

Kvantum spinláncok nemegyensúlyi dinamikája

TDK DOLGOZAT

Krasznai Anna

Természettudományi Kar
BME Fizika MSc, I. évfolyam

Témavezető:

Dr. Takács Gábor

Egyetemi tanár
BME Fizika Intézet
Elméleti Fizika Tanszék



Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem

2021

Köszönetnyilvánítás

Szeretnék köszönetet mondani témavezetőmnek, Dr. Takács Gábornak, aki szakértelmével, motiváló lelkesedésével és folyamatos támogatásával fáradhatatlanul segítette a dolgozat létrejöttét. Hálával tartozom továbbá szüleimnek és testvéremnek, páromnak és barátaimnak, akik munkám során végig támogattak és mellettem álltak.

Az Innovációs és Technológiai Minisztérium ÚNKP-21-2 kódszámú Új Nemzetiségi Kiválóság Programjának a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Alapból finanszírozott szakmai támogatásával készült.



Kivonat

A kvantum spinláncok legegyszerűbb modellje, amiben kvantumos fázisátalakulás megfigyelhető, az ún. transzverz térbeli Ising modell. A szakirodalomban ismert, hogy a ferromágneses fázisban gerjesztés hatására domének jönnek létre, a domének közötti falakra pedig, mint kvázirészecskékre tekinthetünk. Egy kvantum kvencs (a Hamilton-operátor paramétereinek hirtelen változása) hatására létrejövő időfejlődés során ezek a gerjesztések terjesztik a korrelációkat és összefonódást a rendszerben, így alakul ki az egyensúlyi állapot. Jelen dolgozatomban elsősorban a transzverz térbeli Ising modell analitikus megoldását, határesetek perturbatív vizsgálatát és a rendszerben terjedő lokális kvantum kvencsek numerikus szimulációját szeretném tárgyalni. Az utóbbi esetén – témavezetőm csoportjának korábbi munkája nyomán - szeretném megvizsgálni a dinamikát abban az esetben, ha bekapcsolunk egy további longitudinális mágneses teret is, ami megsérti a modell integrálhatóságát és bezáró dinamikához vezet.

Tartalomjegyzék

1. Bevezetés	2
2. Kvantum spinláncok és fázisaik	3
2.1. Fázisátalakulások	3
2.2. Transzverz térbeli Ising modell	3
3. A TIFM határesetei és ezek perturbatív vizsgálata	5
3.1. Paramágneses fázis	5
3.2. Ferromágneses fázis	9
3.3. Kramers-Vannier dualitás	12
4. Az egydimenziós TFIM analitikus megoldása	14
4.1. Jordan-Wigner transzformáció	14
4.2. Az egydimenziós TFIM analitikus megoldása	15
4.3. Az egyrészcseke spektrum vizsgálata	17
4.4. Majorana operátorok	19
4.5. Véges spinlánc vizsgálata	20
4.6. Páros fermionszám	21
4.7. Páratlan fermionszám	21
4.8. Paramágneses fázis	22
4.9. Ferromágneses mágneses fázis	23
5. A TIFM numerikus vizsgálata	24
5.1. A kód ellenőrzése	24
5.2. Kvantum kvencsek a TIFM különböző változataiban	25
5.2.1. Kvantum kvencs a TFIM-ben	25
5.2.2. Kvantum kvencs a TFIM longitudinális taggal kiegészített változatában	29
6. Kitekintés és további tervek	36
7. Összefoglalás	37
Irodalomjegyzék	39

1. Bevezetés

Az erősen korrelált kvantumrendszerek kutatása az utóbbi időben a tudományos világ érdeklődésének előterébe került. Ennek oka nemcsak az elméleti kihívásban rejlik, hanem az egyre jelentősebb gyakorlati alkalmazásokban is. Az ilyen rendszerek ugyanis makroszkopikusan is kvantumviselkedést mutathatnak, és olyan egzotikus jelenségeket figyelhetünk meg bennük, mint például a kvantum fázisátalakulás. Ezen jelenségek kihasználása ígéretes lehetőséget nyújt új kvantumtechnológiai eszközök kifejlesztésére és alkalmazására.

A kvantum spinláncok az erősen korrelált kvantumrendszerek egy fontos osztályát alkotják. Vizsgálatuk egyrészt azért fontos, mert hatékony elméleti eszközökkel modellezhetők, több esetben analitikus módszerekkel is megoldhatóak, ugyanakkor valódi anyagi rendszereket is modelleznek: megvalósíthatók, mint effektíve egydimenziós mágneses anyagok (pl. CoNb_2O_6) [1–3], vagy csapdázott ultrahideg atomok segítségével [4–6].

A kvantum spinláncok legegyszerűbb modellje az ún. transzverz térbeli Ising modell, amiben kvantum fázisátalakulás figyelhető meg [7]. Dolgozatomban elsősorban ezen modell egydimenziós változatának vizsgálatát szeretném tárgyalni, mind analitikus, mind numerikus módszerekkel.

2. Kvantum spinláncok és fázisaik

2.1. Fázisátalakulások

Klasszikus fázisátalakulásnak azt a jelenséget nevezzük, amikor egy anyag bizonyos fizikai jellemzői véges T hőmérsékleten, valamilyen paraméter függvényében (ami bizonyos esetekben maga a hőmérséklet) ugrásszerűen megváltoznak. Ezzel szemben kvantum fázisátalakulás történhet $T = 0$ K hőmérsékleten is, jelen dolgozatomban elsősorban ilyen jellegű fázisátalakulásokat vizsgálók. Tekintsünk egy rendszert, melyet leíró Hamilton-operátor $H(g)$ valamilyen dimenziótlan g csatolási állandó függvénye [7]. Véges rendszerméret esetén az alapállapot energiája általában analitikus függvénye g -nek, kivéve abban az esetben, ha g valamilyen megmaradó mennyiséghez csatolódik, vagyis $H(g) = H_0 + gH_1$, ahol H_0 és H_1 kommutálnak. Ez azt jelenti, hogy H_0 -nak és H_1 -nek létezik közös sajátfüggvény rendszere, így annak ellenére, hogy a sajátértékek függenek g értékétől, a sajátfüggvények nem. Ekkor valamilyen kritikus g_c értéken bekövetkezhet az, hogy az első gerjesztett állapot energiája átfed az alapállapotéval és ez a két energiaszint felcserélődését eredményezi ("level-crossing"), tehát lesz egy olyan g_c érték, ahol $H(g)$ alapállapota nem analitikus viselkedést mutat g függvényében. Végtelen rendszer méret esetén viszont mást is megfigyelhetünk: lehet(nek) olyan pont(ok), amiknek megfelelő g_c értékeknél véges rendszerméret mellett nem látunk nem-analitikus viselkedést, végtelen határesetben viszont degenerálttá válik az alapállapot. Azokat a pontokat, amikben végtelen rendszerméret mellett az alapállapot g függvényében nem-analitikus viselkedésűvé válik, abban az esetben is, ha véges rendszerben nem ezt tapasztaljuk, kvantum fázisátalakulás helyeként azonosíthatjuk. Általában a szakirodalomban egyébként csupán az utóbbi, csak végtelen rendszerméret esetén bekövetkező alapállapoti nem analitikus viselkedéseket azonosítjuk kvantum fázisátalakulásként, dolgozatomban én is elsősorban ezzel foglalkozom. Megjegyzendő, hogy ezek létrejöttéhez nem kell, hogy H_0 és H_1 kommutáljon.

Fontos megjegyezni továbbá, hogy az ebben az értelemben vett fázisátalakulások valamilyen sokaság kollektív viselkedésének eredményeképp jönnek létre. Precízen tehát csak végtelen rendszerméret határeset mellett beszélhetünk a fenti definíció szerinti fázisátalakulásról, bár nyilván szimulációk során csak véges rendszereket tudunk létrehozni, így ezek esetén csak bizonyos közelítéssel tudunk ilyen jelenségeket vizsgálni.

Megjegyzendő továbbá, hogy a klasszikus fázisátalakulások a hőmérsékleti fluktuációk eredményeként jönnek létre, egy klasszikus rendszer pedig $T = 0$ -n jellemzően be van fagyva egy fluktuációmentes állapotba. Ezzel szemben a kvantumrendszerekben a Heisenberg-féle határozatlansági elv miatt is keletkeznek fluktuációk alapállapotban is, vagyis $T = 0$ -án ezek a fluktuációk eredményezik a kvantum fázisátalakulásokat.

A fázisátalakulásokat mind klasszikus, mind kvantumos esetben többféleképpen csoportosíthatjuk. Az egyik legalapvetőbb osztályozásuk, ha első- és másodrendű fázisátalakulásokra csoportosítjuk őket a szabadentalpia szerint. Elsőrendű fázisátalakulás során (pl. ferromágneses állapotban a spontán mágnesezettség kialakulása miatt létrejövő két "mágnesezettségi ág" közötti átmenet) a szabadentalpia első deriváltja nem folytonos, míg másodrendű fázisátalakulás esetén (pl. para-ferromágneses átmenet) csak a szabadentalpia második deriváltjának van ugrása. Fontos különbség a két csoport között, hogy másodrendű fázisátalakulás esetén a korrelációs hossz végtelenné válik, míg elsőrendű esetben véges marad.

2.2. Transzverz térbeli Ising modell

A transzverz térbeli Ising modell olyan transzverz külső térbe helyezett spinek viselkedését írja le, amik között első szomszéd kölcsönhatásokat veszünk csak figyelembe. A rendszert definiáló Hamilton-operátor, periodikus határfeltétel mellett, ekkor az alábbi alakban írható:

$$H = -Jh \sum_i \hat{\sigma}_i^x - J \sum_{\langle ij \rangle} \hat{\sigma}_i^z \hat{\sigma}_j^z,$$

ahol J valamilyen pozitív, a Hamilton-operátor dimenzióját megadó konstans, h a korábban g -vel jelzett, dimenziótlan csatolási állandó, $\langle ij \rangle$ az első szomszédokat jelöli, $\hat{\sigma}_i^z$ és $\hat{\sigma}_i^x$ pedig a megfelelő Pauli-mátrixok:

$$\hat{\sigma}^z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad ; \quad \hat{\sigma}^x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} .$$

A Hamilton-operátor első tagja a transzverz tér hatásának, míg második tagja a spinek közötti első szomszéd kölcsönhatásnak felel meg.

A továbbiakban szorítkozunk a modell egydimenziós esetére, vagyis amikor a spinek egy lánc mentén helyezkednek el. Ekkor a Hamilton-operátort a következő alakba írhatjuk

$$H = -Jh \sum_i \hat{\sigma}_i^x - J \sum_i \hat{\sigma}_i^z \hat{\sigma}_{i+1}^z , \quad (1)$$

aminek tulajdonképpen csupán annyi szerepe van, hogy jobban kiemeli a tényt, hogy csak első-szomszéd kölcsönhatásokat veszünk figyelembe. Ha az első tagban szereplő szummában $\hat{\sigma}_i^x$ helyett $\hat{\sigma}_i^z$ -t írnák, akkor felismerhetnénk a klasszikusan is kezelhető Ising modellt (ekkor $\hat{\sigma}_i^z$ tulajdonképpen csak egy klasszikus változó, aminek értékkészlete $\{1, -1\}$). Azt a tényt, hogy a transzverz térbeli Ising modell kvantum viselkedést mutat, maga a transzverz tér megjelenése okozza. Megjegyzendő azonban, hogy a klasszikus, 1 dimenziós Ising modellben véges hőmérsékleten sem tapasztalunk fázisátalakulást.

A dolgozat további részeiben a transzverz térbeli Ising modell (a továbbiakban TFIM) egydimenziós esetét fogjuk vizsgálni, mindig $T = 0$ K hőmérsékletet feltételezve.

Az (1) kifejezésben látható, hogy a Hamilton operátor tagjai nem kommutálnak egymással, ami - a fentiek alapján - azt jelenti, hogy csak termodinamikai határesetben, vagyis végtelen rendszerméret esetén történhet fázisátalakulás a modellben.

Vegyük a következő unitér operátort

$$\hat{P} = \prod_j \hat{\sigma}_j^x , \quad (2)$$

aminek hatására minden spin az eredeti állapotával "ellenkező irányba fordul át", vagyis a $|\uparrow\rangle$ állapotú spineket a $|\downarrow\rangle$ állapotba forgatja és fordítva. Mivel

$$\hat{\sigma}_i^x \rightarrow \hat{P}^+ \hat{\sigma}_i^x \hat{P} = \sigma_i^x \quad , \quad \hat{\sigma}_i^z \rightarrow \hat{P}^+ \hat{\sigma}_i^z \hat{P} = -\hat{\sigma}_i^z ,$$

így $\hat{P}$ kommutál az (1) Hamilton-operátorral, vagyis az (1) Hamilton-operátor rendelkezik Z_2 szimmetriával. Megjegyzendő, hogy a Pauli-mátrixok fent megjelenített bázis-választása mellett szokásosan:

$$|\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{és} \quad |\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} .$$

Nyilvánvalóan $T = 0$ -n nincsenek hőmérsékleti fluktuációk a rendszerben, viszont kvantum fluktuációk megjelennek a $-Jh \sum_i \hat{\sigma}_i^x$ tagnak köszönhetően, hiszen utóbbi megfordítja ("flippeli") a spineket, aminek köszönhetően ellene dolgozik a rendeződésnek.

3. A TIFM határesei és ezek perturbatív vizsgálata

A következőkben áttekintjük a TIFM határeseit és ezek perturbatív vizsgálatát véges, de elegendően hosszú láncon. A perturbációs számítás alapvetően a témavezető útmutatásával végzett önálló számolás.

Tekintsük a rendszert leíró Hamilton-operátort, az egyszerűség kedvéért $J = 1$ választással:

$$H = - \sum_{i=0}^{L-1} (\hat{\sigma}_i^z \hat{\sigma}_{i+1}^z + h \hat{\sigma}_i^x) = - \sum_{i=0}^{L-1} (Z_i Z_{i+1} + h X_i), \quad (3)$$

ahol az egyszerűbb írásmód kedvéért bevezetett jelölés szerint értelemsszerűen $Z_i = \hat{\sigma}_i^z$ és $X_i = \hat{\sigma}_i^x$. Válasszunk a továbbiakban is periodikus határfeltételt: $i = i + L$, vagyis

$$Z_i = Z_{i+L} \quad \text{és} \quad X_i = X_{i+L}.$$

3.1. Paramágneses fázis

A paramágneses fázisú határesetben $h \rightarrow \infty$, így a (3) Hamilton-operátort érdemes a következőképp átskalázni: $H = h \tilde{H}$, ahol

$$\tilde{H} = - \sum_{i=0}^{L-1} \left(\frac{1}{h} Z_i Z_{i+1} + X_i \right). \quad (4)$$

Ha $h \rightarrow \infty$, akkor nyilvánvaló, hogy a fenti, átskalázott Hamilton-operátor első tagja elhanyagolható a második mellett, vagyis ebben a határesetben a (nem degenerált) alapállapot egyszerűen

$$|0\rangle = |\rightarrow \cdots \rightarrow\rangle,$$

ahol

$$|\rightarrow\rangle_i = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle_i + |\downarrow\rangle_i), \quad X_i |\rightarrow\rangle_i = +1 \cdot |\rightarrow\rangle_i,$$

vagyis az alapállapot energiája $\tilde{H}$ egységeiben mérve, $J = 1$ választással $-L$. A gerjesztett állapotoknak megfelelő sajátállapotokat a spinek átforgatásával kapjuk:

$$| \{r_1, r_2, \dots\} \rangle = |\rightarrow \cdots \rightarrow \leftarrow_{r_1} \rightarrow \cdots \rightarrow \leftarrow_{r_2} \rightarrow \cdots \rangle$$

Ezekre az állapotokra, mint egyrészcsekés, kétrészcsekés ...stb. állapotokra tekinthetünk, annak függvényében, hogy hány spint fordítottunk át. Az adott részcsekesszámú állapotok nyilvánvalóan degeneráltak $h \rightarrow \infty$ esetben. Az ilyen jellegű kvázirészcsekéket magnonoknak nevezzük.

Ha h nagy, de már nem a végtelen határesetben vagyunk, a fenti az állapotok nem lesznek többé sajátállapotok, hiszen megjelenik a (4) Hamilton-operátorban az első tag is. Utóbbit viszont figyelembe vehetjük a perturbáció számítás segítségével, amennyiben $h \gg 1$. A $-\frac{1}{h} \sum_i Z_i Z_{i+1}$ perturbáló operátor két szomszédos spin irányát fordítja meg, így alapállapotban a perturbáló operátor várható értéke zérus:

$$-\frac{1}{h} \langle 0 | \sum_i Z_i Z_{i+1} | 0 \rangle = -\frac{1}{h} \sum_i \langle 0 | Z_i Z_{i+1} | 0 \rangle = 0,$$

tehát az alapállapot energiája $1/h$ vezető rendjében nem változik.

Tekintsük most az $|\{r\}\rangle$ egyrészcseke állapotokat. Ezek az állapotok L -szeresen degeneráltak, energiájuk $\tilde{H}$ egységeiben mérve 2 egységnyivel nagyobb az alapállapot energiaszintjénél, hiszen $\hat{\sigma}^x$ sajátértékei között 2 a különbség. Ahhoz hogy meghatározzuk az egyrészcseke állapotok energiájának a perturbáló operátor hatására történő felhasadását, diagonalizálnunk kell a perturbáló operátort a megfelelő degenerált altéren. A perturbáló operátor hatása az egyrészcsekés állapotokra a következőképp írható:

$$\sum_i Z_i Z_{i+1} |\{r\}\rangle = |\{r+1\}\rangle + |\{r-1\}\rangle + \text{3-részcsekés állapotok}.$$

Ekkor a perturbáló operátor mátrixa:

$$-\frac{1}{h}\langle\{r'\}|\sum_i Z_i Z_{i+1}|\{r\}\rangle = -\frac{1}{h}(\delta_{r',r-1} + \delta_{r',r+1}).$$

A jobb oldalon lévő zárójelben megjelenő mátrix első tagja annak a műveletnek felel meg, mintha egy diszkrét (spinek közötti, 1-nek választott) távolsággal eltoltuk (periodikus határfeltétel miatt elforgattuk) volna a láncot balra, míg a második tag annak, mintha egy diszkrét távolsággal eltoltuk (elforgattuk) volna jobbra. Az ezekhez a műveletekhez tartozó operátorok kommutálnak, így létezik közös sajátfüggvény rendszerük, közös sajátfüggvényeik az alábbi alakban írhatóak fel:

$$|k\rangle = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{r=0}^{L-1} e^{ikr} |r\rangle,$$

amik tulajdonképpen síkhullámok

$$k = n \frac{2\pi}{L}$$

hullámszámmal, ahol $n = 0, 1 \dots (L-1)$ egész szám. Áttérve tehát a fenti bázisba (hullámszámtérbe) már könnyen kiszámolhatjuk a perturbáló operátor várható értékét egyrészecske állapotban:

$$-\frac{1}{h}\langle k|\sum_i Z_i Z_{i+1}|k\rangle = -\frac{1}{h}(e^{ik} + e^{-ik}) = -\frac{1}{h}2\cos k.$$

Így tehát egy k hullámszámnak megfelelő impulzussal rendelkező egyrészecske állapot energiája az alapállapothoz viszonyítva $\tilde{H}$ egységeiben:

$$E_1(k) - E_0 = 2 - \frac{1}{h}2\cos k + O(h^{-2}),$$

míg H egységeiben:

$$\epsilon(k) = h(E_1(k) - E_0) = 2(h - \cos k) + O(h^{-1}). \quad (5)$$

Tekintsük most a kétrészecske állapotokat. Ezeket az állapotokat a vákuumállapotból kiindulva úgy hozhatjuk létre, ha átfordítunk két spint, két különböző helyen:

$$|\{r_1, r_2\}\rangle = Z_{r_1} Z_{r_2} |0\rangle,$$

Ezen állapotok teljes halmaza indexelhető rendezett $r_1 < r_2$ párokkal. Továbbá konvenció szerint

$$|\{r, r\}\rangle = Z_r Z_r |0\rangle = |0\rangle.$$

A $h \rightarrow \infty$ határesetben a kétrészecskes állapotok szintén degeneráltak, az alapállapothoz képest 4 egységnyi energiával $\tilde{H}$ egységeiben mérve. Ahhoz hogy kiszámoljuk a perturbáló operátor várható értékét kétrészecskes állapotban, ismét választanunk kell egy olyan bázist, ahol a perturbáló operátor diagonális. Ezt az előzőekhez hasonlóan síkhullám állapotok választásával tehetjük meg, hullámszámtérbe áttérve ezáltal:

$$|k_1, k_2\rangle = \mathcal{N}(k_1, k_2) \sum_{r_1 < r_2} \left(e^{ik_1 r_1} e^{ik_2 r_2} + S(k_1, k_2) e^{ik_1 r_2} e^{ik_2 r_1} \right) |\{r_1, r_2\}\rangle.$$

