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 renormálásicsoportalgoritmus (DMRG-algoritmus) által kapható megoldások struktúrái. A spinek közötti párkorrelációk és párösszefondódás 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.	. Sürüségmátrixos 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				
Kä	öszönetnyilvánítás	39				
1.	Függelék	40				
н	ivatkozások	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 szuszceptibilitását. 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

$$H = J \sum_{\langle i,j \rangle} \boldsymbol{S}_i \boldsymbol{S}_j \tag{1}$$

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

$$[S_i^{\alpha}, S_j^{\beta}] = \delta_{ij} \sum_{\gamma} \mathrm{i}\varepsilon^{\alpha\beta\gamma} S_j^{\gamma} \tag{2}$$

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 J₁-J₂ 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 spineket tartalmazó alrácsra bontható nulla eredő mágnesezettséget adva. Az elemi gerjesztések diszperziója szintén k = 0-ról energiarés 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 CsNiCl₃, ami a Ni²⁺ ionok 3d⁸ elektronszerkezete által megvalósított S = 1 spinű antiferromágneses láncként viselkedik [4, 5].

Az alacsony dimenziós rendszerek (alrács-)mágnesezettségének 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 Betheansatz 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 gappel 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

$$H = J_1 \sum_{i} \boldsymbol{S}_i \boldsymbol{S}_{i+1} + J_2 \sum_{i} \boldsymbol{S}_i \boldsymbol{S}_{i+2}$$
(3)

alakban írható. Azonos nagyságrendű antiferromágneses csatolások esetén a spinrendszerben 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 energiatöbblettel [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 2016ban – 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:

$$H = \cos\theta \sum_{i} \boldsymbol{S}_{i} \boldsymbol{S}_{i+1} + \sin\theta \sum_{i} (\boldsymbol{S}_{i} \boldsymbol{S}_{i+1})^{2}.$$
 (4)

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

1.2. Numerikus módszerek

A előbbiekben 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 renormálásicsoport-algoritmus (NRGalgoritmus) 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 renormálásicsoport-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 mátrixszorzatállapot (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 dimenziósnak feltételezett – Hilbert-tér normált eleme ($\langle\psi|\psi\rangle = 1$). Az ilyen önadjungált, lineáris operátorok halmazát jelölje

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

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

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

$$\langle O \rangle = \operatorname{Tr}(\varrho O) = \sum_{i} p_{i} \operatorname{Tr}(\pi_{i} O) = \sum_{i} p_{i} \langle \psi_{i} | O | \psi_{i} \rangle.$$
 (7)

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

$$S(\varrho) := -\operatorname{Tr}(\varrho \ln \varrho) \tag{8}$$

von Neumann-entrópia, ami számos előnyös tulajdonsággal bír: nemnegatív, folytonos, korrelálatlan állapotokra additív, hű (tiszta állapotokra, és csak azokra eltűnik), bisztohasztikus kvantumcsatornákban nem csökken [16, 17]. Két állapot $(\varrho, \sigma \in \mathcal{D})$ megkülönböztethetősége számszerűsíthető az Umegakiféle relatív entrópiával,

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

ami szintén nemnegatív, és pontosan akkor zérus, ha $\varrho = \sigma$, kvantumcsatornákban 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 $\text{Tr}_2 : \mathcal{D}_{12} \to \mathcal{D}_1$ 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

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

A két részrendszer akkor korrelálatlan, ha bármely két valószínűségi változó korrelálatlan (a fenti mennyiség eltűnik) ez pontosan akkor teljesül, ha $\rho = \rho_1 \otimes \rho_2$, ezért a *korrelálatlan állapotok* halmaza

$$\mathcal{D}_{unc} := \Big\{ \varrho \in \mathcal{D}_{12} \ \Big| \ \exists \varrho_1 \in \mathcal{D}_1, \ \exists \varrho_2 \in \mathcal{D}_2 : \ \varrho = \varrho_1 \otimes \varrho_2 \Big\}.$$
(11)

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

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

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

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

$$\mathcal{D}_{\text{sep}} := \operatorname{Conv} \mathcal{P}_{\text{sep}} = \operatorname{Conv} \mathcal{D}_{\text{unc}}.$$
(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 tartalmaznak kvantumos korrelációt ebből a szempontból. Összefonódott állapot az, ami nem szeparálható, vagyis az összefonódott állapotok halmaza $\overline{\mathcal{D}_{sep}} = \mathcal{D}_{12} \setminus \mathcal{D}_{sep}$.

