

РОЛЬ ВАКАНСИЙ В СПИН-ЖИДКОСТНОЙ МОДЕЛИ ЯО–ЛИ

В. А. Поляков^{a}, Н. Б. Перкинс^{b**}*

^a *Московский физико-технический институт
(Национальный исследовательский университет)
141701, Долгопрудный, Московская обл., Россия*

^b *School of Physics and Astronomy, University of Minnesota
55455, Minneapolis, MN, USA*

Поступила в редакцию 17 июня 2023 г.,
после переработки 25 июня 2023 г.
Принята к публикации 25 июня 2023 г.

Рассмотрено влияние вакансий на низкоэнергетический спектр возбуждений квантовой спиновой жидкости, реализуемой в точно-решаемой модели Яо–Ли [Н. Yao and D.-H. Lee, Phys. Rev. Lett. **107**, 087205 (2011)]. Физически, вакансии могут возникнуть по различным причинам, например, вследствие отсутствия магнитных моментов на решетке, либо из-за наличия немагнитных примесей, либо из-за случайного уменьшения локальных связей магнитных моментов с остальной решеткой. Численно показано, что конечная плотность случайных вакансий в этой модели приводит к накоплению состояний вблизи нулевой энергии, что может быть обнаружено в изменении поведения теплоемкости при низких температурах. Более того, показано, что низкоэнергетические моды более локализованы, чем остальные собственные моды. Этот эффект пориллюстрирован с помощью обратного коэффициента участия (IPR). При нарушении симметрии обращения времени, например из-за присутствия магнитного поля, в фермионном спектре модели открывается щель и в ней возникают локализованные состояния, индуцированные вакансиями. Энергии этих состояний зависят от структуры взаимодействий, отвечающих за нарушение симметрии обращения времени.

Статья для специального выпуска ЖЭТФ, посвященного 95-летию Л. А. Прозоровой

DOI: 10.31857/S0044451023100140

EDN: XLNIRM

1. ВВЕДЕНИЕ

Научные исследования последних лет показали, что топология, фрустрация и беспорядок являются ключевыми составляющими для возникновения необычных фаз вещества в твердотельных системах с сильным спин-орбитальным взаимодействием [2]. В слабо-коррелированных системах спин-орбитальное взаимодействие приводит к реализации топологически нетривиальных состояний, среди которых топологический изолятор является одним из наиболее ярких примеров [3–5]. В сильно коррелированных системах, так называемых моттовских изо-

ляторах, может реализоваться квантовая спиновая жидкость (КСЖ).

Квантовые спиновые жидкости были теоретически предсказаны в 1973 г. Ф. Андерсоном [6]. КСЖ обладает необычными свойствами. В КСЖ магнитные моменты (спины) оказываются неупорядоченными, и в основном состоянии они все запутанны друг с другом. То есть направление спина на одном узле зависит от направления спина на другом узле, на каком бы расстоянии они ни находились. Более того, зачастую магнитные возбуждения в КСЖ несут спин $1/2$, т.е. являются фермионами. Квантовая запутанность и дробность элементарных возбуждений обуславливает интересные свойства КСЖ, так что различные модели, реализующие КСЖ, представляют большой интерес и активно исследуются [6–12]. Например, спин-орбитальное взаимодействие и сильные корреляции между электронами позволяют реализовать модель Китаева на шестиугольной решетке [13]. Эта модель имеет осо-

* E-mail: poliakov.va@phystech.edu

** E-mail: nperkins@umn.edu

бое значение, поскольку она была первой точно решаемой моделью КСЖ в двух измерениях [13]. В настоящее время известны и другие модели, имеющие точное решение, основное состояние которых представляет собой КСЖ [1, 14–18].

Спиновая жидкость — очень редкое магнитное состояние вещества, и до сих пор не найдено вещества, которое бы однозначно являлось КСЖ. Тем не менее, в последние годы появилось много магнитных материалов, которые, как считается, могут быть адекватно описаны моделями КСЖ. Такие материалы активно исследуются экспериментаторами [9, 11, 12]. В некоторых из них, в основном в соединениях переходных металлов с сильным спин-орбитальным взаимодействием и соответствующей трехкоординатной геометрией [19, 20], возникает китаевское взаимодействие, при котором на каждом ребре решетки взаимодействуют компоненты спина только одного типа. Это позволяет изучать свойства китаевской КСЖ в реальных материалах [13].

К сожалению, прямое экспериментальное наблюдение КСЖ довольно проблематично, так как отсутствие дальнего магнитного порядка, которого может не быть по ряду причин, не означает, что основное состояние системы это спиновая жидкость. Например, отсутствие дальнего порядка может быть вызвано наличием беспорядка в системе и, поскольку в природе нет абсолютно чистых материалов, важно понять, является ли подавление спинового упорядочения результатом внутренних свойств КСЖ или обусловлено беспорядком в системе.

Эффекты от беспорядка, проявляющиеся в низкоэнергетических свойствах китаевской КСЖ [21–28], во многом похожи на эффекты локализации электронных состояний в твердых телах при наличии беспорядка [29, 30]. Это связано с тем, что при фиксированных значениях потоков фермионные квазичастицы, описывающие возбуждения в китаевской КСЖ даже в присутствии замороженного беспорядка, остаются невзаимодействующими, и, следовательно, идеи Андерсоновской локализации применимы [29]. Более того, то, что модель Китаева с беспорядком по-прежнему точно решается, позволяет проводить прямые численные вычисления. В предыдущих работах было показано, что небольшая концентрация вакансий в основном сохраняет спинжидкостное поведение в модели Китаева, но приводит к определенным изменениям в его низкоэнергетическом спектре [25, 26, 28]. В частности, связанные с вакансиями майорановские состояния образуют пик в плотности состояний при низких энергиях, форма которого хорошо описывается степен-

ном законом. Кроме того, состояния внутри этого пика более локализованы, чем другие состояния в системе [26]. Локализация низкоэнергетических состояний особенно сильна, когда симметрия обращения времени нарушена трехчастичным взаимодействием, являющимся эффектом внешнего магнитного поля. Другая ситуация возникает в китаевской КСЖ с беспорядком на связях [23], где локализация происходит не на низких, а на высоких энергиях, образуя так называемые хвосты Лифшица [30].

Системы с локализованными майорановскими модами потенциально могут служить для реализации топологических кубитов, которые в будущем позволят проводить квантовые вычисления, устойчивые к локальным возмущениям и внешним помехам [13, 31–35]. Это, в свою очередь, поможет сделать квантовые компьютеры более надежными. Существуют предложения по созданию масштабируемых сетей таких майорановских мод: например, теоретически было показано, что в двумерном $(p + ip)$ -сверхпроводнике каждый вихрь содержит одну локализованную и топологически защищенную майорановскую моду [36–39]. Таким образом, в системе с $2n$ вихрями имеется $2n$ мод, которые слабо гибридизуются друг с другом при больших межвихревых расстояниях. В некотором смысле, модель Китаева с низкой плотностью вакансий также представляет собой сеть из слабо гибридизующихся между собой связанных майорановских состояний [25, 26, 28].