A fenti egyenletben megjelenő két tag oka a részecskék megkülönböztethetlensége, vagyis hogy nem tudjuk megmondani melyik rendelkezik k_1 hullámszámnak megfelelő impulzussal és melyik k_2 -nek megfelelővel. Figyelni kell továbbá arra is, hogy a két tag között lehet egy általános fáziskülönbség, amit a fenti összefüggésben $S(k_1, k_2)$ reprezentál. A kifejezés elején megjelenő $\mathcal{N}(k_1, k_2)$ faktor a

normálási tényező. Következő lépésként számoljuk ki a perturbáló operátor egy tagjának hatását az eredeti bázisban:

$$Z_i Z_{i+1} |\{r_1, r_2\}\rangle = \delta_{i,r_1-1} |\{r_1 - 1, r_2\}\rangle + \delta_{i,r_1} |\{r_1 + 1, r_2\}\rangle + \delta_{i,r_2-1} |\{r_1, r_2 - 1\}\rangle + \delta_{i,r_2} |\{r_1, r_2 + 1\}\rangle + \text{kettőnél több vagy kevesebb részecskés állapotok} .$$

Ezt felhasználva a perturbáló operátor egy tagjának hatása hullámszámtérben:

$$Z_i Z_{i+1} |k_1, k_2\rangle = \mathcal{N}(k_1, k_2) \sum_{r_1 < r_2} \left(e^{ik_1 r_1} e^{ik_2 r_2} + S(k_1, k_2) e^{ik_1 r_2} e^{ik_2 r_1} \right) (\delta_{i,r_1-1} |\{r_1 - 1, r_2\}\rangle + \delta_{i,r_1} |\{r_1 + 1, r_2\}\rangle + \delta_{i,r_2-1} |\{r_1, r_2 - 1\}\rangle + \delta_{i,r_2} |\{r_1, r_2 + 1\}\rangle) + \text{kettőnél több vagy kevesebb részecskés állapotok}.$$

A perturbáló operátor tagjainak hatását összeadva lesz tehát négy szummánk, amiket megfelelően átindexelhetünk. Például a szummát, ami az $|\{r_1 - 1, r_2\}\rangle$ tagot tartalmazza, átindexelhetjük a következőképp: $s_1 = r_1 - 1$, így az alábbi kifejezést kapjuk

$$\begin{aligned} \mathcal{N}(k_1, k_2) \sum_{s_1+1 < r_2} \left(e^{ik_1(s_1+1)} e^{ik_2 r_2} + S(k_1, k_2) e^{ik_1 r_2} e^{ik_2(s_1+1)} \right) |\{s_1, r_2\}\rangle = \\ \mathcal{N}(k_1, k_2) \sum_{s_1 < r_2-1} \left(e^{ik_1} e^{ik_1 s_1} e^{ik_2 r_2} + S(k_1, k_2) e^{ik_2} e^{ik_1 r_2} e^{ik_2 s_1} \right) |\{s_1, r_2\}\rangle . \end{aligned}$$

Vegyük észre, hogy ez az összefüggés a fázisfaktoroktól eltekintve majdnem úgy néz ki, mint $|k_1, k_2\rangle$ kifejezése, azt leszámítva, hogy az $s_1 = r_2 - 1$ tag hiányzik. Hasonlóan a többi szummát is átindexelve a következő kifejezést kapjuk a teljes perturbáló operátor hatására:

$$\begin{aligned} \sum_i Z_i Z_{i+1} |k_1, k_2\rangle = \mathcal{N}(k_1, k_2) \sum_{s_1 < r_2-1} \left(e^{ik_1} e^{ik_1 s_1} e^{ik_2 r_2} + S(k_1, k_2) e^{ik_2} e^{ik_1 r_2} e^{ik_2 s_1} \right) |\{s_1, r_2\}\rangle \\ + \mathcal{N}(k_1, k_2) \sum_{s_1 < r_2+1} \left(e^{-ik_1} e^{ik_1 s_1} e^{ik_2 r_2} + S(k_1, k_2) e^{-ik_2} e^{ik_1 r_2} e^{ik_2 s_1} \right) |\{s_1, r_2\}\rangle \\ + \mathcal{N}(k_1, k_2) \sum_{r_1 < s_2+1} \left(e^{ik_2} e^{ik_1 r_1} e^{ik_2 s_2} + S(k_1, k_2) e^{ik_1} e^{ik_1 s_2} e^{ik_2 r_1} \right) |\{r_1, s_2\}\rangle \\ + \mathcal{N}(k_1, k_2) \sum_{r_1 < s_2-1} \left(e^{-ik_2} e^{ik_1 r_1} e^{ik_2 s_2} + S(k_1, k_2) e^{-ik_1} e^{ik_1 s_2} e^{ik_2 r_1} \right) |\{r_1, s_2\}\rangle \\ + \text{kettőnél több vagy kevesebb részecskés állapotok} . \end{aligned}$$

Ha a fenti kifejezésben megvizsgáljuk a tagokat észrevehetjük, hogy - ahogy azt az első tag esetén már megjegyeztük - mindegyik szumma a fázisfaktorokat leszámítva csupán egyetlen tagban tér el a $|k_1, k_2\rangle$ állapot kifejezésétől: az első szummából hiányzik az $s_1 = r_2 - 1$ - ahogy ezt már korábban is említettük - , a második és a harmadik szummában pluszban szerepel az $s_1 = r_2$ tag, az utolsó szummából pedig hiányzik az $r_1 = s_2 - 1$ tag. A plusz tagok csupán alapállapotú járulékok, számunkra nem érdekesek, hiszen később úgyis kiesnek az ortogonalitás miatt, akárcsak a többi kettőtől eltérő részecskeszámú állapotok járulécai. Ha a "hiányzó" tagokat kivonjuk és hozzáadjuk a kifejezés jobb oldalához a következőt kapjuk:

$$\begin{aligned}
 \sum_i Z_i Z_{i+1} |k_1, k_2\rangle &= \mathcal{N}(k_1, k_2) \sum_{s_1 < r_2} \left(e^{ik_1} e^{ik_1 s_1} e^{ik_2 r_2} + S(k_1, k_2) e^{ik_2} e^{ik_1 r_2} e^{ik_2 s_1} \right) |\{s_1, r_2\}\rangle \\
 &+ \mathcal{N}(k_1, k_2) \sum_{s_1 < r_2} \left(e^{-ik_1} e^{ik_1 s_1} e^{ik_2 r_2} + S(k_1, k_2) e^{-ik_2} e^{ik_1 r_2} e^{ik_2 s_1} \right) |\{s_1, r_2\}\rangle \\
 &+ \mathcal{N}(k_1, k_2) \sum_{r_1 < s_2} \left(e^{ik_2} e^{ik_1 r_1} e^{ik_2 s_2} + S(k_1, k_2) e^{ik_1} e^{ik_1 s_2} e^{ik_2 r_1} \right) |\{r_1, s_2\}\rangle \\
 &+ \mathcal{N}(k_1, k_2) \sum_{r_1 < s_2} \left(e^{-ik_2} e^{ik_1 r_1} e^{ik_2 s_2} + S(k_1, k_2) e^{-ik_1} e^{ik_1 s_2} e^{ik_2 r_1} \right) |\{r_1, s_2\}\rangle \\
 &- \mathcal{N}(k_1, k_2) \sum_{s_1 = r_2 - 1} \left(e^{ik_1} e^{ik_1 s_1} e^{ik_2 r_2} + S(k_1, k_2) e^{ik_2} e^{ik_1 r_2} e^{ik_2 s_1} \right) |\{s_1, r_2\}\rangle \\
 &- \mathcal{N}(k_1, k_2) \sum_{r_1 = s_2 - 1} \left(e^{-ik_2} e^{ik_1 r_1} e^{ik_2 s_2} + S(k_1, k_2) e^{-ik_1} e^{ik_1 s_2} e^{ik_2 r_1} \right) |\{r_1, s_2\}\rangle \\
 &+ \text{kettőnél több vagy kevesebb részecskés állapotok.}
 \end{aligned}$$

A fenti kifejezést tovább alakítva

$$\begin{aligned}
 \sum_i Z_i Z_{i+1} |k_1, k_2\rangle &= 2(\cos k_1 + \cos k_2) |k_1, k_2\rangle \\
 &- \mathcal{N}(k_1, k_2) \sum_{s_1} \left(e^{i(k_1+k_2)} e^{ik_1 s_1} e^{ik_2 s_1} + S(k_1, k_2) e^{i(k_1+k_2)} e^{ik_1 s_1} e^{ik_2 s_1} \right) |\{s_1, s_1 + 1\}\rangle \\
 &- \mathcal{N}(k_1, k_2) \sum_{r_1} \left(e^{ik_1 r_1} e^{ik_2 r_1} + S(k_1, k_2) e^{ik_1 r_1} e^{ik_2 r_1} \right) |\{r_1, r_1 + 1\}\rangle \\
 &+ \text{kettőnél több vagy kevesebb részecskés állapotok.}
 \end{aligned}$$

adódik. Látható, hogy ahhoz, hogy a degenerált altér $|k_1, k_2\rangle$ állapotai a perturbáló operátor sajátvektoraik legyenek, vagyis hogy $|k_1, k_2\rangle$ bázisban diagonális legyen $\sum_i Z_i Z_{i+1}$, $S(k_1, k_2) = -1$ szükséges, vagyis a gerjesztések során létrejövő kvázirészecskék fermionok, hiszen hullámfüggvényük

$$|k_1, k_2\rangle = \mathcal{N}(k_1, k_2) \sum_{r_1 < r_2} \left(e^{ik_1 r_1} e^{ik_2 r_2} - e^{ik_1 r_2} e^{ik_2 r_1} \right) |\{r_1, r_2\}\rangle$$

teljesíti a

$$|k_1, k_2\rangle = -|k_2, k_1\rangle$$

összefüggést. Később ezt az analitikus megoldás kereteiben is tárgyalni fogjuk. A fentiek alapján tehát ha kiszámoljuk a perturbáló operátor várható értékét kétrészecske állapotban, $|k_1, k_2\rangle$ bázisban és kihasználjuk, hogy a kettőtől eltérő kvázirészecske számmal rendelkező állapotok ortogonálisak bármilyen kétrészecske állapotra, így ezek járuléka zérus, akkor a kétrészecske állapotok alapállapot energiához viszonyított spektrumára a következő adódik $\tilde{H}$ egységeiben:

$$E_2(k_1, k_2) - E_0 = 2 - \frac{1}{h} 2(\cos k_1 + \cos k_2) + O(h^{-2}).$$

Visszatérve H egységeibe, a gerjesztési energiaspektrumra a következőt kapjuk:

$$\epsilon(k_1, k_2) = 2h - 2(\cos k_1 + \cos k_2) + O(h^{-1}) = \epsilon(k_1) + \epsilon(k_2). \quad (6)$$

Mint látható, a spektrumban semmilyen kölcsönhatási tag nem jelenik meg, a gerjesztési energia csupán tisztán két egyrészecske energia összege, ami azt jelenti, hogy a gerjesztésekre úgy tekinthetünk, mint nemkölcsönható fermionikus kvázirészecskékre.

A magasabb részecskeszámmal rendelkező állapotok spektrumának perturbatív számolása teljesen hasonlóan történik és az eredmény teljesen analóg a (6) kétrészecskés gerjesztési spektrummal: mindig annyi független egyrészecske energiatag összege a végeredmény, ahány részecskés állapotot vizsgálunk aktuálisan.

3.2. Ferromágneses fázis

A ferromágneses határesetben $h \rightarrow 0$. Ha tekintjük a (3) kifejezésben szereplő Hamilton-operátort, akkor látható, hogy $h \rightarrow 0$ határesetben a transzverzális térrel kapcsolatos tag elhanyagolható a kölcsönhatási tag mellett. Ennek megfelelően a rendszer alapállapota kétszeresen degenerált lesz $-JL$ ($-L$ ha $J = 1$) energiával, a két alapállapotot pedig a következőképp jelölhetjük:

$$\begin{aligned} |+\rangle &= |\uparrow \dots \uparrow\rangle \\ |-\rangle &= |\downarrow \dots \downarrow\rangle \end{aligned}$$

Ebben az esetben a domének közötti falakra tekinthetünk úgy, mint kvázirészecskékre, amiket kinkeknek nevezünk. Periodikus határfeltétel és ilyen jellegű kvázirészecske értelmezés mellett viszont csak páros számú kvázirészecske lehet a rendszerben (aperiodikus határfeltétel esetén pedig csak páratlan számú). Ennek megfelelően a legalacsonyabb energiájú gerjesztett állapotok a degenerált kétrészecske állapotok vagy 2-kink állapotok, amikor két doménfal jelenik meg a rendszerben:

$$|\{x_1, x_2\}\rangle = |\underbrace{\uparrow \dots \uparrow}_i \underbrace{\downarrow \dots \downarrow}_j \underbrace{\uparrow \dots \uparrow}_{L-i-j}\rangle.$$

Konvenció kérdése, hogy egy véges lánc esetén mit írunk x_1 és x_2 helyére, amik megadják a doménfalak pozícióit. Itt most azt a konvenciót használjuk, hogy a doménfalak a két rácspont között félúton helyezkednek el, vagyis a fenti kétrészecske állapot esetén

$$x_1 = i - \frac{1}{2}, \quad x_2 = i + j - \frac{1}{2}.$$

Minden ilyen kétrészecske állapot energiája az alapállapothoz képest ($2 \cdot 2J =$) 4, H egységeiben mérve. Továbbá konvenció szerint:

$$|\{x, x\}\rangle = |+\rangle.$$

A paramágneses fázis kétrészecske állapotainak vizsgálatához hasonlóan áttérve hullámszámtérbe (impulzustérbe) a kétrészecske állapotot a következőképp írhatjuk:

$$|k_1, k_2\rangle = \mathcal{N}(k_1, k_2) \sum_{x_1 < x_2} \left(e^{ik_1 x_1} e^{ik_2 x_2} + S(k_1, k_2) e^{ik_1 x_2} e^{ik_2 x_1} \right) |\{x_1, x_2\}\rangle,$$

ahol az előzőekhez hasonlóan $S(k_1, k_2)$ a fázis, $\mathcal{N}(k_1, k_2)$ pedig a normálási faktor, amiről feltehetjük, hogy

$$\mathcal{N}(k_1, k_2) = \mathcal{N}(k_2, k_1)$$

A normálási faktor biztosítja, hogy

$$\langle k_1, k_2 | k'_1, k'_2 \rangle = \delta_{k_1 k'_1} \delta_{k_2 k'_2} + S(k_1, k_2)^{-1} \delta_{k_1 k'_2} \delta_{k_2 k'_1},$$

amiből következik, hogy

$$S(k_1, k_2) = S(k_2, k_1)^{-1}.$$

A fentieket kihasználva az alábbi kifejezéshez juthatunk:

$$\begin{aligned} |k_2, k_1\rangle &= \mathcal{N}(k_1, k_2) \sum_{x_1 < x_2} \left(e^{ik_2 x_1} e^{ik_1 x_2} + S(k_1, k_2)^{-1} e^{ik_2 x_2} e^{ik_1 x_1} \right) |\{x_1, x_2\}\rangle \\ &= S(k_1, k_2)^{-1} |k_1, k_2\rangle. \end{aligned} \tag{7}$$

Vegyük észre, hogy

$$|k_2, k_1\rangle = \mathcal{N}(k_1, k_2) \sum_{x_1 < x_2} \left(S(k_2, k_1) e^{ik_1 x_1} e^{ik_2 x_2} + e^{ik_1 x_2} e^{ik_2 x_1} \right) |\{x_1, x_2\}\rangle \tag{8}$$

A (7) egyenlet alapján egyértelmű, hogy

$$S(k_1, k_2) |k_2, k_1\rangle = |k_1, k_2\rangle.$$

Ha h továbbra is nagyon kicsi ($h \ll 1$), de már nem a $h \rightarrow 0$ határesetben vagyunk, akkor a fenti állapotok nem lesznek többé sajátállapotok, viszont a spektrumot vizsgálhatjuk perturbációs számítás segítségével, perturbáló operátornak a $-\sum_i h X_i$ tagot tekintve. Akárcsak a paramágneses esetben, a perturbációs számítás elsőrendjében a ferromágneses fázisban sem változik az alapállapot energiája, mivel

$$\begin{aligned} -h \sum_{i=0}^{L-1} \langle + | X_i | + \rangle &= -h \sum_{i=0}^{L-1} \langle + | \uparrow \dots \uparrow \downarrow_i \uparrow \dots \uparrow \rangle = 0 \\ -h \sum_{i=0}^{L-1} \langle - | X_i | + \rangle &= -h \sum_{i=0}^{L-1} \langle - | \uparrow \dots \uparrow \downarrow_i \uparrow \dots \uparrow \rangle = 0 \\ -h \sum_{i=0}^{L-1} \langle + | X_i | - \rangle &= -h \sum_{i=0}^{L-1} \langle + | \downarrow \dots \downarrow \uparrow_i \downarrow \dots \downarrow \rangle = 0 \\ -h \sum_{i=0}^{L-1} \langle - | X_i | - \rangle &= -h \sum_{i=0}^{L-1} \langle - | \downarrow \dots \downarrow \uparrow_i \downarrow \dots \downarrow \rangle = 0. \end{aligned}$$

Megjegyezzük, hogy

$$|\uparrow \dots \uparrow \downarrow_i \uparrow \dots \uparrow\rangle = |\{x, x+1\}\rangle \quad \text{ahol} \quad x = i - \frac{1}{2}.$$

Ahhoz hogy megkapjuk a kétrészecskés impulzus sajátállapotokhoz tartozó energiák eltolódását először a következőt kell kiszámolnunk:

$$\begin{aligned} X_i |\{x_1, x_2\}\rangle &= \delta_{i, x_1-1/2} |\{x_1-1, x_2\}\rangle + \delta_{i, x_1+1/2} |\{x_1+1, x_2\}\rangle \\ &\quad + \delta_{i, x_2-1/2} |\{x_1, x_2-1\}\rangle + \delta_{i, x_2+1/2} |\{x_1, x_2+1\}\rangle \\ &\quad + 0 \text{ vagy 4-kink állapotok,} \end{aligned}$$

aminek felhasználásával a következő mátrixelemeket kapjuk:

$$\begin{aligned} \langle \{x'_1, x'_2\} | \sum_{i=0}^{L-1} X_i | \{x_1, x_2\} \rangle &= \\ \begin{cases} \delta_{x'_1, x_1-1} \delta_{x_2 x'_2} + \delta_{x'_1, x_1+1} \delta_{x_2 x'_2} + \delta_{x_1 x'_1} \delta_{x'_2, x_2-1} + \delta_{x_1 x'_1} \delta_{x'_2, x_2+1}, & x_2 > x_1 + 1, \\ \delta_{x'_1, x_1-1} \delta_{x_2 x'_2} + \delta_{x_1 x'_1} \delta_{x'_2, x_2+1}, & x_2 = x_1 + 1. \end{cases} \end{aligned} \quad (9)$$

