



M Ű E G Y E T E M 1 7 8 2

TDK DOLGOZAT

Kvantumos spinláncok dinamikája mátrix szorzat állapotokkal

Király Csilla

Témavezető: Lencsés Máté
Tudományos munkatárs
Wigner Fizikai Kutatóközpont
Részecske- és Magfizikai Intézet,
Elméleti Fizikai Ösztály

BME, TTK
2023

Köszönetnyilvánítás

Ezúton szeretnék köszönetet mondani témavezetőmnek, Lencsés Máténak, aki nemcsak szakértelmével és hasznos magyarázataival, de határtalan segítőkészségével is hozzájárult ahhoz, hogy megszülethessen ez a dolgozat. Szeretném továbbá kifejezni őszinte hálám azért, hogy mindig pontosan szem előtt tartotta céljaimat és önzetlen munkájával segítette beteljesítenem azokat. Ugyanakkor szeretném megköszönni támogatását, rengeteg értékes tanácsát és azt a mérhetetlen motivációt is, amivel a konzultációk során folyamatosan elhalmozott. Ezek mind nagyban hozzájárultak a személyes fejlődésemhez nemcsak szakmailag, de Máténak köszönhetően önbizalmat is nyertem, az egyetemen élém gördülő akadályokkal pedig könnyebben nézek szembe és sokkal jobban bírom magamban és abban, hogy meg tudom valósítani az álmaimat.

Tartalomjegyzék

1. Bevezetés	3
2. Időfejlesztő blokk decimációs algoritmus véges és végtelen spinláncokra (TEBD és iTEBD)	5
2.1. Kvantumösszefonódás és entrópia	5
2.2. Terület- és térfogattörvény	7
2.3. Mátrix szorzat állapotok (MPS)	7
2.4. Az iTEBD algoritmus működése	10
2.5. Az iTEBD és a TEBD algoritmusok közötti különbségek	14
3. A Blume–Capel modell vizsgálata egzakt diagonalizációval	15
3.1. A Blume–Capel modell	15
3.2. Energiaszintek véges lánc esetén	16
3.3. Alapállapotú energiasűrűségek	18
4. Dinamikai kétpont-függvények és struktúra faktorok	20
4.1. Korrelációs függvények form faktor kifejtésben	20
4.2. Dinamikai kétpont-függvény számolása TEBD-vel	21
5. Az E_8 modell dinamikai kétpont-függvényei	23
5.1. A transzverz Ising modell és az E_8 modell	24
5.2. Kétpont-függvények az Ising modellben	25
5.3. E_8 modell dinamikai kétpont-függvényei és dinamikai struktúra faktorai	27
6. Az E_7 modell dinamikai kétpont-függvényei	38
6.1. Z_2 szimmetria	38
6.2. E_7 vonal	39
6.3. E_7 modell dinamikai kétpont-függvényei és dinamikai struktúra faktorai	40
7. Összefoglalás és kitekintés	47

1. fejezet

Bevezetés

A statisztikus fizika sok szabadsági fokú rendszerek vizsgálatával foglalkozik, például az egydimenziós soktest kvantumrendszerek, így a spinláncok kritikus jelenségeivel is.

Az egydimenziós kvantumrendszerek fázisátmeneti (kritikus) pontjaikban konform térelméletekkel modellezhetők. Célunk a kritikus ponthoz közeli kvantumrendszerek dinamikai kétpont-függvényeinek vizsgálata volt a TEBD módszer alapján megírt dinamikai kétpont-függvényt számoló algoritmusunk segítségével.

Ezt néhány sorban motiválnám. A Blume–Capel modell egy speciális spinlánc, melynek trikritikus pontja a skálázó limeszben egy $c = 7/10$ centrális töltéssel rendelkező konform térelmélettel írható le, és melynek trikritikus pontja körüli termális perturbációja az E_7 modell [1, 2].

A trikritikus Ising vagy Blume–Capel modellt még az 1960-as években mágneses anyagokban talált elsőrendű fázisátalakulás megértésére találták ki [3, 4]. Mi a kvantumos esetet vizsgáljuk, amikor a Blume–Capel modell egy egyes spinű lánc. Ennek még nincs kísérleti megvalósítása, azonban egy nagyon hasonló, az ún. E_8 modellnek, mely a $c = 1/2$ centrális töltésű kritikus Ising modell longitudinális mágneses térrel vett pertrubációja, már látezik kísérleti megvalósítása. 2010-ben a $CoNb_2O_6$ kvázi egydimenziós Ising ferromágnes segítségével sikerült realizálni a modellt [5]. A [6] cikkben látható, hogy a kísérletiek munkájához nagyban hozzájárultak az iTEBD-vel végzett szimulációk is. Éppen ezért az E_7 modell megvalósításához is hasonlóan hasznosak lehetnek az iTEBD-vel vagy TEBD-vel végzett szimulációk.

Korábbi munkám során a Blume–Capel modell kvencs utáni dinamikáját vizsgáltam, valamint a skálázó limeszére tett térelméleti jóslatokat igazoltam. Ezúttal pedig a [7, 8], cikkekben szereplő eredmények alátámasztása volt a célunk annak érdekében, hogy a Blume–Capel modell esetleges megvalósítása esetén a kísérleti eredményeket magyarázni tudjuk. Fontos továbbá megemlíteni a napokban megjelent [9] kéziratot is, ugyanis ez egy előrelépés lehet az E_7 modell egy alternatív realizációjához vezető úton. Reméljük, hogy újabb- és újabb mágneses anyagok felfedezésével, esetleg ultra-hideg atomok segítségével a közeljövőben realizálhatóvá válik a Blume–Capel modell is.

A dolgozatban tehát az E_8 modellt, valamint az E_7 modellt vizsgáltuk. Térelméleti jóslatok ismertek az E_8 és E_7 modellek dinamikai struktúra faktoraira. Ezen jóslatokat szerettük volna alátámasztani a numerikus eredményeinkkel, ehhez egy dinamikus kétpont-függvényt számoló algoritmust fejlesztettem, melyből meghatároztam a $q = 0$ impulzushoz tartozó dinamikai struktúra faktort.

A dolgozatban először az iTEBD és TEBD módszereket ismertetjük. Bemutatjuk, hogy milyen feltételezéseket és közelítéseket alkalmazunk az algoritmusban. Ezt követően egzakt diagonalizációval vizsgáljuk a véges Blume–Capel spinláncot és megmutatjuk, hogy az alapállapot energiásűrűségekre kapott eredmények összhangban vannak az iTEBD- és TEBD-vel számolt eredménnyel.

A dolgozat második felében először röviden ismertetjük a dinamikai struktúra faktorok térelméleti leírását és bemutatjuk a TEBD-hez írt kétpont-függvényt számoló algoritmusunkat, valamint annak tesztelését a korrelációs hosszak kimérésének segítségével a transzverz Ising modellben. Végül az E_8 és az E_7 modellek dinamikai struktúra faktorait vizsgáljuk az algoritmusunk segítségével. A kapott eredményeket pedig összevetjük a térelméleti jóslatokkal.

