

Doktori (PhD) értekezés tézisei

**A spin-pálya kölcsönhatás sokrészecskés
kvantumrendszerekre gyakorolt hatása**

Kucska Nóra

Témavezető: Dr. Gulácsi Zsolt



DEBRECENI EGYETEM

Fizikai Tudományok Doktori Iskola

Debrecen, 2022

Bevezetés

Dolgozatomban bemutattam a sokrészesekés spin-pálya kölcsönhatás (SOI) hatását különböző sokrészesekés kvantumrendszerekre. Az egzakt számításokat SOI jelenlétében végeztem először szerves vezető polimer láncok-, majd 2D erősen korrelált, nem integrálható rendszer esetén. Az eredményt több, a SOI felületekre és határfelületekre gyakorolt hatását vizsgáló kísérlettel hasonlítottam össze, és ezekkel sajátos mágneses jelenséget magyarázó elméletet állítottam fel.

Először a szerves vezető polimerláncok sávszerkezetét számítottam ki SOI és külső mágneses tér jelenlétében. Megmutattam, hogy a SOI hogyan képes relaxálni a vizsgált ötszögű monomerű vezető polimerekre vonatkozó laposság kondíciókat.

Majd a SOI 2D erősen korrelált rendszerekre gyakorolt hatásának vizsgálatához egy reális, nem integrálható modell Hamilton operátorát írtam fel. Mivel a SOI csatolás általában több nagyságrenddel kisebb, mint az elektron-elektron kölcsönhatás csatolása, az alacsonyrendű közelítő módszerek ilyen esetben nem tudnak megoldást adni. Tekintettel a modell nem integrálhatóságára, vizsgálatom során egy olyan egzakt megoldási módszert alkalmaztam, amely 2D sokrészesekés, kétsávós, nem integrálható, kölcsönható kvantumrendszerekre alkalmazható, és egzakt alapállapotot biztosít spin-pálya kölcsönhatás jelenlétében. Ez a módszer a pozitív szemidefinit operátorok (PSO) tulajdonságain alapszik, és korábban már többször sikeresen alkalmazták nem integrálható rendszerek vizsgálatára. Tudomásom szerint kétdimenziós fermionikus rendszerekre SOI jelenlétében kapott egzakt eredmények a munkámat megelőzően nem álltak rendelkezésre a szakirodalomban.

A PSO módszerrel egzakt alapállapoti hullámfüggvényeket kaptam a 2D modellhez SOI jelenlétében. Magas rendszertöltés esetén ferromágneses alapállapotot találtam, ahol a töltéshordozók mobilitása SOI-val fokozható. Megmutattam, hogy a modell és a kapott eredmények hogyan alkalmazhatók arany nanoszemcsék felületére, ahol méretfüggő ferromágnesesség figyelhető meg.

Tézis Pontok

A tézispontok következő listája a sokrészesecskés spin-pálya csatolás sokrészesecskés kvantumrendszerekre gyakorolt hatásaival kapcsolatos munkámat foglalja össze:

1. Lapos sáv kondíciókat vizsgáltam ötszög, vezetők polimerláncok esetén, SOI jelenlétében. A vizsgált rendszer sávszerkezetét a Hamilton operátor egyrészesecske járulékanak k -térbe transzformált, diagonalizált mátrixának szekuláris egyenletéből kaptam meg. Először is megmutattam, hogy SOI nélkül a lapos sáv kondíciók merev, a Hamilton operátor paraméterek között létrejövő összefüggésekhez vezetnek két Hamilton hopping paraméter esetében; a cellák közötti hopping nagyság t_c -, és az ötszögű egységcella antennája mentén létrejött hopping erősség t_f esetén. Megmutattam, hogy ezeknek a paramétereknek a lapos sáv kondíciók által meghatározott értékről történő megváltoztatása hogyan eredményezi a lapos sávok diszperzív sávokká válását.

Ezt követően bemutattam, hogy a SOI hogyan tudja visszalaposítani a diszperzív sávokat és ezáltal lazítani a merev lapos sáv kondíciókat.

a) Először abban az esetben, amikor a lapos sáv megőrizte az eredeti helyzetét az energiaskálán (E -t). Ebben az esetben a SOI képes volt kompenzálni a t_c értéktől való 20-30%-os eltérést. Kis nagyságú, belső SOI esetén $\bar{\lambda} = \lambda = \lambda_c$ megoldásokat kaptam meg $B = 0$ és $B \neq 0$ esetben.

b) Megvizsgáltam, hogyan változnak a lapos sáv kondíciók, ha hagyjuk az újralapított sávot az energiaskála új pozíciójában megjelenni (ΔE). Ebben az esetben egy lapos sáv feltétellel kevesebb van, amiből kiszámítottam ΔE -t, a kialakult lapos sáv új pozícióját. Így a merev lapos sáv feltételek már nem jelentenek megszorítást többé. A lapos sáv energiája a kezdeti lapos sáv energiájához viszonyítva ($E/\Delta E$) 10-20% körül változott egy tetszőleges energiaskálán. A korábban megszorított t_f, t_c paraméterek 20-30%-kal változtathatók $B = 0$ -nál, és a külső mágneses tér jelenléte még jobban fokozza a SOI a lapos sáv kondíció merevségét relaxáló képességeit.

