

Többrészrendszer-összefonódás vizsgálata mátrixszorzat-állapotos közelítés alkalmazásával

Máté Mihály, fizikus MSc II.



EÖTVÖS LORÁND TUDOMÁNYEGYETEM
TUDOMÁNYOS DIÁKKÖRI DOLGOZAT

Témavezetők:
Dr. Legeza Örs
Dr. Szalay Szilárd



WIGNER FIZIKAI KUTATÓKÖZPONT

2017. január

Kivonat

Az erősen korrelált rendszerek és kondenzált anyagok kutatási területén jól ismert Haldane-fázis a 2016-os év során kiemelt figyelmet kapott a topologikus fázisok témájában kiadott fizikai Nobel-díjnak köszönhetően. Az úgynevezett bilineáris-bikvadratikus modell az egyik legalapvetőbb modell, mely a Haldane-fázis tulajdonságait visszaadja a fázistér egy speciális pontjában, ami a szakirodalomban Affleck–Kennedy–Lieb–Tasaki-modellként ismert. E modell megoldása egyben a legegyszerűbb a mátrixszorzat-állapotok (MPS) között, melyek az úgynevezett sűrűségmátrixos renormálásicsoport-algoritmus (DMRG-algoritmus) által kapható megoldások struktúrái. A spinnek közötti párkorrelációk és párösszefonódás alapvető eszközök az ilyen modellek vizsgálatánál, azonban a valódi többrész-korrelációs tulajdonságok eddig kiaknázatlan lehetőségeket kínálnak.

TDK-munkámban a bilineáris-bikvadratikus-, és a J_1 – J_2 Heisenberg-modellben vizsgálom a többrészrendszer-korrelációkat és összefonódottságot analitikus és numerikus (DMRG, MPS) módszerekkel. A fázistér különböző pontjaiban (kritikus-, dimerizált- és Haldane-fázisok) meghatározom a különböző sokrész-korrelációk lecsengését.

Tartalomjegyzék

1. Bevezetés	2
1.1. Spinmodellek	2
1.2. Numerikus módszerek	4
1.3. Célkitűzés	5
2. Többrészrendszer-korreláció	6
2.1. Elemi rendszer	6
2.2. Két részrendszer	7
2.3. Kétrész-korreláció mértékei	9
2.4. A többrész-korreláció struktúrája	10
2.5. Többrész-korreláció mértékei	16
3. Sűrűségmátrixos renormálásicsoport (DMRG)	18
4. Mátrixszorzat-állapot (MPS)	20
4.1. Vegyértékkötésű modell	22
5. Eredmények	25
5.1. Feles spinű J_1 - J_2 modell	27
5.2. Bilineáris-bikvadratikus modell	31
6. Összefoglalás	38
Köszönetnyilvánítás	39
1. Függelék	40
Hivatkozások	41

1. Bevezetés

A fémek vezetési tulajdonságai kvantitatíven először a naiv, ám meglepően sikeres Drude-modellen keresztül érhetők meg. A kvantummechanika kibontakozása során azonban nyilvánvalóvá vált, hogy az iontörzsekkel olykor-olykor összeütköző vezetési elektronok klasszikus képe tovább nem tartható. Sommerfeld munkássága során kiderült, hogy a Fermi–Dirac-statisztikának engedelmeskedő elektronok ideális gázát leíró modell jól visszaadja a legegyszerűbb fémek fajhőjét és szuszeptibilitását. Ám például a mágneses tulajdonságok, szupravezetés leírásához a nagy számban jelen lévő elektronok közti kölcsönhatás nem kerülhető meg, sőt az *erősen korrelált rendszerek* vizsgálata során a szokványos közelítő eljárások nem alkalmazhatók. Ezek a problémák az elmúlt évtizedekben új matematikai és numerikus eljárások kidolgozását idézték elő [1], melyekben fontos szerepet kapott a kvantumrendszerekben megjelenő különleges korrelációtípus, az összefonódás [2, 3].

A modern szilárdtest-fizika fő célja a kölcsönható spin- és elektronrendszerek viselkedésének leírása, a kölcsönhatások mibenlétének feltérképezése. Ennek során igyekszünk megalkotni a lehető legegyszerűbb, legkevesebb paramétert tartalmazó modellt, figyelembe véve a kísérleti és elméleti eredményeket, valamint a paraméterek hangolásával jóslatot tenni eddig meg nem figyelt tulajdonságokra.

1.1. Spinmodellek

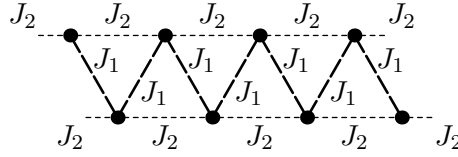
A szilárd testek mágneses tulajdonságainak megértésére a legegyszerűbb leírást a *Heisenberg-modell* szolgáltatja. Ennek tárgyalása során a rendszert felépítő atomok és molekulák belső szerkezetétől eltekintünk, a rácspontokon elhelyezkedő spinek közti kicserélődési kölcsönhatást egy J csatolási együtthatóval jellemezzük. Ha csak az $\langle i, j \rangle$ első szomszédok közti kölcsönhatást vesszük figyelembe, a Hamilton-operátor a

$$H = J \sum_{\langle i, j \rangle} \mathbf{S}_i \mathbf{S}_j \quad (1)$$

alakban írható, ahol $\mathbf{S}_i = (S_i^x, S_i^y, S_i^z)$ az i -edik rácsponton lévő spin operátora, és eleget tesz az $\mathfrak{su}(2)$ Lie-algebra

$$[S_i^\alpha, S_j^\beta] = \delta_{ij} \sum_{\gamma} i\epsilon^{\alpha\beta\gamma} S_j^\gamma \quad (2)$$

kommutációs összefüggésének. A J csatolás előjele adja meg, hogy a minta ferromágneses ($J < 0$) vagy antiferromágneses viselkedésű ($J > 0$). Ferromágneses alapállapotban a spinek egy irányba állnak, a *Goldstone-tétel* következtében a diszperziós reláció a forgatási szimmetria sérülése miatt a $k = 0$ hullámszámtól



1. ábra: A J_1 – J_2 Heisenberg-modellben a rácspontok közti kölcsönhatások illusztrálása.

gap nélkül indul. Antiferromágneses rendszerben a spinek igyekeznek ellentétes irányba beállni. Néel típusú rend esetén a szerkezet két, ellentétes beállású spinet tartalmazó alrácsra bontható nulla eredő mágneszettséget adva. Az elemi gerjesztések diszperziója szintén $k = 0$ -ról energiárás nélkül, ám lineárisan indul.

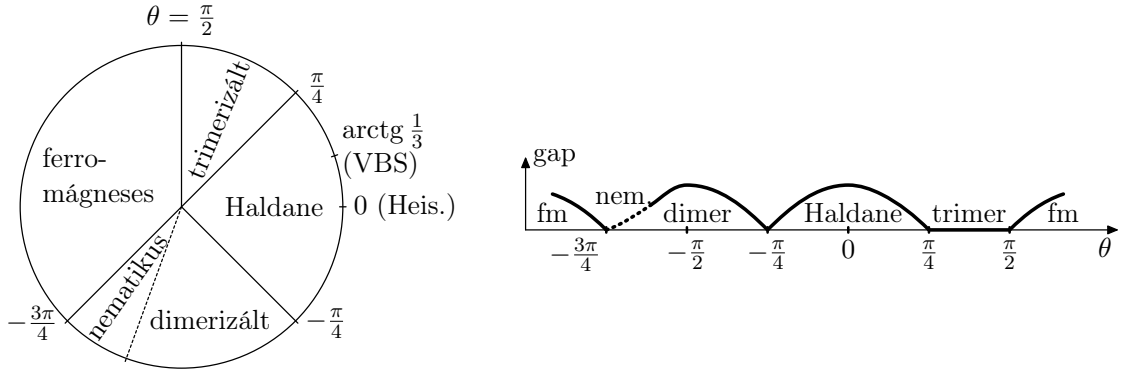
Már korán ismeretessé vált, hogy egyes anyagok – például grafit, kvarc – nagyfokú anizotrópiát mutatnak bizonyos transzportfolyamatokra nézve. Az igazi érdekességet az jelentette, hogy a természetben megfigyelhetők, illetve létrehozhatók olyan anyagcsaládok, amelyekben a mágneses momentummal rendelkező atomok közti kicserélődési kölcsönhatás lényegében egy irányra korlátozódik, ezzel egydimenziós spinláncot eredményezve. Ilyen például a CsNiCl_3 , ami a Ni^{2+} ionok $3d^8$ elektronszerkezete által megvalósított $S = 1$ spinű antiferromágneses láncként viselkedik [4, 5].

Az alacsony dimenziós rendszerek (alrács-)mágneszettségének hőmérsékletfüggését vizsgálva adódik, hogy a kvantumfluktuációk felerősödnek. Egydimenziós izotrop Heisenberg-modellben semmilyen nem nulla hőmérsékleten nem alakulhat ki ferromágneses rend, antiferromágnes esetén pedig már $T = 0$ esetén is instabil a Néel-rend, a rendszer úgynevezett spinfolyadék-állapotban van.

A feles spinű egydimenziós Heisenberg-modell egzaktul megoldható a Bethe-ansatz segítségével, a gerjesztett állapotok spinátforgatással nyerhetők az alapállapotból. Az $S > \frac{1}{2}$ spinű modellekben a Hamilton-operátorban a bilineáris tag mellett magasabb rendű forgatásinvariáns tagok is megjelenhetnek. Ezek a modellek csak az együtthatók speciális megválasztása mellett oldatók meg egzaktul. A Lieb–Schultz–Mattis-tétel [6] szerint egydimenziós, izotrop, rácsállandóval való eltolással szemben invariáns, félegész spinű mágneses rendszerekben az energiaspektrum vagy gap nélküli, és az alapállapot nem degenerált; vagy gappal rendelkezik, és az alapállapot transzlációs szimmetriájának sértése következtében degenerált. Egy ilyen eltolási szimmetriát sértő alapállapotot kaphatunk, ha az egydimenziós Heisenberg-modellt kiegészítjük a *másodszomszédok* J_2 erősségű kölcsönhatásával, aminek szemléltetése az 1. ábrán látható. Ekkor a Hamilton-operátor

$$H = J_1 \sum_i \mathbf{S}_i \mathbf{S}_{i+1} + J_2 \sum_i \mathbf{S}_i \mathbf{S}_{i+2} \quad (3)$$

alakban írható. Azonos nagyságrendű antiferromágneses csatolások esetén a spin-rendszerben frusztráció jelenhet meg. Feles spinű láncra analitikus megoldás a



2. ábra: A bilineáris-bikvadratikus modell sematikus fázisdiagramja és energiarése a θ paraméter függvényében.

Majumdar–Ghosh-pontban ($J_2 = \frac{1}{2}J_1$) adható, ahol megmutatható, hogy a Hamilton-operátor olyan projektorok összege, amely három szomszédos spinnek a $\frac{3}{2}$ -es alterére vetít [1], ekkor az alapállapot szingulett kötések sorozata, ami nyitott határfeltétel esetén kétszeres degenerációhoz vezet. Gerjesztett állapotot egy szingulett kötés felszakításával kaphatunk, így a diszperziós görbén gap jelenik meg. Az így keltett *spinonok* a lánc mentén szabadon terjedhetnek, ugyanis a szingulett kötések átrendeződése nem jár energiátöbblettel [7, 8].

A félegész spinű rendszerek tulajdonságait az $S = \frac{1}{2}$ -es Heisenberg-modell alapján érthetjük meg; a modellek kritikusak és gap nélküliek. Ezzel szemben, ahogy Haldane rámutatott [9] – ami az egyik Nobel-díjjal jutalmazott eredménye 2016-ban – az egész spinű rendszerek alapvetően eltérő tulajdonságokat mutatnak. Az úgynevezett *Haldane-fázis* megjelenésével az antiferromágneses alapállapotot energiarés választja el a gerjesztésektől, ezzel a rendszer nem kritikus, és a korrelációs függvények exponenciális lecsengésűek. A Haldane-fázis tulajdonságainak vizsgálatához a széleskörűen tanulmányozott $S = 1$ spinű elsőszomszéd-kölcsönható spinláncra vonatkozó *bilineáris-bikvadratikus modell* alakja:

$$H = \cos \theta \sum_i \mathbf{S}_i \mathbf{S}_{i+1} + \sin \theta \sum_i (\mathbf{S}_i \mathbf{S}_{i+1})^2. \quad (4)$$

A kölcsönhatás típusa a θ paraméterrel hangolható, melynek függvényében kirajzoló fázisdiagramok a 2. ábrán láthatjuk. Az egyes tartományok elemzésére az 5.2 fejezetben térünk vissza.

1.2. Numerikus módszerek

A előbbieken vázolt modellek, és általában a természetben megvalósuló fizikai folyamatokra alkotott modellek csak bizonyos paramétertartományokban oldhatók

meg egzaktul, vagy közelíthetők megfelelően analitikus módszerek alkalmazásával. A perturbációszámítás bevált eszköze az erősen korrelált rendszerek esetén nem alkalmazható általánosan, ezért előtérbe kerülnek a numerikus módszerek. Az utóbbi évtizedek alatt számos numerikus eljárás fejlődött ki az alacsony dimenziós rendszerek kezelésére. A legkézenfekvőbb módszer az *egzakt diagonalizálás*. A számítás költsége a rácspontok számával exponenciálisan skálázódik, így még az iteratív algoritmusok segítségével is a néhány tíz pontra végzett számítások után már csak a végesméret-skálázás eszközével kiegészítve lehet extrapolálni a termodinamikai határesetre.

Ezért olyan módszerre van szükség, ami a teljes Hilbert-tér egy megszorított, ám a fizikai folyamatokat tekintve jelentős alterében adja meg a rendszer viselkedését. A Wilson által kifejlesztett *numerikus renormálásicoport-algoritmus* (NRG-algoritmus) jelentősége a Kondo-probléma megoldásában mutatkozott meg, amiért 1975-ben Nobel-díjjal jutalmazták [10]. A kezdetben széles körben elterjedő módszer a rendszer méretével növekvő numerikus hiba miatt csak korlátozottan vált alkalmazhatóvá. A igazi áttörés a '90-es években White munkássága során következett be a *sűrűségmátrixos renormálásicoport-algoritmus* (DMRG-algoritmus) kidolgozásával [11, 12]. Napjainkban az alacsony dimenziós erősen korrelált rendszereket numerikusan leghatékonyabban a DMRG módszerével lehet vizsgálni akár több száz rácspont hosszúságú láncok esetén. E módszer – amint a későbbi fejezetekben belátjuk – egy mátrix-szorzat alakú hullámfüggvény-reprezentációt ad. Az ekkor megjelenő mátrixok mérete a rendszerben lévő összefonódás erősségétől függ.

1.3. Célkitűzés

A dolgozatban bemutatom a többrészrendszer-összefonódás elméleti hátterét, és mint vizsgálati módszert a spinláncok viselkedésének feltérképezésében. Majd rátérek az általam használt és fejlesztett numerikus DMRG és mátrixszorzat-állapot (MPS) alapú módszerek ismertetésére és kapcsolatára. Ezt követően az irodalomban elsőként alkalmazom a sokrész-korrelációk elméletét a spinláncok vizsgálatára: a (3) és a (4) modellek paramétertartományának több pontján kiszámítom a különböző háromrész-korrelációk lecsengését az általam írt implementációk segítségével. Végül röviden összefoglalom a kutatással kapcsolatos további terveket, lehetőségeket.

2. Többrészrendszer-korreláció

2.1. Elemi rendszer

Egy rendszerről a kvantummechanika statisztikus leírást ad, és a róla való ismereteinket az *állapotvektorral* reprezentáljuk. Ezzel számolhatjuk ki a mérhető fizikai mennyiségek várhatóértékét, megadva a rendszer kvantummechanikailag teljes leírását [13, 14, 15].

Egy rendszert akkor hívunk *tisztának*, ha létezik olyan nem degenerált Neumann-mérés, amit a rendszer több példányán megismételve mindig ugyanazt az eredményt kapjuk. E rendszer állapotát matematikailag a $\pi = |\psi\rangle\langle\psi|$ *tiszta állapottal* reprezentáljuk, ahol a $|\psi\rangle$ állapotvektor egy $\mathcal{H}$ – a fejezetek során véges dimenziós – feltételezett – Hilbert-tér normált eleme ($\langle\psi|\psi\rangle = 1$). Az ilyen önadjungált, lineáris operátorok halmazát jelölje

$$\mathcal{P}(\mathcal{H}) := \left\{ \pi \in \text{Lin}_{\text{SA}} \mathcal{H} \mid \pi^2 = \pi, \text{Tr } \pi = 1 \right\}. \quad (5)$$

Tiszta állapotú rendszeren O operátorral reprezentált fizikai mennyiség várhatóértéke $\langle\psi|O|\psi\rangle = \text{Tr}(\pi O)$.

Ha a rendszer nem írható le tiszta állapotokkal, akkor a tiszta állapotok keverékével előállított *kevert állapotokkal* írható le. Tehát általában a rendszer *állapota* a tiszta állapotok konvex kombinációjaként adható meg. Ezek halmaza

$$\mathcal{D}(\mathcal{H}) := \text{Conv } \mathcal{P}(\mathcal{H}) \equiv \left\{ \varrho = \varrho^\dagger \mid \pi_i \in \mathcal{P}(\mathcal{H}), p_i \geq 0, \|\mathbf{p}\|_1 = 1 : \varrho = \sum_i p_i \pi_i \right\}. \quad (6)$$

Vagyis a kevert állapotok – (5) definícióból következően – olyan önadjungált lineáris operátorok, melyek pozitív szemidefinitek és normáltak ($\text{Tr } \varrho = 1$). Ekkor O várhatóértéke

$$\langle O \rangle = \text{Tr}(\varrho O) = \sum_i p_i \text{Tr}(\pi_i O) = \sum_i p_i \langle \psi_i | O | \psi_i \rangle. \quad (7)$$

A $\varrho \in \mathcal{D}$ állapotok kevertségének számszerű jellemzésére *entrópiák* vezethetők be. A klasszikus tárgyalásban megjelenő *Shannon-entrópia* kvantumos megfelelője az

$$S(\varrho) := -\text{Tr}(\varrho \ln \varrho) \quad (8)$$

von Neumann-entrópia, ami számos előnyös tulajdonsággal bír: nemnegatív, folytonos, korrelálatlan állapotokra additív, hű (tiszta állapotokra, és csak azokra eltűnik), biztahasztikus kvantumcsatornáknál nem csökken [16, 17].

