

无晶格对称性的交替磁性

Peru d'Ornellas^{1,*}, Valentin Leeb^{2,3,*}, Adolfo G. Grushin¹ and Johannes Knolle^{2,3,4}

¹Université Grenoble Alpes, CNRS, Grenoble INP, Institut Néel, 38000 Grenoble, France

²Department of Physics TQM, Technische Universität München,

James-Frank-Straße 1, D-85748 Garching, Germany

³Munich Center for Quantum Science and Technology (MCQST), 80799 Munich, Germany

⁴Blackett Laboratory, Imperial College London, London SW7 2AZ, United Kingdom

(10Dated: 2025 年 4 月 17 日)

亚磁性是一种共线磁有序,在这种状态下,相反的自旋种类在实空间旋转下进行交换。因此,对物理实现的搜索集中在具有特定旋转对称性的晶体固体上。在这里,我们展示了亚磁性也可以出现在非晶态系统中,如非晶固体,尽管缺乏全局旋转对称性。我们在非晶格子上构建了一个哈密顿量,每个站点有两个方向轨道,并且相互作用在自旋旋转下保持不变。然后由于围绕每个原子的自发对称性破缺,在自旋和轨道自由度中出现了亚磁性,显示出一种共同的点群对称性。这种形式的亚磁性表现出各向异性的自旋传输和可实验测量的自旋谱函数。我们的机制可以推广到任何晶格和任何亚磁性有序,这将非晶态系统的亚磁现象搜索范围扩大了。

介绍— 对称性使我们能够将自然界繁多的磁性材料组织成具有不同宏观性质的类别。铁磁 (FM) 序破坏了时间反演对称性 (TRS), 导致电子结构中自旋分裂的能带 [1]。反铁磁 (AFM) 序保持了 TRS 和晶格平移 (或反演) 的组合, 因此具有自旋简并的能带结构 [2]。努力寻找一个完整的基于实空间和自旋变换的对称性分类 [3–5] 已经导致提出了一种新的共线序, 被称为交替磁化 (AM) [6, 7]。像 AFM 一样, 历史上称为 d 波磁体或更高阶的交替磁体 [8–10], 它们具有零净磁化强度。然而, 与 AFM 不同的是, 它们的电子能带结构是自旋分裂的。交替磁序保持自旋翻转和实空间旋转对称性的组合, 同时破坏自旋亚晶格 [7] 之间的反演和晶格平移对称性。

旋转对称性分类 AMs 在其定义中存在歧义。我们可以设想两个不同的实空间旋转算子的定义: 整个系统的空间坐标的旋转和作用于每个站点周围轨道自由度的局部旋转。关于 AM 的研究主要集中在前一个定义上, 在该定义中, 通过不同亚晶格上的位点具有由旋转 [7, 11, 12] 相关的局部环境来强制执行晶体学的旋转对称性, 例如在非简单元胞的未畸变晶格上 [13–19]。

然而, 最近的研究发现可以使用多极序参数 [20, 21] 来量化自旋角动量, 这可以编码单个位置周围磁性

结构的轨道对称性。此外, 无需依赖显式的自旋和实空间旋转对称性的破坏, 自发对称性破缺可以在没有晶体亚晶格各向异性的相互作用系统中产生自旋角动量排序 [22]。在此, 实空间对称性破缺源于电子轨道本身的各向异性形状, 而不是任何晶格结构的对称性。

这促使我们提出一个问题: 晶体晶格对称性是否必要的吗——或者是否可以通过在不具有任何相关对称性的晶格上结合自旋和轨道的排列来实现 AM? 最近, 许多结晶电子相已经被扩展到无定形晶格几何中, 如拓扑绝缘体 [23–33] 和自旋液体 [34, 35]。目前尚不清楚是否可以在任意无定形晶格几何中构建反铁磁基态, 或者——如同 AFM 一样——无定形结构通常会导致玻璃态物理学 [36, 37]。

在这项工作中, 我们构建了一个轨道 AM 相的最小模型, 该模型在一个通过自发对称性破缺保持旋转对称性的系统中出现。我们在一个无定形晶格上构造了一个哈密顿量, 该哈密顿量在自旋和轨道空间中都遵守现场旋转对称性。我们使用实空间平均场理论计算了完整的相图, 并量化了两种作为反磁有序标志的可观测量, 即自旋分辨谱函数和各向异性自旋电导率。我们的机制足够通用, 可以适用于任何非晶格结构。由于它是铁磁性地创建的, 在晶格中的每个点都处于相同的自旋和轨道配置中, 因此不会受到几何挫败的影响。此外, 这种机制可以导致反磁序参数的任何对称性。

* These authors contributed equally.