2. fejezet

Időfejlesztő blokk decimációs algoritmus véges és végtelen spinláncokra (TEBD és iTEBD)

A kvantumrendszerek állapotainak közelítésére több algoritmus is szolgál. Ezek egyike az ún. időfejlesztő blokk decimációs algoritmus (time-evolving block decimation, TEBD), ami egy speciális módszer arra, hogy zárt, nagy kvantumrendszerek időfejlődését vizsgáljuk valós illetve képzetes időben egyaránt [10].

A TEBD módszer alapillére a kvantumrendszerek kvantumos összefonódási tulajdonsága és az algoritmus azt a fontos megállapítást használja ki, hogy egy általános kvantumállapotot át lehet írni mátrix szorzat állapotba (MPS), melyen speciális állapotokra további közelítésekkel élhetünk.

Mi olyan véges spinláncokat vizsgáltunk, amit bizonyos esetekben hatékonyan lehet MPS alapú TEBD-vel közelíteni. Ebben a fejezetben tehát a TEBD módszert és az ehhez szükséges fizikai háttérrel mutatjuk be, majd az algoritmus működéséről, illetve az abban használt közelítésekről is szó lesz. Mindezt pedig az [11] jegyzet alapján tesszük. Továbbá kitérünk a végtelen időfejlesztő blokk decimációs módszerre (iTEBD) [12] is, ugyanis munkánk során ennek az algoritmusnak a használatára is szükségünk volt.

2.1. Kvantumösszefonódás és entrópia

Az összefonódás a kvantummechanika egyik alapvető jelensége. Akkor beszélünk róla, amikor egy kvantumrendszert jellemző szabadsági fokok nem írhatók le egymástól függetlenül. Például ha két spin összefonódott állapotban van, akkor nem tudunk úgy mérést végezni az egyikén, hogy az ne legyen hatással a másikra. Soktest kvantumrendszerekben a részecskék közötti ismétlődő kölcsönhatások is összefonódást hoznak létre, ezt hívjuk kvantum soktest-összefonódásnak. Az összefonódás tanulmányozása ilyen rendszerekben hasznos eszköz lehet azok jellemzésére. Például az összefonódási entrópia skálázásának vizsgálatából tudunk következtetni a kritikus pont tulajdonságaira [13, 12, 14, 15].

A továbbiakban egydimenziós soktest kvantumrendszerekben való összefonódással foglalkozunk. Ehhez tekintsünk egy speciális rendszert, az egydimenziós N hosszú spinláncot. Ennek Hilbert-tere a

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 \otimes \dots \otimes \mathcal{H}_N \quad (2.1)$$

tenzorszorzattal adható meg, ahol $\mathcal{H}_i$ az i -edik helyen lévő spin Hilbert-tere, az ún. lokális állapotter. Az egyszerűség kedvéért feltesszük most, hogy a lokális állapotterek megegyeznek, és $\mathcal{H}_i = \mathbb{C}^d$. Ebből pedig következik, hogy a spinlánc (komplex) deminziója $\dim \mathcal{H} = d^N$.

A rendszer egy tiszta állapota felírható a természetes tenzorszorzat bázison:

$$|\psi\rangle = \sum_{\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_N=1}^d \psi^{\alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_N} |\alpha_1\rangle \otimes |\alpha_2\rangle \otimes \dots \otimes |\alpha_N\rangle, \quad (2.2)$$

azaz d^N komplex $\psi^{\alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_N}$ együtthatóval adható meg. Ahhoz, hogy vizsgálni tudjuk az adott rendszert, meg kell határozni az összes együtthatót, ez azonban már nem túl nagy N rendszer-méretre is nagyon sok komplex számot jelent. A számítógép véges memóriájából adódóan nem tudunk ennyi adatot egyszerre eltárolni, vagyis csak kis méretű rendszerek vizsgálatára van lehetőségünk. Ha nagyobb kvantumrendszerek tanulmányozása a cél, akkor viszont közelítésekre van szükség, melyek segítségével elég kevesebb adattal dolgozni ahhoz, hogy jellemezni tudjuk a rendszert. Erre az ún. mátrix szorzat állapotok (MPS) nyújtanak egy megoldást. Ennek ismertetése előtt azonban emlékeztetünk néhány kvantummechanikai fogalomra.

Vágjuk ketté valahol a példaként vett N hosszú spinláncunkat. Ekkor a teljes rendszer egy bal- ($\mathcal{H}_L$) és egy jobb ($\mathcal{H}_R$) oldali részrendszer tenzorszorzataként adható meg:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_L \otimes \mathcal{H}_R, \quad (2.3)$$

az összetett rendszer tiszta állapota pedig legyen $|\psi\rangle$ ($\in \mathcal{H}$). Ekkor léteznek a $\mathcal{H}_L$ -ben és a $\mathcal{H}_R$ -ben olyan ortonormált állapotok ($|\alpha\rangle_L$ és $|\alpha\rangle_R$), melyekkel a rendszer tiszta állapota

$$|\psi\rangle = \sum_{\alpha} \Lambda_{\alpha} |\alpha\rangle_L \otimes |\alpha\rangle_R \quad (2.4)$$

alakban írható fel. Ezt nevezzük Schmidt-féle felbontásnak, a Λ_{α} faktorokat pedig Schmidt-együtthatóknak, melyekre:

$$\begin{aligned} \Lambda_{\alpha} &\geq 0 \quad \forall \alpha\text{-ra} \\ \sum_{\alpha} \Lambda_{\alpha}^2 &= 1. \end{aligned} \quad (2.5)$$

Egy rendszer összefonódott állapotban van, ha nem tudjuk tiszta állapotok szorzatára szétbontani. A $\mathcal{H}_L$ ($\mathcal{H}_R$) részrendszert leíró sűrűségmátrixot redukált sűrűségmátrixnak hívjuk, amit úgy kapunk, hogy kiszedjük a $\mathcal{H}_R$ ($\mathcal{H}_L$) rendszert leíró szabadsági fokokat azzal, hogy a teljes sűrűségmátrix $\mathcal{H}_R$ ($\mathcal{H}_L$) rendszer szerinti parciális nyomát vesszük. Értelemszerűen tehát egy összefonódott tiszta kvantumállapot redukált sűrűségmátrixa a részrendszer egy kevert állapotát leíró sűrűségmátrix lesz.

Az összetett rendszer sűrűségmátrixa az alábbi

$$\rho \equiv |\psi\rangle \langle \psi| = \sum_{\alpha} \Lambda_{\alpha}^2 |\alpha\rangle_L \langle \alpha|_L \otimes |\alpha\rangle_R \langle \alpha|_R \quad (2.6)$$

tenzorszorzattal adható meg, ahol használtuk a (2.4) felbontást. A redukált sűrűségmátrixokra pedig a

$$\begin{aligned} \rho^L &\equiv \text{Tr}_R \rho = \sum_{\alpha} \Lambda_{\alpha}^2 |\alpha\rangle_L \langle \alpha|_L \\ \rho^R &\equiv \text{Tr}_L \rho = \sum_{\alpha} \Lambda_{\alpha}^2 |\alpha\rangle_R \langle \alpha|_R \end{aligned} \quad (2.7)$$

kevert állapotok adódnak. Vegyük észre, hogy a redukált sűrűségmátrixok sajátértékei éppen a Schmidt-együtthatók négyzetei. A részrendszerek közötti összefonódás számszerűsítésére a von Neumann entrópia vagy összefonódási entrópia szolgál¹, amely a redukált sűrűségmátrixsal adható meg:

$$S_i \equiv -\text{Tr} \rho_i \ln \rho_i \quad i = L, R. \quad (2.8)$$

¹Kiindulásként feltettük, hogy a teljes rendszer tiszta állapotban van.

