



NATIONAL RESEARCH  
UNIVERSITY

# Изучение свойств квантовой спиновой жидкости в трехмерной модели Китаева

Айсель Ширалиева

Кафедра теоретической физики при ИТФ им. Л.Д. Ландау

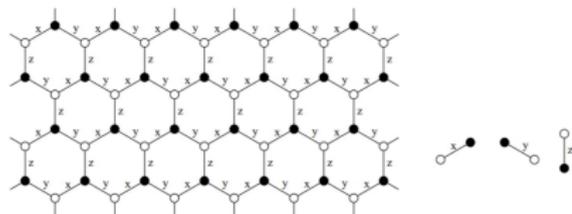
Руководитель:  
профессор Наталья Борисовна Перкинс,  
University of Minnesota Twin cities



- Квантовая спиновая жидкость - это состояние в твердом веществе, в котором при нулевой температуре дальний магнитный порядок не формируется. Помимо отсутствия магнитного порядка, оно характеризуется дробными возбуждениями и квантовой запутанностью дальнего действия;
- Данное состояние не нарушает ни вращательной, ни трансляционной симметрии гамильтониана;
- Экспериментально наблюдаемые свойства квантовой спиновой жидкости проявляются в основном в дробных возбуждениях;
- Перспективным подходом при поиске физики квантовой спиновой жидкости в реальных материалах является изучение динамических проб (например, фононной динамики) и нахождение в них свойств, которые возникают из-за дробных спиновых возбуждений.

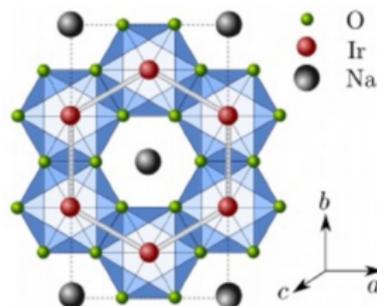
$$\mathcal{H}^S = -J_x \sum_{x\text{-links}} \sigma_j^x \sigma_k^x - J_y \sum_{y\text{-links}} \sigma_j^y \sigma_k^y - J_z \sum_{z\text{-links}} \sigma_j^z \sigma_k^z$$

Точно разрешимая модель, основное состояние которой является квантовой спиновой жидкостью.



**Рис.:** Шестиугольная решетка с китаевским взаимодействием.

A.Kitaev, *Annals of Physics* (2006)



**Рис.:** Кандидаты в 2D материалы.  
Y.Singh, P.Gegenwart, *PRL* 2010, 2011

$$\mathcal{H}^S = -J^x \sum_{\langle r, r' \rangle \in x} \sigma_r^x \sigma_{r'}^x - J^y \sum_{\langle r, r' \rangle \in y} \sigma_r^y \sigma_{r'}^y - J^z \sum_{\langle r, r' \rangle \in z} \sigma_r^z \sigma_{r'}^z,$$

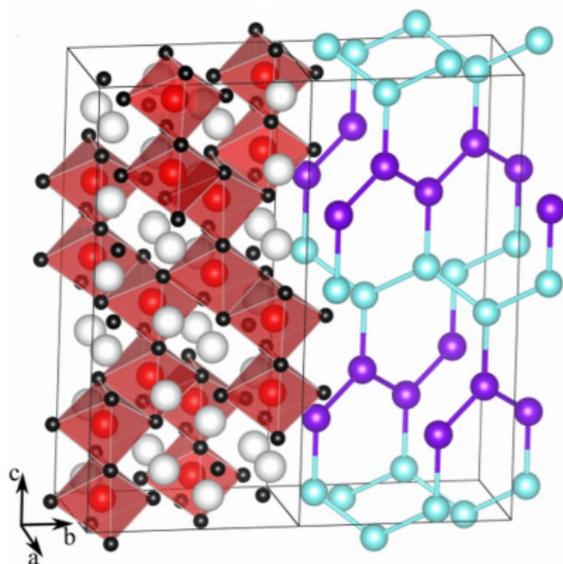


Рис.: 3D материал-кандидат  $\beta\text{-Li}_2\text{IrO}_3$   
A. Biffin et al, PRB (2014)

