

Mágneses Weyl-pontok vizsgálata különböző spinrendszerekben

Frank György

Konzulens:

Dr. Csonka Szabolcs

Dr. Pályi András

BME Fizika Tanszék

Budapest

2018



M Ű E G Y E T E M 1 7 8 2

Tartalomjegyzék

1. Bevezetés	2
2. Topológia [4]	4
2.1. Topológiai eszközök	4
2.2. Alkalmazás spinrendszerre	5
3. Modellek dupla kvantumpötty rendszerre	7
3.1. Exchange-modell	7
3.2. Hubbard-modell	8
4. Schrieffer–Wolff-transzformáció [6]	10
4.1. Hubbard-modell transzformálása exchange-modellbe	11
5. Analitikus eredmények a degenerációs pontokra	14
5.1. Kölcsönhatás egyszerűsítése bázistranszformációval	14
5.2. Bázistranszformáció hatása a Zeeman-tagra	15
5.3. Degenerációs pontok helye izotrop Hubbard-modellben	16
5.4. Degenerációs pontok iránya általános Hubbard-modellben	18
5.5. Hat degenerációs pont feltétele	19
5.6. Degenerációk az exchange-modellben	24
6. További rendszerek	32
6.1. Tripla pötty feles spinekkel	32
6.2. Nitrogén-vakancia centrum gyémántban [8]	34
6.3. Kobalt spin-3/2 dimer [9]	35
6.4. Króm spin-5/2 trimer [10]	36
7. Összefoglalás	38
8. Függelék	39
8.1. Egy feles spin mágneses térben	39
8.2. Két nem kölcsönható spin	40
8.3. Kölcsönhatás csökkenti az alapállapot energiáját	40
8.4. Forgatás nélkül hat degenerációs pont van	40
8.5. Effektív g-tenzor determinánsa	41
Irodalomjegyzék	43

1. Bevezetés

Ez még mindig változatlan Kölcsönható spinrendszerek kutatása több évtizede a szilárdtestfizika egyik legaktívabb területe. A spinrendszerek viselkedését meghatározza a spinek között fellépő kicserélődési kölcsönhatás, az esetleges spin-pálya kölcsönhatás és a külső mágneses tér összjátéka. Sok esetben komoly elméleti kihívást jelent ezen rendszerekről bármilyen állítást is megfogalmazni.

Korábbi dolgozatomban bemutattam a topológia újszerű felhasználásával, hogy ezen rendszerekben általános esetben mindig létezik olyan mágneses tér érték, ahol az alapállapot degenerált [1]. Az ilyen mágneses tér értékek a mágneses paramétertérben diszkrét pontokként mutatkoznak, melyeket mágneses Weyl-pontoknak nevezünk el, utalva a Weyl-félfémekkel való matematikai analógiára, ahol a megszokott hullámszám tér helyett esetünkben a mágneses térnek van kiemelt szerepe [2].

Az általam eddig vizsgált rendszer két kölcsönható feles spint tartalmazott, mivel kísérletileg ezt tudtuk megvalósítani dupla kvantumpöttyökbe csapdázott elektronok segítségével [3]. Egy ilyen rendszerben a teljes topológikus töltés, más néven a Chern-szám kettő, ezért két degenerációs pontot vártunk a paramétertérben. Mivel a spinrendszert leíró Hamilton-operátor kölcsönható része időtükrözésre invariáns, ezért a két pont egymás időtükrözött párja, azaz ellentétes mágneses térnél jelentkeznek. Ezen pontok létét a kísérletekkel is igazoltuk.

Azonban a rendszer teljes topológikus töltése nem feltétlenül egyezik meg a degenerációs pontok számával, könnyedén lehet olyan Hamilton-operátort konstruálni, melyben magas fokú szimmetria folytán a koordinátatengelyek mentén összesen hat degenerációs pont van jelen. Ezen pontokat a szimmetria mellett ugyanakkor a topológia is védi, mely robusztus, tehát a szimmetria folytonos lerontásával nem lehet a degenerációkat felhasítani, a pontok csupán arrébb vándorolnak a paramétertérben. Ez alapján tehát hat pont esete is generikusnak mondható. Ez persze felveti a kérdést, hogy milyen esetek lehetnek, még ezenkívül, és az is kérdéses továbbá, hogy a degenerációs pontok miként osztoznak a teljes Chern-számon.

Munkám során a rendszer analitikus és numerikus vizsgálatával egyaránt keresem a felmerült kérdésekre a választ. Kitérek továbbá olyan kérdésekre is, hogy a spinek közötti csatolás megváltoztatása (izotrop/anizotrop, ferro/antiferromágneses stb.) miként hat a Weyl-pontokra. Mivel hogy a két-elektron rendszer egy nagyon speciális, egyszerű esete a kölcsönható spinrendszereknek. Érdekes kérdés, hogy bonyolultabb rendszerek esetén mit tud állítani a topológia és mit tapasztalunk a numerikából. Ehhez több vagy nagyobb spineket tartalmazó rendszereket fogok megvizsgálni. A dolgozat fő célja topológia segítségével a lehető legtöbb általános állítást megfogalmazni.

2. Topológia [4]

2.1. Topológiai eszközök

A topológia alkalmazása során az adiabatikus folyamatoknál használt fogalmakat vesszük alapul, mint a Berry-konnxio, Berry-görbület, és a Chern-szám. Vegyük a Hamilton-operátorok egy olyan családját, ami külső paramétertől függ. Ez a szilárdtestfizikában a topológiát elsőként alkalmazó munkákban az elektronok hullámszáma volt. Esetünkben, mivel hogy spinrendszereket vizsgálunk, a mágneses tér lesz. Ekkor az alapállapotra a sajátérték-egyenletet:

$$H(\mathbf{B}) = E_0(\mathbf{B}) |\Psi_0(\mathbf{B})\rangle, \quad (2.1)$$

ahol a Hamilton-operátor, és így az alapállapot és alapállapot energiája is \mathbf{B} paramétertől függ. A Berry-konnxiót definiáló képlet:

$$\mathcal{A} = i \langle \Psi_0(\mathbf{B}) | \nabla_{\mathbf{B}} \Psi_0(\mathbf{B}) \rangle, \quad (2.2)$$

mely egy valós vektormennyiség. Ez valamilyen módon az alapállapot megváltozását mutatja a mágneses tér függvényében, de mértékfüggő mennyiség, így nem lehet fizikai jelentése. Ahhoz, hogy mértékfüggetlen mennyiséget kapjunk, venni kell a Berry-konnxio rotációját:

$$\mathcal{B}(\mathbf{B}) = \nabla_{\mathbf{B}} \times \mathcal{A}(\mathbf{B}), \quad (2.3)$$

ez a Berry-görbület. Nem véletlen az \mathcal{A} és \mathcal{B} jelölés, hiszen a két mennyiség között ugyanaz a kapcsolat, mint vektorpotenciál és mágneses tér között, de a kalligrafikus írásmód utal arra, hogy ez két új absztrakt mennyiség. Habár a Berry-görbület argumentumában a valós mágneses tér szerepel, a két mennyiség között nincsen szoros, közvetlen kapcsolat. Egy fontos különbség, hogy a Berry-görbület felületi integrálja zárt felület mentén lehet nemnulla. Ezt a mennyiséget egy 2π normálással a felület Chern-számának nevezzük:

$$C(\partial V) = -\frac{1}{2\pi} \oint_{\partial V} \mathcal{B} \cdot d\mathbf{S} \quad (2.4)$$

Fontos tulajdonsága, hogy egy mértékinvariáns egész szám. Ha a Chern-szám nemnulla, az azt jelenti, hogy a felületen belül valahol \mathcal{B} szinguláris, ilyenkor az alapállapot degenerált.

Numerikus számításokhoz ezen mennyiségek diszkrét megfelelőit használjuk.

2.2. Alkalmazás spinrendszerre

A topológiai fogalmak bevezetése után néhány egyszerű példán keresztül bemutatom, hogy a topológia hogyan alkalmazható spinrendszerekre.

Spinrendszerek esetén a mágneses tér elsősorban a Zeeman-tagban jelenik meg, ami egy feles spin esetén

$$H_Z = -\mu_B \mathbf{B}^T \hat{\mathbf{g}}^T \mathbf{S} = -\mu_B \mathbf{B}_{\text{eff}}^T \mathbf{S} \quad (2.5)$$

formában írható, ahol $\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e} \approx 5,8 \cdot 10^{-2}$ meV/T a Bohr-magneton, \mathbf{B} a mágneses tér, $\mathbf{S} = \frac{\hbar}{2} \boldsymbol{\sigma}$ a Pauli-mátrixokból képezett spinvektor-operátor, és $\hat{\mathbf{g}}$ pedig a Landé-féle g-faktor tenzoriális megfelelője, egy kilenc független valós komponensből álló mátrix. Ez utóbbi hatására tekinthetünk úgy, hogy a spin egy $\hat{\mathbf{g}}\mathbf{B} = \mathbf{B}_{\text{eff}}$ effektív mágneses teret érzékel, így alapállapotban ezzel egy iránnyal megegyezően áll be. A g-tenzor a poláris dekompozíció tétele alapján felbontható egy speciális ortogonális mátrix és egy szimmetrikus mátrix szorzatára: $\hat{\mathbf{g}} = \hat{\mathbf{O}}\hat{\mathbf{G}}$. Ezt felhasználva a Zeeman-felhasadás nagysága:

$$\Delta E^2 = \mu_B^2 \mathbf{B}_{\text{eff}}^2 = \mu_B^2 \mathbf{B}^T \hat{\mathbf{g}}^T \hat{\mathbf{g}} \mathbf{B} = \mu_B^2 \mathbf{B}^T \hat{\mathbf{G}}^2 \mathbf{B}, \quad (2.6)$$

csak a szimmetrikus résztől függ. Az ortogonális rész nem határozható meg a felhasadás mérésével, viszont a megváltozása mérhető g-tenzor moduláció segítségével [5].

Ha az effektív mágneses tér nulla, az alapállapot degenerált. Ez a valós mágneses térben, mint paramétertérben általában az origóban jelentkezik. A degenerációs pont Chern-száma a g-tenzor determinánsának előjelével egyezik meg. Ez könnyedén kiszámítható feles spinre abban az esetben, ha g-tenzor az egységmátrix (Függelék 8.1), és ebből általános pozitív determinánsú g-tenzorra pedig egy folytonos deformációval juthatunk. A folytonos deformáció¹ a mindig egész Chern-számot folytonosan változtatja, így az konstans. Negatív determinánsú g-tenzorhoz az átmenet nem folytonos, mivel ahhoz az egyik sajátértéknek nullán kell átmennie. Ilyenkor a degenerációs pontok a g-tenzor nulla sajátértékhez tartozó sajátalterén (origón átmenő egyenes, sík, vagy a teljes tér) helyezkednek el, így azokat nem lehet körbevenni egy felülettel, azaz a Chern-szám nem értelmezhető.

Több spin esetén a Hamilton-operátorban az egyes spinek Zeeman-tagjai összegződnek:

$$H_Z = -\mu_B \mathbf{B}^T \sum_i \hat{\mathbf{g}}_i^T \mathbf{S}_i = -\mu_B \sum_i \mathbf{B}_{\text{eff},i}^T \mathbf{S}_i, \quad (2.7)$$

¹A g-tenzor lényegében a mágneses tér lineáris átskálázását okozza, ezt addig változtathatjuk folytonosan, amíg az elfajult eseteket elkerüljük. A pozitív és negatív determinánsú g-tenzorok esetére tekinthetünk két külön problémaként, melyekre találtunk egy általános képletet, de nincsen folytonos átmenet a kettő között.

ahol \mathbf{S}_i az egyes Hilbert-tereken ható spinoperátorok, pl.: $\mathbf{S}_2 = \frac{\hbar}{2} \cdot \mathbf{1} \otimes \boldsymbol{\sigma} \otimes \mathbf{1} \otimes \dots \otimes \mathbf{1}$. A topologikus mennyiségek több nem kölcsönható spin esetén összegződnek (Függelék 8.2), mivel ekkor az alapállapot az egyrészezske alapállapotok tenzorszorzata, tehát az origóban levő degenerációs pont Chern-száma az egyes g-tenzorok determinánsának előjeleinek összegével egyezik meg.

Kölcsönható spinek esetében a fenti érvelés már nem állja meg a helyét, de belátható, hogy bizonyos megszorításokkal a kölcsönhatás nem változtatja meg a rendszer teljes topologikus töltését. Ehhez először tegyük fel, hogy a kölcsönhatás nem függ a mágneses tértől:

$$H(\mathbf{B}) = H_Z(\mathbf{B}) + H_{int} \quad (2.8)$$

Ekkor egy λ paraméterrel átskálázva a Hamilton-operátort és kihasználva a Zeeman-tag linearitását, kapjuk az alábbi eredményt:

$$H(\lambda\mathbf{B}) = \lambda H_Z(\mathbf{B}) + H_{int} = \lambda \left[H_Z(\mathbf{B}) + \frac{1}{\lambda} H_{int} \right] \quad (2.9)$$

A sajátértékegyenlet linearitása miatt az alapállapot nem függ a kiemelt λ skálafaktortól, így a topologikus mennyiségek sem függenek. Ha növeljük a mágneses tér nagyságát, az egyenértékű azzal, mintha konstans mágneses tér mellett a kölcsönhatás nagyságát csökkentenénk. Ezt kihasználva tudjuk kiszámítani a teljes rendszer Chern-számát. Először vegyünk egy B sugarú gömböt az origó körül, és a sugárral tartsunk végetlenbe:

$$C_\infty = \lim_{B \rightarrow \infty} C(B) = \sum_i \det \hat{\mathbf{g}}_i, \quad (2.10)$$

ahol \mathbf{g}_i az i -edik spin g-tenzora. Határértékben a nem kölcsönható spinrendszer teljes Chern-számát kapjuk vissza. A (2.9) képlet alapján akkor is elhanyagolható a kölcsönhatás a Zeeman-tag mellett, ha az függ a mágneses tértől, viszont korlátos nagyságú.

Belátható, hogy nagyobb spin esetén a Chern-szám $2S \text{sgn} \det(\hat{\mathbf{g}})$, ahol S a spin nagysága, ekkor a rendszer teljes topologikus töltése::

$$C_\infty = \sum_i 2S_i \text{sgn} \det \hat{\mathbf{g}}_i. \quad (2.11)$$

Ha a teljes Chern-szám nemnulla, akkor valahol a mágneses térben létezik legalább egy degenerációs pont, amit nem lehet felhasítani a Hamilton-operátor folytonos deformációjával² csak elmozdítani lehet, felhasítani nem.

²A kölcsönhatás esetén a folytonos deformáció alatt azt értem, hogy a Hamilton-operátor mátrixelemei folytonosan változnak

3. Modellek dupla kvantumpötty rendszerre

A korábbi munkámban bemutatott [1] két kölcsönható feles spint dupla kvantumpötty-be csapdázott elektron párral valósítottuk meg. A kísérletben mindkét pöttyön egy-egy elektron helyezkedett el. Ezt a rendszert több modell-el is leírhatjuk, melyek közül kettőt mutatok be az alábbiakban.

Az exchange-modell kifejezetten egy spinrendszert ír le és csak spin szabadsági foka van, míg a Hubbard-modell rendelkezik a spin mellett betöltés szabadsági fokkal is és így valamivel közvetlenebb a kapcsolata a kísérleti megvalósításhoz. Később látni fogjuk, hogy a két modell bizonyos határesetben megegyezik.

3.1. Exchange-modell

Miután a modellben csak a spin szabadsági fok szerepel, ezért a Hilbert-tér négy dimenziós. A kölcsönhatást

$$H_{int} = \mathbf{S}_L^T \hat{\mathbf{J}} \mathbf{S}_R \quad (3.1)$$

formában írhatjuk fel, ahol általános esetben $\hat{\mathbf{J}}$ egy kilenc független valós komponenssel rendelkező mátrix.

Ha a kölcsönhatás izotrop, akkor mindössze egy független komponens van, J egy skalár. Ilyenkor a két spin a párhuzamos beállást preferálja. Előjeltől függően lehet a kölcsönhatás ferromágneses, ekkor az azonos irány az energetikailag kedvezőbb, vagy antiferromágneses, ilyenkor pedig az ellentétes beállítás a kedvező. Ha $\hat{\mathbf{J}}$ szimmetrikus mátrix, akkor megfelelő bázisválasztással diagonalizálható. A különböző Heisenberg-modellekben általában diagonális J-tenzorokat használnak, pl. egyik példa az Ising-modell, ahol csak az egyik diagonális komponens nemnulla. A teljesen antiszimmetrikus J-tenzorra is van példa, a Dzsalsinszkij-Moriya-kölcsönhatást egy ilyen tenzorral írjuk le. Ekkor a független paraméterek száma három, és a kölcsönhatás két spin között $\mathbf{D}_{12} \cdot (\mathbf{S}_1 \times \mathbf{S}_2)$ formában is írható, ilyenkor az egymással 90° -os szöget bezáró spinkonfigurációk preferáltak.

