

**Fluktuáló momentumok  
egy- és kétdimenziós  
Mott-szigetelőkben**

PhD téziszfüzet

Lajkó Miklós

PhD témavezető: Penc Karlo

Fizika Tanszék,  
Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem

Szilárdtestfizikai és Optikai Intézet  
Wigner Fizikai Kutatóközpont

2013

## Bevezető

A kondenzált anyagok fizikájában felmerülő modellek vizsgálata, vagy a valós anyagokban megfigyelt jelenségek tanulmányozása gyakran valamiféle egyszerűsítéssel kezdődik. Bevett eljárás elsőként egy egyszerűbb model felállítása, mely képes kvalitatívan visszaadni a lényeges tulajdonságokat. Később ez a modell kibővíthető, hogy alkalmassá váljon a mérési eredmények számszerű reprodukálására is. Ebben a megközelítésben kihasználjuk a különböző modellek univerzális viselkedését, vagyis, hogy a részletektől függetlenül különböző rendszerek hasonló viselkedést mutathatnak.

A kondenzált anyagok fizikájában Mott-szigetelő állapot alacsony energiás leírására a legegyszerűbb model az előszomszéd Heisenberg model. A modell a lokalizált elektronok perturbatív leírásának vezető rendjéből származik és spin szabadsági fokok kölcsönhatását írja le. Ha magasabbrendű perturbációkat is figyelembe veszünk, akkor az effektív modell magasabbrendű, illetve hosszabb távú kölcsönhatásokat is tartalmaz. Amennyiben az elektronoknak nemcsak spin, hanem pálya szabadsági fokuk is van, az alacsony energiás leírás kiindulópontja a spin és pálya szabadsági fokok kicserélődését leíró Kugel-Khomskii modell [2].

Egy másik lehetőség a vizsgált probléma egyszerűsítésére, ha a vizsgált modellt alacsonyabb dimenziós rendszerre ültetjük át. A legegyszerűbb rendszerek az egydimenziós lánc strukturák, ahol a vizsgálódást segíti az általában egyszerűbb formalizmus, és számos hatékony elméleti és numerikus módszer megléte. Az első lépést a magasabb dimenziók felé a létrák adják, melyekben kettő vagy több láncot csatolunk össze. Ez az elrendezés lehetőséget ad, hogy bepillantsunk a magasabb dimenziós effektusokba, mégis megőrizzük az egydimenziós leírás előnyeit. Az évek során számos anyagot hoztak létre, melyekben létra szerkezet volt megfigyelhető, mindamellert elméleti oldalról is jelentős eredmények születtek. A kísérleti és elméleti kutatások együttműködésének köszönhetően mára átfogó képpel rendelkezünk ezekről a rendszerekről [1].

Disszertációmban példát mutatok az említett egyszerűsítések mindkét esetére. Az első részben háromszög alapú csövön vizsgálok egy első- és másodsomszéd Heisenberg kicserélődést és magasabb rendű kölcsönhatásokat is tartalmazó  $S=1/2$  spin modellt. Bizonyos kérdésekben a modell alacsony energiás viselkedése a csövön és a kétdimenziós négyzetrácson hasonlóságot mutat, azonban csövek esetén az állapotok szimmetria és megmaradó mennyiségekkel való jellemzése jóval egyszerűbb, így elsőként ennek a struktúrának a vizsgálata kézenfekvőbb, és később a csöveken tapasztaltak segíthetnek a kétdimenziós eset megértéséhez.

A disszertáció második felében méhsejtrácson tanulmányozom az  $SU(4)$  szimmetrikus elsőszomszéd Heisenberg-modell alapállapotát. A vizsgálódás célja a spin és pálya szabadsági fokokkal rendelkező anyagokban megfigyelt jelenségek [8] reprodukálása. Az  $SU(4)$  Heisenberg modell – mely ekvivalens az  $SU(4)$  szimmetrikus Kugel-Khomskii modellel – a legegyszerűbb, legmagasabb szimmetriájú modell spin és pálya szabadsági fokokkal is rendelkező Mott-szigetelők vizsgálatára, mely esetünkben kísérleti eredményekkel egybecsengő

tulajdonságokat mutat. Ezen a modellen végzett számolások remek alapot adhatnak általánosabb spin-pálya modellek tanulmányozásához, melyek a kísérletben tapasztaltak kvantitatív leírására is alkalmasak lehetnek.

