



ALAPÁLLAPOTI SOKASÁGOK FRUSZTRÁLT MÁGNESEKBEN

Kránitz Péter

Fizika BSc

Természettudományi Kar

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem

Témavezető:

Penc Karlo

Szilárdtestfizikai és Optikai Intézet

Wigner Fizikai Kutatóközpont

2021 Október

Fordítva: 2022 Október

Kivonat

A piroklórok (kémiai képletük AB_2O_7 , ahol A és B fémionok) és spinellek (AB_2O_4) mágneses ionjai sarokosztásos tetraéderekből felépülő piroklór rácsot alkotnak. A piroklór rács rendkívül frusztrált, ahol a klasszikus Heisenbergmodel $T = 0$ hőmérsékletig rendezetlen marad. Az $S = 1/2$ spinek viselkedéséről azonban sokkal kevesebbet tudunk. Egy nemrégiben végzett numerikus számítás bizonyítékot szolgáltatott az inverziós szimmetriasértésre a kvantum $SU(2)$ szimmetrikus Heisenberg-model alapállapotában [1].

Ezek az eredmények felbuzdulva konstruáltam egy olyan Hamilton operátort, amelynek egzakt alapállapotai sértik az inverziós szimmetriát: minden második tetraéderen a spinek szingletteket alkotnak, a hullámfüggvény ilyen szinglettek szorzata. Mivel minden tetraéderen két lineárisan független $SU(2)$ szinglett lehet, az alapállapotok egy erősen degenerált sokaságot alkotnak, amely dimenziója $2 \times 2^{N_{\text{tet}}/2}$, ahol N_{tet} a tetraéderek száma.

A Hamilton operátor előállításához egy 7-rácshelyű, két sarokosztású tetraéderből felépített alakzattól indulok ki. Továbbá megkövetelem, hogy az egyik tetraéderben szinglettet alkotó spinek hullámfüggvényei az alakzat Hamilton operátorának két- és négy-spin cserékből álló sajátállapotai legyenek. A teljes Hamilton operátor így a rácsot lefedő alakzatok Hamilton operátorainak összege. Ezt a konstrukciót a sakktábla rácsra alkalmazom, amely a piroklór rács kétdimenziós analógja. A 16 és 20 rácspontú periodikus klaszterek numerikus egzakt diagonalizálása után visszakaptam az alapállapot sokaságának várt degenerációját, továbbá pontos alsó korlátot is adok a sakktáblás klaszter energiájára.

Tartalomjegyzék

Kivonat	ii
1. Bevezetés	1
1.1. Frusztrált mágnesek	1
1.2. $S = 1/2$ spinek háromszögön és tetraéderen	4
1.2.1. Háromszög	4
1.2.2. Tetraéder	6
1.3. Majumdar-Ghosh Hamiltoni az $S = 1/2$ spin láncra	9
2. A spin-1/2 Heisenberg-modell a piroklor rácson	11
2.1. A projektor megközelítés	12
2.2. A Hamiltoni	16
2.3. 16- és 20-rács pontos klaszterek	20
2.4. Fizikailag motivált Hamiltonik	23
3. Összefoglalás és kitekintés	28
Köszönetnyilvánítás	30
Függelék	31

1. fejezet

Bevezetés

1.1. Frusztrált mágnesek

Egy mágneses rendszerben a mágneses momentumok közötti $\mathbf{M}_i$ kölcsönhatást a Heisenberg-modell adja meg. Mivel a $\mathbf{M}_i$ mágneses momentumok arányosak a lokalizált elektronok $\mathbf{S}_i$ spinjével, a Heisenberg-Hamiltoni a következőképpen írható fel

$$H = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} J_{i,j} \mathbf{S}_i \mathbf{S}_j, \quad (1.1)$$

ahol $\mathbf{S}_i$ a spinoperátor a rács i helyén, és $J_{i,j} = J_{j,i}$ a $\mathbf{S}_i$ és $\mathbf{S}_j$ közötti kicserélődési kölcsönhatás. A szigetelő mágneses rendszerekben, amikor a kölcsönhatás eredete a szupercsere, a $J_{i,j} > 0$ és a csatolás antiferromágneses [2]. A $\mathbf{S}_i$ egyetlen lokalizált elektron esetén $S = 1/2$. A Hund-szabály miatt több elektron nagyobb spineket is képezhet, mint például a Cr^{3+} ionok $S = 3/2$ a CdCr_2O_4 spinellben, vagy a Fe^{3+} $S = 5/2$ a ZnFe_2O_4 -ben [3]. Nagyobb spinek esetén a kvantumhatások elhanyagolhatók. Az operátorok helyett az 1.1 egyenletben háromkomponensű $\mathbf{S}$ vektorokat használhatunk, amelyek nagysága $S^2 = 1$, ezeket klasszikus spineknek nevezzük.

Klasszikus spinek esetén az antiferromágneses Heisenberg-Hamiltoni egyetlen kötésen $J_{i,j} > 0$ esetén akkor minimalizálódik, ha $\mathbf{S}_i = -\mathbf{S}_j$. Bipartite rácsokon, mint például a négyzet vagy köbös rácson, ahol csak elsőszomszéd kölcsönhatások vannak, a spinek antiferromágnesesen rendeződnek – két alrácson szerkezetet alkotnak antiparallel orientációkkal. Minden kötésen a klasszikus energia optimális, $\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j = -1$. Nem bipartite rácsokban, például háromszög vagy más, háromszögeket tartalmazó rácsokban a spinek nem tudják teljesíteni ezt a feltételt.

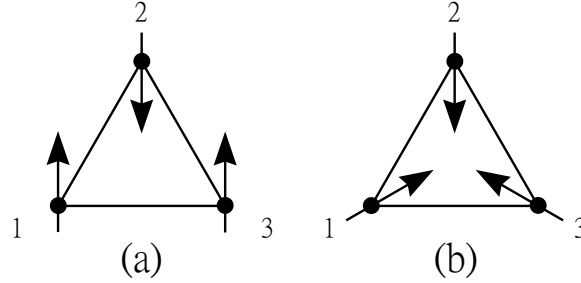
Nézzük meg ezt klasszikus spinekkel és Hamiltonival rendelkező háromszögön keresztül.

$$H = J (\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 + \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_3 + \mathbf{S}_2 \cdot \mathbf{S}_3). \quad (1.2)$$

Ez a Hamiltoni felírható teljes négyzetként:

$$H = \frac{J}{2} \mathbf{S}_{\text{tot}}^2 - \frac{3}{2} J, \quad (1.3)$$

ahol $\mathbf{S}_{\text{tot}} = \sum_{i=1}^3 \mathbf{S}_i$. Ha két spin párhuzamos, és a harmadik spin mindkettővel antiparalel, mint az 1.1(a) ábrán, akkor a teljes energia egyenlő $-J$ -vel. Ehelyett az összes energia minimális, ha $\mathbf{S}_{\text{tot}} = 0$, tehát a spinek 120° -t zárnak be és egy síkban fekszenek, mint a 1.1(b) ábrán. Ebben az esetben a teljes energia $-\frac{3}{2}J$. Ez egy *frusztrált* rendszer, mivel egyik kötés sem éri el az optimális energiát, $-J$ -t. Megjegyezzük, hogy ez az állapot egyedi, elhanyagolva a globális $O(3)$ forgások miatti triviális degenerációt.



1.1. ábra. Klasszikus spinkonfigurációk a háromszögben. A nyilak a klasszikus spineket jelölik. Az (a) ábrán az 1,2 és 2,3 kötések energiái optimálisak ($-J$), de nagyon rossz az 1,3 kötésen ($+J$), a konfiguráció összes energiája $-J$. (b) Egyik kötés energiája sem optimális ($-J/2$), de ez a minimális energiájú konfiguráció $-3J/2$.

A tetraéder esetében a Hamiltoni a következő formában írható fel

$$H = J \sum_{1 \leq i < j}^4 \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j. \quad (1.4)$$

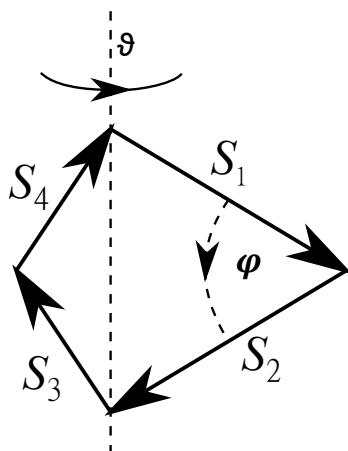
A háromszöghöz hasonlóan a Hamiltoni is kifejezhető

$$H = \frac{J}{2} \mathbf{S}_{\text{tot}}^2 + c, \quad (1.5)$$

ahol $c = -2J$ és

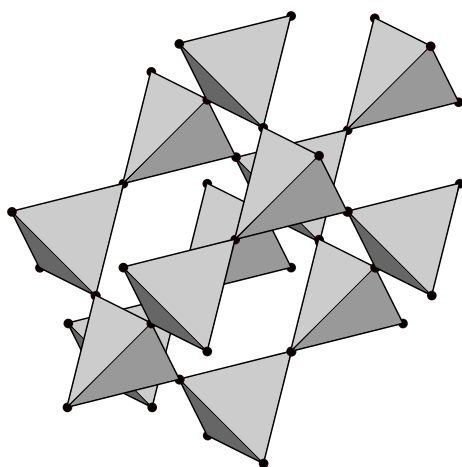
$$\mathbf{S}_{\text{tot}} = \mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2 + \mathbf{S}_3 + \mathbf{S}_4. \quad (1.6)$$

Az 1.6 egyenletet a továbbiakban tetraéder-szabályként fogjuk emlegetni. A teljes energia minimalizálódik, ha $\mathbf{S}_{\text{tot}} = 0$, de az egyedi állapot helyett (mint a háromszög esetében), most végtelen számú konfigurációnk van, mert most a spineknek két belső szabadsági fokuk van a megfelelő konfiguráció megtalálására, ahogy az 1.2 ábrán látható [4].



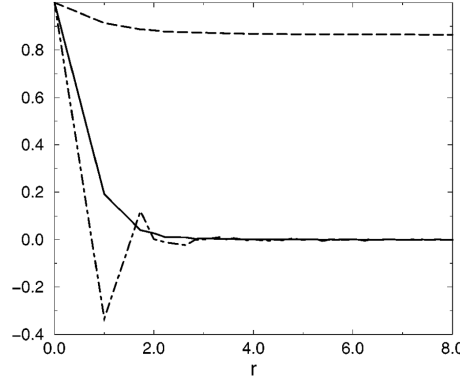
1.2. ábra. A két szabadsági fok ϑ és φ a klasszikus spinekre egy tetraéderen, amely kielégíti a $S_1 + S_2 + S_3 + S_4 = 0$ feltételt.

A tetraéderek a piroklor rács építőkövei, amely sarokosztású tetraéderekből épül fel. A piroklorrácsot a mágneses ionok (B) valósítják meg az $A_2B_2O_7$ kémiai képletű piroklorokban, ahol A és B fémionok, valamint az AB_2O_4 spinellekben. A piroklor rácsban a klasszikus spinek a tetraéder alapállapotának nagyfokú degeneráltságát öröklék: egy kiterjedten degenerált alapállapotú sokaság a rács minden egyes tetraéderére kielégíti a $S_{\text{tot}} = 0$ feltételt.



1.3. ábra. Sarokosztásos tetraéderekből felépülő piroklor rács.

Az n -komponensű klasszikus spinnel rendelkező piroklor rács alapállapotának explicit konstrukciója azt mutatja, hogy a Heisenberg-spinek korrelációs függvénye, amely a spinrendszer kollinearitását adja meg, két legközelebbi szomszédos távolságban még nagyon alacsony hőmérsékleten is nullát ad, ami megerősíti a piroklor rács hatalmas degeneráltságát [5].



1.4. ábra. A Heisenberg- és XY -antiferromágnesek korrelációs függvényei $5 \times 10^{-4} J$ hőmérsékleten. A spin-spin korrelációs függvény 2048 Heisenberg-spinből álló rendszerre pont-szagatott vonallal van ábrázolva. Ez az ábra [5] cikkből lett másolva.

Miután láttuk a klasszikus spinek frusztrációjának következményeit a piroklor rácson, feltehetjük a kérdést, hogy a kiterjedt alapállapot degeneráltság hogyan tükröződik a kvantumspinek viselkedésében. $S = 1$ esetén a $\text{NaCaNi}_2\text{F}_7$ -on végzett neutronszerű kísérletek alacsony hőmérsékleten spinfolyadékszerű állapotra utalnak [6]. $S = 1/2$ esetén ez még nyitott kérdés. Mielőtt tovább tárgyalnánk, hasonlítsuk össze a $S = 1/2$ spinek alapállapotát a háromszögön és a tetraéderen.

