

A T 043330 OTKA pályázat zárójelentés

A 2003-ban indult pályázatban erősen korrelált alacsony dimenziós rendszerek viselkedésének tanulmányozását tűztük ki célul. Az akkor zárult korábbi pályázatunk során egy nagyon hatékony és eléggé általános programcsomagot dolgoztunk ki, mely a sűrűségmátrixon alapuló, numerikus renormálási eljárás (DMRG módszer) sokféle alkalmazását tette lehetővé, nemcsak a szilárdtest-fizikában, hanem a kvantumkémiaiában is. Akkor azt elsősorban spinláncok vizsgálatára alkalmaztuk. A jelen pályázatban egyrészt a módszer továbbfejlesztését terveztük, másrészt erősen korrelált fermionmodellekre kívántuk alkalmazni. Nemcsak egydimenziós rendszerekre, hanem a kétdimenziós rendszerek felé tett lépésként az egyébként fizikailag is igen releváns csatolt láncokat vizsgálva. A numerikus számolások mellett analitikus munkát is terveztünk a Bethe-féle feltevessel megoldható rendszerek vizsgálatával. A beszámolóban először a DMRG módszer továbbfejlesztésével kapcsolatos eredményeinket ismertetjük, majd a fizikai modellek vizsgálata során elért eredményeinket foglaljuk össze. Ezek részben még spinláncok tulajdonságaival kapcsolatosak, de aktivitásunk jelentős részben egydimenziós elektronrendszerekben, illetve csatolt fermionláncokban bekövetkező fázisátalakulások vizsgálatára irányult. Ezután tárgyaljuk a Bethe-féle feltevessel kapott analitikus eredményeket, majd az ebben az időszakban végzett interdiszciplináris kutatásainkra kerül sor.

1. Metodikai fejlesztés

1.1 A DMRG algoritmus fejlesztése

Különösen a beszámolási időszak elején még további fejlesztéseket végeztünk a DMRG algoritmuson alapuló programcsomagon. A DMRG valós térbeli változatát tovább általánosítottuk, így jelenleg bármilyen, két rácsponthoz tartozó operátorral leírható Hamilton-operátor alapállapotának és alacsony energiás gerjesztett állapotainak meghatározását el tudjuk végezni. Az új verzió a megfelelő numerikus pontosság eléréséhez több száz, akár ezer renormált blokkállapot megtartását teszi lehetővé.

1.2 Kvantuminformáció-elméleti eredmények alkalmazása a DMRG pontosságának javítására

Míg a szokásos, valós térben dolgozó DMRG algoritmusban a rácspontok rendezése a modell természetéből adódik, addig impulzustérbeli állapotokkal vagy molekulapályákkal dolgozva az állapotoknak már nincs ilyen természetes rendezése. Megmutattuk, hogy az eljárás pontossága erősen függ attól, hogy a blokkokban hol helyezkednek el azok az állapotok, melyekben a kölcsönhatás következtében leginkább változhat a betöltési szám. Elsőként alkalmaztuk a kvantuminformáció-elmélet eredményeit a DMRG módszer konvergenciája hatékonyságának vizsgálatára, s kidolgoztunk egy új módszert, mely a rácspontok optimális rendezését adja.

A kvantumkémiaiában alkalmazott ún. aktívter-kiterjesztés módszerét továbbfejlesztve egy új inicializálási algoritmust dolgoztunk ki, mely az aktív teret dinamikusan terjeszti ki (DEAS módszer) a Kullback–Leibler-féle információs entrópia maximalizálása révén, figyelembe véve a renormált blokkállapotok struktúrájának változását is. Ennek révén az impulzustérbeli (MS-DMRG) és kvantumkémiai (QC-DMRG) számolásokban a korrelációs energia nagy részét (akár 99%-át) már az inicializálási eljárás végén megkapjuk.

Az optimalizált rendezés és inicializálás alkalmazásával az iterációs lépések számát egy-két nagyságrenddel csökkentettük, így a futásidő tovább csökkent, és a DMRG stabilitása is tovább javult. A DMRG kiegészítő operátorainak átszervezésével és egy új hullámfüggvény-transzformáció kidolgozásával megsokszoroztuk a DEAS módszer hatékonyságát.