Целью настоящей работы является изучение низкоэнергетических квазилокализованных майорановских состояний, которые возникают в модели Яо–Ли [1] при наличии вакансий. Модель Яо–Ли точно решается, и ее основным состоянием является КСЖ [1]. В настоящее время не известен материал, который описывался бы этой моделью, но в будущем возможность получения китаевских взаимодействий между $J_{eff} = 3/2$ в двумерных ван-дер-ваальсовых магнетиках [40] дает нам экспериментальную мотивацию для изучения природы этой экзотической КСЖ. Модель Яо–Ли имеет не только спиновые, но и дополнительные локальные орбитальные степени свободы, которые подобно модели Китаева могут быть представлены с помощью майорановских фермионов [1], однако, в отличие от модели Китаева, ее фермионное представление включает три типа майорановских фермионов, образующих $(S = 1)$ -представление группы $SU(2)$.

Модель Яо–Ли обладает калибровочной симметрией Z_2 с щелевыми вихревыми (потокowymi) Z_2 -возбуждениями, которые определены исключительно в терминах орбитальных степеней свободы. Ко-

гда симметрия обращения времени (СОВ) нарушается, каждый тип майорановских фермионов ведет себя как квазичастица Боголюбова в киральном $(p + ip)$ -сверхпроводнике [1]. В результате каждый Z_2 -оператор потока связывает три нулевые майорановские моды, защищенные $SU(2)$ -симметрией. В данной статье продемонстрировано, что аналогично модели Китаева с беспорядком на узлах [21, 22, 25], вакансия приводит к появлению моды с нулевой энергией и квазилокализованной волновой функцией на границе связанного с ней плакета (на другой подрешетке вокруг вакансии), получившей название p -моды. Кроме того, когда СОВ не нарушена или когда нарушающее ее внешнее поле мало, вакансия и Z_2 -поток образуют связанное состояние. Таким образом, при нарушении СОВ вакансия приобретает связанную с ней топологически защищенную моду с нулевой энергией, называемую f -модой. Число таких топологических мод зависит от типа взаимодействия нарушающего СОВ: если оно сохраняет $SU(2)$ -симметрию, то мы имеем три майорановские моды с нулевой энергией, однако если оно нарушает ее, то число нулевых мод меньше.

2. ОПИСАНИЕ МОДЕЛИ

Модель Яо–Ли [1] определена на шестиугольной решетке, каждый узел которой представляет собой три связанные между собой вершины (см. рис. 1),

$$H_{YL} = \tilde{J} \sum_i \mathbf{S}_i^2 + \sum_{\langle ij \rangle_\lambda} J_{ij}^\lambda [\tau_i^\lambda \tau_j^\lambda] [\mathbf{S}_i \mathbf{S}_j], \quad (1)$$

где суммирование ведется по всем вершинам шестиугольной решетки, обозначенным как i, j , $\mathbf{S}_i = \mathbf{S}_{i,1} + \mathbf{S}_{i,2} + \mathbf{S}_{i,3}$ — полный спин каждого треугольника, а операторы τ_i^λ , описывающие орбитальные степени свободы, определяются следующим образом:

$$\tau_i^x = 2(\mathbf{S}_{i,1} \mathbf{S}_{i,2} + 1/4),$$

$$\tau_i^y = 2(\mathbf{S}_{i,1} \mathbf{S}_{i,3} - \mathbf{S}_{i,2} \mathbf{S}_{i,3})/\sqrt{3},$$

$$\tau_i^z = 4\mathbf{S}_{i,1} \cdot (\mathbf{S}_{i,2} \times \mathbf{S}_{i,3})/\sqrt{3}.$$

Если $\tilde{J} \gg J^\lambda$, то предполагая, что все связи одного вида λ имеют одинаковую силу взаимодействия J^λ , можно рассматривать только состояния с суммарным спином на каждом треугольнике, равным

$$\mathbf{S} = \frac{1}{2} \boldsymbol{\sigma},$$

где τ_i^λ обозначают матрицы Паули. В такой ситуации первый член в (1) является константой, а второй член может быть переписан как

$$H = \frac{1}{4} \sum_{\langle ij \rangle_\lambda} J_{ij}^\lambda [\tau_i^\lambda \tau_j^\lambda] [\boldsymbol{\sigma}_i \boldsymbol{\sigma}_j]. \quad (2)$$

Аналогично модели Китаева [13], в этой задаче удобно представить спиновые операторы через майорановские фермионы в расширенном гильбертовом пространстве, так что спиновый и орбитальный операторы будут иметь следующие представления [1]:

$$\boldsymbol{\sigma}_i = -i\mathbf{c}_i \times \mathbf{c}_i, \quad \boldsymbol{\tau}_i = -i\mathbf{d}_i \times \mathbf{d}_i. \quad (3)$$

Здесь мы использовали векторные обозначения для майорановских фермионов,

$$\mathbf{c}_i = (c_i^x, c_i^y, c_i^z), \quad \mathbf{d}_i = (d_i^x, d_i^y, d_i^z),$$

с коммутационными соотношениями, заданными следующим образом:

$$\{c_i^\alpha, c_j^\beta\} = \{d_i^\alpha, d_j^\beta\} = \delta_{ij} \delta_{\alpha,\beta},$$

$$\{c_i^\alpha, d_j^\beta\} = 0.$$

Удобно выразить матрицы Паули в терминах майорановских фермионов:

$$\sigma_i^\alpha \tau_i^\beta = i c_i^\alpha d_i^\beta,$$

$$\sigma_i^\alpha = -\frac{\epsilon^{\alpha\beta\gamma}}{2} i c_i^\beta c_i^\gamma, \quad (4)$$

$$\tau_i^\alpha = -\frac{\epsilon^{\alpha\beta\gamma}}{2} i d_i^\beta d_i^\gamma.$$

Подстановка (4) в (2) дает гамильтониан в терминах майорановских фермионов \mathbf{c}_i и операторов связей $\hat{u}_{ij} = -i d_i^\lambda d_j^\lambda$:

$$H = \frac{1}{4} \sum_{\langle ij \rangle_\lambda} J_{ij}^\lambda \hat{u}_{ij} (i \mathbf{c}_i \mathbf{c}_j). \quad (5)$$

