

A

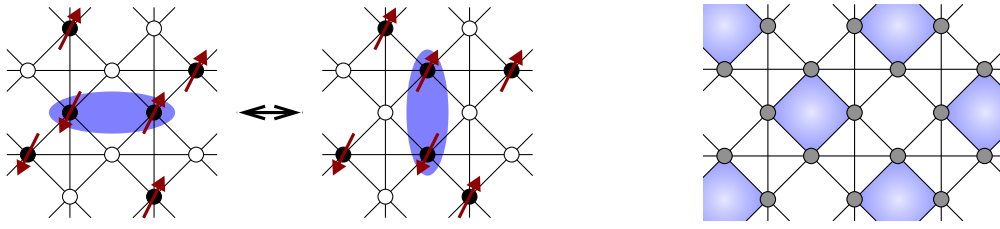
*Töltés, spin és pálya szabadsági fokokkal rendelkező frusztrált
elektronrendszerek egzotikus fázisai és gerjesztései*
című K49607 OTKA projekt zárójelentése

A zárójelentésben a kutatási tervben szereplő fejezeteket követem (A–C), amelyeket kiegészítek újakkal (D–H). Az A fejezet (c) részében, a B fejezet (c) részében, valamint a H fejezetben bemutatott eredmények publikálása még nem történt meg.

A. Frakcionális gerjesztések piroklór rácson

Az $H = \sum_{i,j} S_i^z S_j^z$ Ising-modell alapállapota egy tetraéderen hatszorosan degenerált: a $2^4 = 16$ lehetséges állapot közül 6 állapot energiája azonos (2 spin fel-, 2 pedig lefelé mutat). Mivel a piroklór rács tetraéderekből épül fel, minden olyan állapot, amely a fenti szabályt kielégíti az összes tetraéderen, egyben alapállapot is. A szabály "jégszabály" néven ismert, ugyanis hasonló degeneráció található a jég állapotai esetében is, az Ising-modell és a jég állapotai egy az egyhez feleltethetők meg egymásnak. A 30-as években Pauling megbecsülte a jégszabályt betartó állapotok számát: $Z = (3/2)^N$, azaz exponenciálisan nő a vízmolekulák N számával¹. Ugyancsak jégszabály érvényesül az úgynevezett spin-jég anyagokban² is, mint a $\text{Dy}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$.

Hasonló problémával állunk szemben töltések esetében is: elsőszomszéd taszítással kiterjesztett Hubbard-modell az erősen korrelált határesetben és kommenzurábilis betöltöttség-nél szigetelő. Negyed-betöltöttség-nél tetraéderenként kettő (követve a jégszabályt), nyolcad-betöltöttség-nél tetraéderenként 1 elektron található. Mindkét esetben az alapállapot exponenciálisan degenerált. Fulde szerint a nagy degeneráció esetleg magyarázatot adhat a spinel szerkezetű LiV_2O_4 nehéz fermion viselkedésére³ (itt a töltést hordozó V ionok piroklór rácson helyezkednek el). A modell további érdekessége, hogy az erősen degenerált szigetelő alapállapot miatt frakcionális töltésű gerjesztések jelenhetnek meg benne: például egy hozzáadott elektron



1. ábra. A baloldali ábrán az effektív Hamilton-operátor hatását, jobboldalon pedig a szinglett rezonáló-plakett állapotot illusztráljuk.

két feles töltésű topologikus gerjesztésre bomlik.

