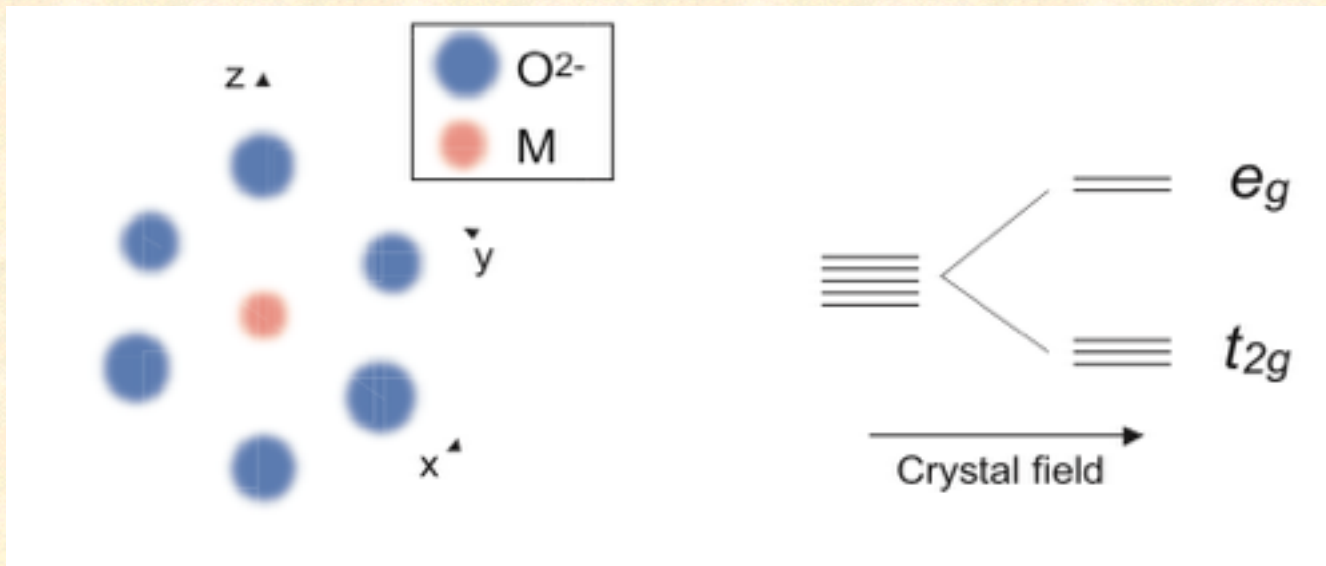


Összefonódás szerepe többpályás rendszerekben

Hagymási Imre, Sólyom Jenő, Legeza Örs
MTA Wigner Fizikai Kutatóközpont
Budapest

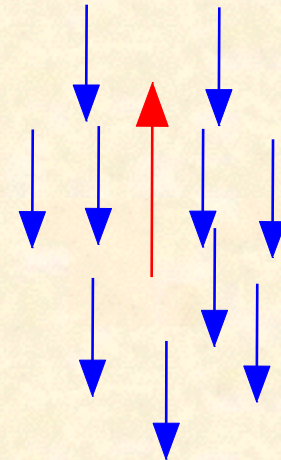
Bevezetés

- átmenetifém-oxidok, d elektronrendszerek
- Hund-csatolás szerepe:
 - mágneses korrelációk felerősítése
 - Mott-átalakulás többpályás rendszerekben: pl. $(\text{Ca}, \text{Sr})_2\text{RuO}_4$



Bevezetés

- lokalizált és itineráns elektronok
- Coulomb-kölcsönhatás, Hund-csatolás (ferromágneses korreláció)
- hibridizáció a lokalizált és itineráns elektronok között: Kondo-effektus, szingulett

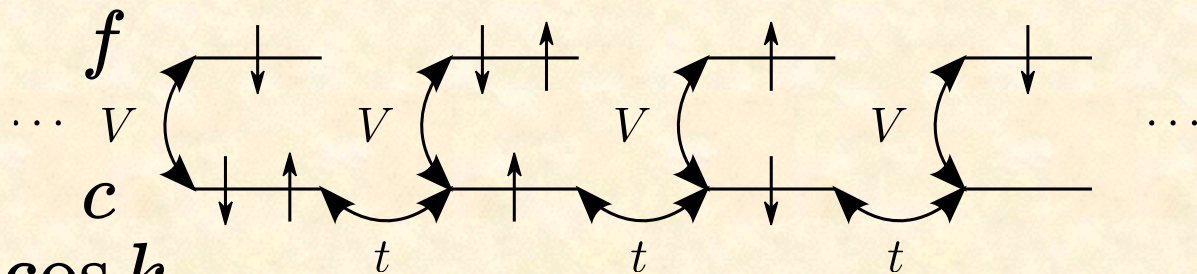


Versengő kölcsönhatások, kvantumos fázisátalakulás?