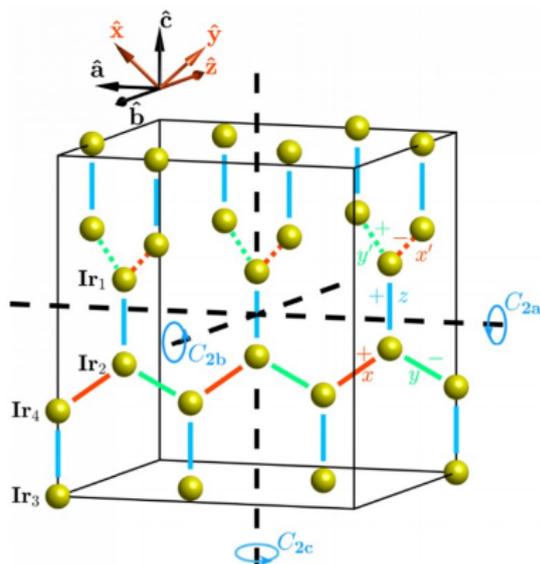


Рис.: Симметрия решетки гиперсотов  
M. Li, I. Rousochatzakis, N. Perkins, PRR 2019

Точное решение модели Китаева. Введем оператор  $\hat{W}_p = \hat{\sigma}_1^x \hat{\sigma}_2^y \hat{\sigma}_3^z \hat{\sigma}_4^x \hat{\sigma}_5^y \hat{\sigma}_6^z$ .

$$[\hat{W}_p, \mathcal{H}^S] = 0, [\hat{W}_p, \hat{W}_{p'}] = 0, W_p = \pm 1.$$

Перейдем от спинов к майорановским фермионам:  $\sigma_r^\kappa = ib_r^\kappa c_r$ ,  $\kappa = x, y, z$ , где

$$\{c_r, c_{r'}\} = \delta_{r,r'}$$

$$\mathcal{H}^S = \sum_{\kappa} \sum_{\langle r,r' \rangle_{\kappa}} iJ_{\kappa} u_{r,r'}^{\kappa} c_r c_{r'}$$

$$[\mathcal{H}^S, u_{r,r'}^{\kappa}] = 0, u_{r,r'}^{\kappa} \equiv ib_r^{\kappa} b_{r'}^{\kappa} = \pm 1$$

$$\hat{W}_p = \prod_{\text{plaquette}} u_{r,r'}^{\kappa}$$

Основное состояние китаевской квантовой спиновой жидкости:  $W_p = 1$

$$\mathcal{H}^S = \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\mu=1}^2 \varepsilon_{\mathbf{k},\mu} [\psi_{\mathbf{k},\mu}^{\dagger} \psi_{\mathbf{k},\mu} - 1/2]$$

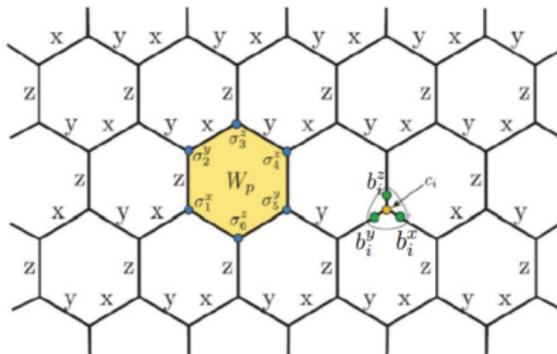
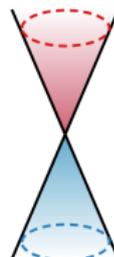


Рис.: Kitaev, Annals of Physics (2006)



- Колебания решетки неизбежны в реальных материалах;
- Низкоэнергетические возбуждения майорановских фермионов в двумерных и трехмерных китаевских спиновых жидкостях оставляют однозначные характерные следы в динамических пробах;
- Можем ли мы использовать спин-решеточное взаимодействие для обнаружения дробных возбуждений в квантовой спиновой жидкости?

