

A K 068340 OTKA pályázat zárójelentése

A 2007 nyarán indult OTKA pályázatunk fő célkitűzése az alacsony dimenziós mágneses és fermionrendszerek fizikájának, a bennük lejátszódó kvantum fázisátalakulásoknak a tanulmányozása volt analitikus és numerikus módszerekkel. Ennek fő motivációja az volt, hogy a fizika különböző területein, az ultrahideg atomok fizikájától a magas átmeneti hőmérsékletű szupravezetőkig, az anyagtudománytól a kvantumkémiaiig található olyan rendszerek, amelyek alacsony dimenziós modellekkel jellemezhetők, vagy azok egy speciális alakjára leképezhetők. Ezen rendszerek sajátossága, hogy a kölcsönhatások szerepe nem vizsgálható a perturbációs számítás módszereivel, hiszen az erős korrelációk és a kvantumfluktuációk miatt a kölcsönhatások lényegesen megváltoztathatják a rendszer tulajdonságait, merőben új jelenségek léphetnek fel.

Az eredetileg négy évre tervezett kutatások befejezésére egy év hosszabbítást kaptunk, így ez a zárójelentés a 2007 és 2012 nyara között elért eredményeinkről ad számot. A publikációk közül kettő könyvfejezet, egy pedig akadémiai doktori értekezés, ezért ezeknél nem jelent meg az OTKA szám. Több cikkünk elbírálás alatt van, egyelőre csak az arXiv-ban érhető el, ezért nincs még impaktfaktora.

1. Algoritmusfejlesztések a kvantuminformáció-elmélet alapján [1–4]

Az erősen korrelált rendszerek numerikus tanulmányozására több eljárás is ismert. Ezek közül egydimenziós modellek esetén a S. R. White által húsz éve kidolgozott módszer, a sűrűségmátrixon alapuló renormálásicsoport-algoritmus (DMRG) a leghatékonyabb. Ez egy valós térbeli renormálási eljárás, amellyel egy véges rácson értelmezett rendszer tulajdonságai tanulmányozhatók. Már az előző, a 2007-ben lezárult OTKA pályázatunkban a módszer jelentős, a kvantuminformáció-elmélet fogalmaira épülő továbbfejlesztéséről számoltunk be. Ebben a periódusban egyrészt egy összefoglaló cikkben [1] mutattuk be, hogy ezeknek a fogalmaknak az alkalmazása hogyan teszi lehetővé a DMRG módszer továbbfejlesztését, s ez hogyan vezet a szilárdtest-fizikában a kölcsönható kvantum rendszerek jobb megértéséhez. Másrészt, nemzetközi kooperációban részt vettünk ezekben a fejlesztésekben, amelyek lényegesen hozzájárultak a DMRG módszer általánosításához, az ún. tenzorhálózatállapot-algoritmusok (TNS) kidolgozásához [2, 3].

Egy egészen új algoritmust dolgoztunk ki a hosszú távú kölcsönhatások kezelésére, ami magasabb dimenziós erősen korrelált rendszerek esetén is alkalmazható. Habár a DMRG impulzustérbeli (MS-DMRG), illetve kvantumkémiai (QC-DMRG) változatait már régóta alkalmazza a szakirodalom ilyen rendszerekre, a DMRG speciális topológiája miatt az csak egy dimenzióban biztosít hatékony optimalizálási lehetőségeket. Kiterjesztettük a mátrixszorzatállapot-megoldást (MPS) oly módon, hogy a rácspontok több mint két kisegítő altérhez kapcsolódhatnak, így lehetőségünk nyílt általánosabb algoritmus kifejlesztésére [4]. Egy speciális változatot vizsgáltunk, amelyben a topológiát egy fa jellegű hálózat adja általános z koordinációs szám mellett (Tree Tensor Network State (TTNS)), ahol $z = 2$ felel meg az egydimenziós esetnek. A módszerben a hosszú távú korrelációk polinom jellegű eltérést mutatnak az átlagtér-közelítésben kapott értéktől, szemben az MPS topológiával, ahol ez exponenciális. A TTNS módszer számításierőforrás-igénye lényegesen alacsonyabb, mint a korábbi DMRG alapú próbálkozásoknak, amelyekben több blokkot renormáltak egyetlen blokkba. Ezen felül a lokális bázisra egy olyan uniter transzformációt dolgoztunk ki, amely a valós és impulzustérbeli megoldások között folytonos átmenetet biztosít. Módszerünk hatékonyságát kvantumkémiai rendszerekre is bemutattuk.