Két állapot $(\varrho, \sigma \in \mathcal{D})$ megkülönböztethetősége számszerűsíthető az Umegaki-féle relatív entrópiával,

$$D(\varrho|\sigma) = \text{Tr}[\varrho(\ln \varrho - \ln \sigma)], \quad (9)$$

ami szintén nemnegatív, és pontosan akkor zérus, ha $\varrho = \sigma$, kvantumcsatornáknban nem nő [18, 19].

2.2. Két részrendszer

A kvantummechanika igazi érdekessége, klasszikustól eltérő viselkedése a részrendszerek korrelációjának tanulmányozása során tárul fel. Az ezzel kapcsolatos fogalmakat érdemes először a legegyszerűbb esetben tárgyalni. A két elemi részrendszer által megvalósított állapotot a $\mathcal{H}_{12} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ tenzorszorzattéren írjuk le, ahol az előzőek alapján bevezethetők a $\mathcal{P}_1 := \mathcal{P}(\mathcal{H}_1)$, $\mathcal{P}_2 := \mathcal{P}(\mathcal{H}_2)$ és $\mathcal{P}_{12} := \mathcal{P}(\mathcal{H}_{12})$ halmazok, melyek a megfelelő tiszta állapotokat tartalmazzák, illetve hasonlóan a kevert állapotokra $\mathcal{D}_1$, $\mathcal{D}_2$ és $\mathcal{D}_{12}$. Egy $\mathcal{D}_{12}$ -beli ϱ állapot *redukált állapota* a *parciális nyomképzés* művelettel nyerhető: $\varrho_1 = \text{Tr}_2 \varrho$, ahol $\text{Tr}_2 : \mathcal{D}_{12} \rightarrow \mathcal{D}_1$ lineáris, speciálisan, $A \otimes B$ elemi tenzorra $\text{Tr}_2(A \otimes B) = A \text{Tr} B$ [13, 15].

A fizikában általában két valószínűségi változó *korrelációjának* mértéke $\langle O_1 O_2 \rangle - \langle O_1 \rangle \langle O_2 \rangle$. (Ezt a mennyiséget a statisztikában kovarianciának hívják, ott a korreláció ennek egy normált változata.) Ez a kvantummechanikában két részrendszeren mért fizikai mennyiség esetén

$$C(\varrho; O_1, O_2) := \langle O_1 \otimes O_2 \rangle - \langle O_1 \rangle \langle O_2 \rangle = \text{Tr}[(\varrho - \varrho_1 \otimes \varrho_2) O_1 \otimes O_2]. \quad (10)$$

A két részrendszer akkor korrelálatlan, ha bármely két valószínűségi változó korrelálatlan (a fenti mennyiség eltűnik) ez pontosan akkor teljesül, ha $\varrho = \varrho_1 \otimes \varrho_2$, ezért a *korrelálatlan állapotok* halmaza

$$\mathcal{D}_{\text{unc}} := \left\{ \varrho \in \mathcal{D}_{12} \mid \exists \varrho_1 \in \mathcal{D}_1, \exists \varrho_2 \in \mathcal{D}_2 : \varrho = \varrho_1 \otimes \varrho_2 \right\}. \quad (11)$$

Klasszikus rendszereknek bármely tiszta állapota korrelálatlan, a kvantummechanikában viszont $\mathcal{P}_{\text{unc}} := \mathcal{D}_{\text{unc}} \cap \mathcal{P}_{12} \neq \mathcal{P}_{12}$, vagyis tiszta állapotokban is lehet korreláció, ezt hívjuk összefonódásnak (tiszta állapotok esetén). Az korrelálatlan tiszta állapotokat más néven *szeperálható tiszta állapotoknak* is nevezzük:

$$\mathcal{P}_{\text{sep}} \equiv \mathcal{P}_{\text{unc}} = \left\{ \pi \in \mathcal{P}_{12} \mid \exists \pi_1 \in \mathcal{P}_1, \exists \pi_2 \in \mathcal{P}_2 : \pi = \pi_1 \otimes \pi_2 \right\}, \quad (12)$$

többiek pedig *összefonódtak*, $\overline{\mathcal{P}_{\text{sep}}} = \mathcal{P}_{12} \setminus \mathcal{P}_{\text{sep}}$.

A *szeparálható állapotok* (nem csak tiszta állapotok esetén) azok, amelyek kikeverhetők szeparálható tisztákból, ezzel ekvivalens, hogy kikeverhetők korrelálatlanokból [20]:

$$\mathcal{D}_{\text{sep}} := \text{Conv } \mathcal{P}_{\text{sep}} = \text{Conv } \mathcal{D}_{\text{unc}}. \quad (13)$$

A definíciót motiválja, hogy ezek azok az állapotok, melyek létrehozhatók lokális műveletekkel és klasszikus kommunikációval (*LOCC: Local Operation and Classical Communication* [20, 21]). A klasszikus kommunikáció a klasszikus kölcsönhatás megfelelője, a kvantumos korrelációt a kvantumos kölcsönhatás hozza létre, tehát a szeparálható állapotok nem tartalmazznak kvantumos korrelációt ebből a szempontból. Összefonódott állapot az, ami nem szeparálható, vagyis az *összefonódott állapotok* halmaza $\overline{\mathcal{D}_{\text{sep}}} = \mathcal{D}_{12} \setminus \mathcal{D}_{\text{sep}}$.

Ezzel a kétrészecskés állapotterek szerkezete az alábbiak szerint vázolható.

$$\begin{aligned} \mathcal{P}_{12} &\subseteq \mathcal{D}_{12} \equiv \text{Conv } \mathcal{P}_{12} \\ \mathcal{P}_{\text{unc}} \equiv \mathcal{P}_{\text{sep}} &\subseteq \mathcal{D}_{\text{unc}} \subseteq \mathcal{D}_{\text{sep}} \equiv \text{Conv } \mathcal{P}_{\text{sep}} \end{aligned} \quad (14)$$

Egy állapotvektor általában kifejtethető a $\{|\varphi_{1,\gamma_1}\rangle\}$ és $\{|\varphi_{2,\gamma_2}\rangle\}$ ortonormált bázisok segítségével:

$$|\psi\rangle = \sum_{\gamma_1=1}^{d_1} \sum_{\gamma_2=1}^{d_2} \psi_{\gamma_1\gamma_2} |\varphi_{1,\gamma_1}\rangle \otimes |\varphi_{2,\gamma_2}\rangle. \quad (15)$$

A $\psi_{\gamma_1\gamma_2}$ együtthatókat tartalmazó mátrixra alkalmazható a szingulárisérték-felbontás: $\boldsymbol{\psi} = \boldsymbol{U} \boldsymbol{S} \boldsymbol{V}^\dagger$, ahol $\boldsymbol{U} \in \text{U}(d_1)$ és $\boldsymbol{V} \in \text{U}(d_2)$ uniter mátrixok, $\boldsymbol{S}$ diagonális, nemnegatív s_α elemeket tartalmaz, melyek a $\boldsymbol{\psi}$ úgynevezett szinguláris értékei. Ekkor

$$|\psi\rangle = \sum_{\alpha=1}^{\min(d_1, d_2)} s_\alpha |\varphi'_{1,\alpha}\rangle \otimes |\varphi'_{2,\alpha}\rangle, \quad (16)$$

ezt az alakot *Schmidt-felbontásnak* is hívják. Könnyen látható, hogy a redukált állapotok sajátértékei az s_α^2 mennyiségek, sajátvektorai pedig $\{|\varphi'_{1,\alpha}\rangle\}$ és $\{|\varphi'_{2,\alpha}\rangle\}$. Ebből az is következik, hogy a tiszta állapot szeparabilitása könnyen eldönthető:

$$\pi \in \mathcal{P}_{\text{sep}} \iff \text{Tr}_2 \pi \in \mathcal{P}_1 \iff \text{Tr}_1 \pi \in \mathcal{P}_2. \quad (17)$$

Példaként tekintsük a $|\psi_1\rangle, |\psi'_1\rangle \in \mathcal{H}_1$ és $|\psi_2\rangle, |\psi'_2\rangle \in \mathcal{H}_2$ páronként ortonormált állapotvektorokat.

- i) A $|\psi\rangle = |\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle \in \mathcal{H}_{12}$ állapotvektorból, jelen esetben elemi tenzorból képzett $\pi = |\psi\rangle\langle\psi|$ állapot szeparálható, hiszen

$$\begin{aligned} \text{Tr}_2 \pi &= |\psi_1\rangle\langle\psi_1| \in \mathcal{P}_1 \quad \text{és} \quad \text{Tr}_1 \pi = |\psi_2\rangle\langle\psi_2| \in \mathcal{P}_2 \\ \pi &= \pi_1 \otimes \pi_2 \in \mathcal{P}_{\text{sep}} \end{aligned} \quad (18)$$

ii) Ha viszont $|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle + |\psi'_1\rangle \otimes |\psi'_2\rangle) \in \mathcal{H}_{12}$, akkor $\pi = |\psi\rangle\langle\psi|$ tiszta állapot nem szeparálható, mert

$$\begin{aligned} \text{Tr}_2 \pi = \frac{1}{2}(|\psi_1\rangle\langle\psi_1| + |\psi'_1\rangle\langle\psi'_1|) \notin \mathcal{P}_1 \quad \text{és} \quad \text{Tr}_1 \pi = \frac{1}{2}(|\psi_2\rangle\langle\psi_2| + |\psi'_2\rangle\langle\psi'_2|) \notin \mathcal{P}_2 \\ \pi \neq (\text{Tr}_2 \pi) \otimes (\text{Tr}_1 \pi) \end{aligned} \quad (19)$$

2.3. Kétrész-korreláció mértékei

Miután megadtuk, hogy mik a korrelálatlan- (11), illetve szeparálható állapotok (13), szeretnénk számszerűsíteni, hogy a többi állapot mennyire korrelált, illetve összefonódott.

Két fizikai mennyiség korrelációját jellemeztük (10)-ben, de a következőkben megfigyelhető mennyiségek nélkül szeretnénk magának a ϱ állapotnak a korrelációjának mértékét leírni. Legyen az állapot annyira korrelált, mint amennyire a korrelálatlanoktól *megkülönböztethető* a relatív entrópiát (9) használva:

$$\min_{\sigma \in \mathcal{D}_{\text{unc}}} D(\varrho||\sigma) = S(\varrho_1) + S(\varrho_2) - S(\varrho) = I(\varrho). \quad (20)$$

(Az első egyenlőség azért igaz, mert a kifejezés a minimumát a $\sigma = \varrho_1 \otimes \varrho_2$ helyen veszi fel [22].) Tehát azt kaptuk, hogy az állapot korrelációja kifejezhető az entrópiák fenti összegeként, ami a *(kvantum) kölcsönös információként* ismert mennyiség [15].

Mivel tiszta állapotok korrelációja az összefonódás, ezért az összefonódás mértéke is legyen a korreláció mértéke:

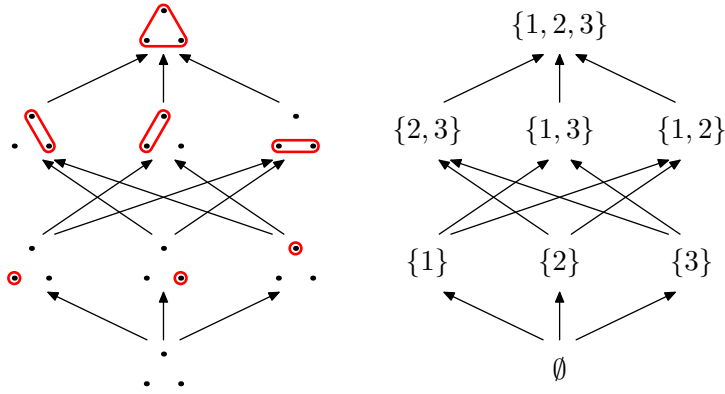
$$E|_{\mathcal{P}}(\pi) := I|_{\mathcal{P}}(\pi) = 2S(\pi_1) = 2S(\pi_2) \quad (21)$$

(mivel a (16) Schmidt-dekompozíció miatt a tiszta állapotok marginálisainak spektrumai megegyeznek) ami kétszerese a szokásos *összefonódási entrópiának* [23]. Kevert állapotoknál az optimális dekompozíció átlagos összefonódását használjuk [21].

$$E(\varrho) = \min \left\{ \sum_i p_i I|_{\mathcal{P}}(\pi_i) \mid \pi_i \in \mathcal{P}_{12}, p_i \geq 0, \|\mathbf{p}\|_1 = 1 : \sum_i p_i \pi_i = \varrho \right\} \quad (22)$$

Tehát a minimalizálás (ami numerikusan nehéz feladat) az állapot összes lehetséges dekompozícióján történik, ezt konvextető-kiterjesztésnek is hívják. Ez jó összefonódási mérték, mert LOCC transzformációra nem nő, vagyis kifejezi, hogy az összefonódás kvantumos eredetű, azaz klasszikus kölcsönhatással nem növelhető.

A mennyiségek *hűek*, azaz I pontosan akkor nulla, ha az állapot korrelálatlan, valamint E pontosan akkor nulla, ha az állapot szeparálható. Továbbá $E \leq I$, vagyis a rendszer korrelációtartalmának egy része kvantumösszefonódás.



3. ábra: A $P_0(\{1, 2, 3\})$ hatványhalmaz hálója.

2.4. A többrész-korreláció struktúrája

A következőkben a két részrendszerre bevezetett korreláció és összefonódás fogalmainak több részrendszerre való kiterjesztését tekintjük át, amely során négy-szintes hálószerkezet bontakozik ki [24, 25].

Ha egy P halmazt ellátunk egy $\preceq$ *részbenrendezéssel* (reflexív, antiszimmetrikus, tranzitív), akkor az így kapott struktúrát *részben rendezett halmaznak* nevezzük. Ha minden elempárnak egyértelműen létezik *legnagyobb alsó korlátja* (infimuma) és *legkisebb felső korlátja* (szuprémuma) a $\preceq$ -ra nézve, akkor ezt *hálónak* nevezzük [26, 27]. Például az egész számok halmazán az oszthatóság egy lehetséges részbenrendezés, az infimum a legnagyobb közös osztó, a szuprémum pedig a legkisebb közös többszörös.

2.4.1. 0. szint: részrendszerek

A vizsgált rendszer álljon n elemi részből, és minden $i \in L = \{1, 2, \dots, n\}$ indexű *elemi részrendszerhez* rendeljünk hozzá egy $\mathcal{H}_i$ Hilbert-teret, illetve a teljes rendszer egy $X \subseteq L$ címkéjű *részrendszeréhez* a $\mathcal{H}_X = \bigotimes_{i \in X} \mathcal{H}_i$ Hilbert-teret. Ennek állapotai (6) alapján $\mathcal{D}_X := \mathcal{D}(\mathcal{H}_X)$. Minden részrendszer címkéje eleme L hatványhalmazának, amit

$$P_0(L) := 2^L \quad (23)$$

jelöl. A tartalmazásra, metszetre és unióra nézve ez a háló matematikai struktúra közismert példája.

Példaként tekintsük a három részrendszeres esetet! Ekkor az $L = \{1, 2, 3\}$ indexhalmaz hatványhalmaza nyolcelemű. Ennek hálóját a 3. ábra mutatja, amelyen körbekerített fekete pontok jelölik a hatványhalmaz elemeit, a nyíl pedig a rendezési relációt szemlélteti.

2.4.2. I. szint: partíciók

A 2.2. fejezetben vizsgált kételemű rendszert csak egyféleképpen lehetett fel-
darabolni, és vizsgálni a korrelációt. Most tetszőleges n esetén a rendszer összes
felosztására nézve megadjuk a korrelálatlanság és szeparabilitás fogalmait.

A rendszer egy *partícióján* (vagy más néven *felosztásán*) a $\xi = \{X_1, X_2, \dots, X_{|\xi|}\}$
halmazt értjük, egyszerűbb írásmódban $\xi = X_1|X_2|\dots|X_{|\xi|}$. Ezen X *részek* legye-
nek nemüres (i), diszjunkt halmazok (ii), amik együtt kiadják az egész rendszert
(iii). Tehát a rendszer összes ilyen lehetséges felosztásának halmaza

$$P_1(L) := \left\{ \xi = X_1|X_2|\dots|X_{|\xi|} \mid \begin{array}{ll} \forall X \in P_0 \setminus \{\emptyset\}, & \text{(i)} \\ \forall X \neq X' \in \xi : X \cap X' = \emptyset, & \text{(ii)} \\ \bigcup_{X \in \xi} X = L & \text{(iii)} \end{array} \right\}. \quad (24)$$

A $\xi, v \in P_1$ partíciókról azt mondjuk, hogy v egy *finomítása* ξ -nek, ha v valamely
részeinek egyesítésével ξ -t kapjuk. Azaz bevezetjük a

$$v \preceq \xi \stackrel{\text{def}}{\iff} \forall Y \in v \quad \exists X \in \xi : Y \subseteq X \quad (25)$$

részbenrendezést. Könnyen látható, hogy P_1 a fenti részbenrendezéssel, valamint
az infimum- és szuprémumképzéssel hálót ad [26, 27].