A vizsgálandó modell

- legegyszerűbb modell két különböző típusú elektronnal: periodikus Anderson-modell:

$$\mathcal{H}_{\text{EPAM}} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma} + \varepsilon_f \sum_{j\sigma} \hat{f}_{j\sigma}^{\dagger} \hat{f}_{j\sigma} \\ + V \sum_{j\sigma} (\hat{f}_{j\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{j\sigma} + \hat{c}_{j\sigma}^{\dagger} \hat{f}_{j\sigma}) + H_{\text{int}}$$



$$\varepsilon_{\mathbf{k}} = -2t \cos k$$

Kölcsönhatások és a Hund-csatolás figyelembevétele

- forgatás invariáns Kanamori-féle Hamilton-operátor:

$$H_{\text{int}} = U \sum_j \hat{n}_{j\uparrow}^{(f)} \hat{n}_{j\downarrow}^{(f)} + U \sum_j \hat{n}_{j\uparrow}^{(c)} \hat{n}_{j\downarrow}^{(c)} + \sum_{j\sigma\sigma'} (U_{cf} - J\delta_{\sigma\sigma'}) \hat{n}_{j\sigma}^{(c)} \hat{n}_{j\sigma'}^{(f)} \\ - J \sum_j \left[\left(\hat{c}_{j\uparrow}^\dagger \hat{c}_{j\downarrow} \hat{f}_{j\downarrow}^\dagger \hat{f}_{j\uparrow} + \hat{c}_{j\uparrow}^\dagger \hat{c}_{j\downarrow}^\dagger \hat{f}_{j\uparrow} \hat{f}_{j\downarrow} \right) + \text{H. c.} \right]$$

$$U = U_{cf} + 2J$$

Módszerek és célok

- DMRG módszer, nyitott határfeltétel
- szimmetrikus, félig töltött modell

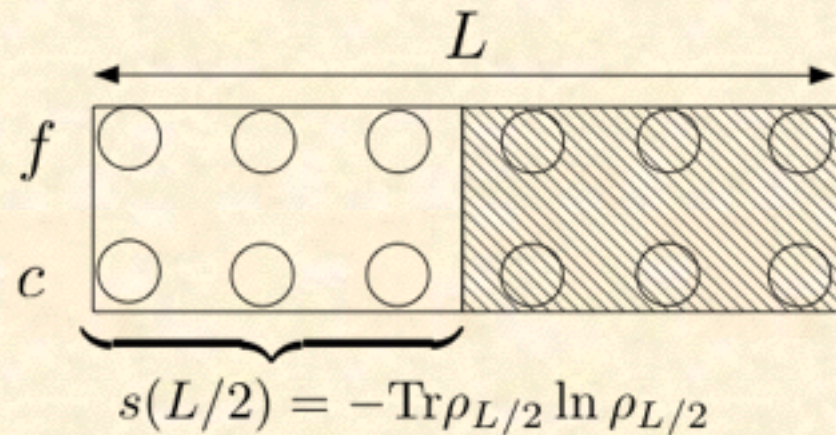
Célok:

- von Neumann-entrópiák $\Rightarrow$ kvantumoz
fázisátalakulások
- alapállapot tulajdonságainak meghatározása redukált
sűrűségmátrixok és kölcsönös információ segítségével

Összefonódási entrópia

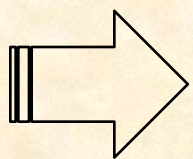
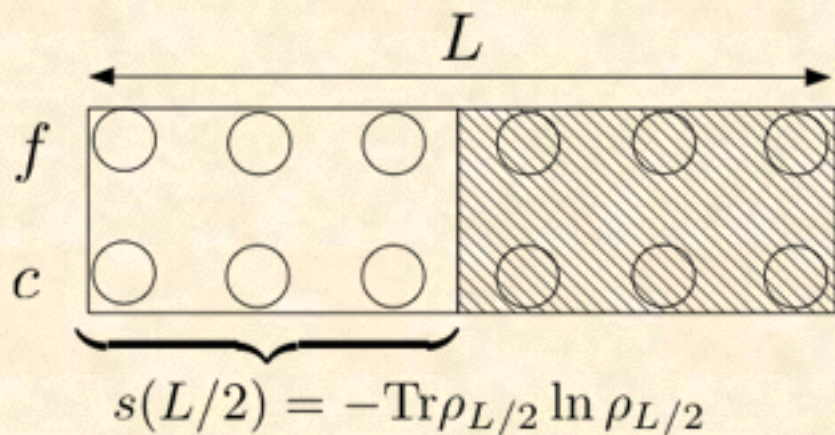
egydimenziós, kritikus rendszerben:

$$s(L/2) \sim c/6 \ln((2L/\pi a))$$

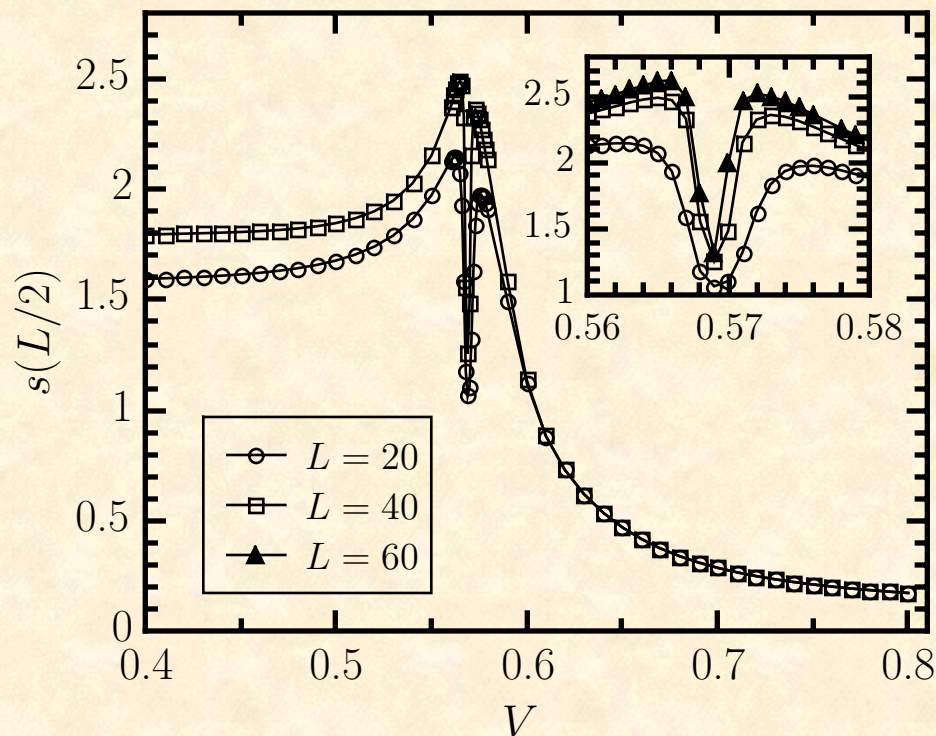


kritikus pont környékén anomális viselkedés!