1.2. $S = 1/2$ spinek háromszögön és tetraéderen

1.2.1. Háromszög

Láttuk, hogy a klasszikus spinekkel rendelkező háromszög alapállapota az az állapot, amikor a spinek 120° -t zárnak be. Kvantumspinekkel ez teljesen másképp van. A három $S = 1/2$ spin, amelyek a háromszög sarkaiban vannak, egy nyolcdimenziós Hilbert-teret feszítenek ki, mely két 2 dimenziós $S = 1/2$ (dublett) altérre és egy 4 dimenziós $S = 3/2$ (quadruplett) altérre bontható:

$$\frac{1}{2} \otimes \frac{1}{2} \otimes \frac{1}{2} = \frac{1}{2} \oplus \frac{1}{2} \oplus \frac{3}{2}. \quad (1.7)$$

Az alapállapotot antiferromágneses esetre kapjuk, amikor $S_{\text{tot}} = 1/2$ az 1.3 egyenletben. Ez akkor teljesül, ha két spin szinglett kötést létesít, míg a harmadik szabad marad, mint az 1.5 ábrán. Az i és j helyeken lévő spinek közötti szinglettkötést szokás a következőképp jelölni:

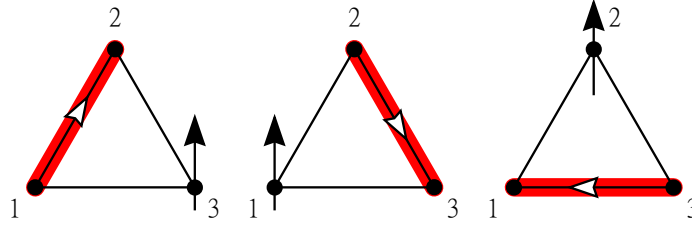
$$[i, j] := \frac{1}{\sqrt{2}} |\uparrow\downarrow - \downarrow\uparrow\rangle. \quad (1.8)$$

A mínusz jel miatt a szinglett kötések orientáltak, így $[i, j] = -[j, i]$. Ezt a jelölést használva az 1.5 ábrán látható állapotokat, balról jobbra haladva, a következőképpen

írhatjuk fel: $|[1, 2], \uparrow\rangle$, $|[2, 3], \uparrow\rangle$, és $|[3, 1], \uparrow\rangle$. Ezek közül csak kettő lineárisan független, mivel a három állapot összege zérus:

$$|[1, 2], \uparrow\rangle + |[2, 3], \uparrow\rangle + |[3, 1], \uparrow\rangle = |\uparrow\uparrow - \downarrow\uparrow\rangle + |\uparrow\uparrow - \uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow - \uparrow\downarrow\rangle = 0. \quad (1.9)$$

Mivel a szabad spin felfelé vagy lefelé mutathat, az alapállapot teljes degenerációja négy.



1.5. ábra. A $|[1, 2], \uparrow\rangle$, $|[2, 3], \uparrow\rangle$ és $|[3, 1], \uparrow\rangle$ szinglettkötés-konfigurációk (balról jobbra) a háromszögön $S_{\text{tot}} = 1/2$ esetén.

A Heisenberg kicserélődés átírható permutáció operátorral:

$$P_{i,j} = 2\mathbf{S}_i\mathbf{S}_j + \frac{1}{2}, \quad (1.10)$$

ahol $P_{i,j}$ a i és j helyeken lévő spineket szó szerint felcseréli. Például, ha csak két pontot veszünk figyelembe, akkor $P_{1,2}|\uparrow\uparrow\rangle = |\uparrow\uparrow\rangle$ és $P_{1,2}|\uparrow\downarrow\rangle = |\downarrow\uparrow\rangle$. Továbbá, ha egy $[i, j]$ szinglett kötésre hat, akkor $P_{i,j}[i, j] = [j, i] = -[i, j]$ kapunk.

A permutációs operátorokkal a háromszög Hamiltonia (1.2) a következőképpen írható fel:

$$H = J \sum_{1 \leq i < j}^3 \left(\frac{1}{2} P_{i,j} - \frac{1}{4} \right) = -\frac{3}{4}J + \frac{J}{2}(P_{1,2} + P_{1,3} + P_{2,3}) \quad (1.11)$$

Az 1.5 ábra első konfigurációjára ható három permutációs operátor:

$$\begin{aligned} (P_{1,2} + P_{1,3} + P_{2,3})|[1, 2], \uparrow\rangle &= |[2, 1], \uparrow\rangle + |[3, 2], \uparrow\rangle + |[1, 3], \uparrow\rangle \\ &= -(|[1, 2], \uparrow\rangle + |[2, 3], \uparrow\rangle + |[3, 1], \uparrow\rangle). \end{aligned} \quad (1.12)$$

Amint azt az 1.9 egyenletben láttuk, a fenti egyenlet utolsó sora egyenlő nullával:

$$(P_{1,2} + P_{1,3} + P_{2,3})|[1, 2], \uparrow\rangle = 0. \quad (1.13)$$

Az utolsó egyenletet figyelembe véve tehát az 1.5 ábra első konfigurációja a Heisenberg-Hamiltoni sajátállapota, amelynek sajátértéke $-3J/4$,

$$H|[1, 2], \uparrow\rangle = -\frac{3}{4}J|[1, 2], \uparrow\rangle. \quad (1.14)$$

A $S_{\text{tot}} = 1/2$ altérben fennmaradó konfigurációk szintén sajátállapotok és alapállapotok.

Abban az esetben, ha $S_{\text{tot}} = 3/2$, $S_z = 3/2$ a

$$(P_{1,2} + P_{1,3} + P_{2,3}) |\uparrow\uparrow\uparrow\rangle = 3 |\uparrow\uparrow\uparrow\rangle, \quad (1.15)$$

így a sajátérték $\frac{3}{4}J$, és ugyanez történik $S_z = -3/2$, vagy bármely más S_z állapot esetén a $S_{\text{tot}} = 3/2$ kvartettben. Ezek az eredmények következnek az 1 egyenletből is a $N = 3$ speciális esetben, amely a következőket adja:

$$P_{1,2} + P_{1,3} + P_{2,3} = S_{\Delta}(S_{\Delta} + 1) - \frac{3}{4} = \begin{cases} 0, & S_{\Delta} = 1/2 \\ 3, & S_{\Delta} = 3/2 \end{cases}, \quad (1.16)$$

ahol $S_{\Delta} := S_{\text{tot}}$. Ha a fenti egyenletet elosztjuk 3-mal, akkor a következő eredményt kapjuk

$$\mathcal{P}_{\Delta} = \frac{1}{3}(P_{1,2} + P_{1,3} + P_{2,3}) = \begin{cases} 0, & S_{\Delta} = 1/2 \\ 1, & S_{\Delta} = 3/2 \end{cases}, \quad (1.17)$$

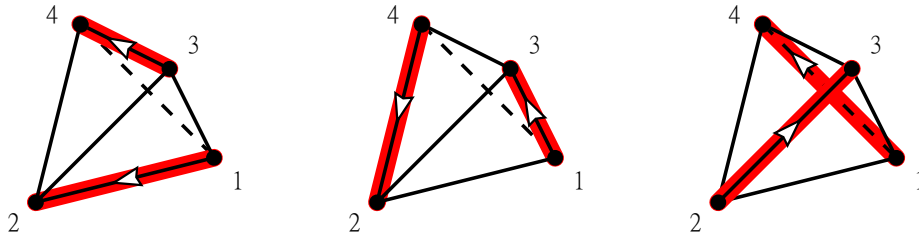
amely egy projektor, a $\mathcal{P}_{\Delta}^2 = \mathcal{P}_{\Delta}$ tulajdonsággal. Ezt a projektort fogjuk használni a Majumdar-Ghosh modell egzakt dimerizált alapállapotának bemutatására.

1.2.2. Tetraéder

Most egy tetraédert tekintünk, amelynek sarkaiban négy $S = 1/2$ kvantumspin van. A négy $S = 1/2$ spin 16 dimenziós Hilbert-tere két 1 dimenziós $S = 0$ (szinglett), három 3 dimenziós $S = 1$ (triplett) és egy 5 dimenziós $S = 2$ (kvintuplett) altérre bomlik:

$$\frac{1}{2} \otimes \frac{1}{2} \otimes \frac{1}{2} \otimes \frac{1}{2} = 0 \oplus 0 \oplus 1 \oplus 1 \oplus 1 \oplus 2. \quad (1.18)$$

A Hamiltoni felírható ugyanabban a formában, mint az 1.5 egyenlet, ahol most $c = -3J/2$. Antiferromágneses kicserélődés esetén ez $S_{\text{tot}} = 0$ esetén minimális, ami akkor teljesül, ha a spinek szinglett állapotokat képeznek. A spineket két szinglettkötésbe kell párosítanunk, és ez három különböző módon valósítható meg, ahogyan az 1.6 ábrán látható. Ezek a következőképpen írható fel: $|[1, 2], [3, 4]\rangle$, $|[1, 3], [4, 2]\rangle$ és $|[1, 4], [2, 3]\rangle$. Ezek közül a konfigurációk közül csak két állapot lineárisan független, az 1.18 egyenlet szerint [7]. Az alábbiakban megmutatjuk, hogy a három konfiguráció összege nulla.



1.6. ábra. Szinglett valencia kötés konfigurációk (vastag piros vonalakkal ábrázolva) $|[1, 2], [3, 4]\rangle$, $|[1, 3], [4, 2]\rangle$ és $|[1, 4], [2, 3]\rangle$ (balról jobbra) a tetraéderen $S_{\text{tot}} = 0$ esetén.

Válasszuk szét ezeket a konfigurációkat az 1.7 ábra szerint. és jelöljük az állapotokat a következő konvencióval: $|\uparrow_i \downarrow_j, [k, l]\rangle$, ahol $i < j$ és $i \neq j \neq k \neq l \neq l \in \{1, 2, 3, 4\}$, az indexek pedig a csúspontokat jelölik. A továbbiakban az indexeket elhagyjuk. Ezekkel az állapotok a következőképpen írhatók fel

$$|[1, 2], [3, 4]\rangle = |\uparrow\downarrow, [3, 4]\rangle - |\downarrow\uparrow, [3, 4]\rangle, \quad (1.19a)$$

$$|[1, 3], [4, 2]\rangle = |\uparrow\downarrow, [4, 2]\rangle - |\downarrow\uparrow, [4, 2]\rangle, \quad (1.19b)$$

$$|[1, 4], [2, 3]\rangle = |\uparrow\downarrow, [2, 3]\rangle - |\downarrow\uparrow, [2, 3]\rangle. \quad (1.19c)$$

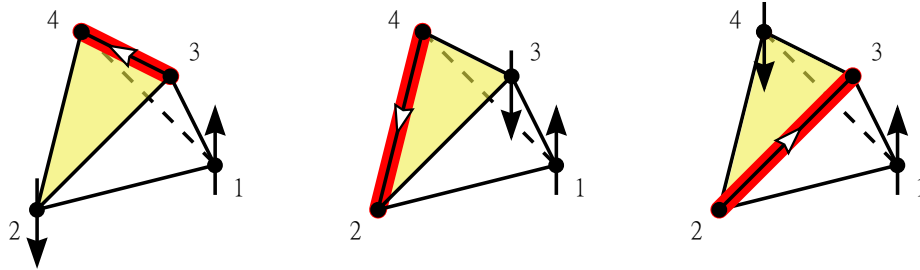
Most tekintsük csak azokat az állapotokat, amikor az 1-es csúcsnak $|\uparrow\rangle$ spinje van: $|\uparrow\downarrow, [3, 4]\rangle$, $|\uparrow\downarrow, [4, 2]\rangle$ és $|\uparrow\downarrow, [2, 3]\rangle$. Ebben az esetben a három állapot összege kiesik, mint az 1.9 egyenletben:

$$|\uparrow\downarrow, [3, 4]\rangle + |\uparrow\downarrow, [4, 2]\rangle + |\uparrow\downarrow, [2, 3]\rangle = |\uparrow\downarrow\uparrow - \uparrow\downarrow\downarrow\rangle + |\uparrow\downarrow\uparrow - \uparrow\uparrow\downarrow\rangle + |\uparrow\downarrow\downarrow - \uparrow\uparrow\downarrow\rangle = 0. \quad (1.20)$$

Ugyanez érvényes arra az esetre is, amikor az 1-es csúcsnak $|\downarrow\rangle$ spinje van. Az 1.19 egyenletből következik, hogy

$$|[1, 2], [3, 4]\rangle + |[1, 3], [4, 2]\rangle + |[1, 4], [2, 3]\rangle = 0, \quad (1.21)$$

így a konfigurációk közül csak kettő lineárisan független és ezt kellett bemutatni.



1.7. ábra. $S_{\text{tot}} = 0$ konfigurációk, ahol a 4 spinből csak 2 képez szinglett kötést (vastag piros vonalakkal ábrázolva) és a maradék két $S = 1/2$ spin (fekete nyilak).

A háromszöghöz hasonlóan a Hamiltoni (1.4) permutációkkal írható át:

$$H = J \sum_{1 \leq i < j}^4 \left(\frac{1}{2} P_{i,j} - \frac{1}{4} \right) = \frac{J}{2} (-3 + P_{1,2} + P_{1,3} + P_{1,4} + P_{2,3} + P_{2,4} + P_{3,4}) \quad (1.22)$$

Ha megvizsgáljuk az összes permutáció összegének hatását, kiderül, hogy kiejti a szingletteket:

$$\begin{aligned} & (P_{1,2} + P_{1,3} + P_{1,4} + P_{2,3} + P_{2,4} + P_{3,4}) |[1, 2], [3, 4]\rangle \\ &= -2 (|[1, 2], [3, 4]\rangle + |[2, 3], [1, 4]\rangle + |[4, 2], [1, 3]\rangle) \\ &= 0, \end{aligned} \quad (1.23)$$

ugyanúgy, mint a háromszög (1.13) esetében. A szinglett állapotok a Hamiltoni sajátállapotai és egyben alapállapotok is, amelyeknek sajátértéke $-3J/2$.

