J_{host} , przy czym zależy to też od η_{imp} . Wynika to z tego, że orbitale matrycy celujące w stronę domieszki efektywnie zwiększają wymianę kinetyczną między jonami $4d^4$ a $3d^3$. W pracy [5] pokazano, że przypadku skończonego domieszkowania generycznie pojawia się także faza pośrednia pomiędzy fazami FM i AF, gdzie spin domieszki jest sfrustrowany, tzn. połowa wiązań hybrydowych jest ferro a połowa antyferromagnetyczna. Fazę taką oznaczamy jako FS (frustrated spin).

Innym typem domieszkowania układu $4d^4$ z porządkiem C-AF jest domieszkowanie jonami $4d^2$, jak na Rys. 7(b). W tym przypadku zarówno matryca jak i domieszka są opisywane lokalnymi spinami $S = 1$ i orbitalnymi pseudospinami $T = 1$, jednak ładunek związany z orbitalnym stopniem swobody jest inny. W



Rysunek 7: Górna część rysunku pokazuje domieszkowanie izolatora Motta z jonami metalu przejściowego w konfiguracji $4d^4$ ze spinowo-orbitalnym porządkiem C-AF z alternującymi orbitalami a i c (zielone kształty). (a) Rozrzedzenie orbitalne poprzez domieszkę d^3 (tylko spin $S = 3/2$, duża strzałka) i (b) rozrzedzenie ładunkowe poprzez domieszkę d^2 (taki sam spin $S = 1$ jak matryca i moment orbitalny $L = 1$ realizowany przez holon w orbitalu zaznaczonym na szaro). Wiązania J_{imp} domieszki z matrycą (wiązania hybrydowe) zaznaczone na czerwono a wiązania J_{host} wewnątrz matrycy na czarno. W części dolnej po lewej, (c) klasyczny diagram fazowy dla pojedynczej domieszki d^3 na węźle matrycy gdzie dublon był w orbitalu c ; ramka oznacza zmianę stanu orbitalnego lub spinowego wokół domieszki. W części dolnej po prawej pokazano fluktuacje orbitalne na wiązaniu hybrydowym $d^2 - d^4$ z korelacjami spinowymi; (d) antyferromagnetycznymi i (e) ferromagnetycznymi. Elipsa w stanie pośrednim oznacza delokalizację dublonu na skutek oddziaływania Hunda.

przypadku jonów matrycy mamy dublony, czyli podwójne obsadzenia, w orbitalach a , b lub c , a w przypadku domieszki są to holony, czyli brak elektronu. Mówimy więc w tym przypadku nie o rozrzedzeniu orbitalnym ale ładunkowym. Wiązania hybrydowe między jonami matrycy a domieszki w granicy nadwymiany wymagają wyprowadzenia, podobnie jak w przypadku domieszkowania $3d^3$, co jest jednym z wyników pracy [7]. Najbardziej interesującym efektem rozrzedzenia ładunkowego jest pojawienie się w hamiltonianie spinowo-orbitalnym wokół domieszki wyrazów typu parowania orbitalnego $\tau_{i\gamma}^+ \tau_{j\gamma}^+$, które są nieobecne w układzie nedomieszkowanym oraz które nie pojawiają się w przypadku domieszkowania $3d^3$. Przez operatory $\tau_{i\gamma}$ należy rozumieć trzy macierze Pauliego na węźle i , które dla wiązania w kierunku $\gamma = a$ działają w przestrzeni stanów orbitalnych $|b\rangle$ i $|c\rangle$, tak jakby to były stany spinu $S = 1/2$, i analogicznie dla innych kierunków γ . Konsekwencją obecności wyrazów parowania jest to, że 'magnetyzacja orbitalna', czyli całkowita ilość dublonów/holonów w orbitalach a , b i c w układzie nie jest dobrą liczbą kwantową, podobnie jak w hamiltonianie nadprzewodnika całkowita liczba elektronów nie jest dobrą liczbą kwantową. Fluktuacje kwantowe w sektorze orbitalnym są więc lokalnie zwiększone na skutek domieszkowania, co w zależności od wyjściowego uporządkowania matrycy może mieć lub nie mieć wpływu na globalny porządek orbitalny, jak pokazano w pracy [7]. Innym skutkiem parowania orbitalnego $\tau_{i\gamma}^+ \tau_{j\gamma}^+$ jest to, że przypadku jednowymiarowym dla sektora orbitalnego otrzymujemy model tożsamy z nadprzewodnikiem typu p lub modelem Kitaeva



Rysunek 8: Rozrzedzenie orbitalne w granicy kwantowej. (a) Diagram fazowy w funkcji $J_{\text{imp}}/J_{\text{host}}$ i η_{imp} otrzymany dla klastra 8 węzłów (b) z periodycznymi warunkami brzegowymi, bez sprzężenia spin-orbita. Strzałki symbolizują wartość lokalnej magnetyzacji $\langle S_i^z \rangle$, elipsoidy wartość lokalnej polaryzacji orbitalnej – płaski dysk leżący w płaszczyźnie oznacza dublon w orbitalu c , dysk o osi obrotu w kierunkach $\hat{a}$, $\hat{b}$ oznacza dublon w orbitalach a , b , z kolei elipsoid sferyczny oznacza, że wszystkie trzy orbitale są jednakowo zajęte, czyli brak polaryzacji. Po prawej (c)-(d) ewolucja stanów QFSa1 i QFSa2 w funkcji rosnącego sprzężenia spin-orbita λ_p na atomach matrycy. Strzałki pionowe to $\langle S_i^z \rangle$, strzałki w płaszczyźnie symbolizują znak korelacji spinowych $\langle S_i^x S_j^x \rangle$ (strzałki w kierunku a) i $\langle S_i^y S_j^y \rangle$ (strzałki w kierunku b), kolor elipsoidów oznacza wartość lokalnego sprzężenia spin-orbita $\langle \vec{L}_i \vec{S}_i \rangle$.

[52]. Taki model znany jest ze swojego topologicznie nietrywialnego stanu podstawowego, co sugeruje, że stan orbitalny w jednowymiarowym modelu $d^4 - d^2$ też może być topologiczny – możliwość ta jest tematem pracy [11], która będzie omawiana później. Jest to dość nieoczekiwany i interesujący aspekt rozrzedzenia ładunkowego.

Przykładowy wirtualny proces prowadzący do wyrazów parowania pokazany jest na Rys. 7(d); zakładamy wiązanie w kierunku a , więc dozwolone są tylko przeskoki z orbitali b na b i z c na c . W konfiguracji początkowej całkowite spiny na jonach d^2 i d^4 są zwrócone do siebie przeciwnie a dublon i holon są w orbitalach c . Jest to więc konfiguracja wiązania antyferromagnetyczna i ferro-orbitalna. W wirtualnym stanie wzbudzonym jeden z elektronów tworzących dublon rekombinuje z holonem i w efekcie nie ma ani dublonu ani holonu. Wracając do stanu podstawowego można albo odwrócić poprzedni proces albo przesunąć elektron z orbitalu b domieszki z powrotem na orbital b matrycy. W tym drugim przypadku wracamy do stanu podstawowego w którym holon i dublon zostały jednocześnie przesunięte z orbitali c na orbitale a . W języku pseudospinów orbitalnych τ_{ia}^+ oznacza to, że na początkowy stan podstawowy zadziałał operator parowania orbitalnego $\tau_{ia}^+ \tau_{ja}^+$. Oczywiście, w przypadku wiązania hybrydowego możliwe są też inne procesy wirtualne, pokazane na Rys. 7(e), w wyniku których otrzymujemy wyrazy przeskoku orbitalnego $\tau_{ia}^+ \tau_{ja}^-$ oraz wyrazy diagonalne $\tau_{ia}^z \tau_{ja}^z$, oba obecne także na wiązaniach matrycy.

Rozrzedzenie orbitalne w granicy kwantowej

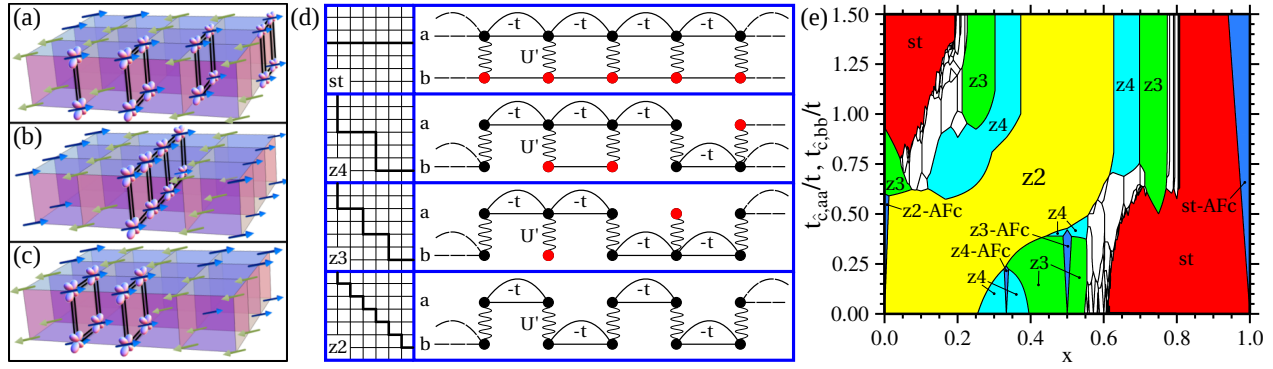
Rozrzedzenie orbitalne ma jeszcze ciekawszy charakter kiedy rozważamy je w obecności fluktuacji kwantowych. Najbardziej zaawansowanym wynikiem pracy [5] jest zatem pełny, kwantowy diagram fazowy dla domieszkowania $x = 1/8$ otrzymany poprzez diagonalizację klastra o 8 węzłach z jedną domieszką i pe-

riodycznymi warunkami brzegowymi, Rys. 8(a-b) oraz ewolucja poszczególnych faz w obecności sprzężenia spin-orbita na atomach $4d^4$ matrycy, Rys. 8(c). W przypadku diagramu 8(a) sprzężenie to jest nieobecne, więc całkowita magnetyzacja $M = \sum_i \langle S_i^z \rangle$ jest dobrą liczbą kwantową. Inną dobrą liczbą kwantową jest całkowita liczba dublonów $N_{a,b,c}$ w orbitalach a , b i c matrycy. Poszczególne fazy na diagramie 8(a) mają więc dobrze określone M oraz $\{N_a, N_b, N_c\}$, a granice faz są wyznaczone przez przecięcia najniższych poziomów energetycznych. Na Rys. 8(a) zaznaczone reprezentatywne dla danej fazy konfiguracje spinowo-orbitalne; strzałki symbolizują lokalną magnetyzację $\langle S_i^z \rangle$, a elipsoidy średnią lokalną gęstość dublonów w orbitalach a , b i c , więc strzałka bez elipsoidu oznacza domieszkę. Długościom półosi elipsoidów w kierunkach a , b i c odpowiada obsadzenie orbitali a , b i c w taki sposób, że jeśli półoś w danym kierunku γ ma zerową długość, to znaczy, że zajęty jest orbital γ . Na przykład, jeśli elipsoida wygląda jak płaski dysk w płaszczyźnie klastra, to oznacza to dublon niemal wyłącznie w orbitalu c , natomiast elipsoida niemal sferyczna oznacza, że dublon nie preferuje żadnego orbitalu. Istnieje pewne podobieństwo otrzymanych konfiguracji do faz z diagramu klasycznego 7(c), np. ułożenie orbitali wokół domieszki w fazach QAFc1 i QAFc2 przypomina to, które było w fazie AF'. Ogólnym wnioskiem, jaki możemy wysnuć z diagramu 8(a) jest to, że jest on jakościowo podobny do diagramów otrzymanych w granicy klasycznych dla niewielkiej koncentracji domieszek [5], a fluktuacje kwantowe są najistotniejsze w fazach FS, gdzie usuwają frustrację i są odpowiedzialne za polaryzację spinu domieszki.

W pracy [5] zaprezentowano także ewolucję reprezentatywnych konfiguracji z diagramu 8(a) dla rosnących wartości sprzężenia spin-orbita λ na atomach matrycy. Ewolucję taką dla dwóch faz FS pokazano na Rys. 8(c-d). Kolor elipsoidów oznacza lokalną wartość wyrazów spin-orbita $\langle \vec{L}_i \vec{S}_i \rangle$, przy czym przesunięcie od czerwieni do fioletu oznacza wzrost tej wielkości. Dla obu faz wybrano takie wartości $\lambda = \lambda_p$ rosnące wraz z p , przy których następuje istotna zmiana konfiguracji spinowej lub orbitalnej. Ze względu na sprzężenie spin-orbita liczby kwantowe M i $N_{a,b,c}$ nie są zachowane więc rozróżnienie faz z diagramu 8(a) staje się umowne. Uniwersalną granicą dużego λ są singlety spinowo-orbitalne na każdym atomie matrycy i resztkowy moment magnetyczny domieszki. Interesującym faktem jest to, że lokalne $\langle \vec{L}_i \vec{S}_i \rangle$ dla umiarkowanego λ ma nietrywialną zależność przestrzenną, np. w fazie QFSa2 węzły 4 i 6 mają wyraźnie niższe wartości $\langle \vec{L}_i \vec{S}_i \rangle$ niż pozostałe węzły. Innym ciekawym efektem, który widać np. dla fazy QFSa2 przy $\lambda = \lambda_2$, jest to, że dla niektórych wiązań korelacje spinowe w osi z (pionowe strzałki) mają inny znak niż w osiach x i y (strzałki w płaszczyźnie klastra). Oznacza to, że w analogicznym układzie ale ze przy spontanicznie złamanej symetrii porządek spinowy będzie niekolearny, podobnie jak to miało miejsce w modelu Kugela-Khomskii'ego dla metali d^9 [1-2]. Tutaj jednak mechanizm jest bardziej konwencjonalny – symetria $SU(2)$ spinów jest złamana explicite przez wyrazy sprzężenia spin-orbita w hamiltonianie.