3.2. Hubbard-modell

Az exchange-modellhez képest a Hubbard-modellben figyelembe vesszük az elektronok töltés szabadsági fokát is. Az előző négy állapoton túl az is megengedett, hogy a két elektron azonos pötyyön helyezkedjen el. Feltéve, hogy a pálya gerjesztési energia kellően nagy, a két elektron azonos pályára kerül. Ekkor a Pauli-elvnek megfelelően szinglet párt alkotnak. A két ilyen konfigurációt is figyelembe véve hat dimenziós Hilbert-teret kapunk. A bázis: $|\uparrow\downarrow, 0\rangle, |\uparrow, \uparrow\rangle, |\uparrow, \downarrow\rangle, |\downarrow, \uparrow\rangle, |\downarrow, \downarrow\rangle, |0, \uparrow\downarrow\rangle$, ahol $|i, j\rangle$ -ben az i (j) a bal (jobb) oldali kvantumpötyyön található elektronok számát, illetve spin állapotát jelöli. A továbbiakban használni fogom a csak elektronszámot jelölő $(0,2)$, $(2,0)$, $(1,1)$ jelölést is. Az utóbbi egyidejűleg négy állapotot jelöl.

A Hamilton-operátor diagonális elemeit nulla mágneses tér esetén a kvantumpötyyök kapuelektrodákkal szabályozott on-site energiája ($\epsilon_{L/R}$), valamint az ugyanazon pötyyön tartózkodó elektronok között ható Coulomb-kölcsönhatás ($U_{L/R}$) határozza meg:

$$H_0 = \sum_{\gamma \in \{L,R\}} n_\gamma \epsilon_\gamma + \frac{1}{2} \sum_{\gamma \in \{L,R\}} U_\gamma n_\gamma (n_\gamma - 1), \quad (3.2)$$

ahol $n_{L/R}$ a kvantumpötyyök betöltöttsége. A diagonális elemek csak a betöltéstől függenek, így a hat dimenziós bázisunkban három különböző érték lehetséges:

$$\begin{aligned} E_{(2,0)} &= 2\epsilon_L + U_L \\ E_{(1,1)} &= \epsilon_L + \epsilon_R \\ E_{(0,2)} &= 2\epsilon_R + U_R \end{aligned} \quad (3.3)$$

Mivel számunkra az energiaszintek közötti különbség a fontos, az $(1,1)$ állapotok energiáját választhatjuk nullának. A másik két energiára pedig az egyszerűség kedvéért a $V_{L/R} = U_{L/R} + \epsilon_{L/R} - \epsilon_{R/L}$ jelölést használom a későbbiekben.

Ebben a modellben a spinek kölcsönhatása a korábban említett Pauli-elvből és a elektronok kvantumpötyyök közötti alagutazásából (tunneling) ered. Az alagutazást a következő tag írja le:

$$H_t = \sum_{ss' \in \{\uparrow, \downarrow\}} \left(t^{ss'} c_{Ls}^\dagger c_{Rs'} + h.c. \right), \quad (3.4)$$

ahol $c_{\gamma s}^\dagger$ és $c_{\gamma s}$ az $\gamma \in \{L, R\}$ kvantumpötyyön s spinű elektront keltő- és eltüntető operátorok, $t^{ss'} = t_0 - i\mathbf{t} \cdot \boldsymbol{\sigma}_{ss'}$ pedig az alagutazás amplitúdóját jellemző SU(2) mátrix négy paraméterrel. A t_0 elem felel meg a spin-megőrző alagutazásért, míg spin-pálya kölcsönhatás jelenlétében figyelembe kell vennünk, hogy a spin nem feltétlenül őrződik

meg az alagutazás során, ezt egy $\mathbf{t} = (t_x, t_y, t_z)$ vektoriális taggal vehetjük figyelembe. Az elfordulás a \mathbf{t} vektor körül történik és a szögére teljesül, hogy $\sin(2\alpha) = |\mathbf{t}|/t$. A kölcsönhatás erősségét a $t^2 = t_0^2 + \mathbf{t}^2$ mennyiség jellemzi.

Mátrixos formában a tunneling-tag az alábbi módon néz ki:

$$H_t = \begin{pmatrix} 0 & t_y - it_x & -t_0 + it_z & t_0 + it_z & t_y + it_x & 0 \\ t_y + it_x & 0 & 0 & 0 & 0 & t_y + it_x \\ -t_0 - it_z & 0 & 0 & 0 & 0 & -t_0 - it_z \\ t_0 - it_z & 0 & 0 & 0 & 0 & t_0 - it_z \\ t_y - it_x & 0 & 0 & 0 & 0 & t_y - it_x \\ 0 & t_y - it_x & -t_0 + it_z & t_0 + it_z & t_y + it_x & 0 \end{pmatrix} \quad (3.5)$$

4. Schrieffer–Wolff-transzformáció [6]

A Schrieffer–Wolff-transzformáció az időfüggetlen perturbációszámítás egy igen hatékony módja, ún. kvázidegenerált perturbációszámítás, amely során egy bonyolultabb, nagyobb dimenziós Hamilton-operátort annak egy kisebb dimenziós altérére szorítjuk le így egyszerűsítve a problémát. Hatékonysága abban rejlik, hogy nem tesz különbséget a degenerált és nem degenerált perturbációszámítás között. A Hamilton-operátor a megszokott módon két részből áll: egy H^0 tagból ismert E_n sajátértékekkel és $|\Psi_n\rangle$ sajátvektorokkal, valamint egy H' tagból, amely perturbatív jellegű.

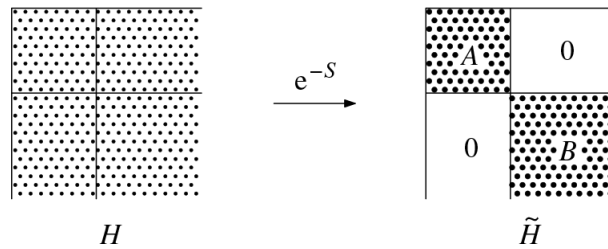
$$H = H^0 + H' \quad (4.1)$$

A transzformáció azon a feltételeken alapul, hogy H^0 struktúrájából adódóan a sajátállapotokat egy alacsonyabb ($A = \{|\Psi_m\rangle\}$) és egy magasabb ($B = \{|\Psi_l\rangle\}$) energiás részhalmazra oszthatjuk, amelyek között a H' csatolás gyenge a két altér energia különbségéhez képest.

Számunkra az A altér az érdekes, ezért, megkonstruáljuk az e^{-S} unitér operátort, úgy, hogy a

$$\tilde{H} = e^{-S} H e^S \quad (4.2)$$

transzformációval kapott Hamilton-operátorban az A és B altérek közötti $\langle \Psi_l | \tilde{H} | \Psi_m \rangle$ mátrixelemek eltűnjenek H' kívánt rendjéig (1. ábra).



1. ábra. A Schrieffer–Wolff-transzformáció lényege, hogy a Hamilton-operátort úgy transzformáljuk, hogy az blokkdiagonális formát öltön.

A számolás során felbontjuk a Hamilton-operátort $H = H^0 + H^1 + H^2$ tagokra, ahol H^1 blokkdiagonális, csak az A és B altéren belül vannak mátrixelemei, míg H^2 -nek csak a két altér között vannak (2. ábra).

Felhasználva, hogy S anti-hermitikus, és \tilde{H} -ra alkalmazva a Haussdorff-kifejtést, azt kapjuk, hogy S -nek H^2 -höz hasonló struktúrájúnak kell lennie.

Feltéve, hogy felírhatjuk az $S = S^{(1)} + S^{(2)} + \dots$ sorfejtést, szukcesszíven meghatározhatjuk S minden rendjét az előzőekből, azt kihasználva, hogy \tilde{H} minden rendjében

$$\begin{array}{c}
\begin{array}{|c|c|} \hline \text{dots} & \text{dots} \\ \hline \text{dots} & \text{dots} \\ \hline \end{array} & = & \begin{array}{|c|c|} \hline \text{dots} & 0 \\ \hline 0 & \text{dots} \\ \hline \end{array} & + & \begin{array}{|c|c|} \hline \text{dots} & 0 \\ \hline 0 & \text{dots} \\ \hline \end{array} & + & \begin{array}{|c|c|} \hline 0 & \text{dots} \\ \hline \text{dots} & 0 \\ \hline \end{array} \\
H & & H^0 & & H^1 & & H^2
\end{array}$$

2. ábra. A Hamilton-operátor perturbatív tagját felbontjuk két speciálisan struktúrált blokkmátrixra.

blokkdiagonális formájú kell legyen. Ekkor S első két eleme:

$$\begin{aligned}
S_{ml}^{(1)} &= -\frac{H'_{ml}}{E_m - E_l} \\
S_{ml}^{(2)} &= \frac{1}{E_m - E_l} \left[\sum_{m'} \frac{H_{mm'} H_{m'l}}{E_{m'} - E_l} - \sum_{l'} \frac{H_{ml'} H_{l'l}}{E_m - E_{l'}} \right],
\end{aligned} \tag{4.3}$$

ha a kapott kifejezéseket visszahelyettesítjük \tilde{H} kifejtésébe, akkor megkapjuk rendről-rendre a transzformációra a képleteket:

$$\begin{aligned}
\tilde{H}_{mm'}^{(0)} &= H_{mm'}^0 \\
\tilde{H}_{mm'}^{(1)} &= H'_{mm'} \\
\tilde{H}_{mm'}^{(2)} &= \frac{1}{2} \sum_l H'_{ml} H'_{lm'} \left[\frac{1}{E_m - E_l} + \frac{1}{E_{m'} - E_l} \right]
\end{aligned} \tag{4.4}$$

A nullad- és elsőrendű tagok mindössze az eredeti Hamilton-operátor H^0 és H' tagja levetítve a kisebb altérre, az első nemtriviális tag a másodrendű tag.

Fontos megjegyezni, hogy magasabb rendben is a nevezőkben csak olyan energiakülönbségek jelennek meg, ahol az egyik tag az A halmaz, másik pedig a B halmaz állapotai közül való. Az A és B halmazokat pedig úgy határozzuk meg, hogy energiában jól szeparáltak legyenek, ezért a hagyományos perturbációs számítással ellentétben akkor is alkalmazhatjuk a transzformációs képleteket, amikor A degenerált.

4.1. Hubbard-modell transzformálása exchange-modellbe

Ha a Hubbard-modellben az egy pöttyön tartózkodó elektronok között nagy a Coulomb-kölcsönhatás, akkor két elektron számára kedvezőtlen ugyanazon a pöttyön tartózkodni, a (2,0) és (0,2) betöltöttségű állapotok nagy energiájúak, melyeket Schrieffer–Wolff-transzformációval eliminálhatunk. Ezzel a betöltés szabadsági fokot veszítjük el, és

érezhetően, egy exchange-modellhez hasonlókat kapunk eredményül, mivel csak a spin szabadsági fokok maradnak meg.

A transzformálandó mátrix:

$$H_{6 \times 6} = H_0 + H_t = \begin{pmatrix} V_L & t_y - it_x & -t_0 + it_z & t_0 + it_z & t_y + it_x & 0 \\ t_y + it_x & 0 & 0 & 0 & 0 & t_y + it_x \\ -t_0 - it_z & 0 & 0 & 0 & 0 & -t_0 - it_z \\ t_0 - it_z & 0 & 0 & 0 & 0 & t_0 - it_z \\ t_y - it_x & 0 & 0 & 0 & 0 & t_y - it_x \\ 0 & t_y - it_x & -t_0 + it_z & t_0 + it_z & t_y + it_x & V_R \end{pmatrix} \quad (4.5)$$

ahol az alacsony energiás állapotok az $m \in \{2, 3, 4, 5\}$ indexekhez, míg a nagy energiás állapotok az $l \in \{1, 6\}$ indexekhez tartoznak.

Az első nem eltűnő járulékot a másodrendű korrekció adja. Alkalmazva a (4.4) formulát, a transzformált mátrix a következő alakot ölti:

$$\tilde{H}_{mm'} = -\frac{1}{2} \left[\frac{1}{V_L} + \frac{1}{V_R} \right] \sum_{l \in \{1, 6\}} (H_t)_{ml} (H_t)_{lm'} = -\frac{1}{4} \left[\frac{1}{V_L} + \frac{1}{V_R} \right] (H_{6 \times 6}^2)_{mm'}, \quad (4.6)$$

ahol kihasználtuk, hogy a tunneling-mátrix nagyon speciális alakú, $l \in \{1, 6\}$ esetén teljesíti $(H_{6 \times 6}^2)_{mm'} = 2(H_t)_{ml}(H_t)_{lm'}$ egyenlőséget, mivel a transzformációs képletben szereplő szummázás a sok nulla elemnek és az $1 \leftrightarrow 6$ indexcserére való szimmetriának köszönhetően a mátrix önmagával való szorzását adja.

Egy 2x2-es önadjungált mátrixnak összesen 4 független valós paramétere lehet, és kifejthető az $\{\mathbf{1}, \sigma_x, \sigma_y, \sigma_z\}$ bázisban, hasonlóan egy 4x4-es önadjungált mátrixnak 16 független valós paramétere lehet, így a bázis, amin kifejthető: $\{\mathbf{1} \otimes \mathbf{1}, \sigma_x \otimes \mathbf{1}, \dots, \sigma_z \otimes \sigma_z\}$. Ha a kapott Hamilton-operátort ezen bázison kifejtjük, akkor visszkapjuk az exchange-modell J-tenzorának komponenseit. *Megjegyzés: ezt a gondolatmenetet általánosíthatjuk N spin esetén $2^N \times 2^N$ -es mátrixokra is, de ekkor figyelembe kell venni, hogy a kifejtés során előfordulhat három-, négy-, ... N -spin kölcsönhatás is.*

A kölcsönhatás időtükrözési szimmetriája megköveteli, hogy, a hat darab $\mathbf{1} \otimes \sigma_i$ és $\sigma_i \otimes \mathbf{1}$ tagnak az időtükrözési szimmetria miatt el kell tűnnie.

A kifejtés során az

$$H_{4x4} = \frac{t^2}{4\hbar^2} \left[\frac{1}{V_L} + \frac{1}{V_R} \right] \left(4\mathbf{S}_L^T \hat{\mathbf{R}} \mathbf{S}_R - \hbar^2 \right) \quad (4.7)$$

alakú exchange-tagot kapjuk eredményül, ahol

$$\hat{\mathbf{R}} = \frac{1}{t^2} \begin{pmatrix} t^2 - 2t_y^2 - 2t_z^2 & -2t_0t_z + 2t_xt_y & 2t_0t_y + 2t_xt_z \\ 2t_0t_z + 2t_xt_y & t^2 - 2t_x^2 - 2t_z^2 & -2t_0t_x + 2t_yt_z \\ -2t_0t_y + 2t_xt_z & 2t_0t_x + 2t_yt_z & t^2 - 2t_x^2 - 2t_y^2 \end{pmatrix} \quad (4.8)$$

egy dimenziótlan mátrix. Az így kapott $\hat{\mathbf{R}}$ első ránézésre általánosnak tűnik, de valójában 9 helyett csak 3 paramétertől függ, továbbá egy SO(3) mátrix, ami pontosan ugyanazt a forgatást írja le a valós térben, mint amit a tunneling tagot definiáló (3.4) képletben szereplő $t^{ss'}$ mátrix ír le a spinortéren. A kicserélődési tag amplitúdója pozitív előjelű, így a forgatást leszámítva ez egyfajta antiferromágneses kölcsönhatást le, a két spin számára kedvező az ellentétes beállítás. Ezt úgy képzelhetjük el (csak spinmegőrző alagutazást feltételezve), hogy olyan másodrendű folyamatok játszódnak le, ahol az egyik elektron időnként átalagutazik a másik kvantumpöttyre majd vissza. Ezt akkor tudja megtenni, ha a spinjének ellentétes irányú a beállása, mint a másik pöttyön tartózkodó elektron spinjének. Ha alagutazás közben elfordul a spin, akkor energetikailag az a kedvező, ha annyit fordul el a spin, amennyi a két pöttyön a kvantálási tengelyek által bezárt szög.

5. Analitikus eredmények a degenerációs pontokra

Ebben a szakaszban megmutatom, hogy a degenerációs pontok helyére a két modellben milyen analitikus formulák adhatóak. A Hubbard-modell esetében tetszőleges paraméterszethez megadható a degeneráció pontok helye analitikusan, így a Schrieffer–Wolff-transzformációval kapott exchange-modell esetén is van analitikus eredmény, de ezen és pár speciális eseten kívül az általános exchange-modellben már csak numerikus megoldást alkalmaztam. A számolások során elhagyom a \hbar és μ_B természeti állandókat, valamint a spinoperátorokból az $1/2$ -et.