2. Mágneses szennyezők vizsgálata [5–6]

A DMRG módszernek a Wilson-féle numerikus renormálási csoporttal (NRG) való ötvözéséből jött létre a sűrűségmátrixot használó numerikusrenormálási csoport-algoritmus (DM-NRG). Ennek olyan kiterjesztését dolgoztuk ki, amely lehetővé teszi a spektrális összecsabályok automatikus kielégítését, a nem abeli szimmetriák általunk javasolt kezelése pedig jóval hatékonyabb számítási eljárások megvalósításához vezetett. Az új program lehetőségeit a mágneses térbe helyezett kétcsatornás Kondo-modellre mutattuk be [5], amelynél a konvencionális NRG-vel kapott eredmény elég nagy hibával rendelkezik. A kód ingyenesen letölthető verzióját és a kapcsolódó kézikönyvet elérhetővé tettük a világhálón keresztül [6].

3. Spinlétrák lehetséges fázisainak vizsgálata [7–8]

Az egydimenziós modellektől a kétdimenziósak felé haladva az első lépés két spinláncnak létrába történő összecsatolása. Ezek a modellek önmagukban is érdekesek, mert frusztráló kölcsönhatások jelenlétében új fázisok és tört kvantumszámú gerjesztések jelenhetnek meg. Megmutattuk, hogy a paramétertér egy kiterjedt tartományában ezen modellek alapállapota topologikus renddel rendelkező, rövid távú, rezonáló valenciakötésekből felépíthető állapot, amely adiabatikusan fejlődik ki vagy a szingulett létrafokú, vagy a Haldane-jellegű állapotból. A topologikus rend ennek megfelelően különböző (ellentétes) paritású. A két fázis között az átalakulás egy lépésben is bekövetkezhet, de bizonyos esetekben egy közbenső, a translációs szimmetriát sértő, dimerizált fázison keresztül történik. Rámutattunk arra, hogy milyen kapcsolatban van a rendszer kötéseinek topológiája és a dimerizált fázis, illetve a tört kvantumszámú gerjesztések megjelenésének a feltétele között. A gyenge csatolású határesetben a bozonizációs eljárással átranzformált rendszerben az analitikus renormálási csoport-módszer alapján részletesen elemeztük a szimmetriák alapján megengedett kölcsönhatási operátorok hatását, a DMRG módszerrel pedig meghatároztuk a fázisdiagramot [7]. Ezen felül, a dimerizációs rendparamétert vizsgálva, egy speciális modell, az átlósan is csatolt létra esetén megmutattuk, hogy a frusztráció nem kedvez a dimerizált fázis megjelenésének [8].

4. Általánosított Hubbard-modellek vizsgálata [9–12]