## Előzmények, célkitűzések

### I. Projekció alapú modell háromágú spin-csőveken

A mágnesség témakörében számos példát találunk, amelyekben a modell felírható projekciós operátorok segítségével. A legjelentősebbek közé tartozik az  $S=1/2$  spin-láncon megadott első- és másodsomszéd Heisenberg kölcsönhatást tartalmazó Majumdar-Ghosh modell [3], amelyben az alapállapot felírható elsőszomszéd szinglett, vagy másnéven vegyérték kötések direkt szorzataként. Egy másik példa  $S = 1$  spin láncok esetén az Affleck-Kennedy-Lieb-Tasaki modell amely szintén felírható projekciók összegeként. A modell egzakt "valence bond solid" alapállapota nem degenerált és a gerjesztések gappeltek, iskolapéldáját mutatva a Haldane sejtésnek [5].

Munkám során háromszög alapú  $S=1/2$  spin-csőveken vizsgáltam egy modellt, mely előáll a négyzet plaketteken ható projekció operátorok összegeként. A modellt Batista és Trugman [6] vezette be a kétdimenziós négyzetrácson, ahol nagyszámú egzakt alapállapot jelenik meg 0 energiával. Ezek az alapállapotok felírhatóak elsőszomszéd vegyérték kötés lefedéseként.

Egzakt diagonalizációs számolások a kétdimenziós négyzetrácson további alapállapotok jelenlétét mutatták, melyek nem írhatóak fel a fenti konstrukcióval. Továbbá háromágú spin-csőveken is találtam 0 energiás alapállapotokat, melyek szintén nem magyarázhatóak a Batista-Trugman módszerrel. Munkám célja a csőveken talált alapállapotok struktúrájának megértése. A csövön kapott eredmények alapul szolgálhatnak a kétdimenziós négyzetrács alaposabb megértéséhez is.

### II. $SU(N)$ szimmetrikus Heisenberg modell kétdimenziós méhsejtrácson

A korrelált szigetelők témakörében számos kontextusban találkozhatunk  $SU(N)$  szimmetrikus modellekkel. Általánosságban ezekben a modellekben az egyes rácshelyeken  $N$  különböző lokális állapot lehetséges, és a kölcsönhatás ezen lokális állapotok felcserélése a szomszédos rácshelyeken. A lokális állapotokat gyakran színekkel reprezentáljuk. A legegyszerűbb példa az  $SU(2)$  szimmetrikus  $S=1/2$  Heisenberg model, mely a lokalizált elektronok alacsony energiás viselkedését írja le a Mott-szigetelő állapotban. A jól ismert  $S \cdot S$  kölcsönhatás ebben az esetben felírható a kicserélődési operátorral. Amikor a spin szabadsági fokokon felül pálya szabadsági fokok is jelen vannak, az alacsony energiás effektív modell az ún. Kugel-Khomskii modell [2], mely a spin és pálya szabadsági fokok kicserélődését írja le. Ez a modell a paraméterek speciális értékeire az  $SU(4)$  szimmetrikus Heisenberg modellt adja vissza.

$S=1$  spinrendszerek esetén, bilineáris  $S \cdot S$  és bikvadratikus  $(S \cdot S)^2$  kölcsönhatások esetén a csatolások megfelelő értékeire a modell ugyancsak az  $SU(3)$  szimmetrikus kicserélődés.

Optikai rácsokban csapdázott ultrahideg alkáli-földfém atomok esetében az  $F$  magspin az egyetlen releváns paraméter, melynek  $N=2F+1$  különböző állapota lehetséges, így a kicserélődés színén leírható  $SU(N)$  szimmetrikus modellekkel [7].