Hasonlóan a (11) definícióhoz, a ξ -*korrelálatlan állapotok* halmaza

$$\mathcal{D}_{\xi\text{-unc}} := \left\{ \varrho \in \mathcal{D} \mid \forall X \in \xi, \exists \varrho_X \in \mathcal{D}_X : \varrho = \bigotimes_{X \in \xi} \varrho_X \right\}, \quad (26)$$

ekkor – mint a kétrészes esetben – bármely X részrendszeren értelmezett O_X fizikai
mennyiségek korrelálatlanok lesznek, azaz $\langle \bigotimes_{X \in \xi} O_X \rangle = \prod_{X \in \xi} \langle O_X \rangle$. Vezessük be
az O_i ($i \in L$) elemi részrendszereken értelmezett fizikai mennyiségek ξ felosztásra
vett korrelációját:

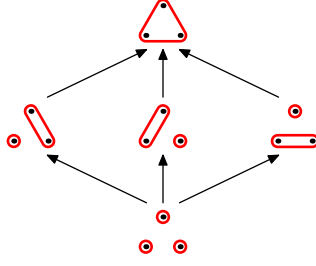
$$C_\xi(\varrho; O_1, \dots, O_n) = \left\langle \bigotimes_{i \in L} O_i \right\rangle - \prod_{X \in \xi} \left\langle \bigotimes_{i \in X} O_i \right\rangle = \text{Tr} \left[\left(\varrho - \bigotimes_{X \in \xi} \varrho_X \right) \bigotimes_{i \in L} O_i \right], \quad (27)$$

a (10) képlet általánosításaként.

Hasonlóan (13) definícióhoz a ξ -*szeparálható állapotok* azok, amik kikeverhetők
 ξ -korrelálatlanokból [28, 29, 30, 31, 32, 33]

$$\mathcal{D}_{\xi\text{-sep}} := \text{Conv } \mathcal{D}_{\xi\text{-unc}}, \quad (28)$$

vagyis nincs kvantumos korreláció az $X \in \xi$ részrendszerek között. Ennek egyszerű
következménye, hogy LOCC műveletek nem visznek ki ebből a halmazból.



4. ábra: Három részből álló rendszer lehetséges partícióinak P_1 hálója.

Belátható, hogy ha egy állapot korrelátlan egy felosztásra nézve, akkor korrelátlan minden durvább felosztásra nézve is, azaz

$$v \preceq \xi \iff \mathcal{D}_{v\text{-unc}} \subseteq \mathcal{D}_{\xi\text{-unc}} , \quad (29)$$

és (28) miatt hasonló mondható el a ξ -szeparálható állapotokról is [24, 25],

$$v \preceq \xi \iff \mathcal{D}_{v\text{-sep}} \subseteq \mathcal{D}_{\xi\text{-sep}} . \quad (30)$$

Ez azt jelenti, hogy a különböző ξ -khez tartozó $\mathcal{D}_{\xi\text{-unc}}$, valamint $\mathcal{D}_{\xi\text{-sep}}$ állapothalmazok hálót alkotnak a tartalmazásra nézve, mely izomorf a felosztásokat leíró $P_1(L)$ hálóval.

Példaként tekintsük a három részrendszeres esetet! A P_1 halmaz elemszáma az úgynevezett Bell-számokkal adható meg, amikre a $B_{n+1} = \sum_{k=0}^n \binom{n}{k} B_k$ ($B_0 = B_1 = 1$) rekurzív formula érvényes. Esetünkben $P_0(n = 3)$ halmazban lévő részekből összesen ötféleképpen tehetjük össze a teljes rendszert:

$$P_1(\{1, 2, 3\}) = \{1|2|3, 12|3, 13|2, 23|1, 123\} \quad (31)$$

A fenti $\preceq$ részbenrendezéssel ellátva ezt a halmazt: $1|2|3 \preceq ab|c \preceq 123$ ($a, b, c \in \{1, 2, 3\}$). Ezeket a felosztásokat a 4. ábra mutatja.

2.4.3. II. szint: partíciók halmaza

Maradva az előbbi $n = 3$ példánál, legyen $\varrho \notin \mathcal{D}_{ab|c\text{-sep}}$, azaz ϱ nem állítható elő sem $12|3$ -, sem $13|2$ -, sem $23|1$ -korrelátlan állapotok konvex kombinációjaként. Ám az összefonódás-elmélet konvex geometriájának egyik fontos következménye, hogy vannak olyan $\varrho \notin \mathcal{D}_{ab|c\text{-sep}}$ állapotok, amik kikeverhetők az $12|3$ -, $13|2$ -, $13|2$ -korrelátlan állapotok *együttes* felhasználásával, azaz $\varrho \in \text{Conv}(\mathcal{D}_{12|3\text{-unc}} \cup \mathcal{D}_{13|2\text{-unc}} \cup \mathcal{D}_{23|1\text{-unc}})$, vagyis valódi háromrész-összefonódás nélkül [30, 31, 32, 33, 24]. Mivel az ilyen állapotokra nem szeretnénk úgy gondolni, mint „teljesen háromrész-összefonódottakra”, ezért további korrelációs foglalmakat kell bevezetnünk, ez az osztályozás II. szintje.

Tekintsük a P_I azon $\xi = \{\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_{|\xi|}\}$ részhalmazát, amelyben minden olyan elem szerepel, amely finomabb, mint e részhalmaz maximális eleme(i). Ezt *ideálnak* vagy másképp *lefelé zárt részhalmaznak* nevezzük. Legyen a P_{II} a nemüres ideálok halmaza, azaz

$$P_{II}(L) := \mathcal{O}_\downarrow(P_I(L)) \setminus \{\emptyset\} \equiv \left\{ \xi \in 2^{P_I(L)} \setminus \{\emptyset\} \mid \forall \xi \in \xi : v \preceq \xi \Rightarrow v \in \xi \right\}. \quad (32)$$

Ez szemléletesen azt jelenti, hogy a P_I ábráján ezeket a halmazokat nem lehet elhagyni a nyilak mentén visszafelé. A P_{II} halmaz ellátható egy természetes részbenrendezéssel, ami maga a halmaztartalmazás ($\subseteq$) reláció, tehát $\xi \preceq v \Leftrightarrow \xi \subseteq v$. Belátható, hogy a metszet ($\cap$) és unió ($\cup$) műveletekkel P_{II} egy háló.

Egy ϱ állapotot *ξ -korrelálatlan állapotnak* mondunk, ha létezik legalább egy $\xi \in \xi$ felosztás, amelyre nézve korrelálatlan ($\varrho \in \mathcal{D}_{\xi\text{-unc}}$), így

$$\mathcal{D}_{\xi\text{-unc}} := \bigcup_{\xi \in \xi} \mathcal{D}_{\xi\text{-unc}} \stackrel{(30)}{=} \bigcup_{\xi \in \max \xi} \mathcal{D}_{\xi\text{-unc}}. \quad (33)$$

Itt is vezessük be az O_i ($i \in L$) elemi részrendszereken értelmezett fizikai mennyiségek ξ ideálra vett korrelációját:

$$C_\xi(\varrho; O_1, \dots, O_n) = \min_{\xi \in \xi} C_\xi(\varrho; O_1, \dots, O_n). \quad (34)$$

Hasonlóan (28) formulához, egy állapot *ξ -szeparálható*, ha kikeverhető ξ -korrelálatlanokból, azaz

$$\mathcal{D}_{\xi\text{-sep}} := \text{Conv } \mathcal{D}_{\xi\text{-unc}}. \quad (35)$$

Hasonlóan a ξ -szeparálható állapotok (28) halmazaihoz, LOCC művelettel nem lehet kijutni ezekből a halmazokból.

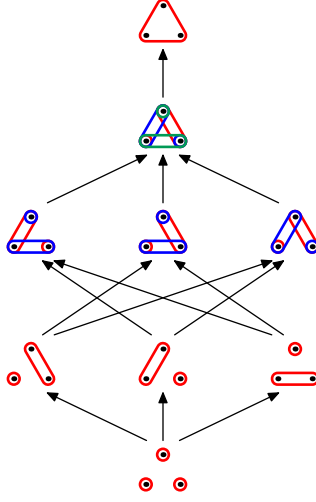
A (29) és a (30) összefüggésekhez hasonlóan itt is beláthatók, hogy a megfelelő állapothalmazok is tartalmazzák egymást, méghozzá épp a P_{II} által megadott módon [24, 25]:

$$v \preceq \xi \iff \mathcal{D}_{v\text{-unc}} \subseteq \mathcal{D}_{\xi\text{-unc}}, \quad (36)$$

$$v \preceq \xi \iff \mathcal{D}_{v\text{-sep}} \subseteq \mathcal{D}_{\xi\text{-sep}}. \quad (37)$$

A lehetséges ideálok, és az általuk megadott korrelációs és összefonódási tulajdonságok száma gyorsan nő a részrendszerek számával, de lehetőségünk van közülük csak néhányat tekinteni, melyeknek szemléletes jelentésük van. Azt mondjuk, hogy egy felosztás *k particionálható*, ha a részek száma legalább k . Az ilyen tulajdonságú partíciókat a

$$\mu_k := \{\mu \in P_I \mid |\mu| \geq k\} \in P_{II} \quad (38)$$



5. ábra: A P_{II} halmazhoz tartozó háló diagramja.

ideál gyűjti egybe, és a megfelelő állapotok a k -particionálhatóan korrelálatlanok $\mathcal{D}_{k\text{-part, unc}} := \mathcal{D}_{\mu_k\text{-unc}}$, valamint a k -particionálhatóan szeparálhatók $\mathcal{D}_{k\text{-part, sep}} := \mathcal{D}_{\mu_k\text{-sep}}$.

Ennek párja a k' produkálhatóság, ami a részek maximális elemszámát limitálja:

$$\nu_{k'} := \{ \nu \in P_{\text{I}} \mid \forall N \in \nu : |N| \leq k' \} \in P_{\text{II}}, \quad (39)$$

és a megfelelő állapotok a k' -produkálhatóan korrelálatlanok $\mathcal{D}_{k'\text{-prod, unc}} := \mathcal{D}_{\nu_{k'}\text{-unc}}$, valamint a k' -produkálhatóan szeparálhatók $\mathcal{D}_{k'\text{-prod, sep}} := \mathcal{D}_{\nu_{k'}\text{-sep}}$.

Példaként tekintsük a három részrendszeres esetet! A lefele zárt részhalmazokat (32) miatt definiálhatjuk a maximális elemeik segítségével, formálisan $\xi = \downarrow \max \xi$.

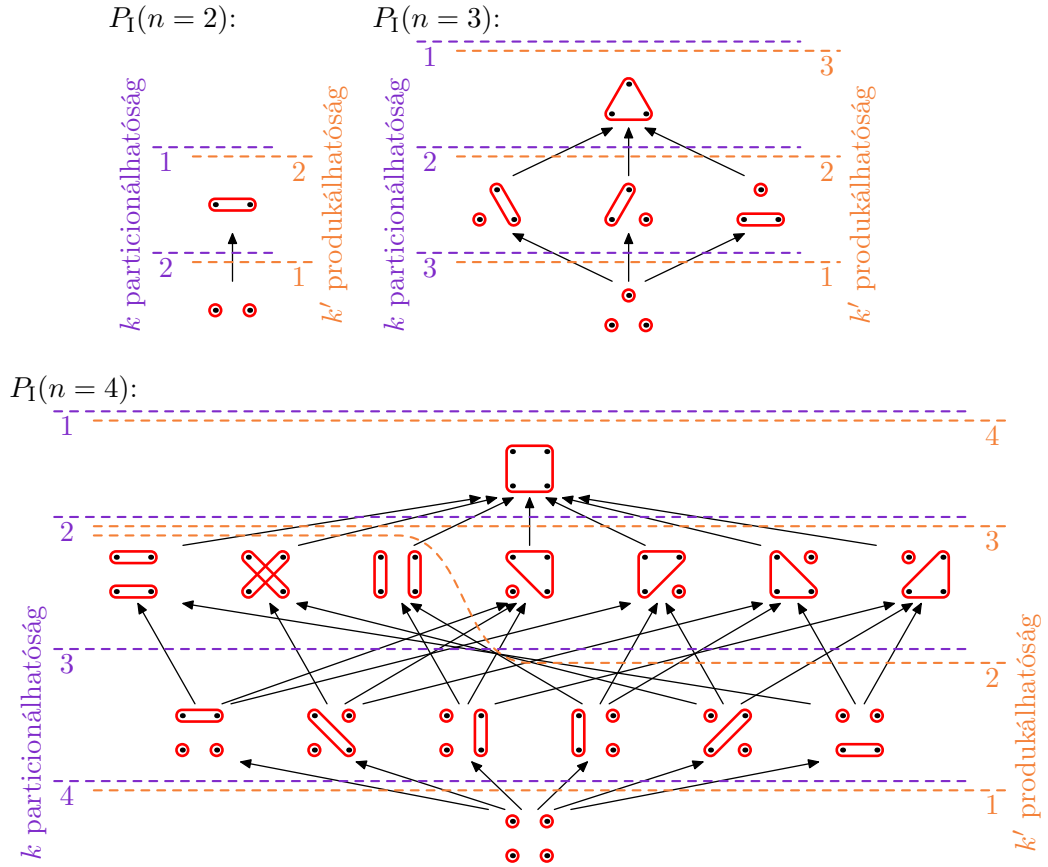
$$P_{\text{II}} = \left\{ \begin{array}{l} \downarrow\{123\} = P_{\text{I}}, \\ \downarrow\{12|3, 13|2, 23|1\}, \\ \downarrow\{12|3, 13|2\}, \downarrow\{12|3, 23|1\}, \downarrow\{13|2, 23|1\}, \\ \downarrow\{12|3\}, \downarrow\{23|1\}, \downarrow\{23|1\}, \\ \downarrow\{1|2|3\} = \{1|2|3\} \end{array} \right\}. \quad (40)$$

Ennek szemléltetése az 5. ábrán látható, ahol a maximális elemeikkel megadott P_{II} -beli elemek vannak feltüntetve.

A particionálhatóság és produkálhatóság kapcsolata a 6. ábra P_{I} hálói látható. Két- és három részrendszer esetén a particionálhatósági és produkálhatósági tulajdonságok egybe esnek.

2.4.4. III. szint: Összefonódási osztályok

A teljesség kedvéért megemlítjük, noha jelen dolgozat keretei között nem használjuk, hogy egy III. szintű háló is konstruálható. Az összefonódási fogalmaink tar-



6. ábra: A particionálhatóság és produkálhatóság szemléltetése a P_1 -hálón. A k particionálható elemek a k -edik lila vonal alatt, míg a k' produkálhatóak a k' -dik narancssárga vonal alatt találhatók. $n > 3$ esetén a két fogalom nem esik egybe.

talmazó halmazokra vezettek (37), vagyis megadták, hogy milyen ξ -korrelálatlan állapotok *elégsek* az állapotok kikeveréséhez. Meg lehet adni a ξ -szeparálható állapotok összes lehetséges metszeteit (*összefonódási osztályok*), vagyis azt, hogy milyen ξ -korrelálatlan állapotok *szükségesek és elégsek* az állapotok kikeveréséhez. Megmutatható, hogy ezeket az összefonódási osztályokat a P_{Π} felfelé zárt részhalmazainak (ún *filtereinek*) hálójával címkézhetjük [24]. Továbbá az is belátható, hogy ez a struktúra az LOCC osztályozás durvítása: ha egy osztályból egy másikba LOCC transzformáció átvisz egy állapotot, akkor az osztályok ebben a hálóban relációban állnak egymással [24].

2.5. Többrész-korreláció mértékei

2.5.1. 0. szint: részrendszerek

Minden részrendszer entrópiáját fel lehet írni – (8) szerint – amelyek segítségével korreláció- és összefonódás-mértékek számolhatók a teljes rendszerre, amit a következő fejezetekben tárgyalunk.

2.5.2. I. szint: partíciók

A rendszernek egy $\xi = X_1|X_2|\dots|X_{|\xi|}$ felosztására vonatkozó korrelációjának és összefonódásának számszerű jellemzésére a 2.3. fejezetben bemutatott gondolatmenet egy az egyben általánosítható. Tehát a $\varrho \in \mathcal{D}$ állapot korrelációja a ξ felosztásra nézve, röviden ξ -korrelációja (ξ -kölcsonös információ) megadható, mint az állapot megkülönböztethetősége a ξ -korrelálatlanoktól [22, 24]:

$$I_{\xi}(\varrho) := \min_{\sigma \in \mathcal{D}_{\xi\text{-unc}}} D(\varrho||\sigma) = \sum_{X \in \xi} S(\varrho_X) - S(\varrho). \quad (41)$$

(A második egyenlőség ismét abból adódik, hogy a minimum helye a $\sigma = \bigotimes_{X \in \xi} \varrho_X$ [22].)

A ξ -összefonódás a tiszta állapotokra megszorított ξ -korreláció konvextető-kiterjesztése [24]

$$E_{\xi}(\varrho) = \min \left\{ \sum_i p_i I_{\xi}(\pi_i) \mid \pi_i \in \mathcal{P}_L, p_i \geq 0, \|\mathbf{p}\|_1 = 1 : \sum_i p_i \pi_i = \varrho \right\}, \quad (42)$$

ami LOCC műveletekre szintén nem nő. A fent bevezetett mennyiségek hűek, azaz I_{ξ} , valamint E_{ξ} pontosan akkor nulla, ha ξ -korrelálatlan, illetve ξ -szeparálható az állapot. Továbbá az is teljesül, hogy $E_{\xi} \leq I_{\xi}$.

Megmutatható, hogy a ξ -korreláció és a ξ -összefonódás *sokrészmonoton* [24, 25]:

$$v \preceq \xi \iff I_v \geq I_\xi, \quad (43)$$

$$v \preceq \xi \iff E_v \geq E_\xi, \quad (44)$$

vagyis finomabb felbontásra nézve minden rendszer korreláltabb, illetve összefon-
tabb. Tehát a korrelációt és összefonódást jellemző függvényhalmazok struktúráját
is a P_I háló jellemzi.

2.5.3. II. szint:

A $\xi = \{\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_{|\xi|}\}$ ideállal megadott korreláció- és összefonódás-fogalmak
számszerű jellemzésére a 2.5.2. fejezet gondolatmenete továbbvihető. Tehát a $\varrho \in \mathcal{D}$
állapot ξ -korrelációja (ξ -kölcönös információja) megadható, mint az állapot
megkülönböztethetősége a ξ -korrelálatlanoktól [24, 25]:

$$I_\xi(\varrho) = \min_{\sigma \in \mathcal{D}_{\xi\text{-unc}}} D(\varrho||\sigma) = \min_{\xi \in \xi} \min_{\sigma \in \mathcal{D}_{\xi\text{-unc}}} D(\varrho||\sigma) = \min_{\xi \in \xi} \sum_{X \in \xi} S(\varrho_X) - S(\varrho) \quad (45)$$

A második egyenlőség azért áll fenn, mert halmazok uniójára történő minimalizálás
ugyanazt jelenti, mint először az egyes halmazok minimumát megkeresni, majd
ezek legkisebb elemét venni.