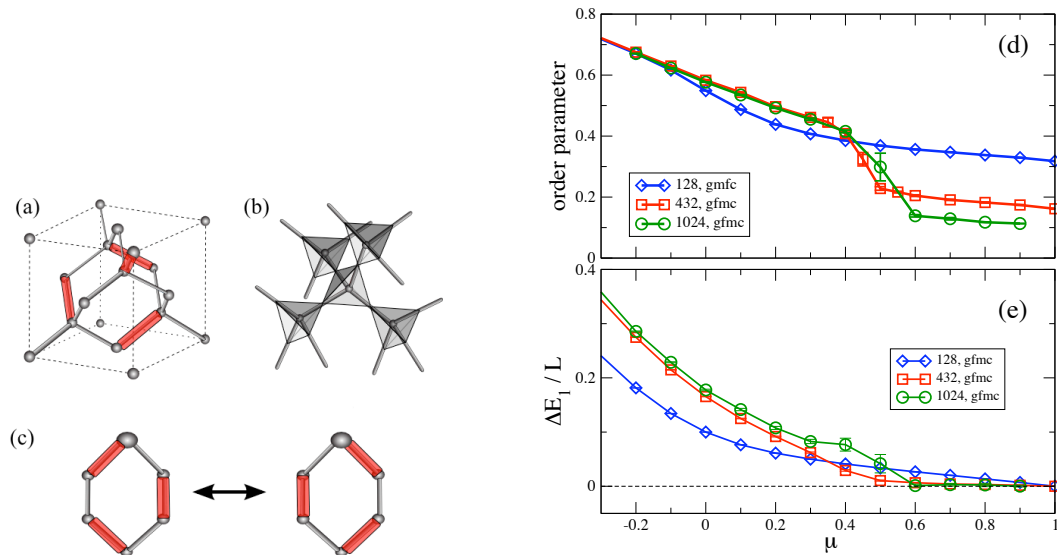
Ebben a problémakörben a következőket vizsgáltuk:

- (a) Meghatároztuk a V elsőszomszéd kölcsönhatással kiterjesztett Hubbard-modell fázisdiagramját "két-dimenziós" piroklór rácson az erős-csatolású határesetben ($U \gg V \gg t$, ahol U az azonos rácshelyen levő elektronok közötti taszítás, t pedig az elektron szomszédos rácshelyek közötti ugrás amplitudója). Negyed-betöltöttségnél tetraéderenként két elektront találunk, amelyben a különböző töltés és spin állapotokat az

$$\mathcal{H}_{\square} = -\frac{2t^2}{V} \sum_{\square} \left(f_{i\uparrow}^{\dagger} f_{j\downarrow}^{\dagger} - f_{i\downarrow}^{\dagger} f_{j\uparrow}^{\dagger} \right) \left(f_{k\downarrow} f_{l\uparrow} - f_{k\uparrow} f_{l\downarrow} \right) + h.c. \quad (1)$$

effektív Hamilton-operátor hasítja fel, amely az "üres" négyzetek átellenes pontjain szinglet párba kötött elektronokat $\pi/2$ szöggel elfordítja a valós térben (1. ábra). Hatására az eltolási invarianciát sértő, a (π, π) hullámszámmal modulált rezonáló plakett állapot alakul ki. Az alapállapot rendezett volta megghiúsítja a frakcionális gerjesztéseket, mivel a feles töltések szétválasztása közben vonalhiba jön létre a plakett háttérén. A vonalhiba energiája a hosszával lineárisan nő, ezért a frakcionális töltések kötött állapotban maradnak. Dópolás hatására szupravezető állapot alakul ki, ami természetes következménye a rezonáló szinglett párok energianyereségének. Eredményeinket perturbációs számítással és egzakt diagonalizációval kaptuk. [D. Poilblanc, K. Penc, N. Shannon: *Doped singlet-pair crystal in the Hubbard model on the checkerboard lattice* Phys. Rev. B **75**, 220503(R) (2007)]

- (b) Ezt követően tekintettük a háromdimenziós piroklór rácson ugráló spinnélküli fermionokat erős elsőszomszéd taszítással, negyed betöltésnél. Ebben az esetben tetraéderenként egy fermionot találunk, az állapotok leképezhetőek a gyémántrács dimer lefedéseire (a piroklór rác tetraédereinek közepe gyémántrácsot alkot, a piroklór rác rácspontjai pedig a gyémántrács éleit, 2b. ábra). Az effektív alacsonyenergiás Hamilton-operátor