2. Egy 2D, itineráns, erősen korrelált, kétsávós rendszert vizsgáltam, ahol a két sáv közül az egyik tartalmazta az erősen korrelált töltéshordozókat. Figyelembe vettem első szomszéd hoppingot és hibridizációt, lokális egyrészesce potenciált és hibridizációt, Hubbard típusú kölcsönhatást a korrelált sávban valamint SOI-t.
 - a) A vizsgált rendszer sávszerkezetét számítottam ki, először a Hamilton operátor egyrészesce járulékat k -térbe transzformáltam, majd megoldottam a szekuláris egyenletét a Hamilton operátor egyrészesce járulékból kapott diagonalizált mátrixnak. Megmutattam, hogy a SOI hatására a sávok felhasadnak, így megszűnik a sávok spinvetület szerinti dupla degenerációja.
 - b) A pozitív szemidefinit operátorok tulajdonságain alapuló módszerrel meghatároztam a rendszer egzakt alapállapot hullámfüggvényeit alacsony és magas koncentrációs határesetben. Magas koncentrációs határesetben alapállapot várható értékeket számoltam és ezekkel kimutattam, hogy a levezetett alapállapot ferromágneses, a teljes spin z várható érték kiszámításának segítségével. Az r -függő hopping várható értéknél kimutattam, hogy a SOI növekedésével növekszik, ráadásul az értéke függ a spin-vetülettől.
3. A ferromágneses, nagy koncentrációs határesetben kapott alapállapot hullámfüggvény felhasználásával lehetséges magyarázatot adtam az arany nanoszemcsék esetében tapasztalható méretfüggő ferromágnességre. Az arany nanoszemcsék felületét a 2D erősen korrelált, kétsávós itineráns, spin $1/2$ elektronokra modelleztem, SOI jelenlétében és periodikus határfeltételekkel felhasználásával. A ferromágnesség az Au nanoszemcsékben akkor lép fel, amikor azok elérik a nano méretet, ahol a részecskék nagy része a felszínen van, így a felületi hatások dominálnak és a 2D modell ferromágneses alapállapota válik relevánssá. A modellben a nanoszemcsék felületén lévő bevonatok hatását a mágnesezettségre a SOI erősségére gyakorolt hatásukkal magyaráztam. A modellem esetében azt tapasztaltam, hogy a SOI erőssége befolyásolja a rendszer teljes spin z vetületet a rendszerben.



Nyilvántartási szám: DEENK/118/2022.PL
Tárgy: PhD Publikációs Lista

Jelölt: Kucska Nóra
Doktori Iskola: Fizikai Tudományok Doktori Iskola
MTMT azonosító: 10060163

A PhD értekezés alapjául szolgáló közlemények

Idegen nyelvű tudományos közlemények hazai folyóiratban (2)

1. **Kucska, N.**, Gulácsi, Z.: Flat-band conditions influenced by spin-orbit interaction in the presence of external magnetic field.
Multidiszciplináris tudományok. 11 (5), 171-179, 2021. ISSN: 2062-9737.
DOI: <http://dx.doi.org/10.35925/j.multi.2021.5.17>
2. **Kucska, N.**, Gulácsi, Z.: Effects of spin-orbit interaction on surfaces and interfaces.
Mater. sci. Engineering Miskolc. 44 (2), 43-53, 2019. ISSN: 2063-6792.
DOI: <http://dx.doi.org/10.32974.mse.2019.005>

Idegen nyelvű tudományos közlemények külföldi folyóiratban (4)