Kidolgoztuk a kvantumos adatkompresszió legáltalánosabb elméleti és numerikus közelítését. Az elmélet általánosítása révén, egy előre meghatározott jósági tényezőnek

megfelelően megadható az egymástól nem független sűrűségmátrixokkal megalkotott üzenetek (konfigurációs terek) Neumann-entrópia szerinti tömöríthetősége. Az elérhető információ alsó (Józsa-féle) és felső (Holovo-féle) korlátjának a DMRG-re való alkalmazásával egy új vágási és kiválasztási eljárását alkottunk meg a renormálási folyamatra. Ennek révén egy új, pontosabb becsléseket adó extrapolációs módszerre tettünk javaslatot. Elsőként a valós térbeli egydimenziós Hubbard-modellt tanulmányozva megmutattuk, hogy annak ellenére, hogy a teljes entrópia nem egyenlő a rácsponthoz rendelhető entrópiák összegével, a DMRG-blokk entrópiája és a blokkállapotok száma, illetve a DMRG-blokk entrópiája és a teljes rendszer Hilbert-terének dimenziója között egyszerű összefüggés áll fenn. Eredményeinket jóval bonyolultabb, nem lokális kölcsönhatásokat tartalmazó kvantumkémiai rendszerekre is alkalmaztuk. A renormálási folyamat információvesztését vizsgálva megmutattuk, hogyan változik a DMRG-blokk entrópiája a blokk méretének növekedésével. Eredményeink alapján kimutattuk, hogy a rácspontokhoz rendelhető entrópiák összege egyenlő a teljes renormálási folyamat információgenerálásával. Ezzel az entrópiára vonatkozó összszabállyal alternatív kritériumot fogalmaztunk meg a DMRG konvergenciájára. Az összefonódottság lokalizálása és a kölcsönhatás lokalizálása közötti versengő folyamatokat az impulzustérbeli és kvantumkémiai rendszerek tanulmányozásával mutattuk meg.

Az egydimenziós periodikus határfeltételnek eleget tevő Hubbard-modellre olyan uniter bázisfüggvény-transzformációt dolgoztunk ki, melynek révén a modell nyitott határfeltétel mellett vizsgálható. Megmutattuk, hogy annak ellenére, hogy a transzformáció után a modell csak első- és másodsomszéd kölcsönhatásokat tartalmaz, a DMRG-vel végzett számolások hatékonysága nem nő. Ezt azzal magyaráztuk, hogy a transzformáció után új csatolások jelentek meg a modellben, melyek mindegyike önálló kvantumcsatornát jelent és összefonódottságot termel. Mindezek együttesen az információs Neumann-entrópia növekedéséhez vezetnek. Egyenként megvizsgáltuk az egyes kvantumcsatornák entrópiatermelését, illetve ezek hatását a DMRG algoritmusra. Vizsgálatunk egy újabb lépést jelentett a kvantumkémiai DMRG optimalizálása és fejlesztése terén.

2. Spinláncok vizsgálata DMRG-vel

Új DMRG programunk hatékonyságát először spinmodelleken demonstráltuk. Mivel az irodalomban az egydimenziós, $S=1$ spinű bilineáris-bikvadratikus modell fázisdiagramjára a korábbi következtetéseinket megkérdőjelező eredmény jelent meg, nevezetesen bizonyítottak látták a Csubukov-fázis létét a paraméterek egy keskeny tartományában, pontosabb módszerekkel újra vizsgáltuk a problémát. Megmutattuk, hogy az eddig legpontosabbnak vélt számítások nem támasztják alá a korábbi eredményeinket ért kritikát.

A $S=3/2$ spinű antiferromágneses Heisenberg-lánc esetén meghatároztuk a felületi spinek korrelációs függvényét, és megmutattuk, hogy a korrelációk logaritmikusan tartanak nullához. A naiv várakozással ellentétben annak ellenére nincs felületi rendeződés, hogy a modellben definiálhatók kvázilokalizált felületi gerjesztések. Eredményeink azt mutatják, hogy a $3/2$ spinű láncban a végspinek valójában nem tekinthetők lokalizáltak, de a felületi delokalizálódás logaritmikusan lassú folyamat, melynek hatása csak exponenciálisan hosszú láncokban figyelhető meg. Az energiaresek lánchosszfüggő viselkedésére koherens értelmezést adtunk.