Könnyen látható, hogy

$$S(\rho^L) = S(\rho^R) = - \sum_{\alpha} \Lambda_{\alpha}^2 \ln \Lambda_{\alpha}^2, \quad (2.9)$$

azaz az összefonódási entrópia meghatározható a Schmidt-koefficiensek ismeretében.

2.2. Terület- és térfogattörvény

Az összefonódási entrópia kapcsán lehet terület- vagy térfogattörvényről beszélni, attól függően, hogy hogyan függ a részrendszerek összefonódása azok méretétől. Itt a terület és térfogat mennyiségeket az adott részrendszer dimenziójának megfelelően kell értelmezni. Például egy dimenzióban a terület maga a vágási pont és a térfogat a lánc hossza.

Az hogy az állapot terület- vagy térfogattörvényt mutat attól függ, hogy mennyire összefonódott. Erős összefonódás esetén nagy a korrelációs hossz és ilyenkor az entrópia nőni fog a térfogattal, míg gyenge összefonódás esetén a kicsi korrelációs hosszúnak köszönhetően az entrópia arányos lesz a területtel.

Kvantumos soktestrendszerek spektruma tartalmazhat m tömegrést. Kvantum kritikus pontban ez a tömegrés elűnik, azaz ilyenkor $m = 0$. Tömeges esetet vizsgálva a korrelációs hossz ($1/m$) véges lesz, egymástól ennél nagyobb távolságra lévő spinek között már nem igazán lesz korreláció. Ilyen esetben az alapállapot felülettörvényt követ, azaz ha az egydimenziós láncunkat elvágjuk az A és a B kellően távoli pontokban, akkor az így kapott részrendszer entrópiája konstans lesz, ha az elvágási helyeket változtatjuk is. Kritikus pontban azonban a korrelációs hossz gyakorlatilag végtelen, ebben az esetben az entrópia már nem a területtel lesz arányos, hanem az A és B pontok közötti lánc hossz (l) természetes alapú logaritmusával ($S_{AB} \sim \ln l/a$), ahol a a rácsállandó. Ezt log-térfogattörvénynek nevezzük.

A területtörvényt követő állapotok sajátos tulajdonsága, hogy az állapot jól közelíthető $\chi \ll d^N$ Schmidt-bázisállapottal²:

$$\sum_{\alpha=1}^{\chi} \Lambda_{\alpha} |\alpha\rangle_L \otimes |\alpha\rangle_R \approx |\psi\rangle \Rightarrow \left\| |\psi\rangle - \sum_{\alpha=1}^{\chi} \Lambda_{\alpha} |\alpha\rangle_L \otimes |\alpha\rangle_R \right\| < \epsilon, \forall \epsilon > 0 \quad (2.10)$$

Ez a tulajdonság teszi lehetővé az egydimenziós kvantumállapotok MPS reprezentációját.

2.3. Mátrix szorzat állapotok (MPS)

Ebben az alfejezetben azt fogjuk megnézni, hogy hogyan lehet egy általános kvantumállapotot átírni MPS formába. Az átláthatóság kedvéért innentől kezdve nem fogjuk kiírni a tenzorszorzásokat, $|j_1\rangle \otimes |j_2\rangle \otimes \dots \otimes |j_N\rangle \equiv |j_1, \dots, j_N\rangle$.

Ugyancsak az N hosszú egydimenziós spinláncot vizsgáljuk, ahol a lokális állapotterek egyformák,

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 \otimes \dots \otimes \mathcal{H}_N \\ \dim \mathcal{H}_i &= d \quad \forall i \\ \dim \mathcal{H} &= d^N \end{aligned} \quad (2.11)$$

Egy általános kvantumállapot a spinek bázisainak tenzorszorzata a megfelelő együtthatókkal

$$|\psi\rangle = \sum_{j_1, \dots, j_N} \psi^{j_1, j_2, \dots, j_N} |j_1, \dots, j_N\rangle \quad (2.12)$$

²végtelen lánc esetén véges sok

Ennek MPS alakja a $\chi_{n-1} \times \chi_n$ dimenziójú $A^{[n]j_n}$ tenzorok segítségével állítható elő [16, 17],

$$|\psi\rangle = \sum_{j_1, \dots, j_N} A^{[1]j_1} A^{[2]j_2} \dots A^{[N]j_N} |j_1, \dots, j_N\rangle, \quad (2.13)$$

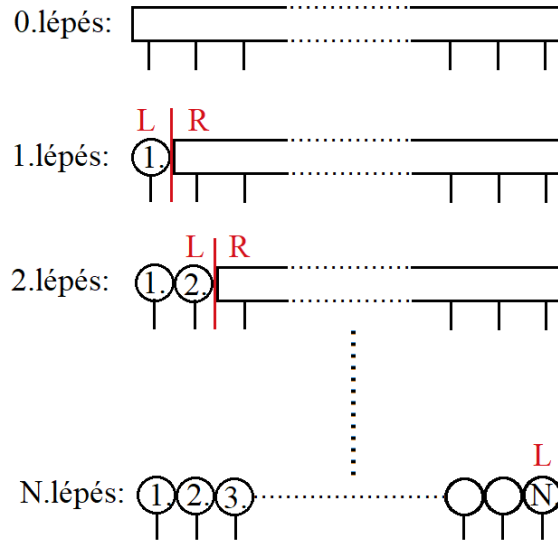
ahol $|j_n\rangle$ az n -ik lokális állapottér bázisa és az $A^{[n]j_n}$ tenzor pedig, ahogy azt lentebb látni fogjuk, a lokális állapotok és a Schmidt-állapotok között teremt kapcsolatot.

A célunk tehát az, hogy egy ilyen általános kvantumállapotot MPS formába alakítsunk át, amit egymás utáni Schmidt-dekompozíciók végrehajtásával tudunk megtenni úgy, hogy változtatjuk a lánc elvágásának helyét a 2.1. ábrán látható módon.

Első lépésben az egydimenziós láncot úgy vágjuk ketté, hogy a bal részrendszer csak egy spint tartalmazzon, míg a jobb az összes többi $(N-1)$. Így az összetett rendszer $|\psi\rangle$ kvantumállapotának Schmidt-felbontása (2.4) alapján

$$|\psi\rangle = \sum_{\alpha_1=1}^d \Lambda_{\alpha_1}^{[1]} |\alpha_1\rangle_{[1]} |\alpha_1\rangle_{[2, \dots, N]} \quad (2.14)$$

ahol a Schmidt-dekompozíció szerint $|\alpha_1\rangle_{[1]}$ ortonormált bázist képez $\mathcal{H}_L$ -ben, míg $|\alpha_1\rangle_{[2, \dots, N]}$ $\mathcal{H}_R$ -ben.