Ultrahideg atomok optikai rácsokon való csapdázásával megvalósítható kísérleti környezet megfelelő lehetőséget biztosít számos érdekes szilárdtest-fizikai probléma szimulációjához. Az utóbbi években viszont nemcsak két belső szabadsági fokkal rendelkező fermion-rendszerek előállítása vált lehetővé, hanem három- vagy többkomponensű rendszereké is, ami új fizikai problémák vizsgálata felé nyitott utat. Elméleti szempontból ezek a rendszerek a szokásos, $SU(2)$ szimmetriájú Hubbard-modellnek az $SU(n)$ ($n > 2$) szimmetriára általánosított változatával írhatók le. Az egydimenziós modell elemzését kommenzurábilis p/q betöltöttségekre végeztük el a bozonizációs eljárással és a DMRG módszerrel [9]. Megmutattuk, hogy a komponensek n számától és a q betöltési paramétertől függően fémes vagy szigetelő állapot alakulhat ki, illetve, hogy bizonyos speciális betöltöttségekre ún. kötésrendezett (dimerizált, trimerizált, tetramerizált) alapállapoti struktúrák valósulhatnak meg a szigetelő fázisban. A rendszert átlagtér-közelítésben tovább vizsgáltuk annak érdekében, hogy a rendeződések kialakulását vezérlő folyamatokról képet alkothassunk. Ennek alapján azt találtuk, hogy a különböző kötésrendeződések a spinkicserélődési kölcsönhatás közvetlen következményeként alakulnak ki, és megállapítottuk, hogy a spinkicserélődés nemcsak végtelen erősségű Coulomb-taszítás mellett játszik meghatározó szerepet az egydimenziós Hubbard-modellben, hanem már gyenge, illetve közepesen erős csatolás esetén is [10].

Megvizsgáltuk a spinkicserélődés és a frusztráció szerepét olyan egydimenziós elektronláncban is, amelyben a szokásos, egy rácsponton ható Hubbard-kölcsönhatás mellett az első-, illetve másodsomszédok közötti antiferromágneses, Heisenberg-jellegű kicserélődést

leíró tagokat is figyelembe vettük. A gyenge csatolású határesetben a bozonizációval kapott effektív modellen renormalációs csoport-transzformáció segítségével analitikus számolásokat végeztünk, a lehetséges rendezett fázisokat félklasszikus közelítésben elemeztük. Az erős csatolásos tartományában pedig a DMRG módszert alkalmaztuk. Azt találtuk, hogy frusztráció (másodsomszédok közötti antiferromágneses spinkicserélődés) nélkül spinsűrűséghullám-állapot jellemzi a rendszert. Bár gyenge frusztráció esetén ez a fázis stabilis marad, a másodsomszédok közötti kicserélődés erősségének növelésekor először egy közbülső, minden szektorban véges energiával gerjeszhető fázis jelenik meg, amelyet kötés központú rendeződés jellemez. Még erősebb frusztráció hatására egy fémes, ún. Luther–Emery-fázis stabilizálódik, ahol csak a spingerjesztések spektrumában marad tiltott tartomány [11].

Az ún. kiterjesztett Hubbard-modellt a lokális, illetve a szomszédos rácspontok közötti Coulomb-kölcsönhatás erősségének függvényében vizsgáltuk a DMRG módszerrel. A probléma hatékonyabb vizsgálata érdekében a fázisdiagramot a kvantuminformációs entrópiák segítségével határoztuk meg, ami jóval pontosabb következtetések levonását teszi lehetővé, mint a szokásos rendparaméterek vizsgálata. Kimutattuk, hogy a sűrűséghullám-fázis (CDW) és a spinsűrűséghullám-fázis (SDW) között egy keskeny tartományban kötésrendezett (BOW), dimerizált fázis húzódik meg. Ezen felül meghatároztuk az egyes fázisok közötti fázisátalakulások jellegét is. A számításokhoz az összefonódottság skálázódását figyelembe vevő eljárást, a blokkállapotok dinamikus kiválasztásának módszerét (DBSS) is felhasználtuk, ezzel biztosítva a megfelelő konvergenciát a fázisátalakulások közelében [12].

5. Szupravezetés, egzotikus fázisok [13–16]

Az anyag olyan egzotikus fázisai, mint a magas hőmérsékletű szupravezetés vagy a kvantum Hall-effektus, szoros kapcsolatban állnak a különböző spinfolyadékfázisokkal, az egzotikus mágneses rendeződésekkel. Magasabb spinű rendszerek különösen gazdag struktúrájú fázisokat mutathatnak, és ultrahideg atomokkal jól kontrollálható körülmények között vizsgálhatók. Ez által motiválva, különböző spinfolyadékfázisok, illetve az azokkal versengő egzotikus mágneses rendeződések vizsgálatát kezdtük el különböző geometriájú kétdimenziós rácson.