Erős mágneses térbe tett spinláncok alacsonyenergiás fizikája a Luttinger-folyadékok univerzalitási osztályába sorolható. A viselkedést a modell paramétereitől folytonosan függő kritikus exponensek jellemzik. A Luttinger-folyadékok elmélete (a konformális invariancia révén) jól meghatározott jóslatokat ad nemcsak a tömbi kétpont-korrelációs függvény viselkedésére, de véges geometria esetén a különböző mennyiségekhez rendelhető „profilok” alakjára is. A profilokat numerikus szimulációval meghatározva megadható a lecsengési exponensekben megjelenő Luttinger-folyadék-paraméter. Az $S=1/2$ spinű lánc esetén, ahol a kritikus exponensek a Bethe-féle feltevessel is számolhatók, az exponensek numerikusan

nagyon pontosan, 1%-os hibán belül meghatározhatók a mágnesezettség-profilok illesztéséből. $S=1$ esetén a Luttinger-folyadék exponenseit a mágnesezettség- és a kvadrupólusoperátor-profilok numerikus vizsgálata segítségével határoztuk meg. Eredményeink azt mutatták, hogy bár mind az $S=1/2$, mind az $S=1$ lánc kellően nagy mágneses térben Luttinger-folyadékként viselkedik, a két rendszer között kvantitatív értelemben jelentős eltérések mutatkoznak.

Egy l hosszúságú blokk tulajdonságait tanulmányoztuk egy véges N hosszúságú, feles spinű XX modellben. A blokk és a rendszer többi része között fennálló összefonódottságból adódó kvantumfluktuációkat vizsgálva megmutattuk, hogy a rendszernek a blokkon túli része termikus környezetként is felfogható. Ily módon egy effektív hőmérsékletet definiáltunk. Numerikus módszerek alkalmazásával megmutattuk, hogy az effektív hőmérséklet kielégíti azon alapvető elvárásokat, melyeket két részrendszer összeillesztésekor elvárunk.

3. Kvantumos fázisátalakulások vizsgálata a Neumann-entrópia segítségével

Az utóbbi évek egyik érdekes fejleményeként kiderült, hogy az egydimenziós modellekben megjelenő kvantumos fázisátalakulások vizsgálatának igen hatékony eszköze lehet a lánc részei közötti összefonódottság tanulmányozása. Először feles spinű spinmodellekre mutatták meg, hogy az ún. konkurencia, mely két szomszédos spin állapotának összefonódottságát jellemzi, extrémális értéket vesz fel a kritikus pontban. A konkurencia azonban csak feles spinű rendszerekre értelmezhető. Bizonyos fázisátalakulásoknál hasonló viselkedés tapasztalható egy rácspont Neumann-entrópiájában is. Rámutattunk arra, hogy egy rácspont entrópiája nem mindig érzékeny a fázis megváltozására, viszont igen markánsan jelenik meg a kvantumos fázisátalakulás, ha két szomszédos rácspont Neumann-entrópiáját vizsgáljuk. Ez utóbbi pedig a DMRG keretei között igen könnyen meghatározható. Elsőrendű átalakulásnál ugrás, másodrendű átalakulásnál éles csúcs jelenik meg. A korábban javasolt eljárásokkal szemben az általunk javasolt módszer fermionok kölcsönhatását tárgyaló modellekre is alkalmazható. Rámutattunk arra is, hogy a dimerizált fázisok kimutatására különösen is alkalmas a módszer, hiszen ha a lánc mentén váltakozó erősségű kötések alakulnak ki, ezzel együtt változik a kötésben részt vevő szomszédos rácspontoknak a környezettel való összefonódottsága, s emiatt a párok entrópiája oszcillál a lánc mentén. Ennek amplitúdója tekinthető rendparaméternek.