A ξ -összefonódás a tiszta állapotokra megszorított ξ -korreláció konvextető-
kiterjesztése [24]:

$$E_\xi(\varrho) = \min \left\{ \sum_i p_i I_\xi |_{\mathcal{P}(\pi_i)} \mid \pi_i \in \mathcal{P}_L, p_i \geq 0, \|\mathbf{p}\|_1 = 1 : \sum_i p_i \pi_i = \varrho \right\}, \quad (46)$$

ami LOCC transzformációkra szintén nem nő. Itt is belátható, hogy mindkét
mennyiség hű, azaz I_ξ , valamint E_ξ pontosan akkor nulla, ha ξ -korrelálatlan, illetve
 ξ -szeparálható az állapot. Valamint $E_\xi \leq I_\xi$ ugyanúgy teljesül.

Megmutatható, hogy a ξ -korreláció és a ξ -összefonódás *sokrészmonoton* [24,
25]:

$$\mathbf{v} \preceq \xi \iff I_{\mathbf{v}} \geq I_\xi, \quad (47)$$

$$\mathbf{v} \preceq \xi \iff E_{\mathbf{v}} \geq E_\xi. \quad (48)$$

A P_{II} halmaz két speciális típusú eleme, μ_k , $\nu_{k'}$, a (38) és (39) definícióik
szerint vihetők tovább a korrelációmértékekre. A k -particionálhatósági korreláció
valamint a k' -produkálhatósági korreláció [25]

$$I_{k\text{-part}}(\varrho) := I_{\mu_k}(\varrho) = \min_{|\mu| \geq k} I_\mu(\varrho), \quad (49)$$

$$I_{k\text{-prod}}(\varrho) := I_{\nu_{k'}}(\varrho) = \min_{\forall N \in \nu: |N| \leq k'} I_\nu(\varrho) \quad (50)$$

szerint adható meg, valamint a k -particionálhatósági összefonódás, illetve a k' -produkálhatósági összefonódás:

$$E_{k \text{ part}}(\varrho) := E_{\mu_k}(\varrho), \quad (51)$$

$$E_{k' \text{ prod}}(\varrho) := E_{\nu_{k'}}(\varrho). \quad (52)$$

Ezeknek a mennyiségeknek a sokrész-monotonitásai a k, k' paramétereikkel kifejezhetők:

$$\mu_k \preceq \mu_l \iff k \geq l \iff I_{k \text{ part}} \geq I_{l \text{ part}}, \quad (53)$$

$$\nu_{k'} \preceq \nu_{l'} \iff k' \leq l' \iff I_{k' \text{ prod}} \geq I_{l' \text{ prod}}, \quad (54)$$

$$\mu_k \preceq \mu_l \iff k \geq l \iff E_{k \text{ part}} \geq E_{l \text{ part}}, \quad (55)$$

$$\mu_{k'} \preceq \mu_{l'} \iff k' \leq l' \iff E_{k' \text{ prod}} \geq E_{l' \text{ prod}}. \quad (56)$$

3. Sűrűségmátrixos renormálásicsoport (DMRG)

Az előző fejezetben megismert új eszköztárat eddig csak molekulák elektron-szerkezetének elemzésére használták [25], a dolgozatban pedig különböző modellek által leírt spinláncok vizsgálatára fogom használni. Ahogy említettük, az ilyen típusú problémák számítására a DMRG jelent hatékony megoldást.

Wilson számára a Kondo-probléma megoldása Nobel-díjat ért, ám ahogy említettük, az NRG várt univerzalitása elmaradt. Az eljárást White 1992-ben bővítette ki, ezzel kifejlesztve a DMRG-algoritmust [11, 12]. Az egyik fontos alapötlet a módszerben, hogy a renormálandó láncokhoz környezetet rendelünk, így az többé már nem izolált; a másik újítás a renormálás során megtartott bázisállapotok kiválasztásának módja a Schmidt-dekompozíció alapján.

A lánc állapotvektorát a

$$|\psi_{a,\gamma_a}\rangle \otimes |\psi_{\{\ell+1\},\gamma_{\{\ell+1\}}}\rangle \otimes |\psi_{\{\ell+2\},\gamma_{\{\ell+2\}}}\rangle \otimes |\psi_{b,\gamma_b}\rangle \quad (57)$$

bázison írjuk fel, ahol $a = \{1, \dots, \ell\}$ a bal oldali ℓ rácspontot tartalmazó blokkot jelöli, $\psi_{\{\ell+1\}}$ és $\psi_{\{\ell+2\}}$ két egyrácspontos állapot, $b = \{\ell+3, \dots, N\}$ pedig a jobb oldali blokk. Az így kapott elrendezés – szimbolikusan $a \bullet \bullet b$ – az úgynevezett *superblokk*, ami 7. ábrán látható. A teljes lánc Hamilton-operátorának diagonalizálásával előállítható a probléma szempontjából érdekes sajátállapot, ami legtöbbször az alapállapot. Ez a DMRG úgynevezett *célállapota*, aminek az (57) bázis szerinti kifejtése

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= \sum_{\gamma_a, \gamma_{\{\ell+1\}}, \gamma_{\{\ell+2\}}, \gamma_b} c_{\gamma_a, \gamma_{\{\ell+1\}}, \gamma_{\{\ell+2\}}, \gamma_b} |\psi_{a,\gamma_a}\rangle \otimes |\psi_{\{\ell+1\},\gamma_{\{\ell+1\}}}\rangle \otimes |\psi_{\{\ell+2\},\gamma_{\{\ell+2\}}}\rangle \otimes |\psi_{b,\gamma_b}\rangle \\ &\equiv \sum_{\gamma_A, \gamma_B} c_{\gamma_A, \gamma_B} |\varphi_{A,\gamma_A}\rangle \otimes |\varphi_{B,\gamma_B}\rangle, \end{aligned} \quad (58)$$

ahol bevezettük $a\bullet$ részrendszer állapotaira $|\varphi_{\mathcal{A},\gamma_{\mathcal{A}}}\rangle$, valamint $\bullet b$ részrendszer állapotaira $|\varphi_{\mathcal{B},\gamma_{\mathcal{B}}}\rangle$ jelöléseket. A renormálási lépés során az $\mathcal{A}$ blokk redukált sűrűségmátrixát parciális nyomképzéssel kapjuk:

$$\varrho_{\mathcal{A}} = \text{Tr}_{\mathcal{B}} |\psi\rangle\langle\psi| = \sum_{\gamma_{\mathcal{A}},\gamma'_{\mathcal{A}}} \left(\sum_{\gamma_{\mathcal{B}}} c_{\gamma_{\mathcal{A}},\gamma_{\mathcal{B}}} c_{\gamma'_{\mathcal{A}},\gamma_{\mathcal{B}}}^* \right) |\varphi_{\mathcal{A},\gamma_{\mathcal{A}}}\rangle\langle\varphi_{\mathcal{A},\gamma'_{\mathcal{A}}}|. \quad (59)$$

Legyen az a blokk állapotainak száma D , az egyrácspont szabadsági foka pedig d . A rendszer méretének növelésével az állapotok száma exponenciálisan növekedne, ezért az $\mathcal{A}$ egyesített részrendszer csak azon D' állapotait szeretnénk megtartani, amelyek a legnagyobb súllyal vannak jelen. Tehát a (16) formulát felhasználva, ha $\varrho_{\mathcal{A}}$ -nak a legnagyobb $\omega_1, \dots, \omega_{D'}$ sajátértékeihez tartozó sajátállapotait egy $(D' \times Dd)$ méretű O_T transzformációs mátrixba rendezzük, akkor ezzel előállíthatók az új $a' = \{1, \dots, \ell, \ell + 1\}$ blokkon ható elforgatott rácsoperátorok:

$$O_{a'} = O_T(O_a \otimes O_{\{\ell+1\}})O_T^\dagger \equiv O_T(O_{\mathcal{A}})O_T^\dagger, \quad (60)$$

ahol O_a és $O_{\{\ell+1\}}$ mérete $(D \times D)$, illetve $(d \times d)$. Az új bázis az állapotok elhagyása miatt nem lesz teljes,

$$\sum_{\gamma_{a'}=1}^{D'} |\psi_{a',\gamma_{a'}}\rangle\langle\psi_{a',\gamma_{a'}}| \neq \text{I}, \quad (61)$$

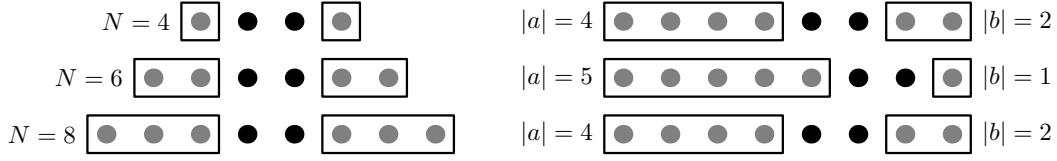
ezért a renormálás során *vágási hiba* jelenik meg, amelynek egy lehetséges mérőszáma az

$$\epsilon = 1 - \sum_{\gamma_{a'}=1}^{D'} \omega_{\gamma_{a'}} \quad (62)$$

mennyiség. A következő lépésben $a' \rightarrow a$ átjelöléssel folytatjuk az algoritmust.

Kiindulásként a lánc felépítéséhez először négy állapotot veszünk, majd a jobb és bal oldali blokkok szimmetrikus növelésével a kívánt lánchosszig folytatjuk az eljárást. Ezen úgynevezett *végtelenrács-algoritmus* során minden lépésben letároljuk az adott blokkokra vonatkozó információkat. Miután elértük az N hosszúságú láncot, a *végesrács-algoritmus* a blokkokat szisztematikusan átméretezve folytatja a renormálást az előre-hátra „cipzárázással”, ahogyan a 7. ábra mutatja, ezzel egyre pontosabban meghatározhatók a keresett állapotok, rácsoperátorok.

Egy DMRG renormálási lépés – (16) miatt – lényegében egy *szinguláris felbontás*. A transzformációs O_T mátrix mérete $D' \times Dd$, amit ha átrendezünk, akkor d darab $D' \times D$ méretű $\mathbf{A}$ mátrixot kapunk egy renormálási lépésben. A következő fejezetben látni fogjuk, ha ezzel építjük fel az állapotvektort, akkor ez



7. ábra: A végtelenrács-algoritmussal a kívánt hosszúságú láncot építjük fel. A végesrács-algoritmus a cipzárzás során a blokkállapotokat, -operátorokat visszatölti a háttértárról, és iterálással pontosítja a reprezentációt.

egy MPS alakú megoldás. Ez N hosszúságú lánc esetén azt jelenti, hogy vágás nélkül az $\mathbf{A}_1, \dots, \mathbf{A}_N$ mátrixok méretei $(1 \times d), (d \times d^2), \dots, (d^{\frac{N}{2}-1} \times d^{\frac{N}{2}}), (d^{\frac{N}{2}} \times d^{\frac{N}{2}-1}), \dots, (d \times 1)$. Természetes, hogy elég nagy lánc hossz esetén korlátot kell szabni a teljes Hilbert-tér dimenziójának, azaz a DMRG-algoritmus során megtartott állapotok számának, így az $\mathbf{A}$ mátrixok a gyakorlatban alkalmazott számolások során $(1 \times d), (d \times d^2), (d^2 \times d^3), (d^3 \times D), (D \times D), \dots, (D \times d^3), \dots, (d \times 1)$ alakúak.

Ebben a képen az mondható, hogy a DMRG-algoritmus az MPS-mátrixok optimalizálását végzi el, vagy másképp fogalmazva a DMRG egy olyan variációs módszer, amelyben az ansatz MPS alakú [34, 35]. A DMRG és MPS közötti kapcsolat részletesen [36] összefoglaló írásban található meg, a következő fejezetben a munkám szempontjából fontos pontokat részletezem.

4. Mátrixszorzat-állapot (MPS)

Egy állapotvektort általában ortonormált rendszerek tenzorszorzatterén való kifejtésével, a

$$|\psi\rangle = \sum_{\gamma_1, \gamma_2, \dots} c_{\gamma_1, \gamma_2, \dots} |\varphi_{1, \gamma_1}\rangle \otimes |\varphi_{2, \gamma_2}\rangle \otimes \dots \quad (63)$$

alakban adunk meg, ahol a $\gamma_1, \gamma_2, \dots$ indexek $d_1, d_2, \dots$ különböző értéket vehetnek fel a lokális szabadsági fokoktól függően. Az együtthatókat tartalmazó $c \in \mathbb{C}^{d_1 \times d_2 \times \dots}$ tenzor a rácspontok számával exponenciálisan növekvő elemet tartalmaz; numerikus kezelése, optimalizálása nehéz. Ezért első lépésként tekintünk ennek a $c_{\gamma_1, \gamma_2, \dots} = C_{(\gamma_1), (\gamma_2, \gamma_3, \dots)}^{[1]}$ átindexelését! Ezzel $\mathbf{C}$, mint $\mathbb{C}^{d_1 \times (d_2 \cdot d_3 \cdot \dots)}$ mátrix a (16) szinguláris felbontás segítségével $\mathbf{C} = \mathbf{U} \mathbf{S} \mathbf{V}^\dagger$ alakra hozható.

$$C_{(\gamma_1), (\gamma_2, \gamma_3, \dots)}^{[1]} = \sum_{\alpha_1} U_{(\gamma_1), \alpha_1}^{[1]} S_{\alpha_1, \alpha_1}^{[1]} (V^{[1]^\dagger})_{\alpha_1, (\gamma_2, \gamma_3, \dots)} \equiv \sum_{\alpha_1} A_{1, \gamma_1}^{\alpha_1} C_{(\alpha_1, \gamma_2), (\gamma_3, \dots)}^{[2]} \quad (64a)$$

A második egyenlőség $\mathbf{S}^{[1]}$ és $\mathbf{V}^{[1]^\dagger}$ indexeinek összeajtése, majd a megmaradó indexek átcsoportosítása után kapható. A kvantummechanikai rendszer szempontjából

a γ indexek relevánsak, például ez indexeli az impulzusmomentum vetületét, vagy ez kódolja a molekulapályák betöltöttségét, ezért ezeket *fizikai indexeknek* nevezzük. Az α indexek csupán a dekompozícióban megjelenő belső *összegző*-, vagy másképp *virtuális indexek*. Ezért $\mathbf{U}^{[1]}$ -re úgy érdemes tekinteni, mint $\mathbf{A}_{1,\gamma_1}$ vektorok összességére. A következő lépésben a felbontást hasonlóan végezzük:

$$C_{(\alpha_1,\gamma_2),(\gamma_3,\dots)}^{[2]} = \sum_{\alpha_2} U_{(\alpha_1,\gamma_2),\alpha_2}^{[2]} S_{\alpha_2,\alpha_2}^{[2]} (V^{[2]\dagger})_{\alpha_2,(\gamma_3,\dots)} \equiv \sum_{\alpha_1} A_{2,\gamma_2}^{\alpha_1\alpha_2} C_{(\alpha_2,\gamma_3),(\gamma_4,\dots)}^{[3]}. \quad (64b)$$

Ebben a lépésben U háromindexes mennyiséget $\mathbf{A}_{2,\gamma_2}$ mátrixoknak feleltettük meg. Ha a dekompozíciót a lánc N hosszúságáig folytatjuk, az állapotvektor mátrixszorzat-alakja

$$|\psi\rangle = \sum_{\gamma_1,\gamma_2,\dots,\gamma_N} \mathbf{A}_{1,\gamma_1} \mathbf{A}_{2,\gamma_2} \dots \mathbf{A}_{N,\gamma_N} |\varphi_{1,\gamma_1}\rangle \otimes |\varphi_{2,\gamma_2}\rangle \otimes \dots \otimes |\varphi_{N,\gamma_N}\rangle. \quad (65)$$

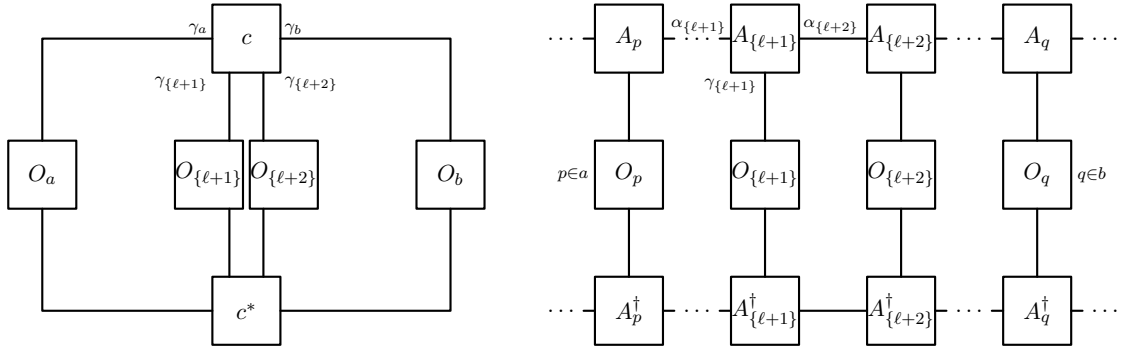
Egy $O = O_1 \otimes O_2 \otimes \dots \otimes O_N$ operátor várhatóértékét a mátrixszorzat-állapotot használva a

$$\langle\psi|O|\psi\rangle = \sum_{\substack{\gamma_N, \\ \gamma'_N}} O_{N,\gamma'_N,\gamma_N} \mathbf{A}_{N,\gamma'_N}^\dagger \left(\dots \left(\sum_{\substack{\gamma_2, \\ \gamma'_2}} O_{2,\gamma'_2,\gamma_2} \mathbf{A}_{2,\gamma'_2}^\dagger \left(\sum_{\substack{\gamma_1, \\ \gamma'_1}} O_{1,\gamma'_1,\gamma_1} \mathbf{A}_{1,\gamma'_1}^\dagger \mathbf{A}_{1,\gamma_1} \right) \mathbf{A}_{2,\gamma_2} \right) \dots \right) \mathbf{A}_{N,\gamma_N} \quad (66)$$

alakban írhatjuk, ahol O_i az i -edik rácsponthoz rendelt Hilbert-tér lineáris operátora, és a mátrixelemei $O_{i,\gamma'_i,\gamma_i} = \langle\varphi_{i,\gamma'_i}|O_i|\varphi_{i,\gamma_i}\rangle$. A teljes rendszer tiszta állapotának sűrűségmátrixa pedig az alábbi:

$$\begin{aligned} |\psi\rangle\langle\psi| = & \sum_{\substack{\gamma_1,\gamma_2,\dots,\gamma_N \\ \gamma'_1,\gamma'_2,\dots,\gamma'_N}} \mathbf{A}_{1,\gamma_1} \mathbf{A}_{2,\gamma_2} \dots \mathbf{A}_{N,\gamma_N} \mathbf{A}_{N,\gamma'_N}^\dagger \dots \mathbf{A}_{2,\gamma'_2}^\dagger \mathbf{A}_{1,\gamma'_1}^\dagger \times \\ & \times |\varphi_{1,\gamma_1}\rangle\langle\varphi_{1,\gamma'_1}| \otimes |\varphi_{2,\gamma_2}\rangle\langle\varphi_{2,\gamma'_2}| \otimes \dots \otimes |\varphi_{N,\gamma_N}\rangle\langle\varphi_{N,\gamma'_N}|. \end{aligned} \quad (67)$$

A DMRG-állapotot (57) alapján egy négyindexes tenzor reprezentál, az operátorok pedig $(D_a \times D_a)$, $(d_{\{\ell+1\}} \times d_{\{\ell+1\}})$, $(d_{\{\ell+2\}} \times d_{\{\ell+2\}})$, $(D_b \times D_b)$ méretű mátrixok. Ezért az mondható, hogy a DMRG egy operátor jellegű megközelítés, mert a (60) renormált O operátorokat tartjuk meg a lépések során. Ezzel szemben az MPS-nél az összes rácsoперátor $(d_j \times d_j)$ méretű mátrix, viszont egy adott $\gamma_1, \dots, \gamma_N$ fizikaiindex-konfiguráció felépítéséhez N darab $D \times D'$ dimenziós mátrix szükséges, így ezt egy állapot jellegű reprezentációnak tekintjük. A két kép grafikus ábrázolását a 8. ábra mutatja.