Az erős lokális taszítás mind bozonok, mind fermionok esetén elsőszomszédok közötti spinkicserélődéssel írható le. Ebből az effektív spinmodellből kiindulva, az egyes szórás folyamatok szimmetriáit kihasználva, egy újfajta effektív modellt vezettünk be, amely különösen jól illeszkedik az erős csatolású határeset egyes mágneses, illetve spinfolyadék-fázisainak leírásához. Módszerünket alkalmaztuk $F=3/2$ hiperfinom spinű fermionok vizsgálatára a sáv negyedig történt betöltöttségénél, négyzögrácson. Azt találtuk, hogy a gerjesztési spektrum nem lokális része két különböző szimmetriájú ágából áll: az egyik $U(1)$ gerjesztéseket, míg a másik $SU(2)$ szimmetriájú gerjesztéseket ír le. Az alapállapotot ezek versengése határozza meg: polarizálatlan esetben a jól ismert $U(1)$ plakettfázis stabilis a paraméterter kiterjedt tartományában, míg elegendő mértékben mágnesesen polarizált rendszerenél $SU(2)$ plakett-, vagy dimerizált fázis jelenik meg. Az újfajta $SU(2)$ fázisok kísérleti vizsgálatára vonatkozóan megállapítottuk, hogy esetünkben a kvadratikusan Zeeman-tag járuléka elhanyagolható, és megbecsültük, hogy a mágneses tér milyen intervallumában várható a fázis stabilizálódása [13].

Vonzó kölcsönhatás esetén az $F=3/2$ spinű fermionok rendszere – a szokásos szingulett BCS-párok megjelenése mellett – kvintett párok megjelenésével szemben is instabilitást mutathat. A kvintett szuperfolyékony állapot stabilitásának feltételét vizsgáltuk a spinpolarizáltság függvényében egydimenziós láncon a DMRG módszerrel. Megállapítottuk, hogy a modell paramétereitől (a szingulett és kvintett szórás folyamatokat jellemző csatolásoktól), valamint a polarizáltság mértékétől függően különböző típusú szuperfolyékony állapotok jelenhetnek meg. Ezekben az egzotikus szuperfolyékony fázisokban mágneses momentumot

hordozó, BCS-jellegű párok vannak jelen. Az állapot belső szerkezetét az jellemzi, hogy az ötös multiplicitású (kvintett) párok közül melyek vannak jelen, ezzel meghatározva a szuperfolyékony állapotra ráakódó mágneses rend jellegét is [14].

$F=1/2$ spinű fermionok (elektronok) egydimenziós láncában is vizsgáltuk egzotikus szupravezető fázisok megjelenésének lehetőségét. Átlagtér-közelítésben azt találtuk, hogy a töltéssűrűség-hullám-állapot és egy nem konvencionális szupravezető együtt is létezhet, ha az elektronok közötti effektív vonzás erőssége meghaladja a töltéssűrűség-hullám gerjesztési spektrumában megjelenő tiltott tartomány nagyságát. A két fázis koegzisztenciája úgy valósul meg, hogy a Cooper-párok impulzusa megegyezik a töltéssűrűség-hullám periodicitását jellemző hullámszámmal [15].

Jelenleg az ultrahideg atomokkal folytatott kísérleteket alkáliföldfém-atomokkal, illetve hasonló, lezárt külső s héjjal rendelkező atomokkal végzik. Ezek a rendszerek igen jó közelítéssel magas spinű, $SU(n)$ szimmetrikus fermion-, bozon-, illetve spinmodellekkel írhatók le. Az $F=5/2$ spinű fermionrendszer $SU(6)$ szimmetrikus modelljét méhsejtrácson vizsgálva azt találtuk, hogy a rendszer alapállapota királis spinfolyadék, amely sérti az időtükrözési invarianciát. Ennek következtében a rendszer kvantum Hall-viselkedést mutat, királis éll állapotok figyelhetők meg benne, elemi gerjesztései tört statisztikájú anyonok. Megmutattuk, hogy ezeket az alacsony energiás gerjesztéseket egy Chern–Simons-tagot tartalmazó $U(1)$ mértékelmélet írja le. Ezáltal lehetővé válhat az anyagtér és a mértéktér kölcsönhatását optikai asztalon vizsgálni, ami jelentősen egyszerűsítheti a nagyenergiás fizikában fontos szerepet játszó rendszerek tanulmányozását [16].