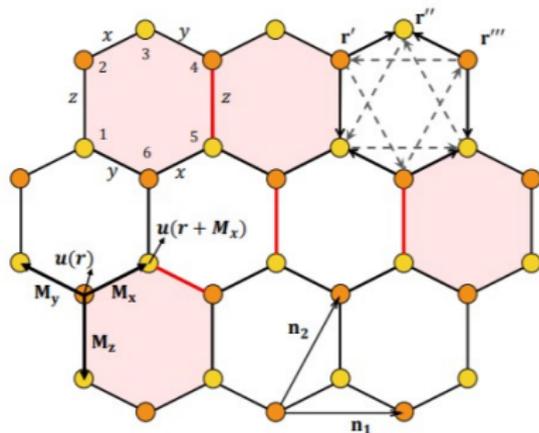


Рис.: K.Feng, M. Ye, N.Perkins, preprint (2021)

Фононную динамику удобно описывать с помощью действия:

$$S_{ph}^{(s)} = \int d^2x dt \left[ \rho \left( \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} \right)^2 + F^{(s)} \right], \quad F = \frac{1}{2} C_{ijkl} \epsilon_{ij} \epsilon_{lk}$$

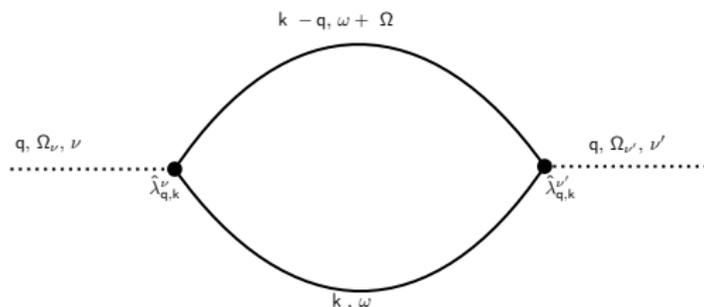
Рассмотрим затухающую звуковую волну, которая распространяется в определенном направлении:

$$v_s^2 \left( 1 + \tau_s \frac{\partial}{\partial t} \right) \nabla^2 u = \frac{\partial^2}{\partial t^2} u$$

Акустические волны затухают с удалением от источника:

$$u(x, t) = u_0 e^{-\alpha_s(\mathbf{q})x} e^{i(\Omega t - \mathbf{q} \cdot \mathbf{x})}$$

$$\alpha_s(\mathbf{q}) \propto -\frac{1}{v_s^2 q} \text{Im} \left[ \Pi_{\text{ph}}^{\mu\mu}(\mathbf{q}, \Omega) \right]_{\Omega = v_s q}$$



Гамильтониан:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}^s + \mathcal{H}^{ph} + \mathcal{H}^c$$

Спиновый гамильтониан:

$$\mathcal{H}^s = -J^x \sum_{\langle r, r' \rangle \in x} \sigma_r^x \sigma_{r'}^x - J^y \sum_{\langle r, r' \rangle \in y} \sigma_r^y \sigma_{r'}^y - J^z \sum_{\langle r, r' \rangle \in z} \sigma_r^z \sigma_{r'}^z$$

Фононный гамильтониан:

$$\mathcal{H}^{ph} = \sum_r \frac{p_r^2}{2m} + \frac{1}{2} k_s \sum_{\langle rr' \rangle} (u_r - u_{r'})^2$$

Гамильтониан спин-решеточного-взаимодействия:

$$\mathcal{H}^c = \lambda \sum_r \mathbf{M}_\alpha \cdot [(\mathbf{M}_\alpha \cdot \nabla) \mathbf{u}(r)] \sigma_r^\alpha \sigma_{r+\mathbf{M}_\alpha}^\alpha, \quad \lambda \sim \left( \frac{dJ}{dr} \right)_{eq} l_a$$