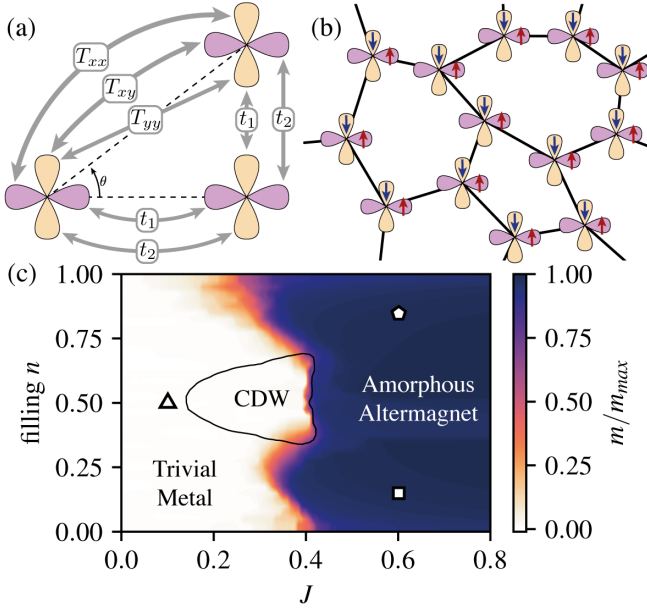


图 1. (a) 相邻轨道通过两个项参数化的轨道依赖跃迁耦合。强 t_1 沿轨道轴作用 (σ -键合)，而弱 t_2 垂直作用 (π -键合)。在中间角度，跃迁通过矩阵 $T(\theta)$ 在不同类型的键合之间插值。(b) 一个具有半填充的反铁磁状态的非晶格结构的部分。每个位点包含两个轨道，分别被自旋向上和自旋向下的电子占据。状态在每个轨道绕其所在点的 $\mathcal{T}$ 自旋翻转和本地 C_4 旋转下保持不变。(c) 在填充度为 n 和相互作用耦合强度为 J 的一个三配位非晶格中的相图。展示了三种相：平凡金属、非晶交替磁体和电荷密度波。着色代表归一化到其最大值 $m_{\max} = 2 - |4n - 2|$ 的平均交替磁化 m 。标记点在正文中有所讨论。

模型— 我们考虑一个无序三配位晶格上相互作用费米子的 t - J 类模型。每个站点具有两个轨道，标记为 x 和 y 。我们选择 d_{xz} 和 d_{yz} 轨道作为具体示例，见 Fig. 1a。然而，只要这些轨道打破了旋转对称性并在 C_4 旋转下相互映射，具体的轨道形状并不重要。哈密顿量 $H = H_K + H_{\text{Int}}$ 包含两部分，一部分是允许在位点间跃迁的动能项 H_K ，另一部分是在下面指定的最近邻自旋轨道相互作用项 H_{Int} 。

哈密顿量的动能部分表示一个轨道依赖的、自旋简并的最近邻跃迁，我们在基底 $\Psi_j^\dagger = (c_{jx\uparrow}^\dagger, c_{jy\uparrow}^\dagger, c_{jx\downarrow}^\dagger, c_{jy\downarrow}^\dagger)$ 中将其表达为

$$H_K = \sum_{\langle jk \rangle} \Psi_j^\dagger [T(\theta_{jk}) \otimes \mathbb{1}] \Psi_k, \quad (1)$$

其中 θ_{jk} 是给定键与 x 轴之间的角度。这项反映了键方向对 x 和 y 轨道重叠的影响。对于 $\theta = 0$ ， x 轨道有较大的重叠 t_1 ，而 y 轨道与 $t_2 < t_1$ 的重叠较小。对于

$\theta = \pi/2$ ，这些跃迁则相反。其间，由矩阵 $T(\theta)$ 描述的跃迁可以通过将轨道旋转到与键对齐的基础，耦合至 t_1 和 t_2 ，然后旋转回原始框架来确定。所有跃迁具有相同的强度，然而使用距离依赖的跃迁不会改变定性物理，因此我们不包括它。这在 Fig. 1a 中显示，并且一个明确的公式给出在结尾部分。

相互作用部分是一种遵循全局 $SU(2) \times SU(2)$ 自旋轨道对称性的铁磁海森堡类结合自旋轨道相互作用

$$H_{\text{Int}} = -J \sum_{\langle jk \rangle} \sum_{\alpha\beta} \left(\Psi_j^\dagger \tau^\alpha \otimes \sigma^\beta \Psi_j \right) \left(\Psi_k^\dagger \tau^\alpha \otimes \sigma^\beta \Psi_k \right) - n_j n_k, \quad (2)$$

其中 $n_j = c_{j\alpha s}^\dagger c_{j\alpha s}$ 是总局域占据算符， σ^α (τ^α) 是在自旋 (轨道) 子空间上起作用的泡利矩阵。请注意，在每个站点单个费米子的极限下，Eq. (2) 类似于铁磁性 Kugel-Kohmskii 相互作用，形式为 $(\mathbf{S}_j \cdot \mathbf{S}_k)(\boldsymbol{\tau}_j \cdot \boldsymbol{\tau}_k)$ [38]。

对称性破缺— 对于 $J > 0$ ，这种相互作用表现为对齐轨道之间的铁磁性海森堡耦合，以及正交轨道之间的反铁磁耦合。该耦合在结合的自旋和轨道空间中尊重全局 $SU(2) \times SU(2)$ 对称性。然而，完整的哈密顿量 H 由于动能部分 H_K 只具有全局 $SU(2) \times SO(2)$ 对称性。每个键选择旋转组合的轨道来优先耦合，使得平均来说系统在真实空间中对 $SO(2)$ 旋转不变 (或等效地，轨道旋转不变)。

为了满足耦合，我们选择轨道空间中的一个状态和自旋种类，并用选定的自旋种类填充所有这样的轨道。接下来，我们用正交自旋种类填充所有的正交轨道。在自旋和轨道中状态的选择是通过自发对称破缺任意挑选的。我们假设这两者都在自旋 σ^z 和轨道 τ^z 的基下，因此我们可以舍弃所有其他算符。这样，相互作用得到了简化，并且用总占据数 n_j 和交替磁化率 $m_j := \Psi_j^\dagger \sigma^z \tau^z \Psi_j = n_{jx\uparrow} - n_{jy\uparrow} - n_{jx\downarrow} + n_{jy\downarrow}$ 表示，得到相互作用

$$H_{\text{Int}} \rightarrow -J \sum_{\langle jk \rangle} (m_j m_k - n_j n_k). \quad (3)$$