6. A Hubbard-fizika és Kondo-fizika versengése a kiterjesztett periodikus Anderson–Hubbard-modellben [17–19]

A Hubbard-modellel egyetlen sávban elhelyezkedő elektronrendszer tulajdonságait vizsgálhatjuk. Ehelyett gyakran találkozunk olyan rendszerekkel, amelyekben egyszerre található elektronok egy keskeny és egy széles, egymást átfedő sávban. Ha a két sáv állapotainak hibridizációján kívül a keskeny sávban lévő elektronok közötti kölcsönhatást is figyelembe vesszük, a periodikus Anderson–Hubbard-modellhez jutunk. A paraméterek értékétől függően a Hubbard-modellre jellemző fém-szigetelő átalakulást figyelhetjük meg, vagy a lokalizált elektronok spinjeitől származó Kondo-effektust, periodikus rendszerben nehézfermionos viselkedést. A periodikus Anderson–Hubbard-modellt kiterjedten vizsgálták a Gutzwiller-féle variációs eljárással. Feladatunk az volt, hogy egyrészt a modellt véges láncokon numerikusan egzaktul megoldva megvizsgáljuk a Gutzwiller-féle eljárás pontosságát, másrészt tanulmányozzuk a széles sávban lévő elektronok közötti kölcsönhatás, illetve a két sávban lévő elektronok közötti kölcsönhatás szerepét. Megmutattuk, hogy a kétféle módszer általában jól egyező eredményt ad még rövid láncok esetén is. Arra is rámutattunk, hogy az új kölcsönhatások hasonló szerepet játszanak, mint a keskeny sávban belüli kölcsönhatások, de eltolják, kiszélesítik azt a tartományt, ahol a nehéz fermionos rendszerekre jellemző viselkedés figyelhető meg, a vegyes valenciájú állapotban pedig a valencia ugrása is megjelenhet. Félig töltött sávú rendszerekben a Kondo-szigetelő állapotból a Mott-szigetelő állapotban való átalakulás kaptunk.

7. Egzaktul megoldható egydimenziós rendszerek termodinamikai viselkedésének leírása [20]

Korábban kidolgoztunk egy funkcionálintegráláson alapuló módszert, amellyel a Bethe-feltevéssel megoldható egydimenziós sokrészecskés rendszerek nagykanonikus állapotösszegeiben az egyensúlyihoz közeli állapotok (a nyeregponthoz közeli fluktuációk) járuléka is figyelembe vehető. A taszító, Dirac- δ potenciállal kölcsönható Bose-gáz, illetve a relativisztikus Lee–Yang-modell szabadenergiájának az így kapott $O(1)$ nagyságrendű korrekciója azonban nem egyezett az irodalomból ismert korábbi elvárásokkal, bár az ellentmondás egy látszólag

ad hoc normálási faktor bevezetésével feloldható volt. Ezt a nem triviális normálási faktort sikerült egzakt módon levezetni. A rendszer lehetséges kvantumszámái megegyeznek az egydimenziós Fermi-gáz kvantumszámaival, de az ezekhez tartozó rapiditásokat, ellentétben a Fermi-gázzal, egy nemlineáris egyenletrendszer határozza meg, így az állapotösszeg nem faktorizálódik az egyes állapotokhoz tartozó állapotösszegek szorzatára. A problémát C. N. Yang és C. P. Yang javaslata alapján a rapiditás eloszlásfüggvényének segítségével felírt szabadenergia-funkcionál bevezetésével oldják fel: ezzel megkapható a makroszkopikus szabadenergia (termodinamikai Bethe Ansatz), és a már említett nyeregponthoz tartozó fluktuációk járuléka. Most kidolgoztuk a lehetséges kvantumszámkészletekre való összegzéstől a lehetséges sűrűségeloszlásokra való összegzéshez vezető transzformációsorozat részleteit. Ez a transzformációsorozat nem triviális, és a statisztikával kapcsolatos kombinatorikai megfontolásokon kívül tartalmaz egy integráltranszformációt is. Ez eredményezi a fent említett Jakobi-determináns alakú normálási faktort, és a neki megfelelő, ugyancsak $O(1)$ szabadenergia-korrekción. Ezzel egzaktul megmutattuk, hogy a Yang és Yang által bevezetett szabadenergia-funkcionál használata csak vezető rendben pontos, az azt követő korrekciók esetében már nem.