Ezzel a kétrészecskés állapotterek szerkezete az alábbiak szerint vázolható.

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

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

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

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

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:

$$\pi \in \mathcal{P}_{sep} \iff \operatorname{Tr}_2 \pi \in \mathcal{P}_1 \iff \operatorname{Tr}_1 \pi \in \mathcal{P}_2.$$
 (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

$$\operatorname{Tr}_{2} \pi = |\psi_{1}\rangle\langle\psi_{1}| \in \mathcal{P}_{1} \quad \text{és} \quad \operatorname{Tr}_{1} \pi = |\psi_{2}\rangle\langle\psi_{2}| \in \mathcal{P}_{2} \pi = \pi_{1} \otimes \pi_{2} \in \mathcal{P}_{\operatorname{sep}}$$
(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

$$\operatorname{Tr}_{2} \pi = \frac{1}{2} \left(|\psi_{1}\rangle \langle \psi_{1}| + |\psi_{1}'\rangle \langle \psi_{1}'| \right) \notin \mathcal{P}_{1} \quad \text{és} \quad \operatorname{Tr}_{1} \pi = \frac{1}{2} \left(|\psi_{2}\rangle \langle \psi_{2}| + |\psi_{2}'\rangle \langle \psi_{2}'| \right) \notin \mathcal{P}_{2} \\ \pi \neq (\operatorname{Tr}_{2} \pi) \otimes (\operatorname{Tr}_{1} \pi)$$

$$(19)$$

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:

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

(Az első egyenlőség azért igaz, mert a kifejezés a minimumát a $\sigma = \rho_1 \otimes \rho_2$ 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:

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

(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].

$$E(\varrho) = \min\left\{\sum_{i} p_{i} I|_{\mathcal{P}}(\pi_{i}) \mid \pi_{i} \in \mathcal{P}_{12}, \ p_{i} \ge 0, \ \|\boldsymbol{p}\|_{1} = 1: \ \sum_{i} p_{i} \pi_{i} = \varrho\right\}$$
(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 négyszintes hálószerkezet bontakozik ki [24, 25].

Ha egy P halmazt ellátunk egy $\leq részbenrendezéssel (reflexív, antiszimmetri$ kus, tranzitív), akkor az így kapott struktúrát részben rendezett halmaznak nevezzük. Ha minden elempárnak egyértelműen létezik legnagyobb alsó korlátja (infi $muma) és legkisebb felső korlátja (szuprémuma) a <math>\leq$ -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 $i \in L = \{1, 2, ..., n\}$ 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 Lhatványhalmazának, amit

$$P_0(L) := 2^L \tag{23}$$

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 feldarabolni, 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 legyenek nemüres (i), diszjunkt halmazok (ii), amik együtt kiadják az egész rendszert (iii). Tehát a rendszer összes ilyen lehetséges felosztásának halmaza

$$P_{1}(L) := \left\{ \xi = X_{1} | X_{2} | \dots | X_{|\xi|} \mid \forall X \in P_{0} \setminus \{\emptyset\}, \quad (i) \\ \forall X \neq X' \in \xi : X \cap X' = \emptyset, \quad (ii) \\ \bigcup_{X \in \xi} X = L \quad (iii) \right\}.$$
(24)

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

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

részbenrendezést. Könnyen látható, hogy $P_{\rm I}$ a fenti részbenrendezéssel, valamint az infimum- és szuprémumképzéssel hálót ad [26, 27].

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

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

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

a (10) képlet általánosításaként.

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

$$\mathcal{D}_{\xi\text{-sep}} := \operatorname{Conv} \mathcal{D}_{\xi\text{-unc}},\tag{28}$$

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 P₁ hálója.