Этот гамильтониан описывает три типа невзаимодействующих майорановских фермионов c_i^κ , $\kappa = x, y, z$, связанных с Z_2 -калибровочным полем \hat{u}_{ij} . Операторы \hat{u}_{ij} являются первыми интегралами данного гамильтониана, поэтому $u_{ij} \pm 1$. Более того, гамильтониан (5) имеет глобальную симметрию $SO(3)$, связанную с вращением в пространстве из трех типов майорановских фермионов, и является следствием $SU(2)$ -симметрии исходной спиновой модели (1). По теореме Либа [41], как и в модели Китаева [13], основное состояние имеет нулевой

поток через каждую ячейку p , т. е. $W_p = \Pi_{ij} u_{ij} = 1$ (если $W_p = \Pi_{ij} u_{ij} = -1$, то будем говорить, что поток (вихрь) присутствует). Каждому набору W_p соответствует несколько наборов $\{u_{ij}\}$, отличающихся друг от друга калибровочным преобразованием, которое не изменяет гамильтониан. Мы предполагаем, что калибровка $u_{ij} = 1$ на всех ребрах соответствует отсутствию потоков в основном состоянии. Далее, все три майорановских фермиона имеют одинаковую дисперсию для любого распределения потоков, т. е. фермионный спектр является трехкратно вырожденным во всей зоне Бриллюэна. В случае нулевого потока в основном состоянии их дисперсии идентичны тем, которые были получены в модели Китаева [13], т. е. они либо бесщелевые с линейной дисперсией, либо с щелью в зависимости от соотношения параметров J_λ :

$$\varepsilon_{\mathbf{k}}^\kappa = \sum_{\lambda=x,y,z} J^\lambda e^{i\mathbf{k}\cdot\hat{\mathbf{r}}_\lambda},$$

где $\hat{\mathbf{r}}_{x,y,z}$ обозначает вектор, направленный от любой вершины в подрешетке A к ее ближайшим соседям в подрешетке B .

2.1. Нарушение симметрии обращения времени

Нарушение СОВ обычно происходит при ненулевом магнитном поле. Задача с магнитным полем, включенным в гамильтониан в виде зеемановского взаимодействия, не может быть решена точно, так как включение поля не сохраняет часть первых интегралов. Однако существует несколько способов добавить в гамильтониан взаимодействие, нарушающее СОВ и имитирующее эффект магнитного поля, но оставляющее модель точно решаемой. Следуя идее Китаева [13], запишем теорию возмущений для основного состояния с нулевым потоком и получим эффективный гамильтониан в фиксированной калибровке, который, по-прежнему, может быть представлен в терминах майорановских фермионов c_i и операторов $\hat{u}_{ij}^\lambda = -id_i^\lambda d_j^\lambda$.

Рассмотрим изотропное китаевское взаимодействие $J^x=J^y=J^z=J$ и запишем возмущение в виде

$$V = \sum_i (h_x \tau_i^x + h_y \tau_i^y + h_z \tau_i^z) + K \sum_{\langle\langle ik \rangle\rangle} \sigma_i \sigma_k, \quad (6)$$

Как легко видеть, четвертый порядок теории возмущений является самым низким порядком теории возмущений, нарушающим СОВ и не меняющим по-

ток через шестигранные ячейки. Он должен содержать три члена с h и один член с K :

$$H^{(4)} = 3! \sum_{ijk} \frac{Kh_x h_y h_z}{\Delta_{jk} \Delta_{jk} \Delta_k} (\sigma_i \sigma_k) \tau_i^x \tau_j^z \tau_k^y, \quad (7)$$

где Δ_k – изменение энергии после применения оператора τ_k^y , а Δ_{jk} – изменение энергии после применения оператора $\tau_j^z \tau_k^y$.

Другая, более общая, форма возмущения (6) имеет вид

$$V = \sum_i (h_x \tau_i^x + h_y \tau_i^y + h_z \tau_i^z) + \sum_{\langle\langle ik \rangle\rangle} \sum_{\lambda,\mu} K^{\lambda\mu} \sigma_i^\lambda \sigma_k^\mu. \quad (8)$$

Здесь $K_{\lambda\mu}$ включает в себя все недиагональные члены, разрешенные симметрией. Предполагая, что

$$K^{\lambda\mu} = K \delta_{\lambda\mu} + (1 - \delta_{\lambda\mu}) K',$$

и используя представление Майораны для спинов σ и псевдоспинов τ , возмущенный гамильтониан можно записать как

$$H = \sum_{\langle ij \rangle} \sum_{\lambda} i J_{ij}^\lambda \hat{u}_{ij} c_i^\lambda c_j^\lambda + \sum_{\langle\langle ik \rangle\rangle} \sum_{\lambda} i \kappa \hat{u}_{ij} \hat{u}_{jk} c_i^\lambda c_k^\lambda + \sum_{\langle\langle ik \rangle\rangle} i \eta \hat{u}_{ij} \hat{u}_{jk} \sum_{\lambda \neq \mu} c_i^\lambda c_k^\mu, \quad (9)$$

где $\langle ij \rangle$ и $\langle\langle ik \rangle\rangle$ обозначают ближайших и вторых ближайших соседей, соответственно, а $\kappa \sim 6 \frac{Kh_x h_y h_z}{J^3}$ и $\eta \sim 6 \frac{K' h_x h_y h_z}{J^3}$ (здесь мы использовали тот факт, что энергия создания потока пропорциональна силе связи $J_{ij}^\lambda \equiv J$, как и в модели Китаева [13]).

2.2. Спектр майорановских фермионов

В состоянии с фиксированным потоком операторы \hat{u}_{ij} в гамильтониане (9) можно заменить соответствующими собственными значениями u_{ij} , так что гамильтониан (9) становится квадратичным по операторам майорановских фермионов. Так как в шестигранной решетке каждая элементарная ячейка l имеет две вершины \mathbf{r}_l^A и \mathbf{r}_l^B , определяющие подрешетки A и B , гамильтониан (9) может быть записан как

$$H = \sum_{\langle l, l' \rangle} \sum_{\lambda} i M_{ll'}^\lambda c_{A,l}^\lambda c_{B,l'}^\lambda + \sum_{\langle\langle l, l' \rangle\rangle} \sum_{\lambda,\mu} i \tilde{M}_{ll'}^{\lambda\mu} (c_{A,l}^\lambda c_{A,l'}^\mu + c_{B,l}^\lambda c_{B,l'}^\mu), \quad (10)$$

где первый член в уравнении (10) описывает прыжки майорановских фермионов на ближайших соседей, определяемых матрицей \hat{M} с элементами