8. Polidiacetilén-szálak energiaspektruma [21]

Polidiacetilén-szálakban a π -elektronok fizikáját jól leíró Hamilton-operátor gerjesztési spektrumát vizsgáltuk. Ezekben az anyagokban a csupasz energiagap a kísérletileg mért egyrészeskés gap értékének csupán a fele, illetve az exciton kötési energiája 0,5 eV, ami kb. 20%-a az egyrészeskés gapnek. Ebből adódóan, illetve a hosszú távú Coulomb-kölcsönhatás miatt a kicserélődés és a korrelációk kezelése numerikusan szinte egzakt vizsgálatot követel meg, amit az általunk fejlesztett DMRG módszer nem lokális változatával értünk el. Felhasználva az ún. Hubbard–Ohno- és az egydimenziós leányékkolt kölcsönhatást, reprodukáltuk a szingulett exciton kísérletileg mért kötési energiáját, illetve polarizálhatóságát. Eredményeink egyben arra is rámutattak, hogy az energiaspektrumban a szingulett excitonállapot alatt optikailag sötét állapotok is elhelyezkednek – a kísérleti eredményekkel egyezésben. Ezen felül találtunk egy második, magasabban fekvő excitonállapotot is kb. 0,1 eV kötési energiával.

9. Kvantumkémiai alkalmazás [22]

Átmenetifém-klasztereket vizsgáltunk a kvantuminformáció-elmélet összefüggéseivel és a DMRG módszerrel. Elsőként a $[\text{Cu}_2\text{O}_2]^{2+}$ nyitott d héjú átmenetifém-klaszter különböző izomerjeit vizsgáltuk. Rámutattunk az összefonódottság és a kölcsönhatás lokalizációja közötti versengésre, majd bemutattuk a konfigurációs kölcsönhatásra épülő, entrópia alapú, dinamikus kiterjesztett aktív tér (CI-DEAS) módszerünket, ami biztosítja, és nagyban megnöveli a DMRG algoritmus konvergenciáját. Többféle, összefonódottságon alapuló rendezési algoritmust vizsgáltunk, illetve a gráfelméletből jól ismert spektrális analízis összefüggéseit is bemutattuk a kölcsönös információ optimalizálása során. Részletesen vizsgáltuk a molekulapályák korrelációját az összefonódottság alapján. Mindezt felhasználva meghatároztuk a $[\text{Cu}_2\text{O}_2]^{2+}$ két izomerjének energiakülönbségét, ami a kémiai hibahatáron belüli jó egyezést mutat a kísérleti eredményekkel.