5.1. Kölcsönhatás egyszerűsítése bázistranszformációval

Az előző részben szemléletes képet kaphattunk a Hubbard-modell kölcsönható tagjáról. Át tudunk térni egy olyan bázisba, ahol ez a tag egyszerűbb formájú, csak spinmegőrző alagutazást tartalmaz. Ehhez végezzünk egy $SU(2)$ forgatást az egyik spin bázisán. A transzformációt a

$$S = s_0\sigma_0 - i\mathbf{s} \cdot \boldsymbol{\sigma} \quad (5.1)$$

mátrixszal végezhetjük, ahol $s_0^2 + s_x^2 + s_y^2 + s_z^2 = 1$. A bal- és jobboldali spin bázisát külön-külön a

$$\begin{aligned} S_R &= \text{BlockDiag}(1, \sigma_0 \otimes S, 1) \\ S_L &= \text{BlockDiag}(1, S \otimes \sigma_0, 1) \end{aligned} \quad (5.2)$$

mátrixokkal forgathatjuk el. A transzformáció a $(2,0)$ és $(0,2)$ állapotokat érintetlenül hagyja. Az S mátrix \mathbf{s} vektor körül forgat $2 \cos^{-1}|\mathbf{s}|$ szöggel. Forgassuk el a bal oldali spint, példaként az $1,2$ indexű tag kiejtése:

$$\begin{aligned} (H'_t)_{1,2} &= \sum_{i,j} (S_L)_{1,i} (H_t)_{i,j} (S_L^{-1})_{j,2} = \sum_{j=1}^2 (H_t)_{1,2j} (S^{-1})_{j,1} = \\ &= (t_y - it_x)(s_0 - is_z) + (t_0 + it_z)(-s_y - is_x) = 0, \end{aligned} \quad (5.3)$$

melyből látható, hogy az ideális választás

$$(s_0, \mathbf{s}) = (t_0, \mathbf{t})/t. \quad (5.4)$$

Elvégezve a kölcsönhatás mátrixán a transzformációt, valóban megkapjuk a tisztán spinmegőrző tagot tartalmazó mátrixot. A kölcsönhatás nagysága nem változik az új

bázisban, így t_0 helyére t kerül:

$$H'_t = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -t & t & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -t & 0 & 0 & 0 & 0 & -t \\ t & 0 & 0 & 0 & 0 & t \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -t & t & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (5.5)$$

Az új bázis választás annak felel meg, hogy a két kvantumpöttyön használt spin bázis éppen úgy áll egymáshoz képest elfordulva, ahogyan a két kvantumpötty között alagutazó elektron spinje fordul el.

A bázisválasztás során a spinforgató hopping eltüntetéséhez csak a két spin bázisának relatív elfordulására kapunk megkötést. Ha a két spin bázisát együtt forgatjuk a

$$S_{L,R} = \text{BlockDiag}(1, S \otimes S, 1) \quad (5.6)$$

mátrix segítségével, akkor a H'_t kölcsönható tag nem változik meg.

5.2. Bázistranszformáció hatása a Zeeman-tagra

Ha spinek bázisán elvégzünk egy transzformációt, akkor a Hamilton-operátor Zeeman-tagja is várhatóan meg fog változni.

$$H_Z = -\mathbf{B}_{\text{eff,L}}^T \boldsymbol{\sigma} \otimes \mathbb{1} - \mathbb{1} \otimes \mathbf{B}_{\text{eff,R}}^T \boldsymbol{\sigma} \quad (5.7)$$

A baloldali spin bázisának transzformálása csak a baloldali spin Zeeman-tagját változtatja meg, ugyanígy a jobboldali esetén. Általános S mátrixot választva a transzformációt könnyedén végig tudjuk számolni a Pauli-mátrixok algebráját kihasználva:

$$(s_0\sigma_0 - i\mathbf{s}\cdot\boldsymbol{\sigma})(\mathbf{B}\cdot\boldsymbol{\sigma})(s_0\sigma_0 + i\mathbf{s}\cdot\boldsymbol{\sigma}) = [(s_0^2 - s^2)\mathbf{B} + 2s_0(\mathbf{s}\times\mathbf{B}) + 2(\mathbf{s}\cdot\mathbf{B})\mathbf{s}]\cdot\boldsymbol{\sigma} = (\hat{\mathbf{R}}\mathbf{B})\cdot\boldsymbol{\sigma}, \quad (5.8)$$

ahol $\hat{\mathbf{R}}$ nem más, mint S forgatás $\text{SO}(3)$ -beli megfelelője, ami azt jelenti, hogy a bázis elforgatása egyenértékű az effektív mágneses terek elforgatásával. Ennek hatása a g-tenzorra egy ortogonális mátrixszal való szorzás balról, de ez fizikailag nem mérhető, mivel a Zeeman-felhasadásban a (2.6) képlet alapján csak a mátrix szimmetrikus komponense játszik szerepet, a felhasadás az effektív mágneses tér nagyságától függ, forgatás során ez nem változik. Ezért a spin bázisát tetszőlegesen megválaszthatjuk.

Behelyettesítve S -be a spinforgató hopping eltüntetéséhez alkalmas paramétereket, a kapott $\hat{\mathbf{R}}$ mátrix megegyezik a (4.8)-as képletben szereplő Schrieffer–Wolff-transzformációval kapott ortogonális mátrixszal.

5.3. Degenerációs pontok helye izotrop Hubbard-modellben

Először nézzük a legegyszerűbb, izotrop esetet (g -tenzorok izotropak, és nincsen spinforgató hopping), ami segít megérteni, hogy milyen feltételek mellett találunk degenerációkat a spektrumban. Ha vannak ilyenek, akkor ezek a forgás szimmetria miatt nem diszkrét pontokban, hanem egy zárt gömbfelületen jelentkeznek, és elég csak a mágneses tér nagyságának függvényében vizsgálni a rendszert, így képet kapva, arról, hogy mi a feltétele a degeneráció meglétének. Ilyenkor a paraméterek száma is kevesebb: $g_{L,R}$ a két g -faktor (tegyük fel, hogy pozitívak), t az alagutazás amplitúdója, és $V_{L,R}$ a $(2,0)$ és $(0,2)$ állapotok energiája. A Hamilton-operátor az alábbi egyszerű formát ölti:

$$H = \begin{pmatrix} V_L & 0 & -t & t & 0 & 0 \\ 0 & -(g_L + g_R)B & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -t & 0 & -(g_L - g_R)B & 0 & 0 & -t \\ t & 0 & 0 & +(g_L - g_R)B & 0 & t \\ 0 & 0 & 0 & 0 & +(g_L + g_R)B & 0 \\ 0 & 0 & -t & t & 0 & V_R \end{pmatrix} \quad (5.9)$$

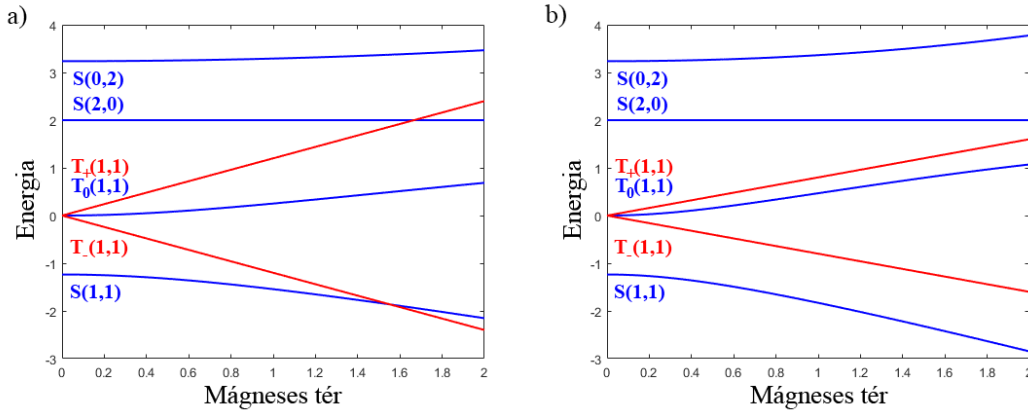
A kölcsönhatás egy szinglet-triplet bázist preferálja, a triplet állapotok sajátállapotok, a szinglet állapot pedig keveredik a $(2,0)$ és $(0,2)$ állapotokkal, így az alapállapot energiája csökken, ezáltal egy szinglet-triplet felhasadás történik. A Zeeman-tag ezzel szemben a spin sajátállapot bázisban lesz diagonális, így mágneses tér jelenlétében keverednek az S és T_0 állapotok.

Legyen $g_{\pm} = g_L \pm g_R$. Láthatóan a T_{\pm} triplet állapotok lecsatolódnak a többi állapotról, ezek energiái $\pm g_{\pm}B$. Ha kellően nagy a mágneses tér, akkor az alapállapot egzaktul a $|\uparrow\uparrow\rangle$ triplet állapot. A maradék négy állapot mátrixa:

$$H = \begin{pmatrix} V_L & -t & t & 0 \\ -t & -g_-B & 0 & -t \\ t & 0 & +g_-B & t \\ 0 & -t & t & V_R \end{pmatrix} \quad (5.10)$$

Ha nincsen kölcsönhatás, akkor a mátrix diagonális, a $|\uparrow\downarrow\rangle$ és $|\downarrow\downarrow\rangle$ spin sajátállapotok

energiája a mágneses tér függvényében $\pm g_- B$ szerint változik, a két magasabb energiájú állapot pedig konstans $V_{L/R}$ energiával rendelkezik. A kölcsönhatás megjelenése csökkenti a szinglet energiáját, így nulla mágneses térnél az energia nulla alá kerül (Függelék 8.3), és ez lesz az alapállapot, viszont az aszimptotikusan viselkedésen nem változtat, nagy tereknél az alapállapot energiája $-|g_-|B$ körül lesz. A g -faktorok pozitivitása miatt $|g_+| > |g_-|$, azaz kellően nagy mágneses térnél az aszimptotikus viselkedés alapján a T_- triplet az alapállapot. Növelve nulláról a mágneses teret, egy bizonyos értéknél az alapállapot degenerált mivel ezen két állapot (triplet és szinglet) a Hamilton-operátor különböző invariáns altereiből kerül ki, nem hibridizálnak (3. ábra).



3. ábra. Az állapotok energiájának változása a mágneses tér nagyságának függvényében. Két triplet (piros) és a többi (kék) között nincsenek mátrixelemek, így azok függetlenül a többi állapottól lineárisan függenek a mágneses tértől. a) Ha a két spin g -faktorainak előjele megegyezik, akkor a lefele tartó piros görbe utoléri a kéket, így van degenerációs pont. b) Ha a g -faktorok előjele eltérő, akkor a triplet sosem lesz alapállapot, így nem alakulhat ki degeneráció. Az ábrához használt paraméterek: $V_{L,R} = 2$, $t = 1$, $g_L = 1$, $g_R = \pm 0.2$

Vegyük azt az egyszerűbb esetet, amikor a dupla kvantumpötty stabilitásdiagramján mindkét pötty $n_{L/R}=1$ -hez tartozó Coulomb-gyémántjának közepén vagyunk: $\epsilon_{L/R} = -\frac{U_{L/R}}{2}$, ekkor $V_{L/R} = \frac{U_L + U_R}{2} = U$. Az (5.10) egyik sajátértéke $E = U$, így ezzel lehet egyszerűsíteni. A maradék három állapotra a sajátértékegyenlet:

$$(U - E)(E^2 - g_-^2 B^2) + 4t^2 E = 0 \quad (5.11)$$

A degeneráció feltétele, hogy az egyik sajátérték megegyezzen a lefele tartó triplet energiájával, $E = -g_+ B$ -t behelyettesítve a sajátértékegyenletbe a $B = 0$ egy triviális meg-

oldással egyszerűsítve (ami a T_0-T_- degenerációnak fel meg) kapjuk, hogy:

$$B_{\text{deg}} = \frac{-U + \sqrt{U^2 + 4t^2 \frac{(g_L + g_R)^2}{g_L g_R}}}{2(g_L + g_R)} \approx \frac{t^2}{U} \left(\frac{1}{g_L} + \frac{1}{g_R} \right), \quad (5.12)$$

A közelítő képlet a $t/U \rightarrow 0$ limeszben érvényes. Ha az általánosabb $V_L \neq V_R$ esetről maradunk, egy olyan harmadfokú egyenletet kapunk, aminek a gyökeinek összege negatív, a szorzatuk pedig pozitív, azaz mindig pontosan egy pozitív valós gyöke van.

Ellentétes előjelű g-faktorok esetén aszimptotikusan nagy mágneses tereknél nem triplet állapot lesz az alapállapot (3.b ábra).

5.4. Degenerációs pontok iránya általános Hubbard-modellben

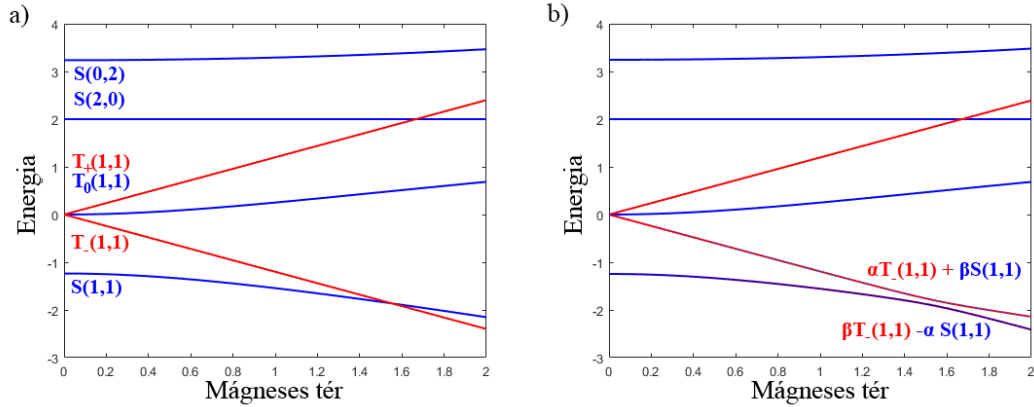
Az izotrop eset alapján azt a feltételt tehetjük a degenerációs pontok meglétéhez, hogy a lokális bázisban értelmezett T_- triplet állapot a Hamilton-operátor sajátállapota, és nagy mágneses tereknél ez az alapállapot. Ehhez az kell, hogy meg tudjuk úgy választani a két spin bázisát úgy, hogy z -irányú mindkét effektív mágneses tér, és ebben a bázisban nincsen spinforgató hopping. A spinforgató részt az egyik effektív mágneses tér elforgatásával tudjuk eliminálni, így már csak az kell, hogy az így kapott két effektív mágneses tér párhuzamos legyen, ami az alábbi sajátvektor problémához vezet:

$$\begin{aligned} \hat{R} \mathbf{B}_{\text{eff,L}} || \mathbf{B}_{\text{eff,R}} \\ (\hat{g}_R^{-1} \hat{R} \hat{g}_L) \mathbf{B} || \mathbf{B} \end{aligned} \quad (5.13)$$

Ez azt jelenti, hogy anizotrop esetben a degenerációs pontok csak speciális irányban jelentkeznek, egy általános irányban a triplet állapotok keveredése miatt felhasad a degeneráció (4. ábra).

Legyen \mathbf{n} olyan irány, amelyre teljesül az (5.13) feltétel, és a hozzá tartozó sajátérték $\lambda_{\mathbf{n}}$. A degenerációs pont számolása során a képletekben a g_L és g_R két szám volt, nem tenzoriális mennyiségek. Anizotrop esethez definiálni kell az adott mágneses tér irányhoz tartozó g-faktorokat. Ha $\mathbf{B} = B\mathbf{n}$, akkor $|\mathbf{B}_{\text{eff,R}}| = B|\hat{g}_R \mathbf{n}|$, ezért $g_R = |\hat{g}_R \mathbf{n}|$. Előjelekre is ügyelve $g_L = \lambda_{\mathbf{n}} g_R$. Mivel a degeneráció meglétének feltétele az, hogy a g-faktorok előjele megegyezzen, ezért a degenerációs pontok $\hat{g}_R^{-1} \hat{R} \hat{g}_L$ mátrix pozitív valós sajátértékeihez tartozó sajátvektorok irányában vannak.

Pozitív determinánsú g-tenzorok esetén a poláris dekompozíció tétele alapján felírhatjuk a g-tenzorokat egy szimmetrikus, pozitív definit, és egy speciális ortogonális



4. ábra. a) Izotrop esetben láthattuk, hogy mindig van degeneráció, ha a g -faktorok előjele megegyezik. b) Anizotrópia esetén általános irányban az állapotok hibridizálnak és a degeneráció felhasad. A hibridizációt ebben a példában a mágneses tér 10° -os elfordulása okozza.

mátrix szorzatára, ekkor:

$$\hat{g}_R^{-1} \hat{R} \hat{g}_L = \hat{G}_G^{-1} \hat{O}_R^T \hat{R} \hat{O}_L \hat{G}_L = \hat{G}_R^{-1} \hat{R}_{\text{eff}} \hat{G}_L, \quad (5.14)$$

így olyan kifejezést kaptunk, amiben a g -tenzorok mérhető, szimmetrikus része szerepel, és egy effektív forgatás, ami áll a spinforgató hoppingból, és állhat abból, hogy a két kvantumpöttyben eltérő a spin-bázis.

5.5. Hat degenerációs pont feltétele

Láthattuk, hogy a degenerációs pontok jelenléte egy valós, 3×3 -as mátrix sajátvektor problémájára vezethető vissza. Számuk attól függ, hány pozitív valós sajátértéke van a g -tenzorokból és hopping forgatásából megkonstruált mátrixnak, minden ilyen sajátértékhez egy időtükrözött pontpár tartozik. Röviden felsorolom a különféle lehetséges eseteket.

Ha a g -tenzorok determinánsának előjele megegyezik, akkor a teljes Chern-szám ± 2 , és $\det(\hat{g}_R^{-1} \hat{R} \hat{g}_L) = \det \hat{g}_L / \det \hat{g}_R$ pozitív. Ilyenkor a lehetséges esetek:

- Mindhárom sajátérték pozitív valós szám. Ekkor 6 degenerációs pont van. Mivel a teljes topologikus töltés $+2$, ezért négy pontnak $+1$, míg kettőnek -1 a Chern-száma. Ennek a levezetését később látni fogjuk.
- Mindhárom sajátérték valós szám, és az egyik pozitív. Ekkor 2 pont van.
- Két sajátérték komplex, egy pedig pozitív valós szám. Ekkor szintén 2 pont van.