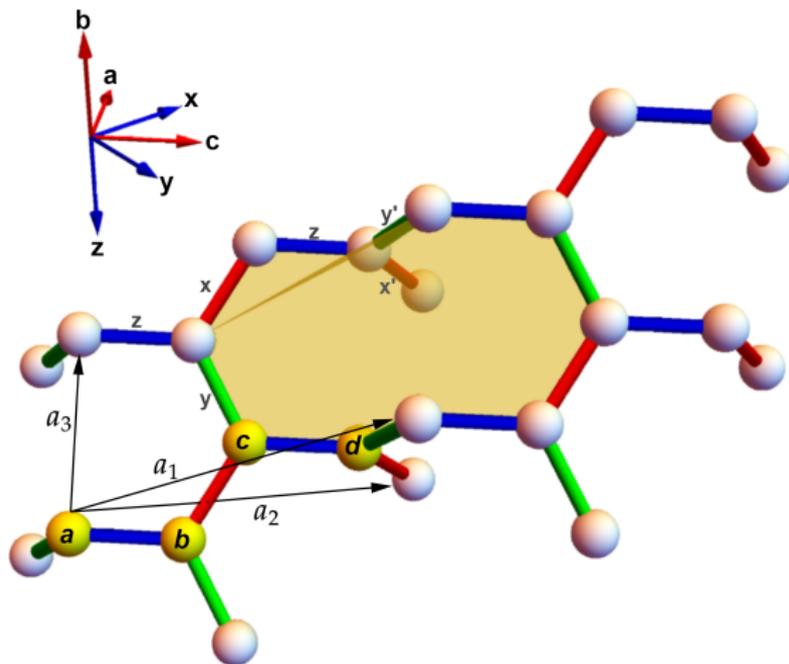
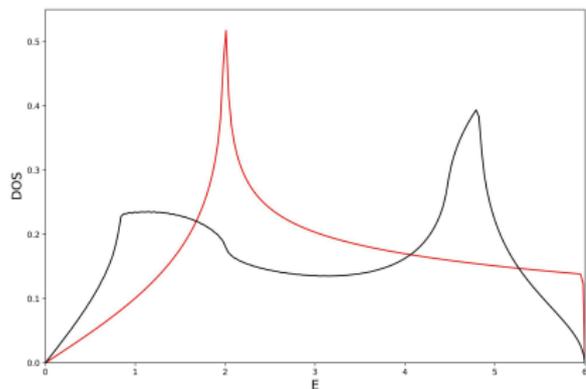


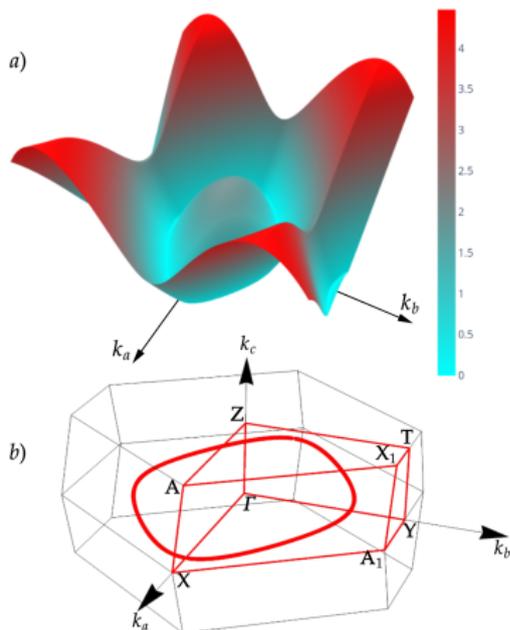
Рис.: Решетка гипертот с базисными векторами. Желтым закрасен плакет