Összefonódási entrópia

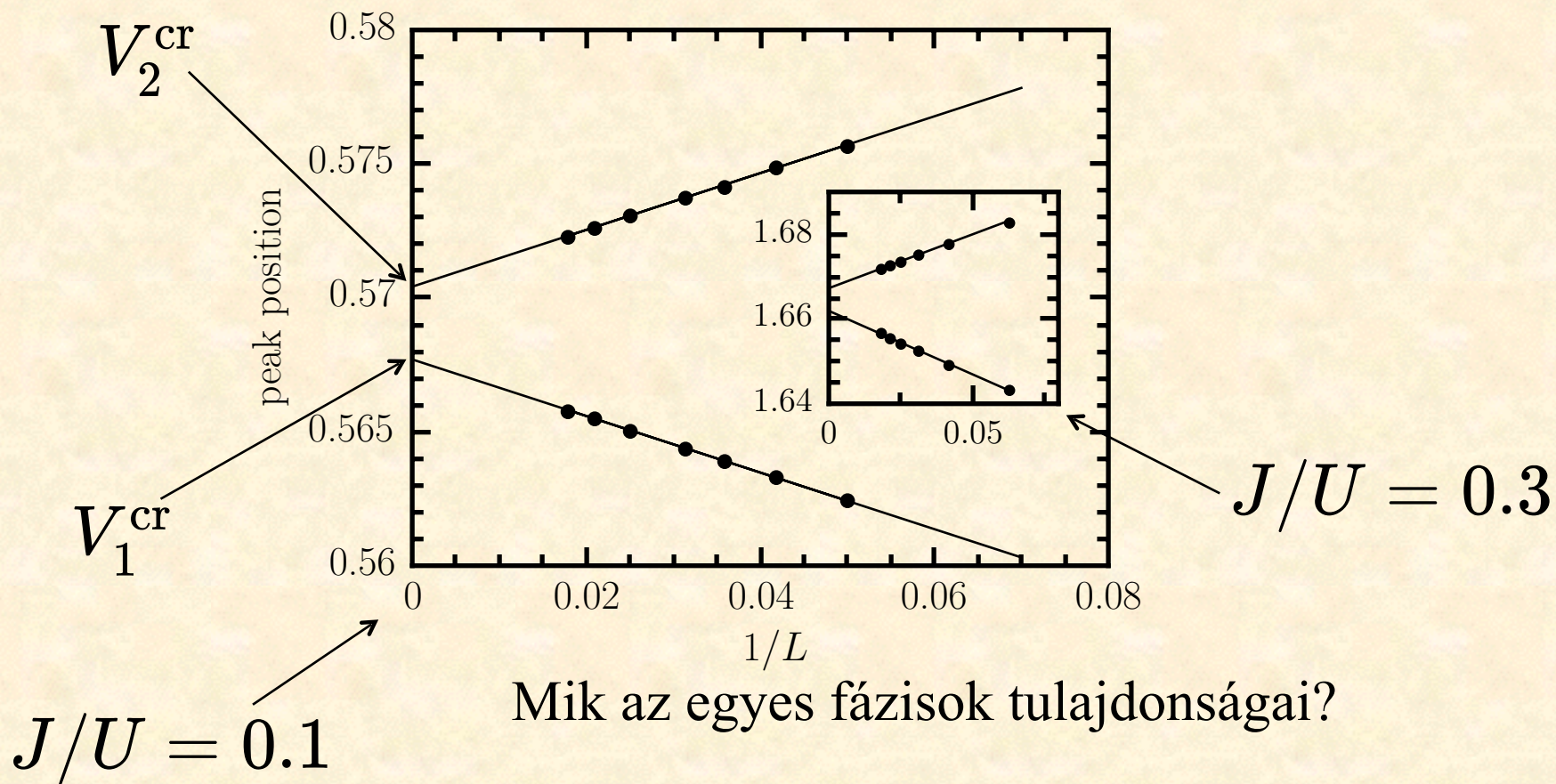


két kvantumos
fázisátalakulás?



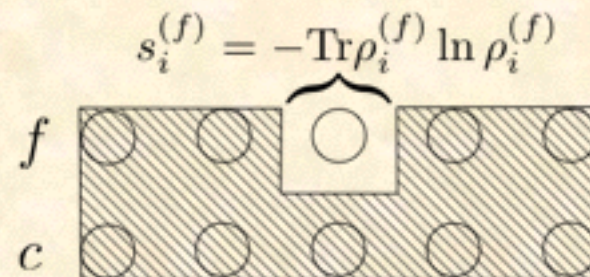
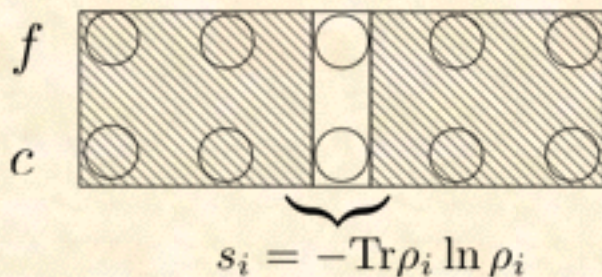
$$U = 4W, J/U = 0.1$$

Csúcspozíciók végesméret-skálázása



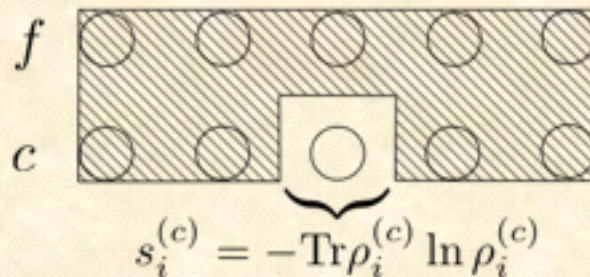
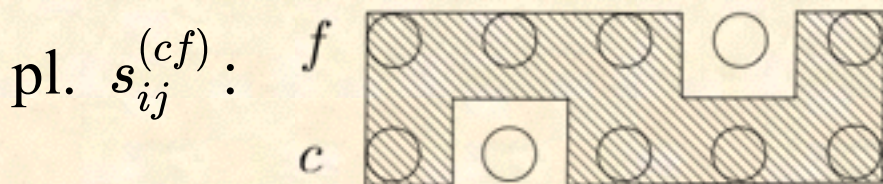
Von Neumann-entrópiák és kölcsönös információ