8. ábra: DMRG- és MPS-hullámfüggvénnyel számolt várhatóérték szemléltetése. A tenzorok indexeinek összeejtését a vonallal való összekötés szimbolizálja.

Spinmodellek esetén egy rácspont szabadsági foka 1 nagyságrendű. Gapes modelleknél, ahol a blokkentrópia és D is szaturálódik, több ezer rácspontot tartalmazó láncot is lehet számolni. Viszont kritikus modelleknél gyakran 20 – 50 ezer blokkállapotot kell megtartani a megfelelő leíráshoz, korlátozva ezzel az elérhető láncosszót.

A DMRG szintén biztosítja az MPS alakot, amire épülő algoritmusokat *post-DMRG* néven hivatkozzák a szakirodalomban. Ez utóbbi előnye, hogy független DMRG-számolások által kapott MPS-ek között tetszőleges operátorkombinációk várhatóértékei kiszámolhatók. TDK-munkámban az ilyen algoritmusok kifejlesztését végeztem el.

4.1. Vegyértékkötésű modell

A mátrixszorzat-állapot jelentősége a (4) bilineáris-bikvadratikus modell egy speciális, egzaktul megoldható pontjában mutatható be, ami az irodalomban AKLT-pontként ismert Affleck, Lieb, Kennedy és Tasaki munkája nyomán [37]. Az alapállapot itt úgynevezett VBS-állapot (valence-bond-solid). Ebben az esetben az $\mathbf{A}$ mátrixokat nem a (64) eljárással nyerjük, hanem közvetlenül kiszámolhatók a probléma sajátossága miatt.

Belátható, hogy a (4) formulában $\theta = \arctg \frac{1}{3}$ választás mellett a bilineáris-bikvadratikus modell ekvivalens egy olyan Hamilton-operátorral, ami két szomszédos spin $S = 2$ -es altérre vetítő projektorok összegeként áll elő [1].

Az $S = 1$ állapotteret $|\varphi_{i,\pm\frac{1}{2}}\rangle$ bázisvektorok segítségével reprezentált feles spinekkel építjük fel ($\dim \mathcal{H}_i = 2$). Az antiferromágneses állapotot úgy formáljuk meg, hogy bizonyos szomszédos feles spinek – vegyértékkötésre (valence bond) emlékeztető – szingulett állapotban vannak, innen kapta a modell a nevét.

$$\begin{aligned}
\mathcal{H} &= \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 \otimes \mathcal{H}_3 \otimes \mathcal{H}_4 \otimes \mathcal{H}_5 \otimes \dots \\
|\tilde{\Psi}\rangle &= |\varphi_1\rangle \otimes |\phi_{\{2,3\}}\rangle \otimes |\phi_{\{4,5\}}\rangle \otimes \dots
\end{aligned} \tag{68}$$

A szingulett állapotok az $\frac{1}{2} \otimes \frac{1}{2}$ bázison:

$$\begin{aligned}
|\phi_{\{i,i+1\}}\rangle &= \sum_{\alpha_i, \alpha_{i+1} = -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}} \phi_{\{i,i+1\}}^{\alpha_i \alpha_{i+1}} |\varphi_{i,\alpha_i}\rangle \otimes |\varphi_{i+1,\alpha_{i+1}}\rangle, \quad i = 2, 4, 6, \dots, \\
\phi_{\{i,i+1\}} &= \begin{bmatrix} 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \end{bmatrix}.
\end{aligned} \tag{69}$$

Egy leképezést keresünk, amellyel a spinlánc állapotvektorát a tripllett altér $\{|\varphi_{\{i-1,i\},\gamma}\rangle\}_{\gamma=-1,0,1}$ sajátbázisán kifejtve nyerjük, figyelembe véve, hogy alapállapotban két szomszédos spin összegének abszolút értéke kisebb kettőnél, azaz $|\mathbf{S}_{\{i-1,i\}} + \mathbf{S}_{\{i+1,i+2\}}| < 2$ [1]. Ezt úgy érhetjük el, hogy a buborékkal szimbolizált spinpároknak csak a tripllett állapotait tartjuk meg, amik a

$$\begin{aligned}
|\psi_{\{i-1,i\},\gamma}\rangle &= \sum_{\alpha_{i-1}, \alpha_i = -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}} \psi_{\{i-1,i\},\gamma}^{\alpha_{i-1} \alpha_i} |\varphi_{i-1,\alpha_{i-1}}\rangle \otimes |\varphi_{i,\alpha_i}\rangle, \quad i = 2, 4, 6, \dots, \\
\psi_{\{i-1,i\},-1} &= \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad \psi_{\{i-1,i\},0} = \begin{bmatrix} 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \end{bmatrix}, \quad \psi_{\{i-1,i\},+1} = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}.
\end{aligned} \tag{70}$$

alakban írhatók. Ezzel a keresett leképezés

$$\begin{aligned}
P_{\{i-1,i\},\gamma} : \mathcal{H}_{i-1} \otimes \mathcal{H}_i &\rightarrow \mathcal{K}_{\{i-1,i\}} \quad (\dim \mathcal{K}_{\{i-1,i\}} = 3) \\
P_{\{i-1,i\}} &= \sum_{\gamma=-1,0,1} P_{\{i-1,i\},\gamma} = \sum_{\gamma=-1,0,1} |\varphi_{\{i-1,i\},\gamma}\rangle \langle \psi_{\{i-1,i\},\gamma}|,
\end{aligned} \tag{71}$$

amit hattatva a (68)-beli $|\tilde{\Psi}\rangle$ állapotvektorra megkapható az alapállapot:

$$|\Psi\rangle = \left(P_{\{1,2\}} \otimes P_{\{3,4\}} \otimes \dots \right) \left(|\zeta_{\{1\}}\rangle \otimes |\phi_{\{2,3\}}\rangle \otimes |\phi_{\{4,5\}}\rangle \otimes \dots \right). \tag{72}$$

Kifejtve a P hatását és felhasználva (69) és (70) alakot, valamint $\{i-1,i\} \rightarrow \frac{i}{2}$

0.436		+	-	+	-
		0	0	0	0
0.218		0	+	0	-
		+	0	-	0
-0.218		+	0	0	-
		+	-	0	0
		0	0	+	-
$\approx 10^{-16}$		+	+	-	-
		+	-	-	+

1. táblázat: DMRG-számolás VBS-állapotra az $S_{tot}^z = 0$ szektorban, $N = 4$ esetén nem szükséges vágást alkalmazni (a (62)-ben $\epsilon \approx 0$). A „+” $\longleftrightarrow$ „-” cserével kapott állapotok nincsenek feltüntetve, ugyanakkora együtthatóval jelennek meg a hullámfüggvényben.

átindexeléssel

$$\begin{aligned}
|\Psi\rangle &= \\
&\sum_{\substack{\gamma_{\{1,2\}}, \\ \gamma_{\{3,4\}}, \dots \\ = -1, 0, 1}} \sum_{\substack{\alpha_1, \alpha_2, \dots \\ = -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}}} \underbrace{\zeta_{\{1\}}^{\alpha_1} \psi_{\{1,2\}, \gamma_{\{1,2\}}}^*}_{\alpha_1 \alpha_2} \underbrace{\phi_{\{2,3\}}^{\alpha_2 \alpha_3} \psi_{\{3,4\}, \gamma_{\{3,4\}}}^*}_{\alpha_3 \alpha_4} \dots |\varphi_{\{1,2\}, \gamma_{\{1,2\}}}\rangle \otimes |\varphi_{\{3,4\}, \gamma_{\{3,4\}}}\rangle \dots = \\
&\sum_{\substack{\gamma_1, \gamma_2, \dots \\ = -1, 0, 1}} \sum_{\substack{\beta_1, \beta_2, \dots \\ = -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}}} A_{1, \gamma_1}^{\beta_1} A_{2, \gamma_2}^{\beta_1 \beta_2} \dots |\varphi_{1, \gamma_1}\rangle \otimes |\varphi_{2, \gamma_2}\rangle \dots = \\
&\sum_{\substack{\gamma_1, \gamma_2, \dots \\ = -1, 0, 1}} \mathbf{A}_{1, \gamma_1} \mathbf{A}_{2, \gamma_2} \dots |\varphi_{1, \gamma_1}\rangle \otimes |\varphi_{2, \gamma_2}\rangle \dots
\end{aligned} \tag{73}$$

Tehát a VBS-állapotban – a láncvégektől eltekintve – minden rácsponthoz ugyanazon három mátrix rendelhető:

$$\mathbf{A}_{i,-1} = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{A}_{i,0} = \begin{bmatrix} \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{A}_{i,+1} = \begin{bmatrix} 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 & 0 \end{bmatrix}. \tag{74}$$

Az $\mathbf{A}_{i,\pm 1}$ mátrixok nilpotensek, így a mátrixszorzat-állapotban zérus együtthatóval jelennek meg azok az állapotok, ahol két + vagy két – állapot követi egymást, sőt a 0 állapotok elhagyása után is váltakozva fordulnak elő a lánc mentén, erre az 1. táblázatban láthatunk egy példát. Tehát a Néel típusú rend megmarad az alapállapotban, a 0 állapotok pedig szabadon mozoghatnak. Ez a tulajdonság *rej-*

tett *topologikus* rendre utal, ami a *fűzéropertátor* várhatóértékével jellemezhető [38]:

$$g(i, j) = - \left\langle S_i^z \exp \left(i\pi \sum_{k=i+1}^{j-1} S_k^z \right) S_j^z \right\rangle. \quad (75)$$

A VBS-állapotban a határérték nem tűnik el, $g(|i-j| \rightarrow \infty) = \frac{4}{9}$. Továbbá látható, hogy nyitott határfeltétel esetén a láncvégeken lévő – (68) képlet ábráján is feltüntetett – szabad $\frac{1}{2}$ -es *végspinek* az alapállapot négyszeres degenerációjához vezetnek. Mivel ebben a θ pontban egzaktul megoldható a (4) bilineáris-bikvadratikus modell, ezért munkámat ennek a problémának implementálásával kezdtem, hogy ezzel tesztelhessem az általános MPS-szkripteket.

5. Eredmények

A szilárdtest-fizikában a hosszú távú rend jellemzéséhez a *korrelációs függvényt* úgy szokás definiálni, mint a (27) formulában bevezetett fizikai mennyiségek korrelációjának valós- vagy impulzustér szerinti függését. Spinláncok esetében a leggyakrabban vizsgált mennyiség két spinvetület (S^z) térbeli korrelációja:

$$C_{i|j}(\varrho_{ij}; S_i^z, S_j^z) = \langle S_i^z \otimes S_j^z \rangle - \langle S_i^z \rangle \langle S_j^z \rangle. \quad (76)$$

Ez arról ad jellemzést szemléletesen, hogy mérve i rácsponton lévő spinbeállást mi a valószínűsége, hogy j -ediken is ugyanazt kapjuk.

Ismeretes, hogy olyan modelleknél, ahol az alapállapotot Δ szélességű gap választja el a gerjesztésektől, a (76) korrelációs függvény exponenciálisan vág le, gyorsaságát $\xi_c \propto \frac{1}{\Delta}$ kitevővel jellemezzük:

$$C_{i|j}(\varrho_{ij}; S_i^z, S_j^z) \underset{\Delta \neq 0}{\propto} e^{-\frac{|i-j|}{\xi_c}}. \quad (77)$$

Kritikus rendszerek esetén tetszőlegesen kicsiny energiájú gerjesztések létezhetnek, a fluktuációk felerősödnek, így a (76) korrelációs függvény az exponenciálisnál lassabban, hatványfüggvény szerint (algebraian) cseng le η kitevővel:

$$C_{i|j}(\varrho_{ij}; S_i^z, S_j^z) \underset{\Delta=0}{\propto} |i-j|^{-\eta}. \quad (78)$$

Láthattuk a 2. fejezet folyamán, hogy a fizikai mennyiségek korrelációja szoros kapcsolatban van az állapot kölcsönös információjával egy adott felosztásra nézve. Ennél több is mondható, belátható (41) és (27) definíciókból, hogy

$$I_{i|j}(\varrho_{ij}) \geq \frac{C_{i|j}(\varrho_{ij}; O_i, O_j)^2}{2\|O_i\|_\infty^2 \|O_j\|_\infty^2}. \quad (79)$$

Tehát hasonló típusú (exponenciális, ill. algebrai) viselkedést feltételezve $I_{i|j}$ -re, a kölcsönös információ legalább kétszer nagyobb kitevővel ($\frac{2}{\xi_c}$ ill. 2η) cseng le, mint a leglassabban lecsengő $C_{i|j}$ korrelációs függvény [39].

Mivel – túl a (76) kifejezésen – számos más, fizikailag releváns operátorkombinációk korrelációs függvénye is információval szolgálhat, ezért célszerű az *általánosított korrelációs függvények* tulajdonságait vizsgálni. Ezért vezessünk be lineáris operátorokat a d dimenziós $\mathcal{H}$ Hilbert-téren, amik a bázisvektorokat egymásba transzformálják.

$$T_{\gamma'\gamma}|\varphi_\gamma\rangle = |\varphi_{\gamma'}\rangle, \quad T_{\gamma'\gamma}^{\alpha'\alpha} = \delta_{\gamma'\alpha'}\delta_{\gamma\alpha}. \quad (80)$$

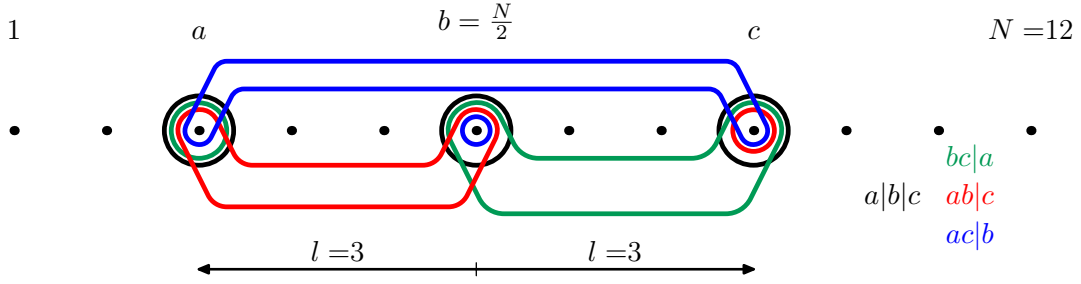
Ezek az *átmeneti operátorok* olyan $d \times d$ méretű mátrixokként reprezentálhatók, amelyek csak egy nem nulla elemet tartalmaznak. A d^2 darab operátor bázist alkot a $\text{Lin } \mathcal{H}$ téren, így tetszőleges fizikai mennyiség operátora kifejezhető ezen. Például (76) kifejezésben feles spin esetén $S_i^z = -\frac{1}{2}T_{i,\downarrow\downarrow} + \frac{1}{2}T_{i,\uparrow\uparrow}$. Látható, hogy ezen operátorok várhatóértékei pontosan az egyrácspontos ϱ_i állapot mátrixelemei lesznek. Hasonlóan bevezetve az i, j -edik rácspontra a T_i, T_j operátorokat, a korrelációs függvények megadhatók a sűrűségmátrixok elemeivel:

$$C(\varrho_{i|j}, T_{i,\gamma'_i\gamma_i}, T_{j,\gamma'_j\gamma_j}) = \langle T_{i,\gamma'_i\gamma_i} \otimes T_{j,\gamma'_j\gamma_j} \rangle - \langle T_{i,\gamma'_i\gamma_i} \rangle \langle T_{j,\gamma'_j\gamma_j} \rangle = \varrho_{ij}^{\gamma_i\gamma'_i, \gamma_j\gamma'_j} - \varrho_i^{\gamma_i\gamma'_i} \cdot \varrho_j^{\gamma_j\gamma'_j}. \quad (81)$$

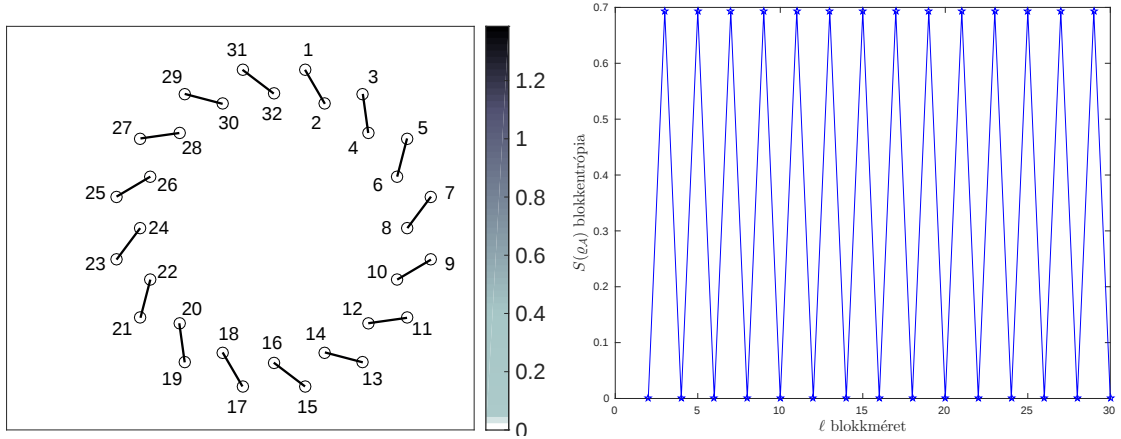
A (79) összefüggés minen O_i, O_j operátorra teljesül, így T_i, T_j operátorokból előállított általánosított korrelációs függvényekre is érvényes. Sőt, kettőnél több operátor különböző ξ -korrelációs függvényére is.