2. ábra. (a) A hosszútávú 8-álrács dimer-rend a gyémánt rácson. (b) A gyémánt- és piroklór-rács kapcsolata. (c) Rezonáló dimerek. (d) A 8-álrács rendparaméter függése. $\mu \approx 0.6$ körül a rend eltűnik, ahogy növeljük a rendszer méretét. (e) A rend eltűnésével az energiáris is eltűnik.

legelőször a perturbációs számítás harmadrendjében köti össze a dimer állapotokat ciklikus kicserélődés formájában (2c. ábra). A kicserélődést kiterjesztve diagonális taggal Rokhsar–Kivelson-féle kvantum-dimer modellt kapunk⁴ (a diagonális tag a rezonálható hatszögek számát méri, nagysága μ , a ciklikus tag amplitúdója pedig egységnyi).

A háromdimenziós kvantum-dimer modell térelméleti tárgyalása arra engedett következtetni⁵, hogy a modell képes egy energiáris-nélküli folyadék fázist stabilizálni, amelyben semmilyen szimmetria sincs megtörve. Ezért az említett modellt különböző, analitikus és numerikus módszerekkel vizsgáltuk. A $\mu \rightarrow -\infty$ esetében a dimerek hosszútávúan rendeződnek (2a. ábra), véges energiájú gerjesztésekkel. Perturbációs számítással meghatároztuk az energiáris viselkedését $1/\mu$ függvényében a $\mu \rightarrow -\infty$ körül, azonban a sor $-0.5 \lesssim \mu$ esetében divergált. Így numerikus módszerhez folyamodtunk: Green-függvényes Kvantum Monte-Carlo kódot fejlesztettünk ki, amellyel a rendparamétert és a gerjesztési spektrumot vizsgáltuk véges méretű rácson (128, 432 és 1024 rácshelyen, 2e–2f. ábra). Eredményeink szerint a folyadék állapot a $0.6 \lesssim \mu \lesssim 1$ tartományban valósul meg.

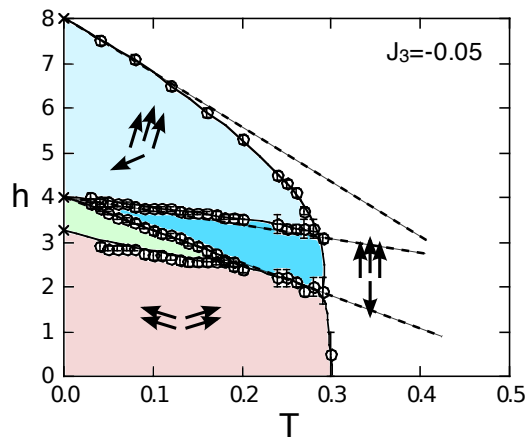
A Green-függvény Monte-Carlo kifejlesztése, tesztelése és a program futása sok időbe telt, így a 2. ábrán bemutatott eredményeket csak idén nyáron kaptuk meg. [O. Sikora, F. Pollmann, N. Shannon, K. Penc, P. Fulde, előkészületben]

B. O(3) klasszikus Heisenberg–modell piroklór rácson

Az előbbieken Ising–jellegű szabadsági fokok viselkedését tárgyaltuk piroklór rácson. Ugyanannyira érdekes az izotróp antiferromágneses Heisenberg–modell klasszikus vagy kvantum változatának vizsgálata. Klasszikus esetben az alapállapot folytonosan elfajult, amit tettszőlegesen kicsi perturbációk felhasíthatnak vagy csökkenthetnek. Ilyen például a másodsomszéd kicserélődés, a rácstorzulásokkal való csatolás, vagy a Dzjaloshinskij–Moriya kölcsönhatás.