Megjegyzendő, hogy, hasonlóan a paramágneses fázis koordinátatérbeli állapotaihoz, itt is úgy indexeljük ezeket az állapotokat, hogy $x_1 < x_2$. Következő lépésként számoljuk ki az alábbi kifejezést

$$\begin{aligned} \sum_{i=0}^{L-1} X_i |k_1, k_2\rangle &= \mathcal{N}(k_1, k_2) \sum_{x_1+1 < x_2} \left(e^{ik_1 x_1} e^{ik_2 x_2} + S(k_1, k_2) e^{ik_1 x_2} e^{ik_2 x_1} \right) |\{x_1+1, x_2\}\rangle \\ &\quad + \mathcal{N}(k_1, k_2) \sum_{x_1 < x_2} \left(e^{ik_1 x_1} e^{ik_2 x_2} + S(k_1, k_2) e^{ik_1 x_2} e^{ik_2 x_1} \right) |\{x_1-1, x_2\}\rangle \\ &\quad + \mathcal{N}(k_1, k_2) \sum_{x_1 < x_2-1} \left(e^{ik_1 x_1} e^{ik_2 x_2} + S(k_1, k_2) e^{ik_1 x_2} e^{ik_2 x_1} \right) |\{x_1, x_2-1\}\rangle \\ &\quad + \mathcal{N}(k_1, k_2) \sum_{x_1 < x_2} \left(e^{ik_1 x_1} e^{ik_2 x_2} + S(k_1, k_2) e^{ik_1 x_2} e^{ik_2 x_1} \right) |\{x_1, x_2+1\}\rangle \\ &\quad + 0 \text{ - vagy 4-kink állapotok.} \end{aligned}$$

A fenti kifejezésben szereplő szummákat könnyen átindexelhetjük a következőképp: az első két szumbában rendre $x_1 + 1 = y_1$, illetve $x_1 - 1 = y_1$, míg a második kettőben rendre $x_2 - 1 = y_2$ és $x_2 + 1 = y_2$ választással:

$$\begin{aligned} \sum_{i=0}^{L-1} X_i |k_1, k_2\rangle &= \mathcal{N}(k_1, k_2) \sum_{y_1 < x_2} \left(e^{-ik_1} e^{ik_1 y_1} e^{ik_2 x_2} + S(k_1, k_2) e^{-ik_2} e^{ik_1 x_2} e^{ik_2 y_1} \right) |\{y_1, x_2\}\rangle \\ &+ \mathcal{N}(k_1, k_2) \sum_{y_1 < x_2 - 1} \left(e^{ik_1} e^{ik_1 y_1} e^{ik_2 x_2} + S(k_1, k_2) e^{ik_2} e^{ik_1 x_2} e^{ik_2 y_1} \right) |\{y_1, x_2\}\rangle \\ &+ \mathcal{N}(k_1, k_2) \sum_{x_1 < y_2} \left(e^{ik_2} e^{ik_1 x_1} e^{ik_2 y_2} + S(k_1, k_2) e^{ik_1} e^{ik_1 y_2} e^{ik_2 x_1} \right) |\{x_1, y_2\}\rangle \\ &+ \mathcal{N}(k_1, k_2) \sum_{x_1 < y_2 - 1} \left(e^{-ik_2} e^{ik_1 x_1} e^{ik_2 y_2} + e^{-ik_1} S(k_1, k_2) e^{ik_1 y_2} e^{ik_2 x_1} \right) |\{x_1, y_2\}\rangle \\ &+ 0\text{- vagy }4\text{-kink állapotok,} \end{aligned}$$

majd további változócserevel a

$$\begin{aligned} \sum_{i=0}^{L-1} X_i |k_1, k_2\rangle &= \mathcal{N}(k_1, k_2) \sum_{x_1 < x_2} \left(e^{-ik_1} e^{ik_1 x_1} e^{ik_2 x_2} + S(k_1, k_2) e^{-ik_2} e^{ik_1 x_2} e^{ik_2 x_1} \right) |\{x_1, x_2\}\rangle \\ &+ \mathcal{N}(k_1, k_2) \sum_{x_1 < x_2 - 1} \left(e^{ik_1} e^{ik_1 x_1} e^{ik_2 x_2} + S(k_1, k_2) e^{ik_2} e^{ik_1 x_2} e^{ik_2 x_1} \right) |\{x_1, x_2\}\rangle \\ &+ \mathcal{N}(k_1, k_2) \sum_{x_1 < x_2} \left(e^{ik_2} e^{ik_1 x_1} e^{ik_2 x_2} + S(k_1, k_2) e^{ik_1} e^{ik_1 x_2} e^{ik_2 x_1} \right) |\{x_1, x_2\}\rangle \\ &+ \mathcal{N}(k_1, k_2) \sum_{x_1 < x_2 - 1} \left(e^{-ik_2} e^{ik_1 x_1} e^{ik_2 x_2} + e^{-ik_1} S(k_1, k_2) e^{ik_1 x_2} e^{ik_2 x_1} \right) |\{x_1, x_2\}\rangle \\ &+ 0\text{- vagy }4\text{-kink állapotok} \end{aligned}$$

összefüggés adódik. Vegyük észre, hogy ez a kifejezés átalakítható a következőképp

$$\begin{aligned} \sum_{i=0}^{L-1} X_i |k_1, k_2\rangle &= 2(\cos k_1 + \cos k_2) |\{k_1, k_2\}\rangle \\ &- \mathcal{N}(k_1, k_2) \sum_{x_1 = x_2 - 1} \left(e^{ik_1} e^{ik_1 x_1} e^{ik_2 x_2} + S(k_1, k_2) e^{ik_2} e^{ik_1 x_2} e^{ik_2 x_1} \right) |\{x_1, x_2\}\rangle \\ &- \mathcal{N}(k_1, k_2) \sum_{x_1 = x_2 - 1} \left(e^{-ik_2} e^{ik_1 x_1} e^{ik_2 x_2} + e^{-ik_1} S(k_1, k_2) e^{ik_1 x_2} e^{ik_2 x_1} \right) |\{x_1, x_2\}\rangle \\ &+ 0\text{- vagy }4\text{-kink állapotok.} \end{aligned}$$

Hasonlóan a paramágneses fázishoz, ahhoz hogy $|k_1, k_2\rangle$ sajátfüggvénye legyen a perturbáló operátornak az

$$\begin{aligned} &\left(e^{ik_1} e^{ik_1(x_2-1)} e^{ik_2 x_2} + S(k_1, k_2) e^{ik_2} e^{ik_1 x_2} e^{ik_2(x_2-1)} \right) \\ &= e^{i(k_1+k_2)x_2} (1 + S(k_1, k_2)) = 0 \end{aligned}$$

és az

$$\begin{aligned} &\left(e^{-ik_2} e^{ik_1(x_2-1)} e^{ik_2 x_2} + e^{-ik_1} S(k_1, k_2) e^{ik_1 x_2} e^{ik_2(x_2-1)} \right) \\ &= e^{i(k_1+k_2)(x_2-1)} (1 + S(k_1, k_2)) = 0 \end{aligned}$$

egyenlőségeknek teljesülnie kell, ami csak úgy lehetséges, ha

$$S(k_1, k_2) = -1$$

teljesül, vagyis a kétrészecske állapotok alakja hullámszámtérben (impulzustérben)

$$|k_1, k_2\rangle = \mathcal{N}(k_1, k_2) \sum_{x_1 < x_2} \left(e^{ik_1 x_1} e^{ik_2 x_2} - e^{ik_1 x_2} e^{ik_2 x_1} \right) |\{x_1, x_2\}\rangle.$$

A kétrészecske állapot kifejezéséből azonnal látszik, hogy utóbbi a kvázirészecskék felcserélése esetén előjelet vált, a gerjesztés kvázirészecskéi tehát ebben az esetben is fermionok. Mivel hullámszámtérben a perturbáló operátor diagonális, a gerjesztési spektrum energiaszintjeinek megváltozásához csak a diagonális elemek kiszámolása szükséges (az előzőekhez hasonlóan) amire a

$$\langle k_1, k_2 | -h \sum_{i=0}^{L-1} X_i | k_1, k_2 \rangle = -2h (\cos k_1 + \cos k_2) \quad (10)$$

összefüggés adódik. Ferromágneses állapotban a kétrészecske állapotok gerjesztési spektruma az alapállapot energiához viszonyítva tehát

$$\epsilon(k_1, k_2) = 2 - 2h \cos k_1 + 2 - 2h \cos k_2,$$

ami alapján azonosíthatjuk az egyrészecskéhez tartozó

$$\epsilon(k) = 2(1 - h \cos k) + O(h^2) \quad (11)$$

gerjesztési spektrumot, noha külön egy kvázirészecskét soha sem figyelhetünk meg a rendszerben. Nagyobb részecskeszámokhoz tartozó gerjesztési spektrum hasonlóan számolható, aminek eredményeként arra juthatunk, hogy ferromágneses fázisban is a megfelelő egyrészecske energiák összege lesz a rendszer energiája az alapállapothoz viszonyítva.

3.3. Kramers-Vannier dualitás

A fentiekben a $h \gg 1$ esetet paramágneses fázisnak, míg a $h \ll 1$ esetet ferromágneses fázisnak neveztük, aminek oka, hogy az előbbi esetben a mágnesezettség operátorának várható értéke zérus, utóbbi esetben viszont véges [8] - erről részletesebben lesz szó a modell numerikus tárgyalásánál. Ebben az alfejezetben arra a kérdésre keressük a választ, hogy a két fázis között h milyen értékénél történik fázisátalakulás, meddig beszélhetünk para és meddig ferromágneses fázisról. A modell egyszerűsége miatt feltételezhetjük, hogy egy kritikus pont van, ahol fázisátalakulás történik, de egyébként ennek precízebb tárgyalására az analitikus megoldás ismertetésénél kerül sor.

Idézzük fel a perturbáló operátor ferromágneses fázisban, kétrészecskés állapotban, koordináta térben kiszámolt mátrixelemeit (9):

$$\begin{aligned} \langle \{x'_1, x'_2\} | h \sum_{i=0}^{L-1} h_i | \{x_1, x_2\} \rangle = \\ h \cdot \begin{cases} \delta_{x'_1, x_1-1} \delta_{x_2 x'_2} + \delta_{x'_1, x_1+1} \delta_{x_2 x'_2} + \delta_{x_1 x'_1} \delta_{x'_2, x_2-1} + \delta_{x_1 x'_1} \delta_{x'_2, x_2+1}, & x_2 > x_1 + 1, \\ \delta_{x'_1, x_1-1} \delta_{x_2 x'_2} + \delta_{x_1 x'_1} \delta_{x'_2, x_2+1}, & x_2 = x_1 + 1. \end{cases} \end{aligned}$$

Analóg módon a paramágneses fázisban is kiszámolhatjuk a perturbáló operátor mátrixelemeit:

$$\begin{aligned} \langle \{r'_1, r'_2\} | \frac{1}{h} \sum_{i=0}^{L-1} Z_i Z_{i+1} | \{r_1, r_2\} \rangle = \\ \frac{1}{h} \begin{cases} \delta_{r'_1, r_1-1} \delta_{r_2 r'_2} + \delta_{r'_1, r_1+1} \delta_{r_2 r'_2} + \delta_{r_1 r'_1} \delta_{r'_2, r_2-1} + \delta_{r_1 r'_1} \delta_{r'_2, r_2+1}, & r_2 > r_1 + 1, \\ \delta_{r'_1, r_1-1} \delta_{r_2 r'_2} + \delta_{r_1 r'_1} \delta_{r'_2, r_2+1}, & r_2 = r_1 + 1. \end{cases} \end{aligned}$$

Vegyük észre, hogy $h > 1$ esetén a

$$\tilde{H} = - \sum_{i=0}^{L-1} \left(\frac{1}{h} Z_i Z_{i+1} + X_i \right)$$

operátor spektruma megegyezik $h < 1$ esetén a

$$H = - \sum_{i=0}^{L-1} (Z_i Z_{i+1} + h X_i) \quad (12)$$

operátor spektrumával, ha a h -t lecseréljük $1/h$ -ra. Ez látható a fenti mátrixelem számoláson: ha paramágneses fázis (a továbbiakban PM fázis) spektrumában az $1/h$ helyére h -t helyettesítünk, akkor visszkapjuk a ferromágneses fázis (a továbbiakban FM fázis) spektrumát. Bár a fenti számolás két-részecske állapotokra és elsőrendben történt, az algebrai struktúra alapján érthető, hogy ez bármilyen magasabb rendben és bármennyi (lehetséges) részecskeszám mellett ugyanúgy teljesül. Ennek megfelelően a PM fázis és az FM fázis dinamikája leképezhető egymásba $h \rightarrow 1/h$ megfeleltetéssel, amit Kramers-Vannier dualitásnak nevezünk. Például a diszperziós reláció a perturbációs számítás minden rendjében kielégíti a

$$\epsilon_{\text{FM}}(k, h) = h \epsilon_{\text{PM}}(k, 1/h) \quad (13)$$

relációt. A fentiek alapján megsejthető, hogy a (13) reláció nemcsak perturbatív közelítésben, hanem egzaktul is teljesül (precízebben ld. az analitikus megoldás tárgyalásánál). Ennek megfelelően megkereshetjük a kritikus pontot is, ahol a két fázis átalakul egymásba. Ez ott következik be, ahol az első gerjesztett állapot és az alapállapot közötti rés eltűnik, vagyis ahol

$$\epsilon_{\text{FM}}(0, h_c) = 0.$$

Viszont ha h_c kritikus pont, akkor nyilván $1/h_c$ is az, viszont csak egy kritikus pont létezését várjuk, ez pedig úgy lehetséges, ha

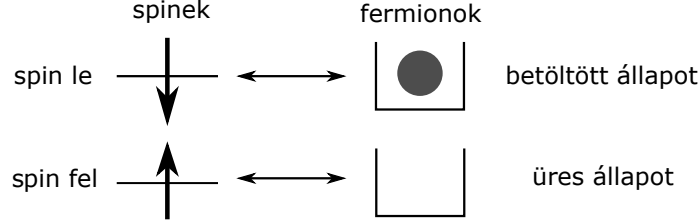
$$h_c = \frac{1}{h_c} = 1.$$

A $0 \leq h < 1$ tartományon tehát ferromágneses fázisban van a rendszer, a $h = 1$ pontban fázisátalakulás történik, a $1 < h$ tartományon pedig paramágneses fázisban van a rendszer.

4. Az egydimenziós TFIM analitikus megoldása

4.1. Jordan-Wigner transzformáció

A központi ötlet, amin az egydimenziós transzverz térbeli Ising modell megoldása alapul $T = 0$ esetén [7], az annak a felismerése, hogy egy feles spinekből álló rendszer nagyon hasonló dinamikát mutat egy spintelen fermionokból álló rendszerhez a következő megfeleltetéssel:



A fenti megfeleltetést az operátorok nyelvén megfogalmazva:

$$\hat{\sigma}_i^z = 1 - 2c_i^+ c_i, \quad (14)$$

ahol c_i és c_i^+ rendre a fermionikus eltüntető és keltő operátor. A (14) relációt motiválja, hogy a $\hat{\sigma}_i^z$ 1 és -1, míg a $c_i^+ c_i$ operátor a fermionok részecskeszám operátoraként 0 vagy 1 értéket vehetnek fel, aminek megfelelően a jobb oldali kifejezés is 1 vagy -1-et lehet. Kézenfekvő lenne a megfeleltetést a $\hat{\sigma}_i^+ = (\hat{\sigma}_i^x + i\hat{\sigma}_i^y)/2 \leftrightarrow c_i$ és a $\hat{\sigma}_i^- = (\hat{\sigma}_i^x - i\hat{\sigma}_i^y)/2 \leftrightarrow c_i^+$ asszociációval teljessé tenni, azonban ez nem elégíti a szükséges kommutációs relációkat, hiszen bár egy konkrét i helyen visszaadja a korrekt spin algebrát, egy spinláncra, ahol több, különböző helyen vannak spinek, már nem, ugyanis különböző helyekre a $\hat{\sigma}_i^\pm$ operátorok kommutálnak, míg c_i^+ és c_i antikommutál:

$$\text{ha } i \neq j: \quad [\hat{\sigma}_i^-, \hat{\sigma}_j^+] = 0 \quad \text{és} \quad \{c_i, c_j^+\} = 0.$$

A problémát Jordan és Wigner ötlete alapján úgy oldhatjuk meg, ha fenti, naív megfeleltetést kiegészítjük egy string operátorral, vagyis

$$\begin{aligned} \sigma_i^+ &= \left[\prod_{j<i} (1 - 2c_j^+ c_j) \right] c_i \\ \sigma_i^- &= \left[\prod_{j<i} (1 - 2c_j^+ c_j) \right] c_i^+. \end{aligned}$$

A $\prod_{j<i} (1 - 2c_j^+ c_j) = \prod_{j<i} \hat{\sigma}_j^z$ string operátor ± 1 értéket vesz fel, attól függően, hogy az i -edik helytől balra páros vagy páratlan fermion helyezkedik el. Ez a string operátor megoldja a kommutátor relációkkal kapcsolatos problémát. Vegyük például, az általánosság megszorítása nélkül, azt az esetet, amikor $l < i$. Ekkor

$$\sigma_i^+ \sigma_l^- = \left[\prod_{j<i} (1 - 2c_j^+ c_j) \right] c_i \left[\prod_{m<l} (1 - 2c_m^+ c_m) \right] c_l^+$$

Ekkor ha "jobbra akarjuk vinni" c_i -t, akkor figyelembe kell vennünk, hogy c_i kommutál a $\prod_{m<l} (1 - 2c_m^+ c_m)$ string operátor minden tagjával, c_l^+ -el pedig antikommutál, hiszen

$$\{c_i, c_l^+\} = \delta_{ij}.$$

Kihasználva továbbá, hogy c_l^+ kommutál a $\prod_{m<l} (1 - 2c_m^+ c_m)$ string operátorral, illetve további átcsoportosítások után a következő kifejezéshez jutunk:

$$\sigma_i^+ \sigma_l^- = - \left[\prod_{m<l, m \neq i} (1 - 2c_m^+ c_m) \right] c_l^+ \left[\prod_{j<i} (1 - 2c_j^+ c_j) \right] c_i (1 - 2c_i^+ c_i) \quad (15)$$

Számoljuk ki az utolsó két tag felcserélésének hatását, figyelembe véve, hogy $c_i^2 = 0$:

$$c_i(1 - 2c_i^+ c_i) = c_i - 2(-c_i^+ c_i + 1)c_i = -c_i = -(1 - 2c_i^+ c_i)c_i,$$

amit felhasználva, valamint további átalakítások után a (15) egyenletet a következő alakba írhatjuk át:

$$\sigma_i^+ \sigma_l^- = \left[\prod_{m < l} (1 - 2c_m^+ c_m) \right] c_l^+ \left[\prod_{j < i} (1 - 2c_j^+ c_j) \right] c_i = \sigma_l^- \sigma_i^+$$

Vagyis a kommutációs relációk így már teljesülnek, sikerült megfeleltetést találnunk a spinek és a fermionok között. Az ár viszont, amit fizetnünk kell ezért az, hogy nagyon nem-lokális reprezentációt kell használnunk.

Kihasználva, hogy $\hat{\sigma}_j^z$ inverze önmaga, felírhatjuk az inverz relációkat is, amelyek

$$c_i = \left[\prod_{j < i} \hat{\sigma}_j^z \right] \sigma_i^+ \\ c_i^+ = \left[\prod_{j < i} \hat{\sigma}_j^z \right] \sigma_i^-.$$

Belátható továbbá [7], hogy a

$$\{c_i, c_j^+\} = \delta_{ij}, \quad \{c_i, c_j\} = \{c_i^+, c_j^+\} = 0 \quad (16)$$

relációk a

$$[\sigma_i^+, \sigma_j^-] = \delta_{ij} \hat{\sigma}_i^z, \quad [\hat{\sigma}_i^z, \sigma_j^\pm] = \pm 2\delta_{ij} \sigma_i^\pm$$

összefüggéseket implikálják és fordítva.

4.2. Az egydimenziós TFIM analitikus megoldása

A fentiekben ismertettük a Jordan-Wigner transzformáció tipikus alakját. Ebben az elfejezetben utóbbi alkalmazását fogjuk bemutatni a transzverz térbeli Ising modell megoldására.