当 m_j 有一个非零的期望值时，系统分别打破旋转对称性，它交换轨道，并且打破自旋种类之间的时间反演对称性。然而，系统仍然保留它们的组合 $C_4 \mathcal{T}$ ，因为这个算子在所有位点 [40] 上与 m_j 对易。自旋和轨道在

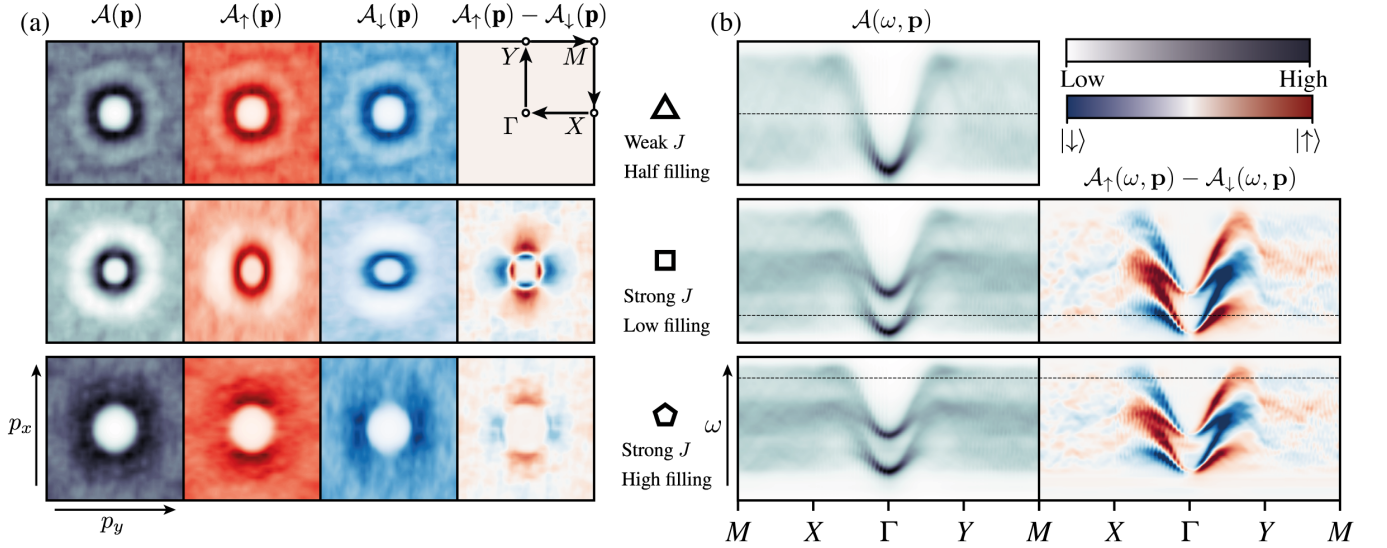


图 2. 相图中三个示例点的谱函数，用对应于 Fig. 1c 中各点的三个多边形标记。第一行 ($\triangle$) 显示了半填充时弱 J/t 的平凡金属相。第二行 ($\square$) 显示了在低填充下具有强 J/t 的交替磁性相，其中费米能级处的状态接近 Γ 。第三行 ($\pentagon$) 显示了高填充下的强 J/t 反磁性相。这里的费米能级附近的态远离 Γ ，因此不能很好地用平面波来近似。(a) 费米能级处以 $\mathbf{p}$ 为函数的谱密度。给出了四种情况，总密度、自旋向上和自旋向下的各自密度以及自旋向上与向下之间的差异。在非反磁性情况下这种差异消失。(b) 沿准布里渊区周围路径的能量和动量函数的谱密度（如子图 a 右上角面板所示）。给出了两种情况，总体谱密度和自旋差密度。准布里渊区 $[-\pi/\bar{a}, \pi/\bar{a}]^2$ 及其高对称点通过平均晶格间距 $\bar{a}$ 定义，这是无定形固体中的相关长度尺度 [39]。

非晶态固体中的自发对称性破缺并不是前所未有的现象。类似的对称性破缺现象（尽管是非磁性的）已在无定形 Bi_2Se_3 [32, 39] 中被观察到，其表面状态显示出可测量的自旋-轨道纹理 [32]。这种缠绕可能由非普适的表面现象（如表面电势）选择，我们期望类似的效果可以在我们的背景下出现。

平均场解耦— 我们现在可以对哈密顿量进行平均场解耦，引入数密度 $\langle n_j \rangle$ 和交替磁化率 $\langle m_j \rangle$ 的期望值。解耦的相互作用如下所示，

$$H_{\text{Int}}(m, n) = -J \sum_{\langle jk \rangle} \langle m_j \rangle m_k - \langle n_j \rangle n_k + (j \leftrightarrow k), \quad (4)$$

其中我们忽略了形式为 $[-\langle m_j \rangle \langle m_k \rangle + \langle n_j \rangle \langle n_k \rangle]$ 的常数能量偏移，因为它对基态没有影响。我们使用迭代实空间哈特里-福克平均场方法确定 $\langle m_j \rangle$ 和 $\langle n_j \rangle$ 的自洽值。这是在具有 $N = 400$ 个站点和周期性边界条件的晶格上完成的，最多执行 400 次迭代步骤以优化 $2N$ 平均场。

