

Líquidos de spin quirais na rede de Kagome

João Augusto S. S.¹, Fabrizio G. Oliviero², Rodrigo G. Pereira^{2,3} e Eric C. Andrade¹.

¹ Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo

¹ Departamento de Física Teórica e Experimental, Universidade Federal do Rio Grande do Norte

¹ International Institute of Physics, Universidade Federal do Rio Grande do Norte

Resumo: Inspirados pelo material Kapellasita ($Cu_3Zn(OH)_6Cl_2$), investigamos um líquido de spin quiral sem gap em um modelo de Heisenberg modificado utilizando técnicas como monte carlo variacional, e construção de Partons. Os nossos resultados corroboram com estudos teóricos anteriores, delimitando uma região energeticamente favorável para o líquido de spin no diagrama de fases do modelo. Além disso, investigamos a instabilidade dessa fase de líquido de spin por fases magnéticas ordenadas encontradas através do formalismo clássico para $S \gg 1$.

Referências:

[1] Zou, Y., Kanoda, K., Ng, T. Quantum spin liquid states. Rev. Mod. Phys. 89,025003 (2017).

[2] Fåk, B., Kermarrec, E., Messio L., Bernu, B. et al. Kapellasite: A Kagome Quantum Spin Liquid with competing interactions. Phys. Rev. Lett. 109,037208 (2012)

[3] Bieri, S., Lhuillier C., and Messio, L. Projective symmetry group classification of chiral spin liquids. Phys. Rev. B 93,094437 (2016).

[4] Oliviero, Fabrizio Giovanni. Gapless chiral spin liquid from a parton mean-field theory on the kagome lattice. 2020. 81f. Dissertação (Mestrado em Física) - Centro de Ciências Exatas e da Terra, Universidade Federal do Rio Grande do Norte, Natal, 2020.