Munkám során DMRG számításokat végeztem a (3) J_1 – J_2 modell, valamint a (4) bilineáris-bikvadratikus modell különböző paramétereinek megválasztása mellett, és vizsgáltam a ξ -kölcsönös információ (41) és a ξ -korrelációs függvények viselkedését. A modellek analízisét jelenleg csak $N = 32$ hosszúságú láncok esetén vizsgáltam, mivel jelenleg az általam implementált post-DMRG függvények numerikus optimalizálása folyamatban van. Ez a lánc hossz a kritikus modelleknél nem elegendő a lecsengések pontos illesztéséhez, viszont az exponensben a (79) összefüggés értelmében fellépő kettes faktor ellenőrzésére jól szolgál.

A 2.4.1. fejezetben tárgyalt elemi részrendszereket csupán a hozzájuk rendelt Hilbert-tér jellemzi, ezért – ahogy a 4. ábrán látható – az $ij|k$ típusú felosztások között csupán kombinatorikai értelemben tettünk különbséget. Spinlánc esetén ez a szimmetria nem tartható, viszont fizikailag intuitív a 9. ábrán látható módon megválasztani a háromelemű részrendszerek pozícióját: a középsőnek kiszemelt rácspontot $b = \frac{N}{2}$ helyre rögzítem, a két szélső pontot pedig szimmetrikusan l ráczállandónnyival távolabb helyezem el, azaz $a(l) = \frac{N}{2} - l$, és $c(l) = \frac{N}{2} + l$. Ezzel a korrelációs függvények és az állapot korrelációmértékei – a és c címkéken keresztül – egyváltozósak.



9. ábra: Az l függvényében felvett három elemi részrendszer, és az általuk megvalósított lehetséges (nemtriviális) partíciók $N = 12$ -re bemutatva.



10. ábra: A Majumdar–Ghosh-modell alapállapota teljesen dimerizált, így az I_{ij} ($i, j \in L$) párkorreláció (páronkénti kölcsönös információ) és az $S(\rho_A)$ ($|\mathcal{A}| = \ell$) blokkentrópia jellegzetes viselkedést mutat.

5.1. Feles spinű J_1 – J_2 modell

A (3) modell két jellegzetes pontjának alapállapotának vizsgálatán keresztül mutatom be a fent említett mennyiségek szemléletes jelentését.

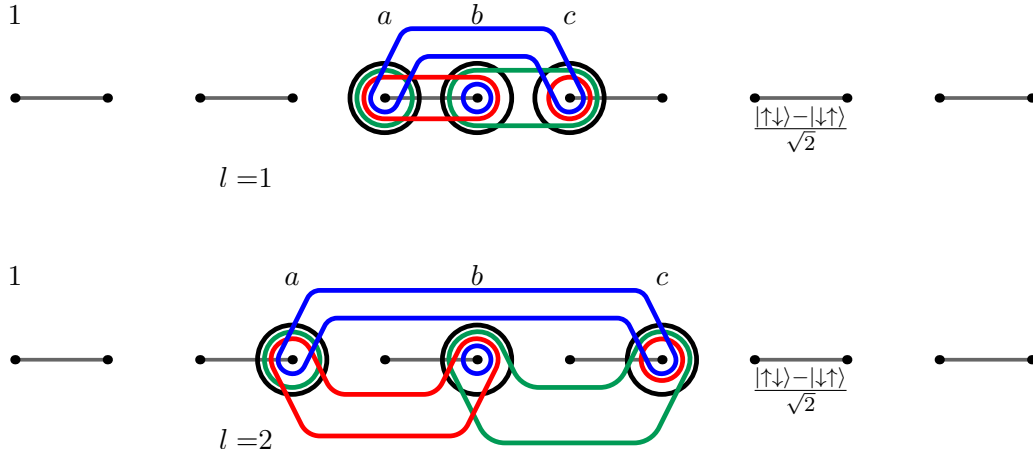
5.1.1. Majumdar–Ghosh-pont: $J_2 = \frac{1}{2}J_1$

Ahogy a bevezetésben említettük, a (3) modell alapállapotban teljesen dimerizált, tehát az alapállapot szorzat alakban írható:

$$|\psi\rangle = |\phi_{\{1,2\}}\rangle \otimes |\phi_{\{3,4\}}\rangle \otimes \dots, \quad (82)$$

és az energia a (69) $|\phi_{\{i,i+1\}}\rangle$ szingulett kötések $\varepsilon_s = -\frac{3}{4}$ energiájának az összege: $\varepsilon = \frac{N}{2}\varepsilon_s$.

Ebben az egyszerű esetben a 10. ábrán látható párkorreláció- és blokkentrópia-grafikon értelmezhető a szingulett állapotoknak, mint kötéseknek az elvágásával.



11. ábra: Az $\{a, b, c\} \subset L$ háromelemű rendszer lehetséges felosztásai a dimerizált láncon $l = 1$ és $l = 2$ esetén.

A fent említett módon kiválasztott három rácspont állapota $\varrho_{abc} = \text{Tr}_{L \setminus \{a, b, c\}}(\varrho)$. (Ahol nem vezet félreértésre, ott továbbiakban, például, a $I_{ab|c} := I_{ab|c}(\varrho_{abc})$ egyszerűsített jelölést használjuk.) Tiszta állapotok (16) Schmidt-dekompozíciója miatt $\text{Tr}_1 |\phi_{\{1,2\}}\rangle\langle\phi_{\{1,2\}}| \cong \text{Tr}_2 |\phi_{\{1,2\}}\rangle\langle\phi_{\{1,2\}}|$. Ezzel az egyrácspont-entrópiák bármely l esetén

$$S_a = S_b = S_c = \ln 2. \quad (83)$$

Abban a speciális esetben, amikor a három kiválasztott rácspont közvetlenül egymás mellett van ($l = 1$), az egyik pár biztosan szingulettet alkot. Ekkor a két- és háromrácspontos entrópiák a 11. ábra elrendezését használva

$$\begin{aligned} S_{ab} &= 0 & S_{ac} &= S_{bc} = 2 \ln 2, \\ S_{abc} &= \ln 2 \end{aligned}$$

a von Neumann-entrópia additivitását kihasználva. Ez szemléletesen azt jelenti, hogy egy részrendszer entrópiája annyiszor $\ln 2$, ahány „kötés elvágásával” (parciális nyomképzéssel szingulett állapotra való hatással) kapjuk meg a teljes rendszerből. Ekkor a kölcsönös információk (41) alapján az $l = 1$ konfigurációra:

$$\begin{aligned} I_{a|b} &= 2 \ln 2 & I_{a|c} &= I_{b|c} = 0, \\ I_{ab|c} &= 0 & I_{ac|b} &= I_{cb|a} = 2 \ln 2, \\ I_{a|b|c} &= 2 \ln 2. \end{aligned}$$

Viszont minden $l > 1$ esetén, a részrendszer elemszámával megegyező kötést kell elvágunk, ahogy a 11. ábra alsó része is mutatja, ezért minden további kölcsönös információ nulla (a vizsgált a, b, c pontokra).

Ezen kívül még az is látható, hogy teljesülnek az általánosan fennálló [25]

$$I_{i|j|k} - I_{ij|k} = I_{i|j} \quad (84)$$

alakú összefüggések, aminek jelentésére a későbbiekben szemléletes képet kapunk.

Hasonlóképpen értelmezhető a blokkentrópia rácspontonkénti ugrálása. Páros rácspontot tartalmazó blokk esetén a rendszer állapota korrelálatlan, páratlanra pedig korrelált az $\mathcal{A}|\mathcal{B}$ felosztásra nézve.

$$\varrho_{\{1,\dots,2k\}} = |\phi_{\{1,2\}}\rangle\langle\phi_{\{1,2\}}| \otimes \dots \otimes |\phi_{\{2k-1,2k\}}\rangle\langle\phi_{\{2k-1,2k\}}| \quad (85)$$

$$\varrho_{\{1,\dots,2k+1\}} = \varrho_{\{1,\dots,2k\}} \otimes \text{Tr}_{2k+2} |\phi_{\{2k+1,2k+2\}}\rangle\langle\phi_{\{2k+1,2k+2\}}| \quad (86)$$

Ezért a blokkentrópia $S(\varrho_{\{1,\dots,2k\}}) = 0$ és $S(\varrho_{\{1,\dots,2k+1\}}) = \ln 2$ érték között oszcillál a lánc mentén, amit a 10. ábrán is láthatunk.

Az elmondottakból és a (79) alapján következik, hogy minden korrelációs függvény minden $l > 1$ helyen zérus. Nem nulla értéket akkor vehet fel egy korrelációs függvény, ha $l = 1$, és a két rácspont szingulett állapotot alkot egymással.

5.1.2. Elsőszomszéd kölcsönhatás: $J_2 = 0$

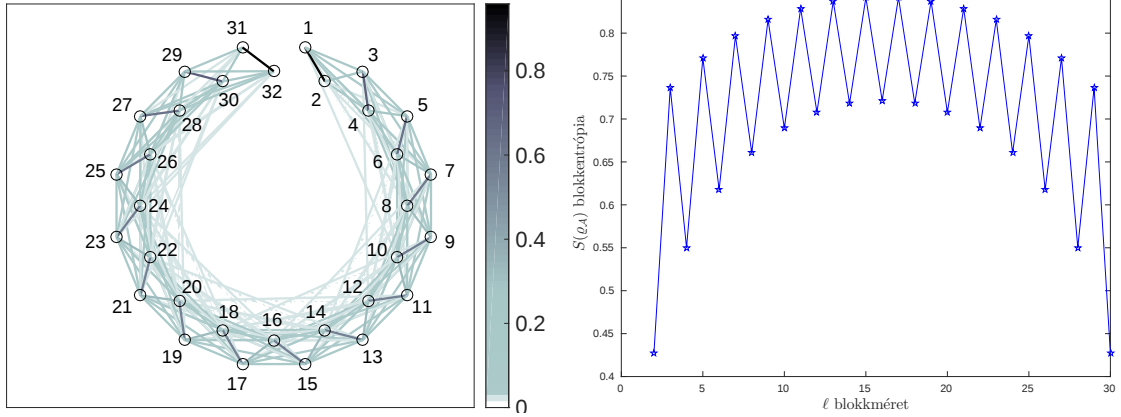
A másodszomszédok közti kölcsönhatást elhagyva a (3) modellből, a közis-mert feles spinű antiferromágneses ($J_1 > 0$) Heisenberg-láncot kapjuk. A rendszer kritikus, hosszú távú korrelációk jelennek meg, amit a 12. ábrán látható kölcsönös információ jól mutat. A diszperziós reláció alacsony energiás gerjesztésekre $\varepsilon(k) = J_1 \frac{\pi}{2} |\sin k|$ alakú, azaz $k = 0$ -ban és $k = \pi$ -ben lágy módusok jelennek meg, ezzel két rácspontos periodicitás alakul ki a láncon. Belátható, hogy a blokkentrópia kritikus rendszerekre

$$S_{\mathcal{A}}(\ell) \propto \ln \left[\frac{2N}{\pi} \sin \left(\frac{\pi \ell}{N} \right) \right] \quad (87)$$

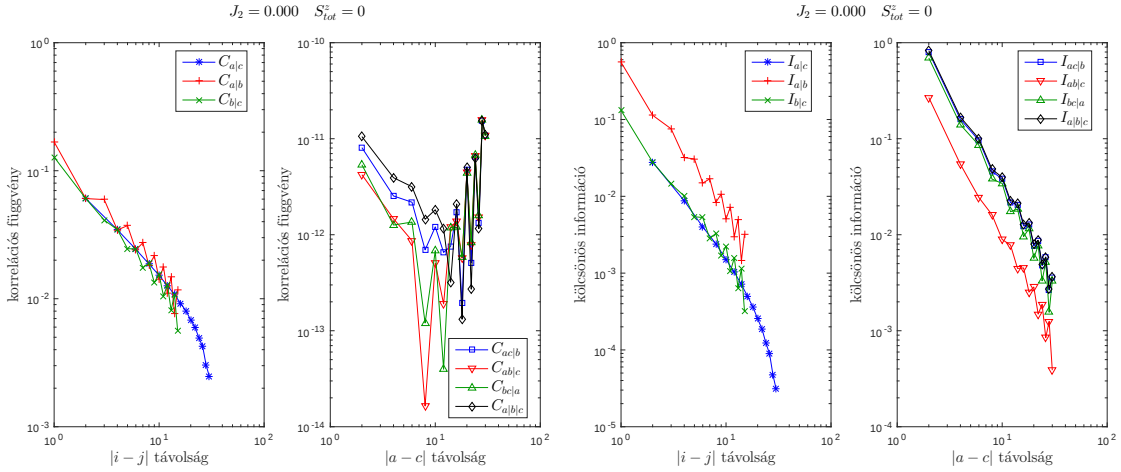
alakú, amelynek Fourier-spektrumából szintén a fenti periodicitás adódik [40, 7].

A (76) alakú korrelációs függvények algebraian $\eta = 1$ kitevővel csengenek le, ahogy a 13. ábrán látható, valamint megfigyelhető $a|c$ felosztás esetén nagy l értékekre a *felületi exponens* ($\eta_s \approx 2$) hatása. Jól látható, hogy az $a|c$ és $ac|b$ felosztáshoz tartozó mennyiségek nem érzik a kettes periodicitást, mivel $a(l)$ és $c(l)$ két rácspontonként távolodnak egymástól. Háromrészes S^z korrelációs függvények eltűnése a 2. táblázatban feltüntetett $N = 4$ -es lánc DMRG-hullámfüggvényével demonstrálható, ugyanis a spintükrözött állapotok együtthatói megegyeznek, ezért a páratlan S_z operátort tartalmazó várhatóértékek (és az ehhez tartozó korrelációs függvények is) nullák.

A 14. ábrán látható, hogy teljesül a (79) állítás, azaz a korrelációs függvények maximum fele olyan gyorsan csengenek le, mint a kölcsönös információ. Sőt az összefüggésre numerikus egyenlőséget is találtunk bizonyos átmenetioperátor-kombinációk mellett.



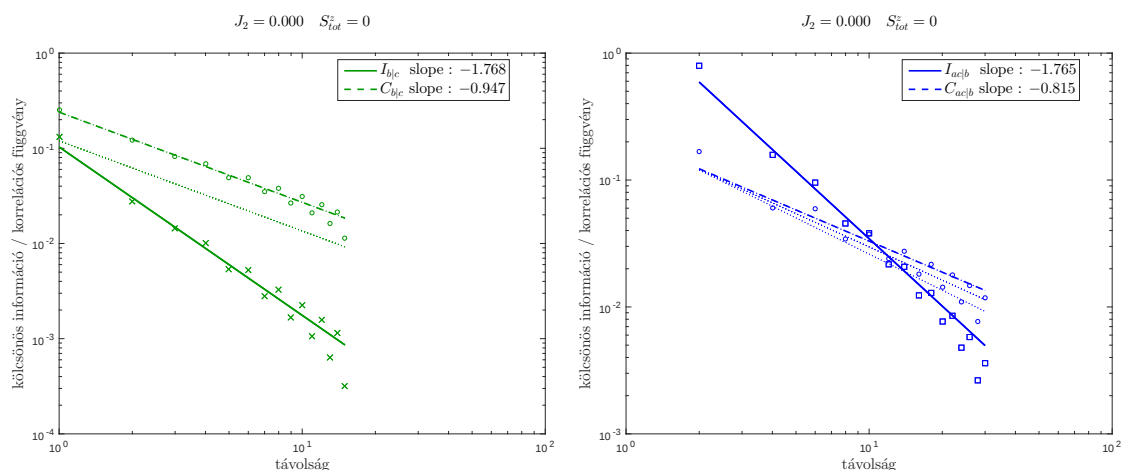
12. ábra: A feles spinű Heisenberg-modell páronkénti kölcsönös információja és a blokkentropiája jól mutatja a kritikus rendszerek viselkedését.



13. ábra: Korrelációs függvények és kölcsönös információk feles spinű Heisenberg-modellre. A Hamilton-operátor diagonalizálásánál kirótt 10^{-9} toleranciához képest a háromrészes S^z korrelációs függvények eltűnnek, tehát nem ezek a fizikai operátorok felelősek az állapot háromrész-korrelációjáért.

0.558	$ \uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\rangle$
0.558	$ \downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\rangle$
-0.149	$ \uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle$
-0.149	$ \downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle$
-0.408	$ \uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\rangle$
-0.408	$ \downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\rangle$

2. táblázat: DMRG-számolás feles spinű Heisenberg-lánc alapállapotára $S_{tot}^z = 0$ megszorítással.



14. ábra: Adott felosztásra vett kölcsönös információ és a leghosszabban lecsengő általános korrelációs függvény illesztése $S = \frac{1}{2}$ -es Heisenberg-modelldre. Szaggatott vonal a többi korrelációs függvény meredekségét mutatja.