Magnetyczne fazy zygzakowe w modelu podwójnej wymiany

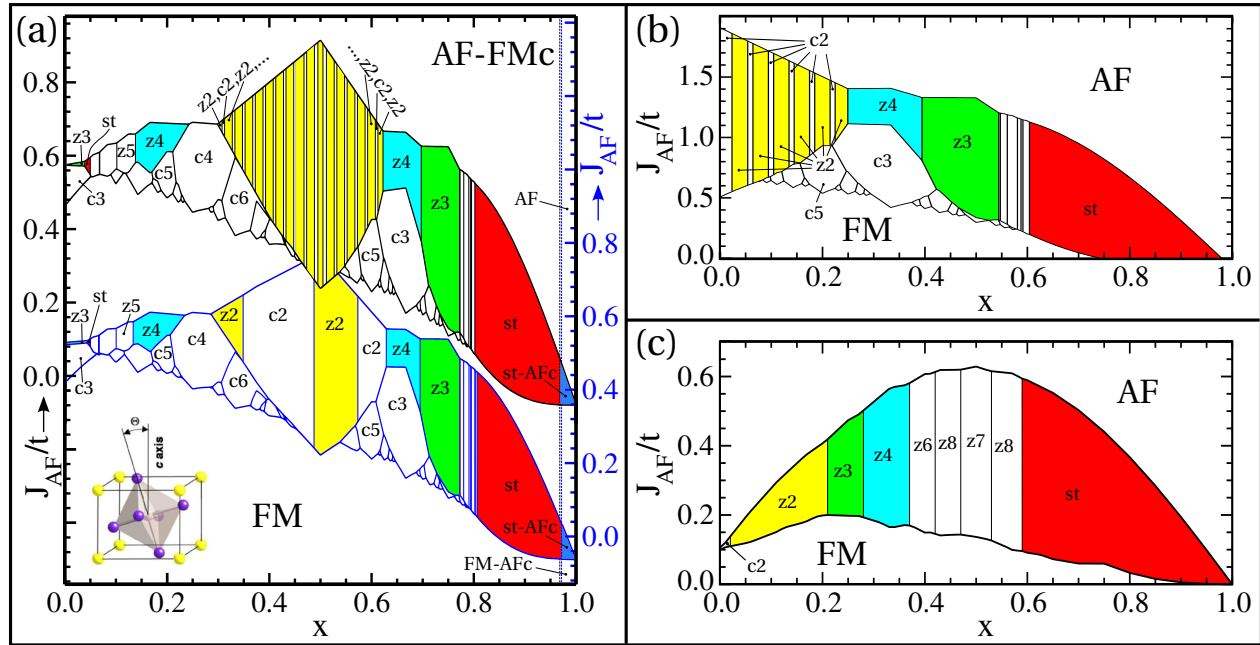
Problem możliwych uporządkowań spinowo-orbitalnych w hybrydowych tlenkach metali przejściowych jest nietrywialny nie tylko w granicy izolatora skorelowanego, gdzie efektywnie nie ma już ładunkowych stopni swobody, ale też w kontekście tzw. mechanizmu podwójnej wymiany [53-54]. Hamiltonian podwójnej wymiany otrzymujemy zakładając, że część ładunków ulega lokalizacji dając porządek magnetyczny i poprzez oddziaływanie Hunda wpływa na energię elektronów niezlokalizowanych, opisywanych przez hamiltonian kinetyczny H_t (2). Model tego typu badano w publikacji [8] w kontekście dwuwarstwowych tlenków rutenu $4d^4$ domieszkowanych manganem $3d^3$. Jest to więc przypadek, który w granicy izolatora nazywaliśmy rozrzedzeniem orbitalnym. Celem pracy [8] jest, między innymi, wyjaśnienie obserwowanej eksperymentalnie fazy magnetycznej z porządkiem zygzakowym [39], gdzie na płaszczyźnie spiny porządkują się równolegle wzdłuż zygzaków i wzór ten powtarza się też w płaszczyźnie poniżej, jak pokazano na Rys. 9(a). Głównym wynikiem pracy [8] jest wykazanie stabilności różnych faz zygzakowych w obszarze parametrów w którym konkurują ze sobą korelacje ferro i antyferromagnetyczne. Co więcej, fazy zygzakowe pozostają stabilne także w obecności dystorsji oktaedrycznych oraz oddziaływania kulombowskiego międzyorbitalnego U' . Bardzo ciekawą cechą tych faz jest to, że mechanizm ich powstawania jest czysto kinetyczny i wynika z kierunkowości orbitali t_{2g} – dzięki powstawaniu zygzakowych zgięć elektrony mogą zamknąć się w 'orbitalnych molekułach' i w ten sposób obniżyć swoją energię kinetyczną w stosunku do propagacji po liniach prostych.



Rysunek 9: (a-c) Schematyczny widok faz magnetycznych dla dwupłaszczyznowego układu d^4 z domieszkowaniem d^3 , otrzymane w ramach mechanizmu podwójnej wymiany; (a) zygzak $z2$, (b) faza paskowa st i (c) faza szachownica $c2$. Podwójną linią zaznaczono wiązania na których możliwe są przeskoki w ramach jednej domeny magnetycznej po zaznaczonych orbitalach. (d) Jednowymiarowe domeny magnetyczne w fazach zygzakowych zn i w fazie paskowej st odwzorowane na układy o geometrii drabiny; nogi drabiny odpowiadają stanom orbitalnym a i b , na czarno zaznaczono węzły sieci po których możliwe są przeskoki z amplitudą $-t$ (łuki), na czerwono węzły na które przeskok w płaszczyźnie jest niemożliwy. Linią falistą zaznaczono oddziaływanie kulombowskie międzyorbitalne U' . (e) Diagram fazowy dla faz zn i st w funkcji domieszkowania x i amplitudy przeskoku między płaszczyznami $t_{\hat{c},aa} = t_{\hat{c},bb}/t$ (w stosunku do amplitudy w płaszczyznach t) w przypadku $J_H \rightarrow \infty$, czyli kiedy nie ma przeskoku między przeciwnymi domenami magnetycznymi.

Model podwójnej wymiany rozważany w pracy [8] zawiera trzy orbitale t_{2g} na każdym węźle sieci, przy czym atomy matrycy mają po cztery elektrony, a domieszki trzy, tak jak na Rys. 3(c). Zakładamy, że orbitale xy (czyli c) są zawsze pojedynczo obsadzone i elektrony, które je zajmują, ulegają lokalizacji i uporządkowaniu magnetycznemu, natomiast elektrony na pozostałe orbitalach yz i zx (czyli b i a) mogą poruszać się swobodnie zgodnie z hamiltonianem H_t (2). O uporządkowaniu zlokalizowanych spinów $\vec{S}_i$, gdzie i numeruje węzły sieci, zakładamy, że jest kolinearne i czysto klasyczne tak, że oddziaływanie Hunda między spinami $\vec{S}_i$ a elektronami wędrownymi postać: $J_H S_i^z s_i^z$, przy czym s_i^z to operator spinu tych elektronów. Wybór osi kwantyzacji spinu jako z oczywiście nie zmniejsza ogólności modelu jeśli porządek spinów $\{\vec{S}_i\}$ jest kolinearny i spiny te nie doświadczają fluktuacji kwantowych, co jest przyjętym tu założeniem. Oddziaływanie pomiędzy spinami $\vec{S}_i$ jest w takim przypadku zredukowane do $J_{AF} S_i^z S_j^z$, gdzie $\{i, j\}$ to sąsiednie węzły sieci (i J_{AF} jest dodatnie). Operator s_i^z jest formą dwuliniową operatorów kreacji $d_{i\gamma\sigma}^\dagger$ i anihilacji $d_{i\gamma\sigma}$ dla elektronów wędrownych na orbitalach $\gamma = a, b$ o spinie $\sigma = \uparrow, \downarrow$. Ma on postać $s_i^z = \frac{1}{2} \sum_{\gamma=a,b} (d_{i\gamma\uparrow}^\dagger d_{i\gamma\uparrow} - d_{i\gamma\downarrow}^\dagger d_{i\gamma\downarrow})$. Dla elektronów $d_{i\gamma\sigma}^\dagger$ otrzymujemy więc hamiltonian kwadratowy parametryzowany przez klasyczne zmienne $S_i^z = \pm \frac{1}{2}$ zdefiniowane dla każdego węzła sieci. Naszym zadaniem jest znaleźć takie uporządkowanie spinów S_i^z , który dla zadanej wartości domieszkowania x (czyli ilości elektronów $d_{i\gamma\sigma}^\dagger$) i wartości sprzężenia J_{AF} spinów S_i^z daje minimalną energię.

Podobny problem optymalizacji został rozwiązany przez Dagotto i współautorów dla tlenków manganu w pracy [54]. Najogólniejszą metodą rozwiązania go jest klasyczna symulacja Monte-Carlo w zmiennych S_i^z . Niemniej jednak, ze względu na silną tendencję układu do separacji faz w pracy [8] wykorzystano metodę wariacyjnych funkcji falowych, tzn. badano określone, zadane z góry, uporządkowania spinów S_i^z i sprawdzano, która ma najniższą energię dla zadanej wartości x i J_{AF} . Uporządkowania te to proste fazy FM i AF oraz fazy pośrednie mające postać albo antyferromagnetycznych zygzaków o długości segmentu n , oznaczone jako zn , albo prostych pasów st , albo faz typu szachownica cn , z kwadratowymi domenami magnetycznymi wielkości $n \times n$. Fazy $z2$, st i $c2$ pokazane są na Rys. 9(a-c). Nie jest trudno przewidzieć, że faza FM będzie stabilna w granicy $J_{AF} \rightarrow 0$, kiedy dominuje energia kinetyczna elektronów, natomiast



Rysunek 10: Diagramy fazowe modelu podwójnej wymiany w funkcji domieszkowania x oraz wymiany magnetycznej J_{AF} dla skończonej wartości $J_H = 100t$. (a) Diagramy dla $t_{\hat{c},aa(bb)} = 0.8t$ dla układu bez dystorsji (górze i skala J_{AF}/t po lewej) oraz z dystorsją przechylenia oktaedrów (pokazane we wstawce) o niewielki kąt $\theta = 10^\circ$ (dół i skala J_{AF}/t po prawej). (b) Diagram fazowy bez dystorsji dla pojedynczej płaszczyzny, czyli $t_{\hat{c}} = 0$ oraz (c) – analogiczny diagram z oddziaływaniem kulombowskim międzyorbitalnym $U' = 10t$. Fazy bez opisu to zygzaki zn lub szachownice cn o wysokich wartościach n .

faza AF dla $J_{AF} \rightarrow \infty$, gdy ważniejsza jest wymiana magnetyczna zlokalizowanych spinów. Nietrywialnym pytaniem jest jaka faza realizuje się pomiędzy tymi dwoma skrajnymi przypadkami.

Istotnym czynnikiem wpływającym na stabilność faz o charakterze jednowymiarowych jest kierunkowość orbitali; przeskok elektronu w kierunku $\hat{a}(\hat{b})$ możliwy jest tylko po orbitalach $b(a)$. Dla dużej wartości J_H względem t (a taka sytuacja nas interesuje) elektrony o zadanym spinie s_i^z znajdują się prawie wyłącznie w domenach o tym samym spinie S_i^z ponieważ przeskok do przeciwnej domeny kosztuje energię J_H . W granicy $J_H \rightarrow \infty$ możemy więc fazy typu zygzak traktować jako zbiór niezależnych podukładów ściśle jednowymiarowych i pojedynczy zygzak lub pasek odwzorować na drabinę, jak na Rys. 9(d). Nogi drabiny odpowiadają orbitalom a i b w ten sposób, że każdy szczebel to pojedynczy węzeł sieci dwuwymiarowej. Dla fazy st z pasami w kierunku $\hat{b}$ przeskoki na drabinie możliwe są tylko wzdłuż nogi a . Zginając pasy w zygzaki zmieniamy orbitale po których można przeskakiwać, tak jak pokazano na Rys. 9(d). W przypadku najkrótszego zygzaka $z2$, dla każdej domeny magnetycznej otrzymujemy efektywnie zbiór niezależnych molekuł dwuatomowych, utworzonych na sąsiednich węzłach sieci z dobrze określoną polaryzacją orbitalną – jest więc to faza z porządkiem orbitalnym. Praca [8] zawiera diagram fazowy dla takich faz jednowymiarowych, w którym parametrami jest domieszkowanie x i wartość amplitudy przeskoku $t_{\hat{c}}$ między dwiema płaszczyznami układu – Rys. 9(e). Diagram ten pokazuje, że faza $z2$ jest stabilna w dość szerokim przedziale domieszkowania wokół $x = 0.5$ w przypadku gdy amplituda $t_{\hat{c}}$ jest równa amplitudzie przeskoku w płaszczyznach t . Przedział ten przesuwają się w kierunku $x = 0$, jeśli zmniejszamy wartość $t_{\hat{c}}$ i dla $t_{\hat{c}} = 0$, czyli niezależnych płaszczyzn, faza $z2$ zaczyna się od zerowego domieszkowania, czyli wysokiej gęstości elektronowej. Ma to związek z konkurencją między molekułami orbitalnymi tworzącymi się w płaszczyźnie, a w kierunku $\hat{c}$. Konsekwencją istnienia drugiej płaszczyzny jest też obecność faz z porządkiem antyferromagnetycznych w kierunku $\hat{c}$, takich jak np.

st-AFc, które jednak występują w wąskich przedziałach domieszkowania.