3. **Kucska, N.**, Gulácsi, Z.: Spin-orbit interactions may relax the rigid conditions leading to flat bands.
Phys. Rev. B. 105 (8), 1-16, 2022. ISSN: 2469-9950.
DOI: <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.105.085103>
IF: 4.036 (2020)
4. **Kucska, N.**, Gulácsi, Z.: Nanograin ferromagnets from nonmagnetic bulk materials: The case of gold nanoclusters.
Int. J. Mod. Phys. B. 35 (10), 1-19, 2021. ISSN: 0217-9792.
DOI: <http://dx.doi.org/10.1142/S0217979221501484>
IF: 1.219 (2020)
5. **Kucska, N.**, Gulácsi, Z.: Itinerant surfaces with spin-orbit couplings, correlations and external magnetic fields: exact results.
Philos. Mag. Lett. 99 (3), 118-125, 2019. ISSN: 0950-0839.
DOI: <http://dx.doi.org/10.1080/09500839.2019.1634291>
IF: 0.836
6. **Kucska, N.**, Gulácsi, Z.: Exact results relating spin-orbit interactions in two-dimensional strongly correlated systems.
Philos. Mag. 98 (18), 1708-1730, 2018. ISSN: 1478-6435.
DOI: <http://dx.doi.org/10.1080/14786435.2018.1441559>
IF: 1.855





**DEBRECENI
EGYETEM**

**DEBRECENI EGYETEM
EGYETEMI ÉS NEMZETI KÖNYVTÁR**

H-4002 Debrecen, Egyetem tér 1, Pf.: 400
Tel.: 52/410-443, e-mail: publikaciok@iib.unideb.hu

A közlő folyóiratok összesített impakt faktora: 7,946

**A közlő folyóiratok összesített impakt faktora (az értekezés alapján szolgáló közleményekre):
7,946**

A DEENK a Jelölt által az iDEa Tudóstérbe feltöltött adatok bibliográfiai és tudományometriai ellenőrzését a tudományos adatbázisok és a Journal Citation Reports Impact Factor lista alapján elvégezte.

Debrecen, 2022.03.21.



Short thesis for the degree of doctor of philosophy (PhD)

**The effects of spin-orbit coupling on many-body
quantum systems**

by Nóra Kucska

Supervisor: Dr. Zsolt Gulácsi



UNIVERSITY OF DEBRECEN

Doctoral School of Physics

Debrecen, 2022

Introduction

In my dissertation I presented the influence of the many-body spin-orbit interaction (SOI) on different many-body quantum systems. I performed exact calculations in the presence of SOI, first in the case of organic conducting polymer chains and then in the case of a 2D strongly correlated, non-integrable system. The results were compared to several experiments relating the effects of SOI on surfaces and interfaces, and with them theories explaining peculiar magnetic phenomena was established.

First I calculated the band structure of organic conducting polymer chains in the presence of SOI and external magnetic field. I showed how SOI is able to relax the rigid flat band conditions of the studied conductive polymers with pentagonal monomer.

Then to investigate the effects of the SOI on 2D strongly correlated systems I constructed the Hamiltonian of a realistic, non-integrable model. Since the SOI coupling is usually many orders of magnitude smaller, than the coupling of the electron-electron interaction the perturbative methods cannot provide solutions. Also considering the model is non-integrable I used an exact solution method in my study, which can be applied to two-band non-integrable systems, operates on a 2D many-body quantum interacting system, and provides an exact ground state in the presence of spin-orbit interaction. This method is based on the properties of positive semidefinite operators (PSOs) and it has been successfully applied to study non-integrable systems many times before. To my knowledge exact results for two dimensional fermionic systems with SOI were however not available in the literature prior to my work.

With the PSO method I obtained exact ground state wave functions for the 2D model with SOI. In high system filling a ferromagnetic ground state was found, where the mobility of the charge carriers found to be enhanceable by SOI. I showed how the model and the found results apply to the surface of golden nanograins, where size dependent ferromagnetism was reported.

Thesis Points

The list of the following thesis points summarizes my work relating the effects of many-body spin-orbit coupling on many-body quantum systems:

1. I investigated flat band conditions for conductive polymers with pentagon chains in the presence of SOI. The band structure of the studied system was obtained from the secular equation of the diagonalized matrix of the one-particle part of the Hamiltonian transformed to k-space. First, I showed, that without SOI the flat bands conditions cause rigid interdependencies between the Hamiltonian parameters for two of the Hamiltonian hopping parameters; the inter-cell hopping strength t_c and the hopping strength along the antenna of the pentagon unit cell t_f . I showed how changing these parameters from the value defined by the flat band conditions cause the flat bands to become dispersive bands.

Then I presented how SOI can reflaten the dispersive bands and thus relax the rigid flat band conditions.

- a) At first this was done while preserving the original position of the flat band on the energy scale (E). In this case 20 – 30% deviation from the t_c value was compensated by the SOI. In the case of small, intrinsic SOI $\bar{\lambda} = \lambda = \lambda_c$ solutions were obtained at $B = 0$ and $B \neq 0$.
- b) I studied how the flat band conditions change if we let the reflattened band appear at a new position on the energy scale (ΔE). In this case one has one less flat band condition, which is used to deduce ΔE , the new positions of the formed flat band. This way the rigid flat band conditions are not restrictive anymore. The energy of the flat band relative to the initial flat band energy ($E/\Delta E$) changed around 10 – 20% on an arbitrary energy scale. The formally restricted parameters t_f, t_c could be changed with around 20 – 30% at $B = 0$ and the presence of external magnetic field enhances the relaxing properties of SOI even more.