Ha $S_{\text{tet}} = 1$ vagy $S_{\text{tet}} = 2$, ahol $S_{\text{tet}} := S_{\text{tot}}$, akkor az összes permutáció összegének hatását az 1 egyenlet speciális esetéből ($N = 4$) kaphatjuk:

$$P_{1,2} + P_{1,3} + P_{1,4} + P_{2,3} + P_{2,4} + P_{3,4} = S_{\text{tet}}(S_{\text{tet}} + 1) = \begin{cases} 0, & S_{\text{tet}} = 0 \\ 2, & S_{\text{tet}} = 1 \\ 6, & S_{\text{tet}} = 2 \end{cases} \quad (1.24)$$

Az 1.24 egyenletből világosan látszik, hogy csak a $P_{i,j}$ 2-rácsponit kicserélődésekkel nem tudunk projektort konstruálni, más tagokat is alkalmaznunk kell. Vezessük be a következő jelölést:

$$P_{\text{tet}}^{(2)} = P_{1,2} + P_{1,3} + P_{1,4} + P_{2,3} + P_{2,4} + P_{3,4}, \quad (1.25)$$

$$P_{\text{tet}}^{(4)} = P_{1,2}P_{3,4} + P_{1,3}P_{2,4} + P_{1,4}P_{2,3}. \quad (1.26)$$

A $P_{\text{tet}}^{(2)}$ a tetraéder szokásos kicserélődéseinek összege, a $P_{\text{tet}}^{(4)}$ eredete pedig a négy-spin gyűrű kicserélődés. $P_{\text{tet}}^{(4)}$ hasznos a $P_{\text{tet}}^{(2)}$ négyzetének kifejezésére, mivel

$$(P_{\text{tet}}^{(2)})^2 = -6P_0 + 6P_{\text{tet}}^{(2)} + 2P_{\text{tet}}^{(4)}, \quad (1.27)$$

ahol P_0 az indentitás permutáció. Egy teljesen szimmetrikus tetraéder esetében, amelynek szimmetriája T_d , nem jelenik meg további tag. A 4 spin tagot is tartalmazó Hamilton operátor

$$H_{\text{tet}} = a_0P_0 + a_2P_{\text{tet}}^{(2)} + a_4P_{\text{tet}}^{(4)} \quad (1.28)$$

és sajátértékei

$$E(S_{\text{tet}} = 0) = a_0 + 3a_4 \quad (1.29)$$

$$E(S_{\text{tet}} = 1) = a_0 + 2a_2 - a_4 \quad (1.30)$$

$$E(S_{\text{tet}} = 2) = a_0 + 6a_2 + 3a_4. \quad (1.31)$$

Ebből megalkothatjuk a $\mathcal{P}_{\text{tet}}$ projektort, amely kiejti a szingletteket és kivetíti a $S_{\text{tet}} = 1$ és $S_{\text{tet}} = 2$ állapotokat.

$$\mathcal{P}_{\text{tet}} = \frac{1}{2}P_0 + \frac{1}{6}P_{\text{tet}}^{(2)} - \frac{1}{6}P_{\text{tet}}^{(4)}. \quad (1.32)$$

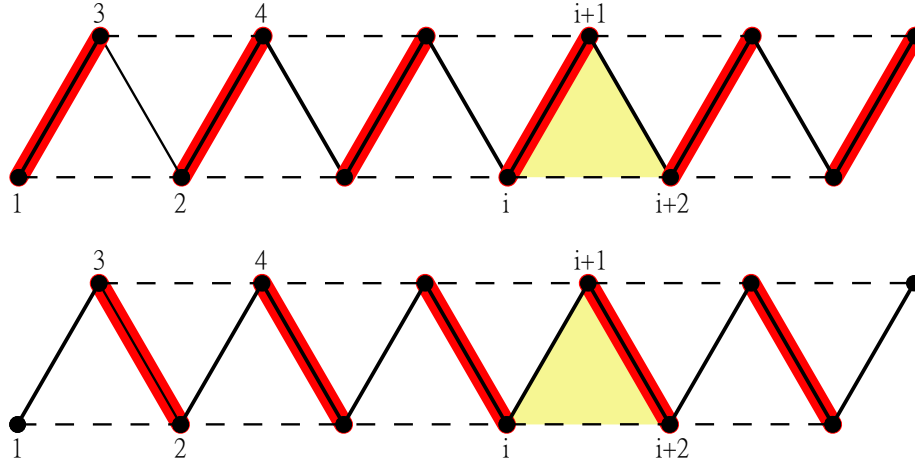
Ez megfelel a $(\mathcal{P}_{\text{tet}})^2 = \mathcal{P}_{\text{tet}}$ projektor tulajdonságnak, így a sajátértékek vagy nullák vagy egyesek.

1.3. Majumdar-Ghosh Hamiltoni az $S = 1/2$ spin láncra

Az egydimenziós $S = 1/2$ Heisenberg-lánc, első szomszéd (J_1) kölcsönhatással, egzaktul megoldható a Bethe Ansatz segítségével, hézagmentes spektrummal [8]. Ha hozzáadjuk a másod szomszéd kölcsönhatást (J_2), $J_2/J_1 \approx 0.24$ körül kvantumfázis-átmenet következik be egy réses, dimerizált fázisba [9]. A Heisenberg-lánc Hamiltoni J_1 és J_2 kölcsönhatással N ponttal a következőképpen néz ki

$$H = \sum_{i=1}^N J_1 \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1} + J_2 \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+2}, \quad (1.33)$$

ahol $\mathbf{S}_{N+1} = \mathbf{S}_1$ és $\mathbf{S}_{N+2} = \mathbf{S}_2$, ha periodikus peremfeltételt feltételezünk.



1.8. ábra. A Majumdar-Ghosh Hamiltoni dimerizált alapállapotai. A szaggatott vonalak a másod szomszédos J_2 cserét jelölik, a folytonos vonalak pedig a J_1 -t. Az alapállapotok, $[1, 2][3, 4] \dots$ és $[N, 1][2, 3][4, 5] \dots$, a szinglett valencia kötések szorzata (vastag piros vonalakkal ábrázolva), és sértik a translációs invarianciát.

Ha hozzáadjuk a J_2 másod szomszéd kicserélődést, akkor a modell már nem megoldható analitikusan a Bethe Ansatz-al. Egy speciális pontban $J_2/J_1 = 1/2$ (Majumdar-Ghosh pont) azonban az alapállapot kifejezhető az 1.8 ábrán látható spin szinglet kötések szorzatával. Az alábbiakban megmutatjuk, hogy ez a modell egy egzakt sajátállapota. A Majumdar-Ghosh pontban a Hamiltoni (1.33) a következő formát ölti

$$H_{\text{MG}} = J \sum_{i=1}^N \left(\mathbf{S}_i \mathbf{S}_{i+1} + \frac{1}{2} \mathbf{S}_i \mathbf{S}_{i+2} \right), \quad (1.34)$$

ahol $J := J_1$.

Ez átírható teljes négyzetek összegeként:

$$H_{\text{MG}} = -\frac{3}{4}JN + \frac{1}{4}J \sum_{i=1}^N (\mathbf{S}_i + \mathbf{S}_{i+1} + \mathbf{S}_{i+2})^2 . \quad (1.35)$$

A teljes spin a $(i, i+1, i+2)$ pontokban $\mathbf{S}_i^{\text{tot}} = \mathbf{S}_i + \mathbf{S}_{i+1} + \mathbf{S}_{i+2}$ (a sárga háromszög az 1.8 ábrán). Négyzetének sajátértékei $S_i^{\text{tot}}(S_i^{\text{tot}} + 1)$, ahol $S_i^{\text{tot}} = 1/2, 3/2$. Ebből könnyen konstruálhatunk egy projektort:

$$\mathcal{P}_i^{\text{MG}} = \frac{1}{3}(\mathbf{S}_i^{\text{tot}})^2 - \frac{1}{4} , \quad (1.36)$$

ami 0-t ad $S_i^{\text{tot}} = 1/2$ és 1-et $S_i^{\text{tot}} = 3/2$ esetén. A 1.2.1 bekezdésben már találkoztunk ezzel a problémával egyetlen háromszögre, ahol a háromszög Hamiltoniát (1.2) egy projektorral fejeztük ki. Az 1.17 egyenletet követve a három egymás utáni helyen ható projektor operátort a következőképpen definiálhatjuk

$$\mathcal{P}_i^{\text{MG}} = \frac{1}{3}(P_{i,i+1} + P_{i,i+2} + P_{i+1,i+2}) = \begin{cases} 0, & \text{for } S_i^{\text{tot}} = 1/2 \\ 1, & \text{for } S_i^{\text{tot}} = 3/2 \end{cases} . \quad (1.37)$$

Ezzel a Hamiltoni a következőre írható át:

$$H_{\text{MG}} = -\frac{3}{8}JN + \frac{3}{4}J \sum_{i=1}^N \mathcal{P}_i^{\text{MG}} . \quad (1.38)$$

Mivel a Hamiltoni pozitív együttthatójú projektorok összege, ha $J > 0$, egyértelmű, hogy a Hamiltoni minimális, ha az összes projektor $\mathcal{P}_i^{\text{MG}}$ nulla sajátértéket ad. Ez az 1.13 egyenletből is látható, hiszen az 1.8 ábrán ábrázolt $[1, 2][3, 4] \dots$ és $[N, 1][2, 3][4, 5] \dots$ hullámfüggvények minden három egymást követő $i, i+1$ és $i+2$ pontból álló háromszögben egy-egy szinglett kötést tartalmaznak. Ezzel megmutattuk, hogy az alapállapot kétszeresen degenerált és sérti a translációs szimmetriát.

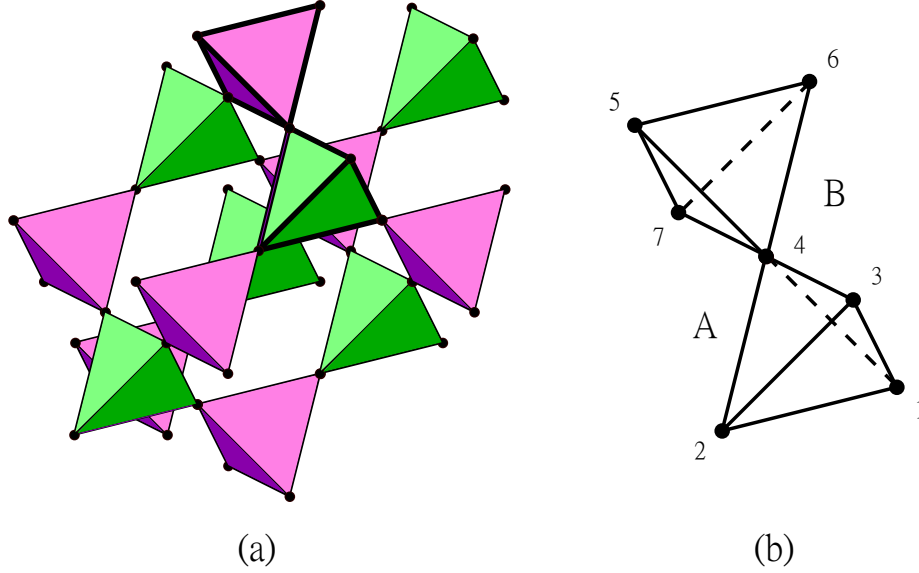
2. fejezet

A spin-1/2 Heisenberg-modell a piroklor rácson

A bevezetőben röviden kitértünk a klasszikus spinekre a piroklor rácson. A klasszikus spinek viselkedése jól ismert – a spinek rendezetlenek maradnak, de engedelmeskednek a tetraéder-szabálynak (1.6). Ezzel szemben a $S = 1/2$ spinek viselkedése nem ismert. Hiányoznak az egzakt analitikus eredmények, és a háromdimenziós modellnek a numerikus kezelése is nehézkes. A legújabb eredmények közé tartozik a sűrűségi mátrix renormalizációs csoport módszerének alkalmazása 128 rácspontig terjedő rendszerre, ahol egy inverziós szimmetriát sértő alapállapotot találtak [1]. Másrészt a pszeudofermion funkcionális renormalizációs csoport módszerrel egy kiterjesztett kvantum-spin-folyadék fázist találtak, amely robusztus a légzési anizotrópia bevezetésével szemben [10]. Ezek csak numerikus módszerek, és az ellentmondás mutatja a probléma nehézségét.

Célunk egy olyan $S = 1/2$ Hamiltoni megkonstruálása, amelyben a tetramerizált állapotok egzakt alapállapotok, ahogyan a Majumdar-Ghosh Hamiltoniban a dimerizált állapotok egzakt alapállapotok. Ezt a problémát először egy projektor megkonstruálásával közelítjük meg.

2.1. A projektor megközelítés



2.1. ábra. A piroklor rác az (a) ábrán, és a motívum a (b) ábrán, ahol A a zöld és B a magenta színt jelöli.