2.1. ábra. Az általános kvantumállapotokat át lehet írni MPS formára, ezt egy N hosszú spinlánc esetén a Schmidt-dekompozíció egymás utáni alkalmazásával tehetjük meg, ahol lépésről lépésre változtatjuk a teljes rendszert alkotó bal- és jobb oldali részrendszereket.

A levezetés során feltesszük, hogy $\chi_0 = \chi_N = 1$, vagyis az első és utolsó A tenzor tulajdonképpen egy d -hosszú (sor- és oszlop-) vektor.

Az MPS-ben megjelenő első tenzor:

$$A_{\alpha_1}^{[1]j_1} = \langle j_1 | \alpha_1 \rangle_{[1]} \quad (2.15)$$

Ebből kifejezve az $|\alpha_1\rangle_{[1]}$ Schmidt-állapotot és visszaírva a (2.15)-be, a következőt kapjuk

$$|\psi\rangle = \sum_{j_1=1}^d \sum_{\alpha_1=1}^d A_{\alpha_1}^{[1]j_1} \Lambda_{\alpha_1}^{[1]} |\alpha_1\rangle_{[1]} |\alpha_1\rangle_{[2, \dots, N]} \quad (2.16)$$

Ha továbblépünk és a spinláncot úgy vágjuk el, hogy a bal oldali részrendszer két spint tartalmazzon, akkor az így kapott részrendszerekre a Schmidt-felbontás a

$$|\psi\rangle = \sum_{\alpha_2=1}^{d^2} |\alpha_2\rangle_{[1,2]} |\alpha_2\rangle_{[3,\dots,N]} \quad (2.17)$$

alakot ölti, ezek alapján a második tenzor pedig a következő

$$A_{\alpha_1\alpha_2}^{[2]j_2} = (\langle\alpha_1|_{[1]} \langle j_2|) |\alpha_2\rangle_{[1,2]}. \quad (2.18)$$

Beépítjük az új tenzort is (2.14)-be,

$$|\psi\rangle = \sum_{\alpha_1=1}^d \sum_{\alpha_2=1}^{d^2} \sum_{j_1, j_2=1}^d A_{\alpha_1}^{[1]j_1} A_{\alpha_1\alpha_2}^{[2]j_2} \Lambda_{\alpha_2}^{[2]} |j_1, j_2\rangle |\alpha_2\rangle_{[3,\dots,N]}. \quad (2.19)$$

Ezt a módszert alkalmazva a harmadik lépés után az állapotunk:

$$|\psi\rangle = \sum_{\alpha_1=1}^d \sum_{\alpha_2=1}^{d^2} \sum_{\alpha_3=1}^{d^3} \sum_{j_1, j_2, j_3=1}^d A_{\alpha_1}^{[1]j_1} A_{\alpha_1\alpha_2}^{[2]j_2} A_{\alpha_2\alpha_3}^{[2]j_3} \Lambda_{\alpha_3}^{[3]} |j_1, j_2, j_3\rangle |\alpha_3\rangle_{[4,\dots,N]}. \quad (2.20)$$

Egyre nagyobb bal részrendszereket véve végül eljutunk az N -ik lépésben oda, hogy eltűnik a jobb részrendszer, tehát egy teljes rendszerünk lesz, amiben már a Schmidt-koefficiensek sem szerepelnek. A rendszer állapotát kizárólag a tenzorok és a lokális állapotok írják le ahogy azt a (2.13)-ba előrevetítettük. Az általános kvantumállapotot átírtuk tehát MPS alakra, ezt tovább alakíthatjuk a (2.10) közelítés bevezetésével az alábbiak szerint.

Legyenek a $\chi_n \times \chi_n$ dimenziós X_n tenzorok olyanok, hogy

$$\tilde{A}^{[n]j_n} = X_{n-1} A^{[n]j_n} X_n^{-1}. \quad (2.21)$$

Ekkor nagyon könnyen belátható, hogy az állapot ugyanaz marad, ha az A tenzorokat $\tilde{A}$ tenzorokra cseréljük

$$|\psi\rangle = \sum_{j_1, \dots, j_N} A^{[1]j_1} A^{[2]j_2} \dots A^{[N]j_N} |j_1, \dots, j_N\rangle = \sum_{j_1, \dots, j_N} \tilde{A}^{[1]j_1} \tilde{A}^{[2]j_2} \dots \tilde{A}^{[N]j_N} |j_1, \dots, j_N\rangle, \quad (2.22)$$

csak a korábbi feltevéseinket kell figyelembe venni, miszerint $\chi_1 = \chi_N = 1$, azaz az X_0 és az X_N^{-1} tenzorok egydimenziósak, vagyis ezek csak skalárszorozók lesznek és egy skalárral való szorzás az állapotot nem változtatja meg.

Egy lineáris algebra tételt felhasználva az $A^{[n]j_n}$ mátrixok előállnak egy $\chi_{n-1} \times \chi_n$ -es mátrix és egy pozitív, valós, négyzetes $(\chi_n \times \chi_n)$ diagonális mátrix szorzataként.

$$A^{[n]j_n} = \Gamma^{[n]j_n} \Lambda^{[n]}. \quad (2.23)$$

Ezzel az N hosszú spinlánc MPS-ének kanonikus formája az alábbi alakot ölti

$$|\psi\rangle = \sum_{j_1, \dots, j_N} \Gamma^{[1]j_1} \Lambda^{[1]} \Gamma^{[2]j_2} \Lambda^{[2]} \dots \Gamma^{[N]j_N} \Lambda^{[N]} |j_1, j_2, \dots, j_N\rangle \quad (2.24)$$

Végtelen MPS esetén, ha a rendszer translációinvariáns is, akkor minden mátrix megegyezik,

$$\begin{aligned} \Gamma^{[n]j_n} &= \Gamma^j \quad \forall n\text{-re} \\ \Lambda^{[n]} &= \Lambda \quad \forall n\text{-re.} \end{aligned} \quad (2.25)$$

Ha a spinlánc végtelen hosszú ($N \rightarrow \infty$), translációinvariáns és olyan a kölcsönhatás, hogy csak elsőszomszédokat csatol (kettő méretű elemi cella), akkor a leíráshoz szükséges tenzorok: $\Gamma^A, \Gamma^B, \Lambda^A$ és Λ^B [18, 19, 20]. A következőkben bemutatjuk az iTEBD algoritmus működését, valamint az iTEBD és TEBD közötti eltéréseket.

2.4. Az iTEBD algoritmus működése

A iTEBD algoritmus egy kvantumállapot időfejlődését közelíti,

$$|\psi(N\delta t)\rangle = \prod_{i=1}^N U(\delta t) |\psi(0)\rangle, \quad (2.26)$$

ahol $U(\delta t) = e^{-iH\delta t}$ operátor diszkrét időlépéseket ír le, ami megvalósíthat valós ($\delta t \in \mathbb{R}$) vagy képzetes ($\delta t = -i\delta\tau$; $\delta\tau \in \mathbb{R}$) időfejlődést is. A diszkrét időlépések sorozata pedig folytonossá tehető $\delta t, \delta\tau \rightarrow 0$ határesetben.

