

OTDK Dolgozat

Király Csaba Zoltán

2023

Szegedi Tudományegyetem TTIK Elméleti Fizika Tanszék

KVANTUMOS SPINLÁNCOK NEMEGYENSÚLYI STACIONÁRIUS ÁLLAPOTÁBAN FELLÉPŐ ÖSSZEFONÓDÁS VIZSGÁLATA

Készítette: Király Csaba Zoltán Fizikus MSc szakos hallgató

Témavezető: Prof. Dr. Iglói Ferenc

Szeged, 2023. 01. 10.

Tartalomjegyzék

0.1. Köszönetnyilvánítás	3
1. Bevezető	4
2. Az XY-modell elméleti tárgyalása	7
2.1. A rendszer szabad-fermion reprezentációja	7
2.2. A Hamilton-operátor diagonalizálása	10
2.3. Véges hőmérsékleti átlagok	13
2.4. Kvencs utáni nemegyensúlyi stacionárius állapotok	14
3. Összefonódási tanúoperátor	16
3.1. Negativitáson alapuló összefonódási tanú	16
3.2. Összefonódás vizsgálata kvencs utáni nemegyensúlyi stacionárius állapotban .	19
4. Összefoglalás	22
A. Python kód a numerikus számolások elvégzéséhez	26

0.1. Köszönetnyilvánítás

Ezúton szeretnék köszönetet mondani témavezetőmnek, Iglói Ferencnek, aki szakértelmével és a konzultációk során biztosított magyarázataival hatalmas segítséget nyújtott dolgozatom elkészüléséhez.

1. fejezet

Bevezető

A kvantumos összefonódás fontos szerepet tölt be a kvantummechanikában, valamint a kvantuminformatika elméletében. Az összefonódott állapotok definiálásához először tisztáznunk kell a szeparálható állapotok fogalmát. Egy kvantumállapotot szeparálhatónak nevezünk, ha a sűrűségmátrixát fel lehet írni szorzatállapotok konvex kombinációjaként:

$$\rho = \sum_l p_l \rho_l^{(1)} \otimes \rho_l^{(2)} \otimes \dots \otimes \rho_l^{(N)}, \quad (1.1)$$

ahol N a részecskék számát jelöli, $\sum_l p_l = 1$, valamint $p_l > 0$. Ezután azt mondjuk, hogy azokat a kvantumállapotokat nevezzük összefonódottnak, amelyek nem szeparálhatóak.

Kísérleti úton egy kvantumállapotról általában kevés információ nyerhető. Ez igaz még nagy rendszerekre vonatkozó elméleti számításokra is. Ebből adódóan csak azok a módszerek alkalmazhatóak összefonódás detektálására, amelyekhez kevés mennyiség mérése is elegendő. Egyike ezen módszereknek, az összefonódási tanúoperátorok használata. Ezek olyan mennyiségek, amelyeknek a várható értéke pozitív minden szeparálható állapotra, illetve negatív összefonódott állapotokra (nem követeljük meg, hogy minden összefonódott állapotot jelezzon a tanú), ezért a negatív várható érték összefonódás jelenlétét jelzi. Az összefonódási tanúk elmélete gyorsan fejlődött az elmúlt évtizedekben [1]-[3]. Le lett vezetve hogyan lehet konstruálni összefonódási tanút, amely összefonódást jelez egy adott kvantumállapothoz közel, akár kevert, akár kötött összefonódott állapot. Az is ismert, hogyan lehet optimalizálni egy tanút, hogy az a lehető legtöbb összefonódott állapotot jelelje [3].

Optimális összefonódási tanúk mellett, fontos olyan tanúk konstruálása is, melyeket könnyen mérhetünk kísérleti úton, vagy könnyű kiszámolni elméleti módszerekkel. Mindkét oldalról nézve, spinláncok Hamilton-operátorain alapuló összefonódási tanúk nagy figyelmet kaptak [4]-[8], ezt jelzi, hogy még végtelen láncokra is léteznek erre vonatkozó számolások [4]. Be lett látva, hogy az optimális összefonódási tanú a lánc termikus állapotában nem szükségszerűen a Hamilton-operátoron alapú tanúoperátorok. [8]. Az energián alapuló tanúk többtest-összefonódást is képesek jelezni. Az energia alapú tanúkat számos fizikai rendszer esetén alkalmazzák, mint például molekuláris nanomágneseknél [9], illetve elméleti számítások során,

elméleti spin modellek esetén [10]-[11].

Dolgozatom során az XY-modellhez fogok összefonódási tanút keresni. A modell Hamilton-operátorát a következőképp definiáljuk:

$$H = - \sum_l \left[\frac{(1+\gamma)}{2} \sigma_l^x \sigma_{l+1}^x + \frac{(1-\gamma)}{2} \sigma_l^y \sigma_{l+1}^y + h \sigma_l^z \right]. \quad (1.2)$$

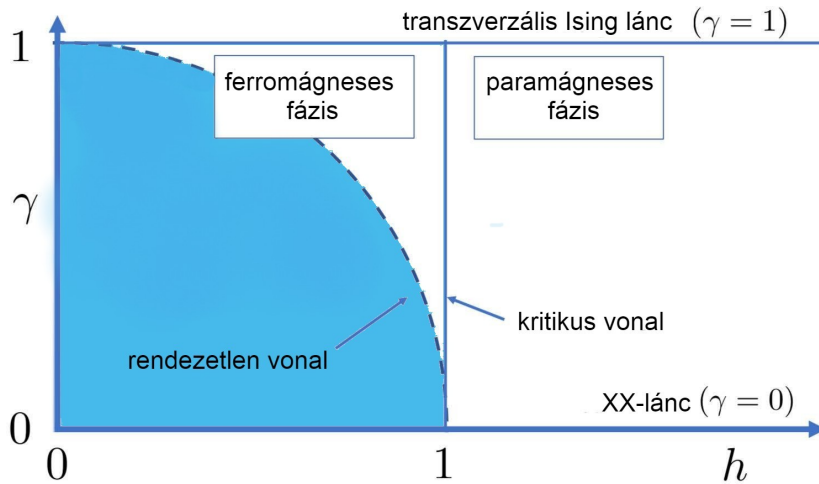
ahol $l = 1, \dots, L-1$ a spinek számán fut végig, σ^α , $\alpha = x, y, z$ a megfelelő helyen vett Pauli-mátrixokat jelöli, $0 \leq \gamma \leq 1$ adja az anizotropia mértékét, $h \geq 0$ pedig a transzverzális teret jelöli. (Kritikus pontról a $h = \frac{1}{2}$ esetben beszélünk.) $\gamma = 1$ választással a homogén kvantum Ising lánc Hamilton-operátorát kapjuk vissza:

$$H = - \sum_l \left(\sigma_l^x \sigma_{l+1}^x + h \sigma_l^z \right). \quad (1.3)$$

Az XY-modell esetén a $h = 1$ egyenletű vonal választja el a ferromágneses és a paramágneses fázist, előbbi a vonaltól balra, utóbbi pedig jobbra található. A rendezett és rendezetlen fázist a rendezetlen vonal választja el, amit

$$\gamma^2 + h^2 = 1 \quad (1.4)$$

egyenlet ad meg. A $\gamma^2 + h^2 \leq 1$ tartományt oszcillációs tartománynak is szokás nevezni.



1.1. ábra. Fázisdiagram (1.2) Hamilton-operátorral definiált XY-modell esetén.

Összefonódás detektálására alkalmas a negativitáson alapuló összefonódási tanú használata. Ezen összefonódási tanú megtalálásához meg kell vizsgálni, hogy a sűrűségmátrix parciális transzponáltjának sajátértékei közül melyik a kisebb, ezt választjuk összefonódási tanúnak [12], [13]. Numerikus számítások alapján azt is mondhatjuk, hogy a negatív sajátértéket választjuk összefonódási tanúnak, mivel csak az egyik sajátérték lehet negatív.

Ha globális kvencs éri az alapállapotába helyezett rendszert [24], [15], akkor a rendszer alapállapot h_0, γ_0 paramétereit megváltoztatja γ, h -ra. Mivel a rendszer így nem egy sajátállapotába kerül, ezért elindul a dinamika. A kvencset egy tranziens folyamat követi, amely során a korrelációk lecsengenek, így kellő idő múlva a rendszer stacionárius állapotba fog kerülni, ami valamilyen kevert állapota a dinamika során fellépő állapotoknak. Ha a Hamilton-operátor nem integrálható, akkor a rendszer termalizáltnak tekinthető, és a stacionárius állapotot a Gibbs-sokaság írja le egy effektív hőmérséklettel [16], [17]. Integrálható rendszerek esetén, mint amilyen az XY-modell is, feltételezzük, hogy a stacionárius állapotot egy úgynevezett általánosított Gibbs-sokaság írja le [18], [19], ahol minden egyes fermion módushoz egy-egy effektív hőmérséklet rendelhető.

Dolgozatomban be fogjuk látni, hogy XY-modell esetén globális kvencs utáni állapotok hatékonyan kezelhetők, még nagy méretű rendszerek esetén is, valamint az összefonódási tanú várható értéke szintén kiszámítható. Ezen kívül meg fogjuk vizsgálni, hogy mely kevert állapotokat detektálja a negativitási tanú.

