MŰEGYETEM 1782

PhD Tézisfüzet

Kvantum spinfolyadékok SU(N) Heisenberg-modellekben: dinamikus korrelációk vizsgálata Variációs Monte Carlo módszerekkel

Vörös Dániel

Témavezető: Penc Karlo

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem

2025

A kutatások előzménye

A fázisátmenetek hagyományos leírása, amelyet Landau fejlesztett ki, a szimmetriasértés fogalmán alapul. Minden egyes fázist egy adott szimmetriacsoport jellemez, és a fázisátmenet egy szimmetriasértéssel jár együtt, amely során az egyik fázis szimmetriacsoportja a másik fázis szimmetriacsoportjának részhalmaza. Ily módon olyan fogalmak, mint a rendparaméterek—amelyek a kritikus hőmérséklet felett eltűnnek, de az alatt véges értéket vesznek fel—mind a klasszikus, mind a kvantumos fázisátmenetek univerzális jellemzőiként jelentek meg. Landau elméletében mind a klasszikus mind a kvantumos fázisátátalakulásokat szimmetriasértés kíséri.

Ezt a jól megalapozott paradigmát kérdőjelezte meg a tört-kvantum-Hall-effektus felfedezése [1], ahol több különböző fázisnak ugyanazok a hagyományos szimmetriái. Mivel nyilvánvalóvá vált, hogy az ilyen kvantum állapotok nem különböztethetők meg a szimmetriasértés keretében, a fizikusok elkezdtek „rejtett" kvantumrendeződéseket keresni, amelyek megkülönböztethetik ezeket a fázisokat.

A kvantum spinfolyadékok tipikus példát nyújtanak ezekre az új elképzelésekre Mott-szigetelőkben. Egy kvantum spinfolyadék olyan kvantum spinrendszer alapállapota, amely teljesen szimmetrikus marad—tekintettel a rács és a Hamilton-operátor szimmetriáira. Ennek eredményeként a kvantum spinfolyadékok semmilyen hagyományos mágneses rendeződést nem mutatnak. Ehelyett töltéssemleges fermionikus gerjesztésekkel rendelkeznek. SU(2) szimmetrikus rendszerekben ezeket a gerjesztéseket gyakran spinonoknak nevezzük, melyek feles spinnel rendelkeznek.

A rejtett kvantumrendeződések jellemzésére ígéretes megközelítést nyújt az átlagtér-elmélet szintjén a projektív szimmetriacsoport ("projective symmetry group", PSG) fogalma. Amikor az átlagtér-elméleten túli fluktuációk gyengék, a PSG jellemzi a fázis tényleges kvantumrendeződését. Ilyen körülmények között kvantumos fázisátmenetek is előfordulhatnak hagyományos szimmetriasértés nélkül, amelyeket a PSG változásai kísérnek. Ahogyan a szimmetriasértés védi a gerjesztési rés nélküli gerjesztéseket a Goldstone-tétel szerint [2], bizonyos PSG-ek védik a gerjesztési rés nélküli gerjesztéseket és azok impulzustérbeli helyzetét [3, Sec. 9.10.2]. Kísérletileg a dinamikus spin struktúra faktor lehetőséget ad egy gerjesztési rés nélküli kvantum spinfolyadék azonosítására [3, Sec. 9].

Az egydimenziós spinrendszerek a kvantum spinfolyadékok archetípusos példái, ahol az erős kvantumfluktuációk elnyomják a mágneses rendeződés minden formáját. Ezzel szemben egy kvantum spinfolyadék megvalósítása kétdimenziós rendszerekben sokkal nagyobb kihívást jelent, és gyakran fokozott fluktuációkat igényel. Az ilyen fluktuációk fokozását el lehet érni geometriai frustrációval (például a háromszög vagy kagome rácson) vagy távolabbi szomszédok közötti kölcsönhatások bevezetésével. Egy másik megközelítés a spin szimmetriacsoport kibővítése, például SU(N) vagy Sp(N) modellek vizsgálatával $N > 2$ esetén [4], ami fokozza a kvantumfluktuációkat, és ezáltal segíti a kvantum spinfolyadékok stabilizálását.

Célkitűzések

Ebben a dolgozatban új utakat keresünk kétdimenziós kvantum spinfolyadékok stabilizálására és jellemzésére, olyan modelleket vizsgálva, amelyek megnövelt SU($N > 2$) szimmetriával rendelkeznek.