- egyrácspontos entrópia:
- parciális egyrácspontos entrópiák:



- parciális kétrácspontos entrópiák:

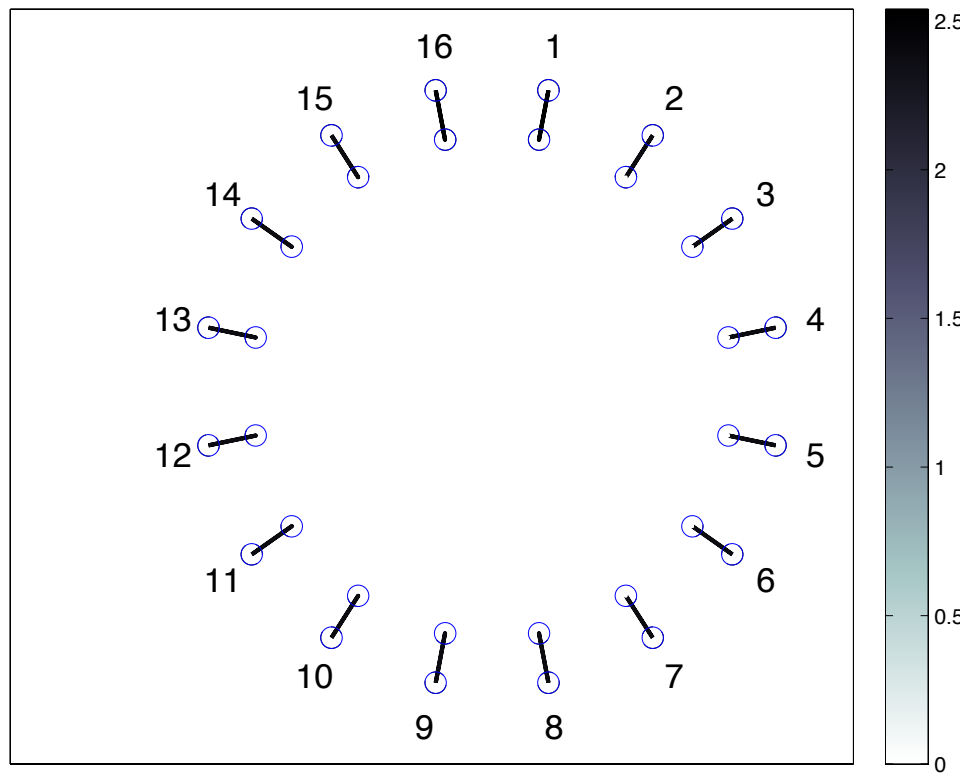
$$s_{ij}^{(ab)} = -\text{Tr} \rho_{ij}^{(ab)} \ln \rho_{ij}^{(ab)}, \quad a, b \in \{c, f\}$$



kölcsönös információ: $I_{ij}^{(ab)} = s_i^{(a)} + s_j^{(b)} - s_{ij}^{(ab)}$

Kondo-szingulett fázis $V > V_2^{\text{cr}}$

összefonódási kép:



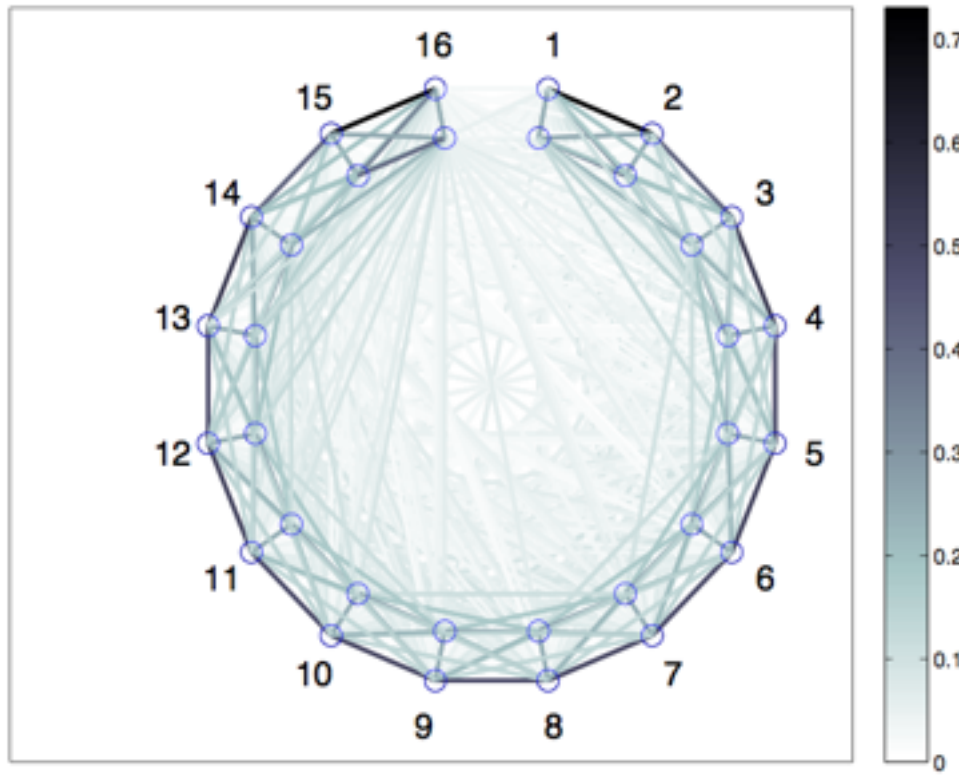
$\rho_{L/2,L/2}^{(cf)}$ domináns sajátértékéhez tartozó sajátvektor:

$$\phi_{L/2,L/2}^{(cf)} = 0.5574(|\uparrow\rangle_{L/2}^{(c)}|\downarrow\rangle_{L/2}^{(f)} - |\downarrow\rangle_{L/2}^{(c)}|\uparrow\rangle_{L/2}^{(f)}) + 0.4350(|\uparrow\downarrow\rangle_{L/2}^{(c)}|0\rangle_{L/2}^{(f)} + |0\rangle_{L/2}^{(c)}|\uparrow\downarrow\rangle_{L/2}^{(f)})$$

szingulett állapot!

Haldane-fázis $V < V_1^{\text{cr}}$

összefonódási kép:



$\rho_{L/2, L/2}^{(cf)}$ domináns sajátértékéhez tartozó sajátvektor:

$$\phi_{L/2, L/2}^{(cf), 1} = |\uparrow\rangle_{L/2}^{(c)} |\uparrow\rangle_{L/2}^{(f)}$$

$$\phi_{L/2, L/2}^{(cf), 2} = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\rangle_{L/2}^{(c)} |\downarrow\rangle_{L/2}^{(f)} + |\downarrow\rangle_{L/2}^{(c)} |\uparrow\rangle_{L/2}^{(f)}),$$

$$\phi_{L/2, L/2}^{(cf), 3} = |\downarrow\rangle_{L/2}^{(c)} |\downarrow\rangle_{L/2}^{(f)}$$