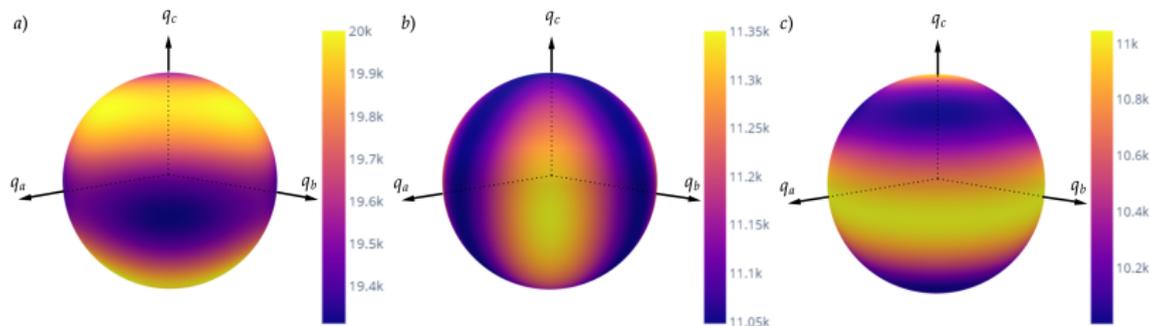


**Рис.:** Однофермионные плотности состояний для изотропной модели Китаева на шестиугольной решетке (красная линия) и решетке гиперсот (черная линия). В этом случае, плотность состояний нормирована таким образом, чтобы интеграл от нее был равен единице.

$$\text{DOS}(E) = \sum_{\mu=1,2} \int_{\text{BZ}} \delta(E - \epsilon_{\mathbf{k},\mu}) d^3\mathbf{k},$$

$$\mathcal{H}^S = \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\mu=1}^4 \epsilon_{\mathbf{k},\mu} [\psi_{\mathbf{k},\mu}^\dagger \psi_{\mathbf{k},\mu} - 1/2]$$





**Рис.:** Угловая зависимость скоростей звука для (а) продольной моды и (б), (с) двух поперечных мод.

$$C_{aaaa} = C_{bbbb} = C_{cccc} = 2800 \text{ kbar}$$

$$C_{aacc} = C_{bbcc} = 1300 \text{ kbar}$$

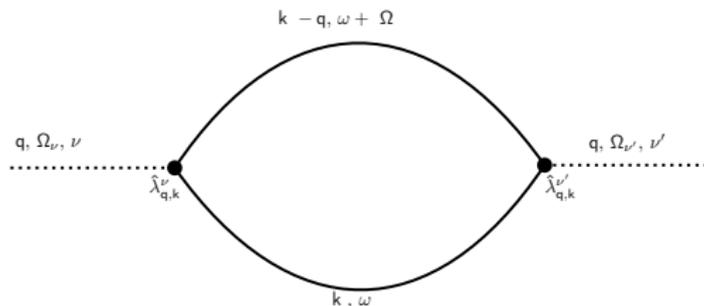
$$C_{aabb} = C_{abab} = C_{acac} = C_{bcbc} = 900 \text{ kbar}$$

$$\Omega_{\mathbf{q}}^{\parallel} = v_s^{\parallel}(\theta, \varphi) q$$

$$\Omega_{\mathbf{q}}^{1, \perp} = v_s^{1, \perp}(\theta, \varphi) q \quad (1)$$

$$\Omega_{\mathbf{q}}^{2, \perp} = v_s^{2, \perp}(\theta, \varphi) q$$

$$\begin{aligned} \Pi_{\text{ph}}^{\mu\nu}(\mathbf{q}, \Omega) &= \frac{-i}{2!} \int dt e^{i\Omega t} \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \left\langle T \psi_{-\mathbf{k}-\mathbf{q}}^T(t) \hat{\lambda}_{\mathbf{q}, \mathbf{k}}^{\mu} \psi_{\mathbf{k}}(t) \psi_{-\mathbf{k}'+\mathbf{q}}^T(0) \hat{\lambda}_{-\mathbf{q}, \mathbf{k}'}^{\nu} \psi_{\mathbf{k}'}(0) \right\rangle \\ &= i \text{Tr} \left[ \hat{\lambda}_{\mathbf{q}, \mathbf{k}}^{\nu} \mathcal{G}(\mathbf{k}, \omega) \hat{\lambda}_{\mathbf{q}, \mathbf{k}}^{\mu} \mathcal{G}(\mathbf{k} - \mathbf{q}, \omega + \Omega) \right], \text{ где } \mu, \nu = \perp_1, \perp_2, \parallel \\ \alpha_s(\mathbf{q}) &\propto -\frac{1}{v_s^2 q} \text{Im} \left[ \Pi_{\text{ph}}^{\mu\mu}(\mathbf{q}, \Omega) \right]_{\Omega=v_s q} \end{aligned}$$



**Рис.:** Процесс, где фотон с частотой  $\Omega_{\mathbf{q}, \nu} = v_s^{\mu} |\mathbf{q}|$  возбуждает два майорановских фермиона с импульсами  $\mathbf{k}$  и  $\mathbf{k} - \mathbf{q}$ .