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

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

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

$$v \leq \xi \quad \Longleftrightarrow \quad \mathcal{D}_{v\text{-sep}} \subseteq \mathcal{D}_{\xi\text{-sep}} .$$
 (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 $P_{\mathrm{I}}(L)$ hálóval.

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

$$P_{1}(\{1,2,3\}) = \left\{1|2|3,12|3,13|2,23|1,123\right\}$$
(31)

A fenti \leq részbenrendezéssel ellátva ezt a halmazt: $1|2|3 \leq ab|c \leq 123$ $(a, b, c \in \{1, 2, 3\})$. 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-korrelálatlan 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-korrelálatlan állapotok együttes felhasználásával, azaz $\varrho \in \text{Conv} (\mathcal{D}_{12|3\text{-unc}} \cup \mathcal{D}_{13|2\text{-unc}})$, 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 $P_{\rm I}$ azon $\boldsymbol{\xi} = \{\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_{|\boldsymbol{\xi}|}\}$ részhalmazát, amelyben minden olyan elem szerepel, amely finomabb, mint e részhalmaz maximális eleme(i). Ezt *ideálnak* vagy másképp *lefelé zárt részhalmaznak* nevezzük. Legyen a $P_{\rm II}$ a nemüres ideálok halmaza, azaz

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

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

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

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

Itt is vezessük be a
z $O_i~(i\in L)$ elemi részrendszereken értelmezett fizikai mennyisége
k $\pmb{\xi}$ ideálra vett korrelációját:

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

Hasonlóan (28) formulához, egy állapot $\boldsymbol{\xi}$ -szeparálható, ha kikeverhető $\boldsymbol{\xi}$ -korrelálatlanokból, azaz

$$\mathcal{D}_{\boldsymbol{\xi}\text{-sep}} := \operatorname{Conv} \mathcal{D}_{\boldsymbol{\xi}\text{-unc}} . \tag{35}$$

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]:

$$\boldsymbol{v} \leq \boldsymbol{\xi} \quad \Longleftrightarrow \quad \mathcal{D}_{\boldsymbol{v}\text{-unc}} \subseteq \mathcal{D}_{\boldsymbol{\xi}\text{-unc}},$$
 (36)

$$\boldsymbol{v} \leq \boldsymbol{\xi} \quad \Longleftrightarrow \quad \mathcal{D}_{\boldsymbol{v}\text{-sep}} \subseteq \mathcal{D}_{\boldsymbol{\xi}\text{-sep}}.$$
 (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

$$\boldsymbol{\mu}_k := \left\{ \mu \in P_{\mathrm{I}} \mid |\mu| \ge k \right\} \in P_{\mathrm{II}}$$
(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:

$$\boldsymbol{\nu}_{k'} := \left\{ \nu \in P_{\mathrm{I}} \mid \forall N \in \nu : |N| \le k' \right\} \in P_{\mathrm{II}}, \tag{39}$$

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 $\boldsymbol{\xi} = \downarrow \max \boldsymbol{\xi}$.

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

$$(40)$$

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 $P_{\rm I}$ hálóin 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-adik lila vonal alatt, míg a k' produkálhatók 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 elégségesek az állapotok kikeveréséhez. Meg lehet adni a ξ -szeparálható állapotok összes lehetséges metszeteit (összefonódási osztályok), vagyis azt, hogy milyen ξ -korrelálatlan állapotok szükségesek és elégségesek az állapotok kikeveréséhez. Megmutatható, hogy ezeket az összefonódási osztályokat a $P_{\rm II}$ 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 $\rho \in \mathcal{D}$ állapot korrelációja a ξ felosztásra nézve, röviden ξ -korrelációja (ξ -kölcsönös információ) megadható, mint az állapot megkülönböztethetősége a ξ -korrelálatlanoktól [22, 24]:

$$I_{\xi}(\varrho) := \min_{\sigma \in \mathcal{D}_{\xi\text{-unc}}} D(\varrho || \sigma) = \sum_{X \in \xi} S(\varrho_X) - S(\varrho).$$
(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 konvextetőkiterjesztése [24]

$$E_{\xi}(\varrho) = \min\left\{\sum_{i} p_i I_{\xi}|_{\mathcal{P}}(\pi_i) \mid \pi_i \in \mathcal{P}_L, \ p_i \ge 0, \ \|\boldsymbol{p}\|_1 = 1: \ \sum_{i} p_i \pi_i = \varrho\right\}, \quad (42)$$