Egy $\mathcal{H}$ Hilbert-terű végtelen hosszú egydimenziós spinlánc $|\psi_{GS}\rangle$ alapállapotát végtelen sok egymás utáni képzetes időfejlődés alkalmazásával tudjuk meghatározni,

$$|\psi_{GS}\rangle = \prod_{j=1}^{\infty} U(-i\delta\tau) |\psi_0\rangle, \quad (2.27)$$

ahol $|\psi_0\rangle$ a kezdeti állapot és $\delta\tau > 0$, amit időfejlesztünk és ami sok idő után bekonvergál az alapállapotba³.

A továbbiakban azt mutatjuk be, hogy az iTEBD algoritmus hogyan működik egydimenziós láncokon.

Először is fontos megjegyezni, hogy a módszer akkor hatékony, ha az összefonódás kellően kicsi, ugyanis az MPS ekkor lesz jó közelítés. Fontos továbbá, hogy a rendszert rövid hatótávolságú kölcsönhatások írják le, mivel a lokális iTEBD lépéseket ekkor tudjuk hatékonyan alkalmazni. Legyen a végtelen egydimenziós spinláncunk Hamilton-operátora most olyan, ami legfeljebb elsőszomszéd kölcsönhatásokat tartalmaz,

$$H = \sum_n h^{[n,n+1]} \quad (2.28)$$

Mivel végtelen spinláncot szeretnénk vizsgálni és a számítógép memóriája is véges, ezért az algoritmusban közelítéseket kell alkalmaznunk ahhoz, hogy a rendszert hűen tudjuk reprezentálni. Az egyik és talán legfontosabb használt közelítés a Trotter–Suzuki dekompozíció. Az ötlet az, hogy a rendszer H Hamilton-operátorát felbontjuk olyan operátorok összegére, melyek jól szimulálhatóak, majd a teljes időfejlődést felírjuk egyszerűbb időfejlődések szorzataként kihasználva a Hamilton-operátor felbontását.

A Hamilton-operátorban válogassuk szét a tagokat aszerint, hogy n páros vagy páratlan, ekkor a szétválogatott hatásokból kapott operátorok:

$$\begin{aligned} H &= H_{\text{odd}} + H_{\text{even}} \\ H_{\text{odd}} &= \sum_{n \text{ odd}} h^{[n,n+1]} = h^{[1,2]} + h^{[3,4]} + h^{[5,6]} + \dots \\ H_{\text{even}} &= \sum_{n \text{ even}} h^{[n,n+1]} = h^{[2,3]} + h^{[4,5]} + h^{[6,7]} + \dots \end{aligned} \quad (2.29)$$

A két operátor általában nem kommutál egymással, viszont mindkettő kommutáló operátorok összege és az algoritmus pont ezt használja ki.

$$\begin{aligned} [H_{\text{odd}}, H_{\text{even}}] &\neq 0 \\ [h^{[i,i+1]}, h^{[i+2,i+3]}] &= 0, \quad i = 1, 2, 3, \dots \end{aligned} \quad (2.30)$$

³amennyiben van az alapállapottal közös komponense, azaz $\langle\psi_0|\psi_{GS}\rangle \neq 0$

Általánosan felírva az első- és másodrendű kiterjesztése a Trotter–Suzuki dekompozíciónak az alábbi

$$\begin{aligned} e^{(V+W)\delta} &= e^{V\delta} e^{W\delta} + \mathcal{O}(\delta^2) \\ e^{(V+W)\delta} &= e^{V\delta/2} e^{W\delta} e^{V\delta/2} + \mathcal{O}(\delta^3). \end{aligned} \quad (2.31)$$

Ha most felosztjuk az időt δt infinitezimálisan kicsi időszetekre, akkor az elsőrendű Trotter–Suzuki dekompozíciót alkalmazva, az időfejllesztő operátor a következő alakban írható fel

$$\begin{aligned} U(\delta t) &= e^{-iH\delta t} = e^{-i(H_{\text{even}}+H_{\text{odd}})\delta t} = e^{-iH_{\text{even}}\delta t} e^{-iH_{\text{odd}}\delta t} + \mathcal{O}(\delta t^2) = \\ &= \left[\prod_{n \text{ even}} e^{-ih^{[n,n+1]}\delta t} \right] \left[\prod_{n \text{ odd}} e^{-ih^{[n,n+1]}\delta t} \right] + \mathcal{O}(\delta^2) \\ \Rightarrow U(\delta t) &\approx \left[\prod_{n \text{ even}} U^{[n,n+1]}(\delta t) \right] \left[\prod_{n \text{ odd}} U^{[n,n+1]}(\delta t) \right] = U^{\text{TEBD1}}(\delta t) \end{aligned} \quad (2.32)$$

ahol $U^{[n,n+1]}(\delta t) = e^{-ih^{[n,n+1]}\delta t}$. Hasonló levezetéssel megmutatható, hogy másodrendű Trotter–Suzuki közelítéssel az időfejllesztő operátor a következő

$$\begin{aligned} U(\delta t) &= \left[\prod_{n \text{ even}} U^{[n,n+1]}(\delta t/2) \right] \left[\prod_{n \text{ odd}} U^{[n,n+1]}(\delta t) \right] \left[\prod_{n \text{ even}} U^{[n,n+1]}(\delta t/2) \right] + \mathcal{O}(\delta^3) \\ \Rightarrow U(\delta t) &\approx \left[\prod_{n \text{ even}} U^{[n,n+1]}(\delta t/2) \right] \left[\prod_{n \text{ odd}} U^{[n,n+1]}(\delta t) \right] \left[\prod_{n \text{ even}} U^{[n,n+1]}(\delta t/2) \right] = U^{\text{TEBD2}}(\delta t). \end{aligned} \quad (2.33)$$

Egy ilyen diszkrét időfejlődés az MPS-ansatz egy két-spin részén az alábbi módon valósítható meg. A kiválasztott két spin állapota a

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= \sum_{\alpha,j,k,\gamma} \Theta_{\alpha\gamma}^{jk} |\alpha_{n-1}\rangle_L |j_n\rangle |k_{n+1}\rangle |\gamma_{n+1}\rangle_R, \\ \Theta_{\alpha\gamma}^{jk} &= \sum_{\beta} \Lambda_{\alpha}^B \Gamma_{\alpha\beta}^{A,j} \Lambda_{\beta}^A \Gamma_{\beta\gamma}^{B,k} \Lambda_{\gamma}^B \end{aligned} \quad (2.34)$$