Из численных вычислений оказывается, что вклад будут давать только  $\hat{\Pi}_{\text{ph}}^{\mu\mu}(q, i\Omega_n)$ , где  $\mu = \parallel, \perp_1, \perp_2$ .

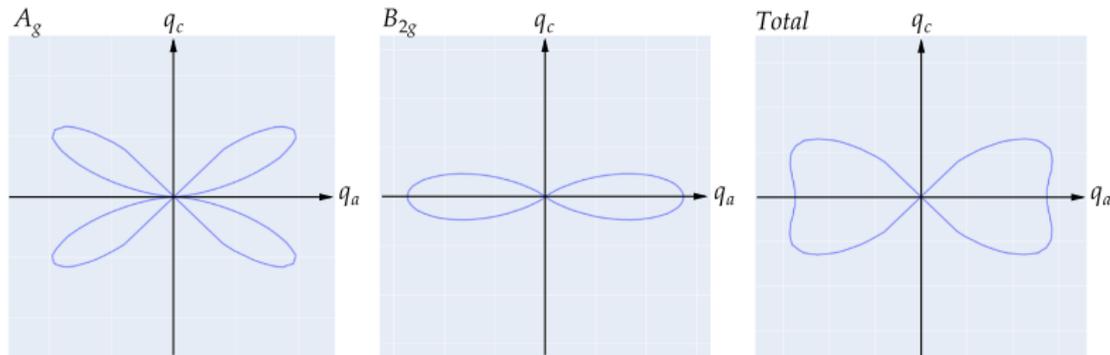


Рис.: Угловая зависимость  $\text{Im } \Pi^{\parallel\parallel}(\theta, \varphi = 0)$ ,  $T = 0.005J$

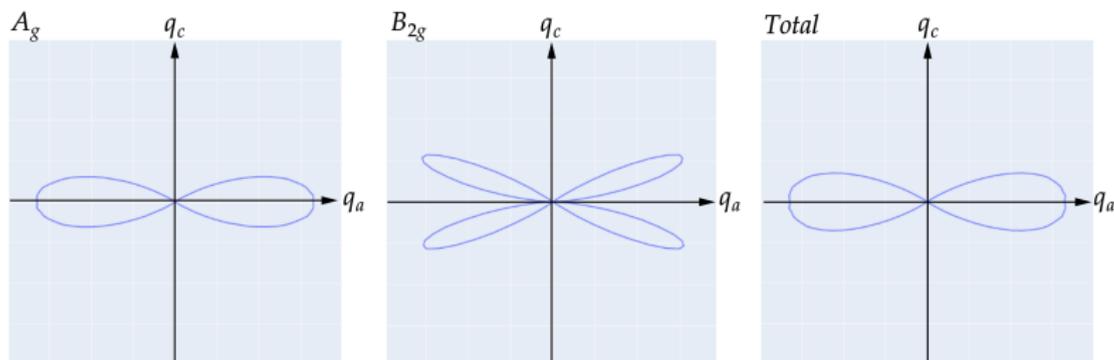


Рис.: Угловая зависимость  $\text{Im} \Pi^{\perp 1 \perp 1}(\theta, \varphi = 0)$ ,  $T = 0.005J$