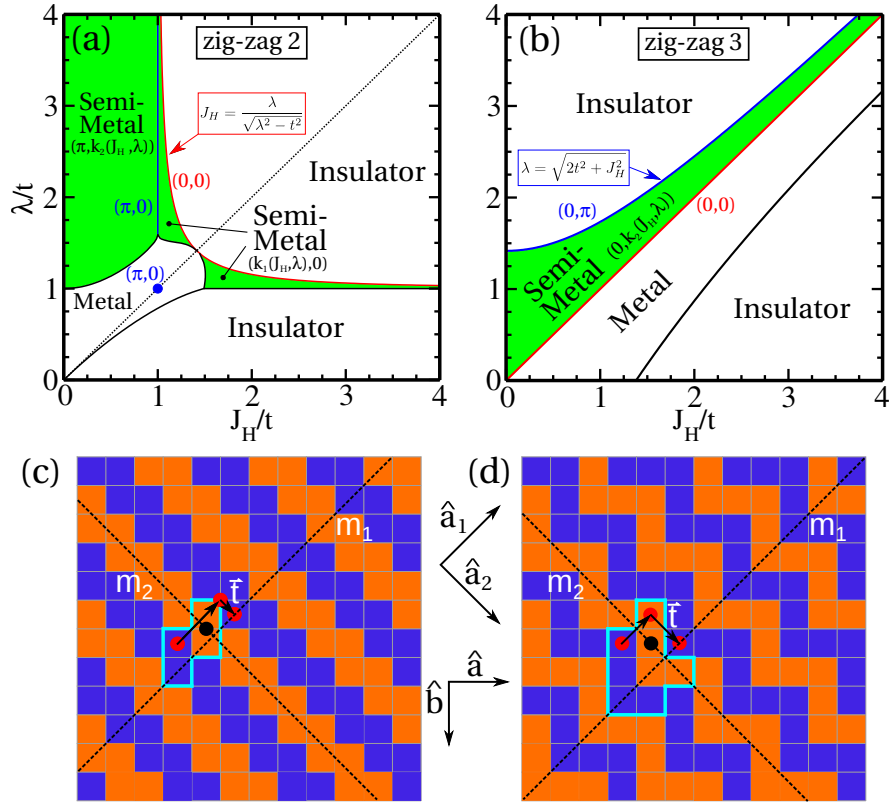
Powyższe rozważania dotyczą tylko faz jednowymiarowych, czyli zygzaków i pasów. Generyczny przypadek dwuwymiarowy jest jednak bogatszy, ponieważ zawiera przeskok między domenami magnetycznymi, zawsze obecne dla skończonego J_H , oraz fazy o charakterze dwuwymiarowym, czyli AF, FM i *cn*. Dodatkowo, możliwy jest opis układu z dystorsjami oktaedrycznymi, które umożliwiają hybrydyzację orbitali na wiązańach sieci. W pracy [8] rozważano kooperatywny obrót oktaedrów tlenowych w płaszczyźnie lub przechylenie oktaedrów względem osi prostopadłej do płaszczyzny, przy czym ten pierwszy przypadek okazuje się być trywialny – układ z dystorsją rotacyjną jest w tym przypadku tożsamy z układem bez żadnej dystorsji. Dystorsja przechylenia jest z kolei nietrywialna i ma wpływ na diagramy fazowe układu, co obrazuje Rys. 10(a), gdzie pokazano diagramy dla kąta przechylenia $\theta = 0$ oraz $\theta = 10^\circ$ otrzymane dla $t_{c,aa(bb)} = 0.8t$ i względnie dużego $J_H = 100t$. Na diagramach widzimy okno pomiędzy fazami FM i AF w którym realizują się fazy zygzakowe *zn* i faza pasowa *st*. Fazy te muszą jednak konkurować z fazami typu szachownica *cn*, które narastają od dołu jako przedłużenie fazy FM. Ze względu na podobne struktury pasmowe szczególnie silna jest konkurencja (praktycznie degeneracja) między fazami *z2* i *c2* w obszarze domieszkowania $x = 0.5$ z tym, że dzieje się tak jedynie dla $\theta = 0$, a efekt znika w obecności dystorsji.

W przypadku układu pojedynczej płaszczyzny, czyli $t_{c,aa(bb)} = 0$, diagram bez dystorsji pokazano na Rys. 10(b). Zgodnie z zachowaniem zaobserwowanym na diagramie jednowymiarowym 9(e), faza *z2* przesuwana się w kierunku zerowego domieszkowania, ale podobnie jak wcześniej nadal silnie konkuruje z fazą szachownicy *c2*. W tym przypadku jednak udało się znaleźć inny mechanizm zwiększający stabilność fazy zygzakowej *z2* – oddziaływanie międzyorbitalne U' (zgodnie z ogólnym hamiltonianem (1), $U' = U - \frac{5}{2}J_H$), takie jak schematycznie przedstawiono na Rys. 9(d). Diagram dla pojedynczej płaszczyzny z oddziaływaniami $U' = 10t$ pokazano na Rys. 10(c). W obecności oddziaływań między elektronami $d_{i\gamma\sigma}^\dagger$ model staje się problemem wielu ciał, a więc jest nierozwiązywalny, wyniki otrzymano zatem poprzez ścisłą diagonalizację skończonych układów i przy założeniu $J_H \rightarrow \infty$, oznaczającym, że elektrony nie opuszczają swoich domen magnetycznych. Przy takim założeniu poprawne jest uwzględnienie wyłącznie oddziaływań międzyorbitalnych, ze względu na nieobecność elektronów z przeciwnym spinem. Jak widać, fazy typu szachownica na diagramie 10(c) praktycznie nie występują, a kolejność faz zygzakowych w oknie pomiędzy obszarami FM i AF jest podobna jak w omówionym wcześniej przypadku bez oddziaływań. Pewną ciekawostką jest to, że poza dość oczywistymi porządkami magnetycznymi i orbitalnymi realizowanymi przez te konfiguracje zygzakowe, w fazie *z3* zaobserwowano także porządek ładunkowy, tzn. optymalne wypełnienie zygzaka jest alternujące, 2 elektrony w każdym parzystym segmencie i 1 w każdym nieparzystym. Oznacza to możliwość pojawienia się w fazie *z3* nieznikającej polaryzacji elektrycznej, czyli porządku ferroelektrycznego. Innym efektem, wspólnym dla wszystkich diagramów 10(a-c) jest egzotyczne przejście metal-izolator pomiędzy fazą *st*, która jest metaliczna, a fazą *z2* w której elektrony są całkowicie zlokalizowane. Obywa się ono poprzez kaskadę faz zygzakowych których długość segmentu rozbiega się gdy zbliżamy się do fazy *st*. Jest to dość nietypowe przejście, od izolatora molekularnego do jednowymiarowego metalu, poprzez rozrost molekuł, czyli segmentów zygzaka.

Podsumowując, praca [8] pokazuje w jak interesujący sposób może się zmienić porządek spinowo-orbitalno-ładunkowy matrycy d^4 w obecności domieszki d^3 w granicy częściowo zlokalizowanych elektronów, tzn. zlokalizowanych ale tylko dla jednego sektora orbitalnego. Jest ona ważna także pod tym względem, że otworzyła drogę do nietypowych faz topologicznego półmetal w obecności uporządkowania magnetycznego zygzakowego, czyli swoistego połączenia magnetyzmu z materią topologiczną w pracy [9].

Topologiczne fazy półmetal w układach z zygzakowym porządkiem magnetycznym

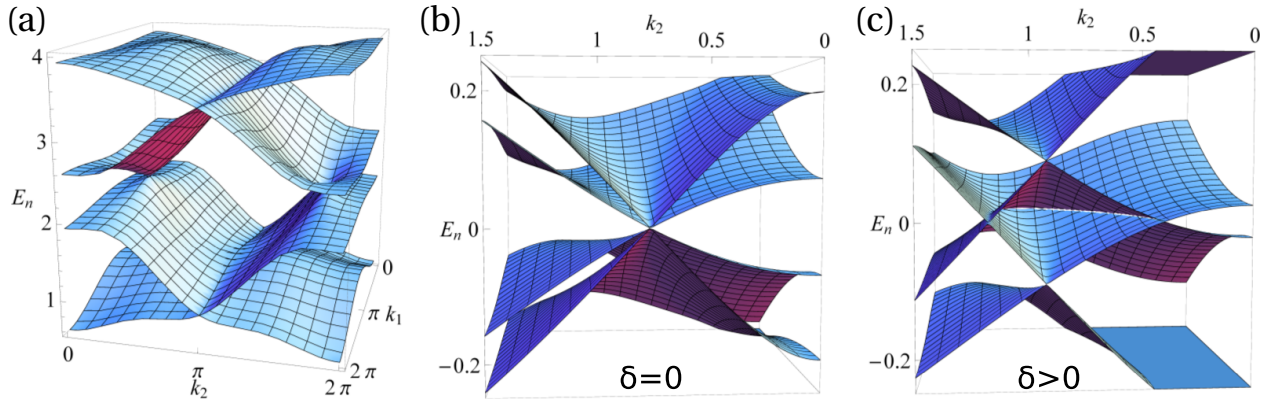
Publikacja [9] jest obszernym studium możliwych stanów topologicznych w układach z porządkiem zygzakowym *z2* i *z3*, których stabilność w domieszkowanych tlenkach d^4 udowodniono wcześniej [8]. W pracy [9] pokazano, że konfiguracje te w funkcji oddziaływania Hunda i sprzężenia spin-orbita mogą mieć fazy topologicznie chronionego półmetal z punktami Diraca. W przypadku zygzaka *z2* punkty te mają współlistniejące ładunki topologiczne różnego typu przy czym wynika to z jednoczesnej obecności wielu symetrii w układzie, w tym symetrii niesymorficznej – w tym przypadku odbicia lustrzanego z przesunięciem o połowę wektora sieci. W przypadku zygzaka *z3* symetria ta, przy udziale dodatkowego mechanizmu opisanego w pracy [8],



Rysunek 11: Elektroniczne diagramy fazowe dla układów z zygzakowymi uporządkowaniami magnetycznymi i ich schematyczny widok. (a) i (b) Diagramy dla układów z2 z wypełnieniem 3/4 i z3 z wypełnieniem 1/2, na zielono fazy topologicznego półmetal z punktami Diraca. (c) i (d) Widok uporządkowania magnetycznego z2 i z3, kolorowe obszary to domeny magnetyczne z spinami do góry (pomarańczowy) lub w dół (niebieski), małe kwadraty symbolizują węzły sieci. Przerywane linie to linie odbicia lustrzanego m_1 i m_2 , czarne kropki to centra inwersji, a wektor $\vec{t}$ to przesunięcie tworzące razem z odbiciem m_2 symetrię niesymorficzną – odbicie z przesunięciem. Działanie tej symetrii obrazują czerwone kropki. Komórki elementarne zaznaczono jasnoniebieską ramką.

proceeds to the Dirac points, i.e. the linear crossing of bands with degeneracy $d = 4$. This is a local dispersion corresponding to the dispersion of a relativistic particle with spin $S = 3/2$. In each case, the presence of topological states manifests itself through the presence of topologically protected edge states. The results are important from both a fundamental and a practical point of view, because at the time of the work [9] they were not described in the literature for many realistic systems in which they coexist with magnetic order, topologically protected phases of the metal and nonsymmorphic symmetries.

The basic results of the publication [9] are the decision, first, whether the Dirac points are topologically protected and second, which symmetries are involved in this protection and what happens if we break them. The mechanism of topological protection with the involvement of the glide symmetry is known (it appears, e.g., in graphene) and there are tables with classifications of topological invariants, which can be obtained in dependence on the Altland-Zirnbauer classification of the Hamiltonian, the dimension of the space and the commutation relations between the operator of the glide and the symmetries of time reversal and particle-hole [56]. At the time of the work [9] they were not known. Even today such classifications exist only for systems with an energy gap [57], while the work on specific systems



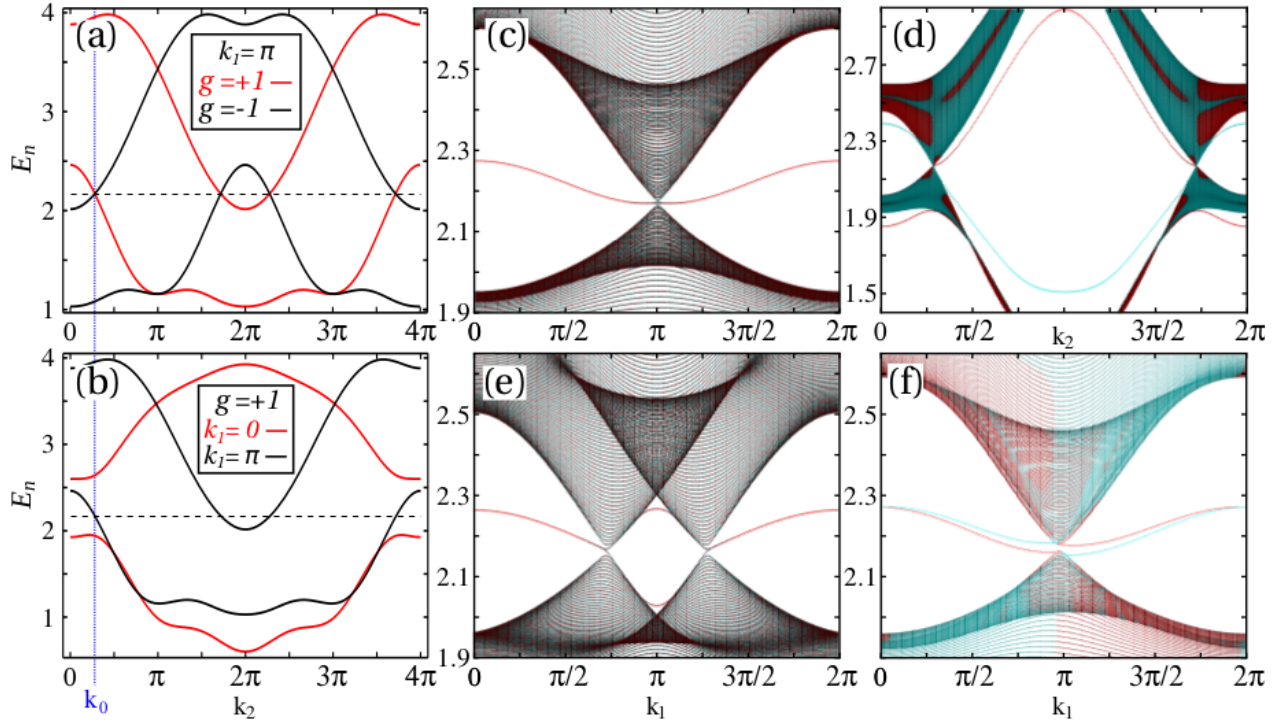
Rysunek 12: Pasma energetyczne w fazach półmetal topologicznego. (a) Układ z2 z punktami Diraca w linii odbicia z przesunięciem $k_1 = \pi$ dla wypełnienia pasm 3/4 (pokazano pasma o dodatniej energii, pasma są symetryczne względem energii zerowej). (b) Układ z3 z podwójnym punktem Diraca, także w linii odbicia z przesunięciem, $k_1 = 0$. Punkt ten ewoluuje w okrąg (c) dla skończonego δ , dodatkowego wyrazu przeskoku w hamiltonianie, który zachowuje wszystkie symetrie układu.

bez przerwy istnieją [58], ale brak jest na razie kompletnej klasyfikacji. Aspekt niesymorficzny jest więc tu szczególną wartością dodaną.