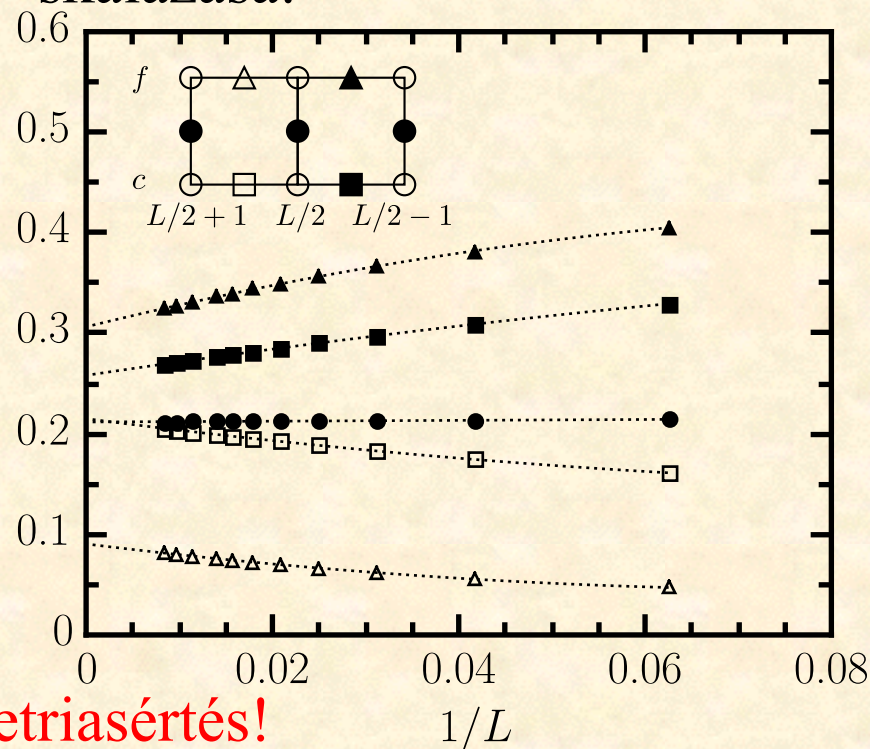
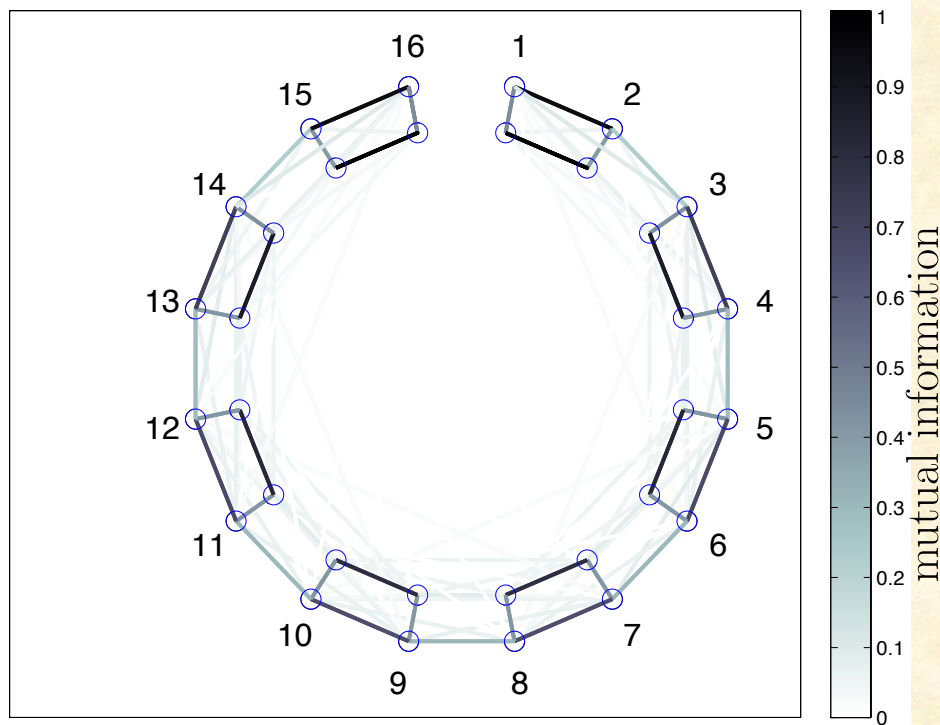
triplett állapot!

$S = 1$ lánc, antiferromágneses csatolással

Dimerizált fázis $V_1^{\text{cr}} < V < V_2^{\text{cr}}$

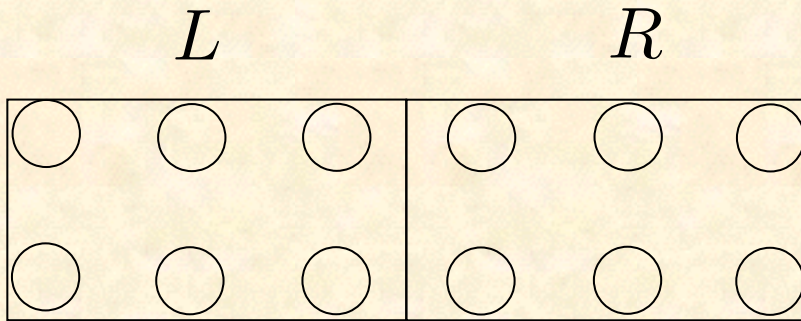
összefonódási kép:

kölcsönös információ
komponensek végesméret-
skalázása:



Spontán szimmetriasértés!