Modellünkötől megköveteljük az inverziós szimmetria spontán sértését, ami akkor valósul meg, amikor a 2.1(a) ábrán látható piroklor rác zöld (A) vagy magenta színű tetraéderei (B) spin-szinglett állapotot képeznek. Jelölve $|0_A\rangle$ -val egy A-típusú tetraéderen lévő spin-szinglett konfigurációt, a hullámfüggvény a szinglettek szorzata az összes A-tetraéderen,

$$|\psi_A\rangle = \prod_{A \text{ tetrahedra}} |0_A\rangle. \quad (2.1)$$

Ez például az úgynevezett lélegző piroklór [11] hullámfüggvénye, ahol csak a zöld (A) tetraéderek élein végesek a kicserélődések, a magenta (B) tetraéderekhez tartozó éleken eltűnően kicsik – ez a szétválasztott tetraéderek határértéke. A 1.2.2 bekezdésben a Heisenberg-modell sajátállapotait vizsgáltuk egyetlen tetraéderen. Megállapítottuk, hogy a szinglett alapállapot kétszeresen degenerált. A $|0_A\rangle$ a $|\psi_A\rangle$ -ban e két szinglett állapot bármelyikét jelöli, és ezeknek megengedjük, hogy különböző tetraédereken különböző lineáris kombinációkban legyenek. Az összes lehetséges konfigurációt figyelembe véve a $|\psi_A\rangle$ hullámfüggvények egy $2^{N_A} = 2^{N_{\text{tet}}/2}$ dimenziójú lineáris teret fognak kifeszíteni, ahol $N_A = N_{\text{tet}}/2$ az A tetraéderek száma – ezt a lineáris teret $\mathcal{M}_A$ alapállapot sokaságnak fogjuk nevezni. Más szóval a $\mathcal{M}_A$ az A tetraéderek kétdimenziós szinglett sokaságainak

tenzor szorzata,

$$\begin{aligned}\mathcal{M}_A &= \{|0_{A_1}\rangle_1, |0_{A_1}\rangle_2\} \otimes \{|0_{A_2}\rangle_1, |0_{A_2}\rangle_2\} \otimes \cdots \otimes \{|0_{A_{N_A}}\rangle_1, |0_{A_{N_A}}\rangle_2\} \\ &= \{|0_{A_1}\rangle_1 |0_{A_2}\rangle_1, |0_{A_1}\rangle_1 |0_{A_2}\rangle_2, |0_{A_1}\rangle_2 |0_{A_2}\rangle_1, |0_{A_1}\rangle_2 |0_{A_2}\rangle_2\} \\ &\quad \otimes \{|0_{A_3}\rangle_1, |0_{A_3}\rangle_2\} \otimes \cdots \otimes \{|0_{A_{N_A}}\rangle_1, |0_{A_{N_A}}\rangle_2\} .\end{aligned}\quad (2.2)$$

A B tetraédereken hasonlóan konstruálhatjuk a szinglettekkel rendelkező állapotokat,

$$|\psi_B\rangle = \prod_{\mathcal{M}_B} |0_B\rangle . \quad (2.3)$$

Ezek az állapotok alkotják a $\mathcal{M}_B$ sokaságot.

Célunk egy olyan $\mathcal{H}$ Hamiltoni felépítése, melynek a fenti állapotok 0 sajátértékkel rendelkező alapállapotai lesznek:

$$\mathcal{H} |\psi\rangle = 0, \quad \text{when } |\psi\rangle \in \mathcal{M}_{A \cup B} . \quad (2.4)$$

A Majumdar-Ghosh modell ötletét követve a $\mathcal{H}$ Hamiltonit projektorok összegeként fogjuk felírni.

$$\mathcal{H} = \sum_{g \in G} g\mathcal{P} . \quad (2.5)$$

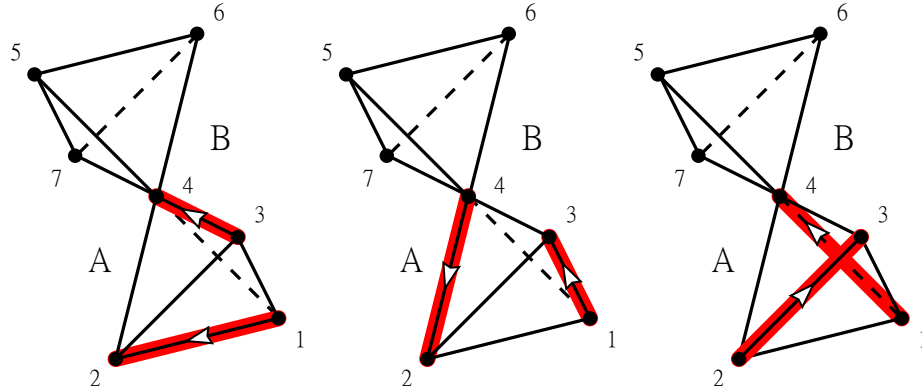
Itt $\mathcal{P}$ egyetlen operátort jelent, amelyet a G tércsoport g elemével kell eltolni és elforgatni.

Minden $|\psi_A\rangle$ és $|\psi_B\rangle \in \mathcal{M}_{A \cup B}$, a $g\mathcal{P} |\psi_A\rangle$ és $g\mathcal{P} |\psi_B\rangle$ értékének nullának kell lennie,

$$g\mathcal{P} |\psi_A\rangle = 0 , \quad (2.6a)$$

$$g\mathcal{P} |\psi_B\rangle = 0 , \quad (2.6b)$$

bármely $g \in G$ esetén. A következőkben egy olyan $\mathcal{P}$ operátort fogunk létrehozni, amely 7 helyre terjed ki. Ez a 7 hely egy motívumot alkot, amely két sarokosztásos tetraéderből áll (egy magenta és egy zöld színű), ezt az ábra 2.1 mutatja. A motívum elég nagy ahhoz, hogy a szinglettet bármelyik tetraéderen (A vagy B) tartalmazza. A csúcsok jelölését a 2.1(b) ábrán megadottak szerint vesszük fel.



2.2. ábra. A motívum lehetséges alapállapotai, ahol a spinek szinglett kötéseket képeznek az A-tetraéderen.

A motívum projektorának megalkotásához tekintsük az A állapotot, amely az 2.2 ábrán látható. Ha a $\mathcal{M}_A$ hullámfüggvényeket a motívum hét pontjára korlátozzuk, akkor az A tetraéderben lévő szinglett azt jelenti, hogy a szinglett az 1,2,3 és 4 helyeken alakul ki, és a projektornak 0 sajátértékkel kell rendelkeznie a következő hullámfüggvényekkel:

$$[1, 2][3, 4]\sigma_5\sigma_6\sigma_7, \quad (2.7a)$$

$$[1, 3][4, 2]\sigma_5\sigma_6\sigma_7, \quad (2.7b)$$

$$[1, 4][2, 3]\sigma_5\sigma_6\sigma_7, \quad (2.7c)$$

az 2.2 ábrán balról jobbra ábrázolva. Az 2.7a egyenletben szereplő $[1, 2][3, 4]$ valencia kötések biztosítják, hogy az 1,2,3 és 4 helyeken lévő spinek szinglettet alkotnak, az 5,6 és 7 helyeken lévő többi spinek pedig tetszőlegesek (egy másik szinglettben vesznek részt, amely a motívumon kívül van). Naiv módon az alapállapot $3 \times 2^3 = 24$ -szeresen degenerált lenne, ahol 2^3 az 5,6 és 7 helyeken lévő három spin degeneráltsága, de a három szinglett konfigurációból csak kettő lineárisan független (lásd 1.2.2 bekezdésben). Ekkor a motívumra korlátozott alapállapotú sokaság dimenziója, $\mathcal{M}_A^{\text{motif}}, 2 \times 2^3 = 16$. Hasonlóképpen megvizsgálhatjuk azt az esetet is, amikor a szinglet a B (magenta) tetraéderen van. A 4,5,6 és 7 helyeken lévő spinek szinglettet alkotnak, és ezek növelik az alapállapoti sokaság dimenzióját, vagyis $\mathcal{M}_{A \cup B}^{\text{motif}}, 2 \times 16 = 32$ -re.

Nehéz feladat lenne kézzel meghatározni ezeket a sokaságokat. Ezért ezeket a számításokat a Mathematica programmal fogjuk elvégezni. Először bázisvektorokat konstruáltunk a $2^7 = 128$ dimenziós Hilbert-téren. Ezután a $P_{1,2} + P_{3,4}$ Hamiltoni alapállapotbeli sokaságaként az 2.7a egyenlet 8 konfigurációját konstruáltuk meg, a 128 dimenziós Hilbert-téren a permutációk mátrixreprezentációinak felépítését és numerikus diagonalizálását követve. Az eljárást megismételtük az 2.7b egyenlet konfigurációinak megkonstruálásához a $P_{1,3} + P_{2,4}$ Hamiltoni alapállapotbeli sokaságát véve, és így tovább. A $\mathcal{M}_A^{\text{motif}}$ előállításához összegyűjtöttük a lineárisan független sajátvektorokat. Ezeket megismételve arra az esetre, amikor a szinglettek a B tetraéderen vannak, megkapjuk a

$\mathcal{M}_B^{\text{motif}}$ sokaságot. Ekkor a projektor sokasága a $\mathcal{M}_A^{\text{motif}}$ és $\mathcal{M}_B^{\text{motif}}$ lineárisan független sajátvektorainak gyűjteménye,

$$\mathcal{M}_{A \cup B}^{\text{motif}} = \mathcal{M}_A^{\text{motif}} \cup \mathcal{M}_B^{\text{motif}}. \quad (2.8)$$

Ekkor a keresett $\mathcal{P}$ projektor

$$\mathcal{P} = 1 - \sum_{|\alpha\rangle \in \mathcal{M}_{A \cup B}^{\text{motif}}} |\alpha\rangle \langle \alpha|. \quad (2.9)$$

Ahhoz, hogy a projektort permutációk formájában kapjuk meg, összegyűjtjük az összes olyan permutációt (P_i) az indexhalmaz $\{1, 2, 3, \dots, 7\}$ felett, amelynek rendje $|P_i| \leq 2$. Jelöljük ezt a halmazt P -vel. Ezután $P_i \in P$ -t véve, c_i együtthatóval, megkapjuk a permutációkkal rendelkező projektort:

$$\mathcal{P} = \sum_{P_i \in P} c_i M_{P_i}, \quad (2.10)$$

ahol M_{P_i} a P_i mátrix reprezentációja a 128 dimenziós Hilbert-téren. A 2.9 egyenletet összehasonlítva a fenti egyenlettel, meghatározhatjuk az egyes c_i és P_i értékeket. A különböző kifejezéseket a 2.1 táblázatban gyűjtöttük össze.

Együttható	Permutációk
$-1/6$	$P_{1,2}, P_{1,3}, P_{2,3}, P_{5,6}, P_{5,7}, P_{6,7}$
$-1/9$	$P_{1,4}, P_{2,4}, P_{3,4}, P_{4,5}, P_{4,6}, P_{4,7}$
$-1/27$	$P_{1,5}, P_{1,6}, P_{1,7}, P_{2,5}, P_{2,6}, P_{2,7}, P_{3,5}, P_{3,6}, P_{3,7}, P_{1,2}P_{3,5}P_{6,7}, P_{1,2}P_{3,6}P_{5,7}, P_{1,2}P_{3,7}P_{5,6},$ $P_{1,3}P_{2,5}P_{6,7}, P_{1,3}P_{2,6}P_{5,7}, P_{1,3}P_{2,7}P_{5,6}, P_{1,5}P_{2,3}P_{6,7}, P_{1,6}P_{2,3}P_{5,7}, P_{1,7}P_{2,3}P_{5,6}$
$-1/54$	$P_{1,2}P_{4,5}, P_{1,2}P_{4,6}, P_{1,2}P_{4,7}, P_{1,3}P_{4,5}, P_{1,3}P_{4,6}, P_{1,3}P_{4,7}, P_{1,4}P_{5,6}, P_{1,4}P_{5,7}, P_{1,4}P_{6,7},$ $P_{2,3}P_{4,5}, P_{2,3}P_{4,6}, P_{2,3}P_{4,7}, P_{2,4}P_{5,6}, P_{2,4}P_{5,7}, P_{2,4}P_{6,7}, P_{3,4}P_{5,6}, P_{3,4}P_{5,7}, P_{3,4}P_{6,7}$
$1/54$	$P_{1,2}P_{3,4}P_{5,6}, P_{1,2}P_{3,4}P_{5,7}, P_{1,2}P_{3,4}P_{6,7}, P_{1,2}P_{4,5}P_{6,7}, P_{1,2}P_{4,6}P_{5,7}, P_{1,2}P_{4,7}P_{5,6},$ $P_{1,3}P_{2,4}P_{5,6}, P_{1,3}P_{2,4}P_{5,7}, P_{1,3}P_{2,4}P_{6,7}, P_{1,3}P_{4,5}P_{6,7}, P_{1,3}P_{4,6}P_{5,7}, P_{1,3}P_{4,7}P_{5,6},$ $P_{1,4}P_{2,3}P_{5,6}, P_{1,4}P_{2,3}P_{5,7}, P_{1,4}P_{2,3}P_{6,7}, P_{2,3}P_{4,5}P_{6,7}, P_{2,3}P_{4,6}P_{5,7}, P_{2,3}P_{4,7}P_{5,6}$
$1/27$	$P_{1,2}P_{3,5}, P_{1,2}P_{3,6}, P_{1,2}P_{3,7}, P_{1,3}P_{2,5}, P_{1,3}P_{2,6}, P_{1,3}P_{2,7}, P_{1,5}P_{2,3}, P_{1,5}P_{6,7}, P_{1,6}P_{2,3},$ $P_{1,6}P_{5,7}, P_{1,7}P_{2,3}, P_{1,7}P_{5,6}, P_{2,5}P_{6,7}, P_{2,6}P_{5,7}, P_{2,7}P_{5,6}, P_{3,5}P_{6,7}, P_{3,6}P_{5,7}, P_{3,7}P_{5,6}$
$1/9$	$P_{1,2}P_{3,4}, P_{1,3}P_{2,4}, P_{1,4}P_{2,3}, P_{4,5}P_{6,7}, P_{4,6}P_{5,7}, P_{4,7}P_{5,6}$
1	P_0

2.1. táblázat. A permutációk (második oszlop) és azok együtthatója (első oszlop) a 2.10 egyenletben. Az utolsó sorban a P_0 az identitáspermutációt jelöli.

Összességében egy olyan Hamiltonit határoztunk meg, amelynek alapállapotai spontán sértik az inverziós szimmetriát. A Hamiltoni olyan $\mathcal{P}$ projektorok összege, amelyek kielégítik a $\mathcal{P}^2 = \mathcal{P}$ projektor tulajdonságot, és a szinglett szorzatból álló hullámfüggvények nulla sajátértékkel rendelkező alapállapotok: $\mathcal{P}|\psi_A\rangle = 0$ és $\mathcal{P}|\psi_B\rangle = 0$. A projektor nehézkes (például 6 helycserét tartalmaz), és nehéz értelmezni a fizikai jelentését. A

bonyolult forma oka az, hogy a fennmaradó $128 - 32 = 96$ állapotoknak mindnek 1-es sajátértékkel kell rendelkeznie. Ebből a megfigyelésből kiindulva a következő fejezetekben egyszerűbb és értelmesebb Hamiltonikat próbálunk találni, amelyeknek az alapállapot sokasága megegyezik a projektoréval.