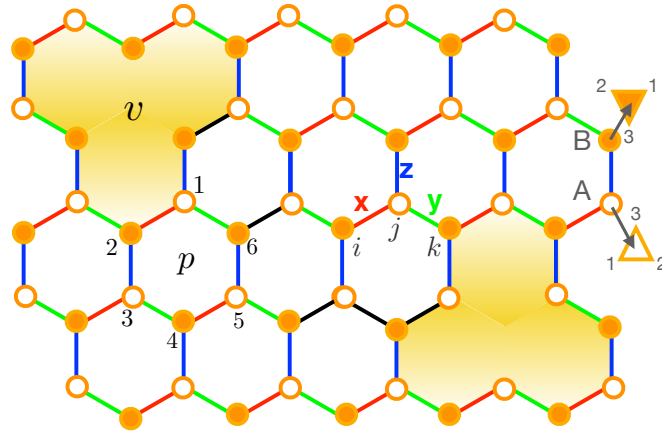


Рис. 1. Схематическое изображение модели Яо-Ли, представляющей собой шестигранную решетку, в которой на каждом узле равноудаленно расположены три спина 1/2 (в вершинах треугольников), связанных между собой обменными взаимодействиями Изинга J^λ . Три типа изинговского взаимодействия J^x, J^y, J^z на ребрах x, y и z обозначены красными, зелеными и синими линиями, соответственно. Треугольники обозначены индексами i, j , вершины внутри каждого треугольника обозначены 1, 2, 3. v и p обозначают центр вакансии или центр шестиугольника, на которых определены операторы W_v и W_p , соответственно. Пара вакансий, к каждой из которых привязан поток, создается по следующей схеме: 1) пара вакансий с общим ребром размещается на решетке случайным образом; 2) знак переменной u_{ij} на общем ребре изменяется с $u = +1$ на $u = -1$ (черная линия), так что два потока созданы и прикреплены к двум плакетам с вакансиями; 3) одна из вакансий в паре перемещается случайным образом и, одновременно, цепочка переменных u_{ij} меняет знак, так что потоки всегда привязаны к движущейся вакансии (показано черными связями)

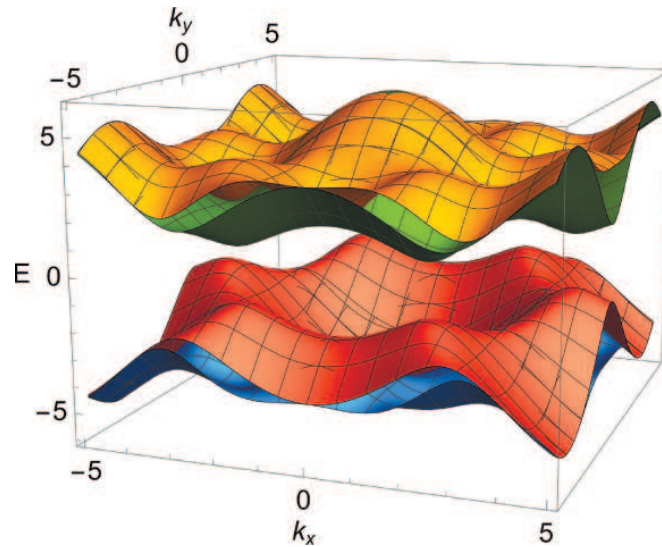


Рис. 2. Спектр $E(\mathbf{k})$ майорановских фермионов в модели Яо-Ли [1] с нарушенной СОВ (9). Верхняя ветвь спектра невырождена и задается уравнением (14), а нижняя двукратно вырождена и описывается уравнением (15). Для вычислений мы использовали $\kappa = \eta = 0.2$. Все энергии указаны в единицах J

$M_{ll'}^\lambda = -J_{ij}^\lambda \hat{u}_{ll'}^{AB}$, если вершины \mathbf{r}_i^A и \mathbf{r}_l^B связаны связью типа λ (где для удобства, мы поменяли обозначения для оператора \hat{u}_{ij} на $\hat{u}_{ll'}^{AB}$), и $M_{ll'} = 0$ в противном случае. Второй член в уравнении (10) описывает прыжки на вторых соседей между двумя вершинами на одной подрешетке (A или B) с матрицей

$$\tilde{M}_{ll'}^{\lambda\mu} = -(\kappa\delta_{\lambda\mu} + \eta(1 - \delta_{\lambda\mu}))\hat{u}_{ll'}^{AB}\hat{u}_{l'l}^{AB}.$$

Гамильтониан (10) может быть диагонализирован в импульсном пространстве, если не нарушена трансляционная инвариантность. Так как в основном состоянии мы можем заменить все операторы связи на их собственные значения $u^{AB} = 1$, в импульсном

представлении гамильтониан принимает вид

$$H = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q}} \mathbf{c}_{-\mathbf{q}}^T iA_{\mathbf{q}} \mathbf{c}_{\mathbf{q}}, \quad (11)$$

где $\mathbf{c}_{\mathbf{q}}^T = (c_{A,\mathbf{q}}^x, c_{A,\mathbf{q}}^y, c_{A,\mathbf{q}}^z, c_{B,\mathbf{q}}^x, c_{B,\mathbf{q}}^y, c_{B,\mathbf{q}}^z)$, а матрица $iA(\mathbf{q})$ имеет вид

$$iA_{\mathbf{q}} = \begin{pmatrix} M_{\mathbf{q}} & F_{\mathbf{q}} & F_{\mathbf{q}} \\ F_{\mathbf{q}} & M_{\mathbf{q}} & F_{\mathbf{q}} \\ F_{\mathbf{q}} & F_{\mathbf{q}} & M_{\mathbf{q}} \end{pmatrix}. \quad (12)$$

В (12) использованы следующие обозначения:

$$M_{\mathbf{q}} = \begin{pmatrix} \Delta_{\kappa}(\mathbf{q}) & if(\mathbf{q}) \\ -if^*(\mathbf{q}) & -\Delta_{\kappa}(\mathbf{q}) \end{pmatrix}, \quad (13)$$

$$F_{\mathbf{q}} = \begin{pmatrix} \Delta_{\eta}(\mathbf{q})/2 & 0 \\ 0 & -\Delta_{\eta}(\mathbf{q})/2 \end{pmatrix}.$$

В изотропном пределе

$$f(\mathbf{q}) = 2J(1 + e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{n}_1} + e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{n}_2},$$

где

$$\mathbf{n}_1 = \left(\frac{\sqrt{3}}{2}, \frac{3}{2} \right),$$

$$\mathbf{n}_2 = \left(-\frac{\sqrt{3}}{2}, \frac{3}{2} \right).$$

Диагональные члены

$$\Delta_{\kappa}(\mathbf{q}) = 4\kappa(\sin(\mathbf{q} \cdot \mathbf{n}_1) - \sin(\mathbf{q} \cdot \mathbf{n}_2) + \sin(\mathbf{q} \cdot (\mathbf{n}_2 - \mathbf{n}_1))),$$

$$\Delta_{\eta}(\mathbf{q}) = 4\eta(\sin(\mathbf{q} \cdot \mathbf{n}_1) - \sin(\mathbf{q} \cdot \mathbf{n}_2) + \sin(\mathbf{q} \cdot (\mathbf{n}_2 - \mathbf{n}_1)))$$

описывают прыжки на вторых соседей, возникающие из-за нарушения СОВ.