TDK munkám felépítése a következő:

A 2. fejezetben bemutatom az XY-modellt, felírom a Hamilton-operátort szabad fermion reprezentációban a Jordan-Wigner-transzformáció felhasználásával, majd diagonalizálom a Fourier-, és a Bogoliubov-transzformáció segítségével. Ezután felírom a termikus átlagokat, valamint a globális kvencs utáni folyamatokat. A 2. fejezetben alapjába véve már ismert eredmények, célunknak megfelelő feldolgozása történik [20], [22].

A 3. fejezetben vezetem be a negativitáson alapuló összefonódási tanút, valamint itt vizsgálom meg a tanú által jelzett összefonódott állapotokat.

A függelékben (A) mutatom be a numerikus számolásokhoz írt kódomat.

A 3. fejezetben látható összefonódási tanú, valamint a hozzá tartozó numerikus számolások a munkám során elkészült új eredmények.

2. fejezet

Az XY-modell elméleti tárgyalása

2.1. A rendszer szabad-fermion reprezentációja

Ennek a fejezetnek az a célja, hogy (1.2) Hamilton-operátort felírjuk szabad-fermion reprezentációban. Elevenítsük fel a Pauli-mátrixokat, valamint a velük definiált léptető operátorokat:

$$\sigma^x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}; \quad \sigma^y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}; \quad \sigma^z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (2.1)$$

$$S^+ = \frac{1}{2}(\sigma_x + i\sigma_y) \quad S^- = \frac{1}{2}(\sigma_x - i\sigma_y) \quad (2.2)$$

A következők során áttekintjük a léptető operátorok egyes fontos tulajdonságait. A léptető operátorok, valamint a Pauli-mátrixok kommutációs tulajdonságát kihasználva egyenlőségeket írhatunk fel a különböző oldalon lévő ($i \neq j$) léptető operátorok között:

$$S_i^- S_j^+ + S_j^+ S_i^- = 2S_i^- S_j^+, \quad (2.3)$$

$$S_i^- S_j^- + S_j^- S_i^- = 2S_i^- S_j^-, \quad (2.4)$$

$$S_i^+ S_j^+ + S_j^+ S_i^+ = 2S_i^+ S_j^+. \quad (2.5)$$

Fontos még megemlíteni az azonos oldalon álló léptető operátorok két jelentős tulajdonságát, miszerint:

$$S_i^- S_i^+ + S_i^+ S_i^- = 1, \quad (2.6)$$

$$S_i^{-2} = S_i^{+2} = 0. \quad (2.7)$$

Most vezessük be a c_i és $c_i^\dagger$ fermion operátorokat. Mivel fermionokról beszélünk, ezért anti-kommutálnak egymással, még akkor is, ha különböző helyen állnak.

$$\{c_i, c_j^\dagger\} = \delta_{ij} \quad (2.8)$$

$$\{c_i, c_j\} = \{c_i^\dagger, c_j^\dagger\} = 0 \quad (2.9)$$

Azonos oldalon (2.6) és (2.7) kielégíthető szimplán $S_i^- = c_i$ valamint $S_i^+ = c_i^\dagger$ helyettesítéssel. Sajnos azonban ez nem helyes különböző helyekre, mivel (2.3), (2.4) és (2.5) nem tesznek eleget (2.8) és (2.9) egyenleteknek.

Pascual Jordan és Wigner Jenő [23] 1928-ban megmutatta, hogy a spin operátorok reprezentálhatók fermion operátorokkal az alábbi transzformáció szerint, melyet Jordan-Wigner transzformációnak hívunk:

$$\left. \begin{aligned} \sigma_j^z &= 2c_j^\dagger c_j - 1 \\ S_j^+ &= c_j^\dagger Q_j^+ \\ S_j^- &= Q_j c_j \end{aligned} \right\} = \text{Jordan} - \text{Wigner transzformáció}$$

ahol $Q_i = \exp\left[i\pi \sum_{l=1}^{i-1} c_l^\dagger c_l\right]$.

Most vizsgáljuk meg a spin operátorok kommutátorát $i \neq j$ esetén. Tekintsük az $[S_i^-, S_j^+]$ kommutátort, ahol $j > i$.

$$\begin{aligned} S_i^- S_j^+ &= Q_i c_i c_j^\dagger Q_j^\dagger = c_i Q_i Q_j c_j^\dagger \\ &= c_i \Pi_{l=1}^{i-1} T_l \Pi_{m=1}^{j-1} T_m c_j^\dagger \\ &= c_i \Pi_{l=i}^{j-1} T_l c_j^\dagger \quad \text{mivel } T_n^2 = 1 \\ &= c_i c_j^\dagger \Pi_{l=i}^{j-1} T_l \quad \text{mivel } l \neq j. \end{aligned} \tag{2.10}$$

Hasonlóan írhatjuk:

$$\begin{aligned} S_j^+ S_i^- &= c_j^\dagger Q_j^\dagger Q_i c_i = c_j^\dagger Q_j Q_i c_i \\ &= c_j^\dagger \Pi_{l=i}^{j-1} T_l c_i \\ &= c_j^\dagger T_i c_i \Pi_{l=i+1}^{j-1} T_l \\ &= -c_j^\dagger c_i T_i \Pi_{l=i+1}^{j-1} T_l \\ &= c_i c_j^\dagger \Pi_{l=i}^{j-1} T_l = S_i^- S_j^+. \end{aligned} \tag{2.11}$$

Ezzel beláttuk, hogy $[S_i^-, S_j^+] = 0$. Ezen eredmények felhasználásával átírhatjuk az (1.2) Hamilton-operátort.

σ^x tag:

$$\begin{aligned} \sigma_l^x \sigma_{l+1}^x &= (S_l^+ + S_l^-) (S_{l+1}^+ + S_{l+1}^-) \\ &= (S_l^+ S_{l+1}^+ + S_l^+ S_{l+1}^- + S_l^- S_{l+1}^+ + S_l^- S_{l+1}^-). \end{aligned} \tag{2.12}$$

σ^y tag:

$$\begin{aligned} \sigma_l^y \sigma_{l+1}^y &= \frac{1}{i} (S_l^+ - S_l^-) \frac{1}{i} (S_{l+1}^+ - S_{l+1}^-) \\ &= -(S_l^+ S_{l+1}^+ - S_l^+ S_{l+1}^- - S_l^- S_{l+1}^+ + S_l^- S_{l+1}^-). \end{aligned} \tag{2.13}$$

Ezek alapján az (1.2) egyenletben lévő σ^x -et, és σ^y -t tartalmazó kifejezés egyszerűsíthető:

$$\begin{aligned} & \frac{(1+\gamma)}{2} \sigma_l^x \sigma_{l+1}^x + \frac{(1-\gamma)}{2} \sigma_l^y \sigma_{l+1}^y = \\ & = \left[\left(S_l^+ S_{l+1}^- + S_l^- S_{l+1}^+ \right) + \gamma \left(S_l^+ S_{l+1}^+ + S_l^- S_{l+1}^- \right) \right]. \end{aligned} \quad (2.14)$$

A léptető operátorokat átírva fermion operátorokra, az alábbi összefüggéseket kapjuk:

$$S_l^- S_{l+1}^+ = c_{l+1}^\dagger c_l, \quad (2.15)$$

$$S_l^+ S_{l+1}^- = c_l^\dagger c_{l+1}, \quad (2.16)$$

$$S_l^+ S_{l+1}^+ = c_l^\dagger c_{l+1}^\dagger, \quad (2.17)$$

$$S_l^- S_{l+1}^- = c_{l+1} c_l. \quad (2.18)$$

A sorozat végén (ahol $l = N$) hiba lép fel, mivel $S_N^+ S_1^- = Q_N c_N^\dagger c_1 \neq c_N^\dagger c_1$, ami abból következik, hogy a transzformációban fellép egy Q_i fázis faktor, ami nem tesz eleget a periodikus határfeltételnek, ezért a Hamilton-operátort az alább látható módon "szétszedjük":

$$\begin{aligned} H = & - \sum_{l=1}^N \left([c_l^\dagger c_{l+1} + c_{l+1}^\dagger c_l] + \gamma [c_l^\dagger c_{l+1}^\dagger + c_{l+1} c_l] \right) + Nh - 2h \sum_{l=1}^N c_l^\dagger c_l \\ & + \left([c_N^\dagger c_1 + c_1^\dagger c_N] + \gamma [c_N^\dagger c_1^\dagger + c_1 c_N] \right) \left(e^{i\pi \hat{N}} + 1 \right), \end{aligned} \quad (2.19)$$

ahol

$$\hat{N} = \sum_{j=1}^N c_j^\dagger c_j. \quad (2.20)$$

Szakirodalmakban ezt az esetet hívják 'a-cyclic' problémának, míg ha a termodinamikai határesetet tekintjük ($N \rightarrow \infty$), akkor a (2.19) egyenletben az utolsó tag elhanyagolható, ezt nevezik 'c-cyclic' problémának [20]:

$$H = - \sum_{l=1}^N \left([c_l^\dagger c_{l+1} + c_{l+1}^\dagger c_l] + \gamma [c_l^\dagger c_{l+1}^\dagger + c_{l+1} c_l] \right) + Nh - 2h \sum_{l=1}^N c_l^\dagger c_l. \quad (2.21)$$