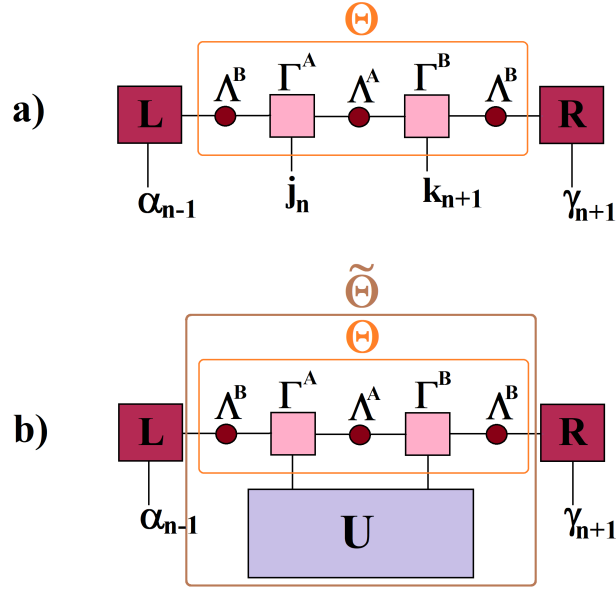
alakban adható meg, ahol $|\alpha_{n-1}\rangle_L$ az $[n-1, n]$ kötés bal oldalán lévő Schmidt-állapotok, míg a $|\gamma_{n+1}\rangle_R$ az $[n+1, n+2]$ kötés jobb oldali Schmidt-állapotai. A $|j_n\rangle$ és $|k_{n+1}\rangle$ az n -ik és $n+1$ -ik lokális Hilbert-tér egy adott bázisállapota. A $\Theta_{\alpha\gamma}^{jk}$ együtthatók pedig az előző fejezet végén felírt tenzorok szorzatai. Kihaszználva az eltolásinvarianciát, a teljes állapot ilyen MPS darabok szorzataként állítható elő. Egy ilyen MPS darab a 2.2.a) ábrán látható módon úgy néz ki, hogy vesszük az adott kettő méretű elemi cellát, illetve ennek bal- és jobb oldalán maradt rácshelyeket.

Könnyen látható, hogy az egy spin operátorok egyértelmű módon hatnak. Bonyolultabb a helyzet két spin operátorok esetén. Ha egy fent említett elemi cellára egy U unitér operátorral hatunk, akkor megváltozik (2.2.b) ábra)

$$\tilde{\Theta}_{\alpha\gamma}^{jk} = \sum_{j',k'} U_{j'k'}^{jk} \Theta_{\alpha\gamma}^{j'k'}. \quad (2.35)$$

A transzformált $\tilde{\Theta}_{\alpha\gamma}^{jk}$ -ból szeretnénk az új MPS tenzorokat is meghatározni. Ezt pedig úgy tudjuk megtenni, hogy a $\tilde{\Theta}_{\alpha\gamma}^{jk}$ indexeit kombináljuk, vagyis a $d \times d \times \chi \times \chi$ dimenziós 4 indexű $\tilde{\Theta}_{\alpha\gamma}^{jk}$ tenzor 2-2 indexét egybeolvasztjuk és kapunk egy $d\chi \times d\chi$ -s 2 indexű $\tilde{\Theta}_{j\alpha,k\gamma}$ tenzort, ami tulajdonképpen így már egy mátrix lesz. Mivel $\det(\Theta_{j\alpha,k\gamma}) \approx 0$, ezért ezt a mátrixot szinguláris érték dekompozíció (SVD) segítségével szétbonthatjuk három mátrix szorzatára,

$$\tilde{\Theta}_{j\alpha,k\gamma} = \sum_{\beta} X_{j\alpha,\beta} D_{\beta} Y_{\beta,k\gamma}, \quad (2.36)$$



2.2. ábra. Elsőszomszéd kölcsönhatást leíró transzformáció esetén kettő méretű az egydimenziós spinlánc elemi cellája, ami így az A és B tenzorokkal írható le. Az a) ábrán egy végtelen hosszú spinlánc MPS-ének egy darabkája látható, a b) ábrán pedig egy az erre a darabra ható unitér operátor.

ahol X és Y is $d_\chi \times d_\chi$ -s mátrix és D egy diagonális $d_\chi \times d_\chi$ -s mátrix. Az X mátrix az új $|\beta_n\rangle_L$ Schmidt-állapotok és a kombinált $|\alpha_{n-1}\rangle |j_n\rangle$ bázisok közötti kapcsolatot írja le, míg Y a $|\beta\rangle_R$ és a $|k_{n+1}\rangle |\gamma_{n+1}\rangle$ közötti kapcsolatot adja meg. Így a D diagonális mátrix pontosan a transzformált állapot Schmidt-együtthatóit tartalmazza, vagyis $D = \tilde{\Lambda}^A$. Az új $\tilde{\Gamma}$ tenzorok pedig a Θ definíciójából a korábbi Γ mátrixok alapján

$$\begin{aligned}\tilde{\Gamma}_{\alpha\beta}^{A,j} &= (\Lambda^B)^{-1}_\alpha X_{j\alpha,\beta} \\ \tilde{\Gamma}_{\beta\gamma}^{B,j} &= Y_{\beta,k\gamma} (\Lambda^B)^{-1}_\gamma.\end{aligned}\tag{2.37}$$