2.2. A Hamiltoni

Ebben a szakaszban megpróbálunk egy megfelelő $\mathcal{H}_{\text{motif}}$ Hamiltonit találni, amely helyettesítheti az előző szakaszban létrehozott $\mathcal{P}$ projektort. Kiindulópontként megköveteljük, hogy $\mathcal{H}_{\text{motif}}$ tiszteletben tartsa a motívum D_{3d} pontcsoport-szimmetriáját. A D_{3d} csoport generátorai a permutációk segítségével a következőképpen fejezhetők ki

$$i = P_{1,5}P_{2,6}P_{3,7} , \quad (2.11a)$$

$$C_3 = P_{1,2,3}P_{5,6,7} , \quad (2.11b)$$

$$\sigma_d = P_{2,3}P_{6,7} , \quad (2.11c)$$

ahol i az inverzió, C_3 a $2\pi/3$ -as forgatás és σ_d a tükrözés. Követjük az 2.1(b) ábra számozását. A Hamiltoni felépítéséhez a motívum összes olyan permutációját vesszük, amelyek 2- és 4-rács hely kicserélődést tartalmaznak. A permutációk nyelvén az összes 2-rács pont $P_{i,j}$ halmaza, ahol $i \neq j \in \{1, 2, 3, \dots, 7\}$, az összes 4-rács pont $P_{i,j}P_{k,l}$ halmaza, ahol a $i, j, k, l \in \{1, 2, 3, \dots, 7\}$ pontok mind különbözőek, és az identitás permutáció P_0 . Az egyes permutációkra a csoport elemeivel hatva a permutációk 19 pályáját kapjuk. Az azonos pályán lévő permutációknak azonos súlyuk lesz a Hamiltoniban. A 128 dimenziós Hilbert-téren a mátrixábrázolásban lévő permutációk súlyaikkal vett összege egy $\mathcal{H}_{\text{motif}}$ -t fog adni 19 paraméterrel $h_1, h_2, \dots, h_{19}$. A pályákat a 2.2 táblázatban gyűjtöttük össze.

Paraméter	Permutációk
h_1	P_0
h_2	$P_{1,5}, P_{2,6}, P_{3,7}$
h_3	$P_{1,2}, P_{1,3}, P_{2,3}, P_{5,6}, P_{5,7}, P_{6,7}$
h_4	$P_{1,4}, P_{2,4}, P_{3,4}, P_{4,5}, P_{4,6}, P_{4,7}$
h_5	$P_{1,6}, P_{1,7}, P_{2,5}, P_{2,7}, P_{3,5}, P_{3,6}$
h_6	$P_{1,2}P_{5,6}, P_{1,3}P_{5,7}, P_{2,3}P_{6,7}$
h_7	$P_{1,5}P_{2,6}, P_{1,5}P_{3,7}, P_{2,6}P_{3,7}$
h_8	$P_{1,6}P_{2,5}, P_{1,7}P_{3,5}, P_{2,7}P_{3,6}$
h_9	$P_{1,2}P_{3,4}, P_{1,3}P_{2,4}, P_{1,4}P_{2,3}, P_{4,5}P_{6,7}, P_{4,6}P_{5,7}, P_{4,7}P_{5,6}$
h_{10}	$P_{1,2}P_{3,7}, P_{1,3}P_{2,6}, P_{1,5}P_{2,3}, P_{1,5}P_{6,7}, P_{2,6}P_{5,7}, P_{3,7}P_{5,6}$
h_{11}	$P_{1,2}P_{4,7}, P_{1,3}P_{4,6}, P_{1,4}P_{6,7}, P_{2,3}P_{4,5}, P_{2,4}P_{5,7}, P_{3,4}P_{5,6}$
h_{12}	$P_{1,2}P_{5,7}, P_{1,2}P_{6,7}, P_{1,3}P_{5,6}, P_{1,3}P_{6,7}, P_{2,3}P_{5,6}, P_{2,3}P_{5,7}$
h_{13}	$P_{1,5}P_{2,7}, P_{1,5}P_{3,6}, P_{1,6}P_{3,7}, P_{1,7}P_{2,6}, P_{2,5}P_{3,7}, P_{2,6}P_{3,5}$
h_{14}	$P_{1,6}P_{2,7}, P_{1,6}P_{3,5}, P_{1,7}P_{2,5}, P_{1,7}P_{3,6}, P_{2,5}P_{3,6}, P_{2,7}P_{3,5}$
h_{15}	$P_{1,2}P_{3,5}, P_{1,2}P_{3,6}, P_{1,3}P_{2,5}, P_{1,3}P_{2,7}, P_{1,6}P_{2,3}, P_{1,6}P_{5,7},$ $P_{1,7}P_{2,3}, P_{1,7}P_{5,6}, P_{2,5}P_{6,7}, P_{2,7}P_{5,6}, P_{3,5}P_{6,7}, P_{3,6}P_{5,7}$
h_{16}	$P_{1,2}P_{4,5}, P_{1,2}P_{4,6}, P_{1,3}P_{4,5}, P_{1,3}P_{4,7}, P_{1,4}P_{5,6}, P_{1,4}P_{5,7},$ $P_{2,3}P_{4,6}, P_{2,3}P_{4,7}, P_{2,4}P_{5,6}, P_{2,4}P_{6,7}, P_{3,4}P_{5,7}, P_{3,4}P_{6,7}$
h_{17}	$P_{1,4}P_{2,5}, P_{1,4}P_{3,5}, P_{1,6}P_{2,4}, P_{1,6}P_{4,5}, P_{1,7}P_{3,4}, P_{1,7}P_{4,5},$ $P_{2,4}P_{3,6}, P_{2,5}P_{4,6}, P_{2,7}P_{3,4}, P_{2,7}P_{4,6}, P_{3,5}P_{4,7}, P_{3,6}P_{4,7}$
h_{18}	$P_{1,4}P_{2,6}, P_{1,4}P_{3,7}, P_{1,5}P_{2,4}, P_{1,5}P_{3,4}, P_{1,5}P_{4,6}, P_{1,5}P_{4,7},$ $P_{2,4}P_{3,7}, P_{2,6}P_{3,4}, P_{2,6}P_{4,5}, P_{2,6}P_{4,7}, P_{3,7}P_{4,5}, P_{3,7}P_{4,6}$
h_{19}	$P_{1,4}P_{2,7}, P_{1,4}P_{3,6}, P_{1,6}P_{3,4}, P_{1,6}P_{4,7}, P_{1,7}P_{2,4}, P_{1,7}P_{4,6},$ $P_{2,4}P_{3,5}, P_{2,5}P_{3,4}, P_{2,5}P_{4,7}, P_{2,7}P_{4,5}, P_{3,5}P_{4,6}, P_{3,6}P_{4,5}$

2.2. táblázat. A permutációk különböző pályái (második oszlop) és súlyaik (első oszlop).

Ahhoz, hogy a sajátállapotok megegyezzenek a projektoréval, a Hamilton operátornak kommutálnia kell a $\mathcal{P}$ projektorral:

$$[\mathcal{H}_{\text{motif}}, \mathcal{P}] = 0. \quad (2.12)$$

Ez a feltétel 19-ről 12-re csökkenti a független paraméterek számát, amelyek a 2.3 táblázat első oszlopában szerepelnek. Továbbá, a Hamiltoninak minden $|\psi\rangle \in \mathcal{M}_{A \cup B}^{\text{motif}}$ esetén meg kell felelnie a következő feltételeknek

$$\mathcal{H}_{\text{motif}} |\psi\rangle = 0. \quad (2.13)$$

Így maradt 7 független paraméter $g_1, g_2, \dots, g_7$, amelyek a második oszlopban láthatók a 2.3 táblázatban.

Összefoglalva, egy 7 paraméteres Hamiltonit kapunk, amelyre a $\mathcal{M}_{A \cup B}$ állapotok egzakt sajátállapotok 0 sajátértékkel. Ezek azonban nem feltétlenül alapállapotok, hiszen a

spektrumban lehetnek más, alacsonyabb energiájú állapotok is. Olyan g_i kombinációt kell találnunk, amely biztosítja, hogy az összes többi állapot pozitív energiájú legyen. Ehhez meg kell határoznunk a Hamilton operátor sajátértékeit.

Paraméterek, melyek kielégítik a $[\mathcal{H}_{\text{motif}}, \mathcal{P}] = 0$ feltételt	Paraméterek, melyek kielégítik a $\mathcal{H}_{\text{motif}} \psi\rangle = 0$ feltételt	Permutációk
h_1	$15g_1$	P_0
h_2	$10g_2$	$P_{1,5}, P_{2,6}, P_{3,7}$
h_3	$5g_3$	$P_{1,2}, P_{1,3}, P_{2,3}, P_{5,6}, P_{5,7}, P_{6,7}$
h_4	$10g_4$	$P_{1,4}, P_{2,4}, P_{3,4}, P_{4,5}, P_{4,6}, P_{4,7}$
h_5	$5g_5$	$P_{1,6}, P_{1,7}, P_{2,5}, P_{2,7}, P_{3,5}, P_{3,6}$
h_6	g_6	$P_{1,2}P_{5,6}, P_{1,3}P_{5,7}, P_{2,3}P_{6,7}$
h_7	$-g_1 + 4g_2 - 2g_3 + 4g_4 - 6g_5$	$P_{1,5}P_{2,6}, P_{1,5}P_{3,7}, P_{2,6}P_{3,7}$
h_8	$-g_1 + 4g_2 - 2g_3 + 4g_4 - 6g_5$	$P_{1,6}P_{2,5}, P_{1,7}P_{3,5}, P_{2,7}P_{3,6}$
h_9	$-g_1 - g_2 - 2g_3 - g_4 - g_5$	$P_{1,2}P_{3,4}, P_{1,3}P_{2,4}, P_{1,4}P_{2,3}, P_{4,5}P_{6,7}, P_{4,6}P_{5,7}, P_{4,7}P_{5,6}$
$-h_2 - h_4 + 2h_5 + h_7 + h_8 - h_9$	$-g_1 - g_2 - 2g_3 - g_4 - g_5$	$P_{1,2}P_{3,7}, P_{1,3}P_{2,6}, P_{1,5}P_{2,3}, P_{1,5}P_{6,7}, P_{2,6}P_{5,7}, P_{3,7}P_{5,6}$
h_{11}	g_7	$P_{1,2}P_{4,7}, P_{1,3}P_{4,6}, P_{1,4}P_{6,7}, P_{2,3}P_{4,5}, P_{2,4}P_{5,7}, P_{3,4}P_{5,6}$
h_{12}	$-10g_2 + 5g_5 + g_6$	$P_{1,2}P_{5,7}, P_{1,2}P_{6,7}, P_{1,3}P_{5,6}, P_{1,3}P_{6,7}, P_{2,3}P_{5,6}, P_{2,3}P_{5,7}$
$-h_2 + h_5 + h_8$	$-g_1 - 6g_2 - 2g_3 + 4g_4 - g_5$	$P_{1,5}P_{2,7}, P_{1,5}P_{3,6}, P_{1,6}P_{3,7}, P_{1,7}P_{2,6}, P_{2,5}P_{3,7}, P_{2,6}P_{3,5}$
$-h_2 + h_5 + h_7$	$-g_1 - 6g_2 - 2g_3 + 4g_4 - g_5$	$P_{1,6}P_{2,7}, P_{1,6}P_{3,5}, P_{1,7}P_{2,5}, P_{1,7}P_{3,6}, P_{2,5}P_{3,6}, P_{2,7}P_{3,5}$
$-h_2 - h_4 + 2h_5 + h_7 + h_8 - h_9$	$-g_1 - g_2 - 2g_3 - g_4 - g_5$	$P_{1,2}P_{3,5}, P_{1,2}P_{3,6}, P_{1,3}P_{2,5}, P_{1,3}P_{2,7}, P_{1,6}P_{2,3}, P_{1,6}P_{5,7}, P_{1,7}P_{2,3}, P_{1,7}P_{5,6}, P_{2,5}P_{6,7}, P_{2,7}P_{5,6}, P_{3,5}P_{6,7}, P_{3,6}P_{5,7}$
$h_2 - h_5 + h_{11}$	$10g_2 - 5g_5 + g_7$	$P_{1,2}P_{4,5}, P_{1,2}P_{4,6}, P_{1,3}P_{4,5}, P_{1,3}P_{4,7}, P_{1,4}P_{5,6}, P_{1,4}P_{5,7}, P_{2,3}P_{4,6}, P_{2,3}P_{4,7}, P_{2,4}P_{5,6}, P_{2,4}P_{6,7}, P_{3,4}P_{5,7}, P_{3,4}P_{6,7}$
h_{17}	$-g_1 + 4g_2 + 3g_3 - 6g_4 - g_5$	$P_{1,4}P_{2,5}, P_{1,4}P_{3,5}, P_{1,6}P_{2,4}, P_{1,6}P_{4,5}, P_{1,7}P_{3,4}, P_{1,7}P_{4,5}, P_{2,4}P_{3,6}, P_{2,5}P_{4,6}, P_{2,7}P_{3,4}, P_{2,7}P_{4,6}, P_{3,5}P_{4,7}, P_{3,6}P_{4,7}$
h_{17}	$-g_1 + 4g_2 + 3g_3 - 6g_4 - g_5$	$P_{1,4}P_{2,6}, P_{1,4}P_{3,7}, P_{1,5}P_{2,4}, P_{1,5}P_{3,4}, P_{1,5}P_{4,6}, P_{1,5}P_{4,7}, P_{2,4}P_{3,7}, P_{2,6}P_{3,4}, P_{2,6}P_{4,5}, P_{2,6}P_{4,7}, P_{3,7}P_{4,5}, P_{3,7}P_{4,6}$
$-h_2 + h_5 + h_{17}$	$-g_1 - 6g_2 + 3g_3 - 6g_4 + 4g_5$	$P_{1,4}P_{2,7}, P_{1,4}P_{3,6}, P_{1,6}P_{3,4}, P_{1,6}P_{4,7}, P_{1,7}P_{2,4}, P_{1,7}P_{4,6}, P_{2,4}P_{3,5}, P_{2,5}P_{3,4}, P_{2,5}P_{4,7}, P_{2,7}P_{4,5}, P_{3,5}P_{4,6}, P_{3,6}P_{4,5}$

2.3. táblázat. A meghatározott paraméterek a $[\mathcal{H}_{\text{motif}}, \mathcal{P}] = 0$ és $\mathcal{H}_{\text{motif}} |\psi\rangle = 0$ feltételek alkalmazása után.