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]:

$$v \leq \xi \quad \Longleftrightarrow \quad I_v \geq I_{\xi},\tag{43}$$

$$v \leq \xi \quad \Longleftrightarrow \quad E_v \geq E_{\xi},\tag{44}$$

vagyis finomabb felbontásra nézve minden rendszer korreláltabb, illetve összefontabb. Tehát a korrelációt és összefonódást jellemző függvényhalmazok struktúráját is a $P_{\rm I}$ háló jellemzi.

2.5.3. II. szint:

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

$$I_{\boldsymbol{\xi}}(\varrho) = \min_{\sigma \in \mathcal{D}_{\boldsymbol{\xi}\text{-unc}}} D(\varrho || \sigma) = \min_{\boldsymbol{\xi} \in \boldsymbol{\xi}} \min_{\sigma \in \mathcal{D}_{\boldsymbol{\xi}\text{-unc}}} D(\varrho || \sigma) = \min_{\boldsymbol{\xi} \in \boldsymbol{\xi}} \sum_{X \in \boldsymbol{\xi}} S(\varrho_X) - S(\varrho)$$
(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 $\boldsymbol{\xi}$ -összefonódás a tiszta állapotokra megszorított $\boldsymbol{\xi}$ -korreláció konvextetőkiterjesztése [24]:

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

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

Megmutatható, hogy a $\boldsymbol{\xi}$ -korreláció és a $\boldsymbol{\xi}$ -összefonódás sokrészmonoton [24, 25]:

$$\boldsymbol{v} \leq \boldsymbol{\xi} \quad \Longleftrightarrow \quad I_{\boldsymbol{v}} \geq I_{\boldsymbol{\xi}},\tag{47}$$

$$\boldsymbol{v} \leq \boldsymbol{\xi} \quad \Longleftrightarrow \quad E_{\boldsymbol{v}} \geq E_{\boldsymbol{\xi}}.$$
 (48)

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

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

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

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

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

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

Ezeknek a mennyiségeknek a sokrész-monotonitásai a k,k^\prime paramétereikkel kifejezhetők:

$$\boldsymbol{\mu}_{k} \preceq \boldsymbol{\mu}_{l} \qquad \Longleftrightarrow \qquad k \ge l \qquad \Longleftrightarrow \qquad I_{k \text{ part}} \ge I_{l \text{ part}}, \tag{53}$$

$$\boldsymbol{\nu}_{k'} \preceq \boldsymbol{\nu}_{l'} \qquad \Longleftrightarrow \qquad k' \leq l' \qquad \Longleftrightarrow \qquad I_{k' \text{ prod}} \geq I_{l' \text{ prod}}, \tag{54}$$

$$\boldsymbol{\mu}_{k} \leq \boldsymbol{\mu}_{l} \qquad \Longleftrightarrow \qquad k \geq l \qquad \Longleftrightarrow \qquad E_{k \text{ part}} \geq E_{l \text{ part}}, \tag{55}$$

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

3. Sürüségmátrixos renormálásicsoport (DMRG)

Az előző fejezetben megismert új eszköztárat eddig csak molekulák elektronszerkezetének 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 lánchoz 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

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

bázison írjuk fel, ahol $a = \{1, \ldots, \ell\}$ a bal oldali ℓ rácspontot tartalmazó blokkot jelöli, $\psi_{\ell+1}$ és $\psi_{\ell+2}$ két egyrácspontos állapot, $b = \{\ell + 3, \ldots, N\}$ pedig a jobb oldali blokk. Az így kapott elrendezés – szimbolikusan $a \bullet \bullet b$ – az úgynevezett szuperblokk, 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