Если $\kappa = \eta = 0$ и СОВ не нарушена, спектр майорановских фермионов $\epsilon_{i,\mathbf{q}} = |f(\mathbf{q})|$ содержит три вырожденные ветви, каждая с двумя дираковскими точками в углах зоны Бриллюэна $\pm K$. Как только СОВ нарушается, т. е. $\kappa \neq 0$ или $\eta \neq 0$, оказывается, что хотя бы одна из ветвей спектра имеет щель. В случае, когда $\kappa \neq 0$, но $\eta = 0$, все три ветви спектра щелевые, но все еще остаются вырожденными. Таким образом, когда $\eta = 0$, спектр модели Яо–Ли есть ни что иное, как трехкратно вырожденный спектр модели Китаева. Однако, если $\eta \neq 0$, то майорановские моды гибридизируются друг с другом и вырождение частично снимается, но две моды все еще остаются вырожденными (см. рис. 2). В этом случае собственные значения возмущенной модели Яо–Ли (9) определяются следующими выражениями:

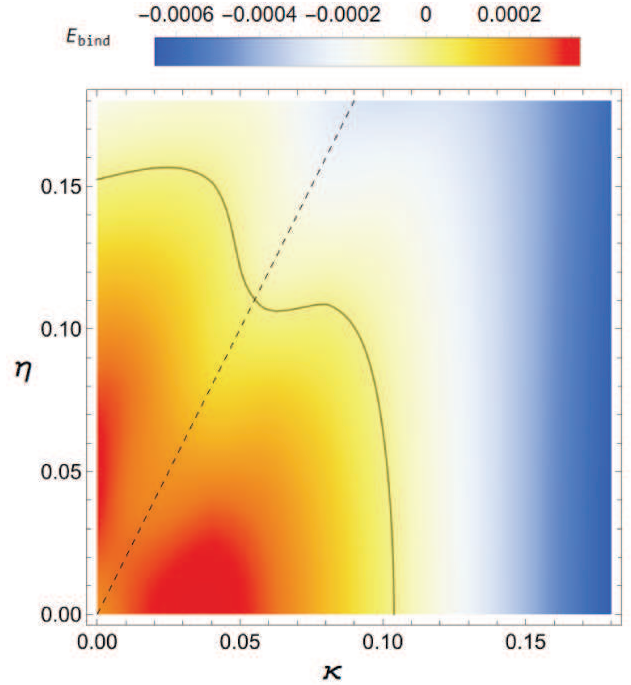


Рис. 3. Зависимость выигрыша в энергии от прикрепления потока к вакансии от параметров гамильтониана (9), рассчитанная для системы конечного размера с $L = 40$. Вычисление энергии связи проводилось в системе с двумя вакансиями, находящимися на максимальном расстоянии $L/2$. Энергия связи и параметры модели приведены в единицах J . Штриховая линия обозначает прямую, на которой щель в двух из трех ветвей в спектре майорановских фермионов закрывается. Как нетрудно видеть, при приближении к этой прямой энергия связи уменьшается

$$\epsilon_{1,\mathbf{q}} = \pm \sqrt{|f(\mathbf{q})|^2 + (\Delta_{\kappa}(\mathbf{q}) + \Delta_{\eta}(\mathbf{q}))^2}, \quad (14)$$

$$\epsilon_{2,\mathbf{q}} = \pm \sqrt{|f(\mathbf{q})|^2 + (\Delta_{\kappa}(\mathbf{q}) - \frac{\Delta_{\eta}(\mathbf{q})}{2})^2}, \quad (15)$$

$$\epsilon_{3,\mathbf{q}} = \pm \sqrt{|f(\mathbf{q})|^2 + (\Delta_{\kappa}(\mathbf{q}) - \frac{\Delta_{\eta}(\mathbf{q})}{2})^2}. \quad (16)$$

3. ВАКАНСИИ В МОДЕЛИ ЯО–ЛИ

Вакансия на решетке обычно представляет собой простое отсутствие атома на одном узле или на нескольких близлежащих узлах. Однако в настоящей работе мы будем использовать этот термин более широко, например, для описания немагнитных примесей или для магнитных атомов, которые очень слабо связаны со своими соседями. Чтобы различить эти два случая, будем называть второй тип локального дефекта *квазивакансией*.

Рассмотрим случайно распределенные квазивакансии в изотропной модели Яо–Ли. Для этого перепишем первый член в (9) как

$$i \sum_{\substack{\langle ij \rangle \\ i,j \in \mathbb{P}}} \sum_{\lambda} J \hat{u}_{ij} c_i^{\lambda} c_j^{\lambda} + i \sum_{\substack{\langle kl \rangle \\ k \in \mathbb{V}, l \in \mathbb{P}}} \sum_{\lambda} J' \hat{u}_{kl} c_k^{\lambda} c_l^{\lambda}, \quad (17)$$

где $J' \ll J$ определяет взаимодействие спина на дефекте с остальными спинами решетки; \mathbb{P} обозначает множество нормальных вершин решетки, а \mathbb{V} — множество вершин с квазивакансиями (см. рис. 1). В дальнейшем, для простоты, мы не будем различать вакансии и квазивакансии, подразумевая, что в пределе $J' \ll J$ вершины, принадлежащие \mathbb{V} , ведут себя как квазивакансии, а в пределе $J' \rightarrow 0$ они становятся настоящими вакансиями, в которых майорановские фермионы c_{α}^{λ} в центре вакансии имеют нулевую амплитуды перескока на ближайших соседях. Также мы будем рассматривать только такие реализации беспорядка, при которых количество вакансий на подрешетках А и В одинаково.

Гамильтониан (10) все еще может быть диагонализирован в присутствии вакансий, несмотря на то, что в пределе $J' \rightarrow 0$ число степеней свободы эффективно уменьшается, так как три плакета соединяются в один возле каждой вакансии (точное решение в оригинальной модели существует, поскольку число спиновых степеней свободы равно числу сохраняющихся величин) [25]. Диагонализация гамильтониана может быть выполнена численно на кластерах конечного размера с периодическими граничными условиями. Диагонализированный гамильтониан имеет вид

$$\mathcal{H} = \sum_n \epsilon_n \left(\psi_n^{\dagger} \psi_n - \frac{1}{2} \right), \quad (18)$$

где ψ_n — комплексные фермионы (составленные из двух майорановских фермионов). Собственные энергии $\epsilon_n \equiv \epsilon_n(\{J_{ij}\}, \{u_{ij}\})$ могут быть получены для каждой реализации беспорядка и распределения потоков.