Elsődleges célunk az SU(4) Heisenberg-modell dinamikus spin struktúra faktorjának kiszámítása volt méhsejtrácson. Ez a modell megvalósítható például α-$ZrCl_3$-ban [5], ahol az erős spin-pálya csatolás effektív $N = 4$ szabadsági fokhoz vezet. A dinamikus spin struktúra faktor segíthet kísérletileg igazolni, hogy az alapállapot egy Dirac-spinfolyadék-e [6]. Ennek érdekében kiterjesztettük SU(N) modellekre azt a dinamikus variációs Monte Carlo módszert, amelyet korábban sikeresen alkalmaztak az SU(2) esetre [7, 8]. A módszert az egzaktul megoldható SU(3) Heisenberg-lánc fundamentális reprezentációjában teszteltük. Számításaink kiváló egyezést mutattak a Bethe-ansatzból, az egzakt diagonizációból és a DMRG-ből származó eredményekkel.

Ezt követően megvizsgáltuk, hogy az SU(6) Heisenberg-modell alapállapota kagome rácson lehet-e szintén egy Dirac-spinfolyadék, korábbi SU(2)-es tanulmányokkal motiválva [9]. Ez a modell optikai rácsban csapdázott ultrahideg ^{173}Yb izotópokkal valósítható meg. Az SU(2) esetben a dinamikus spin struktúra faktor optikai rácsokban Bragg-szórási kísérletekkel mérhető [10]. Abban a reményben, hogy ezek a mérések kiterjeszthetők az SU(6) esetre is, kiszámítottuk a dinamikus spin struktúra faktort a dinamikai variációs Monte Carlo módszer alkalmazásával.

Módszerek

Kiterjesztettem egy numerikus variációs Monte Carlo módszert az SU(N) esetre, amelyet az SU(2) Heisenberg-modellre vezettek be a dinamikus spin struktúra faktor kiszámítására [7, 8]. Ebben a módszerben az alapállapotot a Gutzwiller-projektált Fermi-tenger közelíti, ahol a Fermi-tenger az átlagtér-elmélet alapállapota, amelyet a Heisenberg-Hamilton-operátor variációs energiájának minimalizálásával optimalizáltunk.

A legalacsonyabb energiájú gerjesztett állapotok közelítéséhez előbb a Heisenberg-Hamilton-operátort a Gutzwiller-projektált részecske-lyuk gerjesztéseinek alterére vetítjük. A általánosított sajátértékprobléma megoldása ebben az alterében megadja az energiákat és sajátállapotokat, amelyek segítségével kiszámíthatók a dinamikus spin struktúra faktor spektrális súlyai.

A Gutzwiller-projektor minden rácshelyen kikényszeríti az egyszeres betöltöttséget, ami szükséges a Heisenberg-modell Hilbert-terének visszaállításához, amely az átlagtér-elmélet közelítés során kibővült. Összehasonlításképpen kiszámítottuk a dinamikus spin struktúra faktort átlagtér-elmélettel is, anélkül, hogy alkalmaznánk a Gutzwiller-projektort a Fermi-tengeren vagy a részecske-lyuk gerjesztéseken. Ahogy azt a [11] hivatkozás bemutatja az SU(2) Heisenberg-modell esetében háromszögrácson, a Gutzwiller-projektálás képes gerjesztési rés nélküli gerjesztéseket létrehozni, amelyek hiányoznak az átlagtér-elméletből. Az átlagtér-elmélet spektrumának gerjesztési rés nélküli gerjesztései megjelennek a Gutzwiller-projekció után is, bár a spektrális súlyok alacsonyabb energiákra tolódnak el.

Ez a variációs módszer várhatóan jó közelítést ad a Heisenberg-modell dinamikus spin struktúra faktorjára, ha az átlagtér-elmélet közelítésen túli fluktuációk gyengék. Az SU(2) szimmetrikus Heisenberg-modellekben azonban a fluktuációk gyakran nem elhanyagolhatók. Azonban az Sp($2N$) szimmetrikus Heisenberg-modellekben a fluktuációk a nagy N-határesetben eltűnnek [4].

Számításaink azt sugallják, hogy a Heisenberg-Hamilton-operátor megnövelt SU(N) szimmetriája a fundamentális reprezentációban hasonló hatással van a fluktuációkra.