相图— 我们研究相图，即作为两个参数的函数的平均磁化率 $m = \sum_j \langle m_j \rangle / N$ ，这两个参数是总填充度 n 和相互作用强度 J ，设定 $t_1 = 1$ 和 $t_2 = 1/2$ 。在

每种情况下，我们都确定我们的平均场的基态配置并计算能量谱。发现三个阶段，完整的相图如 Fig. 1c 所示。在低 J 下，系统形成一种平凡金属，其中四个自旋轨道状态完全简并且局部交替磁化 $\langle m_j \rangle$ 处处为零。

在相图的中心，基态形成了一种具有能隙的电荷密度波 (CDW)。这里， $m = 0$ ，并且相互作用 Eq. (3) 作为有效的最近邻排斥力，促使电子聚集在每隔一个晶格点上。由于这是在一个非晶格结构上，缺乏二部图性质意味着 CDW 是几何挫败的，导致了有序中的缺陷。然而，该相没有反铁磁分裂，这里我们不会对此进行关注。

对于较大的 J ，系统收敛到非零的交替磁化 m 。这打破了四个自旋轨道态的简并性，使得当 $m > 0$ 时，状态 $|\uparrow x\rangle$ 和 $|\downarrow y\rangle$ 具有较低的能量，而 $|\uparrow y\rangle$ 和 $|\downarrow x\rangle$ 具有较高的能量。因此自旋和轨道相互锁定，即 x -轨道电子携带自旋向上，反之亦然。因此，两种轨道粒子的各向异性输运导致了自旋的各向异性色散，其中自旋向上的电子在 x 方向具有更高的迁移率，而自旋向下的电子则在 y 方向具有更高的迁移率。

相图在填充上不对称，因为无序晶格上的粒子-空穴对称性被破坏了。在低填充下，费米能级附近的态

接近长波长平面波，因此基本上不受晶格几何形状的影响。另一方面，在高填充下，费米能级的本征态极其敏感于晶格几何结构。从低填充到高填充的变化中，我们发现临界相互作用强度 J 下降了，尽管在半填充附近 CDW 抑制了反铁磁相。有趣的是，我们在高填充下观察到，在这里无序的无定形晶格最相关的情况下，反铁磁相最为稳定，这表明无定形有序增强了 AM 相的稳定性。

谱函数— 尽管晶体动量在非晶格上不是一个良好的量子数，我们仍然可以通过考虑本征态与一组平面波， $|\mathbf{p}s\mu\rangle = \mathcal{N} \sum_{\mathbf{x}_j} e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}_j} |\mathbf{x}_j s\mu\rangle$ 的重叠来确定系统的动量空间性质，其中 s 表示自旋和 μ 轨道。这些状态在非晶系统中不形成一个正交归一基底，然而对于接近 Γ 点的动量 $\mathbf{p}$ 它们几乎是正交归一的。因此，我们计算了自旋分辨的谱函数，这决定了找到具有能量 ε_λ 的本征态 $|\lambda\rangle$ 的概率，这些本征态的能量接近 ω 并且与给定 $\mathbf{p}$ 处的平面波有强烈的重叠，

$$\mathcal{A}_s(\omega, \mathbf{p}) = -\frac{\eta}{\pi} \sum_{\lambda\mu} \frac{|\langle \lambda | \mathbf{p}s\mu \rangle|^2}{(\omega - \varepsilon_\lambda)^2 + \eta^2}, \quad (5)$$

其中 η 是一个小的谱展宽项。我们定义 $\mathcal{A}(\mathbf{p}) = \mathcal{A}(\varepsilon_F, \mathbf{p})$ 为费米能级 ε_F 处的谱函数。谱函数 $\mathcal{A}_s(\omega, \mathbf{p})$ 在自旋分辨角分辨光电子能谱 (ARPES) 实验中是可测量的，甚至在非晶态固体和液体 [32, 39, 41] 中也是如此。该技术揭示了无定形固体 [32] 的相干电子性质 [32, 39] 和自旋轨道纹理。在 Fig. 2 中，我们展示了相图中三个点的动量和能量的谱函数，这些点分别标记为 $\triangle$ 、 $\square$ 和 $\diamond$ ，如 Fig. 1c 所示。

第一个案例 ($\triangle$) 是一个平凡金属，在半填充和弱 $J = 0.1$ 的情况下。这里，所有四个自旋轨道状态都是简并的。因此，自旋向上和自旋向下的谱函数是相同的，并且自旋差谱函数 $\mathcal{A}_\uparrow - \mathcal{A}_\downarrow$ 消失。在带内，低能量状态在接近 Γ 点时具有强烈的谱权重。这些状态实际上对晶格几何不敏感，因为它们接近波长远大于平均晶格间距的平面波。因此，可以将它们理解为类似于在结晶材料中靠近 Γ 处发现的低能量状态。然而，在大动量下，本征态高度敏感于晶格几何的影响，而平面波不再提供良好的描述。因此，我们预期低填充配置将定性上类似于结晶情况，而高填充配置则不会。

接下来，我们考虑反磁相，重点关注 $J = 0.6$ 。我们在低填充度 $n = 0.1(\square)$ 和高填充度 $n = 0.8(\diamond)$ 下