A CdCr_2O_4 -ban és HgCr_2O_4 -ban észlelt feles mágnesezettségi plató⁶ kialakulásában a rácstorzulásnak kiemelt szerepe van. A jelenség lényege már klasszikus spinek szintjén is megérthető: a mágneses Cr atomok piroklór rácson helyezkednek el, és a rácstorzulásokkal való kölcsönhatás csökkenti a frusztrációt és az alapállapot elfajultságát (hasonlóan a Jahn–Teller effektushoz). A rácstorzulásokkal való kölcsönhatás egy effektív bikvadratikus taggal modellezhető. Korábbi ezirányú $T=0$ vizsgálatainkat terjesztettük ki véges hőmérsékletű Monte–Carlo számításokkal és alacsonyhőmérsékleti sorfejtéssel. A következőket találtuk:

- (a) A legegyszerűbb négyalrác (3 fel — 1 le spin) plató állapotnak vizsgáltuk az instabilitását Landau–féle közelítésben: az instabilitásokat szimmetria–osztályoztuk, majd felírtuk a fenomenologikus energiafunkcionált. A kölcsönhatási paraméterek függvényében diszkutáltuk, hogy a plató két szélén milyen instabilitások jelentkezhetnek. [K. Penc, N. Shannon, Y. Motome, H. Shiba: *Symmetry considerations on the magnetization process of the Heisenberg model on the pyrochlore lattice*, J. Phys.: Condens. Matter **19**, 145267 (2007).]
- (b) Klasszikus Monte–Carlo szimulációval feltérképeztük a bilineáris–bikvadratikus klasszikus Heisenberg–modell fázisdiagramját véges hőmérsékleten, valamint a mágnesezettség és szuszceptibilitás hőmérsékletfüggését. Az eredményeket összehasonlítottuk a CdCr_2O_4 és HgCr_2O_4 spineleken mért viselkedéssel. [Y. Motome, K. Penc, N. Shannon: *Monte Carlo study of half–magnetization plateau and magnetic phase diagram in pyrochlore antiferromagnetic Heisenberg model* J. Magn. Magn. Mater. **300**, 57 (2006).]
- (c) Véges másod– és harmad–szomszéd kicserélődést feltételezve, vizsgáltuk a hőmérsékleti fluktuációk hatását. A mágnesezettségi plató kialakulásában a kvantum– ill. hőmérsékleti–fluktuációk jelentős szerepet játszanak: a fluktuációk energia (ill. szabadenergia) nyeresége kollineáris spinelrendeződésben a legnagyobb (”order by disorder”). Míg háromszög és fcc rácson ez működik, piroklór rácson a makroszkopikus elfajultság



3. ábra. Gyenge ferromágneses harmadszomszéd kölcsönhatás ($J_3 = -0.05$) piroklór rácson kiválasztja a 4–alrác hosszútávú rendet, és lehetővé teszi a hőmérsékleti fluktuációk által stabilizált plató létrejöttét. A fázisdiagramon a körök Monte–Carlo szimuláció eredménye, T a hőmérséklet, h a mágneses tér. Az alacsonyhőmérsékleti sorfejtés által megadott fázishatárokat $T \rightarrow 0$ esetben szaggatott vonalak jelzik. Továbbá bejelöltük a spinek állását a négy alrácson a különböző fázisokban.

meghiúsítja a kollineáris rend kialakulását, amennyiben csupán elsőszomszéd kicserélődés van. Az azon túlmutató kölcsönhatások az elfajultság egy részét megszüntetik és lehetővé teszik a rendeződést az "order by disorder" mechanizmus segítségével. A jelenséget Monte–Carlo szimulációkban észleltük, és alacsonyhőmérsékleti sorfejtéssel kiváló egyezést kaptunk (3 ábra). [N. Shannon, K. Penc, Y. Motome, előkészületben]