Mi most az 'a-cycle' problémát tekintjük. Ha a (2.19) egyenlet utolsó zárójeles tagját felbontjuk, akkor következő alakot kapjuk:

$$\begin{aligned} H = & - \sum_{l=1}^{N-1} \left([c_l^\dagger c_{l+1} + c_{l+1}^\dagger c_l] + \gamma [c_l^\dagger c_{l+1}^\dagger + c_{l+1} c_l] \right) + Nh - 2h \sum_{l=1}^N c_l^\dagger c_l \\ & + e^{i\pi \hat{N}} \left([c_N^\dagger c_1 + c_1^\dagger c_N] + \gamma [c_N^\dagger c_1^\dagger + c_1 c_N] \right). \end{aligned} \quad (2.22)$$

Legyen $P = e^{i\pi \hat{N}}$ a paritás operátor. Ekkor a Hamilton-operátor és a paritás operátora kommutálnak egymással, vagyis a paritás egy konzervatív mennyiség $[P, H] = 0$. P spektrális felbontása:

$$P = \sum_{\rho=\pm 1} \rho P_\rho = P_+ - P_-, \quad (2.23)$$

ahol

$$P_+ = \sum_{n \text{ páros}} |n\rangle\langle n| \quad (2.24)$$

$$P_- = \sum_{n \text{ páratlan}} |n\rangle\langle n| \quad (2.25)$$

a projekciós operátorok, amelyek a $\rho = \pm 1$ sajátértékekhez tartoznak, valamint $|n\rangle$ a sajátállapota $\hat{N}$ -nak n sajátértékkel. Mivel a paritás konzervatív mennyiség, ezért a Hamilton operátor felbontható a következőképp:

$$H = P_+ H P_+ + P_- H P_- = H^+ + H^- \quad (2.26)$$

A továbbiakban H^+ -t tekintjük, ahol $e^{i\pi\hat{N}} = 1$. A határfeltételeket megadva H^+ -ban: $c_{N+1} = -c_1$ (antiperiodikus határfeltétel), így az utolsó tagot be tudjuk írni az első szummába.

$$H^+ = - \sum_{l=1}^N \left[[c_l^\dagger c_{l+1} + c_{l+1}^\dagger c_l] + \gamma [c_l^\dagger c_{l+1}^\dagger + c_{l+1} c_l] - h + 2hc_l^\dagger c_l \right]. \quad (2.27)$$

2.2. A Hamilton-operátor diagonalizálása

Átlépve Fourier térbe, új operátorokat definiálunk (c'_k) a következők szerint:

$$c_l = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k' e^{ik'l} c'_k, \quad (2.28)$$

$$c_l^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k' e^{-ik'l} c_k'^\dagger, \quad (2.29)$$

k' lehetséges értékeit az antiperiodikus határfeltétel szabja meg. H_+ esetén (antiperiodikus határeset) $c_{N+1} = -c_1$, azaz $e^{ik'\hat{N}} = 1$ relációnak kell teljesülnie. Az így megengedett k értékek:

$$k' = \frac{\pm(2m+1)\pi}{N}, \quad m = 0, 1, \dots, \frac{N}{2} - 1. \quad (2.30)$$

A (2.28) és (2.29) egyenletekben lévő szumma kielégíti az általános Fourier ortogonalitási relációt:

$$\frac{1}{N} \sum_k e^{ik(n-n')} = \delta_{n,n'}, \quad \frac{1}{N} \sum_n e^{i(k-q)n} = \delta_{k,q}. \quad (2.31)$$

Világos, hogy a Fourier-transzformáció megőrzi a fermionokra vett antikommutációs relációt:

$$\{c_m^\dagger, c_n\} = \frac{1}{N'} \sum_{kk'} \{c_k^\dagger, c_{k'}\} e^{-ikm} e^{ik'n} = \frac{1}{N'} \sum_k e^{ik(n-m)} = \delta_{m,n}, \quad (2.32)$$

és hasonló számolás során megmutatható, hogy $\{c_m, c_n\} = 0$, valamint $\{c_m^\dagger, c_n^\dagger\} = 0$. Ezeket felhasználva, a (2.27) Hamilton-operátor részeit a következőképp írhatjuk:

$$\begin{aligned} \sum_{l=1}^{N'} c_l^\dagger c_{l+1} &= \sum_{j=1}^{N'} \left[\left(\frac{1}{\sqrt{N'}} \sum_{k'} c_{k'}^\dagger e^{-ik'j} \right) \left(\frac{1}{\sqrt{N'}} \sum_k c_k e^{ik(j+1)} \right) \right] \\ &= \sum_{k',k} e^{ik} \left[\frac{1}{N'} \sum_j e^{i(k-k')j} \right] c_{k'}^\dagger c_k \\ &= \sum_{k'} e^{ik'} c_{k'}^\dagger c_{k'}, \end{aligned} \quad (2.33)$$

$$\begin{aligned} \sum_{l=1}^{N'} c_{l+1} c_l &= \sum_{j=1}^{N'} \left[\left(\frac{1}{\sqrt{N'}} \sum_{k'} c_{k'} e^{ik'(j+1)} \right) \left(\frac{1}{\sqrt{N'}} \sum_k c_k e^{ikj} \right) \right] \\ &= \sum_{k',k} c_{k'} c_k e^{ik'} \frac{1}{N'} \sum_{j=1}^{N'} e^{ij(k+k')} \\ &= \sum_{k',k} c_{k'} c_k e^{ik'} \frac{1}{N'} \sum_{j=1}^{N'} e^{ij(k-(-k'))} \\ &= \sum_{k'} e^{ik'} c_{k'} c_{-k'}, \end{aligned} \quad (2.34)$$

$$\begin{aligned} \sum_{l=1}^{N'} c_l^\dagger c_l &= \sum_{j=1}^{N'} \left[\left(\frac{1}{\sqrt{N'}} \sum_{k'} c_{k'}^\dagger e^{-ik'j} \right) \left(\frac{1}{\sqrt{N'}} \sum_k c_k e^{ikj} \right) \right] \\ &= \sum_{k',k} c_{k'}^\dagger c_k \frac{1}{N'} \sum_{j=1}^{N'} e^{ij(k-k')} = \sum_{k'} c_{k'}^\dagger c_{k'}. \end{aligned} \quad (2.35)$$

$$\sum_{l=1}^{N'} c_l^\dagger c_{l+1}^\dagger = \sum_{k'} e^{ik'} c_{k'}^\dagger c_{-k'}^\dagger, \quad (2.36)$$

$$\sum_{l=1}^{N'} c_{l+1}^\dagger c_l = \sum_{k'} e^{-ik'} c_{k'}^\dagger c_{k'}, \quad (2.37)$$

Ezen eredményeket beírva (2.27)-be:

$$\begin{aligned} H^+ &= - \sum_{k'} \left[2hc_{k'}^\dagger c_{k'} + e^{ik'} c_{k'}^\dagger c_{k'} + e^{-ik'} c_{k'}^\dagger c_{k'} + \gamma e^{ik'} c_{k'}^\dagger c_{-k'}^\dagger + \gamma e^{ik'} c_{k'} c_{-k'} \right] + hN \\ &= - \sum_{k'} \left[2hc_{k'}^\dagger c_{k'} + c_{k'}^\dagger c_{k'} 2\cos k' + \gamma e^{ik'} (c_{k'}^\dagger c_{-k'}^\dagger + c_{k'} c_{-k'}) \right] + hN \\ &= - \sum_{k'>0} \left[2(c_{k'}^\dagger c_{k'} + c_{-k'}^\dagger c_{-k'}) (h + \cos k') + \gamma e^{ik'} (c_{-k'}^\dagger c_{k'}^\dagger + c_{-k'} c_{k'}) + \gamma e^{-ik'} (c_{k'}^\dagger c_{-k'}^\dagger + c_{k'} c_{-k'}) \right] + hN \\ &= - \sum_{k'>0} \left[2(c_{k'}^\dagger c_{k'} + c_{-k'}^\dagger c_{-k'}) (h + \cos k') + \gamma e^{ik'} (c_{-k'}^\dagger c_{k'}^\dagger + c_{-k'} c_{k'}) - \gamma e^{-ik'} (c_{-k'}^\dagger c_{k'}^\dagger + c_{-k'} c_{k'}) \right] + hN \\ &= - \sum_{k'>0} \left[2(c_{k'}^\dagger c_{k'} + c_{-k'}^\dagger c_{-k'}) (h + \cos k') + 2i\gamma \sin k' (c_{-k'}^\dagger c_{k'}^\dagger + c_{-k'} c_{k'}) \right] + hN. \end{aligned} \quad (2.38)$$

Összegezve az előző egyenletet:

$$H^+ = - \sum_{k' > 0} \left[2(c_{k'}^\dagger c_{k'} + c_{-k'}^\dagger c_{-k'}) (h + \cos k') + 2i\gamma \sin k' (c_{-k'}^\dagger c_{k'}^\dagger + c_{-k'} c_{k'}) \right] + hN. \quad (2.39)$$

Ezen egyenletben két operátor van, $c_{k'}$ és $c_{-k'}$, illetve ezek hermitikus adjungáltjaik. A következők során, ahhoz hogy diagonalizáljuk (2.39) Hamilton-operátort, be kell vezetnünk az előbbi két operátor lineáris kombinációjaként előálló $\eta_{k'}$ és $\eta_{-k'}$, szintén fermion operátorokat. Először írjuk fel (2.39) operátort mátrixok szorzataként.