进行观察。在低填充度时，我们看到与晶态反磁体中发现的结果类似：费米能级处的谱函数呈现费米面状，在低能量、长波长本征态带穿过费米能级的位置形成一条线。如预期的那样，在非晶系统中，总谱函数在任何填充度下都是完全各向同性的，没有任何方向性是由晶格结构选择的。观察自旋分辨的谱函数时，我们看到类似轮廓，然而有显著差异，由于自旋轨道排序保留了方向感：自旋向上和自旋向下费米面被扭曲成具有相反取向的椭圆，导致自旋差谱函数具有 TC_4 对称性。查看能量分辨的谱函数 Fig. 2b，我们看到非零的 m 将每个能带分裂为两个，费米能级仅与下能带相交，该能带主要由 $|\uparrow x\rangle$ 和 $|\downarrow y\rangle$ 态组成。

在高填充率 ($\diamond$) 下，实现了一个类似的相位，两个分裂带由非零的 m 分裂，并且 $\mathcal{A}_\uparrow(\omega, \mathbf{p}) - \mathcal{A}_\downarrow(\omega, \mathbf{p})$ 具有 C_4T 对称性。然而，在费米能级上的谱函数不再是类似费米面的形态。光谱权重分布在整个动量上，自旋向上的谱权重倾向于位于 $|p_y| > |p_x|$ 处，而自旋向下的谱权重则倾向于位于 $|p_x| > |p_y|$ 处。自旋区分的谱函数通过广泛的符号变化特征捕捉到了这一点，这些特征尊重对于交替磁体典型的 TC_4 对称性。

自旋电导率— 自旋磁性的中心实验特征是非零自旋输运。这反映了存在扩展态，这些状态倾向于将自旋向上沿 x 方向输运，将自旋向下沿 y 方向输运，或者反之。我们数值计算了通过非晶样本的自旋分辨电导 G_s ，见 Fig. 3a，使用了 Python 模块中的内置 Landauer-Büttiker 算法 夸恩特 [42]。Landauer-Büttiker 算法基于 S 矩阵方法，将给定动量 k_x 、自旋 s 和轨道 μ 的金属引线本征态的传输概率与自旋电导 G_s [43–46] 相关联。

首先，我们关注总电导率 $G_\uparrow + G_\downarrow$ ，在图 Fig. 3b 中以灰色显示。根据对非晶系统预期以及我们的谱函数发现，总电导率接近各向同性，即在系统的全局旋转 ϕ 下不变。我们通过旋转内部自由度 $T(\theta_{jk}) \rightarrow T(\theta_{jk} - \phi)$ 来模拟系统的全局旋转，在热力学极限下这等效于系统的一个旋转。轻微的变形归因于有限尺寸形状各向异性。

自旋解析电导具有强烈的各向异性。在低填充率 ($\square$) 下，自旋向上优先沿 x 方向传输，而自旋向下则沿 y 方向传输。在高填充率 $\diamond$ 下，这些方向交换。因此，自旋解析电导的方向依赖性揭示了自旋分裂的 d 波因子。

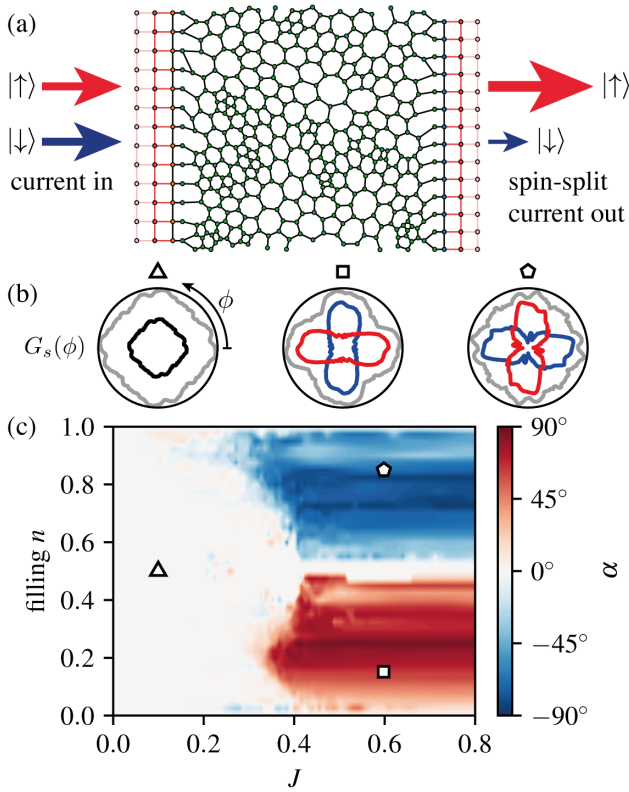


图 3. 自旋电导的非晶态交替磁体。(a) 用于评估自旋电导的设置由平均场收敛的非晶哈密顿量组成，我们在其上连接了金属引线。自旋传输或等效地自旋电导率 $\sigma_{\phi\phi}^s$ 在给定方向 ϕ 和填充 $\langle n \rangle$ 下被确定。(b) 作为角度 ϕ 的函数的自旋分辨电导。在平凡的非晶金属 (Δ) 中，电导是各向同性的，并且在两种自旋种类之间平均分配，而在非晶态、金属交替磁体 ($\square$ 和 $\diamond$) 中，自旋分辨电导是各向异性的。总电导以灰色显示。(c) 自旋分裂角度 α 表征了自旋电导率 $G_{\uparrow} - G_{\downarrow}$ 相对于总电导率 $G_{\uparrow} + G_{\downarrow}$ 的相对强度。在半填充时，系统变为绝缘体。超过半填充时， α 的符号反转，因为上面两个带由 $|\uparrow y\rangle$ 和 $|\downarrow x\rangle$ 状态组成，这些状态具有负的交替磁化 m 。