Kísérleti oldalról, Nakatsuji és csoportja [8] vizsgálta a  $Ba_3CuSb_2O_9$  vegyületet, ahol a mágneses réz ionok méhsejtrácsban rendeződnek. Az alacsony energiás modellben a  $Cu^{2+}$  ionok  $e_g$  pályáján található lyuk spin és pálya szabadsági fokkal is rendelkezik. Röntgenszórási kísérletek alapján nincs jele Jahn-Teller torzulásnak, mely a pálya szabadsági fokok rendeződésére utalna. Ezen kívül a mágneses szuszceptibilitás sem mutat mágneses rendeződésre utaló jeleket. Mindezek alapján feltételezhető, hogy valamilyen spin-pálya folyadék állapot valósul meg a  $Ba_3CuSb_2O_9$  anyagban.

Ezen eredmények alapján variációs Gutzwiller projekciós közelítésben vizsgáltam az  $SU(4)$  szimmetrikus Heisenberg modellt, abban a reményben, hogy ez az egyszerűsített modell is képes visszaadni a kísérletekben megfigyelt folyadék viselkedést.

$SU(N)$  rendszerek esetén a Gutzwiller projekciós közelítés lényege a lokális állapotok, vagyis színek fermionikus reprezentációja. A fermion képben a kicserélődési operátor negyedrendű. A Gutzwiller projekció esetén egy szabad fermion modellből indulunk ki, melynek  $1/N$  betöltésű Fermi-tenger alapállapotából csak azokat a fermion konfigurációkat vesszük figyelembe, ahol szigorúan egy fermion található rácshelyenként, azaz kiprojiciáljuk a többszörös betöltésű konfigurációkat. A szabad fermion modell megfelelő választásával az így kapott variációs állapot jól jellemzi az alapállapotot. Az egyes projekciált állapotok jellemezhetőek a szabad fermionikus modellben az egyes plakettek körüljárása során összeszedett fázissal, másnéven fluxussal. A fluxus konfiguráció és a projekció utáni állapot tulajdonságainak kapcsolata jelenleg nem igazán feltérképezett, de gyakran a nemtriviális fluxuskonfigurációk a projekció után alacsonyabb energiát adnak mint az egységesen 0 fluxusú eset.

Hasonló módszerekkel vizsgáltam az  $SU(3)$  szimmetrikus Heisenberg modellt méhsejtrácson. Ezt a munkát főként az irodalomban talált, különböző módszerekből származó ellentmondó eredmények motiválták.

Az  $SU(3)$  és  $SU(4)$  modelleken végzett munkám egy együttműködés része volt, ahol több különböző numerikus módszer eredményeit vizsgáltuk a modellek alapállapoti struktúráját.

# Új tudományos eredmények

1.

Háromágú spin-csővön tanulmányoztam egy első- és másodsomszéd Heisenberg, valamint négy-spin kölcsönhatásokkal frusztrált Hamilton-operátort. A modell kétdimenziós négyzet rácson nagyszámú 0 energiás egzakt alapállapottal rendelkezik [6], azonban páratlan ágú spin-csővek esetében a négyzet rácson megadott konstrukció nem működik. Egzakt diagonalizációs (ED) számolásokat végeztem kisméretű cső rendszereken (4,5,6 háromszög), melyek a várakozásokkal ellentétben 0 energiás alapállapotok jelenlétét mutatták. Páros hosszú csövek esetén 3 szinglett ( $S=0$ ), míg páratlan hosszú csövek esetén egy dublett ( $S=1/2$ ) alapállapotot találtam. Ezeket az eredményeket megerősítették a Philippe Sindzingre által nagyobb rendszerekre is elvégzett ED számolások is.

Gyengén csatolt háromszögek határesetében meghatároztam az alacsony energiás effektív Hamilton-operátorokat. Erős háromszögön belüli antiferromágneses csatolás esetén az alacsony energiás modell egy effektív egydimenziós modell spin és királis szabadsági fokokkal. Páros hosszúságú cső esetén megadtam az alapállapot szerkezetét ebben a határesetben, mely kétszeresen degenerált és sérti az eltolási invarianciát. Ezek az állapotok az eredeti Batista-Trugman pontban is alapállapotai a cső rendszernek.