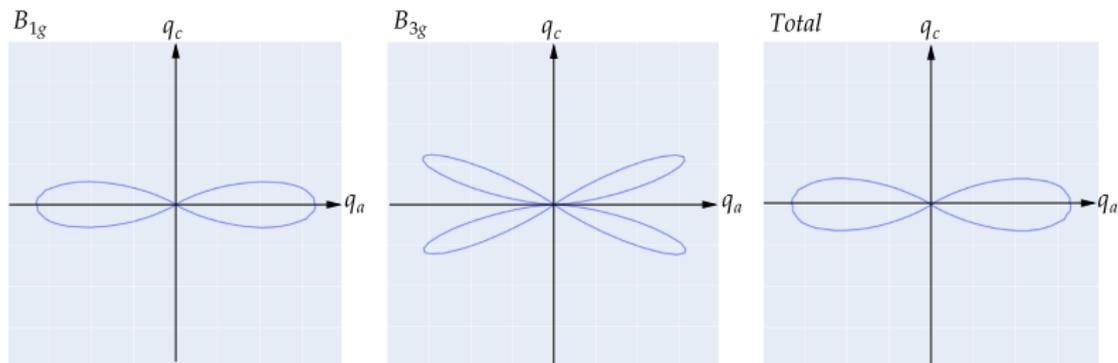


Рис.: Угловая зависимость  $\text{Im} \Pi^{\perp 2 \perp 2}(\theta, \varphi = 0)$ ,  $T = 0.005J$

Температурная зависимость майорановского фермион-фононного вклада:

$$\hat{\Pi}_{\text{ph}}^{\mu\nu}(\mathbf{q}, i\Omega_n) \approx \frac{1}{T} \cdot T^2 \cdot \text{const} = T \cdot \text{const} \quad (2)$$

Где мы считаем температурную зависимость следующим образом:

$$\begin{aligned} \int d^3k &\rightarrow T^2 \\ \tanh\left(\frac{\beta}{2}\varepsilon_i(\mathbf{k})\right) &\rightarrow \tanh\left(\frac{1}{T}\right) \approx \text{const} \\ \frac{1}{i\Omega_n + s'\varepsilon_i(\mathbf{k}-\mathbf{q}) - s\varepsilon_i(\mathbf{k})} &\rightarrow \frac{1}{T} \end{aligned} \quad (3)$$

Оценка для фонон-фононного вклада будет иметь следующий вид (ангармонический вклад) :

$$\begin{aligned} \Sigma(\mathbf{k}, \omega) &\approx \int \frac{d^3q}{(2\pi\hbar)^3} \left[ T \sum_{i\Omega_n} \frac{1}{(i\Omega_n)^2 - \Omega_q^2} \cdot \frac{1}{(i\Omega_n + i\omega_m)^2 - \Omega_{\mathbf{q}-\mathbf{k}}^2} \right] q^4 \\ &\approx \frac{T^4 \cdot T^4}{T^4} \cdot \text{const} = T^4 \cdot \text{const} \end{aligned} \quad (4)$$

Для решетки гиперсот была исследована спин-фононная модель:

- для китаевского спинового взаимодействия был получен спектр возбуждений для майорановских фермионов, а также аналитически получена линия нулевых энергий;
- для вклада акустических фононов были численно получены скорости звука через свободную энергию;
- был выведен гамильтониан магнитоупругого взаимодействия и из симметричных соображений были получены вершины взаимодействия.

Далее был исследован коэффициент затухания в рамках диаграммной техники в терминах майорановских фермионов и акустических фононов, как мнимая часть поляризационной петли, и численно получена его угловая зависимость.

Спасибо за внимание!



$$\hat{\Pi}_{\text{ph}}^{\mu\nu}(\mathbf{q}, i\Omega_n) = \sum_{\mathbf{K}_0} \int_C d^3k \frac{1}{2} \sum_{\substack{i_i=1,2 \\ s=\pm 1}} C_{iiss}^{\mu\nu} \cdot \left( \frac{s \tanh\left(\frac{\beta}{2}\varepsilon_i(\mathbf{k})\right) - s' \tanh\left(\frac{\beta}{2}\varepsilon_i(\mathbf{k}-\mathbf{q})\right)}{i\Omega_n + s' \varepsilon_i(\mathbf{k}-\mathbf{q}) - s \varepsilon_i(\mathbf{k})} \right),$$