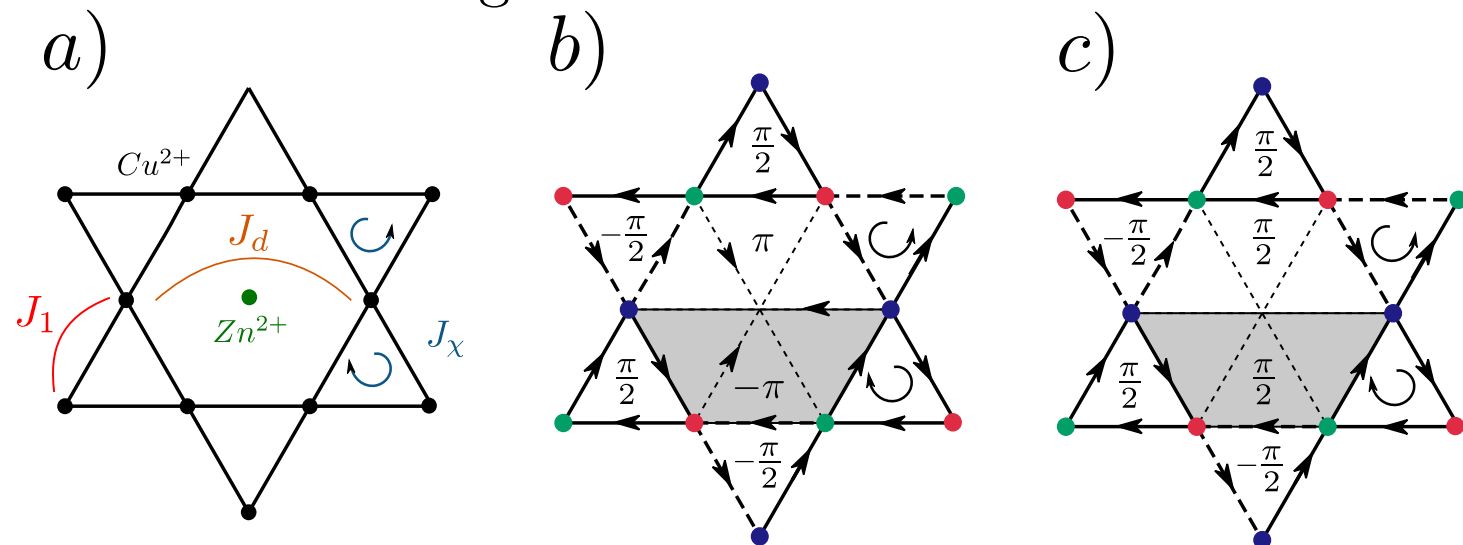
Contextualização, motivação e objetivos

- Devido à frustração geométrica, a rede de Kagome é um ambiente rico para o estudo de líquidos de spin [1]. Mais especificamente, o material Kapellasita possui evidências experimentais da existência de um líquido de spin sem gap e de regiões no espaço de fase dominadas por fases ordenadas conhecidas [2]. Nesse contexto, investigamos o modelo de Heisenberg modificado

$$H = J_1 \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{S}(\mathbf{r}_i) \cdot \mathbf{S}(\mathbf{r}_j) + J_d \sum_{ij \in \hexagon} \mathbf{S}(\mathbf{r}_i) \cdot \mathbf{S}(\mathbf{r}_j) + J_\chi \sum_{ijk \in \triangle \nabla} \mathbf{S}(\mathbf{r}_i) \cdot [\mathbf{S}(\mathbf{r}_j) \times \mathbf{S}(\mathbf{r}_k)],$$

com $J_1 < 0$, $J_d > 0$ e $J_\chi < 0$ ($J_\chi > 0$) nos triângulos para cima (baixo) na rede de Kagome.

- Nossos objetivos consistiram em investigar regiões do espaço de fase onde o líquido de spin e possíveis fases ordenadas pudessem ser favorecidas energeticamente.



$$\kappa_1 = \frac{3}{8} J_\chi \xi_1^2 - J_1 \xi_1, \quad \kappa_d = J_d \xi_d$$

$$f_{i\uparrow}^\dagger f_{j\uparrow} = \frac{\xi_{ij}}{2} + \delta_{ij,\uparrow}$$

Gráfico 1: Ansatz físico explorado no modelo de Heisenberg modificado [3] e constantes de acoplamento relevantes no tratamento de campo médio.

Métodos e técnicas

- Utilizando o método de construção de partons junto de funções de onda projetadas de Gutzwiller [1], representamos os spins como

$$\hat{S}_i^+ = f_{i\uparrow}^\dagger f_{i\downarrow}, \hat{S}_i^- = f_{i\downarrow}^\dagger f_{i\uparrow} \quad e \quad \hat{S}_i^z = \frac{1}{2} (n_{i\uparrow} - n_{i\downarrow})$$

vinculados por

$$|\Psi\rangle = \hat{P}_G |\Psi_{MFT}\rangle = \prod_i (n_{i\uparrow} - n_{i\downarrow})^2 |\Psi_{MFT}\rangle$$

e estudamos a energia do estado fundamental do CQSL através do método de Monte Carlo variacional.