$$H^+ = - \sum_{k' > 0} \left[2(c_{k'}^\dagger c_{k'} + c_{-k'}^\dagger c_{-k'}) (h + \cos k') \right] - \sum_{k' > 0} \left[2i\gamma \sin k' (c_{k'}^\dagger c_{-k'}^\dagger + c_{k'} c_{-k'}) \right] + hN \quad (2.40)$$

(2.40) egyenletbe helyettesítsük be a következő mátrixokat:

$$\bar{c}_{k'}^\dagger = \begin{pmatrix} c_{k'}^\dagger & c_{-k'} \end{pmatrix}, \quad H_{k'}^\dagger = \begin{pmatrix} a_{k'} & -ib_{k'} \\ ib_{k'} & -a_{k'} \end{pmatrix}, \quad \bar{c}_{k'} = \begin{pmatrix} c_{k'} \\ c_{-k'}^\dagger \end{pmatrix}, \quad (2.41)$$

ahol

$$a_{k'} = -2(h + \cos k'), \quad (2.42)$$

$$b_{k'} = 2\gamma \sin k', \quad (2.43)$$

$$H^+ = \sum_{k' > 0} \bar{c}_{k'}^\dagger H_{k'} \bar{c}_{k'} - \sum_{k' > 0} a_{k'} = \sum_{k' > 0} \left[a_{k'} (c_{k'}^\dagger c_{k'} + c_{-k'}^\dagger c_{-k'}) - ib_{k'} (c_{k'}^\dagger c_{-k'}^\dagger + c_{k'} c_{-k'}) \right] - \sum_{k' > 0} a_{k'}. \quad (2.44)$$

Tekintsük a $a_{-k'} = a_{k'}$, $b_{-k'} = b_{k'}$ esetet.

Bogoliubov-rotáció segítségével felírhatjuk $\eta_{k'}$ operátorokra az egyenleteket mátrix szorzás formájában:

$$\bar{\eta}_{k'} = R_{k'} \bar{c}_{k'}, \quad (2.45)$$

ahol

$$\bar{\eta}_{k'} = \begin{pmatrix} \eta_{k'} \\ \eta_{-k'}^\dagger \end{pmatrix}, \quad R_{k'} = \begin{pmatrix} u_{k'}^* & v_{k'}^* \\ -v_{k'} & u_{k'} \end{pmatrix}. \quad (2.46)$$

Ezek alapján a transzformáció a következő alakba írható:

$$\eta_{k'}^\dagger = u_{-k'} c_{k'}^\dagger - v_{-k'} c_{-k'}, \quad (2.47)$$

$$\eta_{k'} = u_{k'}^* c_{k'}^\dagger + v_{k'}^* c_{-k'}^\dagger. \quad (2.48)$$

$R_{k'}$ egy fontos tulajdonsága, hogy unitér mátrix:

$$R_{k'}^{-1} = R_{k'}^\dagger = \begin{pmatrix} u_{k'} & -v_{k'}^* \\ v_{k'} & u_{k'}^* \end{pmatrix}. \quad (2.49)$$

Az inverz Bogoliubov-transzformáció a következő alakú:

$$c_{k'}^\dagger = u_{-k'}^* \eta_{k'}^\dagger + v_{-k'} \eta_{-k'}, \quad (2.50)$$

$$c_{k'} = u_{k'}\eta_{k'} + v_{-k'}^*\eta_{-k'}^\dagger, \quad (2.51)$$

Mivel ((2.49) alapján) $R_{k'}R_{k'}^\dagger = 1$, ezért $|u_{k'}|^2 - |v_{k'}|^2 = 1$. $R_{k'} H_{k'} R_{k'}^\dagger$ diagonalizálják (2.39) egyenletet, melynek sajátértékei legyenek $\pm\Lambda_{k'}$.

$$(|u_{k'}|^2 - |v_{k'}|^2)a_{k'} + (u_{k'}v_{k'}^* - u_{k'}^*v_{k'})ib_{k'} = \Lambda_{k'}, \quad (2.52)$$

$$-2u_{k'}v_{k'}a_{k'} + (u_{k'}^2 + v_{k'}^2)ib_{k'} = 0. \quad (2.53)$$

Ezek alapján $u_{k'}$, $v_{k'}$ és $\Lambda_{k'}$ -ra kapjuk:

$$u_{k'} = \frac{\Lambda_{k'} + a_{k'}}{\sqrt{2\Lambda_{k'}(\Lambda_{k'} + a_{k'})}}, \quad (2.54)$$

$$v_{k'} = \frac{ib_{k'}}{\sqrt{2\Lambda_{k'}(\Lambda_{k'} + a_{k'})}}, \quad (2.55)$$

$$\Lambda_{k'} = \sqrt{a_{k'}^2 + b_{k'}^2}. \quad (2.56)$$

A szimmetriákat kihasználva ($u_{-k'} = u_{k'}$, $v_{-k'} = -v_{k'}$, $\Lambda_{-k'} = \Lambda_{k'}$) valamint $u_{k'}^* = u_{k'}$, $v_{k'}^* = -v_{k'}$ felhasználásával kapjuk:

$$H^+ = \sum_{k'} \Lambda_{k'} \left(\eta_{k'}^\dagger \eta_{k'} - \frac{1}{2} \right), \quad (2.57)$$

ahol

$$\begin{aligned} \Lambda_{k'} &= \sqrt{a_{k'}^2 + b_{k'}^2} = \sqrt{4(h + \cos k')^2 + 4\gamma^2 \sin^2 k'} \\ &= 2\sqrt{(h + 2\cos k')^2 + \gamma^2 \sin^2 k'}. \end{aligned} \quad (2.58)$$

Ha $k' > 0$, akkor $\sin k' = \sin(\pi - k) = \sin(-(k - \pi)) = \sin k$, $\cos k' = \cos(\pi - k) = \cos(-(k - \pi)) = -\cos k$, ha pedig $k' < 0$, akkor $\sin k' = \sin(-(k + \pi)) = \sin k$, $\cos k' = \cos(-(k + \pi)) = -\cos k$, ezért

$$\Lambda_k = 2\sqrt{\gamma^2 \sin^2 k + (h - \cos k)^2} = \varepsilon(k). \quad (2.59)$$

Az alapállapot energiáját

$$E_0 = - \sum_k \frac{\varepsilon(k)}{2}. \quad (2.60)$$

alapján definiáljuk.

2.3. Véges hőmérsékleti átlagok

Az itt feltüntetett eredmények termodinamikai limeszben érvényesek, $L \rightarrow \infty$.

Véges hőmérsékleten [21], $T > 0$ a partíciós függvény a következő:

$$Z = 2^L \Pi_k \cosh \left(\frac{\varepsilon(k)}{2T} \right). \quad (2.61)$$

Ebből adódóan az energia átlagértéke:

$$\langle \mathcal{H} \rangle_T = - \sum_k t(k, T) \frac{\varepsilon(k)}{2}, \quad (2.62)$$

ahol

$$t(k, T) = \tanh\left(\frac{\varepsilon(k)}{2T}\right). \quad (2.63)$$

A számolások során a $k_B = 1$ választással élünk.

2.4. Kvencs utáni nemegyensúlyi stacionárius állapotok

Kvantumos rendszerek tanulmányozása során nagy szerepet kapott a kvantum kvencsek vizsgálata. A kvantum kvencseket olyan kísérleteknek tekintjük, melyek során a rendszert valamilyen nemegyensúlyi állapotba inicializáljuk, majd ebből az állapotból vizsgáljuk a rendszer dinamikáját. Ezt hideg atomi kísérletek során a rendszer Hamilton-operátorának paramétereinek hirtelen megváltoztatásával tudjuk elérni. Beszélhetünk globális, illetve lokális kvencsekről. Globális kvencs esetén a rendszer egy paramétere globálisan, az egész rendszerre kiterjedő módon változik meg. Ilyen például egy, az egész rendszer területén homogén, külső mágneses tér bekapcsolása. Lokális kvencsek esetén a Hamilton-operátor egy rácshely környezetében változik meg pillanatszerűen. Lokális kvencsnek tekinthető például kísérletek során röntgensugarak fémbeli elnyelődése. Munkám során globális kvencset fogunk tekinteni.