Ehhez, kényelmi okokból, forgassuk el a 4.1. fejezetben definiált spinek tengelyét a következőképp, hogy dolgozhassunk az (1) Hamilton-operátorral:

$$\hat{\sigma}^z \rightarrow \hat{\sigma}^x, \quad \hat{\sigma}^x \rightarrow -\hat{\sigma}^z$$

és írjuk a Jordan-Wigner transzformációt az alábbi alakba

$$\hat{\sigma}_i^x = 1 - 2c_i^+ c_i, \quad \hat{\sigma}_i^z = - \left[\prod_{j < i} (1 - 2c_j^+ c_j) \right] (c_i + c_i^+).$$

A célunk, hogy a Jordan-Wigner transzformáció fenti alakját megjelentessük az (1) Hamilton-operátorban. A $\hat{\sigma}_i^x$ -et tartalmazó tag átalakítása triviális, viszont a $\hat{\sigma}_i^z \hat{\sigma}_{i+1}^z$ -es taggal dolgozni kell, ezt a következőképp alakíthatjuk át:

$$\hat{\sigma}_i^z \hat{\sigma}_{i+1}^z = \left[\prod_{j < i} (1 - 2c_j^+ c_j) \right] (c_i + c_i^+) \left[\prod_{j < i+1} (1 - 2c_j^+ c_j) \right] (c_{i+1} + c_{i+1}^+)$$

majd a (16)-es antikommutációs relációkat kihasználva

$$\begin{aligned} \hat{\sigma}_i^z \hat{\sigma}_{i+1}^z &= (c_i + c_i^+)(1 - 2c_i^+ c_i)(c_{i+1} + c_{i+1}^+) = (-c_i + c_i^+)(c_{i+1} + c_{i+1}^+) \\ &= c_i^+ c_{i+1} + c_{i+1}^+ c_i + c_i^+ c_{i+1}^+ + c_{i+1} c_i \end{aligned}$$

adódik. Így tehát a transzverz térbeli Ising modell Hamilton-operátora c_i és c_i^+ operátorokkal felírva:

$$H = -J \sum_i (c_i^+ c_{i+1} + c_{i+1}^+ c_i + c_i^+ c_{i+1}^+ + c_{i+1} c_i - 2hc_i^+ c_i + h). \quad (17)$$

A Hamilton-operátor fenti alakja alapján megállapíthatjuk, hogy H egy egyrészecske operátor, vagyis nemkölsönható fermionokat ír le. Az anomális tagok, $c_i^+ c_{i+1}^+$ és $+c_{i+1} c_i$ azt eredményezik, hogy a rendszerben a részecskeszám nem marad meg, habár a paritás megmaradó mennyiség. Ezek a tagok azért jelennek meg, mivel a $\hat{\sigma}_i^z \hat{\sigma}_{i+1}^z$ operátorok párosával tudják átforgatni a spineket.

Ahhoz, hogy diagonalizálni tudjuk a Hamilton-operátort, először térjünk át síkhullám bázisba

$$c_k = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j c_j e^{-ikr_j}$$

amit behelyettesítve a (17) kifejezésbe a

$$H = J \sum_k (2(h - \cos ka) c_k^+ c_k - i \sin ka [c_{-k}^+ c_k^+ + c_{-k} c_k] - h)$$

kifejezés adódik, ahol $a = r_{i+1} - r_i$ a rácsállandó, amit a perturbációs számításánál az egyszerűség kedvéért 1-nek választottunk. A Hamilton-operátort ezután átírhatjuk az alábbi alakba

$$H = 2J \sum_{k>0} \left\{ \begin{pmatrix} c_k^+ & c_{-k} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} (h - \cos ka) & i \sin ka \\ -i \sin ka & -(h - \cos ka) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_k \\ c_{-k}^+ \end{pmatrix} - h + (h - \cos ka) \right\} + 2J(h-1)c_0^+ c_0.$$

Figyeljük meg, hogy a szummában a k értékek felére összegzünk, az utolsó tag pedig a $k=0$ -nak felel meg. A $k \neq 0$ részben szereplő mátrixot a következőképp alakíthatjuk át:

$$\begin{pmatrix} (h - \cos ka) & i \sin ka \\ -i \sin ka & -(h - \cos ka) \end{pmatrix} = (h - \cos ka) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} - \sin ka \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}.$$

Ez a mátrix diagonalizálható egy unitér transzformáció segítségével, ami összességében egy Θ_k szögű forgatás az xy síkban, ahol

$$\tan \theta_k = \frac{\sin ka}{h - \cos ka},$$

a transzformáció mátrixa pedig

$$U_k = e^{-i\theta_k \frac{\mu_x}{2}} = \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta_k}{2} & -i \sin \frac{\theta_k}{2} \\ -i \sin \frac{\theta_k}{2} & \cos \frac{\theta_k}{2} \end{pmatrix},$$

ahol

$$\mu_x = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

A diagonalizált mátrix alakja tehát

$$U_k^+ \begin{pmatrix} (h - \cos ka) & i \sin ka \\ -i \sin ka & -(h - \cos ka) \end{pmatrix} U_k = \sqrt{(h - \cos ka)^2 + \sin^2 ka} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Az U_k mátrixot arra használjuk tulajdonképpen, hogy végrehajtsunk egy Bogoliubov-transzformációt:

$$\begin{pmatrix} c_k \\ c_{-k}^+ \end{pmatrix} = U_k \begin{pmatrix} \gamma_k \\ \gamma_{-k}^+ \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta_k}{2} & -i \sin \frac{\theta_k}{2} \\ -i \sin \frac{\theta_k}{2} & \cos \frac{\theta_k}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \gamma_k \\ \gamma_{-k}^+ \end{pmatrix}.$$

Megjegyzendő, hogy a γ_k mennyiségek kielégítik a fermionikus antikommutációs relációkat [7], vagyis

$$\{\gamma_k, \gamma_{k'}^+\} = \{\gamma_{-k}, \gamma_{-k'}^+\} = \delta_{kk'}.$$

A Bogoliubov-transzformáció után megkapjuk a Hamilton-operátor alábbi alakját

$$H = \sum_{k>0} \varepsilon_k \left(\gamma_k^+ \gamma_k - \gamma_{-k} \gamma_{-k}^+ \right) + \text{const.},$$

kihasználva az antikommutációs relációkat pedig ezt a következőképp alakíthatjuk át

$$H = \sum_k \varepsilon_k \left(\gamma_k^+ \gamma_k - \frac{1}{2} \right), \quad (18)$$

ahol

$$\varepsilon_k = 2J \sqrt{(h - \cos ka)^2 + \sin^2 ka} = 2J \sqrt{1 + h^2 - 2h \cos ka}. \quad (19)$$

Ezzel tehát a keresett másodkvantált alakra hoztuk a rendszer Hamilton-operátorát, ε_k meghatározásával megadtuk az energiaspektrumot. Megvizsgálhatjuk a kis és nagy h -s határeseteket is:

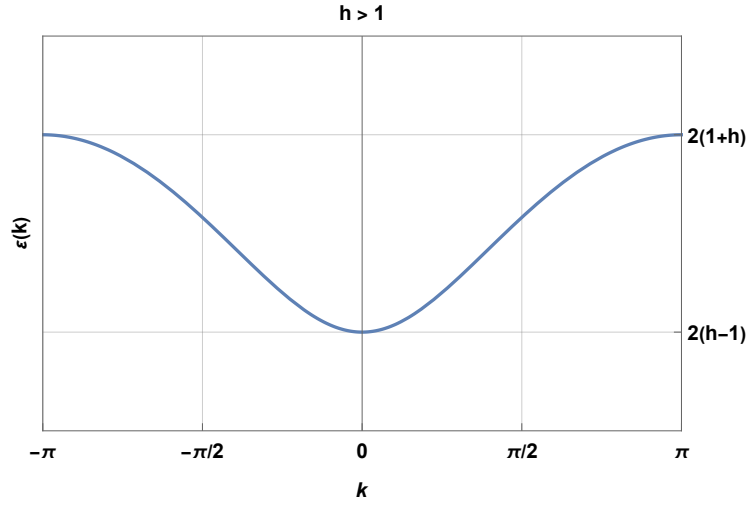
$$\begin{aligned} h \ll 1 &\Rightarrow \varepsilon_k = 2J(1 - h \cos ka) + O(h^2) \\ h \gg 1 &\Rightarrow \varepsilon_k = 2Jh \left(1 - \frac{1}{h} \cos ka + O\left(\frac{1}{h^2}\right) \right) \end{aligned}$$

amik összhangban vannak a perturbációs számítás során kapott eredményekkel ((5),(11)).

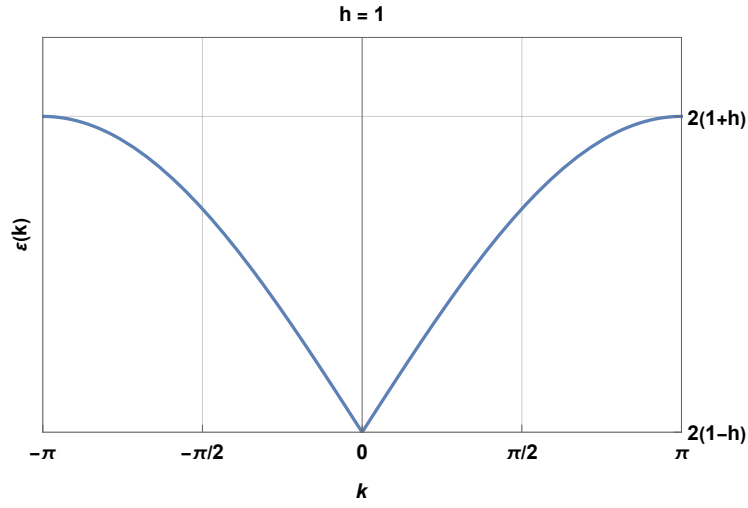
4.3. Az egyrészecske spektrum vizsgálata

Ha tekintjük az egyrészecske spektrumot (19) és $h \gg 1$ értékről indulva csökkentjük h -t, akkor észrevehetjük, hogy a $h = 1$ pontban valami különös dolog történik: az első gerjesztett állapot és az alapállapot közötti rés eltűnik, hiszen a rés nagysága $\Delta = 2J|h - 1|$, ami $h = 1$ esetén $\Delta = 0$ értéket vesz fel! Ebben a pontban ugyanis kvantum fázisátalakulás történik [7], a $h = h_c = 1$ pontot pedig kritikus pontnak nevezzük. A rendszer ebben a pontban átalakul egy olyan fázisból, ami esetén az alapállapot rendelkezik globális Z_2 szimmetriával (paramágneses fázis), egy olyan fázisba, amiben viszont ez nem teljesül (ferromágneses fázis), vagyis az alapállapot kétszeresen degenerálttá válik, spontán szimmetriasértés következik be. Mivel más h érték nincs, ahol eltűnne az első gerjesztett állapot és az alapállapot közötti rés, így megállapíthatjuk azt, hogy valóban egy kritikus pontja van a rendszernek, $h_c = 1$, ami megegyezik a Kramers-Vannier dualitás kihasználásával kapott értékkel. A rendszer mindkét fázisában teljesül, hogy az alapállapot és az első gerjesztett állapot közötti rés nagysága $\Delta = 2J|h - 1|$, ez egyértelmű a kiszámolt spektrum alapján. Ha a rendszer megközelíti a kritikus pontot, akkor ez a rés eltűnik valamint a korrelációs hossz is divergálni fog [7], vagyis a fázisátalakulás másodrendű. Az egyrészecske spektrum $h > 1$, $h = 1$ és $h < 1$ esetben a 2. ábrán látható.

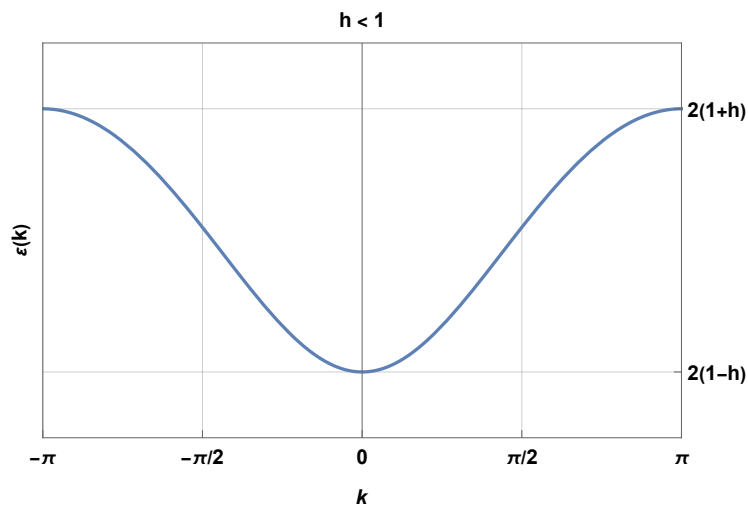
Van azonban egy fontos kérdés, amit a fenti analitikus megoldás során még nem tárgyaltunk: a ferromágneses fázisban ($h < 1$) a spektrum kétszeresen degenerált (hiszen két alapállapot van, amit gerjeszthetünk), viszont ez sehol sem tükröződik a fenti számolásban. Ennek oka, hogy a fenti gondolatmenet egy dolgot nem kezel teljesen precízen: a határfeltételeket, ugyanis eddig periodikus határfeltételt választottunk a számoláshoz de úgy tekintettük a láncot, mintha végtelen lenne. A következőekben az alapállapot degeneráció megértéséhez tekintsük szabad végűnek a spinláncot és vezessük be a Majorana operátorok koncepcióját.



(a) Az egyrészecske spektrum paramágneses fázisban ($h > 1$)



(b) Az egyrészecske spektrum a kritikus pontban ($h = 1$).



(c) Az egyrészecske spektrum ferromágneses fázisban ($h < 1$).

2. ábra. Az egyrészecske spektrum különböző fázisokban.

4.4. Majorana operátorok

Nyílt spinláncot tekintve a transzverz térbeli Ising modell Hamilton-operátora az alábbi alakban írható fel

$$H = -J \left[\sum_{i=1}^{L-1} (-c_i + c_i^+) (c_{i+1} + c_{i+1}^+) + h \sum_{i=1}^L (1 - 2c_i^+ c_i) \right]. \quad (20)$$

Definiáljuk a következő operátorokat [9]:

$$a_j = c_j + c_j^+, \quad b_j = i(c_j^+ - c_j). \quad (21)$$

Az a_j és b_j operátorok (21) alakjából azonnal látszik, hogy

$$a_j^+ = a_j \quad \text{és} \quad b_j^+ = b_j,$$

vagyis hogy ezek hermitikus operátorok. Teljesülnek továbbá a következő antikommutációs relációk:

$$\{a_j, a_{j'}\} = \{c_j + c_j^+, c_{j'} + c_{j'}^+\} = \{c_j^+, c_{j'}\} + \{c_j, c_{j'}^+\} = \delta_{j,j'},$$

$$\{b_j, b_{j'}\} = \delta_{j,j'},$$

$$\{b_j, a_{j'}\} = i\{c_j^+ - c_j, c_{j'} + c_{j'}^+\} = i(\{c_j^+, c_{j'}\} - \{c_j, c_{j'}^+\}) = 0.$$

A fentiek alapján az a_j és b_j operátorok a (21) definícióval $2L$ darab, független, antikommutáló hermitikus operátort jelölnek, melyek mindegyikének négyzete 1-et ad. Az ilyen tulajdonságú operátorokat Majorana operátoroknak nevezzük. A (21) definíciók alapján triviális, hogy a tisztán transzverz fermion keltő és eltüntető operátorokat a Majorana operátorok következő kombinációjával kaphatjuk meg:

$$c_j = \frac{1}{2}(a_j + ib_j), \quad c_j^+ = \frac{1}{2}(a_j - ib_j),$$

amit felhasználva a

$$c_j^+ c_j = \frac{1}{4}(a_j - ib_j)(a_j + ib_j) = \frac{1}{4}(a_j^2 + b_j^2 - 2ia_j b_j) = \frac{1}{2}(1 - ia_j b_j)$$

kifejezés adódik, vagyis

$$-ia_j b_j = 2c_j^+ c_j - 1. \quad (22)$$

A Majorana operátorok (21) definíciója és a (22) kifejezés felhasználásával a rendszert leíró (20) Hamilton-operátort a következő alakban írhatjuk fel a Majorana operátorok segítségével:

$$H = -J \left[\sum_{j=1}^{L-1} (-ib_j a_{j+1}) + h \sum_{j=1}^L ia_j b_j \right]. \quad (23)$$

Tekintsük most ennek a Hamilton-operátornak a határeseteit:

$h \gg 1$ határesetben (PM fázis) a (23) Hamilton-operátor az alábbi módon közelíthető

$$H \approx Jg \sum_{j=1}^L (-ia_j b_j) = \alpha \sum_{j=1}^L c_j^+ c_j + \text{const.}, \quad (24)$$

ahol α arányossági tényező. Megfigyelhető, hogy a Hamilton-operátorban megjelenik az összes Majorana operátor $a_j b_j$ -vel arányos alakú párok formájában, ezek összege adja a teljes operátort. Ha utóbbit fel akarjuk írni tisztán transzverz fermion operátorokkal kifejezve is, ahogy a fenti összefüggésben is látható, akkor a (21) definíció értelmében a c_j és c_j^+ operátorokba csak az a_j , b_j Majorana operátorok adnak járulékot.

$h \ll 1$ határesetben (FM fázis) a (23) Hamilton-operátor a következőképp közelíthető

$$H \approx J \sum_{j=1}^{L-1} (ib_j a_{j+1}) = 2\alpha' \sum_{j=1}^{L-1} d_j^+ d_j + \text{const.}, \quad (25)$$

ahol α' arányossági tényező, d_j és d_j^+ pedig az alábbi alakban definiált, új fajta fermion eltüntető és keltő operátorok:

$$d_j = \frac{1}{2} (b_j + ia_{j+1}), \quad d_j^+ = \frac{1}{2} (b_j - ia_{j+1}).$$

Megfigyelhető, hogy a (25) Hamilton-operátor d_j és d_j^+ segítségével felírt alakja nagyon hasonló a (24) Hamilton-operátor c_j és c_j^+ -al kifejezett alakjához, viszont fontos különbség, hogy az előbbiben $L-1$ darab d_j fermion jelenik meg, míg az utóbbiban L darab c_j fermion. Megjegyzendő továbbá az a különbség is, hogy a (25) kifejezésben megjelenő szumma tagjai $b_j + ia_{j+1}$ -vel arányos alakú párokból állnak (a_1 és b_n egyáltalán nem is jelenik meg), illetve a d_j , d_j^+ operátorokba is a b_j és az a_{j+1} operátorok adnak járulékot. A hiányzó új fajta fermion léptető operátorokat a következő alakban definiálhatjuk

$$d_L = \frac{1}{2} (a_1 + ib_L), \quad d_L^+ = \frac{1}{2} (a_1 - ib_L).$$

Bár d_N és d_N^+ nem jelenik meg explicite a (25) Hamilton-operátor kifejezésében, nyilvánvalóan beleszámítanak a 2^N dimenziós Hilbert tér elemeibe, viszont a Hilbert-tér állapotainak energiája független attól, hogy az N -edik d_n fermion állapot be van-e töltve, ami azt eredményezi, hogy a spektrum FM fázisban kétszeresen degenerálttá válik.

4.5. Véges spinlánc vizsgálata

Ha komolyan szeretnénk venni a rendszer véges méretét, akkor ahogy már említettük, a spektrum megalkotására korábban mutatott számolás (4.2. fejezet) nem teljesen precíz, más megközelítést kell alkalmaznunk [10].