Másik lehetőség, ha a két g -tenzor determinánsának ellentétes az előjele, ekkor a teljes topologikus töltése a rendszernek 0. Ez nem pusztán elméleti felvetés, kísérleti relevanciája is lehet, mivel a g -tenzorban egy effektív momentum van, amiben a spinnek negatív, míg a pályamomentumnak pozitív járuléka van. Méréseink során olyan erős és anizotrop spin-pálya kölcsönhatást tapasztaltunk, hogy az egyik g -tenzor legnagyobb főértéke 20, míg a legkisebb 1 volt, előfordulhatott volna -1-es is [3]. Ellentétes előjelű determinánsok esetén a lehetséges esetek:

- Mindhárom sajátérték negatív valós szám. Ekkor nincs degenerációs pont.
- Mindhárom sajátérték valós szám, és az egyik negatív. Ekkor 4 pont van, ebből kettő pontnak +1, kettőnek -1 a Chern-száma.
- Két sajátérték komplex, egy pedig negatív valós szám. Ekkor szintén nincs degenerációs pont.

Két szélsőséges eset lehetséges, ha nincs forgatás, akkor mindhárom sajátérték pozitív valós szám (bizonyítás Függelék 8.4), ha pedig izotropak a g -tenzorok, akkor a mátrixszorzás eredménye egy ortogonális mátrix, és ekkor egy valós sajátérték van, ami pozitív. Utóbbi esetet felfoghatjuk úgy, hogy a két kvantumpötty közötti alagutazás közben az elektron spinjét egy \mathbf{B}_{SOI} spin-pálya mágneses tér forgatja el, és a degenerációs pont létének feltétele, hogy $\mathbf{B} \parallel \mathbf{B}_{\text{SOI}}$ [7]. A két határeset között a pontok száma attól függ, hogy a g -tenzorok elnyúltsága és a forgatás közül melyik dominál jobban. Ha a forgatás szögét nulláról folytonosan növeljük, akkor a hat pont elkezd elmozdulni, egy bizonyos szögnél két-két pont összehalmozik és eltűnnek. Az annihiláció csak a topologikus töltés megmaradást teljesítve következhet be, a két pontpár ellentétes Chern-számokkal rendelkezik. A harmadik pontpár is elmozdul, de megmarad.

A g -tenzorok elnyúltságának kapcsolatát a maximális szöggel ahol még hat pont van egy egyszerű példán számszerűsíthetjük. Legyen a két g -tenzor diagonális a $g_{LR,xyz}$ elemekkel, és $\hat{\mathbf{R}}_z$ a z -tengely körül forgat α szöggel, ekkor:

$$\hat{\mathbf{g}}_{\mathbf{R}}^{-1} \hat{\mathbf{R}}_z \hat{\mathbf{g}}_{\mathbf{L}} = \begin{pmatrix} \frac{g_{L,x}}{g_{R,x}} \cos \alpha & -\frac{g_{L,y}}{g_{R,x}} \sin \alpha & 0 \\ \frac{g_{L,x}}{g_{R,y}} \sin \alpha & \frac{g_{L,y}}{g_{R,y}} \cos \alpha & 0 \\ 0 & 0 & \frac{g_{L,z}}{g_{R,z}} \end{pmatrix} \quad (5.15)$$

A z -irányú degenerációs pont megmarad, a kezdetben x - és y -irányú pontok egy bizonyos szögnél eltűnnek. A határszöget a sajátértékegyenlet diszkriminánsából kaphatjuk meg, a hat pont feltétele:

$$\cos \alpha > \frac{2\sqrt{\lambda_x \lambda_y}}{\lambda_x + \lambda_y}, \quad (5.16)$$

ahol $\lambda_x = g_{L,x}/g_{R,x}$. A maximális szög koszinuszára a $\lambda_{x,y}$ arányok számtani és mértani közepének hányadosát kaptuk. Ez annál kisebb, minél jobban eltér a két arány. Példaként tegyük fel, hogy a g-tenzorok főértékeit az $[1 - \Delta, 1 + \Delta]$ intervallumból választjuk ($0 \leq \Delta < 1$). A legnagyobb maximális forgatást az intervallum széleivel kaphatjuk, ekkor az arányok $\lambda_x = \frac{1-\Delta}{1+\Delta}$ és $\lambda_y = \frac{1+\Delta}{1-\Delta}$. A szög:

$$1 - \frac{\alpha^2}{2} \approx \cos \alpha > \frac{2}{\frac{1-\Delta}{1+\Delta} + \frac{1+\Delta}{1-\Delta}} = \frac{1 - \Delta^2}{1 + \Delta^2} \approx 1 - 2\Delta^2 \quad (5.17)$$

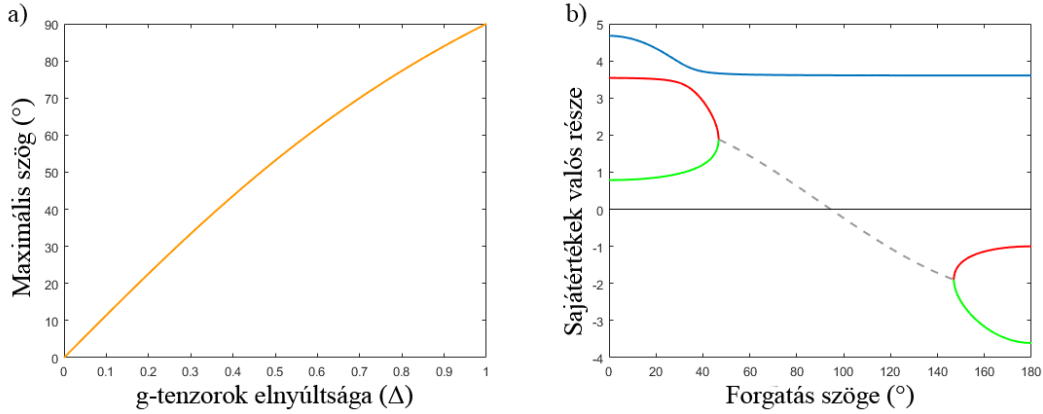
$$\alpha < 2\Delta,$$

ahol a közelítés $\Delta \ll 1$ esetén érvényes. Láthatóan kis Δ értékek esetén, azaz ha a g-tenzorok az egységmátrixtól csak kicsit térnek el, akkor a maximális forgatás, ahol még lehet hat degenerációs pont ennek az eltérésnek (Δ) az első hatványával arányos. Az 5.a ábrán láthatjuk ábrázolva az egzakt eredményt a maximális szögre Δ függvényében.

Egy másik példán (5.b ábra) a $\hat{\mathbf{g}}_{\mathbf{R}}^{-1} \hat{\mathbf{R}} \hat{\mathbf{g}}_{\mathbf{L}}$ mátrix sajátértékeinek változását láthatjuk a forgás szögének függvényében, ahol $\hat{\mathbf{R}}$ a z-tengely körül forgat, és a g-tenzorok:

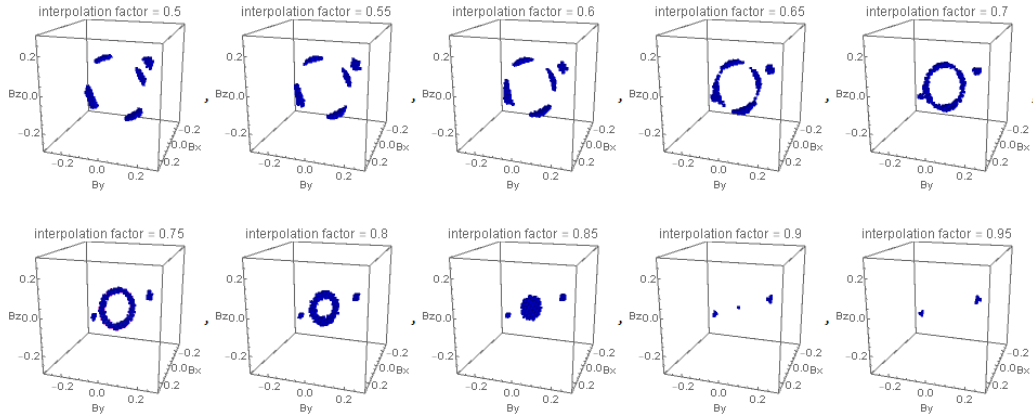
$$\mathbf{g}_{\mathbf{L}} = \begin{pmatrix} 2 & 1 & -1 \\ 1 & 3 & 1 \\ -1 & 1 & 4 \end{pmatrix} \quad \mathbf{g}_{\mathbf{R}} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (5.18)$$

Hat degenerációhoz a $\hat{\mathbf{g}}_{\mathbf{R}}^{-1} \hat{\mathbf{R}} \hat{\mathbf{g}}_{\mathbf{L}}$ mátrixnak mindhárom sajátértékének pozitív valós számnak kell lennie (ha nincs forgatás, akkor mindig teljesül). Ezt a feltételt a forgatás kétféleképpen hiúsíthatja meg, vagy negatív két sajátérték (általában 180°-os forgatásnál ez az eset áll fenn), vagy pedig kettő sajátérték komplex (ez pedig 90°-os forgatás esetén jellemző). Mivel a $\hat{\mathbf{R}}$ mátrix determinánsa a +1, ezért a forgatás szögétől nem függ a $\hat{\mathbf{g}}_{\mathbf{R}}^{-1} \hat{\mathbf{R}} \hat{\mathbf{g}}_{\mathbf{L}}$ mátrix determinánsa. Ha növeljük a forgatás szögét nulláról, akkor a sajátértékek folytonosan fognak megváltozni, de a determináns véges pozitív értéke miatt a komplex számsík valós tengelyén nem léphetik át a nullát. Így a hat pont esete elsőként mindig úgy szűnik meg, hogy két sajátérték komplex lesz. Mivel a komplex sajátértékeknek egymás konjugáltjai, az átmenet hat és kettő degenerációs pont között úgy történik meg, hogy a két sajátérték találkozik a valós tengelyen, majd egymás tükörképeként mozognak tovább a komplex számsíkon. A mágneses térben ez úgy néz ki, hogy két-két degenerációs pont elkezd egymás felé közeledni majd összeolvadnak és eltűnnek. Mivel az átmenet pillanatában két sajátérték megegyezik, a $\hat{\mathbf{g}}_{\mathbf{R}}^{-1} \hat{\mathbf{R}} \hat{\mathbf{g}}_{\mathbf{L}}$ mátrix degenerált lesz, így minden irányban lesznek degenerációs pontok a degenerált altéren, folytonosan sokan. A mágneses térben a két pontpár összeolvadásának pillanatában megjelenik egy (a találkozó pontokat tartalmazó)

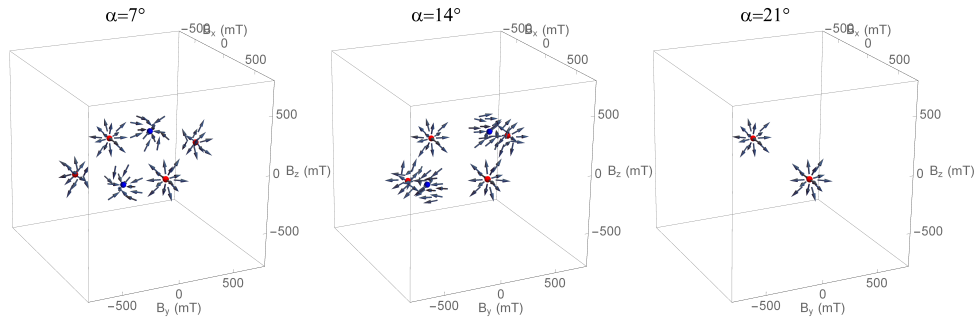


5. ábra. a) Párhuzamos főtengetű g -tenzorok esetén a maximális szög, ahol még hat degenerációs pont lehetséges. A Δ paraméter a g -tenzorok elnyúltságát jellemzi, a főértékek $[1 - \Delta, 1 + \Delta]$ intervallumba esnek. Ebben a speciális példában láthatóan egy 90° -os vagy annál nagyobb forgatás esetén már nem lehet hat pont, általános esetben meg lehet konstruálni úgy a paramétereiket, hogy még 180° -osnál nagyobb forgatásoknál is hat degenerációs pont legyen (a paraméterek véletlen sorsolása során egymilliós mintából csak egy-kettő ilyen fordul elő). b) A $\hat{g}_R^{-1} \hat{R} \hat{g}_L$ mátrix sajátértékeinek valós része egy z -tengely körüli forgatás szögének függvényében egy általános esetben. Kis szögnél mind a három sajátérték pozitív és valós, majd egy adott szögnél két sajátérték komplex lesz, és egymás konjugáltjaiként változnak. Nagyobb forgatásoknál általában újra valós lesz mind a három sajátérték, de ebből kettő negatív. A folyamat nem feltétlenül monoton, olyan eset is lehetséges, ahol a két komplex sajátérték újra valós és pozitív lesz a szög növelésének hatására, majd ismét komplex értéket vesznek fel. A g -tenzorok ennél a példánál az (5.18) formula szerintiek.

degenerációs gyűrű. Ez a forgatási szög további növelése hatására azonnal felhasad, de a közel degenerált alapállapotok jelenléte végigkíséri az egzakt degenerációk összeolvadását (6. ábra). A degenerációs pontok mozgását és összeolvadását láthatjuk a 7. ábrán. Miután két sajátérték komplex lett akár újra találkozhatnak a valós tengelyen, tehetik ezt úgy is, hogy a nullát megkerülve negatív valós számok lesznek (nagy szögeknél általában ez történik).



6. ábra. Hat degenerációs pont megszűnése a mágneses paraméterterben. Az ábrán azok a pontok vannak ábrázolva, melyeknél az első gerjesztés kisebb mint egy megadott érték. Látható, hogy amikor egybeolvad két egzakt degenerációs pontpár, akkor a felhasadás egy gyűrű mentén nagyon kicsi lesz, de a degeneráció nem egzakt. Ábrázolásban köszönet Pályi Andrásnak.



7. ábra. A degenerációs pontok összeolvadása. Az egyes pontok a Chern-számuk alapján vannak színezve, a piros pontoké +1, a kék pontoké -1. Az összeolvadás a teljes Chern-számot változatlanul hagyja. A nyilak a numerikusan számított Berry-görbületet (mágneses teret) mutatják, a +1 Chern-számú pontok az erővonalak forrásai, míg a -1 Chern-számmal rendelkezők a nyelői. A paraméterek: $U = 1$ meV, $t_0 = 0.12 \cos(\alpha/2)$ meV, $t_x = 0.12 \sin(\alpha/2)$ meV, $\hat{g}_L = \text{diag}(1,4,7)$, $\hat{g}_R = \text{diag}(6,1,3)$.

5.5.1. Statisztika hat pontra

Láthattuk, hogy habár a teljes topologikus töltés +2, léteznek esetek, ahol ennél több degenerációs pontot találunk. Felmerül a kérdés, hogy a 2, illetve 6 pontos konfigurációk mennyire mondhatóak általánosnak. Erre a kérdésre statisztikát végezve kaphatjuk meg a választ. Mivel a degenerációs pontok száma a $\hat{g}_R^{-1} \hat{R} \hat{g}_L$ mátrix sajátértékeitől függ, ezért $V_{L/R}$, t^2 értékeivel nem kell törődnünk. A g-tenzorokat szimmetrikusnak vesszük az (5.14) képlet alapján, és a

$$g_{LR,xyz} \in [0, 1], \quad \{\alpha_{LR}, \gamma_{LR}\} \in [-\pi, \pi], \quad \cos(\beta_{LR}) \in [-1, 1] \quad (5.19)$$

egyenletes valószínűségi változókkal sorsoljuk ki, ahol $g_{LR,xyz}$ a g -tenzorok főértékei, és α_{LR} , β_{LR} , γ_{LR} az Euler-szögei. A szögek ilyen választása egyenletesen sorsolja a z -főtengelyt az egységgömb felületén, és egyenletesen sorsolja a másik két főtengelyt az erre merőleges irányok közül. A t_{0xyz} hopping paramétereket egyenletesen sorsoljuk a négydimenziós egységgömb felületén. Belátható, hogy az ilyen t_{0xyz} paraméterekkel kapott $\hat{\mathbf{R}}$ mátrixok ugyanazzal az eloszlással rendelkeznek, mint az α_{LR} , β_{LR} , γ_{LR} Euler-szögekkel leírt forgatás. Sőt, az így sorsolt forgatások eloszlása invariáns marad ortogonális mátrixal való szorzásra. Emiatt ha a g -tenzorokat nem szimmetrikusnak sorsoljuk $\hat{\mathbf{g}} = \hat{\mathbf{V}}\hat{\mathbf{D}}\hat{\mathbf{W}}$ alakban, ahol $\hat{\mathbf{D}}$ diagonális, $\hat{\mathbf{V}}$ és $\hat{\mathbf{W}}$ ortogonális mátrix, akkor nem változik a statisztika. Azonban fontos megjegyezni, hogy a forgatás szöge nem egyenletes eloszlású, csak a tengelye. A szög sűrűségfüggvénye:

$$f(\varphi) = \frac{1}{\pi}[1 - \cos(\varphi)] \quad \varphi \in [0, \pi] \quad (5.20)$$

Az így sorsolt egymilliós mintából a hat degenerációt adó esetek száma 25060 volt, ami mindössze 2.5%-ot jelent, így a hat pont esete habár általános, de ritkának mondható. A ritkaságot az okozza, hogy forgásszög sűrűségfüggvénye kis szögeknél négyzetesen indul nullából, azaz a kis szögű forgatások ritkának mondhatók. Ez a 2.5% körülbelül a 45°-nál kisebb szögű forgatások gyakorisága:

$$\mathbb{P}\left(\varphi < \frac{\pi}{4}\right) = \frac{1}{\pi} \int_0^{\frac{\pi}{4}} [1 - \cos(\varphi)] d\varphi = \frac{1}{4} - \frac{1}{\pi\sqrt{2}} \approx 0.0249 \quad (5.21)$$

Készítettem statisztikát az ellentétes előjelű determinánssal rendelkező g -tenzorokról is, ekkor a topologikus töltés alapján nem várunk degenerációs pontot, de előfordulhat négy pont esete is. Ehhez az egyik g -tenzor főértékeit $[-1,0]$ intervallumból sorsoltam. Az eredmény egymilliós mintából 352205 eset. Ez annak a következménye, hogy a négy pontnak a 180° körüli forgatások kedveznek, a nagy szögű forgatások pedig gyakoribbak. A 147.4°-nál nagyobb szögű forgatások gyakorisága felel meg 35.2%-nak.