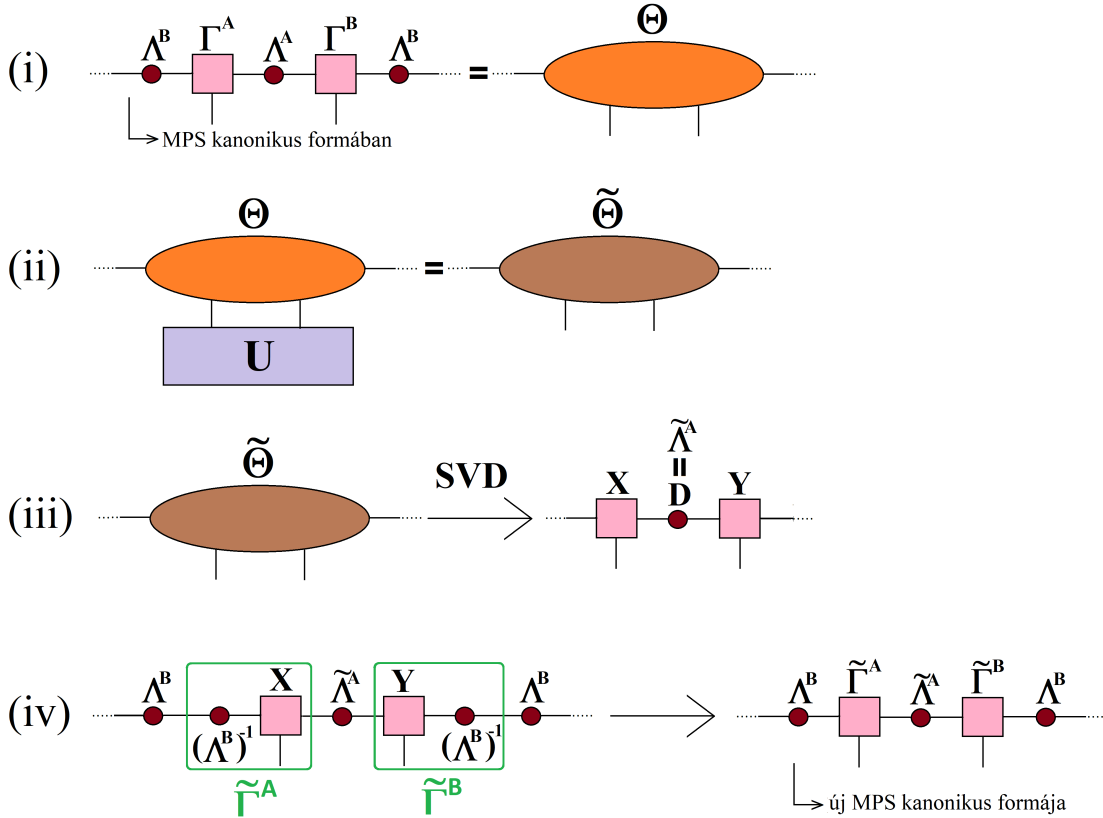
Az új elemi cella tehát

$$\tilde{\Theta}_{\alpha\gamma}^{jk} = \sum_\beta \Lambda_\alpha^B \tilde{\Gamma}_{\alpha\beta}^{A,j} \tilde{\Lambda}_\beta^A \tilde{\Gamma}_{\beta\gamma}^{B,k} \Lambda_\gamma^B,\tag{2.38}$$

látható, hogy az új MPS továbbra is kanonikus formában van.

Összefoglalva a fentebb leírtakat az iTEBD lépései a 2.3. ábrán láthatóak. Először a rendszert leíró állapot MPS felírását, ami kanonikus formában van, összeolvasztjuk a Θ tenzorba (2.3.(i)). Majd az adott $[n, n+1]$ elemi cellán végrehajtjuk az U unitér időfejlődést és így kapjuk a $\tilde{\Theta}$ új tenzort (2.3.(ii)). Az állapotot leíró új tenzort SVD-vel szétbonjuk az X, D és Y mátrixokra, ahol egyszerű megfontolásokból kiderül, hogy a diagonális D tulajdonképpen az új Schmidt-együtthatókat tartalmazza (2.3.(iii)). Utolsó lépésként pedig a kapott állapotot visszaírjuk az új MPS kanonikus formájára (2.3.(iv)). Így néz ki tehát egy teljes iTEBD lépés, amit nagyon sokszor megismétlünk, váltakozva a páros- és páratlan alrácson.

Megjegyzendő továbbá, hogy az algoritmusban további közelítéseket is alkalmazunk. Egy teljes lépés során, amit az $[n, n+1]$ elemi cellán végzünk, megváltozik az $[n, n+1]$ kötésnél lévő összefonódás és a kötés mérete is d_χ -re nő. Így a lépések során ahogy egyre több unitér operátort hajtunk az állapotra exponenciálisan növekszik az az információmennyiség, amit a hullámfüggvény leírásához el kell tárolnunk. Egy idő után azonban erre képtelenek vagyunk, ezért van szükség valamilyen közelítésre.



2.3. ábra. Az iTEBD algoritmus lépései. (i) Az elemi cellát leíró kanonikus formában lévő MPS egy tenzorként való felírása. (ii) Az unitér operátor hatása erre a tenzorra új elemi cellát eredményez, és (iii)-ben az algoritmus ezt az új tenzort SVD-vel szétbontja három mátrix szorzatára majd az (iv) lépésben az új MPS kanonikus formájára alakítja.

Feltéve, hogy alkalmazhatjuk a (2.10) közelítést, a Schmidt-állapotok számára bevezetünk egy χ_{max} maximum értéket, vagyis minden teljes iTEBD lépés után csak a legfontosabb χ_{max} darab Schmidt-állapotot tartjuk meg. Ez egyszerűen annyit jelent, hogy az (2.36)-be a β index csak 1-től χ_{max} -ig fut, amennyiben a Schmidt-állapotokat a méreteik szerint rendezzük. Ez a csonkolás korlátozza az MPS dimenzióját, ugyanis a korábbi tenzorok méreteiben a χ_{max} fog majd szerepet játszani, éppen ezért χ_{max} -t hívjuk a bond-dimenzió (csonkolási dimenzió), ami egy kis szám⁴. Ebből kifolyólag pedig a kanonikus forma normalizálási feltételei jó közelítéssel teljesülnek, de a hullámfüggvény normalizálása érdekében a csonkolás után osztani kell az

$$\mathcal{N} = \sqrt{\sum_{i,j,\alpha,\gamma} |\Theta_{\alpha\gamma}^{ij}|^2} \quad (2.39)$$

csonkolt normával.

⁴Itt kicsi alatt azt értjük, hogy $N\chi_{max}^2d \ll d^N$, azaz az eltárolni kívánt számok legyenek sokkal kevesebben, mint a d^N db. szám, hisz ez volt a célunk a közelítések bevezetésével. Tehát χ_{max} lehet nagy, ugyanis minél nagyobb, annál pontosabbak az eredményeink, a lényeg, hogy teljesüljön az előzőleg említett feltétel.

2.5. Az iTEBD és a TEBD algoritmusok közötti különbségek

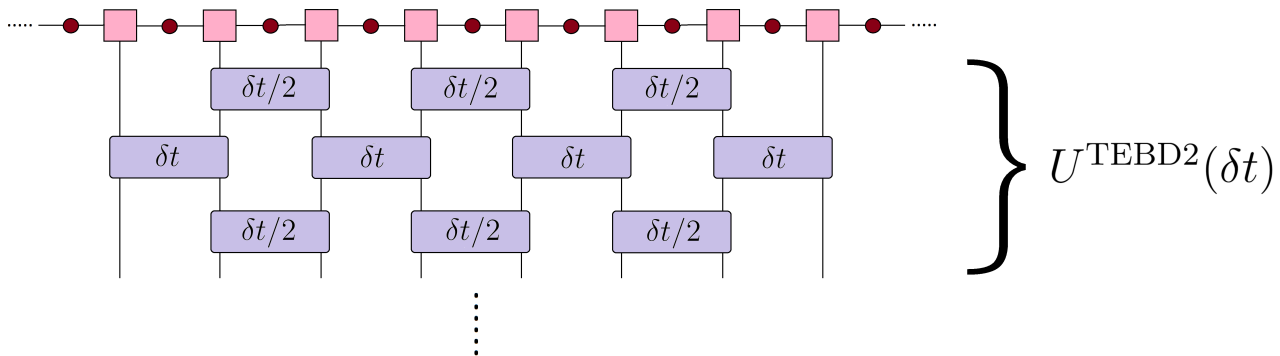
Fentebb bemutattuk hogyan működik a végtelen spinláncokra az iTEBD algoritmus. Most pedig megmutatjuk, hogy miben tér el ettől a véges rendszerek esetén használatos TEBD. A korábban felírt (2.24) véges spinlánc MPS-ének kanonikus alakjára kell koncentrálnunk, ugyanis ellenben a végtelen láncsal, most nem lesz translációinvariáns a rendszer. Egyszóval a Λ és Γ tenzorok helyenként el fognak térni. Így az imént elemi cellának nevezett Θ is más lesz a lánc különböző helyein. A TEBD algoritmusban szabad határfeltétel van, és el kell tárolnunk az összes rácshelyhez tartozó tenzort, továbbá minden bond-ra kell U update, nem elég egy-egy páros/páratlan. Ily módon ez lassabb lesz az iTEBD-nél, azonban lesz helyfüggés, ami lehetővé teszi lokális mennyiségek vizsgálatát.