$$\begin{split} |\psi\rangle &= \sum_{\gamma_{a},\gamma_{\{\ell+1\}},\gamma_{\{\ell+2\}},\gamma_{b}} c_{\gamma_{a},\gamma_{\{\ell+1\}},\gamma_{\{\ell+2\}},\gamma_{b}} |\psi_{a,\gamma_{a}}\rangle \otimes |\psi_{\{\ell+1\},\gamma_{\{\ell+1\}}}\rangle \otimes |\psi_{\{\ell+2\},\gamma_{\{\ell+2\}}}\rangle \otimes |\psi_{b,\gamma_{b}}\rangle \\ &\equiv \sum_{\gamma_{\mathcal{A}},\gamma_{\mathcal{B}}} c_{\gamma_{\mathcal{A}},\gamma_{\mathcal{B}}} |\varphi_{\mathcal{A},\gamma_{\mathcal{A}}}\rangle \otimes |\varphi_{\mathcal{B},\gamma_{\mathcal{B}}}\rangle, \end{split}$$
(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:

$$\varrho_{\mathcal{A}} = \operatorname{Tr}_{\mathcal{B}} |\psi\rangle \langle \psi| = \sum_{\gamma_{\mathcal{A}}, \gamma'_{\mathcal{A}}} \left(\sum_{\gamma_{\mathcal{B}}} c_{\gamma_{\mathcal{A}}, \gamma_{\mathcal{B}}} c^*_{\gamma'_{\mathcal{A}}, \gamma_{\mathcal{B}}} \right) |\varphi_{\mathcal{A}, \gamma_{\mathcal{A}}}\rangle \langle \varphi_{\mathcal{A}, \gamma'_{\mathcal{A}}}|.$$
(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 *A* egyesített részrendszer csak azon *D'* állapotait szeretnénk megtartani, amelyek a legnagyobb súllyal vannak jelen. Tehát a (16) formulát felhasználva, ha ρ_A -nak a legnagyobb $\omega_1, \ldots, \omega_{D'}$ sajátértékeihez tartozó sajátállapotait egy $(D' \times Dd)$ méretű O_T transzformációs mátrixba rendezzük, akkor ezzel előállíthatók az új $a' = \{1, \ldots, \ell, \ell + 1\}$ blokkon ható elforgatott rácsoperátorok:

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

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,

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

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

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

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 "cipzárazással", 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 **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 végesrácsalgoritmus a cipzárazás során a blokkállapotokat, -operátorokat visszatölti a háttértárról, és iterálással pontosítja a reprezentációt.

egy MPS alakú megoldás. Ez N hosszúságú lánc esetén azt jeleni, hogy vágás nélkül az A_1, \ldots, A_N mátrixok méretei $(1 \times d), (d \times d^2), \ldots, (d^{\frac{N}{2}-1} \times d^{\frac{N}{2}}), (d^{\frac{N}{2}} \times d^{\frac{N}{2}-1}), \ldots, (d \times 1)$. Természetes, hogy elég nagy lánchossz esetén korlátot kell szabni a teljes Hilbert-tér dimenziójának, azaz a DMRG-algoritmus során megtartott állapotok számának, így az A mátrixok a gyakorlatban alkalmazott számolások során $(1 \times d), (d \times d^2), (d^2 \times d^3), (d^3 \times D), (D \times D), \ldots, (D \times d^3), \ldots, (d \times 1)$ ala-kúak.

Ebben a képben 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

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

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

$$C^{[1]}_{(\gamma_1),(\gamma_2,\gamma_3,\dots)} = \sum_{\alpha_1} U^{[1]}_{(\gamma_1),\alpha_1} S^{[1]}_{\alpha_1,\alpha_1} (V^{[1]\dagger})_{\alpha_1,(\gamma_2,\gamma_3,\dots)} \equiv \sum_{\alpha_1} A^{\alpha_1}_{1,\gamma_1} C^{[2]}_{(\alpha_1,\gamma_2),(\gamma_3,\dots)}$$
(64a)

A második egyenlőség $S^{[1]}$ és $V^{[1]^{\dagger}}$ indexeinek összeejtése, 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 $U^{[1]}$ -re úgy érdemes tekinteni, mint A_{1,γ_1} vektorok összességére. A következő lépésben a felbontást hasonlóan végezzük:

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

Ebben a lépésben U háromindexes mennyiséget A_{2,γ_2} mátrixoknak feleltettük meg. Ha a dekompozíciót a lánc N hosszúságáig folytatjuk, az állapotvektor mátrixszorzat-alakja

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

Egy $O=O_1\otimes O_2\otimes \ldots\otimes O_N$ operátor várható
értékét a mátrixszorzat-állapotot használva a

$$\langle \psi | O | \psi \rangle =$$

$$\sum_{\substack{\gamma_N, \\ \gamma'_N}} O_{N, \gamma'_N, \gamma_N} \mathbf{A}^{\dagger}_{N, \gamma'_N} \left(\dots \left(\sum_{\substack{\gamma_2, \\ \gamma'_2}} O_{2, \gamma'_2, \gamma_2} \mathbf{A}^{\dagger}_{2, \gamma'_2} \left(\sum_{\substack{\gamma_1, \\ \gamma'_1}} O_{1, \gamma'_1, \gamma_1} \mathbf{A}^{\dagger}_{1, \gamma'_1} \mathbf{A}_{1, \gamma_1} \right) \mathbf{A}_{2, \gamma_2} \right) \dots \right) \mathbf{A}_{N, \gamma_N}$$

$$(66)$$

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:

$$|\psi\rangle\langle\psi| = \sum_{\substack{\gamma_1,\gamma_2,\dots,\gamma_N\\\gamma'_1,\gamma'_2,\dots,\gamma'_N}} \boldsymbol{A}_{1,\gamma_1} \boldsymbol{A}_{2,\gamma_2} \dots \boldsymbol{A}_{N,\gamma_N} \boldsymbol{A}^{\dagger}_{N,\gamma'_N} \dots \boldsymbol{A}^{\dagger}_{2,\gamma'_2} \boldsymbol{A}^{\dagger}_{1,\gamma'_1} \times \\ \times |\varphi_{1,\gamma_1}\rangle\langle\varphi_{1,\gamma'_1}| \otimes |\varphi_{2,\gamma_2}\rangle\langle\varphi_{2,\gamma'_2}| \otimes \dots \otimes |\varphi_{N,\gamma_N}\rangle\langle\varphi_{N,\gamma'_N}| .$$
(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 MPSnél az összes rácsoperátor $(d_j \times d_j)$ méretű mátrix, viszont egy adott $\gamma_1, \ldots, \gamma_N$ 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 lánchosszt.

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 kifejlesz-tését 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 A mátrixokat nem a (64) eljárással nyerjük, hanem közvetlenül kiszámolhatók a probléma sajátossága miatt.

Belátható, hogy a (4) formulában $\theta = \operatorname{arctg} \frac{1}{3}$ választás mellett a bilineárisbikvadratikus 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.

$$\begin{aligned}
& szingulett \\
& végspin \qquad \bullet \qquad S_{\{1,2\}} = 1 \\
& \mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 \otimes \mathcal{H}_3 \otimes \mathcal{H}_4 \otimes \mathcal{H}_5 \otimes \dots \\
& |\tilde{\Psi}\rangle = |\varphi_1\rangle \otimes |\phi_{\{2,3\}}\rangle \otimes |\phi_{\{4,5\}}\rangle \otimes \dots
\end{aligned}$$
(68)

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

$$|\phi_{\{i,i+1\}}\rangle = \sum_{\alpha_{i},\alpha_{i+1}=-\frac{1}{2},\frac{1}{2}} \phi_{\{i,i+1\}}^{\alpha_{i}\alpha_{i+1}} |\varphi_{i,\alpha_{i}}\rangle \otimes |\varphi_{i+1,\alpha_{i+1}}\rangle , \qquad i = 2, 4, 6, \dots ,$$

$$\phi_{\{i,i+1\}} = \begin{bmatrix} 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \end{bmatrix}.$$
(69)