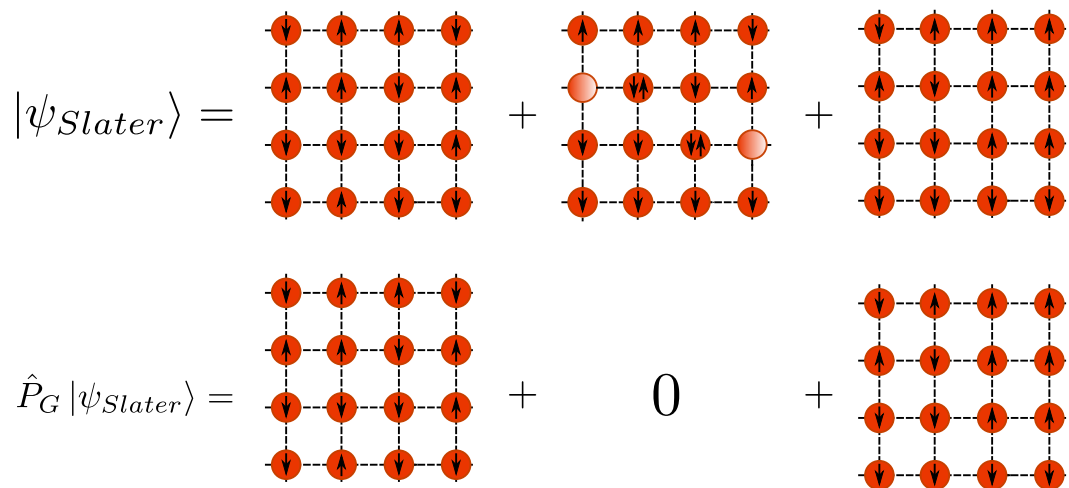


Gráfico 2:
Representação
pictórica das
funções de onda
projetadas.

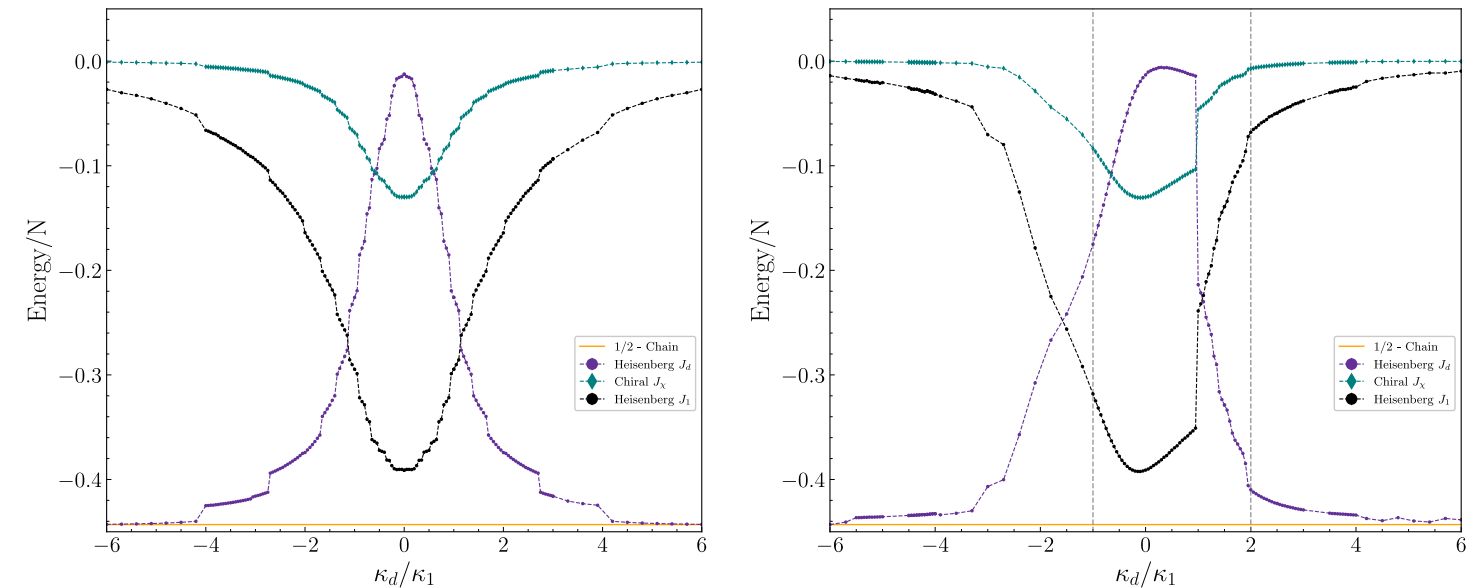


Gráfico 3: Contribuição da energia pelas interações de Heisenberg (verde e preto) e quiral (roxo) para o ansätz I, II (direita) e III (esquerda). A solução pelo ansätz de Bethe da cadeia antiferromagnética é apresentada (laranja) para comparação

- Além disso, para o limite clássico $S \gg 1$ em que o efeito de spins na rede pode ser aproximado pela ação de campos locais, investigamos possíveis fases ordenadas que podem ser favorecidas no modelo através do método de gradiente.