Belátható [11], hogy a periodikus határfeltétellel értelmezett transzverz térbeli Ising modell (1) Hamilton-operátora, a spin tengelyek

$$\hat{\sigma}^z \rightarrow -\hat{\sigma}^x, \quad \hat{\sigma}^x \rightarrow \hat{\sigma}^z$$

elforgatásával és így a 4.1. fejezetben értelmezett Jordan-Wigner transzformáció segítségével és az ott tárgyalt c_j és c_j^+ fermion léptető operátorok felhasználásával az alábbi alakba írható:

$$\begin{aligned} H = -J \sum_{j=1}^L (\hat{\sigma}_j^x \hat{\sigma}_{j+1}^x + h \hat{\sigma}_j^z) &= -J \sum_{j=1}^{L-1} [c_j^+ - c_j] [c_{j+1} + c_{j+1}^+] \\ &\quad - Jh \sum_{j=1}^L [c_j c_j^+ - c_j^+ c_j] - J e^{i\pi \hat{N}} (c_L - c_L^+) (c_1 + c_1^+), \end{aligned} \quad (26)$$

ahol

$$\hat{N} = \sum_{j=1}^L c_j^+ c_j$$

a rendszerben lévő fermionok számának operátora. A továbbiakban válaszunk páros számú spinekből álló láncot, vagyis $L = 2m$. Mivel $[H, e^{i\pi \hat{N}}] = 0$, így a két operátor egyszerre diagonalizálható, hiszen létezik közös sajátfüggvény rendszerük. Megmutatható [10], hogy a H Hamilton-operátor blokk-diagonális $H = H_e \oplus H_o$, ahol a $H_{e/o}$ operátorok a Fock-tér különböző alterein hatnak, amik rendre a páros, illetve páratlan számú fermion esetet írják le.

4.6. Páros fermionszám

Tekintsük először a páros számú fermion alteret. Ekkor $e^{i\pi\hat{N}} = 1$, így a (26) kifejezés alapján

$$H_e = -J \sum_{j=1}^L [c_j^+ - c_j] [c_{j+1} + c_{j+1}^+] - Jh \sum_{j=1}^L [c_j c_j^+ - c_j^+ c_j],$$

ahol megköveteljük a fermionokra vonatkozó antiperiodikus határfeltételt, vagyis

$$c_{L+1} = -c_1. \quad (27)$$

Az antiperiodikus határfeltételt kielégítő szektort gyakran Neveu-Schwarz (NS) szektornak nevezzük [12]. A H_e Hamilton-operátor Fourier-térbe való áttéréssel diagonalizálható:

$$c(k_n) = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{j=1}^L c_j e^{ik_n j},$$

ahol, kihasználva a (27) határfeltételt,

$$k_n = \frac{2\pi(n+1/2)}{L}, \quad n = -\frac{L}{2}, \dots, \frac{L}{2} - 1.$$

A fentiek segítségével belátható [10], hogy a páros részecske számú esetet leíró Hamilton-operátor diagonális alakja

$$H_e = \sum_{n=-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}-1} \varepsilon(k_n) \left[\alpha_{k_n}^+ \alpha_{k_n} - \frac{1}{2} \right],$$

ahol az $\alpha_{k_n}, \alpha_{k_n}^+$ operátorok a korábban a (18)-as összefüggésben γ_k, γ_k^+ -val jelölt operátoroknak megfelelő keltő és eltüntető operátorok, illetve

$$\varepsilon(k_n) = 2J \sqrt{1 + h^2 - 2h \cos(k_n)}, \quad (28)$$

ismét egységnyi rácscsillandót választva. Így tehát a Fock-tér páros fermionszámú alterének bázisát Fourier-térben a következő alakban írhatjuk fel

$$|k_1, \dots, k_{2m}\rangle_{\text{NS}} = \prod_{j=1}^{2m} \alpha_{k_j}^+ |0\rangle_{\text{NS}}, \quad k_j \in \text{NS},$$

ahol $|0\rangle_{\text{NS}}$ az NS-szektor vákuumállapota.

4.7. Páratlan fermionszám

Tekintsük most a páratlan fermionszámhoz tartozó alteret. Ekkor $e^{i\pi\hat{N}} = -1$, így a (26) kifejezés alapján

$$H_o(h) = -J \sum_{j=1}^L [c_j^+ - c_j] [c_{j+1} + c_{j+1}^+] - Jh \sum_{j=1}^L c_j c_j^+ - c_j^+ c_j,$$

ahol periodikus határfeltétel teljesülését követeljük meg a fermionokra, vagyis

$$c_{L+1} = c_1. \quad (29)$$

A periodikus határfeltételt kielégítő szektorra gyakran Ramond (R) szektorként hivatkozunk [13]. A H_o Hamilton-operátor diagonalizálásához Fourier térbe áttérve a

$$c(p_n) = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{j=1}^L c_j e^{ip_n j},$$

transzformáció segítségével, ahol a (29) határfeltétel miatt

$$p_n = \frac{2\pi n}{L}, \quad n = -\frac{L}{2}, \dots, \frac{L}{2} - 1,$$

belátható [10], hogy

$$H_o = \sum_{\substack{n=-\frac{L}{2} \\ n \neq 0}}^{\frac{L}{2}-1} \varepsilon(p_n) \left[\tilde{\alpha}_{p_n}^+ \tilde{\alpha}_{p_n} - \frac{1}{2} \right] - 2J(1-h) \left[\tilde{\alpha}_0^+ \tilde{\alpha}_0 - \frac{1}{2} \right], \quad (30)$$

ahol az $\tilde{\alpha}_{p_n}, \tilde{\alpha}_{p_n}^+$ operátorok a fentiekhez hasonlóan a γ_k, γ_k^+ -val jelölt operátorokkal analóg keltő és eltüntető operátorok, valamint a $\varepsilon(p_n)$ függvény is megegyezik a (28) függvénnyel. Így tehát a Fock-tér páratlan fermionszámú alterének bázisát Fourier-térben az alábbi alakban írhatjuk fel

$$|p_1, \dots, p_{2m+1}\rangle = \prod_{j=1}^{2m+1} \tilde{\alpha}_{p_j}^+ |\tilde{0}\rangle_R, \quad p_j \in \mathbb{R}$$

ahol $|\tilde{0}\rangle_R$ az R-szektor vákuumállapota.

4.8. Paramágneses fázis

Paramágneses fázisban ($h > 1$), mivel $-2J(1-h) > 0$, így $\tilde{\alpha}_{p_n} = \alpha_{p_n}$ és $\tilde{\alpha}_{p_n}^+ = \alpha_{p_n}^+$ definícióval ($n = 0$ esetben is) a fentieknek megfelelően a Hamilton-operátor alakja

$$\begin{aligned} H_e &= \sum_{k_n \in \text{NS}} \varepsilon(k_n) \alpha_{k_n}^+ \alpha_{k_n} + E_0^{\text{NS}}, \\ H_o &= \sum_{p_n \in \mathbb{R}} \varepsilon(p_n) \alpha_{p_n}^+ \alpha_{p_n} + E_0^{\text{R}}, \end{aligned} \quad (31)$$

ahol $E_0^a = -\frac{1}{2} \sum_{q \in a} \varepsilon(q)$, $a = \text{R, NS}$. A rendszernek egyetlen alapállapota van: $|0\rangle_{\text{NS}}$. A rendszerben lévő páros számú fermionikus kvázirészecskéket leíró állapotok a

$$|k_1, \dots, k_{2m}\rangle_{\text{NS}} = \prod_{p_j \in \text{NS}}^{2m} \alpha_{k_j}^+ |0\rangle_{\text{NS}},$$

míg a páratlan számú fermionokat leíró állapotok a

$$|p_1, \dots, p_{2m+1}\rangle_{\text{R}} = \prod_{k_j \in \mathbb{R}}^{2m+1} \alpha_{p_j}^+ |\tilde{0}\rangle_{\text{R}}$$

alakban állnak elő, ahol a $|\tilde{0}\rangle_{\text{R}}$ állapot nem valódi alapállapot, nem eleme a Hilbert-térnek. Megmutatható [9] az Euler–Maclaurin formula korrekciós tagja segítségével, hogy

$$E_0^{\text{NS}} - E_0^{\text{R}} = O\left(e^{-L/\xi}\right), \quad (32)$$

vagyis $L \rightarrow \infty$ határesetben $E_0^{\text{NS}} = E_0^{\text{R}}$. A fenti összefüggésben $\xi \sim 1/|\ln(h)|$ a korrelációs hossz [7]. Az utóbbi állítás érthető is, hiszen $L \rightarrow \infty$ esetben az $E_0^a = -\frac{1}{2} \sum_{q \in a} \varepsilon(q)$, $a = \text{R, NS}$ kifejezésben a szummából integrál lesz, eltűnik a félegész és az egész kvantumszámok közötti különbség.

4.9. Ferromágneses mágneses fázis

Ferromágneses állapotban ($h < 1$) a Ramon-szektorban figyelmesnek kell lennünk, mivel $-2J(1 - h) < 0$, vagyis az $\tilde{\alpha}_0|\tilde{0}\rangle_R$ állapot energiája alacsonyabb, mint a $|\tilde{0}\rangle_R$ állapothoz tartozó energia, így definiáljuk át az előbbi, mint a Ramon-szektor "valódi" alapállapotát:

$$\tilde{\alpha}_0|\tilde{0}\rangle_R := |0\rangle_R,$$

valamint vegyük a következő definíciót: $\tilde{\alpha}_{p_n} = \alpha_{p_n}$ és $\tilde{\alpha}_{p_n}^+ = \alpha_{p_n}^+$ ha $n \neq 0$, különben $\tilde{\alpha}_0 = \alpha_0^+$ és $\tilde{\alpha}_0^+ = \alpha_0$. Ekkor az antikommutációs relációt kihasználva

$$\tilde{\alpha}_0^+ \tilde{\alpha}_0 = 1 - \alpha_0^+ \alpha_0, \quad (33)$$

vagyis a ferromágneses fázis Hamilton-operátorát is ugyanolyan alakba írhatjuk, mint (31). Figyelünk kell viszont az kvázirészecskéket leíró állapotok előállításánál arra, hogy a Ramon szektor alapállapotát úgy definiáltuk át, hogy az eredeti alapállapotra hatottunk egy $\tilde{\alpha}_0$ eltüntető operátorral, vagyis a Ramon-szektor kvázirészecskéi is páros sokan lesznek. Ennek megfelelően ferromágneses állapotban csak páros számú kvázirészecske lehet a rendszerben. A rendszer különböző, páros fermionszámú állapotai ekkor a fenti definíciókkal a

$$|k_1, \dots, k_{2m}\rangle_R = \prod_{k_j \in R}^{2m} \alpha_{k_j}^+ |0\rangle_R$$

és a

$$|p_1, \dots, p_{2m}\rangle_{NS} = \prod_{p_j \in NS}^{2m} \alpha_{p_j}^+ |0\rangle_{NS}$$

alakban állnak elő. Véges rendszer esetén a rendszer alapállapota $|0\rangle_{NS}$, de fontos, hogy $|0\rangle_R$ is eleme a Hilbert-térnek. Mivel ferromágneses esetben is teljesül a (32) összefüggés, így $L \rightarrow \infty$ esetben az alapállapot degenerálttá válik, alapállapotban pedig a spontán szimmetriasértés következtében a

$$\frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle_R \pm |0\rangle_{NS})$$

kombinációk közül valamelyik állapot írja le a rendszert.

Érdekes kérdés, hogy hogyan tudunk nemkölsönható fermionokkal leírni egy kölcsönható spinekből álló rendszert? Hol van eldugva a kölcsönhatás? Erre a kérdésre a válasz egyrészt az, hogy a két leírás közötti áttérést biztosító Jordan-Wigner transzformáció nemlineáris és nemlokális, másrészt hogy ha szimplán egy nemkölsönható rendszerünk lenne, akkor nem kapnánk olyan fermionikus sajátállapotot, ami nem eleme a tényleges Hilbert-térnek.

Fontos megjegyzés továbbá, hogy amit az $\tilde{\alpha}_0$ és $\tilde{\alpha}_0^+$ operátorok átdefinálásakor csináltunk, az nem pusztán egy matematikai átalakítás. Ennek a műveletnek sokkal mélyebb jelentése van: ez hordozza magában a spontán szimmetria sértést, így a fázisátalakulás jelenségének kulcsát is.

Érdemes még megjegyeznünk, hogy a 3. fejezetben, a perturbációszámításban alkalmazott szemléletes kvázirészecske képek, a doménfal/elfordított spin mint egy kvázirészecske megfeleltetések, csak a 3. fejezet határesetekben, perturbatíván használhatóak. Szemléletes képet azonban a köztes tartományokban is tudunk társítani a matematikai leíráshoz: ebben az esetben is választhatjuk az egyrészecske - doménfal/átfordított spin megfeleltetést, azonban már nem tudjuk megmondani, hogy a kvázirészecskék pontosan melyik helyen vannak, hiszen a hullámfüggvények delokalizálódnak, ahogy az a perturbációszámítás segítségével látható.

5. A TIFM numerikus vizsgálata

Munkám során nemcsak analitikus megközelítéssel vizsgáltam a transzverz térbeli Ising modellt, hanem numerikus eszközök segítségével is. A numerikus vizsgálathoz először megalkottam az (1) Hamilton-operátort, Python programozási nyelv segítségével. A Hamilton-operátor összeállításánál fontos, hogy ritka mátrixokat használjunk, különben programunk sokkal memória- és időigényesebb lesz. A rendszer numerikus szimulációja során L -t mindig páros számnak választottam, az általam megvalósított leghosszabb spinlánc pedig $L = 20$ hosszúságú volt, vagyis 20 spinből állt. Továbbá az egyszerűség kedvéért mindig $J = 1$ választással dolgoztam.

5.1. A kód ellenőrzése

További számolások előtt először érdemes ellenőrizni, hogy az összeállított Hamilton-operátorban nincs-e hiba. Erre én most több lehetőséget is ismertetni fogok, amiknek az általam létrehozott kód mind megfelelt:

- **Spektrum:** Természetesen a legkézenfekvőbb lehetőség a Hamilton-operátor sajátértékeinek megkeresése numerikus úton, majd ezek összevetése az elméletileg várt spektrummal. Fontos megjegyezni, hogy mivel a rendszer véges, ezért mindenképp figyelembe kell venni az ezzel járó effektursokat, így az analitikus spektrumot a 4.5. fejezet megfontolásai szerint kell előállítani.
- **A rés nagysága:** Jó ellenőrzési lehetőség különböző h értékek mellett kiszámolni az első gerjesztett állapot és az alapállapot közötti energiakülönbség nagyságát és ezt összehasonlítani az elméleti várakozásainkkal, a rést ugyanis a 4. fejezet alapján $\Delta = 2J|1 - h|$ nagyságúnak várjuk.
- **Mágnesezettség:** Az i -edik spin helyén mérhető mágnesezettség várható értékét alapállapotban a

$$\hat{m}_i = \underbrace{\mathbb{1}_{2 \times 2} \oplus \dots \oplus \mathbb{1}_{2 \times 2}}_{i-1} \oplus \hat{\sigma}_z \oplus \underbrace{\mathbb{1}_{2 \times 2} \oplus \dots \oplus \mathbb{1}_{2 \times 2}}_{L-i} \quad (34)$$

mágnesezettség operátor várható értékének kiszámolásával kaphatjuk meg. Mivel a rendszer eltolás-invariáns, így bármelyik i helyen kiszámolhatjuk a várható értéket, hiszen ugyanazt az eredményt kell kapnunk. A numerikusan számolt eredményt ellenőrzés céljából össze kell már csak hasonlítani az elméleti várakozással: belátható [8], hogy $L \rightarrow \infty$ esetén

$$\begin{aligned} h < 1 : & \quad |\langle \hat{m}_i \rangle(h)| = (1 - h^2)^{1/8}, \\ h > 1 : & \quad \langle \hat{m}_i \rangle(h) = 0. \end{aligned}$$

Megjegyzendő, hogy a rendszer összmágnesezettségét

$$M = \sum_i \hat{m}_i$$

alapvetően mint a transzverz térbeli Ising modellben $T = 0$ -án történő kvantumfázisátalakulás rendparamétereként tekinthetjük, melynek értéke $h > 1$ esetben zérus, $h < 1$ esetén $\langle \hat{M}_i \rangle(h) = \pm L(1 - h^2)^{1/8}$, ferromágneses fázisban ugyanis - ahogy már említettük - spontán mágnesezettség következik be¹ [14].

- **Kommutációs relációk:** A rendszer diszkrét eltolási szimmetriával, valamint Z_2 szimmetriával rendelkezik, vagyis a Hamilton-operátor invariás a diszkrét eltolásra (pontosabban a spinek diszkrét értékkel való rotálására) valamint az összes spin tükrözésére. Ez azt jelenti, hogy H kommutál a T diszkrét eltolás és a

$$S = \prod_i \hat{\sigma}_i^x$$

¹Precízebben a spontán mágnesezettségről csak $L \rightarrow \infty$ határesetben beszélhetünk.

"spin-fordító" operátorral:

$$[H, T] = [H, S] = 0$$

Ezen kommutációs relációk kiszámolása további lehetőséget nyújt a program ellenőrzésére.

5.2. Kvantum kvencsek a TIFM különböző változataiban

Egy rendszerben a Hamilton-operátor paramétereinek hirtelen megváltozását kvantum kvencsnek nevezzük. Egy kvantum kvencs lehet globális és lokális is.

Globális kvantum kvencsnek nevezzük azt az esetet, amikor az energiasűrűség véges, vagyis a rendszerbe pumpált energia extenzív. Ennek legegyszerűbb megvalósítása, amikor a H_{pre} kezdeti (pre) Hamilton-operátor (diszkrét) eltolás-invariáns, a rendszer kezdeti állapota az utóbbi alapállapota (ami szintén eltolás-invariáns) és a hirtelen változás során kialakuló, időfejlődést leíró H_{post} (post) Hamilton-operátor is (diszkrét) eltolás-invariáns.

A lokális kvantum kvencsek esetén ehhez képest a rendszerbe pumpált energia nem extenzív, hanem $O(1)$ szerint skálázódik. Lokális kvantum kvencs például, amikor a tisztán globális kvencs esetéhez képest a H_{post} Hamilton-operátor két tag összegeként áll elő: egy transláció-invariáns és egy lokális tag összegeként (ahol az utóbbi elrontja a rendszer eltolási szimmetriáját) és a rendszert továbbra is H_{post} alapállapotából indítjuk. Egy másik példa, ha a H_{pre} áll egy eltolás-invariáns és egy lokális tagból, a rendszert ennek alapállapotból indítjuk, a H_{post} viszont rendelkezik transláció-invarianciával. Ekkor ha H_{post} teljesen megegyezik a H_{pre} eltolás-invariáns részével, akkor lokális, míg ha nem, akkor egy lokális és egy globális kvantum kvencs kombinációja határozza meg a rendszer dinamikáját.

5.2.1. Kvantum kvencs a TFIM-ben

A kvantum kvencsek leírása a transzverz térbeli Ising modell keretein belül már egy évek óta vizsgált probléma [10,15,16]. Ferromágneses fázisban egy kvantum kvencs hatására létrejövő időfejlődés [17,18] során a rendszerben lévő, korábban már tárgyalt, kvázirészecskének megfeleltetett doménfalak, vagyis a rendszer gerjesztései terjesztik a korrelációkat és összefonódást, így alakul ki az egyensúlyi állapot [16].