聚焦于整个相空间的自旋电导率 $G_{\uparrow} - G_{\downarrow}$ ，参见 Fig. 3c，我们观察到自旋电导率仅在金属反铁磁相中非零，这与相图 (Fig. 1) 紧密对应。在低填充极限下，从长波长论证出发，可以预期存在有限的自旋电导率，反映出谱函数在 Γ 点附近的尖锐特征。令人惊讶的是，即使在高填充情况下——此时谱函数只有非常有限的解释且没有表现出任何尖锐特征——自旋电导率仍然很大。对自旋劈裂角度 $\alpha = 2 \arctan \left(\frac{G_{\uparrow} - G_{\downarrow}}{G_{\uparrow} + G_{\downarrow}} \right)$ 的定量

分析显示，在低填充和高填充条件下均存在接近最优劈裂的区域， $\alpha \sim 90^\circ$ 。这里，系统对于一个自旋种类在 x 方向几乎是完全绝缘体，而对另一个自旋种类则是金属。

结论— 总结而言，我们提出了一种仅使用每个站点的自旋和轨道自由度来实现交替磁相的机制。交替磁对称群依赖于所选轨道的对称性，而不是任何晶体学对称性。这使我们能够在任意非晶系统以及晶体系统中构建交替磁相，在这些系统中，交替磁对称可以不同于晶体的整体旋转对称性。此外，该方法构成了一种在非晶材料中构造补偿共线磁相的一般程序。这为传统观念提供了反例，即非晶材料只能承载铁磁或玻璃态相 [37]。我们的最小模型由通过类似铁磁 Kugel-Khomskii 相互作用耦合的巡游电子组成，并在广泛的参数空间中具有非晶交替磁基态。哪种材料，无论是晶体还是非晶，能够微观地实现这种相互作用或一般不稳定性的这个问题仍然悬而未决。

注释添加— 在准备这篇手稿期间，我们了解到最近有关‘原子交替磁性’[47] 的提议。我们注意到我们的不稳定状态呈现了一个非晶体原子交替磁性的例子，并将其与自旋轨道排序联系起来。

致谢— PD 和 AGG 感谢与 Soren Bear、Frances Hellman、Joel Moore、Joe Orenstein、Nicola Spaldin 和 Marc Vila 进行的富有成效的讨论。VL 感谢“Studienstiftung des deutschen Volkes”的经济支持。AGG 和 PD 感谢欧洲研究理事会 (ERC) 巩固资助协议 No. 101042707 (TOPOMORPH) 提供的资金支持。JK 感谢 Aspen Center for Physics 的热情款待，该中心由国家科学基金会拨款 PHY-2210452 支持。JK 感谢德国研究联合会 (DFG, 德国研究基金会) 在德国卓越战略 (EXC - 2111 - 390814868 和 ct.qmat EXC-2147-390858490) 下的支持，以及 DFG 拨款 No. KN1254/1-2, KN1254/2-1 TRR 360 - 492547816 和 SFB 1143 (项目编号 247310070)，以及由巴伐利亚州政府根据 Hightech Agenda Bayern Plus 提供资金支持的 Munich Quantum Valley。JK 进一步感谢 Imperial-TUM 标杆合作的支持。