5.6. Degenerációk az exchange-modellben

A Hubbard-modellből Schrieffer–Wolff-transzformációval kapott exchange-modellben ortogonális mátrix számszorosa volt a kölcsönhatási tag, legyen $\hat{\mathbf{J}} = J\hat{\mathbf{R}}$. Láthattuk a Hubbard-modell esetén azt is, hogy a spineken végzett bázistranszformációval ki lehet ejteni a spinforgató hopping tagot. A spin bázisának elforgatását a spinoperátorok elfor-

gátásával helyettesíthetjük, így kicserélődési kölcsönhatásban kiejthető az $\hat{\mathbf{R}}$ mátrix:

$$\begin{aligned} H_{int} &= J(\hat{\mathbf{R}}\mathbf{S}_L)^T \hat{\mathbf{R}}\mathbf{S}_R = J\mathbf{S}_L^T \mathbf{S}_R = \\ &= \frac{1}{2}J [(\mathbf{S}_L + \mathbf{S}_R)^2 - \mathbf{S}_L^2 - \mathbf{S}_R^2] = \frac{1}{2}J(\mathbf{S}_L + \mathbf{S}_R)^2 - \frac{3}{2}J \end{aligned} \quad (5.22)$$

Az új bázisban izotropként írhatjuk fel a kölcsönhatást, és ez átírható olyan formába, hogy megjelenjen a két spin összege. Mivel két feles spin összegzése az $\frac{1}{2} \otimes \frac{1}{2} = 0 \oplus 1$ módon történik, ezért szinglet-triplet felhasadás következik be a kölcsönhatás következtében. Azonban ne felejtjük el, hogy a kicserélődési tag csak ebben a speciális bázisban néz ki izotropnak, így ezek a sajátállapotok, ún. pszeudo-szinglet és pszeudo-triplet állapotok.

A spinoperátorokból ismét elhagyva az $1/2$ -eket $J(\boldsymbol{\sigma}_L^T \boldsymbol{\sigma}_R - 1)$ szorzat alakban felírva a kölcsönhatást, a Zeeman-taggal együtt kapjuk a teljes Hamilton-operátort, ahol a mágneses tér ismét a $\hat{\mathbf{g}}_R^{-1} \hat{\mathbf{R}} \hat{\mathbf{g}}_L$ mátrix sajátvektora:

$$H_{4x4} = \begin{pmatrix} -g_+B & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -g_-B - 2J & 2J & 0 \\ 0 & 2J & +g_-B - 2J & 0 \\ 0 & 0 & 0 & +g_+B \end{pmatrix}. \quad (5.23)$$

Itt lecsatolódnak a T_{\pm} triplet állapotok ugyanúgy, mint a Hubbard-modellben, és a $S-T_0$ altér sajátértékegyenletébe behelyettesíthetjük ismét a $E = -g_+B$ feltételt a degenerációra, ami a

$$B_{\text{deg}} = J \left(\frac{1}{g_L} + \frac{1}{g_R} \right) \quad (5.24)$$

eredményre vezet, mely megegyezik a korábbi (5.12) képletben szereplő közelítéssel, abban az esetben ha $J = t^2/U$.

Visszahelyettesítve a kapott mágneses teret a Hamilton-operátorba a $S-T_0$ altéren, a sajátállapotokra kapjuk, hogy:

$$\begin{aligned} T_g &= \frac{1}{\sqrt{g_L^2 + g_R^2}} (g_R |\uparrow\downarrow\rangle + g_L |\downarrow\uparrow\rangle) \\ S_g &= \frac{1}{\sqrt{g_L^2 + g_R^2}} (g_L |\uparrow\downarrow\rangle - g_R |\downarrow\uparrow\rangle), \end{aligned} \quad (5.25)$$

ahol S_g az alapállapot. A g indexes jelölés utal arra, hogy a mágneses tér keveri a szinglet-triplet állapotokat. Látható, hogy ha $g_L = g_R$, akkor $g_-B = 0$, így $S_g = S$ és $T_g = T_0$.

5.6.1. Degenerációs pontok Chern-száma

Az exchange-modellben egyszerűbb formulákat kapunk, ezért további, bonyolultabb számolásokat is könnyebb elvégezni vele. Egy felmerülő kérdés, hogy ha hat degenerációs pont van a paraméterterben, és a teljes Chern-szám $+2$, akkor a degenerációs pontok milyen Chern-számokkal rendelkeznek egyenként, hogy az összegük kiadja a $+2$ -öt. Az időtükrözött pontpárok töltése megegyezik. Numerikus számolásokból azt láttuk, hogy két pontpárnak $+1$, míg egy pontpárnak -1 a Chern-száma. Kérdéses, hogy mitől lesz az egyik degenerációs pontpár eltérő a másik kettőtől. Ahhoz, hogy ezt megtudjuk, számoljuk ki analitikusan a pontok Chern-számát.

A degeneráció kis környezetében sorfejthetjük a Hamilton-operátort első rendig:

$$H(\mathbf{B}_{\text{deg}} + d\mathbf{B}) \approx H_0 + d\mathbf{B}^T \nabla_{\mathbf{B}} H(\mathbf{B}) \quad (5.26)$$

és felhasználhatjuk azt, hogy kétszeres degeneráció közelében a rendszer jó közelítéssel kétállapotú a T_- és S_g altéren, így kifejezhető Pauli-mátrixokkal:

$$H(\mathbf{B}_{\text{deg}} + d\mathbf{B}) \approx (H_0 + dB_{\text{eff},0})\mathbb{1} + d\mathbf{B}_{\text{eff}}^T \boldsymbol{\sigma} = (H_0 + dB_{\text{eff},0})\mathbb{1} - d\mathbf{B}^T \hat{\mathbf{g}}^T \boldsymbol{\sigma} \quad (5.27)$$

Itt $dB_{\text{eff},0}$ hatásával nem kell foglalkoznunk, csak az energiát tolja el. Látható a kétféle felírásból, hogy

$$\hat{\mathbf{g}}^T \boldsymbol{\sigma} = -\nabla_{\mathbf{B}} H_{\boldsymbol{\sigma}}(\mathbf{B}), \quad (5.28)$$

a $H_{\boldsymbol{\sigma}}$ jelölés utal arra, hogy csak $\sigma_{x,y,z}$ komponenseket vesszük figyelembe az S_g-T_- altéren. A degenerációs pont Chern-száma pedig nem lesz más, mint $\hat{\mathbf{g}}$ determinánsának előjele, ami ± 1 lehet.

Ehhez meg kell határozni a $\hat{\mathbf{g}}$ mennyiséget. Elsőként helyettesítsünk $\mathbf{B}_{\text{deg}} + d\mathbf{B}$ mágneses teret a H_{4x4} Hamilton-operátorba, és a $|\uparrow\downarrow\rangle, |\downarrow\uparrow\rangle$ bázison végezzünk el egy forgatást az

$$M = \begin{pmatrix} g_L & -g_R \\ g_R & g_L \end{pmatrix} \quad (5.29)$$

mátrix segítségével. Ekkor hagyjuk el a T_+ és T_g állapotokat, nem más, mint egy elsőrendű Schrieffer–Wolff-transzformáció. Az eredményül kapott 2×2 -es mátrix olyan alakú, mintha

egy effektív mágneses tér hatna a spinekre:

$$\begin{aligned}
dB_x &= \frac{g_R dB_{L,x} - g_L dB_{R,x}}{\sqrt{g_L^2 + g_R^2}} \\
dB_y &= \frac{g_R dB_{L,y} - g_L dB_{R,y}}{\sqrt{g_L^2 + g_R^2}} \\
dB_z &= \frac{g_R^2 dB_{L,z} + g_L^2 dB_{R,z}}{g_L^2 + g_R^2}
\end{aligned} \tag{5.30}$$

Láthatóan a kapott kifejezés anizotrop abból a szempontból, hogy az effektív mágneses tér z -irányú komponensére más kifejezést kaptunk. A z -irányt $\hat{\mathbf{g}}_{\mathbf{R}}^{-1} \hat{\mathbf{R}} \hat{\mathbf{g}}_{\mathbf{L}}$ egyik sajátvektorából kaptuk, így az eredmény átírható bázisfüggetlenül. Legyen \mathbf{n} a sajátvektor (a degeneráció iránya), ekkor $\tilde{\mathbf{n}} = \hat{\mathbf{g}}_{\mathbf{R}} \mathbf{n} / |\hat{\mathbf{g}}_{\mathbf{R}} \mathbf{n}|$ az effektív mágneses tér iránya (az eddigi számolás során z -tengely iránya volt). így:

$$\hat{\mathbf{g}} = (\mathbf{1} - \tilde{\mathbf{n}} \tilde{\mathbf{n}}^T) \frac{g_R \hat{\mathbf{R}} \hat{\mathbf{g}}_{\mathbf{L}} - g_L \hat{\mathbf{g}}_{\mathbf{R}}}{\sqrt{g_L^2 + g_R^2}} + \tilde{\mathbf{n}} \tilde{\mathbf{n}}^T \frac{g_R^2 \hat{\mathbf{R}} \hat{\mathbf{g}}_{\mathbf{L}} + g_L^2 \hat{\mathbf{g}}_{\mathbf{R}}}{g_L^2 + g_R^2} \tag{5.31}$$

Ennek a determinánsa pedig (Függelék 8.5):

$$\det \hat{\mathbf{g}} = \det \hat{\mathbf{g}}_{\mathbf{R}} \frac{\lambda_{\mathbf{n}}(1 + \lambda_{\mathbf{n}})}{(1 + \lambda_{\mathbf{n}}^2)^2} (\lambda_{\mathbf{n}} - \lambda_{\mathbf{n}'}) (\lambda_{\mathbf{n}} - \lambda_{\mathbf{n}''}) \tag{5.32}$$

A kapott kifejezésben megjelenik a $\hat{\mathbf{g}}_{\mathbf{R}}^{-1} \hat{\mathbf{R}} \hat{\mathbf{g}}_{\mathbf{L}}$ mátrix két másik sajátértéke is. Az előjelet a $(\lambda_{\mathbf{n}} - \lambda_{\mathbf{n}'}) (\lambda_{\mathbf{n}} - \lambda_{\mathbf{n}''})$ tag határozza meg. Ha sorrendbe tesszük a sajátértékeket, akkor a sorrendben középső sajátértékhez tartozó degenerációnak lesz -1 a Chern-száma. Az is látható, hogy csak ellentétes Chern-számú degenerációs pontok tudnak találkozni, és kioltani egymást, mivel ekkor két sajátérték közelít egymáshoz, és az nem lehet a két szélső.

Ha csak két pont van, akkor vagy negatív két sajátérték, és ekkor $(\lambda_{\mathbf{n}} - \lambda_{\mathbf{n}'}) (\lambda_{\mathbf{n}} - \lambda_{\mathbf{n}''})$ két pozitív szám szorzata, vagy pedig komplex, ekkor két komplex konjugált szám szorzata, tehát mindig pozitív, ahogy azt elvárjuk, hogy a teljes Chern-szám valóban $+2$ legyen.

5.6.2. Ferromágneses kölcsönhatás

Eddig az exchange-modellnek azzal az eseteivel foglalkoztam, ami a Hubbard-modellből is származtatható. Ezzel szemben az exchange-modell még számos lehetőséget nyújt a spinek közötti kölcsönhatás számára. Ezek közül vizsgálók meg néhány esetet a továbbiakban.

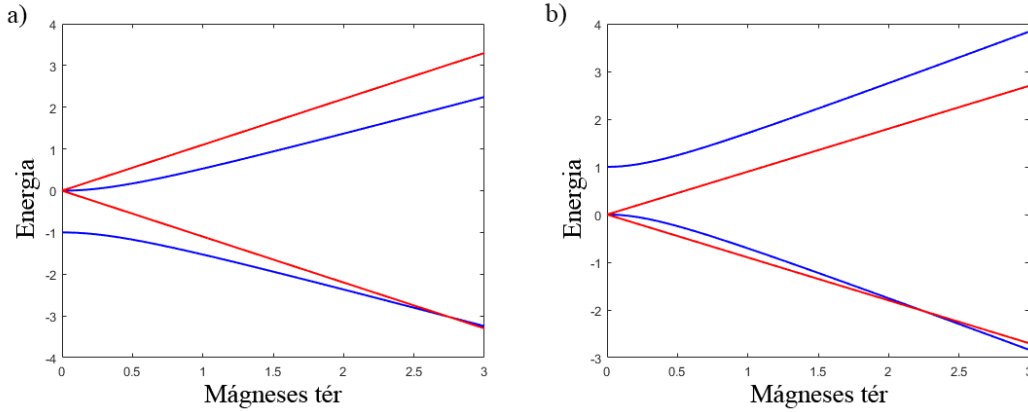
A Hubbard-modellből antiferromágneses kölcsönhatást kaptunk, hiszen csak a pszeudo-szinglet állapot tud nulla mágneses térnél kölcsönhatni a (2,0) és (0,2) állapotokkal, és így alacsonyabb energiára kerülni. Ugyanakkor az exchange-modellben le tudjuk írni a ferromágneses kölcsönhatást, mindössze a J-tenzorba negatív amplitúdót kell behelyettesíteni:

$$H_{int} = -|J|S_L^T \hat{R} S_R \quad (5.33)$$

Ismét választhatunk olyan rendszert, ahol a kölcsönhatásban eltűnik forgatás mátrix. Nulla mágneses térnél a pszeudo-triplet az alapállapot, ami degenerált, ami azt jelenti, hogy mágneses paramétertér origójában van degenerációs pont. Ha bekapcsolunk egy nagyon kis mágneses teret, akkor a két spin relatív irányát a kölcsönhatás fogja meghatározni, ami azt jelenti, hogy együtt fognak beállni valamilyen irányba, van egy együttes g-tenzoruk:

$$\hat{g} = \hat{R}\hat{g}_L + \hat{g}_R \quad (5.34)$$

A Chern-szám is ennek megfelelő, $C = 2 \operatorname{sgn} \det \hat{g}$. Az origón kívül is előfordulhatnak degenerációs pontok, ebben az esetben viszont $\hat{g}_R^{-1} \hat{R} \hat{g}_L$ mátrix negatív sajátértékeihez tartoznak. Ez azért van mert kis tereknél a T_- az alapállapot, és ezt kell utolérnie a $S-T_0$ hibrid állapotnak (8. ábra), azaz $|g_+| < |g_-|$, amihez $g_L g_R < 0$ a feltétel.



8. ábra. Antiferromágneses és ferromágneses kölcsönhatás összehasonlítása. a) Antiferromágneses kölcsönhatás esetén a szinglet állapot lefele hasad, ezt kell utolérnie a T_- tripletnek, ez akkor következik be, ha a két g -faktor megegyező előjelű. b) Ferromágneses esetben kis mágneses tereknél a T_- lesz alapállapot, ezért ezt a $S-T_0$ hibrid állapotnak kell utolérnie, így a g -faktorok előjelének különböznie kell, hogy legyen degenerációs pont. Használt paraméterek: $J = \pm 0.25$ és $g_L = 1.0$, $g_R = \pm 0.1$. Ha csak J előjelét változtatnánk, akkor a spektrum függőlegesen tükröződne.

Ekkor is szétválaszthatjuk a lehetséges eseteket $\hat{g}_R^{-1} \hat{R} \hat{g}_L$ sajátértékei alapján. Ha a két g-tenzor determinánsának előjele megegyezik:

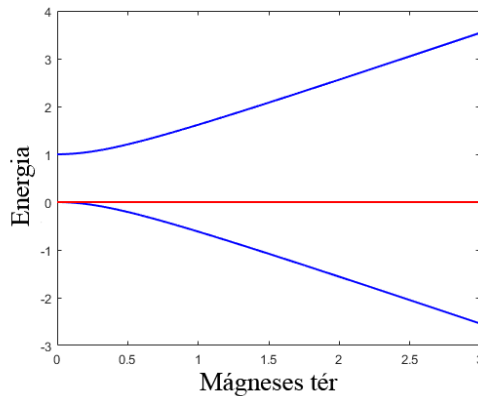
- Mindhárom sajátérték pozitív valós szám. Ekkor 0+1 degenerációs pont van, ahol a +1 az origóban levő degenerációra utal.
- Mindhárom sajátérték valós szám, és kettő negatív. Ekkor 4+1 pont van.
- Két sajátérték komplex, egy pedig pozitív valós szám. Ekkor szintén csak 0+1.