W rozważanym w pracy [9] modelu zygzakowym zakłada się, że elektrony w układzie dwuwymiarowym przeskakują poprzez orbitale xz i yz odczuwając oddziaływanie Hunda $J_H S_i^z s_i^z$ ze spinami S_i^z elektronów zlokalizowanych na orbitalach xy . Dodatkowo, podlegają one także oddziaływaniu spin-orbita w postaci anizotropowej $\lambda S_i^z l_i^z$, gdzie $l_i^z = i(d_{i,a,\sigma}^\dagger d_{i,b,\sigma} - d_{i,b,\sigma}^\dagger d_{i,a,\sigma})$, będącego projekcją pełnego oddziaływania spin-orbita na podprzestrzeń orbitali $xz(a)$ i $yz(b)$. Oba te oddziaływania zachowują spin σ elektronów wędrownych $d_{i,\gamma,\sigma}^\dagger$, który jest zatem dobrą liczbą kwantową. Efektywnie więc problem sprowadza się do hamiltonianu swobodnych i bezspinowych fermionów w którym oddziaływanie Hunda J_H wchodzi jako potencjał chemiczny modulowany przestrzennie przez S_i^z , natomiast sprzężenie spin-orbita λ to przeskoc między orbitalami a i b na tym samym węźle sieci z amplitudą modulowaną przez S_i^z .

Dla układów zygzakowych z2 i z3 wyznaczono elektroniczne diagramy fazowe w funkcji J_H i λ , pokazane na Rys. 11(a) i 11(b). Okazało się, że stany topologiczne (zielone obszary na diagramach) można zaobserwować dla układu z2 przy wypełnieniu 3/4 oraz układu z3 wypełnionego w połowie i pojawiają się one w fazie półmetal, czyli takiej w której przerwa energetyczna zamyka się w izolowanych punktach w przestrzeni pędu – punktach Diraca. Punkty te położone są w liniach wysokiej symetrii w przestrzeni odwrotnej; ich położenia zaznaczono na diagramach jako $\vec{k} = (k_1, k_2)$. W przypadku zygzaka z2 jest to albo linia $k_1 = \pi$ (główna część fazy topologicznej dla $J_H < t$) albo linia $k_2 = 0$ (mniejsze części przylegające do fazy izolatora). Z kolei dla zygzaka z3 punkty Diraca są zawsze w linii $k_1 = 0$. Wartości pozostałych składowych $\vec{k}$ są funkcją parametrów J_H i λ . Na przykład, w układzie z2, będąc w głównej fazie półmetal i zwiększając λ , przesuwamy punkty Diraca po linii $k_1 = \pi$ aż zleją się w punkcie o wysokiej symetrii $\vec{k} = (\pi, 0)$ dla $\lambda = t$ i, dalej zwiększając λ , ponownie się rozdzielą ale już w linii $k_2 = 0$. Dalsze zwiększanie λ powoduje, że punkty te znów zlewają się ze sobą w innym punkcie wysokiej symetrii, $\vec{k} = (0, 0)$, po czym pojawia się przerwa energetyczna i przejście do izolatora. Podobnie w układzie z3, będąc na przekątnej diagramu fazowego ($J_H = \lambda$) i idąc prostopadłe do niej przez fazę półmetal, zmieniamy wartość k_2 od 0 do π przy stałej wartości $k_1 = 0$. Oznacza to, że punkty Diraca przemieszczają się od punktu o wysokiej symetrii $\vec{k} = (0, 0)$ do $\vec{k} = (0, \pi)$ po linii $k_1 = 0$.

Schematyczny widok układów z2 i z3 pokazano na Rys. 11(c) i 11(d), gdzie zaznaczono także komórki elementarne, związane z nimi kierunki na sieci $\hat{a}_1$ i $\hat{a}_2$ (odpowiadają kwazipędowi k_1 i k_2) oraz symetrie przestrzenne. Symetrami tymi są; odbicie lustrzane względem linii m_1 , odbicie lustrzane z przesunięciem $\vec{t}$



Rysunek 13: Pasma energetyczne i stany brzegowe dla układu $z2$. (a) Pasma dla $k_1 = \pi$ o ustalonych wartościach własnych operatora odbicia z przesunięciem; $\mathcal{R}^t = +1$ dla czerwonych linii i $\mathcal{R}^t = -1$ dla czarnych, $k_2 = k_0$ oznacza położenie punktu Diraca. (b) Pasma energetyczne dla $\mathcal{R}^t = +1$ dla dwóch płaszczyzn odbicia z przesunięciem; $k_1 = 0$ dla czerwonych linii i $k_1 = \pi$ dla czarnych. Linia przerywana na wykresach (a-b) to energia Fermiego dla punktów Diraca. (c) i (d) Spektra energetyczne dla układów półotwartych w kierunku odpowiednio $\hat{a}_2$ i $\hat{a}_1$, gdzie każda kropka to stan o danej energii i kwazipędzie w kierunku równoległym do brzegu układu. (e) i (f) Spektra dla układów półotwartych w kierunku $\hat{a}_2$ ze złamana symetrią; (e) odbicia z przesunięciem ale zachowaną inwersją i (f) odwrócenia czasu. Intensywność koloru czerwonego/zielonego kropki oznacza lokalizację stanu na lewym/prawym brzegu układu.

oraz symetria odbicia względem punktu, czyli inwersja. Odbicie z przesunięciem jest tzw. symetrią niesymorficzną, czyli taką, która składa się z operacji grupy punktowej oraz przesunięcia o wektor, który nie jest wielokrotnością żadnego z wektorów sieciowych $\hat{a}_{1,2}$. W naszym przypadku dla obu układów $\vec{t} = \hat{a}_2/2$ i jest to kierunek równoległy do linii odbicia m_2 . Schemat działania tej operacji przedstawiono na Rys. 11(c) i 11(d) na przykładzie ewolucji jednego węzła sieci. Rysunki te nie przedstawiają orbitalnych stopni swobody – ponieważ przeskok w kierunku $\hat{a}(\hat{b})$ możliwe są tylko po orbitalach $b(a)$, a odbicia lustrzane $m_{1,2}$ zamieniają $\hat{a}$ na $\hat{b}$ i vice versa, konieczne jest zamienienie ze sobą orbitali a i b w operacji odbicia. Innym typem symetrii jest symetria podsieci lub chiralność $\mathcal{S}$ polegająca na zamianę domen magnetycznych w komórce elementarnej. Można to osiągnąć poprzez przesunięcie o wektor $\vec{s} = \hat{a}_1/2$, ponieważ jest o ułamek przesunięcia sieciowego, chiralność $\mathcal{S}$ także jest symetrią niesymorficzną.

W przestrzeni pędu hamiltoniany $\mathcal{H}_{\vec{k}}$ dla układów $z2$ i $z3$ są reprezentowane przez macierze o wymiarach odpowiednio 8×8 i 16×16 . Podobnie reprezentowane są operatory symetrii, odbicia $\mathcal{R}$ (względem m_1) i odbicia z przesunięciem (względem m_2) $\mathcal{R}^t$, przy czym ten drugi operator zawiera w sobie nieusuwalną zależność od k_2 ze względu na przesunięcie $\vec{t}$. Działanie tych operatorów na hamiltonian polega na odwracaniu znaku kwazipędu prostopadłego do linii odbicia, czyli $\mathcal{R}^\dagger \mathcal{H}_{k_1, k_2} \mathcal{R} = \mathcal{H}_{k_1, -k_2}$ oraz $\mathcal{R}^{t\dagger} \mathcal{H}_{k_1, k_2} \mathcal{R}^t = \mathcal{H}_{-k_1, k_2}$.

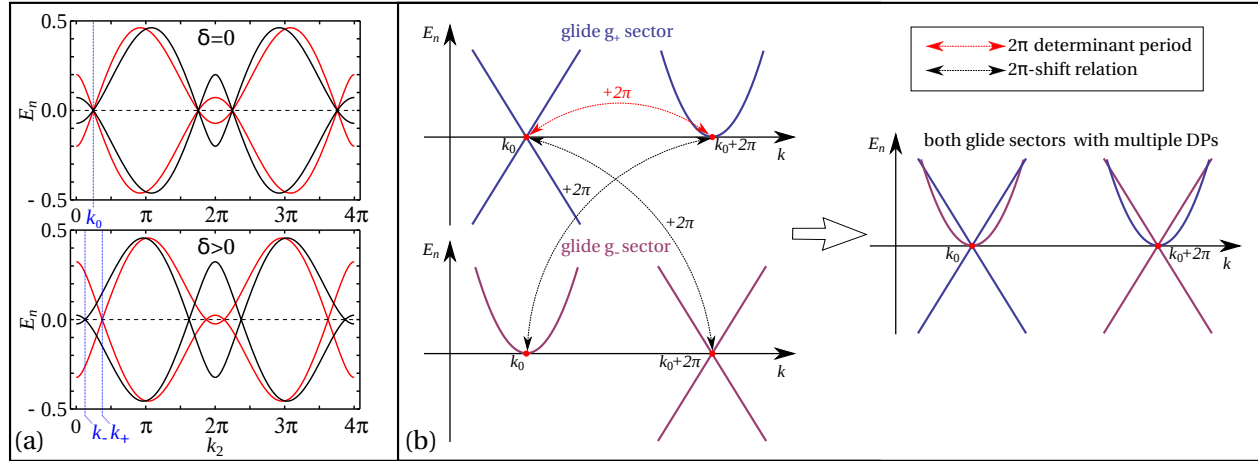
Linie wysokiej symetrii $k_{1(2)} = 0, \pi$ odpowiadają więc płaszczyznom odbicia $m_{2(1)}$ i w tych obszarach przestrzeni pędu operatory $\mathcal{R}^t(\mathcal{R})$ komutują z hamiltonianem $\mathcal{H}_{\vec{k}}$, co oznacza, że pasmom energetycznym $E_n(\vec{k})$ można przypisać liczby kwantowe odpowiadające wartościom własnym $\mathcal{R}^t(\mathcal{R})$. Z kolei symetria chiralna $\mathcal{S}$ dla układów półwypełnionych spełnia zależność $\mathcal{S}^\dagger \mathcal{H}_{\vec{k}} \mathcal{S} = -\mathcal{H}_{\vec{k}}$, czyli antykomutuje z hamiltonianem dla dowolnego $\vec{k}$, i podobnie jak $\mathcal{R}^t$ zawiera w sobie nieusuwalną zależność od k_1 ze względu na przesunięcie $\vec{s}$. Nieusuwalna zależność od kwazipędu oznacza, że nie da się zdefiniować komórki elementarnej, która by się odwzorowywała sama w siebie pod działaniem operatorów $\mathcal{R}^t$ lub $\mathcal{S}$ [9].

Wykresy pasm energetycznych z punktami Diraca dla układów z2 i z3 przedstawiają Rys. 12(a) i 12(b). Bardzo interesującą cechą układu z3 jest to, że jego punkty Diraca mają poczwórną, a nie podwójną degenerację, a pasma energetyczne wokół tych punktów mają postać czterech stożków Diraca stykających się wierzchołkami. Stożki te można rozdzielić bez złamania jakiejkolwiek symetrii układu dodając do hamiltonianu dodatkowe wyrazy przeskoiku δ [9] i otrzymuje się wtedy powierzchnię Fermiego w postaci podwójnie zdegenerowanych okręgów jak na Rys. 12(c). Z kolei dla zygzaka z2 punkty Diraca mają bardziej konwencjonalną postać i przypominają punkty Diraca zaobserwowane w grafenie [55].

W przypadku punktów Diraca leżących w linii odbicia z przesunięciem można się spodziewać, że to jest właśnie symetria, która je chroni przed hybrydyzacją i otwarciem przerwy. Na Rys. 13(a) widać, że tak istotnie jest w przypadku zygzaka z2; pokazano tam pasma energetyczne otrzymane dla $k_1 = \pi$, których kolor odpowiada dwóm wartościom własnym operatora $\mathcal{R}^t$. Warto zauważyć, że tak pokolorowane pasma mają okres nie 2π lecz 4π , co wynika z niesymorficznego charakteru symetrii $\mathcal{R}^t$ [9]. Punkty Diraca na Rys. 13(a) pojawiają się jako przecięcie pasm o różnych wartościach własnych $\mathcal{R}^t$, co świadczy o tym, że są one chronione przez tę symetrię. Jak wynika z ogólnej teorii [56], punkt Diraca ma w takim przypadku ładunek topologiczny MZ , który objawia się poprzez stany brzegowe w układzie z otwartym brzegiem. Stany takie widać jako kolorowe pasma na Rys. 13(c), gdzie układ otwarto w kierunku $\hat{a}_2$, ale zachowano symetrię translacyjną w kierunku $\hat{a}_1$. Pasma te mają podwójną degenerację wynikającą z tego, że jeden stan jest zlokalizowany na lewym a drugi na prawym brzegu układu. Łączą one ze sobą punkty Diraca (na Rys. 13(c) nakładają się one na siebie) o przeciwnych ładunkach topologicznych i w tym przypadku mają one przerwę i skończoną dyspersję. Brak płaskiego pasma, obserwowanego np. w grafenie [55], wynika z tego, że brzeg układu nie jest niezmienniczy względem symetrii $\mathcal{R}^t$ – łatwo jest się przekonać, że w dwóch wymiarach nie jest to możliwe dla żadnego brzegu.

Na Rys.13(d) pokazano spektrum dla układu z2 otwartego w kierunku $\hat{a}_1$, w więc przypadek komplementarny do 13(d). Widzimy teraz oba punkty Diraca połączone dwoma niezdegenerowanymi stanami brzegowymi bezpośrednio oraz jednym stanem brzegowym przez granicę strefy Brillouina. Ten trzeci stan brzegowy świadczy o dodatkowym ładunku topologicznym punktów Diraca. Jego istnienie można pokazać obserwując pasma energetyczne w podukładach jednowymiarowych o ustalonych k_2 , czyli prostopadłych do linii odbicia z przesunięciem, które pokazano na Rys. 13(b). Dla każdego takiego podukładu $\mathcal{R}^t$ stanowi symetrię odbicia względem środka symetrii i każdy z nich ma przerwę, za wyjątkiem tych przechodzących przez punkty Diraca dla $k_2 = \pm k_0$. Jak udowodniono w pracy [59], mogą więc one mieć nietrywialny indeks topologiczny $\mathbb{Z}^\geq$, związany z inwersją, który wyraża się jako różnica w liczbie obsadzonych stanów o zadanej wartości własnej operatora inwersji między punktami wysokiej symetrii $k_1 = 0$ i $k_1 = \pi$. Na Rys. 13(c) pokazano takie stany w funkcji k_2 , przy czym różne kolory pasm odpowiadają punktom $k_1 = 0$ i $k_1 = \pi$. Widać, że dla $k_2 < k_0$ wartość indeksu $\mathbb{Z}^\geq$ jest niezerowa ponieważ liczba linii czerwonych i czarnych pod powierzchnią Fermiego jest różna. Dla $k_2 = k_0$ następuje topologiczne przejście fazowe do fazy trywialnej gdzie indeks $\mathbb{Z}^\geq$ znika. Punkty Diraca stanowią zatem granice faz trywialnych i nietrywialnych topologicznie dla jednowymiarowych podukładów prostopadłych do linii odbicia z przesunięciem. Jest to konsystentne z pojawieniem się dodatkowego stanu brzegowego na Rys. 13(d) dla $k_2 < k_0$ i dla $k_2 > 2\pi - k_0$.

