

Bírálat Vörös Dániel: „*Quantum Spin Liquids in $SU(N)$ Heisenberg Models: Variational Monte Carlo Study of Dynamical Correlations*” című doktori értekezéséről

Habár a szilárdtestfizika egyenlőre még adós maradt olyan rendszerek azonosításával, amelyek elektronszerkezetét spinfolyadékként tudnánk leírni, elméleti érdekessége és izgalmassága miatt mégis napjaink egyik intenzíven kutatott területévé vált. Vörös Dániel dolgozatában egy és két dimenziós spinfolyadék rendszerek korrelációs függvényeit vizsgálta az átlagtér elméleten túlmutató numerikus módszerekkel.

A dolgozat legelején a szerző röviden ismerteti a tudományos kutatás motivációját, majd négy tézispontba foglalva közli saját eredményeit.

A disszertáció hat fejezetre tagolódik, amelyet egy tizenegy részes függelék követ. Az egyes, sok esetben bonyolult számítások részletei kerültek a függelékbe, megkönnyítve ezzel a dolgozat olvashatóságát. A első fejezetben tárgyalja a spinfolyadékok lehetséges kísérleti megvalósítását optikailag csapdázott ultra hideg atomok esetén. Külön kitér olyan fém halogenidek elektronszerkezetére, amelyeket a Kugel-Khomskii modellel jellemezhetünk az erős spin-pálya csatolás következtében. A következő fejezetben a spin folyadékok tulajdonságait taglalja és ismerteti a felhasznált módszereket. A harmadik fejezetben $SU(6)$ Dirac spinfolyadék állapotot vizsgál kagome rácson, majd a következő fejezetben a dinamikus spin struktúra faktorok kiszámításával foglalkozik. Az ötödik fejezetben ismerteti az $SU(3)$ Heisenberg láncra kapott eredményeit végül az utolsó fejezetben az $SU(4)$, $SU(6)$ spinfolyadékok statikus spin struktúra faktorával foglalkozik.

A dolgozat angol nyelven íródott, angolsága megfelelő, szerkesztése világos. Munkája során alaposan feldolgozza és hivatkozza a releváns tudományos irodalmat. A dolgozat irodalomjegyzékében szereplő 113 hivatkozás is megerősíti a jelölt jártasságát a spinfolyadékok területén. A fejezetek végén röviden összefoglalja a kapcsolódó eredményeket. Érdeemes lett volna itt kiemelni, hogy az egyes fejezetek mely tézispontokhoz kapcsolódnak. A dolgozathoz kapcsolódóan három publikáció született a Physical Review B folyóiratban, amely bőven meghaladja a disszertáció nyilvános védésre bocsájtásainak feltételeit. A tézispontokban megfogalmazottakat elismerem a jelölt saját eredményeiként és sikeres védés esetén javaslom a fokozat odaítélését.

A dolgozat olvasása közben a következő kérdések merültek fel bennem:

1. Amint azt a 38. hivatkozásban is írják, a $ZrCl_3$ egy lehetséges jejlöttje volt az $SU(4)$ spinfolyadék fizikai megvalósulásának. A későbbiekben kiderült,

hogy a rendszer dimerizálódik, így érvényét veszti az elektronszerkezet a spinfolyadékkénti leírása. Mit jelent a dimerizáció ebben az esetben? Hasonló a Peierls instabilitáshoz? Ha a rendszert egy Hubbard modellel írjuk le, akkor lehet a paramétereknek egy tartományát meghatározni, ahol fellép ez az instabilitás?

2. A harmadik fejezet 3.2 ábráján az ötödik oszlopa a Dirac spinfolyadék stabilitását mutatja a másod szomszéd és gyűrű csatolás függvényében különböző csatolási struktúrák esetén. Az ábrán egyre szűkül az a tartomány, ahol stabil a spinfolyadék állapot. Van-e magyarázat erre a tendenciára?
3. A 6.7 ábrán a spin korreláció lecsengése látható logaritmus skálán SU(4) és SU(6) spinfolyadék esetén. Mindkét esetben az exponens három és negy közé esik. Van-e erre valamilyen magyarázat?
4. Az ötödik fejezetben a szerző a Heisenberg láncot a következő Hamilton operátorral definiálja:

$$H = J \sum_{i=1}^{N_s} \sum_{a=1}^8 T_i^a T_{i+1}^a .$$

SU(2) esetén ha a J skalár csatolást tenzoriális csatolásra cseréljük, akkor a megjelenő Dzyaloshinskii–Moriya kölcsönhatás jelentősen befolyásolhatja az alapállapotot. Lényeges változás várható-e, ha kiterjesztjük a modellt a következő alakúra:

$$H = \sum_{i=1}^{N_s} \sum_{a=1}^8 T_i^a J_{ab} T_{i+1}^b ?$$

5. Milyen hatása lehet az ötödik fejezetben szereplő Heisenberg láncra másod szomszéd kölcsönhatások bevezetése?

Budapest, 2025 május 4.

.

.....
Udvardi László