Új módszert dolgoztunk ki térben inhomogén fázisok, kommenzurábilis-inkommenzurábilis fázisátalakulások kimutatására. Ez egy nagy véges lánc l hosszúságú szakasza Neumann-féle kvantuminformációs entrópiájának az l hosszától való függésének a vizsgálatán, illetve ezen profil Fourier-spektrumának tanulmányozásán alapszik. Az ismert volt, hogy kritikus rendszerekben egy véges szakasz entrópiája logaritmikusan növekszik a szakasz hosszával, nem kritikus rendszerekben pedig telítésbe megy. Megmutattuk, hogy ennél sokkal gazdagabb lehet az entrópia hosszfüggése. A logaritmikusan növekvő vagy telítésbe menő függvényre oszcilláció ülhet rá. Ez a Fourier-spektrumban csúcsok megjelenését eredményezi. Kritikus rendszerekben ezek amplitúdója eltűnik ugyan, ha a lánc hossza végtelenhez tart, de helyük megadja a gerjesztési spektrum lágymódusainak hullámszámát. Nem kritikus rendszerekben viszont az amplitúdó véges maradhat, s akkor ez térben inhomogén fázis megjelenésére utal. A térbeli periodicitást a csúcshoz tartozó hullámszám adja meg. Több, az alábbiakban tárgyalt modell esetén megmutattuk, hogy ez a módszer spin- és fermionrendszerek esetében egyaránt jóval hatékonyabban alkalmazható a fázisátalakulási pontok kimutatására, mint a korábbi módszerek.

4. A semleges-ionos átalakulás donor-akceptor sókban

Már a múlt század hetvenes évei óta ismertek voltak olyan láncszerű szerkezetű töltésátviteli sók, melyekben az akceptor és donor molekulák felváltva helyezkednek el a láncok mentén. A semleges molekulákról a töltésátvitel akkor indul meg, ha külső nyomásra a szomszédok közötti

átfedés megváltozik. Ennek a semleges-ionos átalakulásnak a tanulmányozására két modellt is kidolgoztak. Az ún. ionos Hubbard-modellben az atomi energiaszint váltakozása szimulálta a kétféle molekulát. A másik modell szerint az ionos állapotban ellentétesen töltött szomszédok közötti Coulomb-vonzás játszik lényeges szerepet. Egyik eredményünk az volt, hogy olyan egységes modellt dolgoztunk ki, mely határesetben mindkét korábbi modellt tartalmazza. Ezzel a korábbinál általánosabb fázisdiagramot sikerült meghatározni, mely első- és másodrendű fázisátalakulásokat is megenged, egyezésben a kísérleti eredményekkel. Másrészt tisztáztuk azt az irodalomban sokáig vitatott kérdést, hogy a semleges-ionos átalakulás egy vagy több lépésben következik-e be. Eredményeink egyértelműen megmutatták, hogy ott, ahol az átalakulás nem elsőrendű, két másodrendű átalakulás követi egymást. Tisztáztuk az állapotok természetét is, nevezetesen azt kaptuk, hogy a semleges és ionos fázis közé a paraméterek egy keskeny tartományában egy dimerizált fázis iktatódik be.

5. A fém-szigetelő átalakulás vizsgálata Hubbard-jellegű modellekben

A fém-szigetelő átalakulás leírásának legegyszerűbb modellje a Hubbard-modell. A szokásos tárgyalásban az egyszerűség kedvéért a pályamozgás szabadsági fokait elhagyják, s minden rácpontban csak a spin kétféle beállítását veszik figyelembe. Átmenetifémek esetén fontos lehet a többi szabadsági fok figyelembevétele. Ennek legegyszerűbb módja a modell általánosítása $SU(n)$ szimmetriára. Ezt a modellt vizsgáltuk analitikusan, a renormálásicsoport-módszer alkalmazásával és numerikusan is, a DMRG segítségével.

Megmutattuk, hogy általános betöltöttség esetén az $SU(n)$ szimmetriájú Hubbard-modell gerjesztési spektruma is nulla energiáról indul, a rendszer n komponensű Luttinger-folyadék-ként viselkedik. Ez azzal jár együtt, hogy teljesül a bozon jellegű gerjesztési ágak szétválása. Ebben a fémes, energiárés nélküli tartományban a Hubbard-modellnél általánosabb n komponensű modelleket is vizsgáltunk. Megmutattuk, hogy a legáltalánosabb esetben n különböző sebességű bozon terjed a rendszerben teljesen függetlenül. Abban az esetben, ha a kölcsönhatások csak a kölcsönható részecskék relatív spinállásától függenek, az $n-1$ spinmódus azonos sebességgel rendelkezik.

