



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 kvantum fázisátmenetek univerzális jellemzőiként jelentek meg. Landau elméletében mind a klasszikus mind a kvantum 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 nem mutatnak semmilyen hagyományos mágneses (pl. ferromágneses vagy antiferromágneses) rendeződést. Míg a mágnesesen rendeződött alapállapotok általában bozonikus gerjesztésekkel rendelkeznek (mint az egész spinű magnon), addig egy kvantum spinfolyadéknak frakcionalizált fermionikus gerjesztései vannak (mint a feles spinű spinonok). A bozonikus gerjesztés fermionikus kvázirészecske-párrá való felhasadását frakcionalizációnak nevezzük. Következésképpen, a kvantum spinfolyadék alapállapot és a frakcionalizált gerjesztések létezése közvetlenül kimérhető a dinamikus spin struktúra faktoron ($S(\mathbf{k}, \omega)$) keresztül, ha a legalacsonyabb gerjesztési energiákon egy folytonos (kvázirészecske-párra utaló) spektrumot figyelünk meg egyetlen gerjesztési ág helyett.

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, az átlagtér-elméleti kvantumrendeződés (amit a PSG véd) a valódi alapállapot kvantumrendeződésévé válik [2, Sec. 9.9.1]. Ha az átlagtér-elméleti egyrészecske spektrum energiával rendelke-

zik, akkor ezt a kvantumrendeződést topologikus rendnek nevezzük, és az alapállapotú degeneráciúval jellemezzük [3]. Ha nincs energiáris az egyrészeske spektrumban, akkor a kvantumrendeződést energiáris nélküli gerjesztések létezése és elhelyezkedése (reciprok térben) jellemzi a dinamikus spin struktúra faktorban [2, Sec. 9.10.2]. Ahogyan a szimmetriasértés védi a energiáris nélküli gerjesztéseket a Goldstone-tétel szerint [4, Sec. 6.1], bizonyos PSG-k védik az energiáris nélküli gerjesztéseket és azok reciproktérbeli helyzetét [2, Sec. 9.10.2]. Következésképpen, a dinamikus spin struktúra faktor lehetőséget ad egy energiáris nélküli kvantum spinfolyadék kísérleti azonosítására [2, Sec. 9]. A PSG megváltozása kvantum fázisátalakulást eredményez, melyet azonban nem kísér hagyományos szimmetriasértés.

Az egydimenziós spinrendszerek a kvantum spinfolyadékok archetipusos 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 frusztrációval (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 [5], 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 faktorának kiszámítása volt méhsejtrácson. Ez a modell megvalósítható például α - $ZrCl_3$ -ban [6], 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 [7]. Ennek érdekében kiterjesztettük $SU(N)$ modellekre azt a dinamikus variációs Monte Carlo módszert, amelyet korábban sikeresen alkalmaztak az $SU(2)$ esetre [8, 9]. 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 [10]. Ez a modell optikai rácspan csapdázott ultrahideg ^{173}Yb izotópokkal valósítható meg. Az $SU(2)$ esetben a dinamikus spin struktúra faktor optikai rácokban Bragg-szórás kísérletekkel mérhető [11]. 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 [8, 9]. Ebben a módszerben az alapállapotot a Gutzwiller-projiciált 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-projiciált 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-projektort minden rácshelyen kikényszeríti az egyszerűsített betöltöttséget, ami szükséges a Heisenberg-modell Hilbert-terének visszaállításához, amely az átlagtér-elmélet közelítés során kibővült. Összehasonlítóképpen 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 [12] hivatkozás bemutatja az $SU(2)$ Heisenberg-modell esetében háromszögrácson, a Gutzwiller-projiciálás képes energiárés nélküli gerjesztéseket létrehozni, amelyek hiányoznak az átlagtér-elméletből. Az átlagtér-elmélet spektrumának energiárés nélküli gerjesztései megjelennek a Gutzwiller-projiciálás után is, bár a spektrális súlyok alacsonyabb energiákra tolódnak el.

Ez a variációs módszer várhatóan jó közelítést ad a Heisenberg-

modell dinamikus spin struktúra faktorára, 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 [5].

