

# **Streszczenie dysertacji pod tytułem „Orbital effects in elemental chalcogens” („Efekty orbitalne w chalkogenach”).**

*Adam Kłosiński*

Ta dysertacja skupia się na dwóch materiałach dla których fizyka orbitalna ma kluczowe znaczenie – chalkogenach selenie i tellurze. Własności elektronowe tych układów badano w latach 50. i 60. zeszłego wieku, kiedy to po raz pierwszy opisano ich strukturę pasmową [1–3]. Od tego czasu, w środowisku teorii fizyki materii skondensowanej, nie poświęcano im wiele uwagi. W ostatnich latach pojawiło się kilka nowych odkryć w dziedzinie chalkogenów. Na uwagę zasługują publikacje Silva *et al.* [4]. Dotychczas nie podjęto prób opisu chalkogenów posługując się współczesnymi koncepcjami fizyki orbitalnej – takimi jak porządek orbitalny i wieloorbitalny model Hubbarda – rozwiniętymi w toku badań nad skorelowanymi układami. Nie podano również pełnego opisu topologii w chalkogenach. Ta dysertacja uzupełnia wiedzę w obszarach wymienionych powyżej. Identyfikuje również nowe zjawiska w selenie i tellurze.

Po ogólnym wstępie (rozdział 1), w rozdziale 2 opisana jest struktura krystaliczna selenu i telluru, składająca się ze słabo związanych, helicznych łańcuchów (łańcuchów chalkogenowych) – to na tych łańcuchach skupia się ta dysertacja. W kryształach chalkogenów łańcuchy te rozmieszczone są na dwuwymiarowej, heksagonalnej sieci, a osie helis poszczególnych łańcuchów są do siebie równoległe. Stan podstawowy pojedynczego łańcucha chalkogenowego jest uporządkowany orbitalnie, nazywany falą gęstości orbitalnej. W stanie tym różne orbitale obsadzone są na różnych, nierównoważnych atomach komórki elementarnej helisy. Taka sytuacja jest konsekwencją geometrii helisy, oraz kształtu orbitali  $p$ , i prowadzi do własności diametralnie różnych od tych charakteryzujących proste, liniowe łańcuchy.

W rozdziale 3 rozważany jest wpływ słabych, międzyorbitalnych oddziaływań Coulombowskich na stan podstawowy bezspinowego łańcucha chalkogenowego (falę gęstości orbitalnej). To zagadnienie związane jest z artykułem [4], w którym autorzy wskazują, że międzyorbitalne oddziaływania Coulombowskie mogą być odpowiedzialne za deformację hipotetycznej (nie obserwowanej) sieci kubicznej w kierunku trójwymiarowej struktury krystalicznej chalkogenów. Z drugiej strony, wiadomo że oddziaływania Coulombowskie w prostych łańcuchach prowadzą do przejścia fazowego typu Peiersa [5]. Czy to samo zjawisko będzie miało miejsce w łańcuchach chalkogenowych? Okazuje się, że taka deformacja nie występuje w łańcuchach chalkogenowych dla rozsądnych wartości parametru Coulombowskiego  $U$ . Jest tak

ze względu na izolujący charakter łańcuchów i znaczną przerwę energetyczną, będące konsekwencjami geometrii helisy i charakteru orbitali  $p$ . Jest to ważna obserwacja, która wskazuje na to, że mechanizm deformacji zaproponowany w [4] nie jest wewnętrznie sprzeczny.

Rozdział 4 zawiera krótki wstęp dotyczący izolatorów topologicznych. Rozdział 5 skupia się na topologii realistycznego modelu łańcuchów chalcogenowych z uwzględnieniem spinu i oddziaływania spin-orbita. Topologia podobnych modeli nie była w przeszłości dokładnie zbadana. W toku rozdziału ustalone zostaje, że stan podstawowy łańcuchów chalcogenowych jest topologicznie nietrywialny i zawiera stany brzegowe, chronione przez symetrię obrotu o 180 stopni. Te zanikające wykładniczo w funkcji odległości od brzegu stany mają charakterystyczną postać – ich funkcja falowa znika na co trzecim atomie w łańcuchu. Taka postać stanów brzegowych wynika ze związku między modelem chalcogenowego łańcucha a modelem Su-Schrieffer-Heeger o okresie 3 (SSH-3) [6]. Jeśli chodzi o pozabrzegowe własności topologiczne (bulk topological properties), niezmiennik topologiczny łańcuchów chalcogenowych to niezmiennik typu Lau-Brink-Ortiz (LBO), opisany dopiero niedawno [7]. Opisane powyżej odkrycia sugerują istnienie topologicznych stanów powierzchniowych w kryształach chalcogenów. Stany te mogą formować się ze stanów końcowych indywidualnych łańcuchów za pośrednictwem słabego sprzężenia między łańcuchami.

# Bibliografia

- [1] A. Von Hippel, “Structure and conductivity in the VI b group of the periodic system”, J. Chem. Phys. 16, 372–380 (1948).
- [2] J. R. Reitz, “Electronic band structure of selenium and tellurium”, Phys. Rev. 105, 1233–1240 (1957).
- [3] D. J. Olechna and R. S. Knox, “Energy-band structure of selenium chains”, Phys. Rev. 140, A986–A993 (1965).
- [4] A. Silva, J. Henke, and J. van Wezel, “Elemental chalcogens as a minimal model for combined charge and orbital order”, Phys. Rev. B 97, 045151 (2018).
- [5] D. I. Khomskii, *Transition metal compounds* (Cambridge University Press, 2014).
- [6] Y. He and C.-C. Chien, “Non-Hermitian generalizations of extended Su–Schrieffer–Heeger models”, J. Phys. Cond. Matter 33, 085501 (2020).
- [7] A. Lau, J. van den Brink, and C. Ortix, “Topological mirror insulators in one dimension”, Phys. Rev. B 94, 165164 (2016).