Más a helyzet speciális kommenzurábilis betöltöttségek esetén. Félig töltött sávnál $n > 2$ esetén a töltés- és spingerjesztések összecsatolódnak az umklapp folyamatok következtében, s emiatt minden gerjesztési ágban megjelenik a véges tiltott sáv. Megmutattuk, hogy ennek a Kosterlitz–Thouless-átalakulásnak a kritikus csatolási állandója valószínűleg $U=0$. Azt is kimutattuk, hogy bármilyen $n > 2$ esetén az alapállapot térben inhomogén, dimerizált, tetszőleges pozitív U -nál.

Arra is rámutattunk, hogy a szokásos, $n=2$ esetben tapasztalt fém-szigetelő átmenetet, ahol a szigetelő fázisban csak a töltésgerjesztésekben van tiltott sáv, a spingerjesztésekben viszont nincsen, általános n esetén az $1/n$ betöltöttségű modellben kapjuk vissza. Itt igaz az, hogy az n -edrendű umklapp folyamatokban csak a töltésgerjesztések vesznek részt, csak bennük keltődik energiárés.

A kétdimenziós általánosítás irányába tett lépésként csatolt, $SU(n)$ szimmetriájú Hubbard-láncok (a Hubbard-létra) viselkedését is tanulmányoztuk az analitikus renormálásicsoport-transzformáció segítségével. Meghatároztuk a Luttinger-folyadék-ként való viselkedés feltételét, s részletesen analizáltuk, a bozonizáció segítségével, a nem Luttinger-folyadék jellegű viselkedést okozó kölcsönhatási folyamatok, a visszaszórás, a töltésátviteli szórás és az umklapp folyamatok szerepét. Megmutattuk, hogy melyik kölcsönhatás melyik töltés- vagy spingerjesztésben okoz véges energiárést. Az erős csatolású fixpontokhoz tartozó állapotokat a szerint osztályoztuk, hogy hány gap nélküli töltés- és spinmódus marad a rendszerben.

Elvégeztük a Luttinger-folyadék-állapot stabilitási analízisét is n komponensű rendszerek esetén, a láncok közötti egyrészecskés átugrással szemben. Azt találtuk, hogy bár teljesen

vonzó, illetve teljesen taszító kölcsönhatások esetén a Luttinger-folyadék-állapot elromlik, de abban az esetben, ha csak a kölcsönhatások egy része válik vonzóvá (például fononokkal való kölcsönhatás következtében), a létramodell megőrzi a láncok Luttinger-folyadék-tulajdonságát.

Első- és másodsomszéd átugrási tagokat is tartalmazó Hubbard-modell kétdimenziós fázisdiagramjában meghatároztuk a kommenzurábilis-inkommenzurábilis fázishatárt. Entrópia analízisünkkel egyben alátámasztottuk azt a várakozást, miszerint a kommenzurábilis-inkommenzurábilis átalakulás független a szigetelő-fém átalakulástól.

6. Bethe-féle feltevessel megoldható rendszerek vizsgálata

Kidolgoztunk egy funkcionálintegráláson alapuló módszert, mellyel a Bethe-feltevessel megoldható egydimenziós sokrészecske-rendszerek (nagy)kanonikus állapotösszegében a nyeregponthoz fluktuációk járuléka is figyelembe vehető, így a megfelelő termodinamikai potenciál a vezető rendnél pontosabban kiszámítható. Az így kapott korrekció $T \rightarrow 0$ határértéke a végtelen méretű rendszer maradék entrópiáját adja meg. Módszerünkkel numerikusan kiértékelhető alakban megadtuk a taszító δ -gáz szabadenergiájának a vezető rendet követő $O(1)$ nagyságrendű tagját periodikus és nyitott lánc esetén is, és elemeztük annak tulajdonságait különböző határesetekben. A módszert általánosítottuk a δ -gázénál bonyolultabb gerjesztési struktúrával rendelkező rendszerekre, mint pl. az XXZ Heisenberg-lánc esetére is, de megmutattuk azt is, hogy izotrop (XXX) lánc esetén a vezető rendet követő járulék nem a nyeregponthoz fluktuációkból, hanem a rendszer magas szimmetriájából eredő degenerációkból adódik, és várhatóan $O(\sqrt{N})$ nagyságú. Megvizsgáltuk a relativisztikus Lee–Yang-modell szabadenergia- korrekcióit is, és azt találtuk, hogy az eredmény nem egyezik az irodalomból ismert korábbi elvárásokkal. Az ellentmondás feloldását nehezíti, hogy az eredmények direkt numerikus ellenőrzésére nem áll rendelkezésre olyan módszer, mellyel elegendően nagy rendszer szabadenergiája elegendő pontossággal meghatározható lenne.