Összefonódási spektrum



$$|\Psi\rangle = \sum_{ab} \Psi_{ab} |\Psi_a\rangle_L |\Psi_b\rangle_R$$

Schmidt-dekompozíció után:

$$|\Psi\rangle = \sum_j \lambda_j |\phi_j\rangle_L |\phi'_j\rangle_R$$

$$\rho_L = \sum_j \lambda_j^2 |\phi_j\rangle_{LL} \langle \phi_j|$$

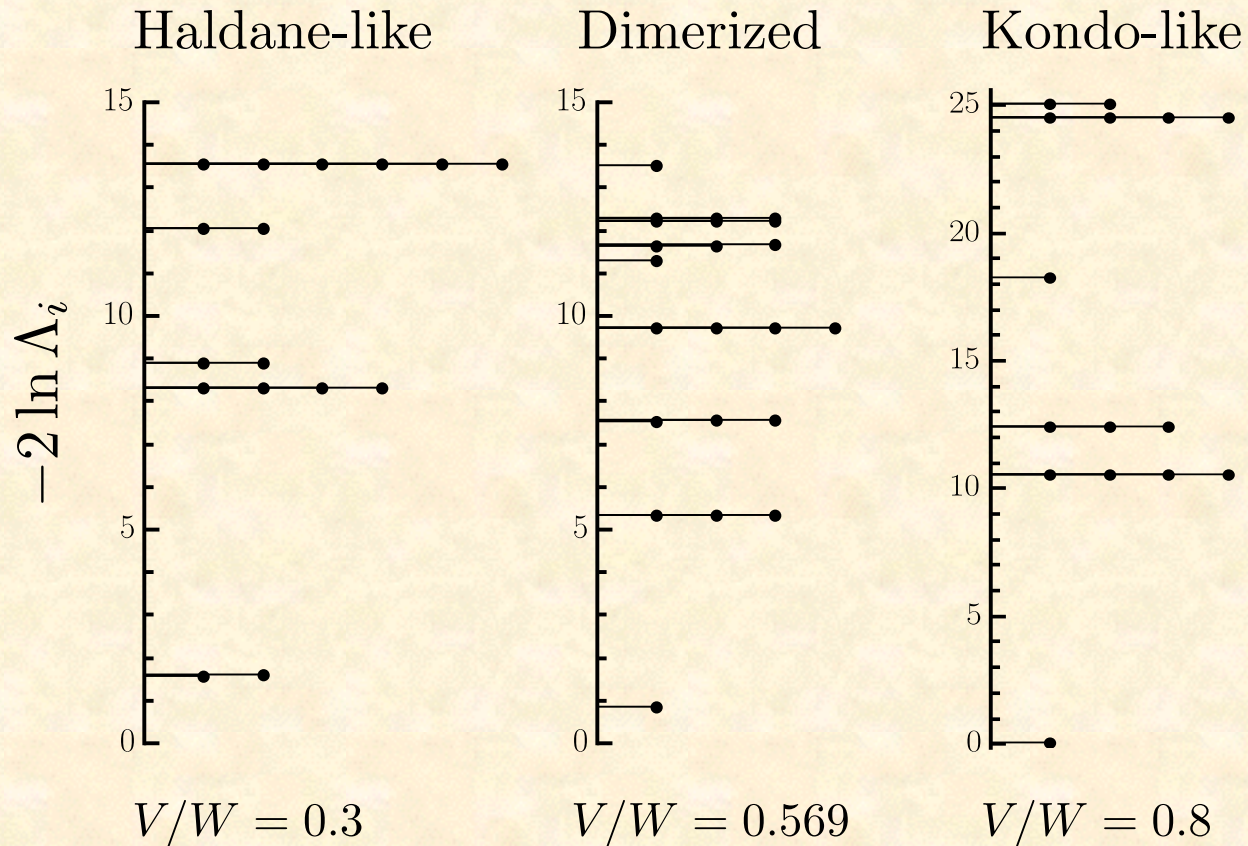
$$\{\Lambda_j\}, \quad (\Lambda_j = \lambda_j^2)$$

$$\downarrow$$

$$s(L/2) = - \sum_j \Lambda_j \ln \Lambda_j$$

Haldane-fázisban a sajátértékek multiplicitása mindig páros!

Összefonódási spektrum



Összegzés

- periodikus Anderson-modell
- Hund-csatolás és Kondo-effektus versengése
- von Neumann-entrópiák, kölcsönös információ
- összefonódási spektrum
- két új fázis: Haldane, dimerizált
- I. Hagymási, J. Sólyom, Ö. Legeza, PRB **92** 035108 (2015).
- I. Hagymási, J. Sólyom, Ö. Legeza, PRB **90** 125137 (2014).