

Niskoenergetyczne modele dla izolatorów Motta ze skończonym sprzężeniem spin-orbita

Dorota Gotfryd, Wydział Fizyki Uniwersytetu Warszawskiego

Streszczenie

Niniejsza dysertacja dotyczy niskoenergetycznych modeli dla izolatorów Motta ze skończonym sprzężeniem spin-orbita. Ogólnie rzecz ujmując, w eksperymentach na izolatorach Motta pokazuje się przerwa izolująca, pomimo że standardowa teoria funkcjonału gęstości przypisuje im właściwości metaliczne. W szczególności, dla tego typu izolatorów należących do klasy związków metali przejściowych z czwartego okresu układu okresowego oddziaływanie kulombowskie na węźle (U) jest wystarczająco duże aby otworzyć przerwę izolującą. Tymczasem, dla niektórych związków metali przejściowych z piątego i szóstego okresu realistyczne wartości U są zbyt małe aby otworzyć przerwę. Odtworzenie właściwości izolujących jest możliwe jedynie po uwzględnieniu znacznych wartości sprzężenia spin-orbita na węźle, charakteryzujących takie materiały.

W przeciągu ostatnich kilkunastu lat pokazano, że niskoenergetyczne modele dla dwóch materiałów z tej kategorii— Na_2IrO_3 oraz $\alpha\text{-RuCl}_3$ zawierają tzw. człon Kitajewa, którego stan podstawowy można uzyskać analitycznie. Jest to tzw. ciecz spinowa Kitajewa, silnie kwantowo splątany stan, którego wersja z przerwą topologiczną pozwala na uzyskanie wzbudzeń “chronionych topologicznie”. Ten ostatni fakt spowodował silne zainteresowanie fizyką powyższych materiałów ze względu na możliwość wykorzystania takich wzbudzeń w charakterze stabilnych kubitów. Pomimo że ostatecznie wspomniane materiały okazały się być uporządkowane magnetycznie, wciąż tli się nadzieja na zrealizowanie fizyki Kitajewa w granicy silnego sprzężenia spin-orbita. Coraz to nowe grupy badawcze podejmują się ustalenia “odległości” pomiędzy parametrami Hamiltonianu oszacowanymi dla ww. materiałów oraz obszarami cieczy spinowej Kitajewa zidentyfikowanymi na diagramie fazowym dla tzw. uogólnionych modeli Kitajewa, co zaczyna przynosić pierwsze rezultaty.

W ramach niniejszej dysertacji rozważamy fizykę izolatorów Motta w granicy silnego sprzężenia spin-orbita w dwóch aspektach:

Po pierwsze, zastanawiamy się które z własności stanu podstawowego uogólnionych modeli Kitajewa mogą być zweryfikowane eksperymentalnie oraz które z nich mogą ułatwić określenie pozycji Na_2IrO_3 i $\alpha\text{-RuCl}_3$ w przestrzeni parametrów dla tychże modeli. W tym celu prezentujemy obliczenia zależności uporządkowanego momentu magnetycznego od parametrów Hamiltonianu i zestawiamy je z uzyskanymi eksperymentalnie wielkościami związanymi z momentem magnetycznym dla Na_2IrO_3 i $\alpha\text{-RuCl}_3$. Zamieszczamy również gruntowną dyskusję adekwatności uzyskanych przewidywań w zawężaniu obszaru parametrów efektywnego Hamiltonianu dla powyższych materiałów oraz proponujemy kroki mające na celu uzyskanie lepszych wyników.

Po drugie, badamy do jakiego stopnia splątanie kwantowe, będące jedną z definiujących cech cieczy spinowej typu Kitajewa, może zostać spowodowane skończonym oddziaływaniem spin-orbita. W tym celu śledzimy ewolucję tzw. splątania spinowo-orbitalnego wraz z rosnącym sprzężeniem spin-orbita na przykładzie minimalnego jednowymiarowego modelu dla izolatora Motta ze skończonym sprzężeniem spin-orbita, składającego się ze spinowo-orbitalnego oddziaływania nadwymiany (typu Kugela-Khomskiego) z członem Kugela-Khomskiego o symetrii $\text{SU}(2) \otimes \text{SU}(2)$ oraz sprzężenia spin-orbita (na węźle) typu Isinga. W szczególności, badamy związek

między splątaniem kwantowym dotyczącym efektywnych stopni swobody narzuconych przez sprzężenie spin-orbita a splątaniem spinowo-orbitalnym w ramach pełnego modelu spinowo-orbitalnego. W rezultacie okazuje się, że nawet klasyczne splątanie spin-orbita jest w stanie wzmóc bądź wyciszyć splątanie spinowo-orbitalne. Zamieszczamy również dyskusję ogólności powyższego rezultatu.