A teljes Chern-szám ilyenkor kettő, ehhez az origó kettővel járul hozzá. Vagy nincsenek további pontok, vagy pedig egy pontpárnak +1, egy másik pontpárnak -1 a Chern száma. Ellentétes előjelnél:

- Mindhárom sajátérték negatív valós szám. Ekkor 6+1 pont van.
- Mindhárom sajátérték valós szám, és az egyik negatív. Ekkor 2+1 pont van.
- Két sajátérték komplex, egy pedig negatív valós szám. Ekkor szintén 2+1 pont van.

Ilyenkor nulla a teljes Chern-szám, úgy jön ki, hogy az origóban levő pont mellett van egy ellentétes előjellel rendelkező pontpár, vagy még további négy pont jelenik meg a paraméterterben összesen nulla Chern-számmal.

Érdemes megemlíteni, hogy \hat{g} mátrix elfajultsága hatással van az origón kívül levő pontokra. Amikor a mátrix determinánusa közelít a nullához, így $\hat{g}_R^{-1} \hat{R} \hat{g}_L$ mátrix egyik sajátértéke mínusz egyhez tart. Ekkor a T_- triplet egyre kisebb meredekségű görbe lesz a mágneses tér-energia diagramon (9. ábra), és az egyik degenerációs pont bezuhan az origóba.



9. ábra. A $\hat{g}_R^{-1} \hat{R} \hat{g}_L$ mátrix -1 sajátértékhez tartozó degenerációs pontjai az origóba zuhanhatnak. A Használt paraméterek: $J = -0.25$ és $g_{L,R} = \pm 0.5$.

5.6.3. Diagonális J-tenzor

A Hubbard-modellben, a kölcsönhatási tagra egy ortogonális mátrixot kaptunk, pozitív együtthatóval. Legyen most a J-tenzor egy általános valós mátrix, ekkor felírható $\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{V}} \hat{\mathbf{J}}_{\text{diag}} \hat{\mathbf{W}}$ alakban, ahol $\hat{\mathbf{J}}_{\text{diag}}$ diagonális (elemei $\hat{\mathbf{W}} = \hat{\mathbf{V}}^T$ esetben, azaz szimmetrikus $\hat{\mathbf{J}}$ esetén lesznek a sajátértékek), $\hat{\mathbf{V}}$ és $\hat{\mathbf{W}}$ pedig ortogonális mátrixok. Ekkor megfelelő spin-bázis választással az ortogonális mátrixok kiejthetők, és így a J-tenzor egyszerűsíthető. Ennek az az ára, hogy a g-tenzorokat ortogonális mátrixokkal kell megszorozni balról, így ha eleinte szimmetrikusak voltak, akkor az új bázisban már nem lesznek azok. Legyen $J_{x,y,z}$ a három diagonális elem, ekkor:

$$H_{int} = \begin{pmatrix} J_z & 0 & 0 & J_x - J_y \\ 0 & -J_z & J_x + J_y & 0 \\ 0 & J_x + J_y & -J_z & 0 \\ J_x - J_y & 0 & 0 & J_z \end{pmatrix} \quad (5.35)$$

Láthatóan a kölcsönhatás külön keveri a T_{\pm} triplet állapotokat, és külön keveri a S szinglet és T_0 triplet állapotot, de a két altér között nincs mátrixelem.

Vegyük a speciális esetet, amikor a két effektív mágneses tér az új bázisban z -tengellyel párhuzamos irányú, a Hamilton-operátor így blokkdiagonális formájú. Kissé átrendezve és bevezetve a $J_{\pm} = J_x \pm J_y$ és $g_{\pm} = g_L \pm g_R$ jelölést:

$$H_{4x4} = \begin{pmatrix} J_z - g_+ B & J_- & 0 & 0 \\ J_- & J_z + g_+ B & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -J_z - g_- B & J_+ \\ 0 & 0 & J_+ & -J_z + g_- B \end{pmatrix} \quad (5.36)$$

Az állapotok energiája ekkor:

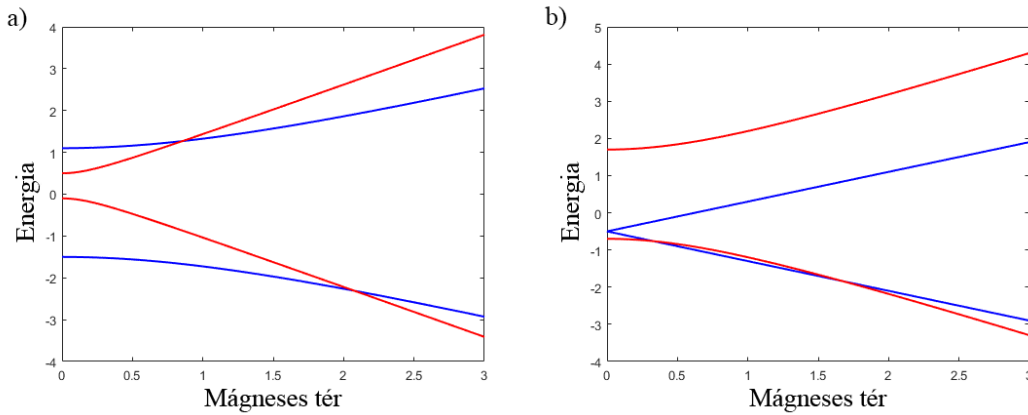
$$\begin{aligned} E_{1,2} &= +J_z \pm \sqrt{g_+^2 B^2 + J_-^2} \\ E_{3,4} &= -J_z \pm \sqrt{g_-^2 B^2 + J_+^2} \end{aligned} \quad (5.37)$$

Ha a nulla mágneses térnél levő alapállapot energiája aszimptotikus tereknél nem a leglassabban csökkenő, akkor biztosan van degeneráció. Nézzük meg azt az esetet, ha a g-faktorok és a J-tenzor minden eleme pozitív mennyiség, azaz $|g_+| > |g_-|$ és $|J_+| > |J_-|$.

Nulla mágneses tér mellett a két kisebb energia:

$$\begin{aligned}
 E_2 &= +J_z - |J_-| \\
 E_4 &= -J_z - |J_+| \\
 E_2 &> E_4
 \end{aligned}
 \tag{5.38}$$

Mivel E_2 aszimptotikusan $-|g_+|$ meredekséggel csökken, ezért megelőzi E_4 -et, és egy ponton az alapállapot degenerált (10.a ábra).



10. ábra. Az állapotok energiái z -irányú mágneses tér függvényében diagonális J -tenzorok esetén. a) Ha a g -faktorok és J -tenzor elemei pozitívak mindig van degenerációs pont. b) Általánosabb esetben előfordulhat több degenerációs pont is egy egyenes mentén. Mindkét esetben $g_L = 1.0$, $g_R = 0.2$ valamint az első esetben $J = \text{diag}(0.8, 0.5, 0.2)$, másodikban $J = \text{diag}(0.6, -0.6, 0.5)$.

Diagonális exchange-tag esetén pozitív paraméterek mellett láthattuk, hogy mindig van degenerációs pont. A helyének meghatározásához meg kell oldani az $E_2 = E_4$ egyenletet B függvényében. Ezek a számolások nem vezetnek egyszerű analitikus eredményre, például ha negatív értékeket is megengedünk előfordulhat hogy nincsen degeneráció, de akár az is, hogy több degenerációs pont is található egy irány mentén (10.b ábra). A számoláshoz az egyszerűsítés érdekében egy nagyon speciális esetet vizsgáltunk. Az általánosításhoz vagy a g -tenzorokat, vagy a J -tenzort kell általánosabb formában felírni. Utóbbi esetben ha bevezetünk J_{xy} és J_{yx} elemeket, még tudunk analitikus eredményt találni a degenerációs pontok helyére, de jóval bonyolultabb formulákkal.

Numerikus vizsgálat során a teljesen általános esetben (egyetlen feltétel a g -tenzorok pozitív determinánsa) azt láttuk, hogy topologikusan védett degenerációs pontok jelen vannak. Legtöbbször két pont található a paramétertérben, de az esetek pár százalékában hat pont is előfordulhat. Páratlan számú pont akkor fordulhat elő, hogyha a J -tenzor speciális, és ekkor egy pont az origóban van.

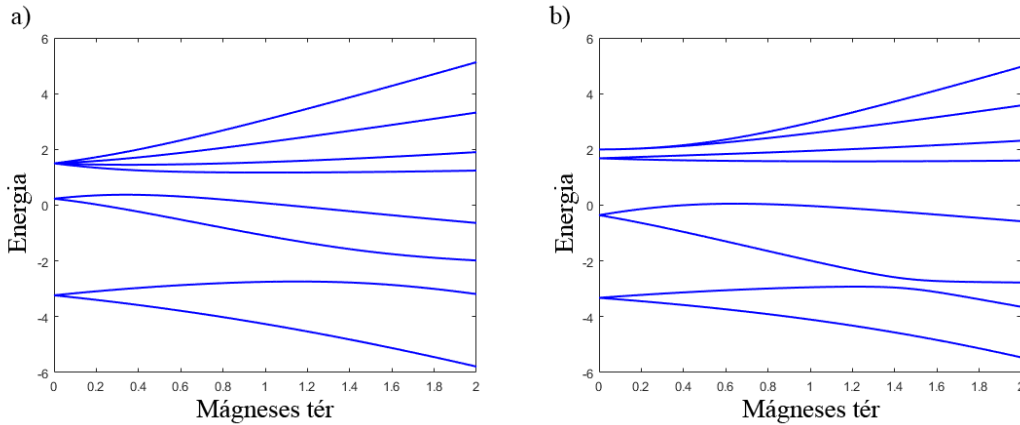
6. További rendszerek

Eddig a spinrendszerekre egy egyszerű példát néztünk, de hasonló rendszerek sok helyen megjelennek. A fent bemutatott topologikus eszköztár széles körben használható, pár példán bemutatom a topológia alkalmazását ezen rendszerekre, és összevetem a numerikus eredményekkel.

6.1. Tripla pötty feles spinekkel

Maradva a kölcsönható feles spineknél, a spinek számának növelésével alkothatunk bonyolultabb rendszereket. Ennek kísérleti megvalósítása a tripla kvantumpötty lehet. Páratlan számú fermion esetén ha a Hamilton-operátor invariáns az időtükrözési szimmetriára, akkor az állapotok párosszorosan degeneráltak. Ez a spinrendszereknél nulla mágneses térnél, azaz a paramétertér origójában okoz degenerációt, ezt láthatjuk a 11. ábrán.

Ha a rendszert Hubbard-moddal szeretnénk leírni, és feltesszük, hogy egy kvantumpöttyön az elektronok csak egy pályán tartózkodhat a két lehetséges spin-állapotban, akkor összesen hat állapot közül választhat három részecske. A bázis így $\binom{6}{3} = 20$ dimenziós.

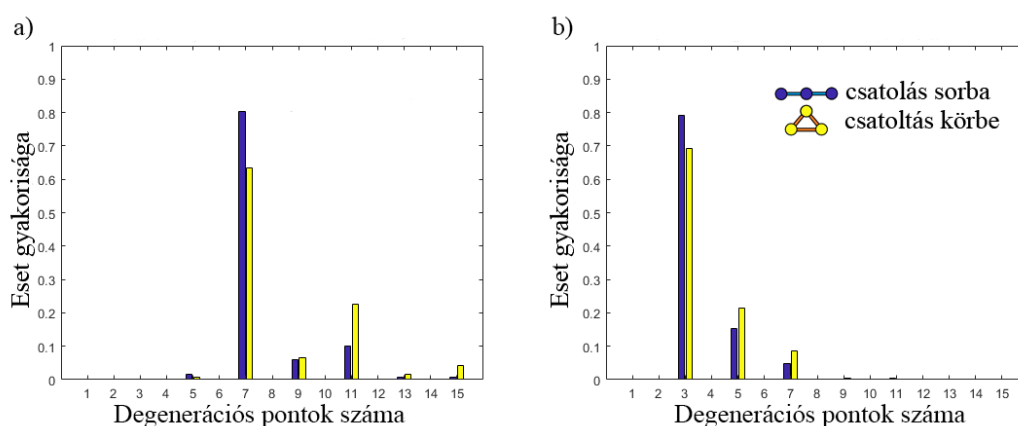


11. ábra. Három kölcsönható spin spektrumi mágneses tér függvényében. A kölcsönhatás antiferromágneses, egy ortogonális mátrix jellemzi. Nulla mágneses térnél mindegyik állapot degenerált az időtükrözési szimmetria miatt. a) Ha a spinek sorosan helyezkednek el, nulla mágneses térnél megjelenik egy 3/2-es állapot. b) Ezt felhásítja ha bekapcsoljuk a két szélső spin között is a kölcsönhatást. Az ábrán izotropak a g -tenzorok, értékük $g_1 = 1.0$, $g_2 = 0.8$, $g_3 = 0.5$, a J -tenzorok 90° -kal z -tengely körül forgató ortogonális mátrixok $J_{12} = 0.5$, $J_{23} = 1.0$, $J_{31} = 0.5$ amplitúdókkal. A mágneses tér x -irányú.

Exchange-modellben három darab két állapotú részecskét írunk le, így a három feles spin bázisa nyolcdimenziós, és az $\frac{1}{2} \otimes \frac{1}{2} \otimes \frac{1}{2} = \frac{1}{2} \oplus \frac{1}{2} \oplus \frac{3}{2}$ impulzusmomentum összegzés

alapján ha a Hamilton-operátor rendelkezik forgásszimmetriával, akkor a Hilbert-tér két feles, illetve egy $3/2$ -es spin alterére esik szét.

A rendszert exchange-moddal írtuk le, de felhasználtuk a két spinnél kapott eredményeket, a kölcsönhatást ortogonális mátrixszal írtuk le, pozitív amplitúdóval, hogy antiferromágneses legyen. Ha a három spin lineárisan helyezkedik el és a két szélső közötti kölcsönhatás elhanyagolható, akkor elforgathatjuk egymáshoz képest a spinek bázisát úgy, hogy a kölcsönhatást már csak az amplitúdók jellemezzék. Ekkor a spektrumban láthatjuk a két feles és az egy $3/2$ -es spint, melyek külön-külön degeneráltak nulla térnél. Ha a három spin háromszögben helyezkedik el, így mindegyik mindegyikkel kölcsönhat, akkor nincsen ilyen speciális bázis, és a kölcsönhatás a $3/2$ -es állapotot felhasítja (11.b ábra).



12. ábra. *Statisztika három kölcsönható feles spin esetén. a) Ha izotrop a kölcsönhatás könnyen megjelenhet nagy számú degenerációs pont. b) Anizotrop esetben is nagy valószínűséggel látunk 3-nál több pontot. A kölcsönhatás mellett aszerint is különválaszthatunk eseteket, hogy sorba (lila), vagy pedig körbe van kötve a három spin (sárga), ez nem okoz nagy változást a statisztikákon. A paraméterek sorsolása ugyanúgy történt mint a két-spin exchange-modell esetén, azonban analitikus formulák nélkül a mintavételezések 1000-res mintákból készültek.*

A rendszer három darab feles spinből áll így teljes topologikus töltése $+3$, ha a g-tenzorok determinánsa pozitív, így ekkor degenerációs pontot várhatunk általánosan. A két spin esete alapján az sem lehet meg minket, ha megjelenik további négy degenerációs pont izotrop kölcsönhatás esetén. Négy lehetséges esetet különböztethetünk meg az alapján, hogy a spinek sorba vagy körbe vannak csatolva, illetve a kölcsönhatás izotrop vagy pedig forgat. Az elkészült statisztikákat láthatjuk a 12. ábrán. Izotrop kölcsönhatás esetén a 7 pont esete a leggyakoribb, de könnyedén előfordulhat több pont is. Ritkán akár 20 fölé is nőhet a pontok száma. A szimulációk alapján több pontpár nem esik egy egyenesre, tehát a kitüntetett irányok száma 3-nál több, így nem jelölhetik ki az irányokat egy darab 3×3 -as mátrix sajátvektorai. Érdekes módon a körbecsatolás esetén nagyobb

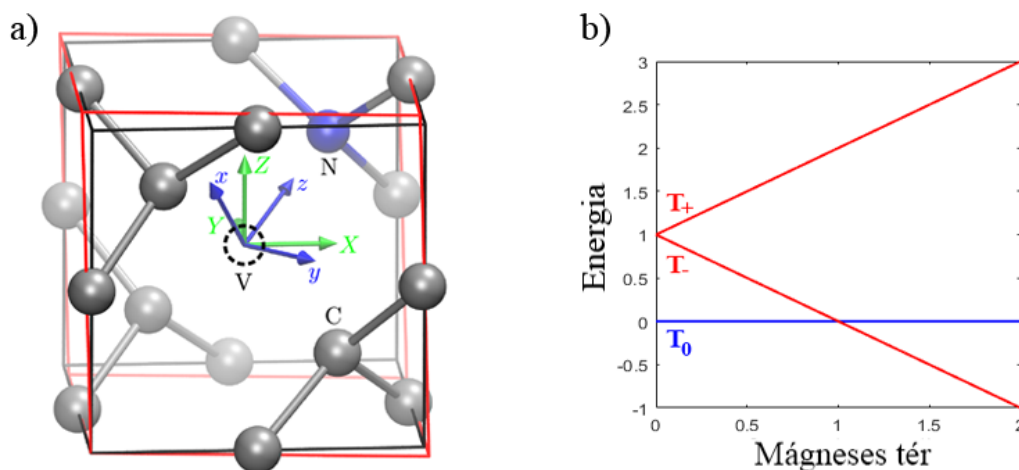
valószínűséggel jelenik meg 7-nél több pont, ez azt jelentheti, hogy a több kölcsönhatás valahogy nagyobb szabadságot ad.