C. SU(4) Heisenberg–modell

A kutatási terv szerint foglalkoztunk volna az SU(4) szimmetrikus Heisenberg–modelllel. A modell például rácshelyenként két spin ($S = 1/2$) és két pálya ($T = 1/2$ pseudospin) szabadsági fokot leíró spin–pálya modell legnagyobb szimmetriájú esetét írja le. A modellben mind a négy állapot egyenrangúan szerepel. Az SU(2) szimmetrikus feles spinek párosával alkotnak szingletteket, és a spin–folyadék állapot azok rezonanciájaként fogható fel. Az SU(4) modellben négy rácshely alkot szinglett állapotot, és elképzelésünk szerint a szinglett plakettek köbös rácson rezonálnának. Elképzelésünk helyesnek bizonyult, azonban S. Pankov *et al.* [Phys. Rev. B **76**, 104436 (2007)] megelőzött minket.

D. Anizotrópia hatása spin–dimer rendszerekben

A spin–dimer rendszerek, mint például a spin létrák, a spin kétrétegek⁷ ($\text{BaCuSi}_2\text{O}_6$), valamint a $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$, amelyekben a feles–spin párok közötti kölcsönhatást a geometria ki-tünteteti, kedvelt rendszerei az elméleti és a kísérleti kutatóknak. A spin–párok alapállapotban szinglettet alkotnak, a rendszer spin–energiaréssel bír. Mágneses térben a triplett gerjesztések energiája csökken, az energiarés eltűnik. Ez a kvantum–fázisátalakulások egyik legszebb példája, és az átalakulás a Bose–Einstein kondenzáció univerzalitási osztályába tartozik, hiszen egy $O(2)$ szimmetria törik meg.

Ha azonban a spin–dimer kölcsönhatásban egyéb tagok is megjelennek, mint például a Dzjaloshinskij–Moriya kölcsönhatás (ha a spin–dimerek nem inverzió–szimmetrikusak), akkor az anizotrópia miatt az $O(2)$ szimmetria eleve hiányzik. Megmutattuk, hogy a Dzjaloshinskij–Moriya kölcsönhatás nemcsak triviálisan beállíthatja az $O(2)$ szöveget, hanem bizonyos esetekben dimerenként egy Ising jellegű szabadsági fok marad meg, és a Bose–Einstein kondenzátum helyett egy Z_2 Ising–fázis alakul ki. [K. Penc, J.-B. Fouet, S. Miyahara, F. Mila, O. Tchernyshyov, Phys. Rev. Lett. **99**, 117201 (2007)]

E. Hubbard–modell

Egydimenziós Hubbard–modell dinamikus spektrálfüggvényeit vizsgáltuk a Fermi pontoktól távol: a Bethe–Ansatz egyenletek megfelelő átfogalmazásával kiszámolhatók a gerjesztések fázistolásai, a fázistolásokból pedig a dinamikus válaszfüggvények hatványfüggése határozható meg a spin– és töltés–gerjesztések kontinuumának alsó szélénél. Az elméletet a TTF–TCNQ kváziagydimenziós anyag fotoemissziós spektrumának megértéséhez használtuk. [D. Bozi, J. M. P. Carmelo, K. Penc, P. D. Sacramento: *The TTF finite–energy spectral features in photoemission of TTF–TCNQ: the Hubbard–chain description*, J. Phys.: Condens. Matter **20**, 022205 (2008); J. M. P. Carmelo, K. Penc, P. D. Sacramento, M. Sing, R. Claessen: *The Hubbard model description of the TCNQ related singular features in photoemission of TTF–TCNQ*, J. Phys.: Condens. Matter **18**, 5191 (2006).]