Munkám során a TFIM-ben terjedő kvantum kvencs egy lehetséges esetét numerikus eszközök segítségével vizsgáltam, Python programozási nyelv használatával. Az általam vizsgált, időfejlesztő Hamilton-operátor az (1) operátor volt, $L = 20$ és - ahogy már említettem - $J = 1$ választással, ferromágneses állapotban. A kiinduló állapot a következő kvantumállapot volt:

$$|\psi(0)\rangle = \hat{S}_j|+\rangle,$$

ahol $|+\rangle$ az a polarizált állapot, ahol minden spin "felfelé áll", $\hat{S}_j$ pedig a j -edik spint átfordító operátor:

$$\hat{S}_j = \underbrace{\mathbb{1}_{2 \times 2} \oplus \dots \oplus \mathbb{1}_{2 \times 2}}_{i-1} \oplus \hat{\sigma}_z \oplus \underbrace{\mathbb{1}_{2 \times 2} \oplus \dots \oplus \mathbb{1}_{2 \times 2}}_{L-i},$$

ahol a szimuláció során mindig a $j = L/2$ választással éltem. Az $\hat{S}_j$ operátor leprogramozása egyszerű feladat, nem olyan könnyű viszont előállítani a $|+\rangle$ állapotot. Ehhez nagyon hasznos a következő eljárás, amit én is alkalmaztam ennek megkonstruálásra: legyen $|v_1\rangle$ és $|v_2\rangle$ a numerikusan kapott két alapállapot. Ekkor

$$|+\rangle = \alpha|v_1\rangle + \beta|v_2\rangle \quad \text{és} \quad |-\rangle = \beta|v_1\rangle - \alpha|v_2\rangle,$$

ahol $|-\rangle$ az a polarizációs állapot, amikor minden spin "lefelé áll". A fenti kifejezésben α és β konstansok, melyekre teljesül, hogy $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$. Megmutatható, hogy ha kiszámoljuk az

$$m_{ab}^i = \langle v_a | \hat{m}_i | v_b \rangle, \quad a, b \in \{1, 2\}$$

mátrixot, akkor ennek a sajátértékei $\pm m_i$, a sajátvektoraira pedig rendre

$$|1\rangle = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \quad \text{és} \quad |2\rangle = \begin{pmatrix} \beta \\ -\alpha \end{pmatrix}$$

adódik, tehát az előbbi mátrixot megkonstruálva, majd diagonalizálva kiszámolhatjuk a $|+\rangle$ állapotot. A fenti kifejezésben $\hat{m}_i$ az i -edik spin helyén lévő mágneszettség operátora (34), m_i pedig az utóbbi várható értéke alapállapotban. Nem túl nagy térfogat esetén a $|0\rangle_{\text{NS}}$ és $|0\rangle_{\text{R}}$ állapotok energiája között véges eltérés van, így elméletileg a $|v_1\rangle, |v_2\rangle$ állapotok ezeknek felelnek meg, viszont ez a véges különbség lehet annyira kicsi, hogy numerikusan gyakorlatilag degenerált lesz az alapállapot, ami azt eredményezi, hogy a numerikusan kapott két, legalacsonyabb energiájú állapot ezek valamilyen kombinációjaként áll elő. Ezért van szükség erre a kicsit körülményesebb eljárásra: ha nem lenne ez a numerikus hiba, akkor a konstansok értéke egyszerűen $\alpha = \beta = 1/\sqrt{2}$ lenne. A fejezet elején bevezetett osztályozás alapján a fentiekben leírt és általam vizsgált kvantum kvencs lokális.

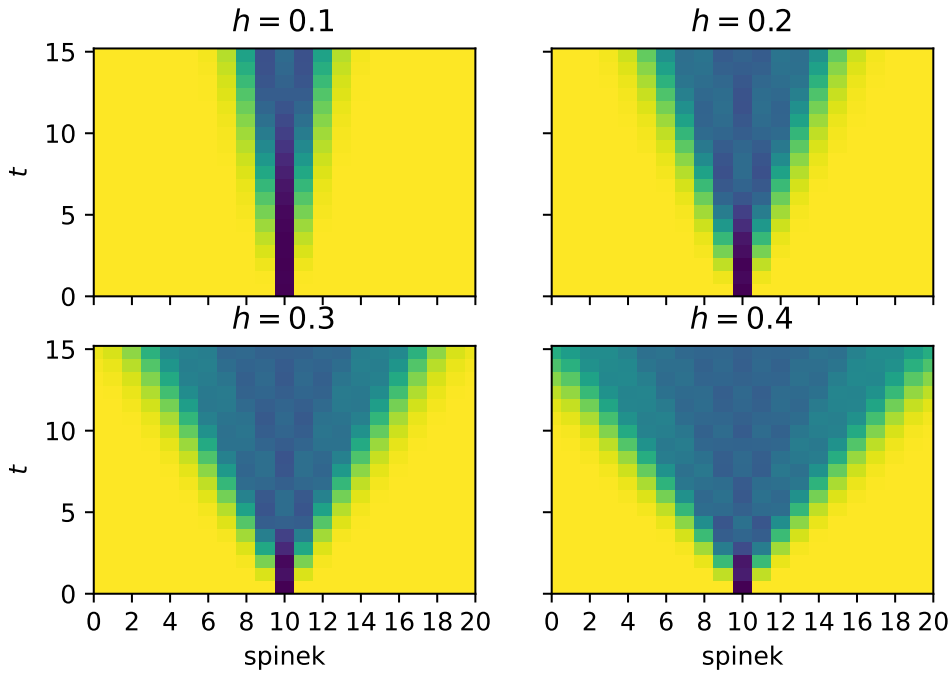
A szimuláció során a kezdeti $|\psi(0)\rangle$ kvantumállapotot fejlesztettem időben a

$$|\psi(t)\rangle = e^{-iHt}|\psi(0)\rangle$$

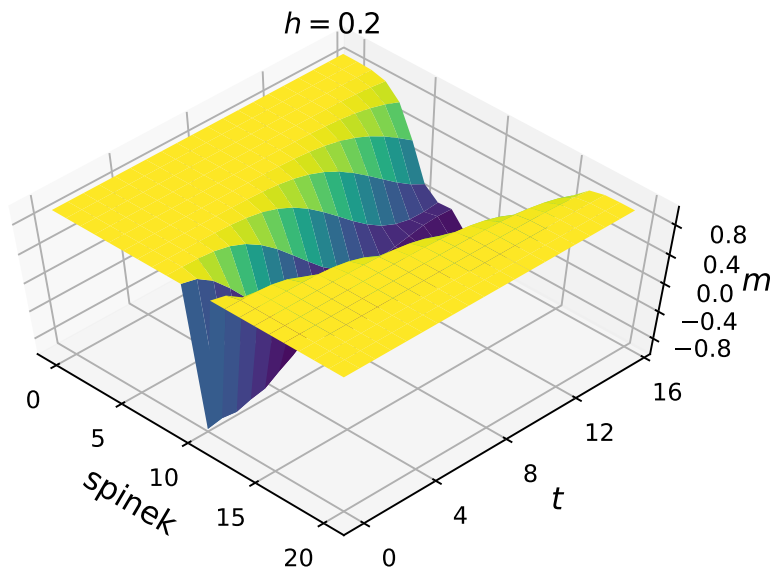
egyenletnek megfelelően és minden időpillanatban kiszámoltam minden spin helyén a (34) mágneszettség várható értékét (a továbbiakban $\langle\psi(t)|\hat{m}_i|\psi(t)\rangle \equiv m(i)$) a rendszert leíró aktuális hullámfüggvény segítségével. Több különböző $h < 1$ értéket vizsgáltam, melyek közül a $h \in \{0.1, 0.2, 0.3, 0.4\}$ értékkel jellemezhető rendszerek mágneszettségének időfejlődése a 3. ábrán látható. A szemléletesebb kép kedvéért a $h = 0.2$ eset időfejlődését a 4. ábrán háromdimenziós formában is megjelenítettem.

Az ábrákon több dolgot is megfigyelhetünk. Először is láthatunk egy jellegzetes fénykúpot, amin adott pillanatban kívül található spineket a rendszerben keltett "zavar" gyakorlatilag még egyáltalán nem érte el. Ez annak a következménye, hogy lokális kvencset indítottunk el a rendszerben. Azt is megfigyelhetjük, hogy a kvencs terjedése a rendszerben jól lokalizált, ellentétes irányban mozgó, konstans csoportsebességű hullámcsomagok formájában történik, melyek az időterjedés folyamán alig folynak szét, ami arra enged következtetni, hogy a rendszer modellezhető kvázirészecskék segítségével, amiről persze a szakirodalom alapján tudjuk is, hogy jól működik [10, 15]. Ahhoz, hogy a kvázirészecskékkal való modellezés alkalmazható legyen, három dolognak kell teljesülnie: a kvantummechanikai állapotot leíró hullámcsomag(ok)nak jól lokalizálnak kell lenniük, az időfejlődés során nem folyhat(nak) szét jelentősen, valamint a kvázirészecskékre ható potenciál hely szerinti deriváltjának megváltozása megfelelően kicsiny kell legyen (a hullámhosszhoz képest, ami az impulzus reciprokával arányos), ami az Ehrenfest-tételből adódó feltétel. Esetünkben az analitikus megoldás tárgyalásánál láttuk, hogy a rendszer gerjesztéseit nemkölcönható fermionokkal modellezhetjük, vagyis a részecskékre ható potenciál zérus, és mivel a szétfolyás is csekély mértékű, a kvázi-klasszikus közelítés alkalmazható. A futási eredmények alapján (3. és 4. ábra) megállapíthatjuk, hogy a hullámcsomag(ok) annál gyorsabb(ak), minél erősebb a transzverzális tér, vagyis minél nagyobb a h érték. Azt biztosan tudjuk, hogy a két hullámcsomaggal leírható kvantumállapotban több, különböző részecskeszámú állapot megjelenik, hiszen ez teszi térben lokalizálttá. Egyébként belátható [19], hogy a maximális sebességű kvázirészecske gerjesztés $v_{\text{max}} = 2Jh = 2h$ sebességgel terjed a rendszerben, ez határozza meg a "fénykúpot".

Érdekes kérdés, hogy pontosan milyen kvázirészecskeszámú és azon belül milyen impulzusú kvázirészecskéket tartalmazó állapotok jelennek meg a két, ellentétes irányú hullámcsomaggal jellemezhető állapotban. Azt biztosan tudjuk, hogy csak páros részecskét tartalmazó állapotok keveredhetnek be, hiszen ferromágneses fázisban vagyunk. Mivel a futási eredmények alapján a fénykúpon belüli tartomány közel homogén mágneszettségűnek tekinthető, valamint minél magasabb részecskeszámú az állapot, annál több energia szükséges az állapot betöltéséhez és a mi kezdeti állapotunkkal viszonylag kevés energiát vittünk a rendszerbe, ezért feltételezhető, hogy legnagyobb súllyal az alapállapotok és a kétrészecske állapotok szerepelnek a rendszert leíró hullámfüggvényben. Ezt a feltevést dolgozatomban numerikus eszközök segítségével vizsgáltam: több különböző L lánc hossz és $h < 1/3$ érték esetén kiszámoltam az alapállapotok és a kétrészecskés állapotok kezdeti állapottal vett átfedéseinek négyzetösszegét (tehát ezen állapotok valószínűségeinek összegét), valamint összehasonlítottam az átfedések négyzetével súlyozott energiaösszeget az alap- és kétrészecskés állapotokra a Hamilton-operátor kiindulási állapotban számolt várható értékével, vagyis a teljes várható energiával (ezen mennyiségek mindegyike időfüggetlen kell hogy legyen, hiszen zárt kvantum rendszer indítunk tiszta állapotból). Az utóbbi azért hasznos, mert így nem kell az összes többi bekeveredő állapot kezdeti állapottal vett



3. ábra. A mágneszettség várható értékének időfejlődése a TFIM keretein belül, lokális kvantum kvencs esetén, különböző erősségű transzverz terek mellett.



4. ábra. A mágneszettség várható értékének időfejlődése a TFIM keretein belül, lokális kvantum kvencs esetén, $h = 0.2$ erősségű transzverz tér mellett.

átfedéseinek négyzetösszegét is kiszámolni és ezt összehasonlítani az alapállapotok és a kétrészecskes állapotok kezdeti állapottal vett átfedéseinek négyzetösszegével a numerikus pontatlanságok és hibák feltérképezésének céljából. Ugyanis amennyiben a kiszámolt teljes energia várható érték és a bekeveredési valószínűségekkel súlyozott alapállapoti és kétrészecske állapoti energiák összege jó közelítéssel

megegyezik, akkor az energiamegmaradás miatt az időfejlődés során végig elmondhatjuk, hogy a dinamikát jól közelíthetjük kváziklasszikusan, csupán kétrészecskés állapotokat felhasználva. A $h < 1/3$ feltételre azért volt szükség, mert ekkor teljesül, hogy minden kétrészecské állapot energiája alacsonyabb a magasabb részecskeszámmal bíró állapotok energiájánál, így az előbbi állapotok egyszerűen elkülöníthetőek a numerikusan számolt spektrumban. Fontos megjegyezni, hogy a valószínűségek kiszámolásához a Hamilton-operátor adott degenerált altereihez tartozó sajátvektorokat ortonormálnak kell választani (mivel H hermitikus, így az ortogonalitás különböző sajátértékekhez tartozó sajátvektorok esetén automatikusan teljesül) amit úgy tehetünk meg, hogy az adott, degenerált alterekbe eső, numerikusan kiszámolt sajátvektorok halmazán Gram-Schmidt ortogonalizációt hajtunk végre. A fentiek alapján az általam numerikusan számolt eredmények az 1., a 2. és a 3. táblázatban láthatóak.

L	$p(h = 0.05)$	$p(h = 0.1)$	$p(h = 0.15)$	$p(h = 0.2)$	$p(h = 0.25)$	$p(h = 0.3)$
4	0.898349	0.739468	1.0	1.0	1.002118	0.598077
6	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0
8	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0
10	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0

1. táblázat. Az alapállapotok és a kétrészecskés állapotok kezdeti állapottal vett átfedéseinek abszolút értékének négyzetösszege (tehát az állapotok valószínűségeinek összege) különböző L és h értékek mellett.

L	$E'(h = 0.05)$	$E'(h = 0.1)$	$E'(h = 0.15)$	$E'(h = 0.2)$	$E'(h = 0.25)$	$E'(h = 0.3)$
4	3.590642	2.945269	3.977561	3.960190	3.946561	2.308197
6	3.997500	3.989981	3.977407	3.959710	3.936807	3.908595
8	3.997499	3.989981	3.977404	3.959695	3.936751	3.908435
10	3.997499	3.989981	3.977404	3.959695	3.936748	3.908422

2. táblázat. Az alapállapotok és a kétrészecskés állapotok kezdeti állapottal vett átfedéseinek abszolút értékének négyzetösszegeivel súlyozott, az alapállapothoz viszonyított energiaértékek összege, a (1) Hamilton-operátor egységeiben, különböző L és h értékek mellett.

L	$\Delta E'(h = 0.05)$	$\Delta E'(h = 0.1)$	$\Delta E'(h = 0.15)$	$\Delta E'(h = 0.2)$	$\Delta E'(h = 0.25)$	$\Delta E'(h = 0.3)$
4	0.406859	1.04474372	0.0	0.0	-0.008609	1.602720
6	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
8	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
10	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0

3. táblázat. Az alapállapotok és a kétrészecskés állapotok kezdeti állapottal vett átfedéseinek abszolút értékének négyzetösszegeivel súlyozott, az alapállapothoz viszonyított energiaértékek összegének és az alapállapothoz viszonyított, kezdeti állapotban számolt teljes energia várható értékének különbsége, a (1) Hamilton-operátor egységeiben, különböző L és h értékek mellett.

Az 1. táblázatban különböző L és h értékek mellett a

$$p(h) = \sum_j |\langle j | \psi(0) \rangle|^2, \quad j \in \{\text{alap- és kétrészecskés állapotok}\}$$

mennyiségek vannak feltüntetve, ahol $|\psi(0)\rangle$ a kezdeti állapotot jelöli, $|j\rangle$ pedig az alap- és kétrészecskes állapotokon fut végig. A 2. táblázatban az

$$E'(h) = \sum_j |\langle j|\psi(0)\rangle|^2 (E_j - E_0), \quad j \in \{\text{alap- és kétrészecskes állapotok}\}$$

mennyiségeket, míg a 3. táblázatban a

$$\Delta E'(h) = (\langle i|H|\psi(0)\rangle - E_0) - \sum_j |\langle j|\psi(0)\rangle|^2 (E_j - E_0), \quad j \in \{\text{alap- és kétrészecskes állapotok}\}$$

mennyiségeket jelenítettem meg. A táblázat értékeinek pontosságát nagyjából hat tizedesjegynyire becsültem, bár látható, hogy $L = 4$, $h = 0.025$ értékek mellett valamiféle nagyobb numerikus hiba is jelentkezik (hiszen az alapállapotok és a kétrészecske állapotok valószínűségeinek összege a becsült hibánál nagyságrendekkel nagyobb értékkel 1 felett van és ennek megfelelően a kiszámolt $E'(h = 0.25)$ energiaösszeg is nagyobb a teljes energiánál). Az mindenesetre megállapítható, hogy $L > 4$ esetben ilyen effektusok már nem jelentkeznek. A táblázatokban megjelenített értékek alapján azt a következtetést vonhatjuk le, hogy nagy L lánc hosszúságok ($L > 4$) és $h < 1/3$ esetén a kezdeti $|\psi(0)\rangle$ állapotba jó közelítéssel (6 tizedesjegy pontossággal) csak az alapállapotok és a kétrészecske állapotok keverednek be, mivel ezek bekeveredési valószínűségeinek összege 6 tizedesjegy pontossággal egyet ad. Mivel a $h = 1/3$ pont fizikailag nem egy kitüntetett hely (pl. nem történik itt fázisátalakulás) így feltételezhetjük, hogy az előbbi állítás nemcsak $h < 1/3$ esetben, hanem az egész ferromágneses tartományon teljesül.

Az, hogy ennyire jól közelíthetjük az alapállapotok és a kétrészecskes állapotok kombinációjával a rendszer kvantumállapotát azért fontos, mivel munkám folytatásaként később kvázi-klasszikus képben szeretném vizsgálni a rendszert kvázirészecskék segítségével, aminek szempontjából ez egy jól hasznosítható eredmény.

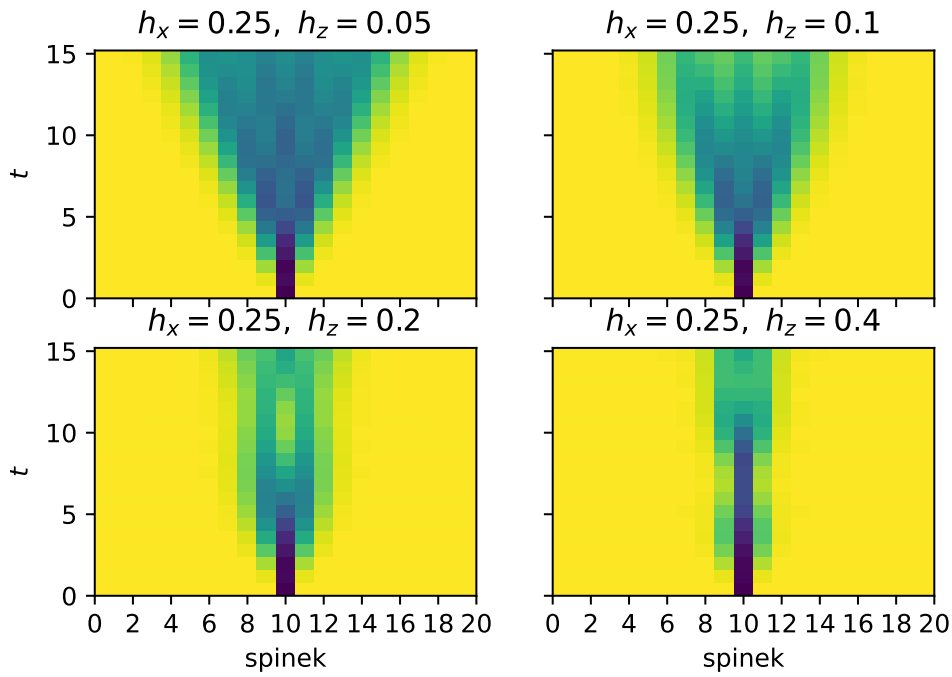
5.2.2. Kvantum kvencs a TFIM longitudinális taggal kiegészített változatában

Ebben az alfejezetben azt az érdekes kérdést vizsgáljuk meg, hogy mi történik a kvantum kvencsek időfejlődésével akkor, ha a TFIM modellhez képest bekapcsolunk egy longitudinális teret, amivel megsértjük a modell integrálhatóságát [20]. Ekkor a TFIM (1) Hamilton-operátort ki kell egészítenünk a longitudinális teret leíró taggal az alábbi módon

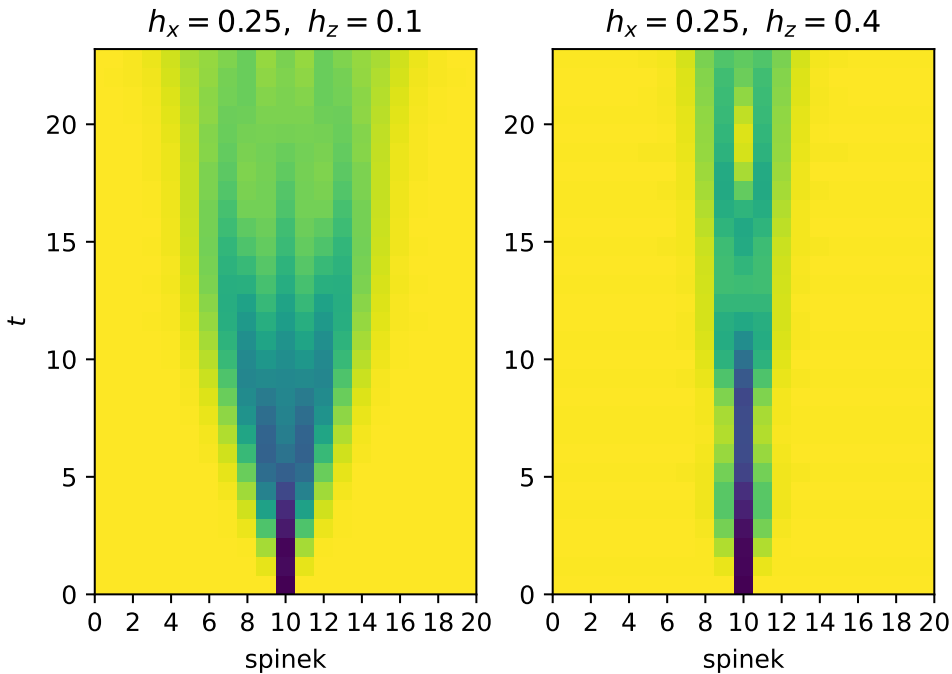
$$H = -J \sum_i \hat{\sigma}_i^z \hat{\sigma}_{i+1}^z - Jh_x \sum_i \hat{\sigma}_i^x - Jh_z \sum_i \hat{\sigma}_i^z, \quad (35)$$

ahol $h_x \equiv h$ a korábbi jelöléssel, h_z pedig a longitudinális tér dimenziótlan csatolási állandója, ami az utóbbi erősségét adja meg.