A Hamiltoni diagonalizálásával az a probléma, hogy 128 dimenziós mátrixunk van, 7 független paraméterrel, és szükségünk van a sajátállapotok általános megoldására. A g_i paraméterekkel rendelkező 128×128 mátrix közvetlen diagonalizálása még a Mathematica számára is félelmetes feladat. E nehézség megkerülésére a következő trükköt alkalmazzuk. Véletlen egész számokat generálunk a paraméterek számára, és a Hamiltoni numerikus sajátvektorait vesszük. Ezután a Hamiltoni és a numerikus sajátvektorok tenzorszorzatát, valamint ezek transzponáltját $(\{\mathbf{n}_i\} \otimes H \otimes \{\mathbf{n}_i\})^T$, ahol $\mathbf{n}_i$ a i . numerikus sajátvektor) visszaadja a részben diagonalizált Hamiltonit. Ezután a diagonális azon elemeit vesszük, amelyek egész számokat tartalmaznak. Ezt többször megismételve a Hamiltoni 104 sajátértékét tudjuk azonosítani.

Degeneráció	Sajátérték
32	0
4	$-90g_2 + 30g_3 + 60g_5$
4	$9g_1 - 36g_2 + 48g_3 - 66g_4 + 54g_5 + 9g_6$
6	$-14g_1 - 119g_2 - 58g_3 + 81g_4 + g_5 + 9g_6 - 3g_7$
2	$12g_1 - 33g_2 + 54g_3 - 33g_4 + 27g_5 + 9g_6 + 3g_7$
12	$-14g_1 + 91g_2 + 47g_3 - 39g_4 - 29g_5 + 6g_7$
8	$6g_1 + 51g_2 + 27g_3 - 39g_4 - 9g_5 + 6g_7$
8	$6g_1 + 6g_2 + 12g_3 + 6g_4 + 6g_5 + 6g_7$
12	$-14g_1 + 11g_2 + 47g_3 - 39g_4 + 11g_5 + 6g_7$
2	$18g_1 - 27g_2 + 6g_3 + 93g_4 - 27g_5 + 9g_6 + 9g_7$
6	$4g_1 + 59g_2 + 38g_3 - 21g_4 - g_5 + 9g_6 + 15g_7$
8	$-63g_1 + 42g_2 + 54g_3 - 108g_4 - 48g_5 + 9g_6 + 18g_7$

2.4. táblázat. A meghatározott sajátértékek és degenerációjuk.

A fennmaradó 24 sajátérték meghatározásához megalkottuk az S_z operátort, és kis súllyal hozzáadtuk a Hamiltonihoz: $H + \delta S_z$, ahol δ egy kis szám. Ezután véletlen egész számokat generáltunk a paraméterekhez, és diagonalizáltuk a mátrixot. Ezután kiválasztva azokat a sajátvektorokat, amelyeknél a $\langle \mathbf{v}_i | S_z | \mathbf{v}_i \rangle$ nem nulla, 4×6 sajátvektort kapunk, amelyeknél S_z egyenlő $-3/2, -1/2, 1/2, 3/2$. Ezekkel a Hamiltoni minden S_z esetén ugyanazok a sajátértékei lesznek. Ekkor elég csak a S_z egyetlen esetére meghatározni a sajátértékeket. A Hamiltoni és a sajátvektorok tenzorszorzata, valamint a sajátvektorok transzponáltja ($\{\mathbf{v}_i\} \otimes H \otimes \{\mathbf{v}_i\}^T$, ahol $\mathbf{v}_i$ az i -edik sajátvektor, $S_z = 3/2$ -el), egy 6×6 mátrixot ad, amelynek sajátértékei karakterisztikus polinom módszerrel meghatározhatók. Az eredmények a 2.2 táblázatban láthatók.

Degeneráció	Sajátérték
2×4	$\frac{1}{2}(21g_1 + 126g_2 + 42g_3 + 66g_4 - 54g_5 + 9g_6 + 12g_7 \pm \sqrt{(-21g_1 - 126g_2 - 42g_3 - 66g_4 + 54g_5 - 9g_6 - 12g_7)^2 - 4(2310g_1g_2 - 6240g_2^2 + 630g_1g_3 + 1800g_2g_3 + 360g_3^2 + 7260g_2g_4 + 1980g_3g_4 - 840g_1g_5 + 5820g_2g_5 - 900g_3g_5 - 2640g_4g_5 - 1440g_5^2 + 990g_2g_6 + 270g_3g_6 - 360g_5g_6 + 1320g_2g_7 + 360g_3g_7 - 480g_5g_7)})$
2×8	$\frac{1}{2}(6g_1 + 96g_2 + 42g_3 + 6g_4 - 24g_5 + 6g_7 \pm \sqrt{(-6g_1 - 96g_2 - 42g_3 - 6g_4 + 24g_5 - 6g_7)^2 - 4(-7140g_2^2 + 60g_1g_2 + 360g_3^2 + 180g_1g_3 + 2700g_2g_3 + 60g_2g_4 + 180g_3g_4 - 2340g_5^2 + 60g_1g_5 + 8520g_2g_5 - 900g_3g_5 + 60g_4g_5 + 60g_2g_7 + 180g_3g_7 + 60g_5g_7)})$

2.5. táblázat. A fennmaradó 24 sajátérték és degenerációjuk.

Most már abban a helyzetben vagyunk, hogy a sajátértékek pozitivitását kielégíthetjük. Az egyszerűség kedvéért egyparaméteres megoldásokat keresünk. Mivel egy paramétert rögzíthetünk, ezért g_3 -t 1-nek választjuk. Több megoldást is kaptunk a követelményeinkre, és azt választottuk, amelyik a legkevesebb tagot tartalmazza. Ez látható az egyenletben

(2.15). A g paraméternek meg kell felelnie a

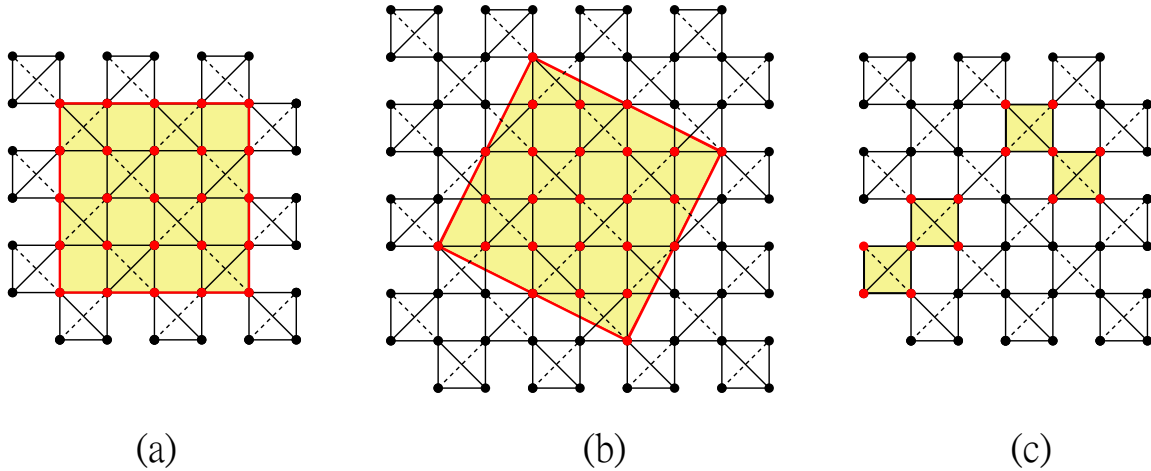
$$g > 35/18 \quad (2.14)$$

feltételnek.

$$\begin{aligned} \mathcal{H}^{\text{motif}} = & 5(P_{1,2} + P_{1,3} + P_{2,3} + P_{5,6} + P_{5,7} + P_{6,7} + P_{1,4} + P_{2,4} + P_{3,4} + P_{4,5} + P_{4,6} + P_{4,7}) \\ & + g(P_{1,2}P_{6,7} + P_{1,3}P_{5,6} + P_{2,3}P_{5,7} + P_{1,2}P_{5,6} + P_{1,2}P_{5,7} + P_{1,3}P_{5,7} + P_{1,3}P_{6,7} \\ & + P_{2,3}P_{5,6} + P_{2,3}P_{6,7}) \\ & - \frac{5}{2}(P_{1,2}P_{3,4} + P_{1,3}P_{2,4} + P_{1,4}P_{2,3} + P_{4,5}P_{6,7} + P_{4,6}P_{5,7} \\ & + P_{4,7}P_{5,6} + P_{1,2}P_{3,5} + P_{1,3}P_{2,7} + P_{1,6}P_{2,3} + P_{1,6}P_{5,7} + P_{2,7}P_{5,6} + P_{3,5}P_{6,7} \\ & + P_{1,2}P_{3,6} + P_{1,2}P_{3,7} + P_{1,3}P_{2,5} + P_{1,3}P_{2,6} + P_{1,5}P_{2,3} + P_{1,5}P_{6,7} + P_{1,7}P_{2,3} \\ & + P_{1,7}P_{5,6} + P_{2,5}P_{6,7} + P_{2,6}P_{5,7} + P_{3,6}P_{5,7} + P_{3,7}P_{5,6}) . \end{aligned} \quad (2.15)$$

2.3. 16- és 20-rácsponthoz tartozó klaszterek

Ebben a szakaszban a meghatározott Hamiltoni (2.15) alapállapot-degeneráltságát ellenőrizzük különböző méretű klasztereken, mivel ha az visszaadja a várt degeneráltságot, akkor felhasználható a bonyolult projektor helyettesítésére. A 2.1 bekezdésből ismert, hogy a $|\psi_A\rangle$ alapállapot $2^{N_{\text{tet}}/2}$ -szeresen degenerált, és ugyanez igaz a $|\psi_B\rangle$ alapállapotra is. Ezért a N_{tet} sarokosztású tetraéderekből kialakított piroklor rác alapállapot degeneráltsága $2 \times 2^{N_{\text{tet}}/2}$.

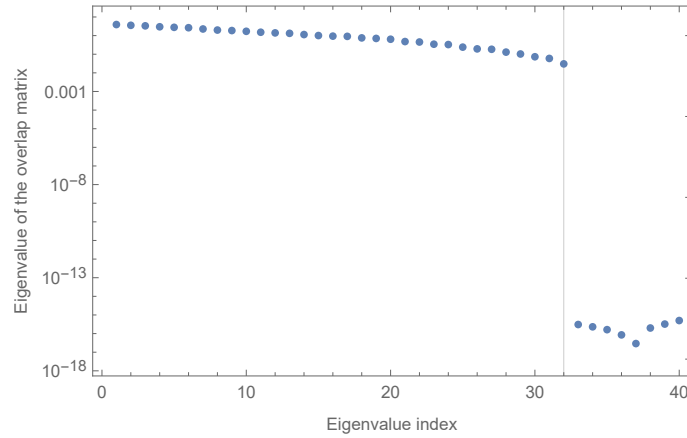


2.3. ábra. A 16- és 20-rácsponthoz tartozó klaszter az (a), (b) ábrán (piros vonallal határolt sárga terület). A (c) ábrán a klaszter két lehetséges lefedése (piros vonallal határolt sárga terület).

