

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

Dániel Vörös - Összefoglaló

Két és három dimenzióban az $SU(2)$ Heisenberg-modell alapállapota többnyire mágnésesen rendezett (ferromágneses vagy antiferromágneses). Ilyen esetekben a gerjesztett állapotok általában bozonikus egész spinű magnonok. Ugyanakkor, ha a kvantumos fluktuációk kellően felerősödnek – akár geometriai frusztráció, akár a lokális Hilbert-tér kibővítése révén –, az alapállapot rendezetlenné válhat, melyet kvantum spinfolyadéknak nevezünk. Ilyen körülmények között a bozonikus egész spinű magnonok két fermionikus feles spinű kvázirészecskére (spinonokra) hasadnak. A bozonikus gerjesztés fermionikus kvázirészecske-párra 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.

Doktori munkám során kiszámoltam az antiferromágneses $SU(N)$ szimmetrikus Heisenberg-modell $S(\mathbf{k}, \omega)$ -ját a fundamentális ábrázolásban, különböző rácson, energiarés nélküli kvantum spinfolyadék alapállapotokat feltételezve. Ehhez egy variációs Monte Carlo (VMC) módszert alkalmaztam, melyet eredetileg az antiferromágneses $SU(2)$ Heisenberg-modell vizsgálatára fejlesztettek ki. A módszerben az alapállapotot egy átlagtér-elméletből származó, Gutzwiller-projiciált Fermi-tengerrel közelítjük, míg a gerjesztett állapotokat a Gutzwiller-projiciált részecske-lyuk gerjesztésekből építjük fel.

A VMC-módszer hitelesítésére először egy egzaktul megoldható, $SU(N)$ -szimmetrikus modellre számoltam ki az $S(\mathbf{k}, \omega)$ -t, az $SU(3)$ Heisenberg-láncre. Megmutattam, hogy a módszer jól reprodukálja az $SU(3)$ Heisenberg-lánc alacsony energiás spektrumát és a spektrális súlyok eloszlását, összehasonlítva az eredményeket 18 rácspont esetén egzakt diagonalizációval, 72 rácspont esetén pedig a Bethe-ansatz két-szolon kontinuumával, DMRG számításokkal és konform térelmélettel [1].

Ezt követően kiszámoltam a $SU(4)$ Heisenberg-modell $S(\mathbf{k}, \omega)$ -ját méhsejt-rácson, ahol az alapállapotot a Gutzwiller-projiciált π -fluxusú Fermi-tengerrel közelítettük, melyet Dirac spinfolyadéknak nevezünk (DSL). Az eredményeket összehasonlítottam kölcsönhatásmentes átlagtér-elméleti számításokkal. A két megközelítés kvalitatívan hasonló eredményeket adott, ami azt sugallja, hogy a Gutzwiller projiciált gerjesztések spektruma egy energiarés nélküli kontinuum. Kvantitatívan a Gutzwiller-projekció a spektrális súlyokat alacsonyabb energiákra tolja el, így kiemeli a kontinuum alsó élet [2].

Az $SU(6)$ Heisenberg-modell alapállapotára a kagome-rácson a Gutzwiller projiciált π -fluxusú Fermi tengert javasoltam, mely szintén egy Dirac spinfolyadék. Ehhez megvizsgáltam a 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 [3].

Az $SU(6)$ szimmetrikus modell Dirac spinfolyadék alapállapotának jellemzésére kiszámoltam a $S(\mathbf{k}, \omega)$ -t, 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 átlagtér-elmélettel vizsgáltam a $S(\mathbf{k}, \omega)$ -t egy jelentős méretű rendszerben, az eredmények energia rés nélküli kontinuumot mutattak [3].

Ezek az eredmények elősegíthetik a Dirac spinfolyadékok kísérleti azonosítását, különösen optikai rácokban csapdázott ultrahideg atomok esetén és erős spin-pálya-csatolású anyagokban.

1. 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).
2. 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) .
3. 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)