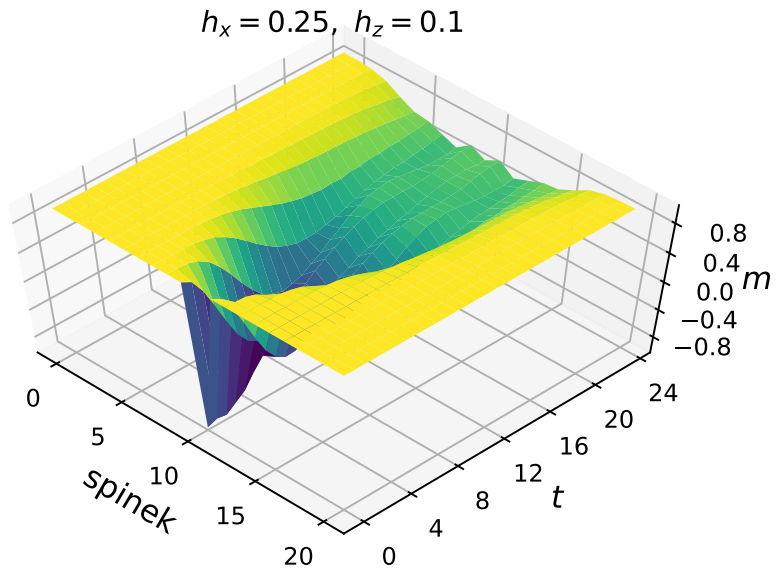
Vizsgáljuk meg először azt az esetet, amikor a longitudinális tér egyirányú az eredeti mágnesezettséggel, vagyis $h_z > 0$, amit bezáró fázisnak nevezünk [20]. Munkám során elsősorban numerikusan vizsgáltam az ilyen rendszerben terjedő kvantum kvencseket. Az általam használt időfejlesztő operátor ekkor a fentiek alapján a (35) Hamilton-operátor volt $h_z > 0$ és ferromágneses ($h_x < 1$) esetben, $L = 20$ és $J = 1$ választással. A kiinduló állapotot a tisztán transzverz TFIM-ben terjedő kvantum kvencs tárgyalásánál ismeretett kiinduló állapothoz teljesen hasonlóan állítottam elő, csak más Hamilton-operátort (35) diagonalizáltam. A korábbi definícióval ez egy lokális kvencs. Az időfejlődés során, akárcsak a tisztán transzverz TFIM esetén, a mágnesezettség várható értékét számoltam ki minden időpillanatban és minden spin helyén. A szimuláció során mindig a $h_x = 0.25$ értékkel dolgoztam, viszont több különböző h_z értéket vizsgáltam, melyek közül a $h_z \in \{0.05, 0.1, 0.2, 0.4\}$ értékkel jellemezhető rendszerek mágnesezettségének időfejlődése az 5. ábrán látható. A $h_z \in \{0.1, 0.4\}$ értékek esetén a hosszabb időfejlődés szemléltetésének céljából megjelenítettem nagyobb időtartományt lefedő "hőterkép" és háromdimenziós ábrákat is (6. ábra, 7. ábra és 8. ábra).



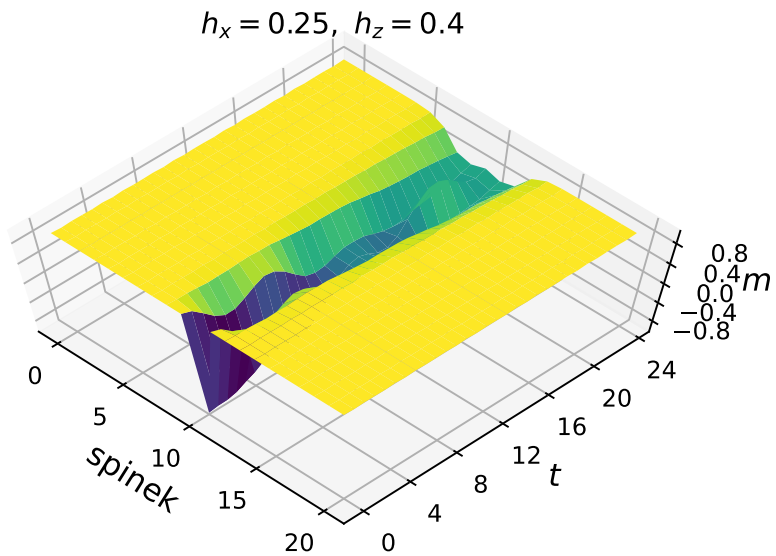
5. ábra. A mágnesezettség várható értékének időfejlődése a longitudinális taggal kiegészített TFIM keretein belül ferromágneses fázisban, $h_z > 0$ és lokális kvantum kvencs esetén, különböző erősségű longitudinális terek mellett.



6. ábra. A mágnesezettség várható értékének (hosszabb) időfejlődése a longitudinális taggal kiegészített TFIM keretein belül ferromágneses fázisban, $h_z > 0$ és lokális kvantum kvencs esetén, különböző erősségű longitudinális terek mellett.



7. ábra. A mágnesezettség várható értékének időfejlődése a longitudinális taggal kiegészített TFIM keretein belül ferromágneses fázisban, lokális kvantum kvencs esetén és $h_z = 0.1$ erősségű longitudinális tér mellett.



8. ábra. A mágnesezettség várható értékének időfejlődése a longitudinális taggal kiegészített TFIM keretein belül ferromágneses fázisban, lokális kvantum kvencs esetén és $h_z = 0.4$ erősségű longitudinális tér mellett.

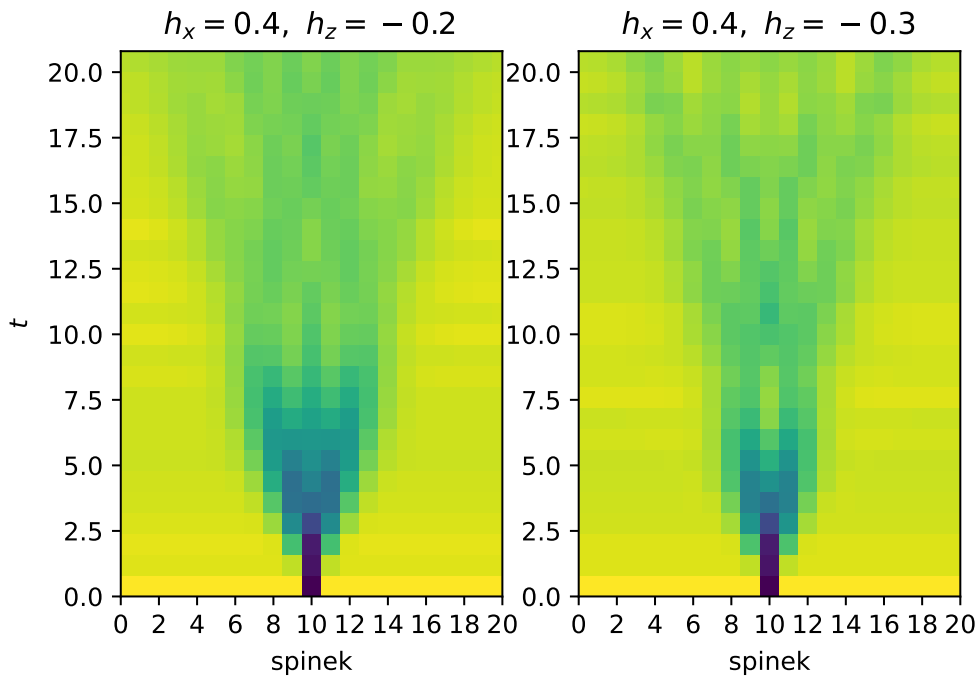
A tisztán transzverz TFIM keretein belül vizsgált kvantum kvencsekhez képest itt valami egészen mást látunk: a mágnesezettségben keltett "zavar" nem terjed szét korlátlanul a rendszerben, hanem jó közelítéssel a tér egy korlátozott tartományában marad, bizonyos spineket egyáltalán nem ér el, amit bezárásnak ("confinement"-nek) nevezünk. Ezt a jelenséget globális kvencsekben már vizsgálták [20], és ennek eredményei alapján az általam vizsgált és az ábrákon bemutatott lokális kvencsekben (nem tökéletesen periodikus) oszcillációkat várunk. Az 5. ábrán valószínűleg túl rövid az időfejlődés, hogy ez jól kivethető legyen, viszont az 6. ábrán, $h_z = 0.4$ esetben már megfigyelhetünk oszcillációra emlékeztető időfejlődést. Az oszcilláció nemcsak analitikus okok miatt lehet aperiodikus: ha bizonyos korrelációk elérik a térfogat határát, akkor ez megzavarja az időfejlődést, ami az oszcilláció szétesését eredményezi, valószínűleg ezt látjuk a 6. ábrán mindkét esetben az időfejlődés végén. Az ábrákon, ahogy a tisztán transzverz TFIM esetén is, visszatükröződik a kvantum kvencs lokalitása. Megfigyelhető továbbá, hogy minél erősebb a longitudinális tér, annál korlátozottabb, kisebb a térnek azon tartománya, ahova a "zavar" eljut.

A tisztán transzverz TFIM-ben nem történik termalizáció, mivel a modell integrálható, viszont láthattuk, hogy egy kvantum kvencs hatására létrejövő időfejlődés folyamán a rendszer az egyensúlyi állapotához tart, az ún. általánosított Gibbs-sokaksághoz. Ha viszont bekapcsolunk egy longitudinális teret, akkor az ún. "Eigenstate Thermalisation Hypothesis" [21, 22] alapján naívan termalizációt várnánk, vagyis azt, hogy a "zavar" szétterjed a rendszerben, kialakul a termikus egyensúlyi állapot. Paramágneses fázisban ($h_x > 1$) ez be is következik [23–25], viszont az általam vizsgált ferromágneses ($h_x < 1$) tartományon - ahogy már az előbbiekben is utaltam rá - egyáltalán nem ez történik. A tisztán transzverz TFIM-hez hasonlóan, a ferromágneses fázisban a domének közötti falakra (kinkek) mint kvázirészecskékre tekinthetünk, tehát ebben az esetben is működik a kváziklasszikus közelítés. Ha a longitudinális tér egyirányú az eredeti mágnesezettséggel, vagyis bezáró fázisban vagyunk ($h_z > 0$) akkor ez egy bezáró erőt jelent a doménfalak között. Ekkor a részecskékre ható bezáró erő a kinkek távolságával arányos (lineáris) potenciálból származtatható:

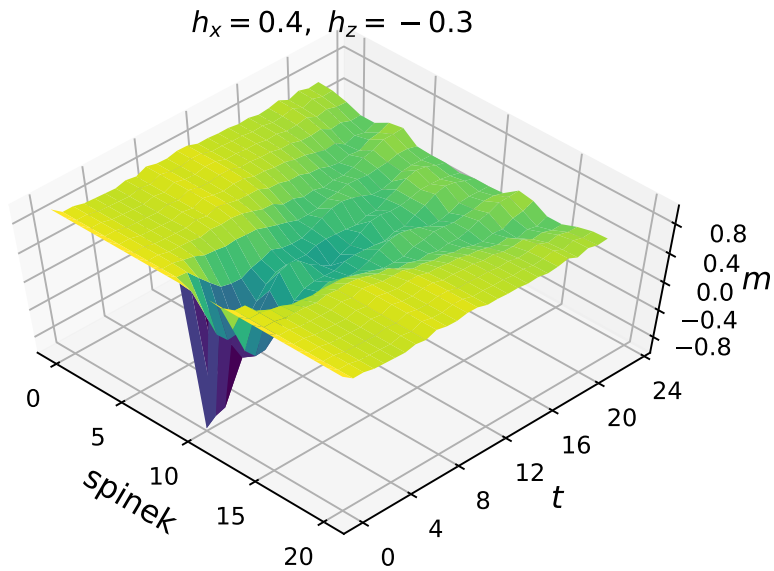
$$V(r) = 2Jh_zmr,$$

ahol m a mágnesezettség kinkek közötti várható értékét jelöli, r pedig a kinkek közötti távolság. Ezzel ún. mezon állapotok alakulnak ki, és a doménfalak nem tudnak eltávolodni egymástól, vagyis a kvázirészecskék lokalizálódnak, ami megakadályozza az egyensúly kialakulását [20].

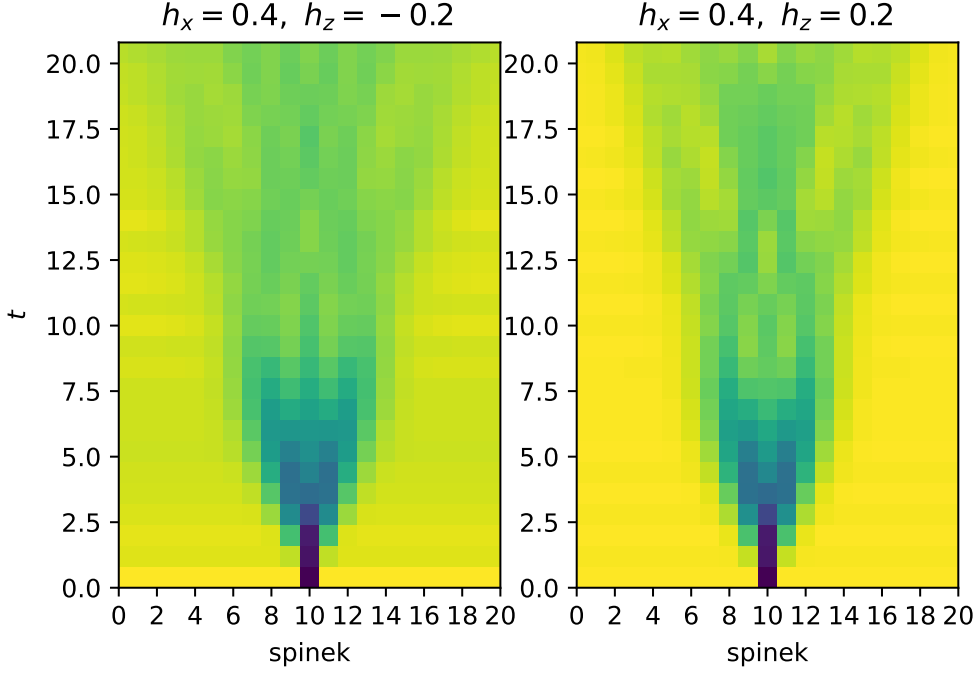
A következőekben vizsgáljuk meg azt az esetet, hogy mi történik, ha a longitudinális tér ellentétes irányú az eredeti mágnesezettséggel, vagyis a (35) Hamilton-operátorban $h_z < 0$. Ezt az esetet én munkám során szintén elsősorban numerikus szimulációk formájában vizsgáltam. A szimulációk során általam használt időfejllesztő operátor a bezáró fázishoz hasonlóan a (35) Hamilton-operátor volt ferromágneses ($h_x < 1$) fázisban, $L = 20$ és $J = 1$ választással, viszont $h_z < 0$ esetben. Kiinduló állapotnak ekkor azt a mesterségesen létrehozott állapotot választottam, amikor minden spin tisztán felfelé áll, kivéve a középső $L/2$ -ediket, ami lefelé. A fenti definíció alapján ez egy globális és egy lokális kvantum kvencs kombinációját jelenti. Az időfejlődés során, ahogy a korábbi szimulációk alatt is, a mágnesezettség várható értékét számoltam ki minden időpillanatban és minden spin helyén. A szimuláció során mindig $h_x = 0.4$ értékkel dolgoztam, viszont több különböző h_z értéket vizsgáltam, melyek közül a $h_z \in \{-0.2, -0.3\}$ értékekkel jellemezhető rendszerek mágnesezettségének időfejlődése a 9. ábrán látható. Ezen felül a $h_z = -0.3$ esetet háromdimenziós ábrán is megjelenítettem (10. ábra), valamint összehasonlítóképp feltüntettem egy ábrát (11. ábra), amin a bezáró esetben, $h_x = 0.4$, $h_z = 0.2$ paraméterekkel, ferromágneses kvázisban, lokális kvencssel végzett és a nem bezáró esetben, $h_x = 0.4$, $h_z = -0.2$ paraméterekkel, ferromágneses kvázisban, lokális és globális kombinációjú kvencssel végrehajtott szimuláció eredményei láthatók.



9. ábra. A mágnesezettség várható értékének időfejlődése a longitudinális taggal kiegészített TFIM keretein belül ferromágneses fázisban, $h_z < 0$, lokális és globális kvantum kvencs kombináció esetén, különböző erősségű longitudinális terek mellett.



10. ábra. A mágnesezettség várható értékének időfejlődése a longitudinális taggal kiegészített TFIM keretein belül ferromágneses fázisban, lokális és globális kvantum kvencs kombináció esetén és $h_z = -0.3$ erősségű longitudinális tér mellett.



11. ábra. A mágnesezettség várható értékének időfejlődése a longitudinális taggal kiegészített TFIM keretein belül ferromágneses fázisban, $h_x = 0.4$ erősségű transzverzális tér mellett, két esetben: $h_z = 0.2$ paraméterrel és lokális kvencssel, valamint $h_z = -0.2$ paraméter mellett, lokális és globális kvantum kvencs kombináció esetén.

A szimulációk eredményeként a nem bezáró, $h_z < 0$ esetben is azt tapasztaljuk, hogy a "zavar" nem terjed szét korlátlanul a rendszerben, hasonló jelenséget látunk, mint bezáró fázisban, azonban a 11. ábra tanulmányozásával észrevehetjük, hogy a kialakuló időfejlődési mechanizmus bár nagyon hasonló, mégis különbözik. A szakirodalom alapján ebben az esetben is (nem feltétlenül tökéletesen periodikus) oszcillációkat várunk [19], viszont ezen oszcillációk fizikai magyarázata jelentősen különbözik a bezáró esetétől. A futási eredményekről készült ábrákon az oszcillációs viselkedés nem tükröződik látványosan, sőt a kialakuló, bezárásra emlékeztető tartományok szétesését látjuk. Az előbbi részben annak köszönhető, hogy valószínűleg ebben az esetben is kevés volt a szimulációs idő. Az oszcilláció szétesését elsősorban valószínűleg az okozza, hogy a kialakuló tartományok több oszcilláló "buborék" időfejlődésének kombinációjaként állnak elő, amik közül bizonyos buborékok mérete meghaladhatja a rendszerméretet, tehát ebben az esetben is a térfogat (túlságosan kicsi) véges mivolta okozza a problémát. Az ábrákon megfigyelhetjük továbbá, hogy a kvencs következményeképp a mágnesezettség nemcsak a korlátos, elérhető tartományon belül, hanem kis mértékben azon kívül is megváltozik, ez a globális kvencs következménye. Ezen kívül a futási eredmények alapján azt a következtetést is levonhatjuk, hogy a bezáró esethez hasonlóan itt is igaz, hogy minél erősebb a longitudinális tér, annál korlátozottabb, kisebb a "zavar" által elérhető tartomány (ld. 9. ábra), vagy máshogy fogalmazva a létrejövő "buborékok" mérete.