F. URu_2Si_2

Az URu_2Si_2 két vitatott természetű (ún. rejtett rend) átalakulásának értelmezését adtuk szimmetria analízis segítségével. Javaslatunk szerint a 17K–en bekövetkező oktapól–

rendeződést 13K-en kvadrupólrendeződés követi. Részletes leírást adtunk a magasabbrendű momentumok természetéről. [P. Fazekas, A. Kiss, K. Radnóczy: *Sequence of multipolar transitions: Scenarios for URu₂Si₂*, Progr. Theor. Phys. Suppl. **160**, 114 (2005)]

G. Kvadrupol rendeződés $S = 1$ spin háromszögrácson

Az $S=1$ spin háromdimenziós Hilbert tere már megengedi olyan állapot kikeverését, amelyben a spin semmilyen határozott irányban nem mutat (a spinoperátorok várható értéke 0). A legegyszerűbb ilyen állapot az $S = 1$ spin $S^z = 0$ vetülete, amelyben a spinek a z tengelyre merőlegesen fluktuálnak, és ennek következményeképp véges kvadrupolmomentummal rendelkeznek. Az $S^z = 0$ sérti az $O(3)$ forgatási szimmetriát, ugyanis térben elforgatva a fluktuációk síkja is elfordul. Rácsra helyezve a spineket, a rács geometriájától és a kicserélődéstől függően a kvadrupolmomentumok rendeződhetnek. Variációs közelítéssel és egzakt diagonalizációval vizsgáltuk a háromszögrács esetét, amelyben a spinek a bilineáris mellett bikvadratikus kicserélődéssel hatnak kölcsön egymással. Feltérképeztük a fázisdiagramot, amelyben a szokásos ferromágneses és antiferromágneses fázisokat ferro– ill. antiferro–kvadrupoláris fázis választotta el egymástól. Véges mágneses térben mágneszettségi platókat találtunk. A rendezett fázisokban kiszámoltuk a gerjesztések diszperzióját, valamint a (neutronszorással mérhető) dinamikus spin–spin korrelációs függvényt. Munkánk aktualitását a NiGa₂S₄ egzotikus viselkedése adta⁸. [A. Läuchli, F. Mila, K. Penc: *Quadrupolar Phases of the $S=1$ Bilinear–Biquadratic Heisenberg Model on the Triangular Lattice*, Phys. Rev. Lett. **97**, 087205 (2006).]

H. Tb₂Ti₂O₇

A Tb₂Ti₂O₇ a spin–jég anyagok családjába tartozik⁹. A mágneses Tb ritkaföldfém ionok piroklór rácsot alkotnak. Mivel mágnességük a $4f$ elektronhéjon elhelyezkedő elektronoktól ered, a mágneses momentum erősen anizotróp, lényegében Ising spin szabadsági fokokkal. A Tb₂Ti₂O₇ érdekessége, hogy a kétszeresen elfajult (Γ_3 dublett) legalsó nívó felett egy másik Γ_3 dublett található. Variációs számítással megmutattuk, hogy az elég erős Heisenberg kicserélődés képes a két nívót összekeverni és egy új, $U(1)$ szabadsági fokkal rendelkező fázis jöhet létre. [J.

Romhányi, K. Penc, előkészületben]

- ¹ L. Pauling, *The Nature of the Chemical Bond*, Cornell Univ. Press, Ithaca, p. 464, 3rd ed., (1960).
- ² S. T. Bramwell and M. P. J. Gingras, *Science*, **294**, 1495 (2001).
- ³ P. Fulde, A. N. Yaresko, A. A. Zvyagin and Y. Grin, *Europhys. Lett.* **54**, 779 (2001).
- ⁴ D. S. Rokhsar and S. A. Kivelson, *Phys. Rev. Lett.* **61**, 2376 (1988).
- ⁵ M. Hermele and M. P. A. Fisher and L. Balents, *Phys. Rev. B* **69**, 064404 (2004).
- ⁶ H. Ueda *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **94**, 047202 (2005)
- ⁷ M. Jaime *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 087203 (2004)
- ⁸ S. Nakatsuji *et al.*, *Science* **309**, 1697 (2005)
- ⁹ J. P. C. Ruff *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **99**, 237202 (2008)