Tekintsük a rendszert kezdetben egyensúlyi állapotban $|\Phi_0\rangle$ alapállapottal, $\mathcal{H}_0$ Hamilton-operátorral, és h_0, γ_0 paraméterekkel. Ezután a rendszert globális kvencs éri 0 hőmérsékleten, amely a Hamilton-operátor paramétereit hirtelen megváltoztatják γ_0 és h_0 -ról γ, h -ra. Kvencs után, $t > 0$ esetén az állapot időfejlődése az új $\mathcal{H}$ Hamilton-operátor szerint:

$$|\Phi_0(t)\rangle = \exp(-i\mathcal{H}t)|\Phi_0\rangle. \quad (2.64)$$

Heisenberg-kép esetén egy operátor időfejlődése a következőképp írható:

$$\sigma_l(t) = e^{i\mathcal{H}t} \sigma_l e^{-i\mathcal{H}t} \quad (2.65)$$

A rendszer kvencs utáni energiáját a következő módon definiáljuk:

$$\langle \Phi_0 | \mathcal{H} | \Phi_0 \rangle = \sum_k \varepsilon(k) \left(\langle \Phi_0 | \eta_k^\dagger \eta_k | \Phi_0 \rangle - \frac{1}{2} \right), \quad (2.66)$$

ahol a k -adik módus betöltési valószínűsége $|\Phi_0\rangle$ állapotban:

$$f_k = \langle \Phi_0 | \eta_k^\dagger \eta_k | \Phi_0 \rangle. \quad (2.67)$$

XY-modell esetén ez a Bogoliubov szögek közti különbséggel $\Delta_k = \Theta_k^0 - \Theta_k$ fejezhető ki [14]:

$$f_k = \frac{1}{2}(1 - \cos \Delta_k), \quad (2.68)$$

ahol a Δ_k koszinusza:

$$\cos\Delta_k = 4 \frac{(\cos k - h_0)(\cos k - h) + \gamma\gamma_0 \sin^2 k}{\varepsilon(k)\varepsilon_0(k)}, \quad (2.69)$$

ahol a 0 index a kvencs előtti mennyiségeket jelöli. Termodinamikai limeszben (2.66) egyenlet új alakba írható:

$$\frac{\langle \Phi_0 | \mathcal{H} | \Phi_0 \rangle}{L} = -\frac{1}{4\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \varepsilon(k) \cos\Delta_k dk. \quad (2.70)$$

A globális kvencset követő tranzienst követő folyamat során a korrelációk lecsengenek, így legendően sok idő után termodinamikai limeszben a rendszer várhatóan stacionárius állapotba kerül,

$$\rho_q = \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{1}{\tau} \int_0^{\tau} e^{-i\mathcal{H}t} |\Phi_0\rangle \langle \Phi_0| e^{+i\mathcal{H}t} dt, \quad (2.71)$$

ahol

$$Tr(\rho_q \mathcal{H}) = \langle \Phi_0 | \mathcal{H} | \Phi_0 \rangle. \quad (2.72)$$

Stacionárius állapotban a megmaradó mennyiségek miatt, a korrelációk átlagát egy általánosított Gibbs-sokaság adja. Ebben az esetben minden egyes fermion módushoz egy effektív hőmérséklet, T_{eff} rendelhető a következő egyenlet szerint [14]:

$$\tanh\left(\frac{\varepsilon(k)}{2T_{eff}(k)}\right) = |2f_k - 1| = |\cos\Delta_k|. \quad (2.73)$$

Ez (2.62), (2.63) és (2.66) összehasonlításából adódik. Stacionárius állapotban az elsőszomszéd korrelációk egyszerűen kiszámíthatók ha $t(k, T)$ -t $|\cos\Delta_k|$ -lel helyettesítjük.

$$t(k, T) \rightarrow |\cos\Delta_k| \quad (2.74)$$

3. fejezet

Összefonódási tanúoperátor

Általánosan egy olyan $\mathcal{W}$ operátort, amely várható értéke, $\langle \mathcal{W} \rangle$, kielégíti a következő kritériumokat:

- i) $\langle \mathcal{W} \rangle \geq 0$ minden szeparálható állapotra,
 - ii) $\langle \mathcal{W} \rangle < 0$ egyes összefonódott állapotra,
- összefonódási tanúoperátornak hívunk [25],[26].

3.1. Negativitáson alapuló összefonódási tanú

Ebben a részben olyan operátorból indulunk ki, amely termikus egyensúlyban lévő spinláncok összefonódási tanújának tekinthető. Kutatási eredmények szerint kapcsolat van a sűrűségmátrix [12], [13] parciális transzponáltja, valamint az összefonódási negativitás között [27].

Általában nehéz megmondani, hogy egy állapot összefonódott-e vagy sem. Igaz, vannak a szeparálhatóságnak olyan szükséges tulajdonságai, amelyek könnyen tesztelhetők. Ha ezek a tulajdonságok nem teljesülnek, akkor az állapot összefonódott.

A két-részecske sűrűségmátrixból:

$$\rho = \sum_{kl,mn} \rho_{kl,mn} |k\rangle\langle l| \otimes |m\rangle\langle n|, \quad (3.1)$$

a parciális transzponáltját a k és l indexek megcserélésével kapjuk:

$$\rho^{TA} = \sum_{kl,mn} \rho_{lk,mn} |k\rangle\langle l| \otimes |m\rangle\langle n|. \quad (3.2)$$

Szeparálható kvantumállapotokra $\rho^{TA} \geq 0$ [12], [13]. Ezért, ha ρ^{TA} mátrixnak van negatív sajátértéke, akkor a kvantumállapot összefonódott.

Az összefonódási negativitást a következőképp definiáljuk [27]:

$$\mathcal{N}(\rho) = 2\max(0, -\min(\mu_\nu)), \quad (3.3)$$

ahol μ_ν a sajátértékei ρ^{TA} -nak.

Tekintsük az elsőszomszéd redukált sűrűségmátrixot, ρ , amelyet a σ^z bázisában definiálunk: $|\alpha\rangle = |\uparrow\rangle$, vagy $|\alpha\rangle = |\downarrow\rangle$, valamint a következő konvenciót használjuk: $|\uparrow\uparrow\rangle = |1\rangle$, $|\uparrow\downarrow\rangle = |2\rangle$, $|\downarrow\uparrow\rangle = |3\rangle$, valamint $|\downarrow\downarrow\rangle = |4\rangle$. Szimmetria okok miatt $\mathcal{H}$ -nak és ρ -nak két ortogonális altere van $|1\rangle$, $|4\rangle$ valamint $|2\rangle$, $|3\rangle$ állapotokkal. A redukált sűrűségmátrix nem nulla elemei [27]:

$$\rho = \begin{pmatrix} \rho_{11} & 0 & 0 & \rho_{14} \\ 0 & \rho_{22} & \rho_{23} & 0 \\ 0 & \rho_{32} & \rho_{33} & 0 \\ \rho_{41} & 0 & 0 & \rho_{44} \end{pmatrix} \quad (3.4)$$

A mátrix valós és szimmetrikus, ezért $\rho_{14} = \rho_{41}$ és $\rho_{23} = \rho_{32}$ fennáll, továbbá $\rho_{11} + \rho_{22} + \rho_{33} + \rho_{44} = 1$. Az általunk vizsgált probléma permutációs szimmetriája miatt $\rho_{22} = \rho_{33}$. A sűrűségmátrix parciális transzponáltja:

$$\rho^{TA} = \begin{pmatrix} \rho_{11} & 0 & 0 & \rho_{23} \\ 0 & \rho_{22} & \rho_{14} & 0 \\ 0 & \rho_{41} & \rho_{33} & 0 \\ \rho_{32} & 0 & 0 & \rho_{44} \end{pmatrix} \quad (3.5)$$

A legkisebb sajátértéke ρ^{TA} -nak, μ_{min} , akkor, és csak akkor nem-negatív ha az állapot szeperálható [12], [1]. (3.5) szerint μ_{min} egyike a két ortogonális szektornak:

$$\mu_{min}^{(1)} = \frac{1}{2} \left[\rho_{11} + \rho_{44} - \sqrt{(\rho_{11} - \rho_{44})^2 + 4\rho_{23}\rho_{32}} \right] \quad (3.6)$$

$$\mu_{min}^{(2)} = \frac{1}{2} \left[\rho_{22} + \rho_{33} - \sqrt{(\rho_{22} - \rho_{33})^2 + 4\rho_{14}\rho_{41}} \right] \quad (3.7)$$

Mivel $\rho_{22} = \rho_{33}$, ezért:

$$\mu_{min}^{(2)} = \rho_{22} - \rho_{14} \quad (3.8)$$

A mátrixelemek kifejezhetők elsőszomszéd korrelációkkal[21]:

$$\langle \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z \rangle_T - 1 = \rho_{11} - \rho_{22} - \rho_{33} + \rho_{44} - (\rho_{11} + \rho_{22} + \rho_{33} + \rho_{44}) = -2(\rho_{22} + \rho_{33}) = -4\rho_{22}, \quad (3.9)$$

$$\langle \sigma_i^x \sigma_{i+1}^x \rangle_T - \langle \sigma_i^y \sigma_{i+1}^y \rangle_T = 2(\langle \sigma_i^+ \sigma_{i+1}^+ \rangle_T + \langle \sigma_i^- \sigma_{i+1}^- \rangle_T) = 2(\rho_{14} + \rho_{41}) = 4\rho_{14}, \quad (3.10)$$

$$\rho_{11} + \rho_{44} = (\langle \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z \rangle + 1)/2, \quad (3.11)$$

$$\rho_{11} - \rho_{44} = (\langle \sigma_i^z \rangle + \langle \sigma_{i+1}^z \rangle)/2, \quad (3.12)$$

$$\rho_{32} = \rho_{23} = (\langle \sigma_i^x \sigma_{i+1}^x \rangle + \langle \sigma_i^y \sigma_{i+1}^y \rangle)/4. \quad (3.13)$$