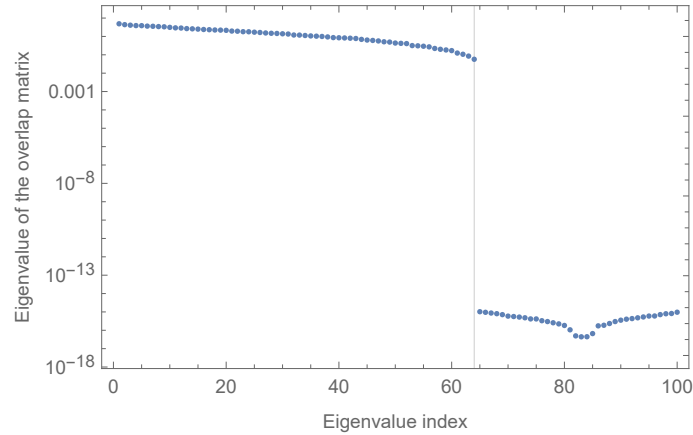
A piroklor rács 2 dimenziós ábrázolása a jól ismert sakktábla rács, és a következőkben ezt fogjuk használni a számítás bonyolultságának csökkentése érdekében. A degenerációt a sakktábla rácson vizsgáljuk $N = 16$, 20 rácpontos klaszterekkel, mint az 2.3(a) és (b) ábrán. A rácsvektorok $N = 16$ esetén $v_1^{(16)} = (0, 4)$ és $v_2^{(16)} = (4, 0)$, $N = 20$ esetén $v_1^{(20)} = (2, 4)$ és $v_2^{(20)} = (4, -2)$, ami a klaszter periodikus peremfeltételeit adja. Ahhoz, hogy megkapjuk a rács Hamiltonit, mint az 2.5 egyenletben, fel kell összegeznünk a klaszter összes motívumának Hamiltoniát:

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^N \mathcal{H}_i^{\text{motif}}, \quad (2.16)$$

ahol az összeg 1-től N -ig tart, mivel a motívum klaszterbe ágyazásának N lehetséges módja van, mint az 2.3(c) ábrán. Mivel a $\mathcal{H}^{\text{motif}}$ az 2.1(b) ábrán jelölt indexezés szabálya szerint van indexelve, csak újra kell indexelnünk a $\mathcal{H}^{\text{motif}}$ -t az összes motívumra az összegben. Ez úgy történik, hogy indexeket rendelünk a rácpontokhoz, periodikus peremfeltétellel. Ez lehetővé teszi, hogy meghatározzuk az új és a régi indexelés közötti kapcsolatot, így a permutációkat is újraindexelhetjük. Miután megkaptuk a rács $\mathcal{H}$ Hamiltoniát, a $\binom{N}{N/2}$ dimenziós Hilbert-téren a Hamiltoni mátrixreprezentációjának diagonalizálásával meghatározható az alapállapot. A 16-rácpontos klaszterre 12870×12870 dimenziós mátrixunk van, a 20-rácpontos klaszterre pedig 184756×184756 , így a teljes diagonalizálás számításigényes vagy lehetetlen. Ehelyett a Lánczos-módszert használjuk, amely numerikusan pontosan megadja az m legkisebb sajátértékeket és sajátvektorokat. Ez egy iteratív módszer, amelynek eredménye a bemeneti vektortól függ. Az degeneráció meghatározásához a Lánczos-módszert véletlenszerű vektorokkal inicializáltuk és többször lefuttattuk, abban a reményben, hogy az alapállapot sokaságot kifestíti. Az $N = 16$ klaszter esetén 40-szer, $N = 20$ esetén pedig 100-szor futtatjuk le. Ennek a sajátvektorhalmaznak és transzponáltjainak tenzorszorzata adja az átfedési mátrixot, amelynek rangja meghatározza a degenerációt. A rang kiszámításához az átfedési mátrixot diagonalizáljuk, és megszámoljuk a nem nulla elemek számát. Az átfedési mátrix számított sajátértékei $N = 16$ és 20 esetén az 2.4 és 2.5 ábrán láthatók. Mint látható, mindkét esetben az alapállapot degeneráltsága egyenlő $2 \times 2^{N_{\text{tet}}/2}$ -vel. $N = 16$ esetén a tetraéderek száma $N_{\text{tet}} = N/2 = 8$ és az alapállapot sokaságnak $\mathcal{M}_{A \cup B}$ dimenziója $2 \times 2^4 = 32$, mint a nem nulla sajátértékek száma az ábrán 2.4. $N = 20$ esetén a degeneráció $2 \times 2^5 = 64$, mint az 2.5 ábrán.

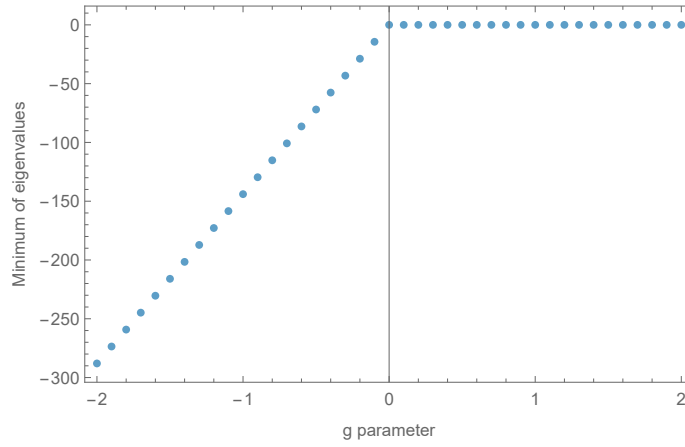


2.4. ábra. A 16-rácsponos klaszter degeneráltsága $g = 1$ paraméterrel. Az átfedési mátrix sajátértékei logaritmikus skálán ábrázolva. Visszanyerjük a 32 dimenziós $\mathcal{M}_{A \cup B}$ sokaságot.

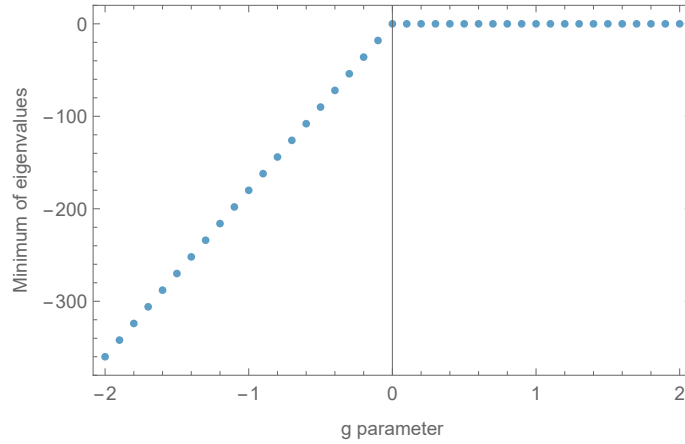


2.5. ábra. A 20-rácsponos klaszter degenerációja $g = 1$ paraméterrel. Az átfedési mátrix sajátértékei logaritmikus skálán ábrázolva. Visszanyerjük a 64 dimenziós $\mathcal{M}_{A \cup B}$ sokaságot.

Ezután megvizsgáltuk a Hamiltoni alapállapotát. A 2.6 és 2.7 ábrákon a sajátértékek minimumát ábrázoljuk az 2.15 egyenletben szereplő g paraméter függvényében. Mint láthatjuk, meglepő módon, a $\mathcal{H}$ Hamiltoni alapállapota $g \geq 0$ esetén nulla, és ferromágneses, ha $g < 0$. Amikor létrehoztuk a $\mathcal{H}^{\text{motif}}$ Hamiltoniát, megköveteltük, hogy a $|\psi\rangle \in \mathcal{M}_{A \cup B}$ alapállapot legyen, de $g < 35/18$ esetén a $|\varphi\rangle \notin \mathcal{M}_{A \cup B}$ állapot energiája kisebb lesz, mint 0, a $|\psi\rangle$ energiája. Ha a rác $\mathcal{H}$ Hamiltoni energiáját tekintjük, kiderül, hogy a $|\psi\rangle$ hullámfüggvény $g < 35/18$ alatt alapállapot marad. Ez valószínűleg azért van, mert a $|\varphi\rangle$ hullámfüggvény nem lehet egyidejűleg az átfedő motívumok sajátállapota, ami megnöveli ezen állapotok energiáját, így a $|\psi\rangle$ alapállapot maradhat.



2.6. ábra. A Hamiltoni sajátértékeinek minimuma (kék pontok) a 16-rácsponos klaszterben. A g paraméter -2 és 2 között mozog.



2.7. ábra. A Hamiltoni sajátértékeinek minimuma (kék pontok) a 20-rácsponos klaszterben. A g paraméter -2 és 2 között mozog.

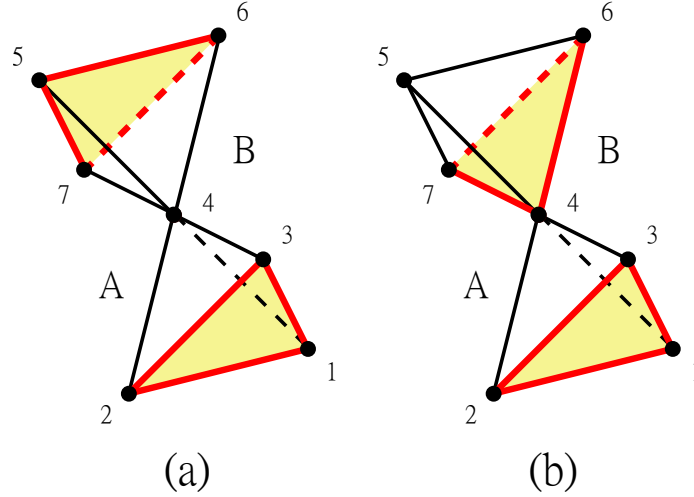
2.4. Fizikailag motivált Hamiltonik

Az 2.15 egyenlet egy egyszerű Hamiltonit ad, amely leírja a motívumot, de ez csak egy matematikai megközelítés, nincs fizikai jelentése. Ezt a Hamiltonit vizsgálva érdekes esetet találtunk, amikor a permutációkat két háromszögről vesszük, mint az 2.8(a) ábrán is látható.

$$\mathcal{H}_P = (P_{1,2} + P_{1,3} + P_{2,3})(P_{5,6} + P_{5,7} + P_{6,7}) \quad (2.17a)$$

$$= (S_{\text{tot}}^{123}(S_{\text{tot}}^{123} + 1) - 3/4)(S_{\text{tot}}^{567}(S_{\text{tot}}^{567} + 1) - 3/4) \quad (2.17b)$$

Ez a Hamiltoni az alapállapot sokaságából származó állapotra hatva nullát ad, mivel a fenti egyenletben szereplő tényezők egyike a tetraéderek egyikén lévő szingletre hatva nullát ad, mint az 1.13 egyenletben.



2.8. ábra. A $\mathcal{H}_P$ és $\mathcal{H}_Q^{(123)(467)}$ Hamiltoniban részt vevő háromszögek.

Ezután megvizsgáltuk, hogy van-e a motívumban más háromszög konfiguráció, ami a fentiekhez hasonlóan működik. Egy másik háromszögmotívum konfiguráció a 2.8(b) ábrán látható, az alábbi Hamiltonival:

$$\mathcal{H}_Q^{(123)(467)} = (P_{1,2} + P_{1,3} + P_{2,3})(P_{4,6} + P_{4,7} + P_{6,7}) . \quad (2.18)$$

A motívumban 6 háromszögpár közül lehet választani. Az egyenértékű szimmetriával rendelkező háromszögpárok összege, $\mathcal{H}_A^{(123)(467)} + \mathcal{H}_A^{(123)(456)} + \dots$, az egyszerűség kedvéért osztva 2-vel, a következő.

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_Q &= (P_{1,2} + P_{1,3} + P_{2,3})(P_{4,5} + P_{4,6} + P_{4,7}) \\ &\quad + (P_{1,2} + P_{1,3} + P_{2,3})(P_{5,6} + P_{5,7} + P_{6,7}) \\ &\quad + (P_{1,4} + P_{2,4} + P_{3,4})(P_{5,6} + P_{5,7} + P_{6,7}) . \end{aligned} \quad (2.19)$$

Mivel a $\mathcal{H}_Q^{(123)(467)} |\psi\rangle = 0$, ahol $|\psi\rangle \in \mathcal{M}_{A \cup B}$, ezért az ekvivalens Hamiltonik összege is nullát ad, $\mathcal{H}_Q |\psi\rangle = 0$.

Továbbá észrevettük, hogy a g_i paramétereket úgy választhatjuk meg a 2.3 táblázatban, hogy az összes 4-rácpont kicserélődést tartalmazó kifejezést kiiktassuk. Ez a Hamiltoni a

következő

$$\begin{aligned}
\mathcal{H}_R &= P_{1,4} + P_{1,5} + P_{1,6} + P_{1,7} + P_{2,4} + P_{2,5} + P_{2,6} + \\
&\quad + P_{2,7} + P_{3,4} + P_{3,5} + P_{3,6} + P_{3,7} + P_{4,5} + P_{4,6} + P_{4,7} - 6 \\
&= \left[\sum_{1 \leq i < j}^7 P_{i,j} \right] - (P_{1,2} + P_{1,3} + P_{2,3}) - (P_{5,6} + P_{5,7} + P_{6,7}) - 6 \\
&= S_{1\dots 7}(S_{1\dots 7} + 1) - S_{123}(S_{123} + 1) - S_{567}(S_{567} + 1) - \frac{3}{4}. \tag{2.20}
\end{aligned}$$

A probléma a fenti Hamiltonival az, hogy negatív sajátértékei is lehetnek. Gyógyítható ez a probléma, ha hozzáadjuk a $\mathcal{H}_P$ és $\mathcal{H}_Q$ értékeket? Ezeket a Hamiltonikat különböző paraméterekkel adtuk hozzá

$$\mathcal{H}^{\text{motif}} = J_p \mathcal{H}_P + J_q \mathcal{H}_Q + J_r \mathcal{H}_R. \tag{2.21}$$

E Hamiltoni sajátértékeit a 2.6 táblázatban gyűjtöttük össze.