Ostatnim ładunkiem topologicznym, jaki można przypisać punktom Diraca w układzie z2 jest indeks $\mathbb{Z}_2$ związany z jednoczesną obecnością inwersji i symetrii odwrócenia czasu [60]. Jego istnienie można stwierdzić łamiąc symetrie odbicia lustrzanego $\mathcal{R}$ i odbicia z przesunięciem $\mathcal{R}^t$ ale zachowując ich iloczyn, czyli właśnie inwersję. Okazuje się, że to nie otwiera przerwy energetycznej, a jedynie przesunęło punktu Diraca poza linię $k_1 = \pi$. Spektrum układu półotwartego ze stanami brzegowymi pokazano na Rys. 13(e). Nie byłoby



Rysunek 14: (a) Pasma energetyczne w linii $k_1 = 0$ dla zygzaka z3 oraz (b) mechanizm powstawania wielokrotnie zdegenerowanych punktów Diraca (lub ogólniej Fermiego). Pasma mają ustalone wartości własne operatora odbicia z przesunięciem; $\mathcal{R}^t = +1$ (czerwone linie) i $\mathcal{R}^t = -1$ (czarne linie), pokazano przypadek zerowego i skończonego δ .

ich bez trzeciego ładunku topologicznego $\mathbb{Z}_2$ w punktach Diraca, który jest w stanie przetrwać złamanie symetrii $\mathcal{R}^t$. Innym przykładem złamanej symetrii jest złamanie symetrii odwrócenia czasu. Rys. 13(f) pokazuje spektrum układu półotwartego, w którym się to stało bez łamania pozostałych symetrii. Jak widać, otwiera się infimezymalna przerwa, która zamykają niezdegenerowane stany brzegowe łączące dolne pasma z górnymi. Spektrum przypomina klasyczny przypadek dwuwymiarowego izolatora topologicznego z niezerową liczbą Cherna lub układu z kwantowym efektem Halla.

Powyższe rozważania dotyczyły wyłącznie fazy magnetycznej z2. Stan topologicznego półmetal dla konfiguracji z3 jest odmienny ze względu na symetrię chiralną $\mathcal{S}$ obecną dla półwypełnienia, co wpływa na możliwe ładunki topologiczne powierzchni Fermiego. Okazuje się, że podwójne punkty Diraca znajdujące się w linii odbicia z przesunięciem $k_1 = 0$ można w sposób ciągły i bez łamania żadnej symetrii układu przekształcić w okręgi Fermiego przecinające linię $k_1 = 0$ w czterech zwykłych punktach Diraca, jak widać na Rys. 14(a). Okręgi takie mają ładunek topologiczny $\mathbb{Z}_2$ wynikający z jednoczesnej obecności symetrii odbicia względem punktu i symetrii cząstka dziura [60]. Efekt polegający na transformacji wielokrotnych punktów Diraca w okręgi Fermiego nie był opisany w żadnej wcześniejszej pracy dotyczącej układów topologicznych. Co więcej, udało się także opisać ukrytą symetrię nieunitarną, która pozwala na istnienie wielokrotnych punktów Diraca dla $\delta = 0$.

Charakterystyczną cechą symetrii niesymorficznej takiej jak $\mathcal{R}^t$ jest to, że w linii symetrii, w tym przypadku $k_1 = 0$, pasma o określonej wartości własnej $\mathcal{R}^t$ mają okres nie 2π lecz 4π . Z drugiej strony, ponieważ pełny hamiltonian ma okres 2π , pasma te nie mogą być od siebie niezależne – muszą się od siebie różnić najwyżej o przesunięcie 2π . Tak też jest na Rys. 14(a). Dodatkowo, w przypadku zygzaka z3 w punkcie $\delta = 0$, okazuje się, że mimo pasm które mają okres 4π wyznacznik hamiltonianu w każdej podprzestrzeni własnej $\mathcal{R}^t$ ma wciąż okres 2π , czyli pasma są 4π -okresowe, ale ich iloczyn jest już 2π -okresowy. Mamy więc do czynienia z pewną symetrią hamiltonianu dla $\delta = 0$, która jednak dotyczy nie tyle samego operatora ale jego wyznacznika. Z tego powodu jest ona nieunitarna, jak pokazano w pracy [9]. Mając wiedzę, że wyznacznik ma okres 2π , można łatwo wyjaśnić mechanizm powstawania wielokrotnych punktów Diraca, lub bardziej ogólnie, dowolnych wielokrotnych przecięć pasm na poziomie Fermiego. Mechanizm ten pokazano na Rys. 14(b). W podprzestrzeni o zadanej wartości operatora odbicia z przesunięciem (lub innej symetrii niesymorficznej rzędu dwa) mamy więc punkt Fermiego dla $k = k_0$, przy czym jego pochodzenie i degeneracja może być dowolne. Z powodu własności wyznacznika powtarza się on dla $k = k_0 + 2\pi$ w tej samej

podprzestrzeni, choć jego degeneracja i dyspersja może być inna. W drugiej podprzestrzeni pasma różnią się jedynie o przesunięcie o 2π , więc k_0 i $k_0 + 2\pi$ nadal są punktami Fermiego tyle, że są one zamienione. Teraz, biorąc obie przestrzenie jednocześnie, widzimy od razu, że dostajemy w k_0 i $k_0 + 2\pi$ zwielokrotnione punkty Fermiego.

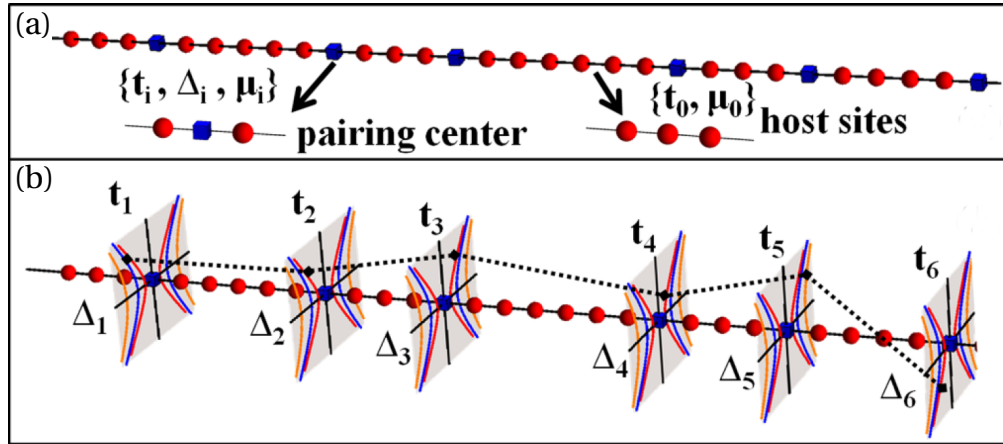
Opisany wyżej mechanizm jest, z fundamentalnego punktu widzenia, wartością dodaną pracy [9]. Opiera się on częściowo na symetrii niesymorficznej układu i dla zygzyka $z3$ odpowiada nie tylko za podwójne (czyli o degeneracji $d = 4$) punkty Diraca dla półwypełnienia, ale także za istnienie punktów Diraca o degeneracji $d = 3$ dla potencjału chemicznego $\mu = \sqrt{2t^2 + J_H^2 + \lambda^2}$. Współlistnieją one jednak ze zwykłą, jednowymiarową i niezdegenerowaną powierzchnią Fermiego [9]. Można więc oczekiwać, że w innych układach o niesymorficznym porządku magnetycznym także uda się zaobserwować egzotyczne fazy półmetal Diraca.

Topologiczne fazy w niejednorodnym modelu Kitaeva

W pracy [7] pokazano, że domieszkowanie matrycy d^4 metalem d^2 może prowadzić w granicy nadwymiany do hamiltonianu z orbitalnymi wyrazami $\tau_{i\gamma}^+ \tau_{j\gamma}^+$ wokół domieszek, gdzie $\tau_{i\gamma}$ to pseudospin orbitalny $\tau = 1/2$, a $\tau_{i\gamma}^\pm$ to operatory podnoszenia/opuszczania $\tau_{i\gamma}^z$. Oprócz tego na każdym wiązaniu, zarówno matrycy jak i wokół domieszek, pojawiają się też wyrazy $\tau_{i\gamma}^+ \tau_{j\gamma}^-$ i $\tau_{i\gamma}^z \tau_{j\gamma}^z$. Dla układu jednowymiarowego, np. wzdłuż $\gamma = a$, mamy więc efektywnie hamiltonian modelu Heisenberga typu XXZ na wiązaniach matrycy i typu XYZ na wiązaniach wokół domieszek.

W jednym wymiarze operatory pseudospinowe τ_i można z łatwością odwzorować na bezspinowe fermiony poprzez transformację Jordana-Wignera. W ten sposób wyrazy $\tau_i^+ \tau_{i+1}^-$ stają się wyrazami przeskoku pomiędzy najbliższymi sąsiadami, a wyrazy $\tau_i^+ \tau_{i+1}^+$ wyrazami parowania, takimi jak w nadprzewodniku typu p Kitaeva [52]. Z kolei jeśli wyrazy diagonalne $\tau_i^z \tau_{i+1}^z$ zastąpimy przez średniopółowe $h_i \tau_i^z$ (z punktu widzenia fermionów jest to rozszczepienie Hartree), to otrzymamy lokalny potencjał chemiczny, różny dla atomów matrycy i domieszek. Otrzymujemy zatem niejednorodny model nadprzewodnika Kitaeva, schematycznie przedstawiony na Rys. 15(a), gdzie atomom matrycy przypisana jest jedna amplituda przeskoku t_0 i jeden potencjał chemiczny μ_0 , a atomom domieszek, czyli centrom parowania, przypisane są amplitudy przeskoku t_i , parowania Δ_i oraz potencjał chemiczny μ_i , gdzie $i = 1, \dots, N$ numeruje domieszki. Model ten jest nieco bardziej ogólny od tego, co można dostać z hamiltonianu spinowo-orbitalnego opisującego matrycę d^4 z domieszkami d^2 , ponieważ wszystkie domieszki są tam takie same, ale należy pamiętać, że sektor orbitalny jest sprzężony z fizycznymi spinami $S = 1$. Jeśli więc interesuje nas efektywny problem czysto orbitalny, to po wyśredniowaniu po możliwej niejednorodnej konfiguracji spinowej (o ile jest to uzasadnione słabym splątaniem spinów i orbitali), domieszki mogą się efektywnie od siebie różnić.

Hamiltonian niejednorodnego nadprzewodnika pokazany na Rys. 15(a) stanowi punkt wyjścia pracy [10], której zagadnieniem są możliwe stany topologiczne w takim układzie. Motywacją jest to, że jednorodny model Kitaeva [52] ma nietrywialnie topologicznie stan podstawowy o ile tylko $\mu_0 < 2t_0$. Nietrywialność ta prowadzi w układzie o otwartych brzegach do tzw. stanów Majorany zlokalizowanych na każdym z tych brzegów. Stany takie mają zerową energię, więc w układzie, który jest nadprzewodnikiem nie sposób odróżnić który jest stanem elektronowym, a który dziurowym. Są one interesujące ze względu na to, że są topologicznie chronione i potencjalnie mogą służyć do implementacji qubitów odpornych na dekoherencję, które mogłyby być wykorzystane w komputerze kwantowym. Obecność stanów Majorany w rzeczywistym układzie fizycznym po raz pierwszy stwierdzono w pracy [61], gdzie badano nanodrut indowo-antymonowe sprzężone z nadprzewodnikiem typu s . Pytanie o stany topologiczne niejednorodnego modelu Kitaeva jest więc uzasadnione ponieważ, po pierwsze, rzeczywiste układy często są niejednorodne, a po drugie układ spinowo-orbitalny, z którego ten model się wywodzi mógłby stanowić platformę do otrzymywania stanów Majorany realizowanych przez orbitalne stopnie swobody. Najważniejszym wynikiem pracy [10] jest znalezienie analitycznych wyrażeń dla stwierdzenia, czy układ wielkości L , w którym jest N domieszek jest topologicznie nietrywialny, przy czym ważnym wynikiem jest też wprowadzenie zmiennym pozwalających na znaczną redukcję liczby parametrów modelu i odsłaniających ukrytą symetrię Lorentza faz topologicznych, zobrazowaną na Rys. 15(b). Udało się w ten sposób pokazać, że nawet układ z całkowitym nieporządkiem rozmieszczenia domieszek ma niezerowy