A felhasznált korrelációs függvényeket kifejezhetjük g_0 , g_c , valamint g_s függvényekkel. Ezen függvények alakja [28], [29], [21]:

$$\begin{aligned}
\langle \sigma_l^x \sigma_{l+1}^x \rangle_T &= g_c - g_s, \\
\langle \sigma_l^y \sigma_{l+1}^y \rangle_T &= g_c + g_s, \\
\langle \sigma_l^z \sigma_{l+1}^z \rangle_T &= g_0^2 - g_c^2 + g_s^2, \\
\langle \sigma_l^z \rangle_T &= g_0, \\
\langle \sigma_{l+1}^z \rangle_T &= g_0,
\end{aligned} \tag{3.14}$$

ahol

$$\begin{aligned}
g_c &= \frac{1}{L} \sum_k \cos k (\cos k - h) t(k, T) \left(\frac{\varepsilon(k)}{2} \right)^{-1}, \\
g_s &= -\frac{1}{L} \gamma \sum_k \sin^2 k t(k, T) \left(\frac{\varepsilon(k)}{2} \right)^{-1}, \\
g_0 &= \frac{1}{L} \sum_k (h - \cos k) t(k, T) \left(\frac{\varepsilon(k)}{2} \right)^{-1},
\end{aligned} \tag{3.15}$$

$$t(k, T) = \tanh \left(\frac{\varepsilon(k)}{2T} \right). \tag{3.16}$$

Ezen összefüggések felhasználásával a két sajátérték kifejezhető a g függvényekkel, ezek fogják szolgáltatni $\mathcal{W}_N$ operátor várható értékét, vagyis az összefonódási tanút:

$$\mu_{min}^{(1)} = -\frac{1}{4} \left[-g_0^2 + g_c^2 - g_s^2 - 1 + 2\sqrt{g_0^2 + g_c^2} \right], \tag{3.17}$$

$$\mu_{min}^{(2)} = \frac{1}{4} [g_0^2 - g_c^2 + g_s^2 + 2|g_s| - 1]. \tag{3.18}$$

Fontos megjegyeznünk, hogy egy két-qubit állapot parciális transzponáltjának legfeljebb egy negatív sajátértéke van, és az összes sajátérték a $\left[-\frac{1}{2}, 1 \right]$ intervallumba esik [30], [31].

Most vizsgáljuk meg $\mu_{min}^{(1)}$, $\mu_{min}^{(2)}$ sajátértékek, valamint h , γ paraméterek közti kapcsolatot. A rendezetlen vonal mentén, $h^2 + \gamma^2 = 1$ $\mu_{min}^{(1)} = \mu_{min}^{(2)}$ és ebben a tartományban az állapot szeparálható, még $T = 0$ esetén is. Numerikusan belátható, hogy $h^2 + \gamma^2 \leq 1$ tartományban $\mu_{min}^{(1)} < \mu_{min}^{(2)}$, $h^2 + \gamma^2 > 1$ tartományban pedig $\mu_{min}^{(1)} > \mu_{min}^{(2)}$. Ezen eredményeket összefoglalva a negativitási összefonódási tanú esetén a következő eredményre jutottunk:

$$\langle \mathcal{W}_N \rangle = \begin{cases} -\frac{1}{4} \left[-g_0^2 + g_c^2 - g_s^2 - 1 + 2\sqrt{g_0^2 + g_c^2} \right], & \text{ha } h^2 + \gamma^2 \leq 1 \\ -\frac{1}{4} [g_0^2 - g_c^2 + g_s^2 + 2|g_s| - 1], & \text{ha } h^2 + \gamma^2 > 1 \end{cases}$$

3.2. Összefonódás vizsgálata kvencs utáni nemegyensúlyi stacionárius állapotban

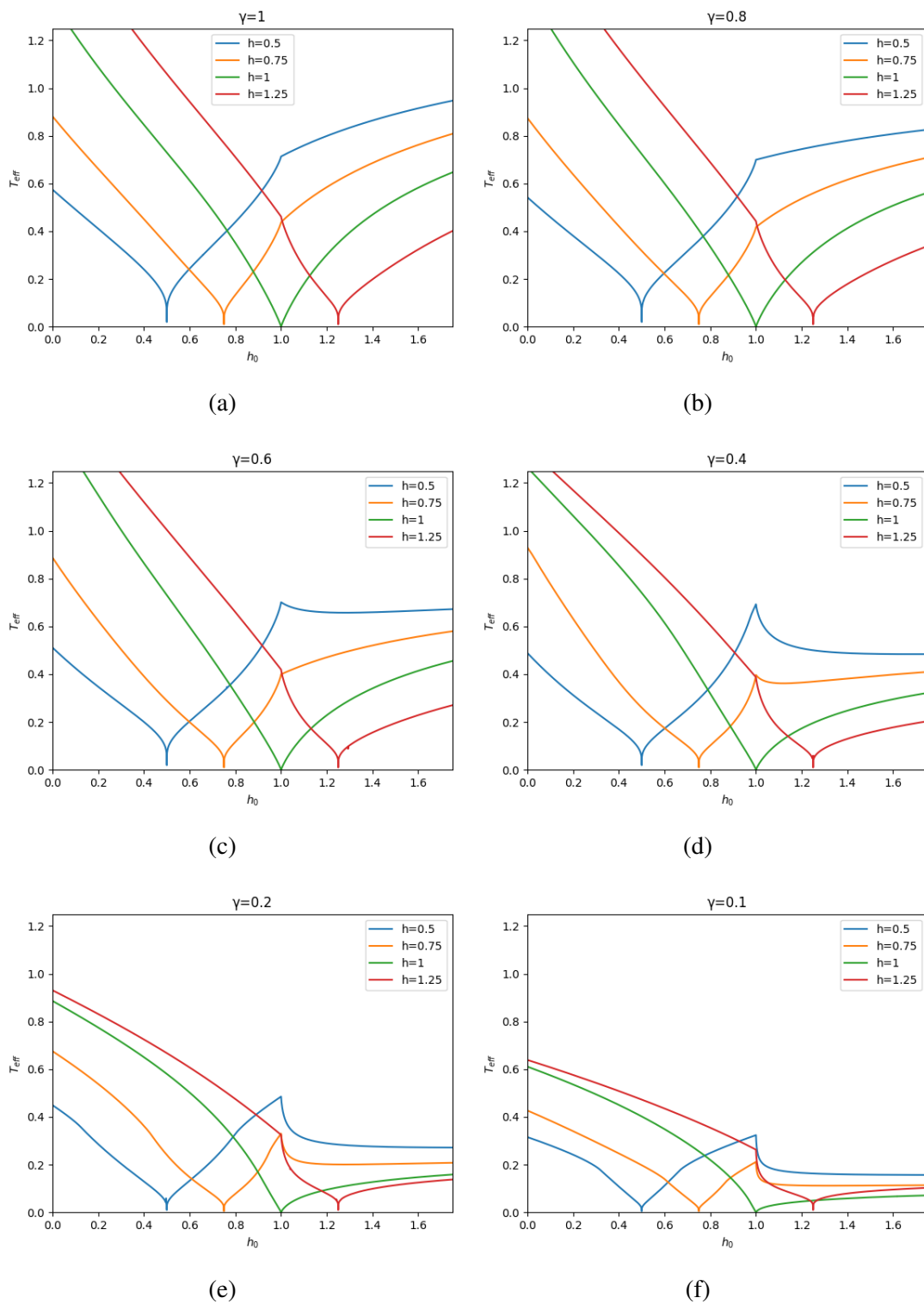
Ebben a részben az az alapfelvetésünk, hogy a (1.2) Hamilton-operátorral leírt rendszer alapállapot energiája (2.62), egyenlő a kvencs utáni nemegyensúlyi stacionárius állapotban lévő rendszer (2.70) energiájával. A két mennyiséget egyenlővé téve láthatjuk, hogy az egyenlőségük T_{eff} effektív hőmérséklettől függ. Ezt a hőmérsékletet adott h , h_0 értékek esetén numerikus számításokkal meghatározhatjuk. T_{eff} ismeretében meghatározható g_0 , g_s valamint g_c függvények, majd $\mathcal{W}_N$ negativitási összefonódási tanú.

Ezt elvégeztem, h , h_0 paraméterek értékeit 0 és 3 között változtattam, ebben a tartományban vizsgáltam az összefonódott állapotok jelenlétét. A 0 – 3 intervallumot 300 egységre bontottam tovább, ezzel finomítva a felbontást.