5.2. Bilineáris-bikvadratikus modell

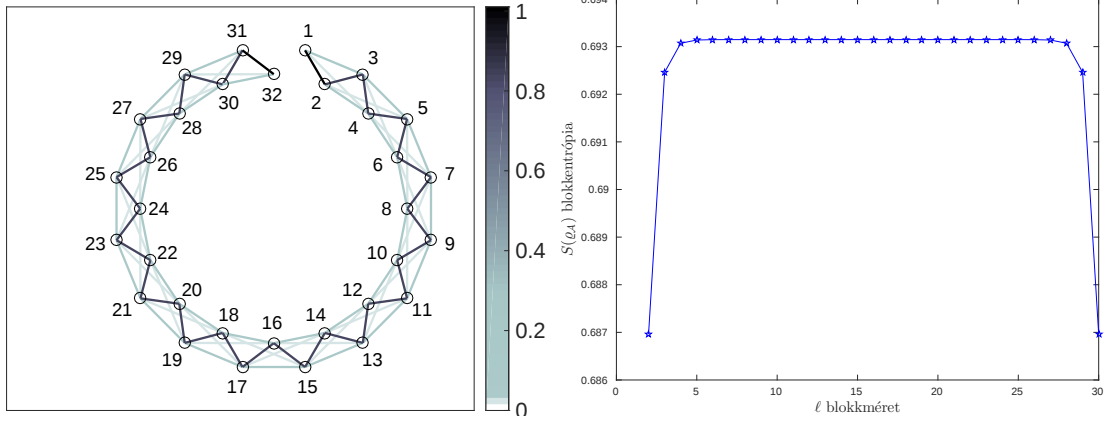
A következőkben a (4) modell 2. ábrán feltüntetett fázisdiagramjának nevezetes pontjait elemzem.

5.2.1. Vegyértékkötésű modell (VBS): $\theta = \arctg \frac{1}{3}$

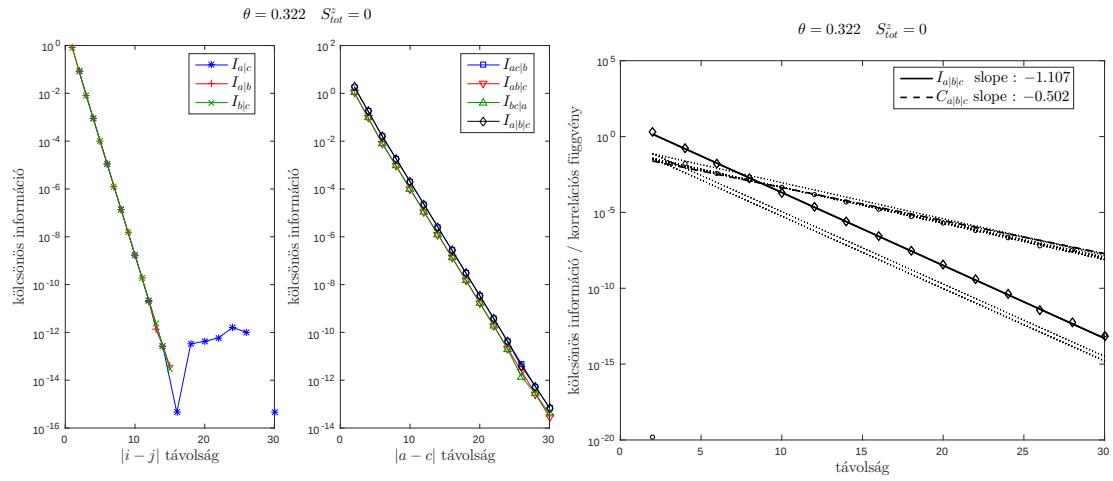
A (4) modell 4.1. fejezetben bemutatott AKLT-megoldása során láttuk, hogy minden szomszédos rácspontpárt szingulett kötés kapcsol össze, és ahogy a 15. ábrán látszik, a nem nulla gap miatt nincsenek hosszú távú párkorrelációk. A blokkentrópia telítődik, hiszen összehasonlítva a (68) egyenlet ábráját, és a 11. ábrán lévő vázlatos rajzokat, a VBS-állapotban – távol a szélektől – *bárhol* kettévágva a láncot egy szingulett kötéshez tartozó entrópiát kapunk ($\ln 2$).

A VBS-állapotot azért kényelmes vizsgálni, mert a Haldane-fázis egy olyan pontjában van, ahol a korábban látott módon egzakt megoldás adható, valamint a korrelációs függvények tisztán exponenciális lecsengésűek $\frac{1}{\xi_c} = \ln 3 \approx 1.099$ kitevővel [41]. A kettes faktor az exponensekben tisztán látszik, ami megerősíti a korábbi eredményeket [39]. Az újonnan alkalmazott háromrész-korrelációk segítségével jól látható, hogy a rendszerben egy karakterisztikus hossz van, az összes kölcsönös információ a részrendszerek közötti legkisebb távolság függvényében csökken a említett ξ_c kitevő szerint. Továbbá minden ℓ -re jól teljesül $I_{ac|b} = I_{ab|c} = I_{bc|a} = I_{a|b|c}$, azaz abc rendszer ilyen szempontból érzéketlen a feldarabolásra, ami a rövid korrelációs hossz velejárója.

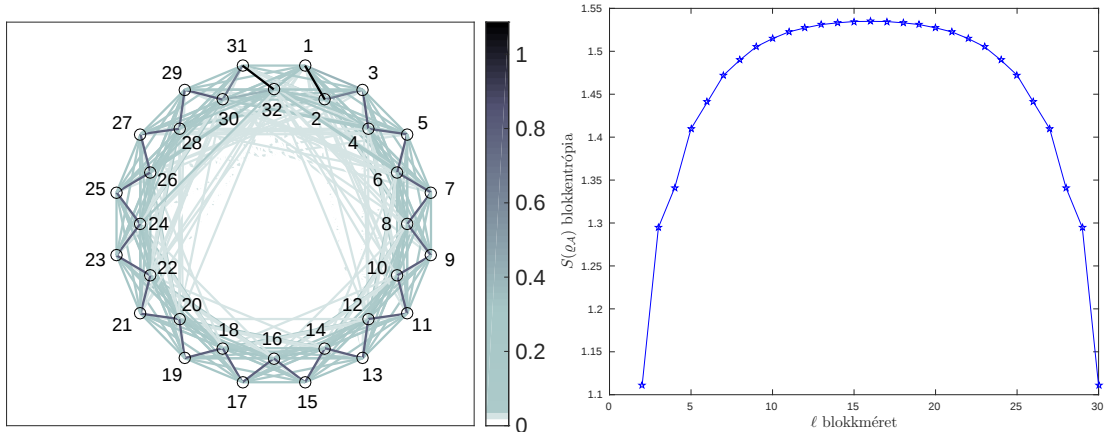
A 2. ábra tanulsága szerint az AKLT-pontból a rendszer θ változtatásával foly-



15. ábra: Az AKLT-modell páronkénti kölcsönös információját és a blokkentropiáját.



16. ábra: Az AKLT-modell tisztán exponenciális lecsengésű kölcsönös információi.



17. ábra: Páronkénti kölcsönös információ és blokkentropia $S = 1$ -es spinű Heisenberg-modellre számolva.

tonosan átvihető a $\theta = 0$ Heisenberg-modellbe, melynek kiértékelésével a következő fejezetben foglalkozom.

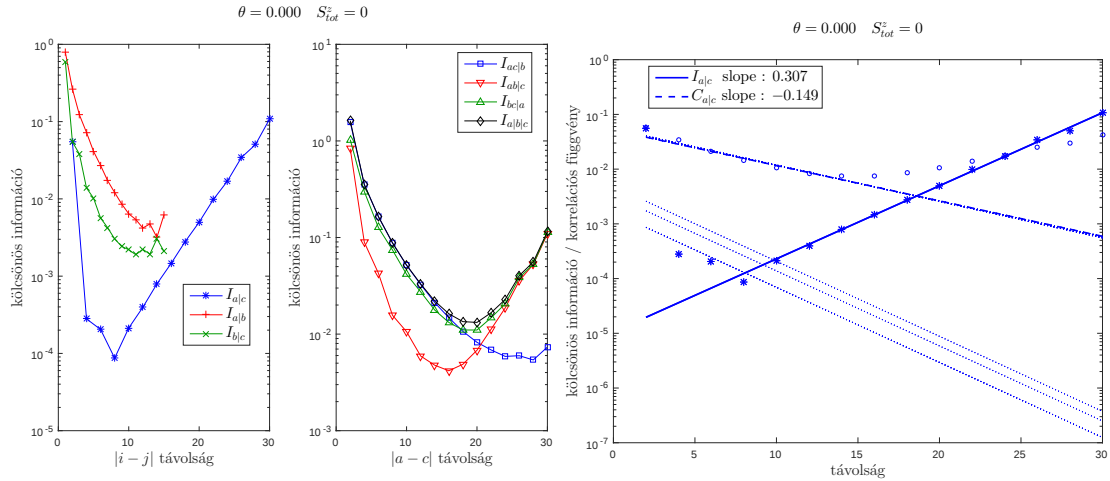
5.2.2. Heisenberg-modell: $\theta = 0$

Az $S = 1$ -es spinű Heisenberg-modellben a $\xi_c \approx 6.03$ korrelációs hossz nagyobb, mint a VBS-modellben, ezért párkorrelációk nagyobb távolságokban is megjelennek valamint a blokkentropia is később szaturálódik, amit a 17. ábra is alátámaszt.

A 18. ábrán feltüntetett $I_{a|b}$, $I_{b|c}$ kölcsönös információk a vártnak megfelelő viselkedést mutatnak, azonban $I_{a|c}$ tömbi részére nem lehet illeszteni, mert az $N = 32$ hosszúságú lánc esetén – a Haldane-fázis topologikus védettsége miatt – a végek felé haladva a végspin-korreláció túl gyorsan felerősödik. Viszont gapes modellekben egy karakterisztikus hossz van, ezért a felületi exponensnek meg kell egyeznie a tömbivel. Ha egy résznek vesszük a végspineket, nagy l -re az állapot $ac|b$ -kölcsönös információja nem nő vissza, érzéketlen a végspin-korrelációra, melynek mennyisége $I_{a|c}$. Viszont az $ac|b$ felosztás finomítására vett korreláció ($I_{a|b|c}$) már tartalmazni fogja a végspinek közti korrelációt, ezzel eleget téve (84) összefüggésnek.

5.2.3. A Haldane-fázis két oldalán: $\theta = \pm \frac{\pi}{4}$

A $\theta = \pm \frac{\pi}{4}$ pontban a gap becsukódik mindkét oldalon, ezért hasonló viselkedést kapunk abban a tekintetben, hogy a modellek kritikusak, ám különbség, hogy a blokkentropiában kettes-, illetve hármas periodicitású ugrások jelennek meg. A $\theta = +\frac{\pi}{4}$ értéknél, az úgynevezett Lai–Sutherland-pontban a probléma integrálható, és a lágy módusok $k = 0, \pm \frac{2\pi}{3}$ -nál jelennek meg. Ez a látszólag trimerizált fázis egészen $\theta = \frac{\pi}{2}$ -ig, a ferromágneses fázis határáig stabilis. A $\theta = -\frac{\pi}{4}$ -ben –



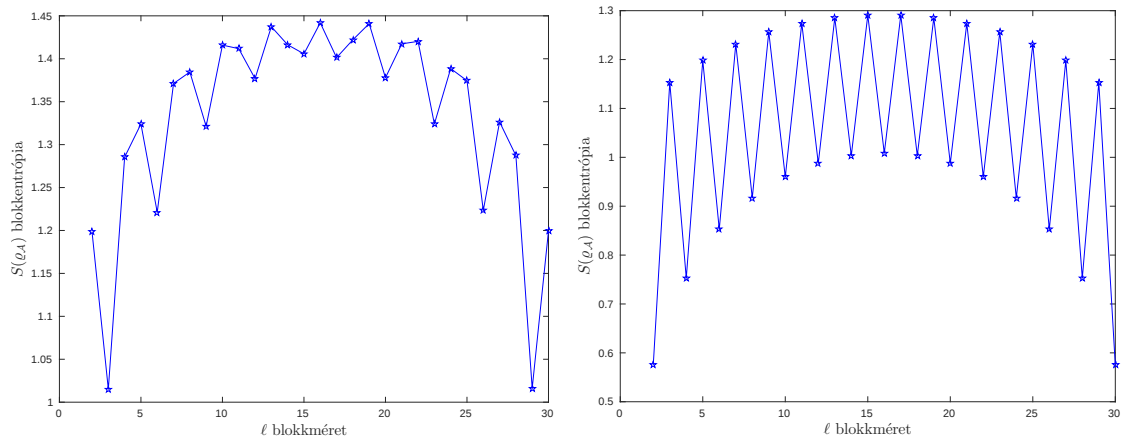
18. ábra: Heisenberg-modell végspin-korrelációjának megnyilvánulása a kölcsönös információkban.

Takhtajan–Babujian-féle szintén integrálható pontban – pedig a *látszólag dimerizált* fázis jelenik meg, így $k = 0, \pi$ értékeknél a gap nulla. A látszólag jelző arra utal, hogy a véges rendszerben látható oszcilláció a végtelenrács-határesetben ($N \rightarrow \infty$) eltűnik, ezek csak a lágy módus helyeit mutatják.

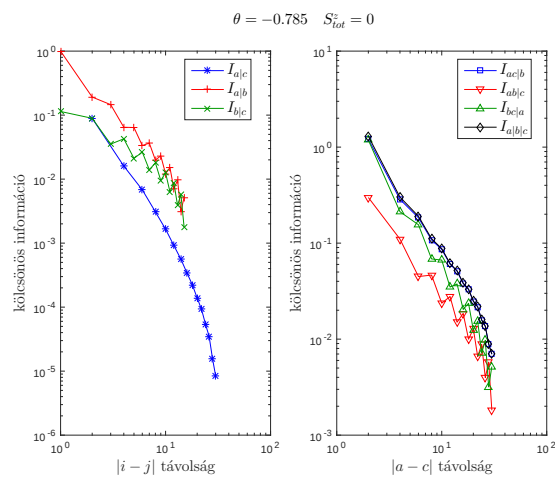
A geometriai értelemben szimmetrikusan megválasztott $a|b$ és $b|c$ felosztásokra vett kölcsönös információ lefutása megegyezik – a 20. ábrán látható módon – egy rácspontnyi eltolódástól eltekintve. Ugyanakkor az $a|c$ -korrelációban nem láthatók azok a kettes „lépcsők”, mint az előbb említettekben. Korrelációk szemléletesen 11. ábrával értelmezhetők, csak a teljes dimerizáció helyett erős-gyenge váltakozó kötések képzünk a rácspontok közé. Az $a|b$ felosztás esetén míg b rögzített, addig a a lépések során hol gyenge-erős, hol erős-gyenge kötést vág el. Hasonló mondható $b|c$ -re is, viszont $a|c$ felosztás ilyen tekintetben szimmetrikus az távolság növelése során. A gondolatmenet továbbvihető a háromrészes esetre is. Alapállapot eltolási invarianciája miatt a fenti különbségek is eltűnnek a termodinamikai határesetben, a korrelációk „kisimulásához” hosszabb láncon végzett számolás szükséges.

5.2.4. A dimerizált fázis közepén $\theta = -\frac{\pi}{2}$

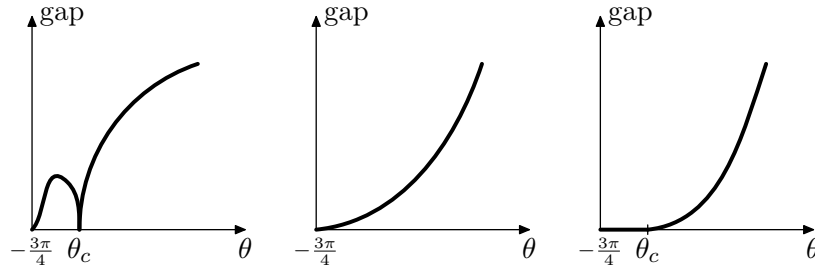
Míg a látszólag trimerizált kritikus fázis kiterjed a ferromágneses tartományig, addig a Haldane-fázis másik oldalán a gap egyből visszánő. A fázistér ezen pontjában is kettes periodicitás mutatkozik a blokkentrópiában, hasonló a 19. ábra jobb oldali ($\theta = -\frac{\pi}{4}$ -hez tartozó) grafikonjához, de az entrópia szaturálódik, és az oszcilláció amplitúdója termodinamikai ($N \rightarrow \infty$) határesetben is megmarad. Ezért ez egy *valódi* dimerizált fázis. A modell gapes volta miatt a korrelációk



19. ábra: A „trimerizált”- és „dimerizált” ($\theta = +\frac{\pi}{4}$, ill. $\theta = -\frac{\pi}{4}$) állapotú lánc blokkentropiái



20. ábra: $\theta = -\frac{\pi}{4}$ esetén a kétrész- és háromrész-korrelációkon megmutatkozó látszólagos dimerizáció, amely megfelelően hosszú láncra eltűnik.