- edition ed., pp. 130–179.
- [2] L. Néel, *Science* **174**, 985 (1971).
 - [3] A. Corticelli, R. Moessner, and P. A. McClarty, *Phys. Rev. B* **105**, 064430 (2022).
 - [4] P. Liu, J. Li, J. Han, X. Wan, and Q. Liu, *Phys. Rev. X* **12**, 021016 (2022).
 - [5] J. Yang, Z.-X. Liu, and C. Fang, *Nature Communications* **15**, 10203 (2024).
 - [6] L. Smejkal, J. Sinova, and T. Jungwirth, *Phys. Rev. X* **12**, 031042 (2022).
 - [7] L. Smejkal, J. Sinova, and T. Jungwirth, *Phys. Rev. X* **12**, 040501 (2022).
 - [8] I. I. Pomeranchuk et al., *Sov. Phys. JETP* **8**, 361 (1958).
 - [9] C. Wu, K. Sun, E. Fradkin, and S.-C. Zhang, *Phys. Rev. B* **75**, 115103 (2007).
 - [10] K.-H. Ahn, A. Hariki, K.-W. Lee, and J. Kunes, *Phys. Rev. B* **99**, 184432 (2019).
 - [11] I. I. Mazin, K. Koepnick, M. D. Johannes, R. González-Hernández, and L. Smejkal, *Proceedings of the National Academy of Sciences* **118**, e2108924118 (2021).
 - [12] L. Smejkal, R. González-Hernández, T. Jungwirth, and J. Sinova, *Science Advances* **6**, eaaz8809 (2020).
 - [13] M. H. Fischer and E.-A. Kim, *Phys. Rev. B* **84**, 144502 (2011).
 - [14] B. Brekke, A. Brataas, and A. Sudbø, *Phys. Rev. B* **108**, 224421 (2023).
 - [15] A. Bose, S. Vadnais, and A. Paramakanti, *Phys. Rev. B* **110**, 205120 (2024).
 - [16] M. Dürrnagel, H. Hohmann, A. Maity, J. Seufert, M. Klett, L. Klebl, and R. Thomale, arXiv preprint arXiv:2412.14251 (2024).
 - [17] P. Das, V. Leeb, J. Knolle, and M. Knap, *Phys. Rev. Lett.* **132**, 263402 (2024).
 - [18] N. Kaushal and M. Franz, *Altermagnetism in modified lieb lattice hubbard model* (2024).
 - [19] Y. Li, V. Leeb, K. Wohlfeld, R. Valentí, and J. Knolle, *d-wave magnetism in cuprates from oxygen moments* (2024).
 - [20] S. Bhowal and N. A. Spaldin, *Phys. Rev. X* **14**, 011019 (2024).
 - [21] P. A. McClarty and J. G. Rau, *Phys. Rev. Lett.* **132**, 176702 (2024).
 - [22] V. Leeb, A. Mook, L. Smejkal, and J. Knolle, *Phys. Rev. Lett.* **132**, 236701 (2024).
 - [23] S. Mansha and Y. D. Chong, *Phys. Rev. B* **96**, 121405 (2017).
 - [24] M. Xiao and S. Fan, *Phys. Rev. B* **96**, 100202 (2017).
 - [25] A. Agarwala and V. B. Shenoy, *Phys. Rev. Lett.* **118**, 236402 (2017).
 - [26] K. Pöyhönen, I. Sahlberg, A. Westström, A. Westström, A. W. N. communications, T. Ojanen, T. Ojanen, and 2018, *Nature Communications* **9**, 2103 (2018).
 - [27] N. P. Mitchell, L. M. Nash, D. Hexner, A. M. Turner, and W. T. M. Irvine, *Nature Physics* **14**, 380 (2018).
 - [28] A. G. Grushin, Topological phases of amorphous matter, in *Low-Temperature Thermal and Vibrational Properties of Disordered Solids* (World Scientific, 2023) Chap. Chapter 11, pp. 435–486.
 - [29] Q. Marsal, D. Varjas, and A. G. Grushin, *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.* **117**, 30260 (2020).
 - [30] P. Mukati, A. Agarwala, and S. Bhattacharjee, *Phys. Rev. B* **101**, 035142 (2020).
 - [31] P. Corbae, J. D. Hannukainen, Q. Marsal, D. Muñoz-Segovia, and A. G. Grushin, *Europhysics Letters* **142**, 16001 (2023).
 - [32] P. Corbae, S. Ciocys, D. Varjas, E. Kennedy, S. Zeltmann, M. Molina-Ruiz, S. M. Griffin, C. Jozwiak, Z. Chen, L.-W. Wang, A. M. Minor, M. Scott, A. G. Grushin, A. Lanzara, and F. Hellman, *Nature Materials* **22**, 200 (2023).
 - [33] S. Kim, A. Agarwala, and D. Chowdhury, *Physical Review Letters* **130**, 026202 (2023).
 - [34] A. G. Grushin and C. Repellin, *Phys. Rev. Lett.* **130**, 186702 (2023).
 - [35] G. Cassella, P. d’Ornellas, T. Hodson, W. M. H. Natori, and J. Knolle, *Nature Communications* **14**, 6663 (2023).
 - [36] R. Zallen, *The physics of amorphous solids* (John Wiley & Sons, 2008).
 - [37] J. M. D. Coey, *Journal of Applied Physics* **49**, 1646 (1978).
 - [38] K. I. Kugel and D. I. Khomskii, *Soviet Physics Uspekhi* **25**, 231 (1982).
 - [39] S. T. Ciocys, Q. Marsal, P. Corbae, D. Varjas, E. Kennedy, M. Scott, F. Hellman, A. G. Grushin, and A. Lanzara, *Nature Communications* **15**, 10.1038/s41467-024-51953-y (2024).
 - [40] S. Giuli, C. Mejuto-Zaera, and M. Capone, *Phys. Rev. B* **111**, L020401 (2025).
 - [41] K. S. Kim and H. W. Yeom, *Phys. Rev. Lett.* **107**, 136402 (2011).
 - [42] C. W. Groth, M. Wimmer, A. R. Akhmerov, and X. Waintal, *New Journal of Physics* **16**, 063065 (2014).
 - [43] R. Landauer, *IBM Journal of Research and Development* **1**, 223 (1957).
 - [44] R. Landauer, *The Philosophical Magazine: A Journal of Theoretical Experimental and Applied Physics* **21**, 863

- (1970).
- [45] M. Büttiker, [Physical Review Letters](#) **57**, 1761 – 1764 (1986).
 - [46] M. Buttiker, [IBM Journal of Research and Development](#) **32**, 317 – 334 (1988).
 - [47] R. Jaeschke-Ubiergo, V.-K. Bharadwaj, W. Campos, R. Zarzuela, N. Biniskos, R. M. Fernandes, T. Jungwirth, J. Sinova, and L. Smejkal, [arXiv preprint arXiv:2503.10797](#) (2025).
 - [48] A. B. Hellenes, T. Jungwirth, R. Jaeschke-Ubiergo, A. Chakraborty, J. Sinova, and L. Smejkal, [P-wave magnets](#) (2023).