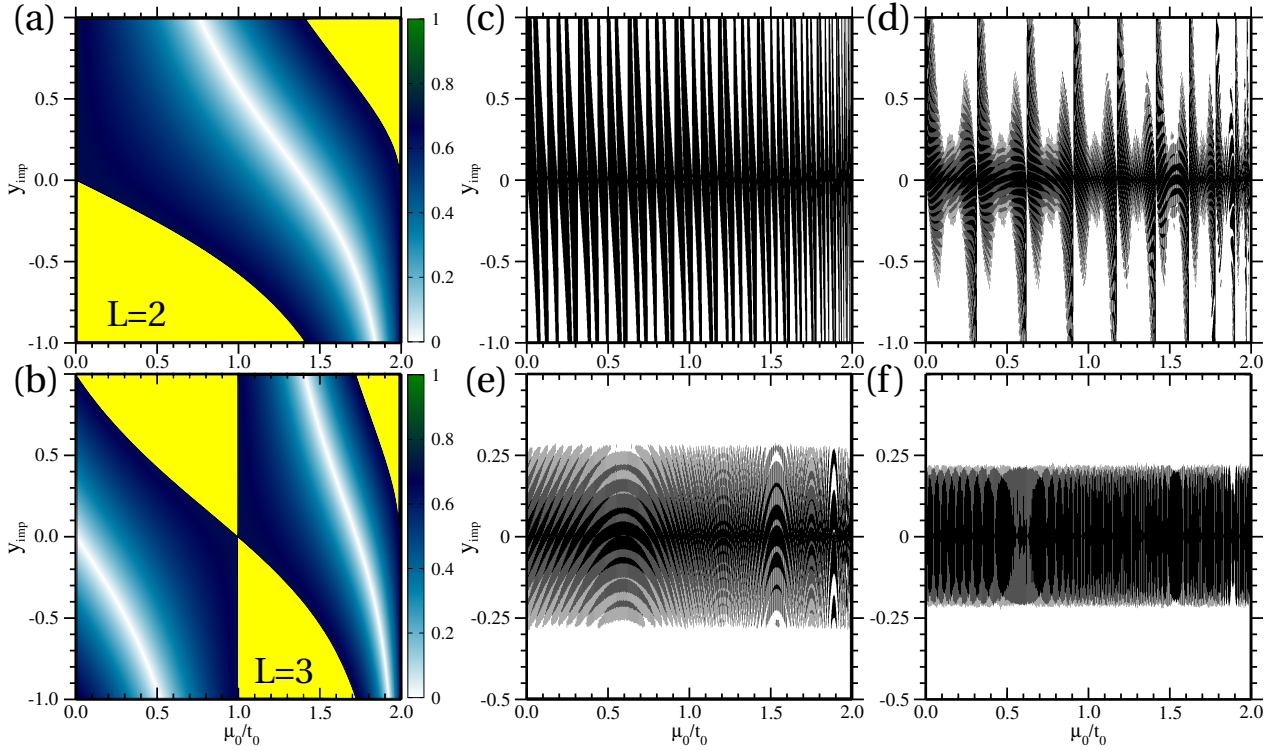


Rysunek 15: Układ niejednorodnego nadprzewodnika jednowymiarowego efektywnie realizowany przez rozrzedzenie ładunkowe i mechanizm parowania orbitalnego. (a) Schematyczny widok układu, czerwone kulki to atomy matrycy d^4 a niebieskie to domieszki d^2 będące centrami parowania. Amplituda przeskoków między atomami matrycy to t_0 . Między atomami domieszki a matrycy możliwy jest przeskoczek z amplitudą t_i i parowanie z amplitudą Δ_i , gdzie $i = 1, \dots, N$ to numer domieszki. Atomy matrycy i domieszki mają potencjały chemiczne, odpowiednio μ_0 i μ_i . (b) Artystyczny widok ukrytej symetrii Lorentza fazy topologicznej układu, faza ta jest stabilna względem zmiany parametrów t_i i Δ_i na każdej domieszce pod warunkiem, że nie zmienia się wartość $r_i^2 = t_i^2 - \Delta_i^2$, czyli parametry te cały czas leżą na hiperbolach o promieniach r_i .

obszar w przestrzeni parametrów, w którym realizuje się stan topologiczny, przy czym dzieje się tak nawet dla niewielkiej koncentracji domieszek rzędu 2%. Potwierdzeniem takiego stanu rzeczy są zaobserwowane stany Majorany w układzie z otwartymi brzegami [10].

Niejednorodny model Kitaeva w jednym wymiarze należy do tej samej klasy symetrii co model jednorodny, tzn. ma symetrię odwrócenia czasu $\mathcal{T}$, cząstka-dziura $\mathcal{C}$, a więc także symetrię chiralną $\mathcal{S} = \mathcal{TC}$. Z ogólnej klasyfikacji stanów topologicznych wiadomo, że może on mieć nietrywialny indeks topologiczny $\mathbb{Z}$, w jednym wymiarze dany przez tzn. liczbę nawinięć. Można ją zdefiniować w następujący sposób; w bazie własnej operatora $\mathcal{S}$ hamiltonian $\mathcal{H}_k$ modelu w przestrzeni pędu (zakładając symetrię translacyjną układu z dowolną komórką elementarną) ma postać blokowo-antydiagonalną z dwoma blokami danymi przez macierze $\mathbf{u}_k$ i $\mathbf{u}_k^\dagger$. Wyznacznik macierzy $\mathbf{u}_k$ jest liczbą zespoloną i zadaje odwzorowanie z jednowymiarowej strefy Brillouina, czyli sfery jednowymiarowej, na płaszczyznę zespoloną. Odwzorowanie takie może być nietrywialne w sensie grup homotopii, tzn. wektor $\vec{v}_k$ dany przez część rzeczywistą i urojoną wyznacznika $\mathbf{u}_k$ może się obrócić o kąt $n2\pi$ podczas jednego obiegu strefy Brillouina, gdzie n to dowolna liczba całkowita. Nietrudno odgadnąć, że n jest tożsame z indeksem topologicznym $\mathbb{Z}$. W przypadku rozważanego modelu wyznacznik $\mathbf{u}_k$ dany jest wyrażeniem $\det \mathbf{u}_k \propto \mathcal{A} + \mathcal{B} \cos k + i\mathcal{C} \sin k$, gdzie $\mathcal{A}$, $\mathcal{B}$ i $\mathcal{C}$ to stałe rzeczywiste, a i to jednostka urojona. Zmieniając k od 0 do 2π mamy więc trzy możliwości, albo wektor $\vec{v}_k$ nie wykona ani jednego obrotu, albo obróci się jeden raz w kierunku zgodnym lub przeciwnym do ruchu wskazówek zegara. Te dwa ostatnie przypadki dają stan topologiczny i zachodzą jeśli tylko $|\mathcal{A}| < |\mathcal{B}|$ i $\mathcal{C} \neq 0$. Otrzymanie ścisłych i zamkniętych wyrażeń na współczynniki $\mathcal{A}$, $\mathcal{B}$ i $\mathcal{C}$ w funkcji parametrów modelu, czyli parametrów matrycy $\{\mu_0, t_0\}$ oraz domieszek $\{\mu_i, t_i, \Delta_i\}_{i=1}^N$, a także położeń domieszek p_i w komórce elementarnej wielkości L , jest centralnym wynikiem pracy [10].

Wyrażenia na $\mathcal{A}$, $\mathcal{B}$ i $\mathcal{C}$ są na tyle proste, że można je przytoczyć w pełnej formie. Największe uproszczenie daje parametryzacja hiperboliczna dla domieszek, tzn. dla każdej domieszki i kładziemy $t_i = r_i \cosh \phi_i$ i $\Delta_i = r_i \sinh \phi_i$, przy czym parametryzacja ta poprzez kontynuację analityczną pokrywa całą płaszczyznę $t_i - \Delta_i$ za wyjątkiem diagonal $|t_i| = |\Delta_i|$, które stanowią analogie stożków świetlnych. Przy takiej parametryzacji



Rysunek 16: Obszary stabilnie topologiczne (na niebiesko z gradientem lub na czarno), czyli takie w których $|\mathcal{A}| < 1$, w funkcji parametru matrycy μ_0/t_0 oraz pojedynczego zredukowanego parametru domieszek $y_i \equiv y_{\text{imp}}$. Diagramy (a) i (b) – duża koncentracja domieszek, pojedyncza domieszka w komórce elementarnej o wielkości $L = 2, 3$ – niebieski gradient oznacza wartość $|\mathcal{A}|$ zgodnie ze skalą, w żółtym obszarze $|\mathcal{A}| > 1$. Diagramy (c-f) – mała koncentracja domieszek, domieszkowanie 2%. (c) Uporządkowane domieszki z dwiema odległościami między sąsiednimi domieszkami $d_{12} = 40$ i $d_{21} = 60$. (d) Układ z binarnym nieporządkiem, dla danej pary sąsiednich domieszek odległość 40 lub 60 jest losowa z tym samym prawdopodobieństwem. (e) Układ z całkowitym nieporządkiem położenia domieszek w komórce elementarnej wielkości $L = 1000$ i (f) ten sam układ z losowym znakiem parametru $y_i = \pm y_{\text{imp}}$. Wyniki dla układów z nieporządkiem są uśrednione po 1000 realizacjach nieporządku. Wykresy (c-f) składają się wyłącznie z czarnych i białych punktów.

otrzymujemy współczynniki $\mathcal{B} = \cosh(2 \sum_i \phi_i)$ i $\mathcal{C} = \sinh(2 \sum_i \phi_i)$ jako zależne wyłącznie od sumy kątów ϕ_i , natomiast współczynnik $\mathcal{A}$ zależy od promieni r_i , położenia domieszek p_i oraz parametrów matrycy. Zależności te da się jednak zredukować do bezwymiarowego parametru y_i , związanego z każdą domieszką i , którego postać to, $y_i = t_0(\mu_i/r_i^2 - \mu_0/t_0^2)/\sqrt{4 - \mu_0^2/t_0^2}$ oraz do jednego bezwymiarowego parametru η_0 określającego matrycę, $\eta_0 = \arccos[\mu_0/(2t_0)]$. Współczynnik $\mathcal{A}$ można teraz zapisać poprzez działania na macierzach trójkątnych $\mathbf{M}_1$ i $\mathbf{M}_2$ oraz macierzy diagonalnej $\mathbf{Y}$, jako $\mathcal{A} = \cos(L\eta_0) + \text{Tr}\{(\mathbf{1} - 2\mathbf{M}_1\mathbf{Y})^{-1}\mathbf{M}_2^T\mathbf{Y}\}$, gdzie nieznikające elementy macierzy to; $(\mathbf{M}_1)_{ij} = \sin(\eta_0 d_{ij})$ i $(\mathbf{M}_2)_{ij} = \sin[\eta_0(L - d_{ij})]$ dla $j \geq i$ oraz $\mathbf{Y}_{ii} = y_i$. Macierze $\mathbf{M}_{1,2}$ zależą od rozkładu przestrzennego domieszek poprzez odległości $d_{ij} \equiv p_j - p_i$ między i -tą a j -tą domieszką, jest więc w nich pewna interferencja stanów jednocząstowych zlokalizowanych między dwiema domieszkami, a $1/\eta_0$ można traktować jako efektywną długość Fermiego matrycy.

Jak widać wprost z postaci współczynników $\mathcal{A}$, $\mathcal{B}$ i $\mathcal{C}$, układ który jest w stanie topologicznym można modyfikować na nieskończenie wiele sposobów i nadal w nim pozostanie. W szczególności, $\mathcal{B}$ i $\mathcal{C}$ zależą tylko od sumy ϕ_i , więc można dowolnie modyfikować $N - 1$ kątów pod warunkiem, że zmiany te skompensujemy tym jednym kątem, którego nie modyfikowaliśmy. Mamy więc symetrie typu Lorentza na każdej płaszczyźnie

$t_i - \Delta_i$ związanej z domieszką i , co zobrazowano na Rys. 15(b). Odkrycie takich symetrii fazy topologicznej jest istotnym i nietrywialnym wynikiem pracy [10], który daje wkład do fundamentalnego zrozumienia faz topologicznych, a także może mieć znaczenie w układach z nieporządkiem. Inną nietrywialną symetrią jest symetria skalowania μ_i i r_i^2 na każdej domieszce przez dowolną stałą α_i , która to operacja nie zmienia parametrów y_i , ani oczywiście kątów ϕ_i .

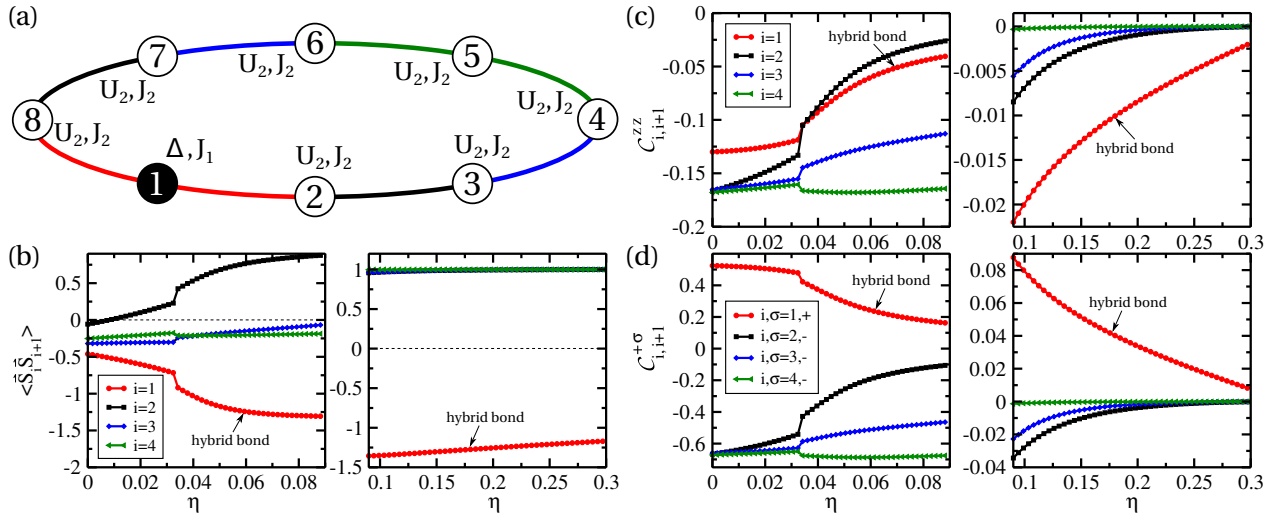
Pytanie o stan topologiczny układu sprowadza się do pytania o wartości $\mathcal{A}$, $\mathcal{B}$ i $\mathcal{C}$, które wciąż zależą od wielu zmiennych. Analizę tego zagadnienia można uprościć, jeśli zauważymy, że zawsze mamy $\mathcal{B} \geq 1$. W takim razie jeśli $\mathcal{A} < 1$ i kąty ϕ_i nie sumują się do zera, to układ zawsze będzie w stanie topologicznym. Obszar w przestrzeni parametrów gdzie $\mathcal{A} < 1$ nazywamy więc obszarem stabilnym topologicznie. Mając ogólny wzór na $\mathcal{A}$ możemy teraz badać takie obszary dla różnych konfiguracji domieszek. Należy tu zauważyć, że z postaci współczynnika $\mathcal{A}$ wynika, że dla $y_i \equiv 0$ zawsze mamy $\mathcal{A} \leq 1$ niezależnie od wszystkich innych zmiennych. Rys. 16(a-b) przedstawia obszary topologiczne dla pojedynczej domieszki o parametrze $y_1 = y_{\text{imp}}$ dla $L = 2$ i $L = 3$, a więc dużej koncentracji domieszek. Widzimy, że wraz ze zwiększaniem się komórki elementarnej obszar topologiczny ulega fragmentacji, a fragmenty te zawsze rozciągają się wokół linii, wzdłuż których $\mathcal{A} = 0$. Nieprzekraczalną granicą każdego obszaru topologicznego jest zawsze punkt $\mu_0 = 2t_0$, będący zarazem granicą fazy topologicznej jednorodnego modelu Kitaeva.