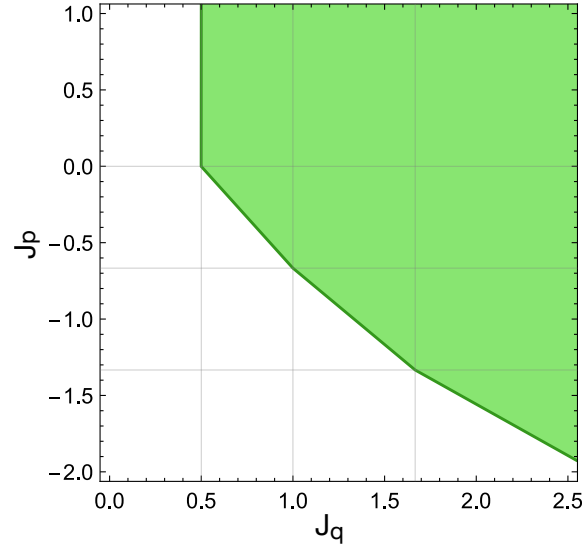
S_{tot}	E	degeneracy
	0	8*
1/2	$-3J_r + 6J_q$	4
	$-6J_r + 12J_q + 9J_p$	1
	$-6J_r + 18J_q + 9J_p$	1
	0	4*
3/2	$3J_r$	4
	$6J_q$	4
	$-3J_r + 9J_q + 9J_p$	1
	$-3J_r + 21J_q + 9J_p$	1
	$5J_r + 6J_q$	4
5/2	$2J_r + 6J_q + 9J_p$	1
	$2J_r + 24J_q + 9J_p$	1
7/2	$9J_r + 27J_q + 9J_p$	1

2.6. táblázat. A $\mathcal{H}^{\text{motif}} = J_p \mathcal{H}_P + J_q \mathcal{H}_Q + J_r \mathcal{H}_R$ energiái és degeneráltságuk. A sajátállapotok teljes S_{tot} spinjét az első oszlopban adjuk meg. A csillag a $\mathcal{M}_{A \cup B}^{\text{motif}}$ sokaságban lévő $2 \times 8 + 4 \times 4 = 32$ sajátállapotokat jelöli.

Az energiák csak $J_r \geq 0$ esetén nem negatívak, így az energiaskálát $J_r = 1$ értékkel állíthatjuk be. Ekkor az összes energia pozitív voltának feltétele a következő

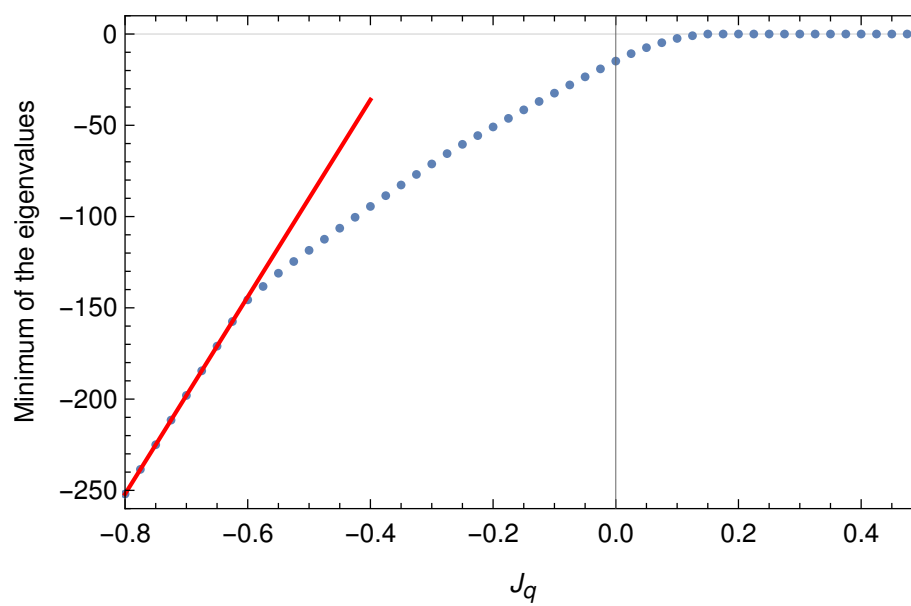
$$\begin{aligned}
&\left(J_p \leq -\frac{4}{3} \wedge J_q \geq -\frac{3J_p}{2} - \frac{1}{3} \right) \vee \left(-\frac{4}{3} < J_p \leq -\frac{2}{3} \wedge J_q \geq \frac{1}{3} - J_p \right) \vee \\
&\vee \left(-\frac{2}{3} < J_p \leq 0 \wedge J_q \geq \frac{1}{2} - \frac{3J_p}{4} \right) \vee \left(0 < J_p \wedge J_q \geq \frac{1}{2} \right) \tag{2.22}
\end{aligned}$$

A megengedett J_q és J_p tartományt a 2.9 ábra mutatja.



2.9. ábra. A lehetséges J_p , J_q paraméterek tartománya (zöld terület), fix $J_r = 1$ értékkel. Az ezen a területen lévő paraméterek kielégítik a $\mathcal{H}^{\text{motif}} = J_p \mathcal{H}_P + J_q \mathcal{H}_Q + J_r \mathcal{H}_R$ Hamiltoni energiáinak pozitivitását.

A következőkben $J_p = 0$, $J_r = 1$ értéket választunk, és csak a J_q paramétert változtatjuk. Az alapállapot degeneráltságát $J_q = 1$ esetén egy 20-rácsponthoz tartozó klaszteren ellenőriztük a 2.3 fejezetben tárgyalt módszerrel. A várt 64 alapállapotot kaptuk. Az alapállapot energiája J_q függvényében az 2.10 ábrán látható. $J_q \gtrsim 0.175$ esetén a $\mathcal{M}_{A \cup B}$ sokaság az alapállapot. Ez az érték ismét kisebb, mint a motívum sajátértékei által várt $J_q = 0.5$, mint az 2.9 ábrán. $J_q \lesssim -0.6$ esetén az alapállapot a ferromágneses állapot. Ezen értékek között az alapállapotok egyéb állapotok. Ez egy nagyon biztató eredmény, mert olyan Hamiltonit találtunk, ahol a 4-rácsponthoz tartozó kicserélődés súlya viszonylag kicsi. A reális modellekben a 4-rácsponthoz tartozó cserék magasabb rendű folyamatok, amelyek erőssége gyengébb, mint a 2-rácsponthoz tartozó kicserélődéseké.



2.10. ábra. Az alapállapot energiája a J_q függvényében, ahol $J_p = 0$ és $J_r = 1$, a 20-rácsponos klaszteren vizsgálva. A kék pontok az alapállapot energiáit, a piros vonal pedig a ferromágneses állapot energiáját jelöli.

3. fejezet

Összefoglalás és kitekintés

A frusztrált rácson végzett kvantum-spin modellek a modern kondenzált anyag fizika legösszetettebb problémái közé tartoznak. Különösen magasabb dimenziókban az elméleti megközelítés gyakran numerikus módszerekre korlátozódik. Itt a rendkívül frusztrált piroklor rácson lévő spineket vizsgáltuk a szélsőséges kvantumhatárban. Kutatásunk célja olyan Hamiltonik megkonstruálása volt, ahol az alapállapotok pontosan ismertek. Ezek a Hamiltonik bonyolultak, de reméljük, hogy kiindulópontként szolgálhatnak a fázisok jobb megértéséhez ezekben a modellekben.

Egy nemrégiben végzett numerikus számítás egy lehetséges inverziós szimmetriasértő fázist vetett fel a piroklor rácspan. Ez inspirált bennünket egy olyan pontos alapállapotokat tartalmazó Hamiltoni megalkotására, amely spontán sérti ezt a szimmetriát, és amely egy tetraéderekből álló alrácson szingletteket alkotó spinekből áll. Ez az alapállapot nem csak az inverziós szimmetriát sérti, hanem extenzíven degenerált, és egy sokaságot alkot. A Majumdar-Ghosh-modell szellemében létrehoztunk egy Hamiltonit, mint projektorok összege, a keresett alapállapot sokasággal. A projektorokat egy 7 rácspontból álló motívumon definiáltuk, amelyet két sarokosztású tetraédert alkot. Ezek a motívumok a rácspan teljes lefedettségét adják. A projektor számos tagból áll, beleértve a 6-rácspont kicserélődéseket is.

Egy egyszerűbb Hamiltoni megtalálása érdekében a motívumon a két- és négy-rácspont kicserélődések lineáris kombinációját tekintettük. Megköveteltük, hogy az alapállapot sokasága nulla energiájú legyen, az összes többi állapotnak pedig véges pozitív energiájúnak kell lennie. Ezzel a matematikai konstrukcióval eljutottunk a szükséges feltételeket kielégítő Hamiltonik halmazához. Megközelítésünk érvényességének ellenőrzésére Hamiltoniainkat 16- és 20-rácspontos klasztereken tekintettük periodikus peremfeltételekkel. A numerikus egzakt diagonalizálás megerősítette az alapállapot sokaságának várt degeneráltságát. A megoldás szerkezetét vizsgálva egy átlátható és fizikailag motivált módszert találtunk a kívánt tulajdonságú Hamiltonik konstruálására. Végül egy viszonylag egyszerű formához jutottunk, a motívumon lévő Hamiltoni csak két- és négy-rácspont kicserélődésekből állt, amelyek nem átfedő háromszögeken végzett permutációk szorzatai. A pontos diagonalizálás kimutatta, hogy a négy-rácspont ki-

cserélődések súlya viszonylag kicsi lehet a két-rácsponthoz képest.

A végeredmény felvetette azt a kérdést, hogy az ilyen négy-rácsponthoz képest megvalósíthatók-e egy fizikai rendszerben. Például a magnetoelasztikus csatolás adhat négy-rácsponthoz képest, a fluktuációk is hatékonyan leírhatók magasabb rendű kifejezésekkel.

Egy másik kérdés, hogy az extenzív alapállapot sokaság hogyan növeli a degeneráltságát. A kapott modell valószínűleg egy kvantumkritikus pontot ír le, ahol sok fázis találkozik. Ettől a ponttól való eltérés különböző effektív kölcsönhatásokat vezet be a tetraédereken lévő szingletek szabadságfokai között. Ezek azonban a jövőre hagyott vizsgálatok.

Köszönetnyilvánítás

Szeretnék köszönetet mondani a Wigner Fizikai Kutatóközpontnak a szükséges munkakörülmények biztosításáért és a gyakornoki programjukból származó pénzügyi támogatásért. A számításokat számítógépeken végeztem, amelyeket részben az NKFIH OTKA K 124176. számú támogatásából finanszíroztak.

Hálás vagyok továbbá témavezetőmnek, Penc Karlonak, aki rengeteg időt és energiát fektetett abba, hogy a dolgozatom alapjául szolgáló ismereteket a rendelkezésemre bocsássa, valamint a folyamatos konzultációkért, amelyek segítettek a munkámban és a dolgozat megírásában való előrehaladásban.

Függelék

Itt egy olyan kifejezést adunk, amely a $P_{i,j}$ összegét egy N oldalú teljes gráfban a teljes S_N spinre vonatkoztatja:

$$\begin{aligned}\sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=i+1}^N P_{i,j} &= \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=i+1}^N 2 \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j + \frac{1}{2} \frac{N(N-1)}{2} \\ &= \left(\sum_{i=1}^N \mathbf{S}_i \right)^2 - N \mathbf{S}_i^2 + \frac{N(N-1)}{4} \\ &= \left(\sum_{i=1}^N \mathbf{S}_i \right)^2 - N \frac{3}{4} + \frac{N(N-1)}{4} \\ &= S_N(S_N + 1) + \frac{N(N-4)}{4} .\end{aligned}\tag{1}$$

Irodalomjegyzék

- [1] I. Hagymási, R. Schäfer, R. Moessner, and D. J. Luitz, „Possible inversion symmetry breaking in the $s = 1/2$ pyrochlore heisenberg magnet,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 126, p. 117204, Mar 2021. [Online]. Available: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.126.117204>
- [2] P. Fazekas, *Lecture notes on electron correlation and magnetism*, ser. Series in Modern Condensed Matter Physics: Volume 5. World Scientific, 1999.
- [3] H. Takagi and S. Niitaka, *Highly Frustrated Magnetism in Spinels*. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2011, pp. 155–175. [Online]. Available: https://doi.org/10.1007/978-3-642-10589-0_7
- [4] J. T. Chalker, *Geometrically Frustrated Antiferromagnets: Statistical Mechanics and Dynamics*. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2011, pp. 3–22. [Online]. Available: https://doi.org/10.1007/978-3-642-10589-0_1
- [5] R. Moessner and J. T. Chalker, „Low-temperature properties of classical geometrically frustrated antiferromagnets,” *Phys. Rev. B*, vol. 58, pp. 12 049–12 062, Nov 1998. [Online]. Available: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.58.12049>
- [6] K. W. Plumb, H. J. Changlani, A. Scheie, S. Zhang, J. W. Krizan, J. A. Rodriguez-Rivera, Y. Qiu, B. Winn, R. J. Cava, and C. L. Broholm, „Continuum of quantum fluctuations in a three-dimensional $S = 1$ Heisenberg magnet,” *Nature Physics*, vol. 15, no. 1, pp. 54–59, Jan. 2019.
- [7] Y. Yamashita and K. Ueda, „Spin-driven jahn-teller distortion in a pyrochlore system,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 85, pp. 4960–4963, Dec 2000. [Online]. Available: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.85.4960>
- [8] H. Bethe, „Zur Theorie der Metalle,” *Zeitschrift fur Physik*, vol. 71, no. 3-4, pp. 205–226, Mar. 1931.
- [9] F. D. M. Haldane, „Spontaneous dimerization in the $s = \frac{1}{2}$ heisenberg antiferromagnetic chain with competing interactions,” *Phys. Rev. B*, vol. 25, pp. 4925–4928, Apr 1982. [Online]. Available: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.25.4925>

-
- [10] Y. Iqbal, T. Müller, P. Ghosh, M. J. P. Gingras, H. O. Jeschke, S. Rachel, J. Reuther, and R. Thomale, „Quantum and classical phases of the pyrochlore heisenberg model with competing interactions,” *Phys. Rev. X*, vol. 9, p. 011005, Jan 2019. [Online]. Available: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevX.9.011005>
- [11] H. Tsunetsugu, „Spin-singlet order in a pyrochlore antiferromagnet,” *Phys. Rev. B*, vol. 65, p. 024415, Dec 2001. [Online]. Available: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.65.024415>