Új tudományos eredmények

A disszertációmban ismertetett új tudományos eredmények az alábbi tézispontokban összegezhetőek:

1. Variációs módszerrel kiszámítottam az SU(3) Heisenberg-lánc dinamikus spin struktúra faktorát, $S(k, \omega)$, a Fermi-tenger Gutzwiller-projektált részecske-lyuk gerjesztéseit használva. Egy csoportelméleti érv azt mutatja, hogy ezek az állapotok általánosan alkalmazhatók az SU(N) Heisenberg-modellek dinamikus spin struktúra faktorjának kiszámítására is. Megmutattam, hogy az SU(3) Heisenberg-lánc alacsony energiájú spektruma és a spektrális súlyok eloszlása jól reprodukálható ezzel a módszerrel. Az eredményeket összehasonlítottam az $S(k, \omega)$ egzakt diagonizációval kapott eredményeivel (18 rácshelyen), a Bethe-ansatz két-szoliton kontinuumával, valamint DMRG eredményekkel (72 rácshelyen). A végesméret effektusok részletes elemzése kimutatta, hogy a módszer reprodukálja a kritikus Wess-Zumino-Witten $\mathrm{SU}(3)_1$ viselkedést, és helyesen visszaadja az exponenseket, kivéve a gerjesztési torony alján lévő spektrális súly méretfüggését. A gerjesztések sebessége és a központi töltés értéke közel esik az ismert eredményekhez. Kapcsolódó publikáció: [I.].

2. A dinamikus variációs Monte Carlo módszerrel kiszámítottam az SU(4) Heisenberg-modell dinamikus spin struktúra faktorát méhsejtrácson, feltételezve a Gutzwiller projektált π-fluxusú Fermi-tenger alapállapotot [6], és összehasonlítottam az eredményeket a kölcsönhatásmentes átlagtér-elméleti számításokkal. A két megközelítés kvalitatívan hasonló eredményeket adott. Ez az analógia azt sugallja, hogy a projektált gerjesztések energiaspektruma egy gerjesztési rés nélküli, frakcionált gerjesztésekből álló kontinuum. Kvantitatívan a Gutzwiller-projekció a spektrális súlyokat a magasabb energiákról alacsonyabbakra tolja el, így kiemeli a kontinuum alsó élét. A átlagtér-elmélet megközelítésben a spinkorrelációs függvények 1/távolság^4 lecsengést mutattak, míg a lokális korrelációk $S^{33}_{\mathrm{MF}}(\omega) \propto \omega^3$ viselkedést adtak. Kapcsolódó publikáció: [II.].

3. Az SU(6) Heisenberg-modell alapállapotára a kagome-rácson a Gutzwiller projektált π-fluxusú Fermi tengert javasoltam, mely egy gerjesztési rés nélküli Dirac spinfolyadék. Ehhez megvizs-

gáltam e Dirac spinfolyadék energetikai stabilitását az átlagtér-elmélet ansatz perturbációival szemben, és megerősítettem, hogy a Dirac spinfolyadék a legalacsonyabb variációs energiájú szinglet állapot. Továbbá megállapítottam, hogy a másodszomszéd (J_2) és a gyűrűs (K) kölcsönhatások véges értékei szükségesek a Dirac spinfolyadék destabilizálásához, kiemelve annak stabilitását a további kölcsönhatásokkal szemben. Kapcsolódó publikáció: [III.].

4. Az SU(6) kagome-rács Dirac spinfolyadék alapállapotának jellemzésére variációsan kiszámítottam a dinamikus spin struktúra faktort, a π-fluxusú Fermi-tenger Gutzwiller-projektált részecske-lyuk gerjesztéseit használva, és összehasonlítottam az eredményeket a kölcsönhatásmentes átlagtér-elméleti számításokkal. Az SU(6) esetben a spektrális súlyok eloszlása az $S(\mathbf{k},\omega)$-ban sokkal jobb egyezést mutatott a variációs és átlagtér-elméleti számítások között, mint az SU(4) vagy SU(2) esetében. Ezt az megnövelt SU(N) szimmetriának tulajdonítom. E hasonlóság alapján az átlagtér-elmélettel vizsgáltam az $S(\mathbf{k},\omega)$ spektrumát egy jelentős méretű, 3888 rácshelyes rendszerben. Az eredmények gerjesztési rés nélküli kontinuumot mutattak, ahol a gerjesztési rés nélküli tornyok a kiterjesztett Brillouin-zóna Γ, Γ', M és M$'$ pontjaiban helyezkednek el. A statikus spin struktúra faktor, $S(\mathbf{k})$, a spektrális súlyok növekedését mutatja háromszög alakú platók formájában a kiterjesztett Brillouin-zóna K$'$ pontjai körül. A variációs módszerrel számított $S(\mathbf{k})$ az átlagtér-elmélettől elsősorban az összegszabályokban, és az M$'$ pontokban megjelenő csúcsokban tér el. A valós-térbeli spin-spin korrelációk távolságfüggése algebraikus lecsengést mutat, egy 3 és 4 közötti hatványkitevővel, hasonlóan az SU(4) esethez (lásd Ref.[6]). Kapcsolódó publikáció: [III.].