Egy leképezést keresünk, amellyel a spinlánc állapotvektorát a triplett 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 $|S_{\{i-1,i\}} + S_{\{i+1,i+2\}}| < 2$ [1]. Ezt úgy érhetjük el, hogy a buborékkal szimbolizált spinpároknak csak a triplett állapotait tartjuk meg, amik a

$$|\psi_{\{i-1,i\},\gamma}\rangle = \sum_{\alpha_{i-1},\alpha_i = -\frac{1}{2},\frac{1}{2}} \psi_{\{i-1,i\},\gamma}^{\alpha_{i-1}\alpha_{i}} |\varphi_{i-1,\alpha_{i-1}}\rangle \otimes |\varphi_{i,\alpha_i}\rangle , \qquad i = 2, 4, 6, \dots,$$

$$\psi_{\{i-1,i\},-1} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad \psi_{\{i-1,i\},0} = \begin{bmatrix} 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \end{bmatrix}, \quad \psi_{\{i-1,i\},+1} = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}.$$
(70)

alakban írhatók. Ezzel a keresett leképezés

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

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

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

Kifejtve a Phatását 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	0	_
-0.218	+	_	0	0
	0	0	+	—
$\sim 10^{-16}$	+	+	_	_
~ 10	+	_	—	+

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

 $|\Psi\rangle =$

$$\sum_{\substack{\gamma_{\{1,2\}, \\\gamma_{\{3,4\}, \cdots} \\ =-1, 0, 1}} \sum_{\substack{z_{1,\alpha_{2}, \cdots} \\ =-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}} \underbrace{\zeta_{\{1\}}^{\alpha_{1}} \psi_{\{1,2\}, \gamma_{\{1,2\}}}^{\ast \alpha_{1}\alpha_{2}}}_{A_{\{2,3\}}^{\alpha_{2}\alpha_{3}} \psi_{\{3,4\}, \gamma_{\{3,4\}}}^{\ast \alpha_{3}\alpha_{4}}} \cdots |\varphi_{\{1,2\}, \gamma_{\{1,2\}}}\rangle \otimes |\varphi_{\{3,4\}, \gamma_{\{3,4\}}}\rangle \cdots = \sum_{\substack{\gamma_{1,\gamma_{2}, \cdots} \\ =-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}}} \sum_{\substack{\beta_{1,\beta_{2}, \cdots} \\ =-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}}} A_{1,\gamma_{1}}^{\beta_{1}} A_{2,\gamma_{2}}^{\beta_{1}\beta_{2}} \cdots |\varphi_{1,\gamma_{1}}\rangle \otimes |\varphi_{2,\gamma_{2}}\rangle \cdots = \sum_{\substack{\gamma_{1,\gamma_{2}, \cdots} \\ =-1,0,1}} A_{1,\gamma_{1}} A_{2,\gamma_{2}} \cdots |\varphi_{1,\gamma_{1}}\rangle \otimes |\varphi_{2,\gamma_{2}}\rangle \cdots$$
(73)

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

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

Az $A_{i,\pm 1}$ mátrixok nilpotensek, így a mártixszorzat-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 füzéroperátor várhatóértékével jellemezhető [38]:

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

A VBS-állapotban a határérték nem tűnik el, $g(|i-j| \to \infty) = \frac{4}{9}$. 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:

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

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

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

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

$$T_{\gamma'\gamma}|\varphi_{\gamma}\rangle = |\varphi_{\gamma'}\rangle, \qquad T_{\gamma'\gamma}^{\alpha'\alpha} = \delta_{\gamma'\alpha'}\delta_{\gamma\alpha}. \tag{80}$$

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 Lin \mathcal{H} téren, így tetszőleges fizikai mennyiség operátora kifejthető 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:

$$C(\varrho_{i|j}, T_{i,\gamma'_{i}\gamma_{i}}, T_{j,\gamma'_{j}\gamma_{j}}) = \langle T_{i,\gamma'_{i}\gamma_{i}} \otimes T_{j,\gamma'_{j}\gamma_{j}} \rangle - \langle T_{i,\gamma'_{i}\gamma_{i}} \rangle \langle T_{j,\gamma'_{j}\gamma_{j}} \rangle = \varrho_{ij}^{\gamma_{i}\gamma'_{i},\gamma_{j}\gamma'_{j}} - \varrho_{i}^{\gamma_{i}\gamma'_{i}} \cdot \varrho_{j}^{\gamma_{j}\gamma'_{j}}.$$

$$(81)$$

A (79) összefüggés minen O_i , O_j operátorra teljesül, így T_i , T_j operátorokból előállított általánosított korrelációs függvénykre 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 lánchossz 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 lrácsállandónyival 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 $I_{i|j}$ $(i, j \in L)$ párkorreláció (páronkénti kölcsönös információ) és az $S(\varrho_{\mathcal{A}})$ $(|\mathcal{A}| = \ell)$ 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:

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

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

Ebben az egyszerű esetben a 10. ábrán látható párkorreláció- és blokkentrópiagrafikon 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

$$S_a = S_b = S_c = \ln 2. \tag{83}$$

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

$$S_{ab} = 0 \qquad \qquad S_{ac} = S_{bc} = 2 \ln 2,$$

$$S_{abc} = \ln 2$$

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:

$$I_{a|b} = 2 \ln 2 \qquad I_{a|c} = I_{b|c} = 0,$$

$$I_{ab|c} = 0 \qquad I_{ac|b} = I_{cb|a} = 2 \ln 2,$$

$$I_{a|b|c} = 2 \ln 2.$$

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]

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

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.

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

$$\varrho_{\{1,\dots,2k+1\}} = \varrho_{\{1,\dots,2k\}} \otimes \operatorname{Tr}_{2k+2} |\phi_{\{2k+1,2k+2\}}\rangle \langle \phi_{\{2k+1,2k+2\}}| \tag{86}$$

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 közismert 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

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



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



13. ábra: Korrelációs függvények és kölcsönös információk feles spinű Heisenbergmodellre. 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\downarrow\rangle$
-0.149	$ \downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\uparrow\rangle$
-0.408	$ \uparrow\downarrow\downarrow\downarrow\uparrow\rangle$
-0.408	$ \downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\rangle$

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



14. ábra: Adott felosztásra vett kölcsönös információ és a leglassabban lecsengő általános korrelációs függvény illesztése $S = \frac{1}{2}$ -es Heisenberg-modellre. 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): $\theta = \arctan \frac{1}{3}$

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 információja és a blokkentrópiája.



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



17. ábra: Páronkénti kölcsönös információ és blokkentrópia S = 1-es spinű Heisenbergmodellre 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 blokkentrópia 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 = 32hosszúságú 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 blokkentrópiában 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 $(N \to \infty)$ 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 kötéseket képzelünk a rácspontok közé. Az a|b felosztás esetén míg brögzített, 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 visszanő. 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 ($N \to \infty$) 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 blokkentrópiái



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



21. ábra: A bilineáris-bikvadratikus modell energiarésének $\theta = -\frac{3\pi}{4}$ 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 sematikusan.

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 középponti témájával, egydimenziós erősen korrelált rendszerekkel foglalkoztam, kiemelten a Haldane-fázist is megvalósító bilineáris-bikvadratikus modellel. Kutatómunkám keretében megismerkedtem a BUDAPEST-QCDMRG [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 lánchossz 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 precízségét, és a dolgozat többszöri átolvasása közben tett hasznos megjegyzéseket.

Kutatómunkám anyagi hátterét 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 Szilárd-testfizikai Intézetének *Erősen Korrelált Rendszerek "Lendület"* kutatócsoportjában.

- Miután megismerkedtem a DMRG elméleti alapjaival, a csoport által fejlesztett Matlab [48] alapú BUDAPEST-QCDMRG [47] kód felépítését tanultam meg. Ezáltal egyszerű számításokat végeztem különösen a bilineárisbikvadratikus 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 várhatóértékeinek, különböző állapotok közti átmeneteinek, redukált sűrűségmátrixnak és ebből származtatott mennyiségek (entrópia, kölcsönös információ, sokrészkorrelációs 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 összefonódás mértékeit.
- 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

- Solyom, 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.
- 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, O. & 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.
- 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.

- 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. Mixedstate 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 threequantum-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. ar-Xiv [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 valencebond 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, O., Lajkó, P. & Iglói, F. Logarithmic delocalization of end spins in the s = 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, O., 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 SrCu₂O₃ 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.