1. Ö. Legeza, R. M. Noack, J. Sólyom, and L. Tincani: *Applications of Quantum Information in the Density-Matrix Renormalization Group*, Lecture Notes in Physics **739**, 653-664, Springer Verlag Berlin Heidelberg (Chapter 24), 2008.
2. Ö. Legeza, T. Rohwedder, R. Schneider: *Numerical approaches for high-dimensional PDE's for quantum chemistry*, Encyclopedia of Applied and Computational Mathematics, Editor B. Engquist, Springer, Berlin, 2012.
3. Ö. Legeza: *Application of quantum information theory to strongly correlated systems and the ERA concept*, MTA doktora címre beadott értekezés, 2009.
4. V. Murg, F. Verstraete, Ö. Legeza, R. M. Noack: *Simulating strongly correlated quantum systems with tree tensor networks*, Phys. Rev. B **82**, 205105/1-11, 2010.
5. A. I. Tóth, C. P. Moca, Ö. Legeza and G. Zaránd: *Density matrix numerical renormalization group for non-Abelian symmetries*, Phys. Rev. B **78**, 245109/1-11, 2008.
6. Ö. Legeza, C. P. Moca, A. I. Tóth, I. Weymann, G. Zaránd: *Manual for the flexible DM-NRG code*, arXiv:0809.3143, <http://www.phy.bme.hu/~dmnrg>, 2008.
7. E. H. Kim, Ö. Legeza and J. Sólyom: *Topological order, dimerization and spinon deconfinement in frustrated spin ladder models*, Phys. Rev. B **77**, 205121/1-16, 2008.
8. G. Barcza, Ö. Legeza, R. M. Noack, J. Sólyom: *On the dimerized phase in the cross-coupled antiferromagnetic spin ladder*, arXiv:1104.3990, 2011.
9. E. Szirmai, Ö. Legeza, and J. Sólyom: *Spatially nonuniform phases in the one-dimensional SU(n) Hubbard model for commensurate fillings*, Phys. Rev. B **77**, 045106/1-10, 2008.
10. E. Szirmai, Ö. Legeza, and J. Sólyom: *The role of the exchange interaction in the one-dimensional n-component Hubbard model*, Acta Physica Polonica A **115**, 98-100, 2009.
11. X. Huang, E. Szirmai, F. Gebhard, J. Sólyom, and R. M. Noack: *Phase diagram of the t-U-J₁-J₂ chain at half filling*, Phys. Rev. B **78**, 085128/1-10, 2008.
12. C. Mund, Ö. Legeza, and R. M. Noack: *Quantum information analysis of the phase diagram of the half-filled extended Hubbard model*, Phys. Rev. B **79**, 245130/1-7, 2009.
13. E. Szirmai, M. Lewenstein: *Exotic magnetic orders for high-spin ultracold fermions*, Europhysics Letters **93**, 66005, 2011.
14. G. Barcza, E. Szirmai, Ö. Legeza, J. Sólyom: *Emergence of quintet superfluidity in the chain of partially polarized spin-3/2 ultracold atoms*, arXiv:1201.3837, 2012.
15. E. Szirmai and J. Sólyom: *Momentum-dependent superconducting order in a one-dimensional fermion system*, Journal of Physics: Conference Series **200**, 012195, 2010.

16. G. Szirmai, E. Szirmai, A. Zamora, M. Lewenstein: *Gauge fields emerging from time-reversal symmetry breaking for spin-5/2 fermions in a honeycomb lattice*, Phys. Rev. A **84**, 011611(R)/1-4, 2011.
17. I. Hagymási, K. Itai, J. Sólyom: *Periodic Anderson model with d-f interaction*, Acta Physica Polonica A **121**, 1070-1072, 2012.
18. I. Hagymási, K. Itai, J. Sólyom: *Periodic Anderson model with correlated conduction electrons: variational and exact diagonalization study*, Phys. Rev. B **85**, 235116/1-13, 2012.
19. I. Hagymási, K. Itai, J. Sólyom: *Hubbard physics in the symmetric half-filled periodic Anderson-Hubbard model*, arXiv:1207.0381, 2012.
20. F. Woynarovich: *On the normalization of the partition function of Bethe Ansatz systems*, Nuclear Physics B **852**, 269-286, 2011.
21. G. Barcza, Ö. Legeza, F. Gebhard, and R. M. Noack: *Density matrix renormalization group study of excitons in polydiacetylene chains*, Phys. Rev. B **81**, 045103/1-7, 2010.
22. G. Barcza, Ö. Legeza, K. H. Marti, M. Reiher: *Quantum-information analysis of electronic states of different molecular structures*, Phys. Rev. A **83**, 012508/1-15, 2011.