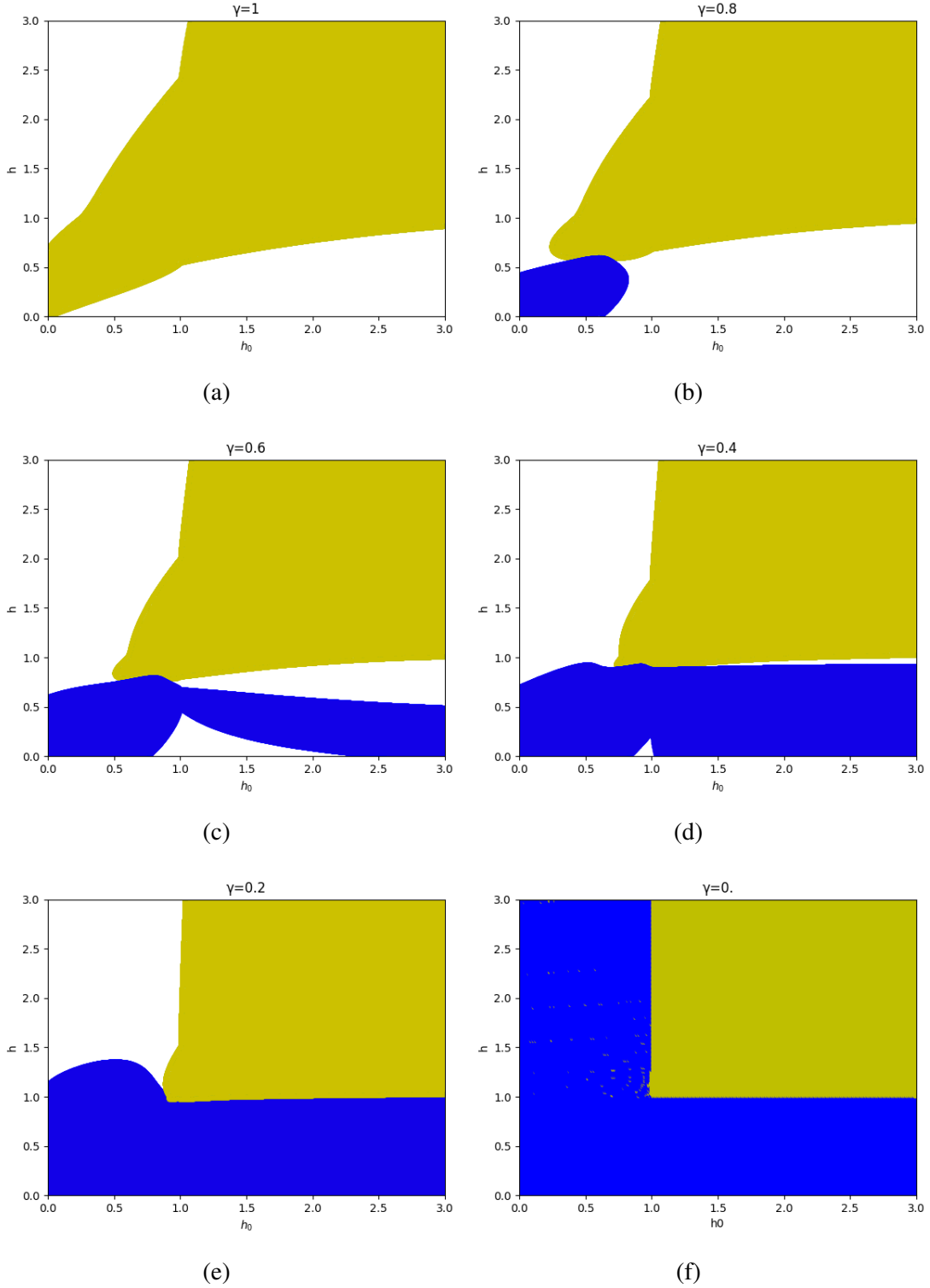
Kiválasztottam hat γ értéket, ezután négy h érték esetén ábrázoltam az effektív hőmérsékletek értékét h_0 függvényében. Ezen eredmények 3.1 ábrán vannak feltüntetve. Az ábrán látható, hogy a $h_0 = h$ esetet nézve $T_{eff} = 0$, ha pedig $h_0 \neq h$, akkor minden effektív hőmérséklethez tartozik kettő h_0 érték.

3.2 ábrán a kvencs utáni összefonódott állapotokat jeleníttem meg a $h - h_0$ síkon. Sárgával ábrázoltam (3.18) sajátérték alapján számolt összefonódási tanú által detektált összefonódást, kézzel pedig (3.17) sajátértékből származó tanú által detektált összefonódást. γ paramétert 1, 0.8, 0.6, 0.4, 0.2, 0 értékek esetén vizsgáltam, valamint a $\gamma = 0$ esetet a $\gamma \rightarrow 0^+$ határesettel közelítettem.

3.2 ábra alapján látható, hogy $\gamma = 1$, vagyis a homogén kvantumos Ising-lánc esetén (3.17) egyenlet (kék szín) nem jelez összefonódást. γ értékének csökkentésével h , h_0 kisebb értékeinél kezd el (3.17) összefonódást jelezni, majd az általa detektált összefonódott állapotok száma nő, ezzel párhuzamosan (3.18) (sárga) által detektált állapotok száma csökken. A két tanú által detektált állapotok együttes száma γ értékének csökkentésével növekszik.



3.1. ábra. Az ábrákon különböző γ értékek esetén, rögzített h -értékekre az effektív hőmérséklet görbéi láthatóak h_0 függvényében



3.2. ábra. Az ábrákon kék színnel jelöltem (3.17) által, sárgával pedig (3.18) által detektált összefonódott állapotokat. $\gamma = 1$ esetben, vagyis a kvantumos Ising lánc esetén csak (3.18) detektál összefonódást a sík átlója mentén. $\gamma = 0.8$ -nál már (3.17) is detektál összefonódást a sík $[0 - 0.5] \times [0 - 0.5]$ tartományán. γ -át tovább csökkentve, $\gamma = 0.6$ -ra, (3.17) összefonódást jelez már az $[1 - 3] \times [0 - 1]$ tartományon is. (3.18) által jelzett összefonódott állapotok nem változnak jelentősen. $\gamma = 0.4$ -re (3.17) már közel az egész $[1 - 3] \times [0 - 1]$ tartományon összefonódást jelez. $\gamma = 0.2$ esetén (3.17) már a teljes $[1 - 3] \times [0 - 1]$ tartományt összefonódottnak detektálja, valamint $[0 - 1] \times [1 - 3]$ 'alsó' részén is kezd összefonódást jelezni. Végül, $\gamma = 0$ esetben (3.17) összefonódott állapotot jelez a $[0 - 1] \times [0 - 3]$, és a $[0 - 3] \times [0 - 1]$ tartományon, (3.18) pedig az $[1 - 3] \times [1 - 3]$ tartományon.

4. fejezet

Összefoglalás

Munkám során az XY-modellel leírt kvantumos spinlánc nemegyensúlyi stacionárius állapotai-ban fellépő kvantumos összefonódást vizsgáltam. Ehhez első lépésként az XY-modell Hamilton-operátorát írtam fel szabad-fermion reprezentációban, ehhez a Jordan-Wigner-, a Bogoliubov-, valamint a Fourier-transzformációt alkalmaztam. Ebből felírtam a módusok energiáját, vala-mint az alapállapothoz tartozó energiát. A kvencs előtti, valamint a nemegyensúlyi stacionárius állapot energiáját összevetve kaptam meg T_{eff} effektív hőmérsékletet. Ezután bevezettem a negativitáson alapuló összefonódási tanút, amely várható értékét (3.15) függvények segítségével számoltam ki. Megvizsgáltam hogy az így kapott eredmény negatív, vagy pozitív, azaz hogy detektál-e összefonódott állapotot az összefonódási tanú, vagy sem. Ezen eredményeket tüntettem fel a 3.2 ábrán, a két összefonódási tanú által detektált állapotokat külön színnel. Az eredmények alapján látható, hogy $\gamma = 1$ esetén csak (3.18) egyenlet jelez összefonódást. γ ér-tékének csökkentésével h , h_0 kis értékeinél kezd el (3.17) összefonódást jelezni, majd az általa detektált összefonódott állapotok száma nő, míg (3.18) által detektált állapotok száma csökken. A két tanú által detektált állapotok együttes száma γ csökkentésével növekszik. Ezen eredmé-nyek mellett rögzített γ értékre ($\gamma = 1$) megvizsgáltam az effektív hőmérséklet h_0 függését $h = 0, 25; 0, 5; 0, 75; 1; 1, 25$ esetekben, ezt tartalmazza a 3.1 ábra. Az ábráról jól látható, hogy ha $h = h_0$, akkor $T_{eff} = 0$, ellenkező esetben, ha $h \neq h_0$, akkor egy T_{eff} értékhez kettő h_0 érték tartozik.

Irodalomjegyzék

- [1] M. Horodecki, P. Horodecki, and R. Horodecki, *Separability of mixed states: necessary and sufficient conditions*, Phys. Lett. A 271, 319 (1996).
- [2] B. M. Terhal, *Bell inequalities and the separability criterion*, Phys. Lett. A 271, 319 (2000).
- [3] M. Lewenstein, B. Kraus, J. I. Cirac, and P. Horodecki, *Optimization of entanglement witnesses*, Phys. Rev. A 62, 052310 (2000).
- [4] N. Kiesel, C. Schmid, U. Weber, G. Tóth, O. Gühne, R. Ursin, and H. Weinfurter, *Experimental analysis of a four-qubit photon cluster state*, Phys. Rev. Lett. 95, 210502 (2005).
- [5] G. Tóth, *Entanglement witnesses in spin models*, Phys. Rev. A 71, 010301(R) (2005).
- [6] G. Tóth and O. Gühne, *Detection of multiple entanglement with two-body correlations*, Appl. Phys. B 82, 237 (2006).
- [7] O. Gühne and G. Tóth, *Energy and multipartite entanglement in multidimensional and frustrated spin models*, Phys. Rev. A 73, 052319 (2006).
- [8] L.-A. Wu, S. Bandyopadhyay, M. S. Sarandy, and D. A. Lidar, *Entanglement observables and witnesses for interacting quantum spin systems*, Phys. Rev. A 72, 032309 (2005).
- [9] I. Siloi and F. Troiani, *Towards the chemical tuning of entanglement in molecular nanomagnets*, Phys. Rev. B 73, 134404 (2012).
- [10] F. Troiani and I. Siloi, *Energy as a witness of multipartite entanglement in chains of arbitrary spins*, Phys. Rev. A 86, 032330 (2012).
- [11] F. Troiani, S. Carretta, and P. Santini, *Detection of entanglement between collective spins*, Phys. Rev. B 88, 195421 (2013).
- [12] A. Peres, *Separability criterion for density matrices*, Phys. Rev. Lett. 77, 1413 (1996).
- [13] P. Horodecki, *Separability criterion and inseparable mixed states with positive partial transposition*, Phys. Lett. A 232, 333 (1997).