Resultados e conclusão

- Região classicamente desordenada onde o líquido de spin (CQSL) é favorecido;
- Presença de três novas fases ordenadas (Octahedral-2, FM-Stripe e FM-Chains);

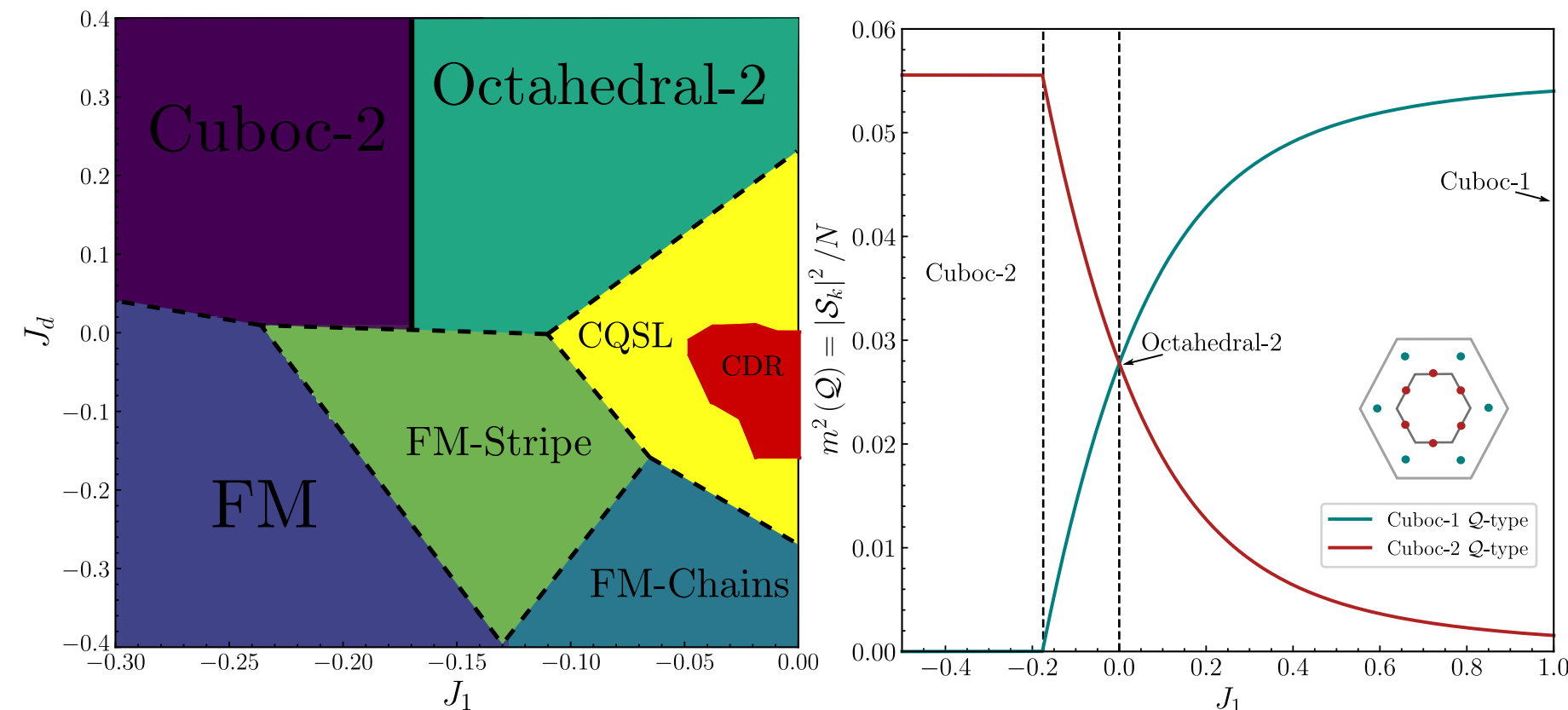


Gráfico 4: (Esquerda) Diagrama de fase do modelo. (Direita) Transição de fase entre as fases Cuboc-2, Octahedral-2 e Cuboc-1 vista pelo parâmetro de ordem.