Na Rys. 16(c-f) pokazano ewolucję obszaru topologicznego dla koncentracji domieszek 2% przy zwiększającym się nieporządku ich położenia, ale przy tych samych parametrach $y_i \equiv y_{\text{imp}}$ na każdej domieszce, za wyjątkiem 16(f), gdzie znak y_i jest zmienną losową. Rys. 16(c) odnosi się do układu uporządkowanego, gdzie odległości między najbliższymi domieszkami alternują między wartościami $d_{12} = 40$ i $d_{21} = 60$, jest to więc układ zdimeryzowany z dwiema domieszkami w komórce elementarnej. Obszar topologiczny jest silnie pocięty w pionie na wąskie nogi rozciągające się w dużym zakresie y_{imp} . Na Rys. 16(d) w tym samym układzie wprowadzamy Poissonowski nieporządek binarny polegający na tym, że odległości między najbliższymi domieszkami przyjmują z tym samym prawdopodobieństwem wartość 40 lub 60 tak, że całkowita ilość odległości długich i krótkich jest taka sama. Współczynnik $\mathcal{A}$ uśredniamy po wielu realizacjach nieporządku i na podstawie $\langle \mathcal{A} \rangle$ wyznaczamy obszar topologiczny. Widać w nim pewne podobieństwo do przypadku uporządkowanego z tym, że niektóre z jego nóg są obcięte w osi pionowej i pojawia się subtelny wzór interferencyjny, który sprawia, że niektóre części tego obszaru stają się podziurawione, podobnie jak dywan Sierpińskiego, zbiór Cantora, czy inne struktury fraktalne. Zwiększając dalej nieporządek otrzymujemy obszar pokazany na Rys. 16(e), gdzie domieszki rozmieszczone są całkowicie losowo, z zastrzeżeniem, że nigdy ze sobą nie sąsiadują. Jak widać, nie ma już pionowych nóg, a granice obszaru w pionie wydają się nie zależeć od μ_0 . Wzór interferencyjny jest wyraźny i przypomina wiele nakładających się parabol, których wierzchołki wydają się skupiać dla kilku wyróżnionych wartości μ_0 , co prawdopodobnie ma związek z tworzeniem się fal gęstości ładunku między domieszkami dla wybranych wartości potencjału chemicznego matrycy. Widać też asymetrię obszaru względem dodatnich i ujemnych y_{imp} , przy czym asymetria ta znika, jeśli poza nieporządkiem położenia, zmieniamy losowo znak y_{imp} na każdej domieszce. Przypadek ten przedstawia Rys. 16(f), gdzie obszar topologiczny kurczy się nieco w pionie a wzór interferencyjny ma postać długich i cienkich palców fazy trywialnej wchodzących w ten obszar. Co ciekawe, subtelny charakter obszarów topologicznych 16(e-f) nie zależy silnie od koncentracji domieszek; jedynie szerokość obszaru rośnie wraz ze spadkiem ich koncentracji ponieważ liczba domieszek N to jednocześnie maksymalna potęga y_{imp} w wyrażeniu na współczynnik $\mathcal{A}$.

W pracy [10] udało się zatem otrzymać ciekawe analityczne właściwości niejednorodnego modelu Kitaeva, łącznie z ukrytymi symetriami fazy topologicznej, a także nietrywialne wyniki numeryczne dla faz topologicznych układów z silnym nieporządkiem. Okazało się, między innymi, że w dowolnie nieuporządkowanym układzie można dostać stany topologiczne, a więc i stany Majorany w układzie otwartym, o ile wartości parametrów domieszek y_i są odpowiednio bliskie zera. Jest to nietrywialny warunek pewnego rezonansu między domieszkami a matrycą, który zachodzi gdy $t_0^2 \mu_i \equiv (\Delta_i^2 - t_i^2) \mu_0$.

Związek niejednorodnego modelu Kitaeva z rozrzedzeniem ładunkowym

Opisany powyżej model wywodzi się z układu spinowo-orbitalnego z rozrzedzeniem ładunkowym, czyli układu d^4 domieszkowanego metalem d^2 . Model spinowo-orbitalny jest jednak bogatszy niż model Kitaeva ponieważ



Rysunek 17: (a) Schemat układu 8 węzłów z jedną domieszką d^2 na węzle $i = 1$ i siedmioma atomami matrycy d^4 na węzłach $i = 2, \dots, 8$. Parametry domieszki to Δ i J_1 , a matrycy U_2 i J_2 . Konwencja koloru wiązań $\langle i, i+1 \rangle$ jest utrzymana na wykresach (b-d). (b) Korelacje spinowe $\langle \vec{S}_i \vec{S}_{i+1} \rangle$ w stanie podstawowym w funkcji $\eta = J_2/U_2$ w obszarze antyferromagnetycznej (wykres po lewej) i ferromagnetycznej (wykres po prawej) matrycy. (c) i (d) Analogiczne wykresy dla kowariancji spinowo-orbitalnych $C_{i,i+1}^{zz}$ i $C_{i,i+1}^{+\sigma}$, gdzie $\sigma = -$ dla wiązań matrycy i $\sigma = +$ dla wiązań hybrydowych wokół domieszki.

orbitale mogą być splątane ze spinami. W celu zbadania kiedy to splątanie można zaniedbać i czy model czysto orbitalny może dać stan topologiczny przy takich parametrach, jakie wynikają z nadwymiany, powstała praca [11]. Rozważano tam pełny model spinowo-orbitalny dla pojedynczej domieszki i siedmiu atomów matrycy. Schemat takiego układu przedstawia Rys. 17(a), gdzie U_2 i J_2 oznaczają oddziaływania Hubbarda i Hunda na atomach matrycy, J_1 to oddziaływanie Hunda na domieszce, a Δ to charakterystyczna energia wzbudzeń dla wiązania hybrydowego między domieszką a matrycą, analogiczna do tej, jaką otrzymujemy przy rozrzedzeniu orbitalnym [7]. Głównym wynikiem pracy [11] jest pokazanie, że jeśli $\eta = J_2/U_2$ jest wystarczająco duże, to porządek spinowy matrycy staje się ferromagnetyczny a splątanie między spinami i orbitalami niewielkie. W tym obszarze parametrów możemy więc oddziaływania spinowe zastąpić przez ich średnie w stanie ferromagnetycznym i korzystając z wyników pracy [10] stwierdzić, czy model czysto orbitalny jest nietrywialny topologicznie.

Na Rys. 17(b) pokazano korelacje spinowe dla najbliższych sąsiadów w stanie podstawowym otrzymanym przez ścisłą diagonalizację. Jak widać, już od $\eta \simeq 0.09$ matryca staje się ferromagnetyczna, choć wiązanie hybrydowe pozostaje antyferromagnetyczne. Należy więc sprawdzić, czy takie wiązanie nie generuje wysokiego splątania spinowo-orbitalnego w układzie. W tym celu wyliczono kowariancje spinowo-orbitalne $C_{i,i+1}^{zz}$ i $C_{i,i+1}^{+\sigma}$ na wiązaniach. Ich postać to: $C_{i,i+1}^{zz} = \langle \vec{S}_i \vec{S}_{i+1} \tau_i^z \tau_{i+1}^z \rangle - \langle \vec{S}_i \vec{S}_{i+1} \rangle \langle \tau_i^z \tau_{i+1}^z \rangle$ oraz $C_{i,i+1}^{+\sigma} = \langle \vec{S}_i \vec{S}_{i+1} \tau_i^+ \tau_{i+1}^\sigma \rangle - \langle \vec{S}_i \vec{S}_{i+1} \rangle \langle \tau_i^+ \tau_{i+1}^\sigma \rangle + c.c.$, gdzie $\sigma = \pm$, przy czym wynika ona z tego jakie wyrazy znajdują się w hamiltonianie spinowo-orbitalnym. Zerowa wartość tych kowariancji oznacza, w pewnym uproszczeniu, że funkcję falową układu można faktoryzować na część orbitalną i spinową. Zachowanie tych wielkości w funkcji η pokazano na Rys. 17(c) i 17(d). Okazuje się, że niezerowe kowariancje niediagonalne $C_{i,i+1}^{+\sigma}$ na wiązaniach matrycy są tylko dla $\sigma = -$ a dla wiązań hybrydowych tylko dla $\sigma = +$, więc tylko takie kowariancje znajdują się na Rys. 17(d). Jak widać, obszar antyferromagnetyczny dla niskiego η cechuje się relatywnie wysokimi kowariancjami, więc nie można w nim oddzielić spinów od orbitali. Z drugiej strony, w obszarze ferromagnetycznym, kowariancje są o rząd wielkości niższe i, szczególnie dla wiązań matrycy, zanikają szybko wraz ze wzrostem η . Nieco wyższe splątanie utrzymuje się dla wiązań hybrydowych,

ale można oczekiwać, że im mniejsza koncentracja domieszek, tym efekt ten będzie słabszy, ponieważ stan ferromagnetyczny matrycy będzie efektywnie tłumił fluktuacje spinów.

Po wyśredniowaniu spinów model czysto orbitalny został w pracy [11] rozwiązany poprzez przybliżenie Hartree-Focka dla wyrazów $\tau_i^z \tau_{i+1}^z$ zapisanym poprzez fermiony Jordana-Wignera. W ten sposób układ został odwzorowany na niejednorodny model Kitaeva, a następnie stwierdzono jego topologiczną nietrywialność korzystając z wcześniejszych wyników [10]. Praca [11] pokazuje zatem, że model spinowo-orbitalny z rozrzedzeniem ładunkowym może w pewnym obszarze mieć topologiczny stan orbitalny i, co za tym idzie, orbitalne stany Majorany na brzegach. Jest to nowa idea w kontekście układów topologicznych i stanowi główną wartość tej publikacji.

3.4 Podsumowanie

W pracach [1-11] pokazano nietrywialne przypadki uporządkowań spinowych, orbitalnych i topologicznych w modelach opisujących złożone i silnie skorelowane tlenki metali przejściowych. W modelu spinowo-orbitalnym dla tlenków metali o konfiguracji d^9 , czyli modelu Kugela-Khomskii'ego [1-2], otrzymano niekolinearne fazy magnetyczne, których stabilność nie wynika ze sprzężenia spin-orbita, a jedynie z silnych fluktuacji orbitalnych i splątania spinowo-orbitalnego. Z drugiej strony, w pracy [3] otrzymano ścisły porządek topologiczny w jednowymiarowym modelu spinowo-orbitalnym, który wynika z nietrywialnej separacji spinów i orbitali w układzie periodycznym. Z kolei badania tego samego układu w obecności dodatkowego sprzężenia Heisenberga między spinami [4] pokazały obecność kwantowego przejścia fazowego polegającego na spontanicznej dimeryzacji układu. Dimeryzacja ta zachodzi przede wszystkim w sektorze spinowym na skutek fluktuacji orbitalnych. Jest więc to mechanizm pokrewny do tego, jaki daje fazy niekolinearne w modelu Kugela-Khomskii'ego.

Prace [5-7] skupiają się na modelach tlenków d^4 domieszkowanych metalami d^3 lub d^2 . Pierwszy z tych przypadków, to rozrzedzenie orbitalne [5-6], ponieważ domieszka efektywnie pozbawiona jest orbitalnych stopni swobody, natomiast drugi to rozrzedzenie ładunkowe [7], ponieważ domieszka ma orbitalne stopnie swobody, ale realizowane przez zerowe, a nie podwójne obsadzenie jednego z orbitali t_{2g} . W pracy [5] pokazano modyfikację porządku spinowo-orbitalnego matrycy d^4 na skutek rozrzedzenia orbitalnego w różnych zakresach parametrów mikroskopowych modelu, zarówno w granicy klasycznej jak i kwantowej, także z uwzględnieniem sprzężenia spin-orbita na atomach matrycy. Otrzymano, między innymi, fazy z niekolinearnym porządkiem magnetycznym [5] oraz silne modyfikacje porządku matrycy nawet dla niewielkich domieszkowań [5-6]. Z kolei w przypadku rozrzedzenia ładunkowego [7] pokazano, że domieszki są źródłem wyrazów parowania orbitalnego i zbadano wpływ tych wyrazów na porządek orbitalny matrycy w granicy kwantowej. Okazało się, że zwiększają one fluktuacje orbitalne w układzie i mogą drastycznie zmienić uporządkowanie matrycy, podobnie jak w przypadku rozrzedzenia orbitalnego. Prace [5-7] stanowią jeden z nielicznych wkładów teoretycznych do niezwykle interesującego kierunku badań jakim są hybrydowe tlenki metali przejściowych. Co więcej, są one inspiracją do dalszych badań doświadczalnych układów z rozrzedzeniem orbitalnym lub ładunkowym.

Nieco inny aspekt tlenków hybrydowych i rozrzedzenia ładunkowego poruszają publikacje [10] i [11], gdzie pokazano, że w jednym wymiarze układ d^4 z domieszkowaniem d^2 można powiązać z niejednorodnym modelem Kitaeva [11], a model ten ma fazy nietrywialnie topologiczne [10], także w przypadku całkowitego nieporządku domieszek. Powiązanie jednego modelu z drugim jest możliwe pod warunkiem, że splątanie spinowo-orbitalne jest niewielkie, co dzieje się w przypadku ferromagnetycznej fazy matrycy [11]. Z drugiej strony, wyniki otrzymane dla modelu Kitaeva są bardziej ogólne i pokazują ukryte symetrie fazy topologicznej, polegające, między innymi, na transformacjach Lorentza w lokalnej przestrzeni parametrów domieszek. Prace [10-11] stanowią więc zarówno wkład w zrozumienie fundamentalnych właściwości faz topologicznych, jak i postulat istnienia orbitalnych stanów Majorany w układach spinowo-orbitalnych.