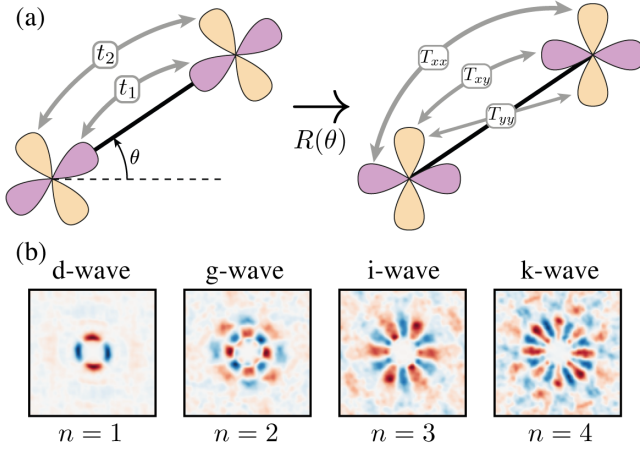


图 4. (a) 确定跳跃矩阵 $T(\theta)$ 的程序。我们从一对旋转至与键方向对齐的轨道开始，分配跳跃参数 t_1 和 t_2 。回旋到一个标准基 (x 和 y 轨道) 后，我们得到 $T(\theta)$ 的矩阵元。(b) 一系列高阶交替磁相的谱函数，由 n 参数化，其中每个相的交替磁对称性为 $C_{4n}\mathcal{T}$ 。每个相都是根据正文详细说明了的平均场方法构建和求解的。

结尾事项

A. 跃迁矩阵

为了产生一个 d 次波交替磁性相，我们从一对轨道开始，这对轨道在绕 z 轴的 $\pi/2$ 旋转下相互变换。例如我们可以使用 p_x 和 p_y 轨道，或者 d_{xz} 和 d_{yz} 轨道，标记为 x 和 y 。在绕 z 轴进行 θ 实空间旋转下，我们可以将这两个轨道关联到一个新的基中，在该基中轨道分别平行和垂直于 θ ，

$$\begin{pmatrix} c_{\parallel} \\ c_{\perp} \end{pmatrix} = R(\theta) \begin{pmatrix} c_x \\ c_y \end{pmatrix}, \quad (6)$$

其中 $R(\theta)$ 是标准二维旋转矩阵，

$$R(\theta) = \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta \\ -\sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix}. \quad (7)$$

因此，为了计算与 x 轴形成角度 θ 的键上的 $T(\theta)$ 跳跃矩阵，我们可以从一个与该键对齐的基开始，如图 Fig. 4a 所示。我们在两个与键平行的轨道之间分配一个跃迁 t_1 ，而在那些垂直的轨道上分配一个跃迁 t_2 ，得

到跃迁项

$$h_{jk} = t_1 c_{j\parallel}^\dagger c_{k\parallel} + t_2 c_{j\perp}^\dagger c_{k\perp} + h.c., \quad (8)$$

，在这里我们省略了明确写出自旋自由度。现在我们可以将全局参考框架中的轨道旋转回来，通过对 x 和 y 轨道上的自由度应用旋转矩阵 $R(\theta)$ ，在 j 和 k 站点上都进行操作，从而得到如下形式的跃迁

$$h_{jk} = \begin{pmatrix} c_{jx}^\dagger & c_{jy}^\dagger \end{pmatrix} T(\theta) \begin{pmatrix} c_{kx} \\ c_{ky} \end{pmatrix}, \quad (9)$$

的形式

$$T(\theta) = \begin{pmatrix} (t_1 - t_2) \cos^2 \theta + t_2 & (t_1 - t_2) \sin \theta \cos \theta \\ (t_1 - t_2) \sin \theta \cos \theta & (t_1 - t_2) \sin^2 \theta + t_2 \end{pmatrix}. \quad (10)$$

B. 高阶交替磁性

向更高阶的交替磁性相扩展是直接明了的。如果我们现在考虑使用一对在不同分数下的轨道， π 下相互转换的轨道—例如， d_{xy} 和 $d_{x^2-y^2}$ 轨道通过绕 z 轴的 $\pi/4$ 旋转映射到彼此—我们会看到唯一的变化是我们有效的旋转矩阵 Eq. (7) 在轨道空间中以多重的 $n\theta$ 对 $n \in \mathbb{Z}$ 进行操作。因此，我们的哈密顿量的唯一变化是我们现在使用形式为

$$h_{jk} = \begin{pmatrix} c_{jx}^\dagger & c_{jy}^\dagger \end{pmatrix} T(n\theta) \begin{pmatrix} c_{kx} \\ c_{ky} \end{pmatrix}. \quad (11)$$

的跃迁项。对于每个值的 n ，产生的相是一个交替磁体，其中基态尊重一个 $C_{4n}\mathcal{T}$ 对称性。

四个对应于 $n \in \{1, 2, 3, 4\}$ 的谱函数示例显示在 Fig. 4b 中，分别对应于 $C_4\mathcal{T}$ 、 $C_8\mathcal{T}$ 、 $C_{12}\mathcal{T}$ 和 $C_{16}\mathcal{T}$ 反铁磁相。在每种情况下，我们都按照正文中的规定构造了一个交替磁性的哈密顿量，收敛到同一晶格结构上的交替磁性平均场基态，占据数为 $J = 0.8$ ，填充 0.3， $t_1 = 1$ ， $t_2 = 0.5$ ，并确定了费米能级的谱函数。请注意， n 的半整数值是被禁止的，因为它们不会导致如 [48] 中讨论的共线磁相，例如不能构造 $C_6\mathcal{T}$ 交替磁性。