3.1. Вакансии со связанным потоком

При изучении вакансий в модели Китаева было обнаружено, что наличие вакансии приводит к появлению собственной моды с очень низкой (близкой к нулю) энергией и волновой функцией, квазилокализованной на узлах другой подрешетки вокруг центра вакансии [21, 22, 25]. Уилланс, Челкер и Месснер также показали, что дефект в виде вакансии связывает Z_2 -поток с вакансией [21, 22], и, поскольку,

этот поток является анионом, то наличие вакансий в китаевской модели позволяет контролируемым образом создавать анионы, что может быть использовано для квантовых вычислений. Поведение модели Китаева при наличии вакансий во многом определяется тем, рассматривается ли щелевая ($J^x, J^y \ll J^z$) или бесщелевая фаза (включая изотропную точку $J_x = J_y = J_z$). В щелевой фазе можно аналитически показать, что к каждой вакансии прикрепляется поток [21]. В бесщелевой фазе аналитические вычисления невозможны, но численно было проверено, что поток по-прежнему прикрепляется к вакансии [26].

Проверим, остается ли это верным для вакансий в модели Яо–Ли. Как уже упоминалось ранее, основное состояние невозмущенной модели Яо–Ли имеет нулевой поток [1]. Для того чтобы оценить энергию связи потока и вакансии, были рассмотрены две вакансии, разделенные расстоянием $\sim L/2$, где L — линейный размер системы, причем одна из них находится на подрешетке А, а другая — на подрешетке В (см. рис. 1). Энергия связи в таком случае задается разностью между энергией системы, в которой каждая из вакансий связывает поток, E_{bound} , и энергией системы с нулевым потоком, E_{zero} :

$$E_{\text{bind}} = \frac{E_{\text{bound}} - E_{\text{zero}}}{2}. \quad (19)$$

Зависимость энергии связи от параметров κ и η , определяющих насколько велики взаимодействия, нарушающие СОВ, показана на рис. 3. Видно, что с возрастанием κ и η происходит переход из основного состояния с потоками, привязанными к вакансиям, в основное состояние с нулевым потоком (линия перехода между двумя фазами показана сплошной линией). Заметим, что вычисление энергии связи проводилось в системе с двумя вакансиями, и наличие конечной плотности вакансий может подвинуть границу между фазами, но качественно ситуация не должна измениться. Энергия связи потока с вакансией также уменьшается при приближении к прямой $\kappa = \eta/2$ (показано штриховой линией), на которой у двух из трех ветвей в спектре закрывается щель.

3.2. Плотность состояний и IPR

В этом разделе будет рассмотрено, как наличие вакансий влияет на низкоэнергетическую плотность состояний майорановских фермионов в модели Яо–Ли. Плотность состояний определяется формулой

$$n(E) = \left\langle \sum_n \delta(E - \epsilon_n) \right\rangle, \quad (20)$$

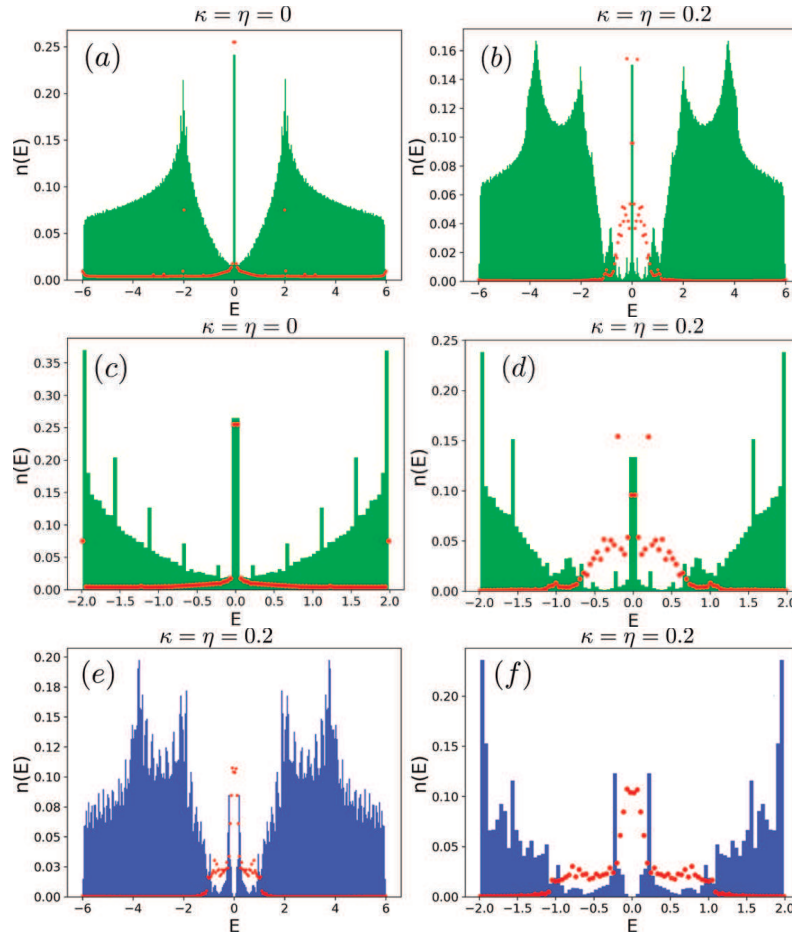


Рис. 4. Плотность состояний $n(E)$ в модели Яо–Ли в присутствии 2% вакансий. На панелях (a) и (b) показаны плотности состояний $n(E)$ для системы, в которой к каждой вакансии привязан ненулевой поток ($W_v = -1$), рассчитанные для $\kappa=\eta=0$ и $\kappa=\eta = 0.2$, соответственно. На панелях (c) и (d) показаны те же плотности состояний, но только для низких энергий. Ширина низкоэнергетического пика определяется величиной обменного взаимодействия $J' = 0.01$, которое приводит к гибридизации нулевых мод, индуцированных вакансиями с остальными собственными состояниями системы. На панели (e) показана плотность состояний $n(E)$ в системе с нулевым потоком (все $W_v = 1$ и все $W_p = 1$), рассчитанная для $\kappa=\eta = 0.2$. На панели (f) показана та же плотность состояний, но только для низких энергий. Численный счет был выполнен на конечной системе с $L = 40$ с использованием периодических граничных условий. Все результаты были усреднены по 40 случайным реализациям. Красные точки соответствуют величинам IPR, показанным в том же масштабе, что и $n(E)$ (IPR было умножено на 4 в случаях (a) и (c)). Все энергии указаны в единицах J

где усреднение проводится по независимым реализациям беспорядка. Так как плотность состояний содержит информацию лишь о спектре системы, но не о том, насколько локализованы состояния в спектре, мы также вычислили обратный коэффициент участия (в дальнейшем обозначенным как IPR — Inverse Participation Ratio), описывающий меру локализации каждого состояния. IPR определяется как

$$P_n = \sum_i |\phi_{n,i}|^4, \tag{21}$$

где индекс n нумерует волновые функции состояний $\phi_{n,i}$, а индекс i нумерует координаты в задан-

ном базисе. У делокализованной моды IPR меняется с ростом размера системы N как $\sim 1/N$, потому что плотность вероятности почти равномерно распределена по решетке. Если же состояние является связанным, то его IPR не зависит от размера системы, так как он определяется лишь значением вероятности на конечном числе узлов [26].