Ha megnézzük az anizotrop kölcsönhatás statisztikáját, azt láthatjuk, hogy a 3-nál több pont esete nem ritka, 30% körüli. A körbecsatolás itt is növeli valamennyivel a több pont előfordulásának gyakoriságát.

Azt várnánk, hogy 3 pont mellett csak $4n$ pont jelenhet meg párkeltésekkel, de azt látjuk hogy megjelenhet 5,9,13... pont is. Ilyenkor a numerikus eredmények alapján az origó Chern-száma -1 . A topológia felhasználásával azt mondhatjuk, hogy $4n + 1$ a degenerációs pontok száma, ha az origóban a Chern-szám -1 , és $4n + 3$ van, ha ez $+1$. Az átmenet $4n + 3$ és $4n + 1$ között a Hamilton-operátor folytonos deformációjának hatására úgy történik, hogy két pont bezuhan az origóba.

6.2. Nitrogén-vakancia centrum gyémántban [8]

Eddig több spinnel foglalkoztunk, holott egyetlen spin esetén is lehet nemtriviális, véges mágneses térben jelentkező degeneráció. Ez akkor történhet meg, ha a Hamilton-operátorban vannak $S_{x,y,z}$ operátorokban négyzetes tagok. Ezek csak felesnél nagyobb spineknél léteznek. Erre példa a nitrogén-vakancia centrum gyémántban (13.ábra), amely spin-1 részecskeként viselkedik.



13. ábra. a) Nitrogén-vakancia centrum szerkezete a gyémántrácsban. A kristályrács mechanikai behatás következtében torzulhat, ezt jelképezi a piros vonal. b) A spektrumban az anizotropia tagnak köszönhetően lehasad a T_0 állapot. Mivel z -irányú mágneses tereknél az állapotok nem hibridizálnak, ezért megfelelően nagy térnél megjelenik a degeneráció.

A rendszert leíró Hamilton-operátor:

$$H_3/h = DS_z^2 + \gamma_e \mathbf{B} \cdot \mathbf{S}, \quad (6.1)$$

ahol az első az ún. anizotrópia tag. Ez a T_0 állapot lehasadását okozza, így nulla mágneses tereknél ez az alapállapot. Nagy tereknél a T_- az alapállapot, és mivel a két állapot között nincsen mátrixelem a Hamilton-operátorban, ha a mágneses tér z -irányú, megfelelően nagy tERNél degenerált lesz az alapállapot. Mivel az anizotrópia-tag időtükrözésre invariáns, ezért két degenerációs pontot láthatunk a z -tengely mentén, egymás időtükrözött párjait.

Mivel az NV centrum egy darab spin-1 részecske, ezért a teljes Chern-száma $+2$, és ez meg is egyezik ebben az esetben a pontok számával. A Hamilton-operátorban további tagok jelenhetnek meg, ha a rendszert mechanikai hatásnak tesszük ki, vagy elektromos teret kapcsolunk rá. Utóbbi esetben az új tagok:

$$\begin{aligned} H_{E0}/h &= d_{\parallel} S_z^2 E_z \\ H_{E1}/h &= d'_{\perp} [\{S_x, S_z\} E_x + \{S_y, S_z\} E_y] \\ H_{E2}/h &= d_{\perp} [(S_y^2 - S_x^2) E_x + \{S_x, S_y\} E_y]. \end{aligned} \quad (6.2)$$

Mivel a pontpár topologikusan védett, a Hamilton-operátor változtatására nem hasadhatnak fel, de elmozdulhatnak. Behelyettesítve a hivatkozott cikk paramétereit a pontpár 100 mT környékén van, 2 V/nm nagyságú x -irányú tér a pontokat nagyjából 10 mT-val mozdítja arrébb x -irányba (E_y nem y -irányba mozdít, mivel a rendszernek C_{3v} szimmetriája van).

Nagyobb spineknél természetesen más tagok is megjelenhetnek a Hamilton-operátorban. Az ún. anizotrópia tagoknak köszönhetően az origón kívül van degenerációs pont.

6.3. Kobalt spin-3/2 dimer [9]

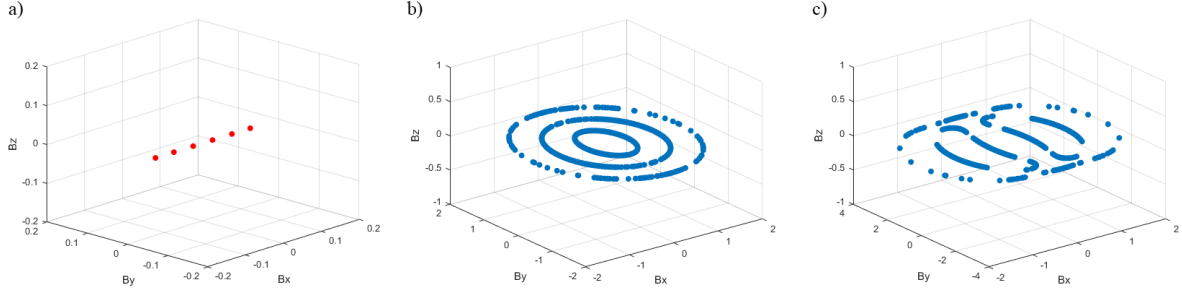
Egy kobalt atom Cu_2N felületen 3/2-es spinként viselkedik. Ha kettőt helyezünk egymás mellé, akkor kölcsönhatnak. A rendszer Hamilton-operátora dimenziótlanul:

$$H = J \mathbf{S}^A \cdot \mathbf{S}^B - \sum_{i,\mu} (\lambda^2 \Lambda_{\mu\mu} S_{\mu}^i S_{\mu}^i + 2(1 - \lambda \Lambda_{\mu\mu}) B_{\mu} S_{\mu}^i), \quad (6.3)$$

ahol \mathbf{S}^i az $i \in \{A, B\}$ atom spinvektor-operátora, az anizotrópiát $\Lambda_{\mu\mu}$ tag okozza, és $\Lambda_{xx} = 0$, $\Lambda_{yy} = \Lambda_{zz}$, és x -irány az atomokat összekötő egyenes iránya.

A 3/2-es spinek Chern-száma 3, és mivel kettő van belőle, a rendszer teljes topologikus töltése 6. A Hamilton-operátornak forgásszimmetriája van z -tengely körül, így degenerációs pontokat a z tengelyen várunk, azon kívül gyűrűket várhatunk.

A numerikus számításokból azt kaptuk, hogy a topologikus töltésnek megfelelő számú degenerációs pont van ferromágneses kölcsönhatás esetén. Antiferromágneses esetben a



14. ábra. *Co dimer esetén a degenerációs pontok lehetnek diszkrét pontok és lehetnek folytonosan sokan a kölcsönhatástól függően. a) Ferromágneses kölcsönhatás esetén a degenerációk diszkrét pontokban jelennek meg. Paraméterek: $J = -1.0$, $\Lambda = 0.5$, $\lambda = 0.5$ b)-c) antiferromágneses esetben a degenerációs pontok felületekre esnek, a xy síkban való metszetet láthatjuk az ábrán. Kisebb anizotrópia tagok esetén a felületek egymást tartalmazzák, míg nagyobb esetén a két belső szétválík. Paraméterek: b) $J = +1.0$, $\Lambda = 0.5$, $\lambda = 0.5$ és c) $J = +1.0$, $\Lambda = 0.8$, $\lambda = 0.8$*

pontok a $B_z = 0$ síkban is folytonosan sokan vannak, a teljes térben felületek mentén helyezkednek el (14. ábra).

6.4. Króm spin-5/2 trimer [10]

A krómatomok aranyfelületen 5/2-es spinként írhatók le, az (1,1,1) irányú felületre helyezett 3 darab krómatom az eddigieknél nagyobb rendszer. Mivel az 5/2-es spin 6 állapotú, három ilyen kölcsönható spin már 216 dimenziós Hilbert-térrel rendelkezik. A rendszer geometriai kialakítása miatt rendelkezik C_{3v} szimmetriával, és az időtükrözésnek megfelelő inverziós szimmetriával is, így a paramétertérben a degenerációs pontokat D_{3d} szimmetriával várjuk megjeleníteni.

A Hamilton-operátor

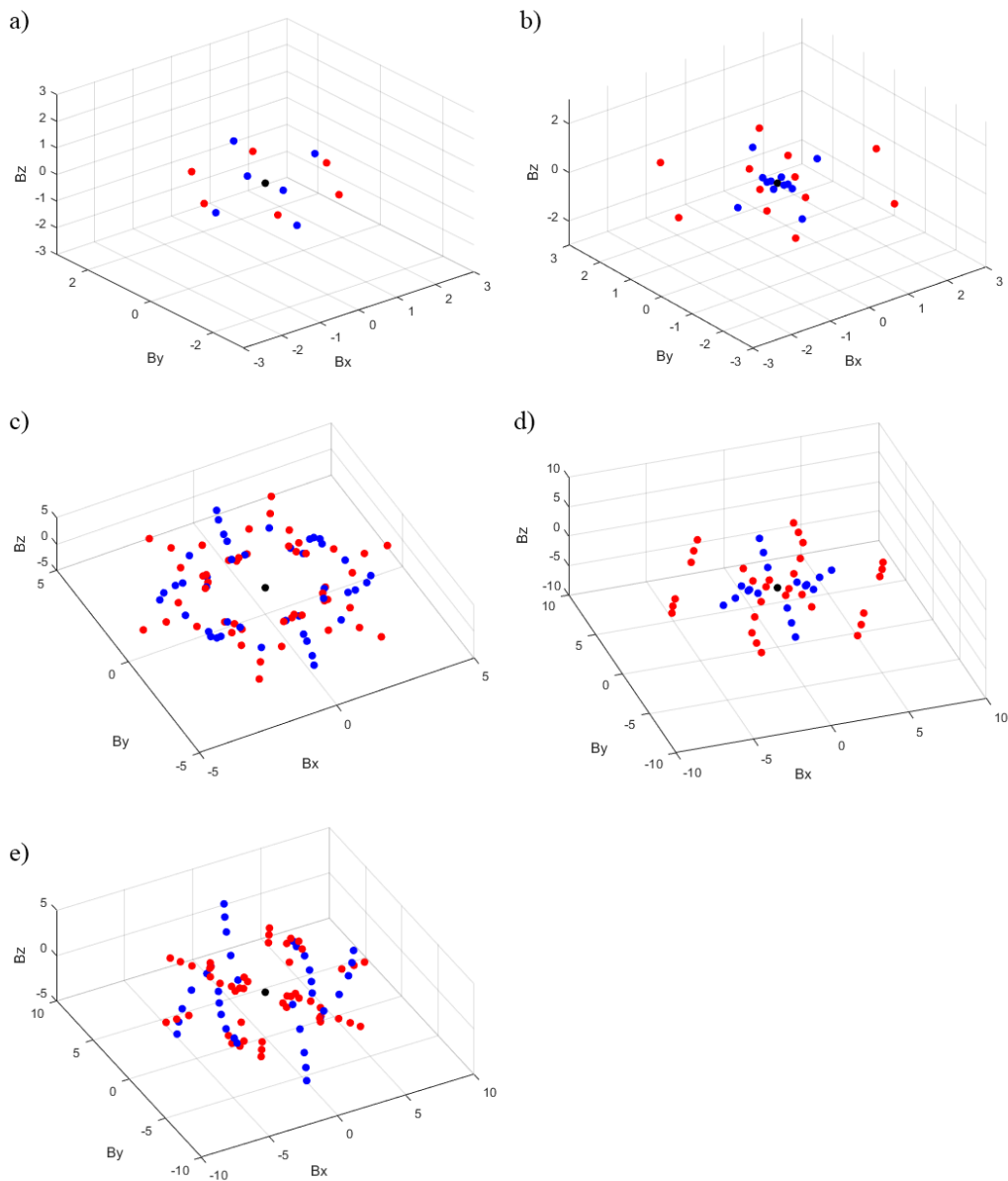
$$H = - \sum_i \left(\mathbf{B}^T \hat{\mathbf{g}}_i^T \mathbf{S}_i + K (S_i^z)^2 \right) + \sum_{i \neq j} \left[J_{\parallel} S_i^{\tilde{z}} S_j^{\tilde{z}} + J_{\perp} (S_i^{\tilde{x}} S_j^{\tilde{x}} + S_i^{\tilde{y}} S_j^{\tilde{y}}) \right], \quad (6.4)$$

ahol $\hat{\mathbf{g}}_i$ g-tenzorok y -főtengelye a σ_i tükörsíkokra merőlegesek, a síkban akárhogy állhatnak. A K -tag a z -irányú anizotrópiának felel meg, ezt a felület okozza, valamint $J_{\parallel, \perp}$ a kicserélődési kölcsönhatás amplitúdói, ahol $S_i^{\tilde{z}} S_j^{\tilde{z}}$ kifejezésben \tilde{z} az i, j spineket összekötő irány, $S^{\tilde{z}}$ a spinvektor-operátor ilyen irányú vetülete.

A 15. ábrán láthatjuk a rendszer degenerációs pontjait két paraméterszett esetén, 1/2-es 3/2 és 5/2-es spin esetén. A feles spinnél az anizotrópia tagnak nincsen szerepe, csak egy konstans eltolást okoz. A szimmetria következtében az origóban a Chern-szám ± 3 ,

ha kicsit lerontjuk két pont távozik az origóból, az egyik feles spines futtatás esetén ez összesen 27 darab degenerációs pontot jelent.

A Chern-számok összege is megegyezik az elvárttal, példaként a c) ábrán a 3/2-es spin esetén: $3 \times (+3) = 1 \times (+3) + 48 \times (+1) + 42 \times (-1)$, összesen 91 darab pont van.



15. ábra. Cr trimer degenerációs pontjai. Piros pontok +1, kék pontok -1 Chern-számmal, az origóban ± 3 . a)b) 1/2-es spin c)d) 3/2-es spin e) 5/2-es spin. A paraméterek: a)c)e) $J_{\parallel} = 1$, $J_{\perp} = 0.8$, g-tenzorok z-főtengelyeinek szöge 0.2 radián szöget zár be z-tengellyel, x-főérték: 0.9, y-főérték: 0.8, z-főérték: 1, $K = 0.2$ b)d) $J_{\parallel} = 1$, $J_{\perp} = 0.5$, g-tenzorok z-főtengelyeinek szöge 0.6 radián szöget zár be z-tengellyel, x-főérték: 0.7, y-főérték: 0.3, z-főérték: 1, $K = 0.5$

7. Összefoglalás

A dolgozatomban először rövid bevezető után bemutattam a topologikus eszközöket, melyek segítségével bonyolult spinrendszerek mágneses térbeli viselkedéséről egyszerűbb állításokat tehetünk. Bemutattam, a legegyszerűbb spinrendszert felhasználva, hogy az általánosabb rendszerek mágneses térbeli viselkedésében alapvető jelenség degenerált alapállapotok jelenléte.

Ezután áttértem két darab feles spint tartalmazó rendszer tárgyalásába, mivel egy ilyen rendszert valósítottunk meg korábban kísérletileg. Bemutattam a két modellt is a kölcsönható spinekre, a kísérleti megvalósításhoz valamivel közelebb álló Hubbard-modellt, ahol a spineket kvantumpöttyökbe csapdázott elektronok valósítanak meg, valamint bemutattam az exchange-modellt, amely tisztán egy spinrendszert ír le, csak spin szabadsági foka van.

A két rendszer között a Schrieffer–Wolff transzformációval sikerült is kapcsolatot létesíteni, a Hubbard-modellből származtatott exchange-modell kizárólag egy forgatással rendelkező antiferromágneses kölcsönhatást ír le.

A Hubbard-modellre mutattam egy egzakt megoldást, ahol láthattuk, hogy a degenerációs pontok száma lehet kettő vagy hat, azaz nem feltétlenül egyezik meg a teljes topologikus töltéssel (kettő). Áttérve a Hubbard-modellből származtatott exchange-modellre, ahol egyszerűbb formulákkal lehet számolni, azt sikerült belátni, hogy a pontok egyenkénti topologikus töltését összeadva a rendszer teljes topologikus töltését kapjuk. A kettő és hat pont közötti átmenetre is sikerült analitikus eredményeket kapni, két ellentétes töltésű pontpár tud megjeleníteni vagy kioltani egymást.