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 összegezhetők:

1. Variációs módszerrel kiszámítottam az $SU(3)$ Heisenberg-lánc dinamikus spin struktúra faktorát, $S(k, \omega)$, a Fermi-tenger Gutzwiller-projiciált részecske-lyuk gerjesztéseit használva. 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 diagonalizációval 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 $SU(3)_1$ 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 méhszejtrácson, ahol az alapállapotot a Gutzwiller-projiciált π -fluxusú Fermi-tengerrel közelítettük ([7] alapján), melyet Dirac spin folyadéknak nevezünk. Ezeket az eredményeket összehasonlítottam kölcsönhatásmentes átlagtér-elméleti számításokkal. A két közelítés kvalitatívan hasonló eredményeket adott, ami azt sugallja, hogy a Gutzwiller projiciált gerjesztések spektruma egy energiarés nélküli, frakcionált gerjesztésekből álló kontinuum. Kvantitatívan a Gutzwiller-projiciálás a spektrális súlyokat a magasabb energiákról alacsonyabbakra tolja el, így kiemeli a kontinuum alsó

élet. Az alábbi hányados $(\sum_{\mathbf{k} \in \text{eBZ}} S_{\text{MF}}^{33}(\mathbf{k})) / (\sum_{\mathbf{k} \in \text{eBZ}} S^{33}(\mathbf{k})) = 1 - 1/N$ azt mutatja, hogy a korrelációk csökkennek az átlagtér-elméletben, mert a töltésfluktuációk csökkentik a négyzetes Casimir operátor értékét, mely megjelenik az összszabályokban. Kapcsolódó publikáció: [II].

3. Az SU(6) Heisenberg-modell alapállapotára a kagome-rácson a Gutzwiller projiciált π -fluxusú Fermi tengert javasoltam, mely szintén egy Dirac spinfolyadék. Ehhez megvizsgáltam e Dirac spinfolyadék energetikai stabilitását az átlagtér ansatz perturbációival szemben, és megerősítettem, hogy a Dirac spinfolyadék a legalacsonyabb variációs energiájú szinglett állapot. Továbbá megállapítottam, hogy a másodsomszéd (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) szimmetrikus modell Dirac spinfolyadék alapállapotának jellemzésére variációsán kiszámítottam a dinamikus spin struktúra faktort, a π -fluxusú Fermi-tenger Gutzwiller-projiciált 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) esetekben. A csökkenő különbséget a két fajta számítás között az átlagtér-elméleten túli fluktuációk gyengülésének tulajdonítom a növekvő SU(N) szimmetria hatására. E hasonlóság alapján az átlagtér-elmélettel vizsgáltam az $S(\mathbf{k}, \omega)$ spektrumát egy jelentős méretű, 3888 rácshelyes rendszerben. Az eredmények energiarés nélküli kontinuumot mutattak, ahol a energiarés 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 összszabályokban, és az M' pontokban megjelenő csúcsokban tér el. A valószínűleg spin-spin korrelációk távolságfüggése hatványfüggvényyszerű lecsengésnek tűnik, egy 3 és 4 közötti hatványkitevővel, hasonlóan az SU(4) esethez (lásd Ref.[7]). 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] 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>
- [3] Wen, Xiao-Gang, „Quantum orders and symmetric spin liquids,” *Phys. Rev. B*, vol. 65, p. 165113, Apr 2002. [Online]. Available: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.65.165113>
- [4] P. Fazekas, *Lecture Notes on Electron Correlation and Magnetism*. WORLD SCIENTIFIC, 1999. [Online]. Available: <https://www.worldscientific.com/doi/abs/10.1142/2945>

- [5] 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>
- [6] M. G. Yamada, M. Oshikawa, and G. Jackeli, „Emergent SU(4) symmetry in α -ZrCl₃ and crystalline spin-orbital liquids,” , vol. 121, no. 9, p. 097201, Aug. 2018. [Online]. Available: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.121.097201>
- [7] 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>
- [8] 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>
- [9] 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>
- [10] Y. Ran, M. Hermele, P. A. Lee, and X.-G. Wen, „Projected-wavefunction 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>
- [11] S. Hoinka, M. Lingham, M. Delehay, 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>
- [12] 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>