На рис. 4 показана плотность состояний $n(E)$ в модели Яо–Ли при наличии 2% вакансий. На рис. 4 а показана плотность состояний $n(E)$ для системы с ненарушенной СОВ ($\kappa=\eta=0$), в которой к каждой вакансии привязан ненулевой поток, $W_v = -1$, а на

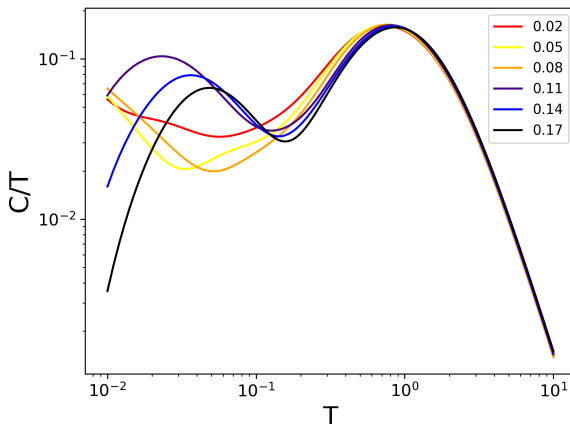


Рис. 5. Температурные зависимости C/T от T (в логарифмическом масштабе) для разных значений $\kappa = \eta$, каждая из которых обозначена своим цветом. Численные значения величин T , κ , η и $J' = 0.01$ приведены в единицах J . Все расчеты проведены при 2% вакансий

всех остальных плакетах $W_p = 1$ и потока нет. На рис. 4 *b, e* показаны плотности состояний $n(E)$ для системы с нарушенной СОВ ($\kappa = \eta = 0.2$), в которой к каждой вакансии, соответственно, либо привязан либо не привязан поток, $W_v = -1$. На рис. 4 *d, f* показаны те же плотности состояний, но только для низких энергий.

При создании различных реализаций беспорядка с ненулевым потоком мы использовали алгоритм, предложенный в работе [25], а именно, каждая пара вакансий, к каждой из которых привязан поток, создается по следующей схеме: 1) пара вакансий с общим ребром размещается на решетке случайным образом; 2) знак переменной u_{ij} на одном из общих ребер изменяется с $u = +1$ на $u = -1$, так что создаются два потока, прикрепленные к двум вакансионным плакетам; 3) одна из вакансий перемещается случайным образом и, одновременно, цепочка переменных u_{ij} меняет знак, так что потоки всегда привязаны к движущейся вакансии, а потоки через остальные ячейки остаются прежними.

Вне зависимости от потоков вакансии индуцируют низкоэнергетические состояния, приводящие к образованию пика в плотности состояний вблизи нуля энергии. Ширина этого низкоэнергетического пика определяется величиной обменного взаимодействия $J' = 0.01$, которое приводит к гибридизации нулевых мод, индуцированных вакансиями, с остальными состояниями системы. Мы видим, что даже при ненарушенной СОВ, т.е. при отсутствии

щели в спектре, состояния, дающие вклад в этот пик, довольно локализованы (это видно из более высоких значений IPR на рис. 4 *c*, показывающих низкоэнергетическую часть $n(E)$ на рис. 4 *a*). Заметим, что при $\kappa = \eta = 0$ каждая вакансия в модели Яо–Ли порождает два типа трижды вырожденных низкоэнергетических состояний. Так же как и в китаевской модели с вакансиями [25], первый вид связанных состояний локализован на самой вакантной вершине, слабо связанной посредством J' со своими соседями. Второй вид состояний локализован на периферии плакета вокруг вакансии, на узлах другой подрешетки.

Различия между наличием и отсутствием потоков, связанных с вакансией, становятся очевидными, когда нарушается СОВ и в спектре появляется щель. Если щель достаточно широкая, т.е. определяющие ширину щели параметры κ и η достаточно велики, то спектр хорошо описывается гибридизацией связанных состояний, локализованных на одном и том же вакансионном плакете, а также более слабой гибридизацией между состояниями на разных вакансиях (в последнем случае ширина пика увеличивается с ростом плотности вакансий). Из рис. 4 *d, f* видно, что количество пиков внутри щели напрямую зависит от потока через вакансии. Если поток отсутствует, то внутри щели появляются два широких пика при конечных энергиях, а пик вблизи нуля энергии пропадает. Если поток связан с вакансией и СОВ нарушена, то возникают дополнительные состояния с близкой к нулю энергией, образующие пик в плотности состояний. Когда вакансии находятся далеко друг от друга, эти состояния являются майорановскими нулевыми модами и могут быть интерпретированы как возбуждения с анионной статистикой [36]. Однако, если все же учесть конечность расстояния между вакансиями и, как следствие, их взаимодействие друг с другом, эти моды гибридизуются друг с другом и пик приобретает конечную ширину.

Хотя такое поведение и похоже на то, что наблюдалось в модели Китаева [25], не будем забывать, что в модели Яо–Ли от каждой вакансии появляется в три раза больше состояний, чем в модели Китаева. Кроме того, наличие дополнительного члена $\eta \neq 0$, нарушающего СОВ, изменяет саму структуру связанных состояний. В общем случае количество резонансных пиков внутри щели соответствует числу локализованных мод вблизи каждой вакансии, а структура пиков от их гибридизации.

3.3. Влияние вакансий на термодинамику

Рассмотрим, как наличие вакансий влияет на низкотемпературную теплоемкость. Если температура ниже, чем энергия образования одного потока через обычный плакет, то можно считать все потоки фиксированными. В таком случае вклад в теплоемкость дают лишь свободные майорановские фермионы,

$$C(T) = \int E \cdot n(E) \cdot \frac{\partial n_F(E, T)}{\partial T} dE \\ = \sum_n \left(\frac{\epsilon_n}{T} \right)^2 \frac{e^{\epsilon_n/T}}{(e^{\epsilon_n/T} + 1)^2}, \quad (22)$$

где $n_F(E, T) = (e^{E/T} + 1)^{-1}$ – функция Ферми, а $n(E)$ – плотность состояний.