2. I studied a 2D, itinerant, strongly correlated, many-body system, with two bands, one of which contained the strongly correlated charge carriers. I took first neighbour hoppings and hybridizations, on-site potentials and hybridizations, Hubbard type interaction in the correlated band and SOI into account.
 - a) I calculated the band structure of the studied system, by first transforming the one-particle part of the Hamiltonian to k -space, then solving the secular equation of the diagonalized one-particle Hamiltonian matrix. I showed that SOI causes the bands to split, ceasing the spin projection double degeneracy of the bands.
 - b) I used the method based on the properties of positive semidefinite operators to deduce the exact ground state wave functions of the system at low-, and high concentration limit. I calculated ground state expectation values in high concentration limit and with them I showed that the deduced ground state is ferromagnetic, by calculating the total spin z expectation value. For the r -dependent mobility I showed that it increases with increasing SOI, moreover it has a spin projection dependency.

3. Using the ferromagnetic ground state wave function in high concentration limit, I provided a possible explanation for the size dependent ferromagnetism experienced in the case of golden nanograins. The surface of golden nanograins was modelled with the 2D strongly correlated, itinerant, spin $1/2$ electrons on lattice, with two bands, SOI and periodic boundary conditions. The ferromagnetism occurs in Au nanograins when they reach nano size, where the majority of the particles is on the surface, thus surface effects become dominant and the ferromagnetic ground state of the 2D model becomes relevant. In this model, I explained the effects on the magnetism of the protective agents on the surface of the nanograins through their influence on the SOI strength. I found in the case of my model, that the SOI strength affects the total spin z projection in the system.



Registry number: DEENK/118/2022.PL
Subject: PhD Publication List

Candidate: Nóra Kucska
Doctoral School: Doctoral School of Physics
MTMT ID: 10060163

List of publications related to the dissertation

Foreign language scientific articles in Hungarian journals (2)

1. **Kucska, N.**, Gulácsi, Z.: Flat-band conditions influenced by spin-orbit interaction in the presence of external magnetic field.
Multidiszciplináris tudományok. 11 (5), 171-179, 2021. ISSN: 2062-9737.
DOI: <http://dx.doi.org/10.35925/j.multi.2021.5.17>
2. **Kucska, N.**, Gulácsi, Z.: Effects of spin-orbit interaction on surfaces and interfaces.
Mater. sci. Engineering Miskolc. 44 (2), 43-53, 2019. ISSN: 2063-6792.
DOI: <http://dx.doi.org/10.32974.mse.2019.005>

Foreign language scientific articles in international journals (4)

3. **Kucska, N.**, Gulácsi, Z.: Spin-orbit interactions may relax the rigid conditions leading to flat bands.
Phys. Rev. B. 105 (8), 1-16, 2022. ISSN: 2469-9950.
DOI: <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.105.085103>
IF: 4.036 (2020)
4. **Kucska, N.**, Gulácsi, Z.: Nanograin ferromagnets from nonmagnetic bulk materials: The case of gold nanoclusters.
Int. J. Mod. Phys. B. 35 (10), 1-19, 2021. ISSN: 0217-9792.
DOI: <http://dx.doi.org/10.1142/S0217979221501484>
IF: 1.219 (2020)
5. **Kucska, N.**, Gulácsi, Z.: Itinerant surfaces with spin-orbit couplings, correlations and external magnetic fields: exact results.
Philos. Mag. Lett. 99 (3), 118-125, 2019. ISSN: 0950-0839.
DOI: <http://dx.doi.org/10.1080/09500839.2019.1634291>
IF: 0.836





**UNIVERSITY of
DEBRECEN**

UNIVERSITY AND NATIONAL LIBRARY

UNIVERSITY OF DEBRECEN

H-4002 Egyetem tér 1, Debrecen

Phone: +3652/410-443, email: publikaciok@lib.unideb.hu

6. **Kucska, N.**, Gulácsi, Z.: Exact results relating spin-orbit interactions in two-dimensional strongly correlated systems.

Philos. Mag. **98** (18), 1708-1730, 2018. ISSN: 1478-6435.

DOI: <http://dx.doi.org/10.1080/14786435.2018.1441559>

IF: 1.855

Total IF of journals (all publications): 7,946

Total IF of journals (publications related to the dissertation): 7,946

The Candidate's publication data submitted to the iDEa Tudóstér have been validated by DEENK on the basis of the Journal Citation Report (Impact Factor) database.

21 March, 2022