A hat pont feltétele, hogy a rendszerben nincsen effektív spinforgatás a két kvantumpötty között, és erre készítettem statisztikát, amely szintén alátámasztotta hogy a hat pont esete generikus, de arányuk elenyésző.

Kihasználva az exchange-modell nyújtotta szabadságot megvizsgáltam az esetleges ferromágneses kölcsönhatás hatását a pontokra, illetve megnéztem, hogy diagonális tenzonnal leírt kölcsönhatás miként viselkedik.

Végül áttértem több és nagyobb spineket tartalmazó rendszerek numerikus vizsgálatára, ahol megnéztem hogy a topológia általános állításait miként lehet egyes rendszerekre érvényesíteni. Láthattuk, hogy a degenerációs pontok jelenléte spinrendszerek általános tulajdonsága, de a pontok számáról már nehéz állításokat megfogalmazni.

8. Függelék

8.1. Egy feles spin mágneses térben

A mágneses térbe helyezett magányos spin esete analitikusan megoldható. Ha a g -tenzort az egységmátrixnak választjuk, akkor a Hamilton-operátor az alábbi formájú:

$$H(\mathbf{B}) = -\frac{\hbar\mu_B}{2}\mathbf{B}^T\boldsymbol{\sigma} \quad (8.1)$$

Az alapállapot gömbkoordinátákkal:

$$|\Psi_0(B, \theta, \varphi)\rangle = \begin{pmatrix} e^{-\frac{i\varphi}{2}} \cos \frac{\theta}{2} \\ e^{+\frac{i\varphi}{2}} \sin \frac{\theta}{2} \end{pmatrix}, \quad (8.2)$$

így

$$|\nabla_{\mathbf{B}}\Psi_0(B, \theta, \varphi)\rangle = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2B}e^{-\frac{i\varphi}{2}} \sin \frac{\theta}{2} \\ +\frac{1}{2B}e^{+\frac{i\varphi}{2}} \cos \frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \mathbf{e}_r + \begin{pmatrix} \frac{-i}{2B \sin \theta} e^{-\frac{i\varphi}{2}} \cos \frac{\theta}{2} \\ \frac{+i}{2B \sin \theta} e^{+\frac{i\varphi}{2}} \sin \frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \mathbf{e}_\varphi. \quad (8.3)$$

Tehát a Berry-konnexió:

$$\mathcal{A}(\mathbf{B}) = \frac{\cos(\theta)}{2B \sin(\theta)} \mathbf{e}_\varphi, \quad (8.4)$$

a Berry-görbület pedig:

$$\mathcal{B}(\mathbf{B}) = -\frac{1}{2B^2} \mathbf{e}_r. \quad (8.5)$$

Így a Chern-szám egy origó középpontú B sugarú gömbfelületre számítva:

$$C(\partial V) = \frac{1}{2\pi} \int \frac{1}{2} d\Omega = 1, \quad (8.6)$$

amely érték minden más origót tartalmazó felületre is ugyanennyi.

Ha a g -tenzort az egységmátrix mínusz egyszeresének választjuk, akkor az alapállapot a feles spin másik, a mágneses térrel ellentétes állapota lesz. Ha erre is elvégezzük a számolást, akkor -1 -et kapunk az origó Chern-számára. Ebből a két példából már bármilyen nem elfajult g -tenzort megkonstruálhatunk folytonos deformációval. A Chern-számra ezt az eredményt egy képlettel a

$$C = \text{sgn} \det \hat{\mathbf{g}} \quad (8.7)$$

formában írhatjuk.

8.2. Két nem kölcsönható spin

Két nem kölcsönható spin egymástól függetlenül áll be a mágneses tér irányába, ekkor az alapállapot a két egyrészecske alapállapot szorzata:

$$|\Psi_0\rangle = |\Psi_0^1\rangle |\Psi_0^2\rangle, \quad (8.8)$$

ezáltal a várhatóértékek, így a topologikus mennyiségek is egyszerűen összegződnek:

$$\mathcal{A} = i \langle \Psi_0^2 | \langle \Psi_0^1 | \nabla_{\vec{B}} | \Psi_0^1 \rangle | \Psi_0^2 \rangle = i \langle \Psi_0^1 | \nabla_{\vec{B}} | \Psi_0^1 \rangle + i \langle \Psi_0^2 | \nabla_{\vec{B}} | \Psi_0^2 \rangle = \mathcal{A}_1 + \mathcal{A}_2, \quad (8.9)$$

így

$$C = C_1 + C_2. \quad (8.10)$$

8.3. Kölcsönhatás csökkenti az alapállapot energiáját

Nulla mágneses tér mellett a Hubbard-modell kölcsönható tagja négydimenziós altéren:

$$H = \begin{pmatrix} V_L & -t & t & 0 \\ -t & 0 & 0 & -t \\ t & 0 & 0 & t \\ 0 & -t & t & V_R \end{pmatrix} \quad (8.11)$$

Ennek nulla sajátértékkel sajátállapota a $T0$ triplet állapot, a mátrix tovább egyszerűsíthető a középső két bázisvektor 45° -os elforgatásával. Elhagyva $T0$ -át a maradék három állapot Hamilton-operátora:

$$H = \begin{pmatrix} V_L & \sqrt{2}t & 0 \\ \sqrt{2}t & 0 & \sqrt{2}t \\ 0 & \sqrt{2}t & V_R \end{pmatrix} \quad (8.12)$$

Mivel ennek a determinánsa $-2t^2(V_L + V_R)$, ezért van negatív sajátértéke, azaz az alapállapot energiája csökken ahhoz képest, mint ami kölcsönhatás nélkül volt.

8.4. Forgatás nélkül hat degenerációs pont van

Legyen $\hat{A} = \hat{G}_R^{-1}$ és $\hat{B} = \hat{G}_L$ a két pozitív definit szimmetrikus mátrix, ekkor $\hat{A}\hat{B}$ nem feltétlenül szimmetrikus, sem pozitív definit, viszont a sajátértékei pozitív valós számok. Ehhez végezzünk egy bázistranszformációt a $\sqrt{\hat{B}}$ mátrixszal, mivel ez nem változtat a

sajátértékeken:

$$(\hat{\mathbf{A}}\hat{\mathbf{B}})' = \sqrt{\hat{\mathbf{B}}}\hat{\mathbf{A}}\hat{\mathbf{B}}\left(\sqrt{\hat{\mathbf{B}}}\right)^{-1} = \sqrt{\hat{\mathbf{B}}}\hat{\mathbf{A}}\sqrt{\hat{\mathbf{B}}}, \quad (8.13)$$

ez viszont szimmetrikus, és bármilyen \mathbf{v} -re:

$$\mathbf{v}^T\sqrt{\hat{\mathbf{B}}}\hat{\mathbf{A}}\sqrt{\hat{\mathbf{B}}}\mathbf{v} = \left(\sqrt{\hat{\mathbf{B}}}\mathbf{v}\right)^T \hat{\mathbf{A}} \left(\sqrt{\hat{\mathbf{B}}}\mathbf{v}\right), \quad (8.14)$$

ezért pozitív definit is, tehát három pozitív valós sajátértéke van a transzformált és így az eredeti mátrixnak is.

8.5. Effektív g-tenzor determinánása

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{g}} &= (\mathbb{1} - \tilde{\mathbf{n}}\tilde{\mathbf{n}}^T) \frac{g_R \hat{\mathbf{R}}\hat{\mathbf{g}}_L - g_L \hat{\mathbf{g}}_R}{\sqrt{g_L^2 + g_R^2}} + \tilde{\mathbf{n}}\tilde{\mathbf{n}}^T \frac{g_R^2 \hat{\mathbf{R}}\hat{\mathbf{g}}_L + g_L^2 \hat{\mathbf{g}}_R}{g_L^2 + g_R^2} = \\ &= \frac{g_R \hat{\mathbf{R}}\hat{\mathbf{g}}_L - g_L \hat{\mathbf{g}}_R}{\sqrt{g_L^2 + g_R^2}} + \tilde{\mathbf{n}}\tilde{\mathbf{n}}^T \left[\frac{g_R^2 \hat{\mathbf{R}}\hat{\mathbf{g}}_L + g_L^2 \hat{\mathbf{g}}_R}{g_L^2 + g_R^2} - \frac{g_R \hat{\mathbf{R}}\hat{\mathbf{g}}_L - g_L \hat{\mathbf{g}}_R}{\sqrt{g_L^2 + g_R^2}} \right] = \\ &= \hat{\mathbf{g}}_R \frac{\hat{\mathbf{g}}_R^{-1} \hat{\mathbf{R}}\hat{\mathbf{g}}_L - \frac{g_L}{g_R} \mathbb{1}}{\sqrt{1 + \frac{g_L^2}{g_R^2}}} + \tilde{\mathbf{n}}\tilde{\mathbf{n}}^T \hat{\mathbf{g}}_R \left[\frac{\hat{\mathbf{g}}_R^{-1} \hat{\mathbf{R}}\hat{\mathbf{g}}_L + \frac{g_L^2}{g_R^2} \mathbb{1}}{1 + \frac{g_L^2}{g_R^2}} - \frac{\hat{\mathbf{g}}_R^{-1} \hat{\mathbf{R}}\hat{\mathbf{g}}_L - \frac{g_L}{g_R} \mathbb{1}}{\sqrt{1 + \frac{g_L^2}{g_R^2}}} \right] = \\ &= \hat{\mathbf{g}}_R \frac{\hat{\mathbf{M}} - \lambda_n \mathbb{1}}{\sqrt{1 + \lambda_n^2}} + \tilde{\mathbf{n}}\tilde{\mathbf{n}}^T \hat{\mathbf{g}}_R \left[\frac{\hat{\mathbf{M}} + \lambda_n^2 \mathbb{1}}{1 + \lambda_n^2} - \frac{\hat{\mathbf{M}} - \lambda_n \mathbb{1}}{\sqrt{1 + \lambda_n^2}} \right], \end{aligned} \quad (8.15)$$

ahol $\hat{\mathbf{M}} = \hat{\mathbf{g}}_R^{-1} \hat{\mathbf{R}}\hat{\mathbf{g}}_L$, és $\lambda_n = g_L/g_R$ sajátértéke. Legyen

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{A}} &= \hat{\mathbf{g}}_R \frac{\hat{\mathbf{M}} - \lambda_n \mathbb{1}}{\sqrt{1 + \lambda_n^2}} \\ \hat{\mathbf{B}} &= \hat{\mathbf{g}}_R \frac{\hat{\mathbf{M}} + \lambda_n^2 \mathbb{1}}{1 + \lambda_n^2}, \end{aligned} \quad (8.16)$$

tehát

$$\hat{\mathbf{g}} = \hat{\mathbf{A}} + \tilde{\mathbf{n}}\tilde{\mathbf{n}}^T [\hat{\mathbf{B}} - \hat{\mathbf{A}}] \quad (8.17)$$

Ekkor alkalmazzuk a mátrix determináns lemmát [11]:

$$\det(\hat{\mathbf{A}} + \mathbf{u}\mathbf{v}^T) = (1 + \mathbf{v}^T \hat{\mathbf{A}}^{-1} \mathbf{u}) \det(\hat{\mathbf{A}}), \quad (8.18)$$

ahol

$$\begin{aligned} \mathbf{u} &= \tilde{\mathbf{n}} \\ \mathbf{v}^T &= \tilde{\mathbf{n}}^T [\hat{\mathbf{B}} - \hat{\mathbf{A}}], \end{aligned} \quad (8.19)$$

így

$$\begin{aligned} \det \hat{\mathbf{g}} &= \det \left(\hat{\mathbf{A}} + \tilde{\mathbf{n}} \tilde{\mathbf{n}}^T [\hat{\mathbf{B}} - \hat{\mathbf{A}}] \right) = \\ &= \left(1 + \tilde{\mathbf{n}}^T [\hat{\mathbf{B}} - \hat{\mathbf{A}}] \hat{\mathbf{A}}^{-1} \tilde{\mathbf{n}} \right) \det(\hat{\mathbf{A}}) = \tilde{\mathbf{n}}^T \hat{\mathbf{B}} \hat{\mathbf{A}}^{-1} \tilde{\mathbf{n}} \det(\hat{\mathbf{A}}) \end{aligned} \quad (8.20)$$

Használjuk fel, hogy $\tilde{\mathbf{n}} = \hat{\mathbf{g}}_{\mathbf{R}} \mathbf{n} / |\hat{\mathbf{g}}_{\mathbf{R}} \mathbf{n}|$, ahol \mathbf{n} az $\hat{\mathbf{M}}$ mátrix sajátértéke λ_n sajátértékkel. Formálisan írható, hogy

$$\begin{aligned} \det(\hat{\mathbf{A}}) &= \frac{\det(\hat{\mathbf{g}}_{\mathbf{R}})(\lambda_n - \lambda_{n'}) (\lambda_n - \lambda_{n''}) (\lambda_n - \lambda_{n'''})}{(1 + \lambda_n^2)^{\frac{3}{2}}} \\ \hat{\mathbf{A}}^{-1} \tilde{\mathbf{n}} &= \frac{\mathbf{n} \sqrt{1 + \lambda_n^2}}{(\lambda_n - \lambda_{n'}) |\hat{\mathbf{g}}_{\mathbf{R}} \mathbf{n}|} \\ \tilde{\mathbf{n}}^T \hat{\mathbf{B}} \mathbf{n} &= \frac{|\hat{\mathbf{g}}_{\mathbf{R}} \mathbf{n}| \lambda_n (1 + \lambda_n)}{(1 + \lambda_n^2)^2} \end{aligned} \quad (8.21)$$

Együtt kapjuk, hogy

$$\det \hat{\mathbf{g}} = \det \hat{\mathbf{g}}_{\mathbf{R}} \frac{\lambda_n (1 + \lambda_n)}{(1 + \lambda_n^2)^2} (\lambda_n - \lambda_{n'}) (\lambda_n - \lambda_{n''}) \quad (8.22)$$

A determináns lemma feltétele, hogy $\hat{\mathbf{A}}$ invertálható, így a levezetés úgy igaz, ha egy invertálható mátrixot teszünk $\hat{\mathbf{A}}$ helyére, és tartunk vele $\hat{\mathbf{A}}$ -hoz.

Köszönetnyilvánítás

A kutatást a Nemzeti Kutatási Fejlesztési és Innovációs Alap támogatta a 2017-1.2.1-NKP-2017-00001. számú projekt részeként.

AZ EMBERI ERŐFORRÁSOK MINISZTERIUMA ÚNKP-18-2 KÓDSZÁMÚ ÚJ NEMZETI KIVÁLÓSÁG PROGRAMJÁNAK TÁMOGATÁSÁVAL KÉSZÜLT

Irodalomjegyzék

- [1] G. Frank, „Topologikusan védett alapállapotú degenerációk két spin rendszerben,” *BME TTK TDK*, 2017.
- [2] S.-Y. Xu, I. Belopolski, N. Alidoust, M. Neupane, G. Bian, C. Zhang, R. Sankar, G. Chang, Z. Yuan, C.-C. Lee, *et al.*, „Discovery of a weyl fermion semimetal and topological fermi arcs,” *Science*, vol. 349, no. 6248, pp. 613–617, 2015.
- [3] Z. Scherübl, A. Pályi, G. Frank, I. Lukács, J. Nygard, G. Zaránd, and S. Csonka, „Observation of spin-orbit coupling induced weyl points and topologically protected kondo effect in a two-electron double quantum dot,” 2017.
- [4] J. K. Asbóth, L. Oroszlány, and A. Pályi, *A short course on topological insulators: Band structure and edge states in one and two dimensions*, vol. 919. Springer, 2016.
- [5] A. Crippa, R. Maurand, L. Bourdet, D. Kotekar-Patil, A. Amisse, X. Jehl, M. Sanquer, R. Laviéville, H. Bohuslavskyi, L. Hutin, *et al.*, „Electrical spin driving by g-matrix modulation in spin-orbit qubits,” *Physical review letters*, vol. 120, no. 13, p. 137702, 2018.
- [6] R. Winkler, *Spin-orbit coupling effects in two-dimensional electron and hole systems*, vol. 191. Springer Science & Business Media, 2003.
- [7] S. Nadj-Perge, V. Pribiag, J. Van den Berg, K. Zuo, S. Plissard, E. Bakkers, S. Frolov, and L. Kouwenhoven, „Spectroscopy of spin-orbit quantum bits in indium antimonide nanowires,” *Physical review letters*, vol. 108, no. 16, p. 166801, 2012.
- [8] P. Udvarhelyi, V. O. Shkolnikov, A. Gali, G. Burkard, and A. Pályi, „Spin-strain interaction in nitrogen-vacancy centers in diamond,” *Physical Review B*, vol. 98, no. 7, p. 075201, 2018.
- [9] A. Spinelli, M. Gerrits, R. Toskovic, B. Bryant, M. Ternes, and A. Otte, „Exploring the phase diagram of the two-impurity kondo problem,” *Nature communications*, vol. 6, p. 10046, 2015.
- [10] B. Lazarovits, P. Simon, G. Zarand, and L. Szunyogh, „Exotic kondo effect from magnetic trimers,” *Physical review letters*, vol. 95, no. 7, p. 077202, 2005.
- [11] J. Ding and A. Zhou, „Eigenvalues of rank-one updated matrices with some applications,” *Applied Mathematics Letters*, vol. 20, no. 12, pp. 1223–1226, 2007.