Innym połączeniem fizyki stanów topologicznych z tlenkami hybrydowymi i porządkiem spinowo-orbitalnym są prace [8] i [9]. Pierwsza z nich skupia się na kwestii stabilności faz z zygzakowym porządkiem magnetycznym w układzie dwupłaszczyznowym d^4 domieszkowanym jonami d^3 , a więc przypadku rozrzedzenia orbitalnego. Układ badano poprzez model podwójnej wymiany, gdzie elektrony na jednym z orbitali ulegają lokalizacji i oddziałują swymi spinami, poprzez oddziaływanie Hunda, z elektronami na pozostałych orbita-

lach, które pozostają wędrowne. Pokazano w pracy [8], że różnego typu fazy zygzakowe są stabilne dzięki procesowi tworzenia się molekuł orbitalnych, które przy pewnej gęstości elektronowej pozwalają na obniżenie energii kinetycznej w układzie. Dzieje się tak w obszarze parametrów modelu gdzie jednorodna faza ferromagnetyczna konkuruje z fazą antyferromagnetyczną, a więc energia kinetyczna elektronów wędrownych jest porównywalna z wymianą magnetyczną zlokalizowanych spinów. Z kolei praca [9] skupia się na aspekcie topologicznym elektronów wędrownych, które poruszając się wśród spinów uporządkowanych zygzakowo, oddziałują z nimi poprzez oddziaływanie Hunda i poprzez sprzężenie spin-orbita. Okazuje się, że zmieniając te dwa parametry możemy otrzymać stany metaliczne, izolujące i stany półmetal, przy czym te ostatnie są topologicznie nietrywialne. Ich nietrywialność wynika z obecności topologicznie chronionych punktów Diraca. Mogą to być punkty o wyższej degeneracji niż podwójna, a ochrona topologiczna może się wiązać z obecnością więcej niż jednego ładunku topologicznego. Źródłem tych nietypowych cech faz topologicznego półmetal jest niesymorficzny charakter zygzakowego porządku magnetycznego – ma on symetrię odbicia z przesunięciem o połowę wektora sieciowego. Dodatkowo, symetria ta ma tendencję do sklejania punktów Diraca w punkty o wielokrotnej degeneracji, w co zaangażowana jest dodatkowa symetria, będąca jednak nieunitarna (ani nie antyunitarna), działająca na poziomie wyznacznika hamiltonianu. Praca [9] przyczynia się więc do fundamentalnego zrozumienia faz topologicznych z symetriami niesymorficznymi, co nie jest jeszcze tematem wyeksplorowanym. Może też ona stanowić inspirację dla grup doświadczalnych poszukujących materiałów jednocześnie topologicznych i magnetycznych.

Prace [1-11] stanowią zwarty ciąg tematyczny skupiony na różnych egotycznych typach uporządkowań, w tym topologicznych, w modelach opisujących silnie skorelowane tlenki metali przejściowych, zarówno czyste jak i hybrydowe, czyli domieszkowane innym metalami przejściowymi. Zawierają one wyniki nowe, znaczące i niepublikowane wcześniej, dlatego stanowią one wartość dodaną w swojej dziedzinie.

4 Pozostałe osiągnięcia

Dla tzw. modelu kompasów, czyli modelu zlokalizowanych pseudospinów opisujących kierunkowe oddziaływania orbitalne w silnie skorelowanych izolatorach, przeprowadzono wyczerpującą analizę specyficznych dla tego modelu dyskretnych symetrii, własności stanu podstawowego i wielkości termodynamicznych [15]. Wielkości te badano metodami ścisłej diagonalizacji skończonych układów, wykorzystując algorytm Lanczosa oraz metodę KPM, czyli metodę wielomianów Czebyszewa. Przeprowadzono także analizę miar splątania kwantowego w funkcji parametru modelu przy przejściu przez kwantowy punkt krytyczny. W celu wykorzystania symetrii do zmniejszenia efektywnego wymiaru przestrzeni Hilberta sformułowano ciąg transformacji pseudospinowych, które po pierwsze prowadzą do blokowo-diagonalnej formy hamiltonianu oraz, po drugie, pokazują ukrytą symetrię układu (opisaną także w osobnej pracy [17]). Te wyniki są zasadnicze z punktu widzenia fundamentalnych właściwości modelu kompasów oraz innym modeli o podobnych symetriach, które często opisują układy inne niż izolatory silnie skorelowane z degeneracją orbitalną – są to modele dla np. dla sieci nadprzewodzących lub zimnych atomów. Mają one także związek z topologicznie chronionymi qubitami.

Pokrewnymi modelami są plakietkowe modele kompasów dla układów o geometrii drabinki [12-13]. Mają one podobne, lokalne symetrie więc także dla nich udało się wyprowadzić odpowiednie transformacje spinowe, przez które można te modele połączyć adiabaticznie, zmieniając parametry modelu, z jednowymiarowym modelem kompasów dla spinów $S = 1/2$ [19,21] lub $S = 1$ lub ze sobą nawzajem [13]. Modele te są sfrustrowane i wykazują silne splątanie kwantowe przede wszystkim wtedy gdy pojawia się nieporządek, albo w stanie podstawowym [13] albo w niskich stanach wzbudzonych [12]. Prace [12-13] są istotne właśnie ze względu na to, że pokazują fundamentalny związek między frustracją, nieporządkiem a splątaniem kwantowym na stosunkowo prostych przykładach.

Nieco inne zagadnienia poruszono w pracach [14,22], gdzie rozważano problem propagacji pojedynczego ładunku w układzie typu model kompasów przy użyciu wariacyjnej metody klastrowej (VCA). Jest to problem, który ma związek z polaronami orbitalnymi ponieważ poruszające się ładunek ciągnie za sobą chmurę wzbudzeń (czyli polaron) w modelu kompasów, który opisuje stopnie swobody typu orbitalnego. Głównym wynikiem jest tu fakt, że dziura w modelu kompasów (a także jego uogólnionej wersji, która zawiera model

dla orbitali e_g) może się poruszać, ale nie dzięki fluktuacjom w stanie uporządkowanym, jak to ma miejsce w antyferromagnetyku, ale z powodu fluktuacji które tworzy sama obecność dodatkowego ładunku. Wyniki te są ważne ze względu na możliwe właściwości transportu w izolatorach silnie skorelowanych z porządkiem orbitalnym.

4.1 Dane bibliometryczne

- Całkowita liczba artykułów: 29 (w tym 8 prac konferencyjnych)
- Liczba cytowań: 313 (bez autocytowań: 216)
- Indeks Hirscha: 11

4.2 Pozostałe publikacje

12. **W. Brzezicki** and A.M. Oleś, Physical Review B 93, 214402 (2016), “One-dimensional frustrated plaquette compass model: Nematic phase and spontaneous multimerization”.
13. **W. Brzezicki** and A.M. Oleś, Physical Review B 90, 024433 (2014), “Locally tunable disorder and entanglement in the one-dimensional plaquette orbital model”.
14. **W. Brzezicki**, M. Daghofer, and A.M. Oleś, Physical Review B 89, 024417 (2014), “Mechanism of hole propagation in the orbital compass models”.
15. **W. Brzezicki** and A.M. Oleś, Physical Review B 87, 214421 (2013), “Symmetry properties and spectra of the two-dimensional quantum compass model”.
16. **W. Brzezicki** and A.M. Oleś, Physical Review B 83, 214408 (2011), “Entangled spin-orbital phases in the bilayer Kugel-Khomskii model”.
17. **W. Brzezicki** and A.M. Oleś, Physical Review B: Rapid Communications 82, 060401 (2010), “Hidden dimer order in the quantum compass model”.
18. **W. Brzezicki** and A.M. Oleś, Physical Review B 80, 014405 (2009), “Exact solution for a quantum compass ladder”.
19. **W. Brzezicki** and A.M. Oleś, Acta Physica Polonica A 115, 162 (2009), “Quantum phase transition in the one-dimensional XZ model”.
20. **W. Brzezicki** and A.M. Oleś, European Physical Journal B 66, 361 (2008), “Exact ground state of a spin ladder with a quantum phase transition”.
21. **W. Brzezicki**, J. Dziarmaga and A.M. Oleś, Physical Review B 75, 134415 (2007), “Quantum phase transition in the one-dimensional compass model”.

4.3 Prace konferencyjne

22. **W. Brzezicki**, M. Daghofer, and A.M. Oleś, Acta Physica Polonica A 127, 263 (2015), “Hole Propagation in the Orbital Compass Models”.
23. **W. Brzezicki**, J. Dziarmaga and A.M. Oleś, Acta Physica Polonica A 126, A40 (2014), “Exotic Spin Order due to Orbital Fluctuations”.
24. **W. Brzezicki**, Lectures On The Physics Of Strongly Correlated Systems XVII, 1550, 249 (2013), “Entangled phase diagram of the Kugel-Khomskii model”.

25. **W. Brzezicki** and A.M. Oleś, *Acta Physica Polonica A* 121, 1045 (2012), “Entangled Spin-Orbital Phases in the d(9) Model”.
26. **W. Brzezicki** and A. M. Oleś, *Journal of Physics: Conference Series* 391, 012085 (2012), “Spin-Orbital Entanglement Emerging from Frustration in the Kugel-Khomskii Model”.
27. **W. Brzezicki**, *Lectures On The Physics Of Strongly Correlated Systems XV*, 1419, 261 (2011), “Exact Properties of the Quantum Compass Model”.
28. **W. Brzezicki**, *Lectures On The Physics Of Strongly Correlated Systems XIV*, 1297, 407 (2010), “Quantum compass model on a chain, ladder and finite square clusters”.
29. **W. Brzezicki** and A. M. Oleś, *Journal of Physics: Conference Series* 200, 012017 (2010), “Compass model on a ladder and square clusters” .

5 Bibliografia

30. J. Zaanen, G. A. Sawatzky, and J. W. Allen, *Phys. Rev. Lett.* 55, 418 (1985).
31. K. I. Kugel and D. I. Khomskii, *JETP Lett.* 15, 446 (1972).
32. N. F. Mott, *Rev. Mod. Phys.* 40, 677 (1968).
33. G. Jackeli and G. Khaliullin, *Phys. Rev. Lett.* 102, 017205 (2009).
34. A. M. Oleś, *J. Phys.: Condens. Matter* 24, 313201 (2012).
35. A. M. Oleś, P. Horsch, L. F. Feiner, and G. Khaliullin, *Phys. Rev. Lett.* 96, 147205 (2006).
36. M. Imada, A. Fujimori, and Y. Tokura, *Rev. Mod. Phys.* 70, 1039 (1998).
37. W.W.-Krempa, G. Chen, Y. B. Kim, and L. Balents, *Annu. Rev. Cond. Mat. Phys.* 5, 57 (2014).
38. G. Cao et al., *Phys. Rev. B* 71, 035104 (2005).
39. M. A. Hossain et al., *Phys. Rev. Lett.* 101, 016404 (2008); D. Mesa et al., *Phys. Rev. B* 85, 180410 (2012).
40. V. Durairaj, S. Chikara, X. N. Lin, A. Douglass, G. Cao, P. Schlottmann, E. S. Choi, and R. P. Guertin, *Phys. Rev. B* 73, 214414 (2006); T. F. Qi, O. B. Korneta, S. Parkin, L. E. De Long, P. Schlottmann, and G. Cao, *Phys. Rev. Lett.* 105, 177203 (2010).
41. A. P. Schnyder, S. Ryu, A. Furusaki, and A. W. W. Ludwig, *Phys. Rev. B* 78, 195125 (2008); K. Shiozaki and M. Sato, *Phys. Rev. B* 90, 165114 (2014).
42. Y. X. Zhao and Z. D. Wang, *Phys. Rev. Lett.* 110, 240404 (2013); Y. X. Zhao and Z. D. Wang, *Phys. Rev. B* 89, 075111 (2014).
43. A. M. Essin and V. Gurarie, *Phys. Rev. B* 84, 125132 (2011); V. Gurarie, *Phys. Rev. B* 83, 085426 (2011).
44. K. Shiozaki and M. Sato, *Phys. Rev. B* 90, 165114 (2014); C.-K. Chiu and A. P. Schnyder, *Phys. Rev. B* 90, 205136 (2014).
45. Y. Xia, D. Qian, D. Hsieh, L. Wray, A. Pal, H. Lin, A. Bansil, D. Grauer, Y. S. Hor, R. J. Cava, and M. Z. Hasan, *Nat. Phys.* 5, 398 (2009).

46. Y. Tanaka, Z. Ren, T. Sato, K. Nakayama, S. Souma, T. Takahashi, K. Segawa, and Y. Ando, Nat. Phys. 8, 800 (2012).
47. A. A. Burkov, M. D. Hook, and Leon Balents Phys. Rev. B 84, 235126 (2011); S.-Y. Xu, I. Belopolski, N. Alidoust, M. Neupane, G. Bian, C. Zhang, R. Sankar, G. Chang, Z. Yuan, C.-C. Lee, S.-M. Huang, H. Zheng, J. Ma, D. S. Sanchez, B. Wang, A. Bansil, F. Chou, P. P. Shibayev, H. Lin, S. Jia, and M. Z. Hasan, Science 349, 613 (2015).
48. F. Pollmann and A. M. Turner, Phys. Rev. B 86, 125441 (2012).
49. Y. Hatsugai, J. Phys. Soc. Jpn. 74, 1374 (2005); T. Kariyado and Y. Hatsugai, Phys. Rev. B 91, 214410 (2015).
50. B. Kumar, Phys. Rev. B 87, 195105 (2013).
51. S. R. White, Phys. Rev. Lett. 69, 2863 (1992).
52. A. Kitaev and C. Laumann, arXiv:0904.2771v1 (2009).
53. C. Zener, Phys. Rev. 82, 403 (1951).
54. S. Yunoki, J. Hu, A. L. Malvezzi, A. Moreo, N. Furukawa, and E. Dagotto, Phys. Rev. Lett. 80, 845 (1998).
55. A. H. Castro Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov, and A. K. Geim, Rev. Mod. Phys. 81, 109 (2009); A. Rycerz, J. Tworzydło, C.W.J. Beenakker, Nature Physics 3 (3), 172 (2007).
56. C.-K. Chiu and A. P. Schnyder, Phys. Rev. B 90, 205136 (2014).
57. K. Shiozaki, M. Sato, and K. Gomi, Phys. Rev. B 93, 195413 (2016).
58. S. Kobayashi, Y. Yanase, and M. Sato, Phys. Rev. B 94, 134512 (2016).
59. A. Alexandradinata, Xi Dai, and B. A. Bernevig, Phys. Rev. B 89, 155114 (2014).
60. Y. X. Zhao, A. P. Schnyder, and Z. D. Wang, Phys. Rev. Lett. 116, 156402 (2016).
61. V. Mourik, K. Zuo, S. M. Frolov, S. R. Plissard, E. P. A. M. Bakkers, and L. P. Kouwenhoven, Science 336, 1003 (2012).

W. Brzezicki