Páratlan számú háromszögből álló csövek esetén azonosítottam a Batista-Trugman pontban talált dublett alapállapotot, mely egy delokalizált egy-doménfal állapot. Hasonlóan, páros hosszúságú csövek esetén egy független két-doménfal állapot is alapállapot ebben a pontban. Ezeket az alapállapotokat is megadtam analitikusan, továbbá variációs számolásokat végeztem az egy-, illetve két-doménfal állapotok alterén. Melyekből kiderült, hogy a doménfal gerjesztések gapnélküliek a termodinamikai limeszben.

A háromszögön belüli csatolás hangolásával három különböző fázist találtam. Az erős antiferromágneses esetben a már említett spin-királis effektív modell jellemzi az alacsony energiás viselkedést, kétszeresen degenerált alapállapottal és gappelt gerjesztésekkel. Erős ferromágneses csatolás esetén a modell leírható egy effektív  $S=3/2$  bilineáris-bikvadratikus modellel, melyben a gerjesztések gapnélküliek, és az alapállapot nem degenerált. A két határeset között találtam egy harmadik fázist, melyben a kölcsönhatás hangolásával doménfal párok jelennek meg az alapállapotban. A spin-királis fázis és a köztes fázis közti átalakulási pont éppen a Batista-Trugman pont, ahol dimerizált és két-doménfal alapállapotok is jelen vannak. Ahogy hangoljuk a háromszögön belüli csatolást a ferromágneses határeset felé, egyre több doménfal jelenik meg a rendszerben míg egy elsőrendű fázisátalakulással be nem lépünk az  $S=3/2$  fázisba. [1]

2.

Méhsejtárcson tanulmányoztam az  $SU(4)$  szimmetrikus elsőszomszéd Heisenberg-modellt variációs Gutzwiller projekciós közelítésben.

Leprogramoztam egy Monte Carlo algoritmust, mely alkalmas a Gutzwiller projiciált hullámfüggvények mintavételezésére. Az algoritmusban súlyozott mintavételezést, és hatékony determináns számolási eljárást alkalmaztam. Ezen program segítségével számoltam a projiciált hullámfüggvények energiáját és szín-szín korrelációit. A legalacsonyabb energiát egy plakettenként  $\pi$  effektív fluxussal rendelkező projiciált Fermi-tenger állapot esetén kaptam, melynél Dirac csúcsok jelentek meg a szabad fermion spektrumban negyedes betöltésnél. Ezen esetre végeztem részletesebb számolásokat különböző méretű rendszereken. Azt találtam, hogy a szín-szín korrelációk algebrai lecsengést mutatnak.

Ezek a számolások más módszerekkel egybevetve azt mutatják, hogy  $SU(4)$  Heisenberg modell alapállapota a kétdimenziós méhsejtárcson egy algebrai spin-pálya folyadék állapot [II].

3.

A méhsejtárcson vett elsőszomszéd  $SU(4)$  szimmetrikus Heisenberg modell esetén tanulmányoztam a talált folyadék állapot stabilitását különböző rendeződésekkel szemben. Ezen vizsgálatok során változtattam a variációs állapotok előállításához használt szabad fermionikus modell paramétereit, és a projekció utáni állapotok energiáit hasonlítottam össze. Négy különböző esetet vizsgáltam:  $SU(4)$  szimmetriasértő hosszútávú rend, dimerizáció, láncok kialakulása, illetve tetramerizáció, azaz  $SU(4)$  szinglettek kialakulása. Azt találtam, hogy minden esetben a spin-pálya folyadék állapot energiája a legkisebb.

A variációs Monte Carlo számolások alapján rajzoltam egy fázisdiagrammot, mely szemlélteti a másod és harmadszomszéd kölcsönhatás hatását. Ez a vizsgálat azt mutatta, hogy a spin-pálya folyadék állapot véges másod és harmadszomszéd csatolás esetén is stabil. A tetramerizáció esete megtalálható [IV]-ben.

4.