7. A DMRG alkalmazása interdiszciplináris problémákra

A DMRG módszer matematikai apparátusát szociofizikai modellek vizsgálatára is alkalmaztuk. Kidolgoztuk a heterogén populációban kialakuló nyelvi és kulturális evolúció egy lehetséges egyszerűsített modelljét. Részletesen vizsgáltuk a modell fázisdiagramját a szociális kölcsönhatások erőssége és a kölcsönható egyedek racionalitását jellemző paraméter függvényében és rend-rendezetlen típusú fázisátalakulást találtunk.

Vizsgáltuk a vállalatközi elektronikus piacok néhány gyakorlati szempontból fontos árazási, illetve növekedési problémáját. A statisztikus fizika és az evolúciós játékelmélet eszköztárát felhasználva megmutattuk, hogy egy megfelelően adaptált sztochasztikus piaci modellben bizonyos feltételek mellett a gazdasági verseny erősödése magasabb árakhoz vezethet. A jelenség háttérében az áll, hogy bár az egyedek a saját szemszögükből nézve racionális gazdasági döntést hoznak, a lehetséges döntési alternatívák megítélésében egyéni preferenciáik érvényesülnek. Ezek a preferenciák a populációban egy eloszlásfüggvénnyel jellemezhetők, s ennek lecsengése a modell viselkedését alapjaiban meg tudja változtatni. Az exponenciálisnál lassabb lecsengése paradox módon az egyensúlyi árat a naiv várakozással ellentétesen mozgatja. Elemeztük továbbá a piacok növekedésének dinamikáját, és megmutattuk, hogy azt alapvetően egy instabilis nyeregponthoz határozza meg, amely egy „kritikus tömeget (likviditást)” definiál. Az ilyenfajta kritikustömeg-effektus megjelenése minden olyan esetben tipikusnak mondható, amikor az egyedek utilitásfüggvénye nemlineáris módon növekszik a piacon résztvevő egyedek számának függvényében. Elemeztük azt is, hogy milyen hatással van a rendszer működésére, ha a szereplők stratégiaváltása jelentős egyszeri költséget jelent. Azt találtuk, hogy a modell két fixpontját elválasztó szeparatrix ebben az esetben véges sávra szélesedik, és ez metastabilitáshoz, illetve hiszterézishez vezet.

Egy másik kutatásunk célja az volt, hogy a fizikai „renormálás” koncepcióját kiterjesszük és alkalmazzuk korlátozott racionalitással rendelkező egyedek és a belőlük spontán módon szerveződő közösségek, társadalmak tulajdonságainak leírására. A kognitív erőforrások korlátozott volta szükségessé teszi, hogy az egyedek a körülöttük lévő világot optimálisan redukált formában kezeljék. Belső működésüket így egy dimenzióredukációs (renormálási) mechanizmus vezérli, mely a komplex világ attribútumhalmazából csak a fontos szabadsági fokokat igyekszik megtartani. Ez utóbbiak (az ún. „konceptiók”) vezérlik ezután az egyed döntéseit és adják „kulturális profilját”. Kölcsonható populációban az egyedek kulturális profilja dinamikusan adaptálódik egymáshoz a szociális hálózatban. Azt találtuk, hogy ez a dinamika általában egy fixponthoz konvergál, mely értelmezésünkben egy játékelméleti Nash-egyensúly. Eredményeink azt mutatták, hogy többféle fixpont lehetséges különböző mértékű társadalmi koherenciaszinttel. A modell kidolgozásán túl kutatásunk fő eredménye a fázisdiagram megértése és feltérképezése statisztikus fizikai módszerek segítségével. Eredményeink magyarázattal szolgálhatnak a mintegy 50 000 évvel ezelőtt lezajlott „kulturális robbanás” megértéséhez.