На рис. 5 представлены температурные зависимости C/T (в логарифмическом масштабе) для различных значений $\kappa = \eta \in [0.02, 0.17]$. Переход из фазы со связанными потоками в фазу с нулевыми потоками, происходящий примерно при $\kappa = \eta \simeq 0.1$ (см. рис. 3), виден по изменению поведения теплоемкости. Если система находится в фазе с прикрепленными к вакансиям потоками, т. е. при $\kappa = \eta < 0.1$, то C/T имеет степенную расходимость при малых температурах, появляющуюся вследствие наличия пика в плотности состояний возле нулевой энергии, в то время как если потоки в основном состоянии отсутствуют, т. е. при $\kappa = \eta > 0.1$, величина C/T стремится к нулю при температурах, стремящихся к нулю. В последнем случае теплоемкость при конечных температурах имеет широкий пик, отражающий наличие состояний внутри щели.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В настоящей работе изучены эффекты беспорядка и локализации в двумерной КСЖ, реализуемой в точно решаемой модели Яо–Ли [1]. Показано, что присутствие вакансий в этой модели приводит к возникновению пика в плотности состояний при низких энергиях, что проявляется, например, в поведении низкотемпературной теплоемкости. Несмотря на то, что низкоэнергетическая часть спектра зависит от конкретных параметров модели, таких как характер взаимодействий, нарушающих СОВ, эти состояния более локализованы, чем другие состояния системы. Численно изучен эффект локализации при помощи обратного коэффициента участия (IPR) и показано, что локализация низкоэнергетических состояний особенно сильно выражена, когда каждая

вакансия имеет связанный с ней ненулевой поток и имеется поле, нарушающее симметрию обращения времени. Однако, если это поле достаточно сильное, то энергетически более выгодно иметь нулевой поток через все плакетты, но при этом локализация уменьшается. Интересно заметить, что низкоэнергетические состояния внутри щели при нарушенной СОВ представляют собой пример сети квазилокализованных майорановских состояний, которая может быть использована для квантовых вычислений.

Благодарности. Авторы признательны Wen-Han Kao за сотрудничество в предыдущих работах, идеи которых были использованы в данном исследовании. Авторы также благодарны А. Цвелику за полезные дискуссии о модели Яо–Ли.

Финансирование. Н.Б.П. выражает благодарность фонду National Science Foundation, Award No. DMR-2310318 за частичную финансовую поддержку.

ЛИТЕРАТУРА

1. H. Yao and D.-H. Lee, Phys. Rev. Lett. **107**, 087205 (2011).
2. W. Witczak-Krempa, G. Chen, Y. B. Kim, and L. Balents, Ann. Rev. Cond. Matt. Phys. **5**, 57 (2014).
3. C. L. Kane and E. J. Mele, Phys. Rev. Lett. **95**, 146802 (2005).
4. B. A. Bernevig and S.-C. Zhang, Phys. Rev. Lett. **96**, 106802 (2006).
5. R. Moessner and J. E. Moore, Topological Phases of Matter (Cambridge University Press, 2021).
6. P. W. Anderson, Mater. Res. Bull. **8**, 153 (1973).
7. L. Balents, Nature **464**, 199 (2010).
8. L. Savary and L. Balents, Rep. Prog. Phys. **80**, 016502 (2017).
9. M. R. Norman, Rev. Mod. Phys. **88**, 041002 (2016).
10. J. Knolle and R. Moessner, Annu. Rev. Condens. Matter Phys. **10**, 451 (2019).
11. C. Broholm, R. J. Cava, S. A. Kivelson, D. G. Nocera, M. R. Norman, and T. Senthil, Science **367** (2020).

12. H. Takagi, T. Takayama, G. Jackeli, G. Khaliullin, and S. E. Nagler, *Nat. Rev. Phys.* **1**, 264 (2019).
13. A. Kitaev, *Annals of Physics* **321**, 2 (2006).
14. H. Yao, S.-C. Zhang, and S. A. Kivelson, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 217202 (2009)
15. F. Wang and A. Vishwanath, *Phys. Rev. B* **80**, 064413 (2009).
16. C. Wu, D. Arovas, and H.-H. Hung, *Phys. Rev. B* **79**, 134427 (2009).
17. R. Nakai, S. Ryu, and A. Furusaki, *Phys. Rev. B* **85**, 155119 (2012).
18. V. S. de Carvalho, H. Freire, E. Miranda, and R. G. Pereira, *Phys. Rev. B* **98**, 155105 (2018).
19. G. Jackeli and G. Khaliullin, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 017205 (2009).
20. J. Chaloupka, G. Jackeli, and G. Khaliullin, *Phys. Rev. Lett.* **105**, 027204 (2010).
21. A. J. Willans, J. T. Chalker, and R. Moessner, *Phys. Rev. Lett.* **104**, 237203 (2010).
22. A. J. Willans, J. T. Chalker, and R. Moessner, *Phys. Rev. B* **84**, 115146 (2011).
23. J. Knolle, R. Moessner, and N. B. Perkins, *Phys. Rev. Lett.* **122**, 047202 (2019).
24. J. Nasu and Y. Motome, *Phys. Rev. B* **102**, 054437 (2020).
25. W.-H. Kao, J. Knolle, G. B. Halasz, R. Moessner, and N. B. Perkins, *Phys. Rev. X* **11**, 011034 (2021).
26. W.-H. Kao and N. B. Perkins, *Ann. Phys.* **435**, 168506 (2021).
27. W.-H. Kao and N. B. Perkins, *Phys. Rev. B* **106**, L100402 (2022).
28. V. Dantas and E. C. Andrade, *Phys. Rev. Lett.* **129**, 037204 (2022).
29. P. W. Anderson, *Phys. Rev.* **109**, 1492 (1958).
30. I. M. Lifshitz, *Soviet Physics Uspekhi* **7**, 549 (1965).
31. A. Y. Kitaev, *Physics-Uspekhi* **44**, 131 (2001).
32. C. Nayak, S. H. Simon, A. Stern, M. Freedman, and S. Das Sarma, *Rev. Mod. Phys.* **80**, 1083 (2008).
33. J. D. Sau, S. Tewari, R. M. Lutchyn, T. D. Stanescu, and S. Das Sarma, *Phys. Rev. B* **82**, 214509 (2010).
34. R. R. Biswas, *Phys. Rev. Lett.* **111**, 136401 (2013).
35. K. Damle, *Phys. Rev. B* **105**, 235118 (2022).
36. D. A. Ivanov, *Phys. Rev. Lett.* **86**, 268 (2001).
37. S. Tewari, S. Das Sarma, and D.-H. Lee, *Phys. Rev. Lett.* **99**, 037001 (2007).
38. V. Gurarie and L. Radzihovsky, *Phys. Rev. B* **75**, 212509 (2007).
39. R. Roy, *Phys. Rev. Lett.* **105**, 186401 (2010).
40. C. Xu, J. Feng, M. Kawamura, Y. Yamaji, Y. Nahas, S. Prokhorenko, Y. Qi, H. Xiang, and L. Bellaiche, *Phys. Rev. Lett.* **124**, 087205 (2020).
41. E. H. Lieb, *Phys. Rev. Lett.* **73**, 2158 (1994).