Konstruáltam egy  $SU(4)$  szimmetrikus Hamilton-operátort a méhsejtárcson, melynek egzakt alapállapotai felírhatóak  $SU(4)$  szinglettek direkt szorzataként. Az elsőszomszéd Heisenberg modell és e között a modell közötti interpoláció során szükségszerűen találunk egy fázisátalakulást a spin-pálya folyadék állapotból a tetramerizált állapotba. Ezen fázisátalakulást tanulmányoztam részlegesen tetramerizált variációs Gutzwiller projiciált állapotok energiáinak összehasonlításával. Hasonló számolásokat végeztem másodsomszéd Heisenberg csatolás bekapcsolása esetén is. Mindkét esetben azt találtam, hogy a fázisátalakulás elsőrendű, azonban az átalakulás helye erősen függ a rendszermérettől [IV].

5.

Szintén Gutzwiller projekciós módszerrel vizsgáltam a méhsejtrácson az  $SU(3)$  szimmetrikus elsőszomszéd Heisenberg modellt. Különböző rendszerméretekre (72, 288, 648), és számos különböző fluxus konfiguráció esetén végeztem variációs Monte Carlo számolásokat. Ezen számolások két, az irodalomban már korábban is felvetett lehetőséget mutattak: egy dimerizált, és egy hexamerizált állapotot. Eredményeim alapján a hexamerizált állapot energiája egyértelműen alacsonyabb, még nagyobb rendszerek esetén is. Ezen kívül vizsgáltam az állapotok stabilitását a folytonos  $SU(3)$  szimmetria sérülésével szemben, de azt találtam, hogy mindkét eset stabil ezzel a szimmetriasérüléssel szemben [III].

## Irodalomjegyzék

- [1] E. Dagotto, T. M. Rice, *Science* **271**, 5249 (1996).
- [2] K. I. Kugel, D. I. Khomskii, *Sov. Phys. Usp.* **25**, 231 (1982).
- [3] C. K. Majumdar and D. K. Ghosh, *J. Math. Phys.* **10**, 1399–1402 (1969).
- [4] I. Affleck, T. Kennedy, E. H. Lieb, and H. Tasaki, *Commun. Math. Phys.* **115**, 477 (1988).
- [5] F. D. M. Haldane, *Phys. Rev. Lett.*, **50**, 1153 (1983).
- [6] C. D. Batista and S. A. Trugman, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 217202 (2004).
- [7] A. V. Gorshlov et al., *Nature Physics* **6**, 289 (2010).
- [8] S. Nakatsuji et al., *Science* **336**, 559 (2012).
- [9] Y.-W. Lee and M-F. Yang, *Phys. Rev. B*, **85** 100402 (2012),  
H. H. Zhao et al, *Phys. Rev. B*, **85** 134416 (2012).

## Tézispontokhoz kapcsolódó publikációk

- [I] M. Lajkó, P. Sindzingre, K. Penc:  
*Exact ground states with deconfined gapless excitations for the 3 leg spin-1/2 tube*  
*Phys. Rev. Lett* **108**, 017205/1-5 (2012).
  
- [II] P. Corboz, M. Lajkó, A. M. Läuchli, K. Penc, F. Mila:  
*Spin-orbital quantum liquid on the honeycomb lattice*  
*Phys. Rev. X* **2**, 041013/1-11 (2012).
  
- [III] P. Corboz, M. Lajko, K. Penc, F. Mila, A. Läuchli  
*Competing states in the SU(3) Heisenberg model on the honeycomb lattice: Plaquette valence-bond crystal versus dimerized color-ordered state*  
*Phys. Rev. B* **87**, 195113/1-11 (2013).
  
- [IV] M. Lajkó, K. Penc  
*Tetramerization in SU(4)-Heisenberg model on the honeycomb lattice*  
*Phys. Rev. B* **87**, 224428/1-10 (2013).

## Egyéb publikációk

- J. Romhányi, M. Lajkó, K. Penc:  
*Zero- and finite-temperature mean field study of magnetic field induced electric polarization in Ba<sub>2</sub>CoGe<sub>2</sub>O<sub>7</sub>: The effect of the antiferroelectric coupling*  
*Phys. Rev. B* **84**, 224419/1-8 (2011).