A tézispontokhoz kapcsolódó publikációk:

I. D. Vörös and K. Penc, *Dynamical structure factor of the SU(3) Heisenberg chain: Variational Monte Carlo approach* Physical Review B **104** 184426/1-19 (2021)

II. D. Vörös and K. Penc, *Dynamical structure factor of the SU(4) algebraic spin liquid on the honeycomb lattice* Physical Review B **108** 214407/1-10 (2023)

III. D. Vörös, P. Kránitz and K. Penc, The algebraic spin liquid in the SU(6) Heisenberg model on the kagome lattice, Physical Review B **110** 144437/1-29 (2024)

További publikációk:

IV. M. Kormos, D. Vörös, and G. Zaránd, *Finite-temperature dynamics in gapped one-dimensional models in the sine-Gordon family* Physical Review B **106** 205151/1-16 (2022).

Hivatkozások

[1] D. C. Tsui, H. L. Stormer, and A. C. Gossard, „Two-dimensional magnetotransport in the extreme quantum limit," *Phys. Rev. Lett.*, vol. 48, pp. 1559–1562, May 1982. [Online]. Available: https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.48.1559

[2] P. Fazekas, *Lecture Notes on Electron Correlation and Magnetism.* WORLD SCIENTIFIC, 1999. [Online]. Available: https://www.worldscientific.com/doi/abs/10.1142/2945

[3] X.-G. Wen, *Quantum Field Theory of Many-Body Systems: From the Origin of Sound to an Origin of Light and Electrons.* Oxford University Press, 09 2007. [Online]. Available: https://doi.org/10.1093/acprof:oso/9780199227259.001.0001

[4] Y. Ran and X.-G. Wen, „Continuous quantum phase transitions beyond landau's paradigm in a large-n spin model," *arXiv: Strongly Correlated Electrons*, 2006. [Online]. Available: https://api.semanticscholar.org/CorpusID:116902931

[5] M. G. Yamada, M. Oshikawa, and G. Jackeli, „Emergent SU(4) symmetry in α -$ZrCl_3$ and crystalline spin-orbital liquids," , vol. 121, no. 9, p. 097201, Aug. 2018. [Online]. Available: https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.121.097201

[6] P. Corboz, M. Lajkó, A. M. Läuchli, K. Penc, and F. Mila, „Spin-orbital quantum liquid on the honeycomb lattice," *Phys. Rev. X*, vol. 2, p. 041013, Nov 2012. [Online]. Available: https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevX.2.041013

[7] T. Li and F. Yang, „Variational study of the neutron resonance mode in the cuprate superconductors," *Phys. Rev. B*, vol. 81, p. 214509, Jun 2010. [Online]. Available: https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.81.214509

[8] B. Dalla Piazza, M. Mourigal, N. B. Christensen, G. J. Nilsen, P. Tregenna-Piggott, T. G. Perring, M. Enderle, D. F. McMorrow, D. A. Ivanov, and H. M. Rønnow, „Fractional excitations in the square-lattice quantum antiferromagnet," *Nature Physics*, vol. 11, no. 1, pp. 62–68, Jan. 2015. [Online]. Available: https://doi.org/10.1038/nphys3172

[9] Y. Ran, M. Hermele, P. A. Lee, and X.-G. Wen, „Projected-wave-function study of the spin-1/2 heisenberg model on the kagomé lattice," *Phys. Rev. Lett.*, vol. 98, p. 117205, Mar 2007. [Online]. Available: https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.98.117205

[10] S. Hoinka, M. Lingham, M. Delehaye, and C. J. Vale, „Dynamic spin response of a strongly interacting fermi gas," *Phys. Rev. Lett.*, vol. 109, p. 050403, Aug 2012. [Online]. Available: https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.109.050403

[11] F. Ferrari and F. Becca, „Dynamical Structure Factor of the J_1–J_2 Heisenberg Model on the Triangular Lattice: Magnons, Spinons, and Gauge Fields," *Physical Review X*, vol. 9, no. 3, p. 031026, Jul. 2019. [Online]. Available: https://doi.org/10.1103/PhysRevX.9.031026