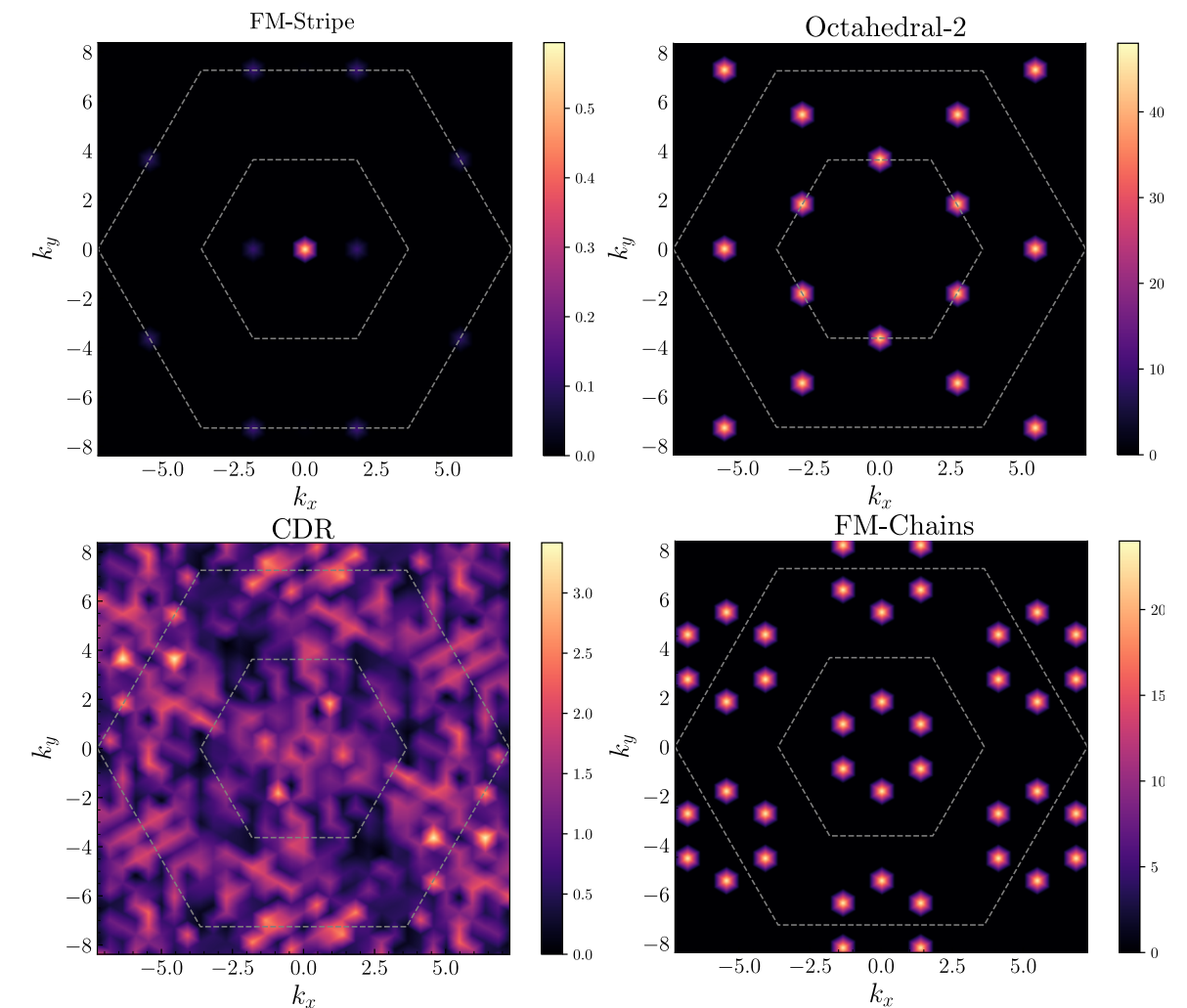


Gráfico 5: Fator de estrutura magnético para as fases ordenadas e para a região classicamente desordenada.

Agradecimentos:



processo
88887.474253/2020-00