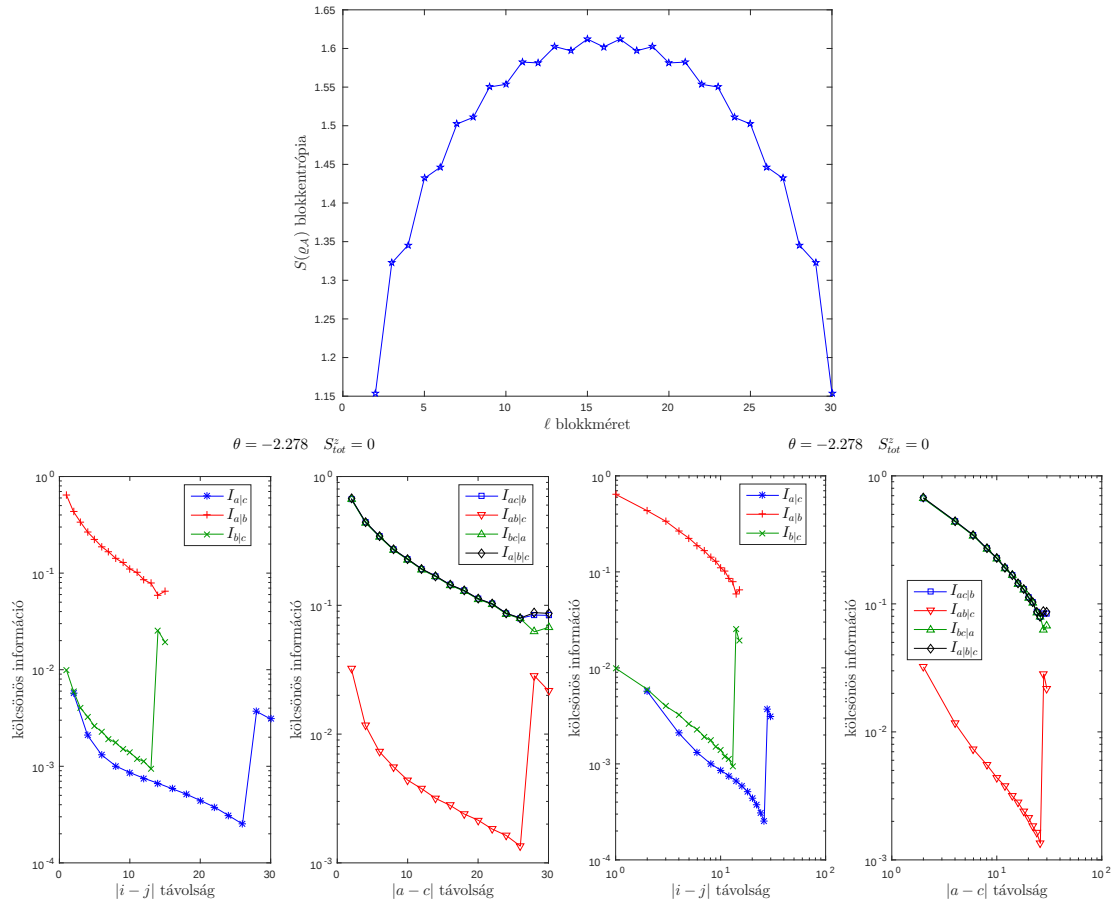
21. ábra: A bilineáris-bikvadrátikus modell energiárésének $\theta = -\frac{3\pi}{4}$ körüli viselkedése a három lehetséges elmélet szerint [46].

exponenciálisan csengenek le, de ezen kívül egyéb tulajdonságok hasonlóak, mint a 19. ábrán láthatók.

5.2.5. Spin nematikus fázis: $\theta \searrow -\frac{3\pi}{4}$

Tovább haladva a 2. ábrán látható fázisdiagramon a $\theta = -\frac{3\pi}{4}$ ferromágneses átalakulási pont felé közeledve található a szakirodalomban spin nematikus fázisként ismert tartomány, melynek létezéséről élénk vita folyik manapság is [42, 43, 44]. A kiterjedt gapes dimertartományban a Hamilton-operátor eltolási invarianciája sérül, a ferromágneses fázisban pedig az SU(2) szimmetria spontán sérülése következik be, ám semmi nem indokolja azt, hogy a fázisátalakulások ugyanabban a pontban következzenek be. Chubokov feltevése szerint a dimer fázisban lévő gap még $\theta = -\frac{3\pi}{4}$ előtt egy kritikus pontban eltűnik, majd újra kinyílik [45]. Egy másik lehetőség, hogy a két fázis közé egy kritikus tartomány ékelődik be, továbbá az is elképzelhető, hogy a ferromágneses fázisig végig gapes a modell. A három különböző elképzelést a 21. ábra mutatja sematikusán.

A blokkentrópia és kölcsönös információk 22. ábrán látható profiljából nem lehet biztosan állítani, hogy a modell kritikus, vagy gapes viselkedést mutat. Nagyobb lánchosszra van szükség a valódi karakterisztika feltérképezéséhez, melyben reményeink szerint nagy segítségre lesz a többrész-korrelációk vizsgálata.



22. ábra: DMRG-számolás a $\theta = -0.725\pi$ paraméterértékre, a spin nematikus fázis feltételezett környezetében.

6. Összefoglalás

Tudományos diákköri munkám során a modern szilárdtest-fizika egyik középonti témájával, egydimenziós erősen korrelált rendszerekkel foglalkoztam, kiemelten a Haldane-fázist is megvalósító bilineáris-bikvadratikus modellel. Kutatómunkám keretében megismerkedtem a BUDAPEST-QC-DMRG [\[47\]](#) kód felépítésével és használatával, különös figyelmet fordítva a mátrixszorzat-állapotot használó eljárásokra, melynek továbbfejlesztése volt az egyik fő célom, ezzel hatékony eszközt adva a sokrész-korrelációk numerikus vizsgálatához. Nagyobb lánc hossz esetén lehetőség nyílik háromnál több, sőt a lánc mentén különböző geometriát megvalósító részrendszer korrelációjának vizsgálatára, melynek eredményei tudományos folyóiratban való publikáció anyagát fogják képezni.

Köszönetnyilvánítás

A dolgozatom zárásaként szeretnék köszönetet mondani témavezetőimnek a gyakori és rugalmas konzultációkért, amelyek nélkül nem készülhetett volna el e munka. Köszönettel tartozom Dr. Legeza Örsnek a szakmai tanácsaiért és intelmeiért, valamint ösztönző bizalmáért a közös munka kezdeti fázisában. Köszönöm Dr. Szalay Szilárdnak a tanító erejű szakmai precízsgét, és a dolgozat többszöri átolvasása közben tett hasznos megjegyzéseket.

Kutatómunkám anyagi háttérét az *OTKA* NN110360 és K120569 számon bejegyzett támogatása, valamint az *MTA Lendület* program (81010-00) biztosította.

Hálásan köszönöm szüleim türelmét, támogatását és szeretetét.

1. Függelék

A kutatómunkámat – melynek eredményei a dolgozatban szerepelnek – 2016. elején elsőéves MSc-hallgatóként kezdtem a Wigner Fizikai Kutatóközpont Szilárdtestfizikai Intézetének *Erősen Korrelált Rendszerek* „Lendület” kutatócsoportjában.

- Miután megismerkedtem a DMRG elméleti alapjaival, a csoport által fejlesztett Matlab [48] alapú BUDAPEST-QC-DMRG [47] kód felépítését tanultam meg. Ezáltal egyszerű számításokat végeztem különösen a bilineáris-bikvadratikus modell egzaktul megoldható VBS pontjában, hiszen ez nyújt egy alapvető tesztelési lehetőséget saját, MPS alapú könyvtáramhoz.
- A DMRG által meghatározott optimális MPS alakú hullámfüggvényt felhasználva olyan rutinokat írtam, amely tetszőleges operátor várhatóértékének, különböző állapotok közti átmeneteinek, redukált sűrűségmátrixnak és ebből származtatott mennyiségek (entrópia, kölcsönös információ, sokrész-korrelációs mértékek, ...) számítását végzik.
- Ezzel párhuzamosan a összefonódás-elmélet alapjaival ismerkedtem meg, részben a *Kvantum-összefonódás* c. speciálkollégium keretében, részben pedig [24] munka vonalvezetését követve.
- A 2. fejezetben ismertetett transzparens matematikai struktúra (részrendszer, partíció, partíciók halmaza) implementálását is elvégeztem, mivel az ilyen (mind matematikai, mind szintaktikai) objektumok címkézik a részrendszerek közti korrelációs és összefonódási mértékeket.
- Mindezek felett alapvető egydimenziós modellek elméletét [37, 49] is tanultam a munkámhoz szükséges irodalmi háttéranyag összegyűjtése mellett.
- Szükséges eljárások implementálása után a vizsgált modellek fázisterének különböző pontjaiban DMRG-számításokat futtattam, és a kapott eredmények kiértékelését végeztem. Az eredményeimet összevetettem a szakirodalomban korábban publikáltakkal, illetve új, az általános korrelációs függvényekre vonatkozó többrészes mennyiséget számoltam ki.

Hivatkozások

- [1] Sólyom, J. *Fundamentals of the Physics of Solids, Vol. 1, Structure and Dynamics* (Springer, 2007). URL <http://www.springer.com/materials/book/978-3-540-72599-2>.
- [2] Horodecki, R., Horodecki, P., Horodecki, M. & Horodecki, K. Quantum entanglement. *Rev. Mod. Phys.* **81**, 865–942 (2009).
- [3] Amico, L., Fazio, R., Osterloh, A. & Vedral, V. Entanglement in many-body systems. *Rev. Mod. Phys.* **80**, 517–576 (2008). URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.80.517>.
- [4] Buyers, W. J. L. *et al.* Experimental evidence for the haldane gap in a spin-1 nearly isotropic, antiferromagnetic chain. *Phys. Rev. Lett.* **56**, 371–374 (1986). URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.56.371>.
- [5] Fazekas, P. *Lecture Notes on Electron Correlation and Magnetism (Series in Modern Condensed Matter Physics, Vol. 5)* (World Scientific Pub Co Inc, 1999).
- [6] Lieb, E., Schultz, T. & Mattis, D. Two soluble models of an antiferromagnetic chain. *Annals of Physics* **16**, 407 – 466 (1961). URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0003491661901154>.
- [7] Kim, E. H., Legeza, Ö. & Sólyom, J. Topological order, dimerization, and spinon deconfinement in frustrated spin ladders. *Phys. Rev. B* **77**, 205121 (2008). URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.77.205121>.
- [8] Hagymási, I. & Legeza, Ö. Characterization of a correlated topological Kondo insulator in one dimension. *arXiv [cond-mat.str-el]* 1601.04606 (2016). URL <http://arxiv.org/abs/1601.04606>. <http://arxiv.org/pdf/1601.04606>.
- [9] Haldane, F. D. M. Nonlinear field theory of large-spin Heisenberg antiferromagnets: Semiclassically quantized solitons of the one-dimensional easy-axis Néel state. *Phys. Rev. Lett.* **50**, 1153–1156 (1983). URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.50.1153>.
- [10] Wilson, K. G. The renormalization group: Critical phenomena and the Kondo problem. *Rev. Mod. Phys.* **47**, 773–840 (1975). URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.47.773>.
- [11] White, S. R. Density matrix formulation for quantum renormalization groups. *Phys. Rev. Lett.* **69**, 2863–2866 (1992). URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.69.2863>.

- [12] White, S. R. Density-matrix algorithms for quantum renormalization groups. *Phys. Rev. B* **48**, 10345–10356 (1993). URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.48.10345>.
- [13] Nielsen, M. A. & Chuang, I. L. *Quantum Computation and Quantum Information* (Cambridge University Press, 2000), 1 edn.
- [14] Bengtsson, I. & Życzkowski, K. *Geometry of Quantum States: An Introduction to Quantum Entanglement* (Cambridge University Press, 2006).
- [15] Petz, D. *Quantum Information Theory and Quantum Statistics* (Springer, 2008).
- [16] Ohya, M. & Petz, D. *Quantum Entropy and Its Use* (Springer Verlag, 1993), 1 edn.
- [17] Neumann, J. v. Thermodynamik quantenmechanischer gesamtheiten. *Nachrichten von der Gesellschaft der Wissenschaften zu Göttingen, Mathematisch-Physikalische Klasse* **1927**, 273–291 (1927). URL <http://eudml.org/doc/59231>.
- [18] Umegaki, H. Conditional expectation in an operator algebra. IV. entropy and information. *Kodai Math. Semin. Rep.* **14**, 59–85 (1962). URL <http://dx.doi.org/10.2996/kmj/1138844604>.
- [19] Hiai, F. & Petz, D. The proper formula for relative entropy and its asymptotics in quantum probability. *Commun. Math. Phys.* **143**, 99–114 (1991). URL <http://dx.doi.org/10.1007/BF02100287>.
- [20] Werner, R. F. Quantum states with Einstein–Podolsky–Rosen correlations admitting a hidden-variable model. *Phys. Rev. A* **40**, 4277–4281 (1989).
- [21] Bennett, C. H., DiVincenzo, D. P., Smolin, J. A. & Wootters, W. K. Mixed-state entanglement and quantum error correction. *Phys. Rev. A* **54**, 3824–3851 (1996). URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.54.3824>.
- [22] Modi, K., Paterek, T., Son, W., Vedral, V. & Williamson, M. Unified view of quantum and classical correlations. *Phys. Rev. Lett.* **104**, 080501 (2010). URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.104.080501>.
- [23] Bennett, C. H., Bernstein, H. J., Popescu, S. & Schumacher, B. Concentrating partial entanglement by local operations. *Phys. Rev. A* **53**, 2046–2052 (1996). URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.53.2046>.

- [24] Szalay, Sz. Multipartite entanglement measures. *Phys. Rev. A* **92**, 042329 (2015). URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.92.042329>.
- [25] Szalay, Sz., Barcza, G., Szilvási, T., Veis, L. & Örs Legeza. The correlation theory of the chemical bond. *arXiv [quant-ph]* 1605.06919 (2016). URL <http://arxiv.org/abs/1605.06919>. <http://arxiv.org/pdf/1605.06919>.
- [26] Davey, B. A. & Priestley, H. A. *Introduction to Lattices and Order* (Cambridge University Press, 2002), second edn.
- [27] Stanley, R. P. *Enumerative Combinatorics, Volume 1* (Cambridge University Press, 2012), second edn.
- [28] Dür, W., Cirac, J. I. & Tarrach, R. Separability and distillability of multiparticle quantum systems. *Phys. Rev. Lett.* **83**, 3562–3565 (1999). URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.83.3562>.
- [29] Dür, W. & Cirac, J. I. Classification of multiqubit mixed states: Separability and distillability properties. *Phys. Rev. A* **61**, 042314 (2000). URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.61.042314>.
- [30] Acín, A. *et al.* Generalized schmidt decomposition and classification of three-quantum-bit states. *Phys. Rev. Lett.* **85**, 1560–1563 (2000). URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.85.1560>.
- [31] Seevinck, M. & Uffink, J. Partial separability and entanglement criteria for multiqubit quantum states. *Phys. Rev. A* **78**, 032101 (2008). URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.78.032101>.
- [32] Szalay, Sz. & Kökényesi, Z. Partial separability revisited: Necessary and sufficient criteria. *Phys. Rev. A* **86**, 032341 (2012). URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.86.032341>.
- [33] Szalay, Sz. Quantum entanglement in finite-dimensional Hilbert spaces. *arXiv [quant-ph]* 1302.4654 (2013). URL <http://arxiv.org/abs/1302.4654>. <http://arxiv.org/pdf/1302.4654>.
- [34] Östlund, S. & Rommer, S. Thermodynamic limit of density matrix renormalization. *Phys. Rev. Lett.* **75**, 3537–3540 (1995). URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.75.3537>.
- [35] Dukelsky, J., Martín-Delgado, M. A., Nishino, T. & Sierra, G. Equivalence of the variational matrix product method and the density matrix renormalization group applied to spin chains. *EPL (Europhysics Letters)* **43**, 457 (1998). URL <http://stacks.iop.org/0295-5075/43/i=4/a=457>.

- [36] Schollwöck, U. The density-matrix renormalization group in the age of matrix product states. *Annals of Physics* **326**, 96 – 192 (2011). URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0003491610001752>. January 2011 Special Issue.
- [37] Affleck, I., Kennedy, T., Lieb, E. H. & Tasaki, H. Rigorous results on valence-bond ground states in antiferromagnets. *Phys. Rev. Lett.* **59**, 799–802 (1987). URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.59.799>.
- [38] den Nijs, M. & Rommelse, K. Preroughening transitions in crystal surfaces and valence-bond phases in quantum spin chains. *Phys. Rev. B* **40**, 4709–4734 (1989). URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.40.4709>.
- [39] Barcza, G., Noack, R. M., Sólyom, J. & Legeza, Ö. Entanglement patterns and generalized correlation functions in quantum many-body systems. *Phys. Rev. B* **92**, 125140 (2015). URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.92.125140>.
- [40] Calabrese, P. & Cardy, J. Entanglement entropy and quantum field theory. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment* **2004**, P06002 (2004). URL <http://stacks.iop.org/1742-5468/2004/i=06/a=P06002>.
- [41] Fáth, G., Legeza, Ö., Lajkó, P. & Iglói, F. Logarithmic delocalization of end spins in the $s = \frac{3}{2}$ antiferromagnetic Heisenberg chain. *Phys. Rev. B* **73**, 214447 (2006). URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.73.214447>.
- [42] Fáth, G. & Sólyom, J. Search for the nondimerized quantum nematic phase in the spin-1 chain. *Phys. Rev. B* **51**, 3620–3625 (1995). URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.51.3620>.
- [43] Legeza, Ö., Fáth, G. & Sólyom, J. Phase diagram of magnetic ladders constructed from a composite-spin model. *Phys. Rev. B* **55**, 291–298 (1997). URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.55.291>.
- [44] Kawashima, N. Quantum Monte Carlo methods. *Progress of Theoretical Physics Supplement* **145**, 138–149 (2002). URL <http://ptps.oxfordjournals.org/content/145/138.abstract>. <http://ptps.oxfordjournals.org/content/145/138.full.pdf+html>.
- [45] Chubukov, A. V. Fluctuations in spin nematics. *Journal of Physics: Condensed Matter* **2**, 1593 (1990). URL <http://stacks.iop.org/0953-8984/2/i=6/a=018>.

- [46] Legeza, Ö. Kvantuminformáció-elmélet alkalmazása erősen korrelált rendszerek vizsgálatára és az ERA koncepció (2012). DSc thesis.
- [47] Legeza, Ö. QC-DMRG-Budapest, a program for quantum lattice and chemical DMRG calculations. (2012).
- [48] MATLAB. *version 8.6.0 (R2015b)* (The MathWorks Inc., Natick, Massachusetts, 2015).
- [49] Azuma, M., Hiroi, Z., Takano, M., Ishida, K. & Kitaoka, Y. Observation of a spin gap in SrCu_2O_3 comprising spin-1/2 quasi-1D two-leg ladders. *Phys. Rev. Lett.* **73**, 3463–3466 (1994). URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.73.3463>.