Для перехода от мацубаровских частот к реальным, делаем аналитическое продолжение  $i\Omega_n \rightarrow \Omega + i\delta$ :

$$\hat{\Pi}_{\text{ph}}^{\mu\nu}(\mathbf{q}, \Omega) = \sum_{\mathbf{K}_0} \int_C d^3k \frac{1}{2} \sum_{\substack{i_i=1,2 \\ s=\pm 1}} C_{iiss}^{\mu\nu} \cdot \left( \frac{s \tanh\left(\frac{\beta}{2}\varepsilon_i(\mathbf{k})\right) - s' \tanh\left(\frac{\beta}{2}\varepsilon_i(\mathbf{k}-\mathbf{q})\right)}{\Omega + i\delta + s' \varepsilon_i(\mathbf{k}-\mathbf{q}) - s \varepsilon_i(\mathbf{k})} \right),$$

Используя теорему Сохоцкого-Племеля:  $\lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \frac{1}{x \pm i\varepsilon} = \mp i\pi\delta(x) + \mathcal{P}\left(\frac{1}{x}\right)$ , мы получаем:

$$\text{Im } \hat{\Pi}_{\text{ph}}^{\mu\nu}(\mathbf{q}, \Omega) = -\frac{1}{\pi} \sum_{\mathbf{K}_0} \int_C d^3k \frac{1}{2} \sum_{\substack{i_i=1,2 \\ s=\pm 1}} C_{iiss}^{\mu\nu} \cdot \left( s \tanh\left(\frac{\beta}{2}\varepsilon_i(\mathbf{k})\right) - s' \tanh\left(\frac{\beta}{2}\varepsilon_i(\mathbf{k}-\mathbf{q})\right) \right) \cdot \delta(\Omega + s' \varepsilon_i(\mathbf{k}-\mathbf{q}) - s \varepsilon_i(\mathbf{k})),$$

Back slide: Влияние дробных спиновых возбуждений на динамические пробы.

Пример температурной зависимости коэффициента затухания звука в 2D

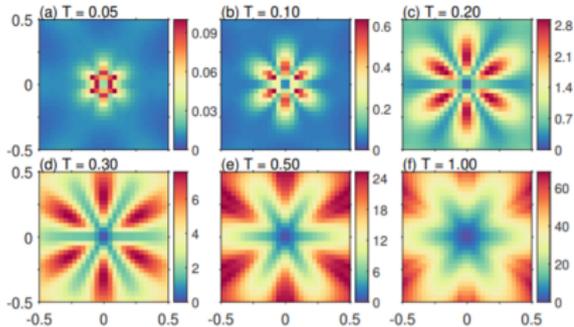


FIG. 5. Case  $v_s < v_F$ : The temperature evolution of the sound attenuation coefficient  $\alpha_s^{||}(\mathbf{q})$  computed in the zero-flux sector. The diagonalization of the Majorana fermion Hamiltonian Eq. (11) is done in the momentum space on the lattice with  $N_1 = N_2 = 500$ . The phonon momentum  $\mathbf{q}$  belongs to the region  $(q_x, q_y) \in [-0.5\pi, 0.5\pi]^2$ . In the calculations, we set  $v_s = 0.1v_F$  and the imaginary energy broadening  $\delta = 0.2$ .

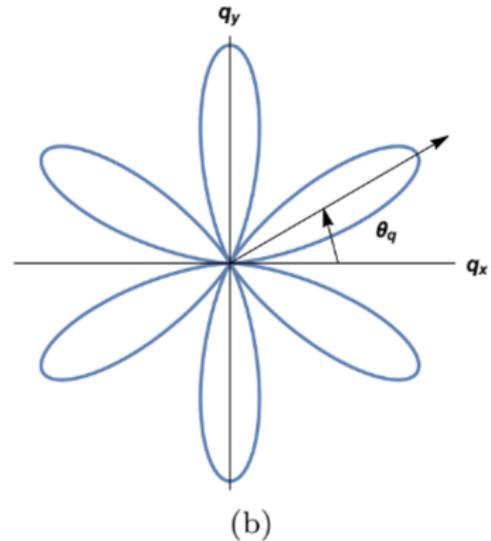


Рис.: K.Feng, M. Ye, N.Perkins, preprint (2021)

Рис.: M. Ye, R. Fernandes, N.Perkins, PRR (2020)