- [14] B. Blass, H. Rieger, and F. Iglói, *Quantum relaxation and finite-size effects in the XY chain in a transverse field after global quenches*, EPL (Europhysics Letters) 99, 30004 (2012).
- [15] K. Sengupta, S. Powell, and S. Sachdev, *Quench dynamics across quantum critical points*, Phys. Rev. A 69, 053616 (2004).
- [16] S. Sotiriadis, D. Fioretto, and G. Mussardo, *Zamolodchikov-Faddeev algebra and quantum quenches in integrable field theories*, J. Stat. Mech.: Theory Exp. 2012 (02), P02017
- [17] G. Roux, *Quenches in quantum many-body systems: One-dimensional bose-hubbard model reexamined*, Phys. Rev. A 79, 021608 (2009).
- [18] L. Vidmar and M. Rigol, *Generalized Gibbs ensemble in integrable lattice models*, J. Stat. Mech.: Theory Exp. 2016 (6), 064007.
- [19] B. Pozsgay, *Quantum quenches and generalized Gibbs ensemble in a bethe ansatz solvable lattice model of interacting bosons*, J. Stat. Mech.: Theory Exp. 2014 (10), P10045.
- [20] E. Lieb, T. Schultz, and D. Mattis, *Two soluble models of an antiferromagnetic chain*, Ann. Phys 16, 407 (1961).
- [21] F. Iglói, G. Tóth, *Entanglement witnesses in the XY-chain: Thermal equilibrium and post-quench non-equilibrium states*, arXiv:2207.04842 (2022)
- [22] P. Pfeuty, *The one-dimensional ising model with a transverse field*, Ann, Phys. 57, 79 (1970).
- [23] P. Jordan, and E. P. Wigner, *Über das Paulische equivalenzverbot*, Z.Phys. 47, 631 (1928)
- [24] F. Iglói and H. Rieger, *Long-range correlation in the nonequilibrium quantum relaxation of a spin chain*, Phys. Rev. Lett. 85, 3233 (2000).
- [25] M. Lewenstein, B. Kraus, P. Horodecki, and J. I. Cirac, *Characterization of separable states and entanglement witnesses*, Phys. Rev. A 63, 044304 (2001).
- [26] B. M. Terhal, *Detecting quantum entanglement*, Theor. Comput. Sci. 287, 313 (2002).
- [27] G. Vidal and R. F. Werner, *Computable measure of entanglement*, Phys. Rev. A 65, 032314 (2002).
- [28] E. Barouch, B. M. McCoy, and M. Dresden *Statistical mechanics of the XY model. I* Phys. Rev. A 2, 1075 (1970).
- [29] E. Barouch, B. M. McCoy *Statistical mechanics of the XY model. III* Phys. Rev. A 3, 2137 (1971).

- [30] A. Senparuta, R. Tarrach, and G. Vidal, *Local description of quantum inseparability* Phys. Rev. A 58, 826 (1998).
- [31] S. Rana *Negative eigenvalues of partial transposition of arbitrary bipartite states*, Phys. Rev. A 87, 054301 (2013).

A. függelék

Python kód a numerikus számolások elvégzéséhez

```
import math
import numpy as np
import time
from numba import jit
import matplotlib.pyplot as plt

'''itt definiálom az összefonódási tanú kiszámolásához szükséges g
függvényeket'''
@jit(nopython=True)
def g0function (T, gamma, h, L ):
    k = -math.pi
    g0 = 0
    d = 2*math.pi/L
    while k <= math.pi:
        g0 = g0 + (((math.tanh(math.sqrt(((gamma * math.sin(k))
        ** 2) + (h - math.cos(k))
        ** 2) / T))) * (
            1 / (math.sqrt(
                ((gamma * math.sin(k)) ** 2) + (h - math.cos(k))
                ** 2))) * ((h - math.cos(k))))
        k = k + d
    g0 = g0 / L
    return g0
@jit(nopython=True)
```

```

def gfunction(T, gamma, h, L):
    k = -math.pi
    gs = 0
    d = 2*math.pi/L
    while k <= math.pi:
        gs = gs + ((math.tanh(math.sqrt(((gamma * math.sin(k))
** 2) + (h - math.cos(k)) ** 2) / T)) * (1 /
        (math.sqrt(((gamma * math.sin(k)) ** 2)
        + (h - math.cos(k))** 2)))) * (
        ((math.sin(k)) ** 2)))
        k = k + d
    gs = -(gs / L) * gamma
    return gs

@jit(nopython=True)
def gcfunction(T, gamma, h, L):
    d = 2*math.pi/L
    gc = 0
    k = -math.pi
    while k <= math.pi:
        gc = gc + ((math.tanh(np.sqrt(((gamma * np.sin(k)) ** 2)
+ (h - np.cos(k)) ** 2) / T)) * (1 /
        np.sqrt(((gamma * np.sin(k)) ** 2) +
        (h - np.cos(k)) ** 2)))) * (np.cos(k) *
        ((np.cos(k) - h)))
        k = k + d
    gc = gc / L
    return gc

@jit(nopython=True)
'''itt adom meg az egyensúlyi állapot
alapállapotához tartozó energiát'''
def elsofgv(gamma, h, T, L):
    c = -math.pi
    d = 2*math.pi/L
    elso = 0
    while c <= math.pi:
        elso = elso + (math.tanh(math.sqrt(((gamma * math.sin(c))
** 2) + (h - math.cos(c)) ** 2) / T) * math.sqrt(

```

```

        ((gamma * math.sin(c))
         ** 2) + (h - math.cos(c)) ** 2))
    c = c+d
    return else
@jit(nopython=True)
'''itt adom meg a kvencs utáni nemegyensúlyi stacionárius
állapot energiáját'''
def masodikfgv(h, h0, gamma, L):
    masodik = 0
    c = -math.pi
    d = 2*math.pi/L
    while c <= math.pi:
        masodik = masodik + abs((math.cos(c) - h0) *
        (math.cos(c) - h) + ((gamma * math.sin(c)) ** 2)) / (
            math.sqrt(((gamma * math.sin(c)) ** 2) +
            (h0 - math.cos(c)) ** 2)))
        c = c + d
    return masodik
@jit(nopython=True)
'''itt adom meg a két összefonódási tanút'''
def tanu2(gs, g0, gc):
    W = (-1 / 4) * (2 * abs(gs) + ((g0) ** 2) - ((gc) ** 2) +
    ((gs) ** 2) - 1)
    return W
@jit(nopython=True)
def tanu1(gs, g0, gc):
    w = -(1/4)*(-(g0**2)+(gc**2)-(gs**2)-1+2*math.sqrt(
    (g0**2)+(gc**2)))
    return w
'''itt adom meg a kezdeti paramétereket'''
h = 0.01
h0 = 0.01
T = 2.5
gamma = 0.6
L = 100000
'''az idő megadása csak a program futási
idejének pontos tudása miatt érdekes'''

```

```

start_time = time.time()
'''két for ciklussal számoltatom ki adott paraméterek
esetén az összefonódási tanút a h0-h síkon'''
for b in range(299):
    for i in range(299):
        K = 2.5
        T = 2.5
        result = 1
        '''while ciklussal pontosítom az
effektív hőmérséklet értékét'''
        while abs(result) > 10**(-8):
            elso = elsofgv(gamma, h, T, L)
            masodik = masodikfgv(h, h0, gamma, L)
            result = (elso - masodik) / L
            if result > 0:
                T = T + K / 2
            elif result < 0:
                T = T - K / 2
            K = K / 2
        '''itt hívom meg a fent
megadott függvényeket'''
        gc = gcfuction(T, gamma, h, L)
        gs = gsfunction(T, gamma, h, L)
        g0 = g0function(T, gamma, h, L)
        '''megnézem hogy az egyik sajátérték kisebb-e
mint 0, ha igen akkor az állapot
összefonódott, ha nem, akkor kiszámoltatom
a másik sajátértéket és ebből mondom
meg hogy összefonódott-e vagy sem'''
        W2 = tanu2(gs, g0, gc)
        if W2 < 0:
            plt.plot(h0, h, "y.")
            '''ha összefonódást jelez (3.18 egyenlet),
akkor ezt az ábrán egy sárga ponttal jelölöm'''
        else:
            W1 = tanu1(gs, g0, gc)
            if W1 < 0:

```

```

plt.plot(h0, h, "b.")
'''ha összefonódást jelez (3.17 egyenlet),
akkor ezt az ábrán egy kék ponttal jelölöm'''
h = h+0.01
h=0.01
h0 = h0+0.01
print ("%s_sconds"%(time.time()-start_time))
#itt formálok és kéretem ki az ábrát
plt.xlim(0, 3)
plt.ylim(0, 3)
plt.xlabel('h0')
plt.ylabel("h")
plt.title('γ=0.6')
plt.savefig("összefonódásgamma=0.6.png")
plt.show()

```