Ha a longitudinális mágnesezettség előjele ellentétes az eredeti tér előjelével, vagyis nem bezáró fázisban vagyunk ($h_z < 0$), akkor a bezárás eseténél röviden ismertett kvázirészecske képben gondolkodva azt mondhatjuk, hogy ekkor taszító erő hat a kinkek között [19]. Viszont ez alapján naívan azt gondolhatnánk, hogy ekkor a "zavar" még gyorsabban szétterjed a rendszerben, mint a tisztán transzverz TFIM keretein belül, vagyis az (ebben az esetben termikus) egyensúlyi állapot még gyorsabban bekövetkezik. A szimulációs eredmények alapján azonban láthatjuk, hogy valami egészen más történik: egyáltalán nem alakul ki az egyensúlyi állapot. Ez az állítás elméleti megfontolásokkal is alátámasztható: megmutatható [19], hogy a taszító erő szintén oszcillációra kényszeríti a doménfalakat, amit Bloch-oszcillációnak nevezünk. A Bloch-oszcillációk kialakulása a modell rács-struktúrájával áll

kapcsolatban, és kváziklasszikus közelítésben könnyen megérthető. Azt korábban már láttuk, hogy $h_x < 1$, $h_z = 0$ esetben kváziklasszikus képben a kinkek mint nemkölcönható fermionok viselkednek $\epsilon(k)$ diszperziós relációval, ahol

$$\epsilon(k) = 2J\sqrt{1 + h_x^2 - 2h_x \cos k}.$$

Kváziklasszikus képben ezek a fermionok a diszperziós reláció alapján számolható csoportsebességgel haladnak:

$$v(k) = \frac{\partial \epsilon(k)}{\partial k}.$$

Ha most bekapcsolunk egy $h_z < 0$ longitudinális teret, akkor a kinkek között taszító erő lép fel. Első közelítésben hanyagoljuk el az $\epsilon(k)$ diszperziós reláció longitudinális tér hatására létrejövő korrekcióját, valamint vizsgáljuk csak a rendszer állapotába bekeveredő azon kétrészecske állapotokat, amik két, ellentétesen haladó kvázirészecskét írnak le, vagyis egy kink-anitkink párt. Ekkor a kinkek között a longitudinális mágneses tér hatására létrejövő taszító potenciál:

$$V(r) = -\chi r = -2m|h_z|r = 2|h_z|(1 - h_x^2)^{1/8},$$

ahol r a kinkek távolsága. Ekkor a szemiklasszikus mozgásegyenletek a következőképp írhatók:

$$\dot{r} = 2\frac{\partial \epsilon(k)}{\partial k}, \quad \dot{k} = -\frac{1}{2}\frac{\partial V}{\partial r} = \frac{\chi}{2},$$

ahol a 2-es és 1/2-es faktorok amiatt jelennek meg, mivel két kink relatív mozgását vizsgáljuk. A második egyenletből azonnal következik, hogy

$$k(t) = k_0 + \frac{1}{2}\chi t,$$

aminek segítségével az első egyenlet is megoldható:

$$r(t) = \frac{4}{\chi} [\epsilon(k_0 + \chi t/2) - \epsilon(k_0)] + r_0,$$

ahol r_0 a kinkek kezdeti távolsága, $\pm k_0$ pedig a kinkek kezdeti impulzusa. Mivel $\epsilon(k)$ periodikus, ezért a kink-sebesség előjelet vált, amikor a k impulzus átlépi a Brillouin-zóna határát, vagyis amikor $k = \pm\pi$. Ekkor tehát a kinkek visszafordulnak, ami azt eredményezi, hogy visszatérnek az eredeti pozíciójukba és valamilyen $T(k_0)$ idő elteltével összeütköznek, amikor is az általuk határolt buborék "összeomlik". Ez akkor következik be, amikor

$$k_0 + \chi T(k_0)/2 = 2\pi - k_0.$$

Ebben a pontban a kink és az antikink visszaverődik egymásról és elkezdődik a folyamat előlről, így alakul ki tehát a buborékok Bloch-oszcillációja. Persze a rendszert leíró teljes (nem feltétlenül tökéletesen periodikus) oszcilláció jó közelítéssel több ilyen oszcilláló buborék kvantumozott szuperpozíciójaként alakul ki, melyek kezdeti mérete és impulzusa is eltér.

Az "egy átfordított spin" állapotból induló globális kvantum kvencsek vizsgálata egyébként jelenleg is aktívan kutatott kérdés, ezzel foglalkozik például a frissen megjelent [26] preprint is.

6. Kitekintés és további tervek

A későbbiekben munkám folytatásának első lépéseként szeretnék informatívabb, hosszabb idejű, nagyobb felbontású és nagyobb térfogatú rendszer választásával szimulációkat készíteni, melyeket összehasonlítnék a szakirodalomban megtalálható eredményekkel is [19, 20]. Egy lehetséges módszer a sokkal nagyobb térfogatú szimuláció megvalósításához az ún. TEBD módszer [27], ami segíthet áthidalni a korábban említett, túl kis rendszerméretekből fakadó problémákat.

Következő lépésként szeretném mélyebben megérteni a TFIM és ennek longitudinális térrel módosított változatának analitikus (már amikor lehetséges), kváziklasszikus leírását. Közelebb kerülhetünk a modell megértéséhez a rendszer bizonyos mennyiségeinek vizsgálatával is, ilyen például az összefonódottság, pontosabban a kiszámolható összefonódottsági entrópia. A rendszerben a kvantum kvencs nyomán létrejövő ellentétes irányba terjedő hullámcsomagok ugyanis összefonódott állapotban vannak. A tisztán transzverz TFIM keretein belül ez az összefonódottság az egyensúlyi állapot kialakulása folyamán delokalizálódik, viszont longitudinális tér jelenlétében lokális marad, hiszen ekkor nem alakul ki egyensúlyi állapot.

A longitudinális mágneses tér bekapcsolásának hatására a rendszer transzportfolyamatainak jellege is megváltozik, hiszen a bezárás vagy a létrejövő Bloch-oszcillációk döntően megváltoztatják a rendszer időbeli dinamikáját: a kvázirészecskék lokalizálódnak. További munkám fő célja a transzportfolyamatok elemzése bezáró fázisban, különböző kvantum spinlánc modellekben, így nemcsak az Ising-modell keretein belül, hanem például a Heisenberg modellben vagy a Potts-modellben. Az Ising-modell esetén ennek leírása már részben ismert [28], azonban más modellekben, illetve feltételek mellett még nem vizsgálták a problémát. A kutatómunka során mind numerikus eszközökkel, mind analitikus közelítésekkel tervezem vizsgálni a felvetett kérdéseket. A rendszerben létrejövő transzportfolyamatok vizsgálatát két fizikai szituációban tervezem elvégezni. Egyrészt, ha a rendszert inhomogénné tesszük az által, hogy belehelyezünk egy doménfalat (gerjesztést), akkor a rendszer továbbra is zárt marad, viszont már nem lesz sajátállapotban. A feladat tehát a rendszert leíró állapotfüggvény időbeni vizsgálata. A másik módszer, hogy a rendszert nyílnak tekintjük, a gerjesztést pedig valamilyen külső erő hatásának [29–31]. Ekkor a leíráshoz az ún. Lindblad-formalizmus [32] elsajátítása és használata szükséges.

7. Összefoglalás

Dolgozatom központi témája a kvantum spinláncok legegyszerűbb modelljének, a transzverz térbeli Ising modellnek (TFIM) analitikus és numerikus vizsgálata. Számos jelenség azonban, amit megfigyelhetünk ennek az egyszerű modellnek a keretein belül, megfigyelhető más, komplexebb rendszerekben is (például a kvantum fázisátalakulás), így a TFIM megértése és vizsgálata közben elsajátított ismeretek szélesebb körben is hasznosak.

Az 1. fejezet rövid bevezetője után dolgozatom 2. fejezetében ismertettem a kvantum fázisátalakulás fogalmát, majd bevezettem a transzverz térbeli Ising modell koncepcióját $T = 0$ hőmérsékleten.

A 3. fejezetben részletesen kifejtettem a TFIM határeseteit ($\hbar \rightarrow 0$ és $\hbar \rightarrow \infty$) majd ezek perturbatív vizsgálatát, továbbá bevezettem a kvázirészecskék perturbatív koncepcióját. A perturbációs számítás eredményeként megkaptuk, hogy a modell Hamilton-operátorának spektruma nemkölcsonható fermionikus kvázirészecskék egyrészecske energiatagjainak összegéből áll elő, amiről később láttuk, hogy nemcsak perturbatív esetben teljesül. A fejezet végén megismertettem az olvasót a Kramers-Vannier dualitás fogalmával, aminek segítségével meg tudtuk határozni a kritikus pont helyét, mely $h_c = 1$, ahol kvantum fázisátalakulás történik a rendszerben.

A 4. fejezetben először bevezettem a Jordan-Wigner transzformáció fogalmát, majd ismertettem a TFIM analitikus megoldásának lerövidített változatát, mely egy dolgot nem kezel precízen: a határfeltételeket, hiszen egyszerre tekintette a láncot végtelennek és választott periodikus határfeltételt. Ennek következtében az $L \rightarrow \infty$ határesetben jól visszakaptuk a spektrumot, viszont nem kaptunk információt a ferromágneses fázis spektrumának kétszeres degeneráltságáról. Az utóbbi probléma feloldásához a Majorana operátorok bevezetésén keresztül jutottunk el. A fejezet végén kitértem továbbá a ténylegesen véges rendszerbeli spektrumra és sajátállapotokra is.

Az 5. fejezetben a TFIM különböző változatainak numerikus vizsgálatával foglalkoztam. Elsősorban a különböző rendszerekben terjedő kvantum kvencseket vizsgáltam. A tisztán transzverz TFIM keretein belül a numerikus eredmények alapján arra a következtetésre juthatunk, hogy bekövetkezik az egyensúlyi állapot elérése, amit a szakirodalom is alátámaszt [10]. A numerikus eredmények alapján azt a következtetést is levonhatjuk, hogy nemcsak a modell kváziklasszikus leírása lehetséges, de ez jó közelítéssel csak kétrészecske állapotok segítségével megtehető. A tisztán transzverz TFIM elemzése után megvizsgáltam azt az esetet is, elsősorban numerikus eszközökkel, hogy mi történik ha a rendszerünkbe bekapcsolunk egy longitudinális mágneses teret is, milyen lesz ekkor a kvantum kvencsek nyomán létrejövő időfejlődés. Numerikusan azt tapasztaltam, majd analitikus megfontolásokkal alá is támasztottam, hogy ha a longitudinális tér iránya megegyezik az eredeti mágnesezettséggel, akkor bezárás következik be, vagyis a dinamika a rendszer egy bizonyos tartományára korlátozódik, aminek következtében oszcillációk alakulnak ki a mágnesezettségi profil időfejlődésében. Szintén numerikus tapasztalatok alapján azt a következtetést is levonhatjuk, hogy abban az esetben is hasonló oszcillációk jönnek létre, ha a longitudinális tér előjele ellentétes az eredeti mágnesezettséggel, viszont ezen oszcillációk fizikai magyarázata jelentősen különbözik a bezáró dinamikáétól. Ebben az esetben is analitikus megfontolásokkal támasztottam alá a tapasztaltakat, arra a következtetésre jutva, hogy a mágnesezettségi profil időfejlődésében Bloch-oszcillációk alakulnak ki, ami a modell rács-szerkezetének köszönhető.

Végül a 6. fejezetben ismertettem munkám további tervezett lépéseit, céljait.

Munkám eredményeként közelebb kerülhetünk a transzverz térbeli Ising modell és ennek longitudinális térrel kiegészített változatának, valamint a kvantum kvencsek megismeréséhez, megértéséhez, továbbá az elsajátított ismereteket komplexebb kvantum rendszerek esetén is hasznosíthatjuk.

Hivatkozások

- [1] R. Coldea, D. A. Tennant, E. M. Wheeler, E. Wawrzynska, D. Prabhakaran, M. Telling, K. Habicht, P. Smeibidl, and K. Kiefer, „Quantum Criticality in an Ising Chain: Experimental Evidence for Emergent E_8 Symmetry,” *Science* **327** (2010) 177, [arXiv:1103.3694](#) [`cond-mat.str-el`].
- [2] H. Zou, Y. Cui, X. Wang, Z. Zhang, J. Yang, G. Xu, A. Okutani, M. Hagiwara, M. Matsuda, G. Wang, G. Mussardo, K. Hódsági, M. Kormos, Z. He, S. Kimura, R. Yu, W. Yu, J. Ma, and J. Wu, „ E_8 Spectra of Quasi-One-Dimensional Antiferromagnet $\text{BaCo}_2\text{V}_2\text{O}_8$ under Transverse Field,” *Phys.Rev.Lett.* **127** (2021) 077201, [arXiv:2005.13302](#) [`cond-mat.str-el`].
- [3] X. Wang, H. Zou, K. Hódsági, M. Kormos, G. Takács, and J. Wu, „Cascade of singularities in the spin dynamics of a perturbed quantum critical Ising chain,” *Phys.Rev.B* **103** (2021) 235117, [arXiv:2103.09128](#) [`cond-mat.str-el`].
- [4] I. Bloch, „Quantum Gases,” *Science* **319** (2008) 1202.
- [5] I. Bloch, J. Dalibard, and S. Nascimbène, „Quantum simulations with ultracold quantum gases,” *Nat. Phys.* **8** (2012) 267–276.
- [6] F. Schäfer, T. Fukuhara, S. Sugawa, Y. Takasu, and Y. Takahashi, „Tools for quantum simulation with ultracold atoms in optical lattices,” *Nat. Rev. Phys.* **2** (2020) 411–425, [arXiv:2006.06120](#) [`cond-mat.quant-gas`].
- [7] S. Sachdev, *Quantum Phase Transitions*. Cambridge University Press, 2011.
- [8] P. Pfeuty, „The one-dimensional Ising model with a transverse field,” *Ann. Phys. (N. Y.)* **57** (1970) 79–90.
- [9] G. Bigan Mbeng, A. Russomanno, and G. E. Santoro, „The quantum Ising chain for beginners,” [arXiv:2009.09208](#) [`quant-ph`].
- [10] P. Calabrese, F. H. L. Essler, and M. Fagotti, „Quantum quench in the transverse field Ising chain: I. Time evolution of order parameter correlators,” *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment* **2012** (2012) 07016, [arXiv:1204.3911](#) [`cond-mat.quant-gas`].
- [11] E. Lieb, T. Schultz, and D. Mattis, „Two soluble models of an antiferromagnetic chain,” *Ann. Phys. (N. Y.)* **16** (1961) 407–466.
- [12] A. Neveu and J. H. Schwarz, „Tachyon-free dual model with a positive-intercept trajectory,” *Phys. Lett. B* **34** (1971) 517–518.
- [13] P. Ramond, „Dual Theory for Free Fermions,” *Phys.Rev.D* **3** (1971) 2415–2418.
- [14] T. D. Schultz, D. C. Mattis, and E. H. Lieb, „Two-Dimensional Ising Model as a Soluble Problem of Many Fermions,” *Rev. Mod. Phys.* **36** (1964) 856–871.
- [15] P. Calabrese, F. H. L. Essler, and M. Fagotti, „Quantum quenches in the transverse field Ising chain: II. Stationary state properties,” *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment* **2012** (2012) 07022, [arXiv:1205.2211](#) [`cond-mat.stat-mech`].
- [16] P. Calabrese, F. H. L. Essler, and M. Fagotti, „Quantum Quench in the Transverse-Field Ising Chain,” *Phys. Rev. Lett.* **106** (2011) 227203, [arXiv:1104.0154](#) [`cond-mat.str-el`].
- [17] P. Calabrese and J. Cardy, „Time Dependence of Correlation Functions Following a Quantum Quench,” *Phys. Rev. Lett.* **96** (2006) 136801, [arXiv:cond-mat/0601225](#) [`cond-mat.stat-mech`].

- [18] P. Calabrese and J. Cardy, „Quantum quenches in extended systems,” *J. Stat. Mech.: Theory Exp.* **2007** (2007) 06008, [arXiv:0704.1880](#) [`cond-mat.stat-mech`].
- [19] O. Pomponio, M. A. Werner, G. Zaránd, and G. Takács, „Bloch oscillations and the lack of the decay of the false vacuum in a one-dimensional quantum spin chain,” (2021) , [arXiv:2105.00014](#) [`cond-mat.stat-mech`].
- [20] M. Kormos, M. Collura, G. Takács, and P. Calabrese, „Real-time confinement following a quantum quench to a non-integrable model,” *Nat. Phys.* **13** (2017) 246–249, [arXiv:1604.03571](#) [`cond-mat.stat-mech`].
- [21] M. Srednicki, „The approach to thermal equilibrium in quantized chaotic systems,” *J. Phys. A* **32** (1999) 1163–1175, [arXiv:cond-mat/9809360](#) [`cond-mat.stat-mech`].
- [22] M. Rigol, V. Dunjko, and M. Olshanii, „Thermalization and its mechanism for generic isolated quantum systems,” *Nature* **452** (2008) 854–858, [arXiv:0708.1324](#) [`cond-mat.stat-mech`].
- [23] M. Collura, M. Kormos, and G. Takacs, „Dynamical manifestation of Gibbs paradox after a quantum quench,” *Phys. Rev. A* **98** (2018) 053610, [arXiv:1801.05817](#) [`cond-mat.stat-mech`].
- [24] O. Pomponio, L. Pristiyák, and G. Takács, „Quasi-particle spectrum and entanglement generation after a quench in the quantum Potts spin chain,” *J. Stat. Mech.* **1** (2019) 013104, [arXiv:1810.05539](#) [`cond-mat.stat-mech`].
- [25] M. Lencses, O. Pomponio, and G. Takacs, „Relaxation and entropy generation after quenching quantum spin chains,” *SciPost Phys.* **9** (2020) 011, [arXiv:2004.09550](#) [`cond-mat.stat-mech`].
- [26] M. Fagotti, „Global Quenches after Localised Perturbations,” (2021) , [arXiv:2110.11322](#) [`cond-mat.str-el`].
- [27] G. Vidal, „Efficient Simulation of One-Dimensional Quantum Many-Body Systems,” *Phys. Rev. Lett.* **93** (2004) 040502, [arXiv:quant-ph/0310089](#) [`quant-ph`].
- [28] P. P. Mazza, G. Perfetto, A. Leroze, M. Collura, and A. Gambassi, „Suppression of transport in nondisordered quantum spin chains due to confined excitations,” *Phys. Rev. B* **99** (2019) 180302, [arXiv:1806.09674](#) [`cond-mat.stat-mech`].
- [29] K. Saito, „Strong evidence of normal heat conduction in a one-dimensional quantum system,” *EPL (Europhys. Lett.)* **61** (2003) 34–40, [arXiv:nlin/0212027](#) [`nlin.CD`].
- [30] H. Wichterich, M. J. Henrich, H.-P. Breuer, J. Gemmer, and M. Michel, „Modeling heat transport through completely positive maps,” *Phys. Rev. E* **76** (2007) 031115, [arXiv:quant-ph/0703048](#) [`quant-ph`].
- [31] T. Prosen, „Open XXZ Spin Chain: Nonequilibrium Steady State and a Strict Bound on Ballistic Transport,” *Phys. Rev. Lett.* **106** (2011) 217206, [arXiv:1103.1350](#) [`cond-mat.str-el`].
- [32] G. Lindblad, „On the generators of quantum dynamical semigroups,” *Communications in Mathematical Physics* **48** (1976) 119–130.