Megismerkedtünk tehát az iTEBD és TEBD algoritmussal, amit a következő fejezetekben az E_8 és E_7 modellek vizsgálatánál fogunk alkalmazni. Végül megjegyezzük, hogy a modellekben végzett iTEBD során az algoritmusban negyedrendű Trotter–Suzuki közelítést alkalmaztunk. Ez a megfelelő időlépésekkel összerakható másodrendű közelítésekből (2.4. ábra) [21]:

$$U^{\text{TEBD}^4}(\delta t) = U^{\text{TEBD}^2}(\delta t_1)U^{\text{TEBD}^2}(\delta t_1)U^{\text{TEBD}^2}(\delta t_2)U^{\text{TEBD}^2}(\delta t_1)U^{\text{TEBD}^2}(\delta t_1)$$

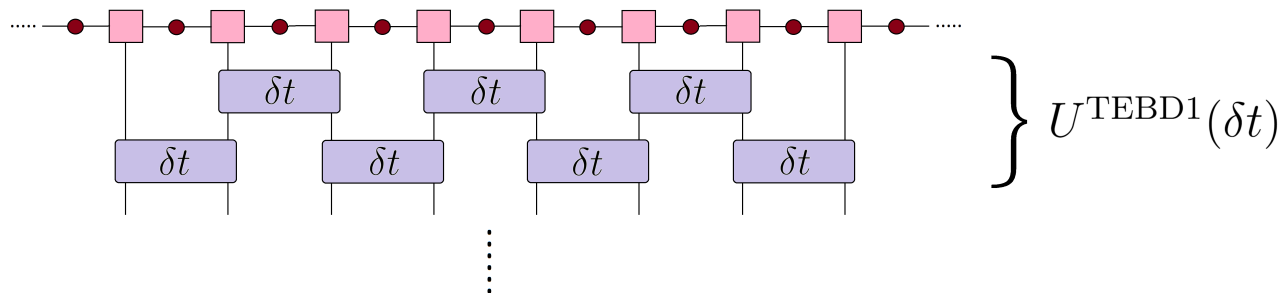
$$\delta t_1 = \frac{1}{4 - 4^{1/3}}\delta t$$

$$\delta t_2 = (1 - 4\delta t_1)\delta t$$
(2.40)



2.4. ábra. Másodrendű Trotter-Suzuki dekompozíciót használó algoritmus egy időlépése

A TEBD algoritmusban pedig elsőrendű Trotter–Suzuki dekompozíciót (2.5. ábra) használtunk.



2.5. ábra. Elsőrendű Trotter-Suzuki dekompozíciót használó algoritmus egy időlépése

3. fejezet

A Blume–Capel modell vizsgálata egzakt diagonalizációval

A továbbiakban egy többparaméterű kvantumrendszer által leírt spinláncról, nevezetesen a Blume–Capel modellről lesz szó, mely a trikritikus pontjában egy konform térelmélettel írható le, melynek egyik perturbációja az E_7 integrálható modell [22, 23]. Ebben a fejezetben [24] alapján egzakt diagonalizációval vizsgáltam a Blume–Capel modellt véges lánc esetén. Az alapállapotú energiasűrűségre kapott eredmények összhangban vannak az iTEBD-vel számolt eredménnyel.

3.1. A Blume–Capel modell

A Blume–Capel modell ismertetése előtt érdemes megemlíteni a klasszikus trikritikus Ising modellt, ugyanis ez szoros kapcsolatban áll az általunk vizsgálni kívánt speciális modellel.

A klasszikus trikritikus Ising modell egy kétdimenziós rácsot ír le, ami üres, valamint fel és le spint tartalmazó rácspontokból áll és a rendszert jellemző kölcsönhatás csak elsőszomszédokat csatol. Így a modellt leíró hatás az

$$S = \beta \sum_i s_i s_{i+1} t_i t_{i+1} - \mu \sum_i t_i \quad (3.1)$$

alakot ölti, melyben $s_i = \pm 1$ az i -ik rácshelyen lévő spint írja le ($s_i = +1$ fel spin esetén és $s_i = -1$ le spin esetén), $t_i = 0, 1$ pedig a rácspont betöltöttségéről ad információt ($t_i = 0$ ha üres, nincs az i -ik rácshelyen spin és $t_i = 1$ ha nem üres). A rendszert jellemző paraméterek a $\beta = 1/T$ inverz hőmérséklet (térelméletek esetén $k_B = 1$) és a μ kémiai potenciál. Ennek a klasszikus rendszernek két fázisa van a $\beta - \mu$ síkban, melyek között másodrendű fázisátalakulási vonal van. Ez a vonal a modell trikritikus pontjában végződik és áthaladva rajta a rendszernek már elsőrendű fázisátalakulása lesz. Továbbá, ami nagyon fontos, hogy az S hatásnak Z_2 szimmetriája van, amit a későbbiekben a 6.1. alfejezetben részletezünk.

A transzfer mátrix formalizmus segítségével a klasszikus $n \times n$ -es kétdimenziós trikritikus Ising modell átírható egydimenziós n hosszú kvantum spinláncra, amit háromállapotú spinek alkotnak [25, 26, 27]. Az így kapott kvantumrendszert hívjuk Blume–Capel modellnek és ezt végtelen rendszerméret esetén a

$$H = \xi \sum_i \left(\alpha (S_i^x)^2 + \beta S_i^z + \gamma (S_i^z)^2 - S_i^x S_{i+1}^x \right) \quad (3.2)$$

Hamilton-operátor írja le, melyben a megjelenő mátrixok

$$S_i^x = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}_i, \quad S_i^z = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}_i. \quad (3.3)$$

A rendszert az S^z bázisban írjuk fel, melynek sajátértékei $-1, 0$ és 1 lehetnek.

A modellnek három paramétere is van: α , β és γ . Az összegzés előtt szereplő ξ pedig az euklideszi időskálát rögzíti, másként ξ felelős a csatolási állandók megfelelő átskálázásáért.

A (3.1) és (3.2) képletek között kapcsolat áll fenn a paramétereik által, mégpedig a (3.1) összefüggésben a β paraméter szerepét a (3.2)-beli β és a (3.1)-beli $-\mu$ szerepét a (3.2)-ben szereplő α paraméter tölti be. A γ egy bizonyos intervallumon belüli változtatásával a fázisgörbe eltolható úgy, hogy a trikritikus ponton való áthaladás után a rendszert elsőrendű fázisátalakulások jellemezzék.

A továbbiakban a $\gamma = 0$ választással élünk, melyre a trikritikus pontot az alábbi paraméterek jellemzik [24]:

$$\begin{aligned}\alpha_{tp} &= 0,910207(4) \\ \beta_{tp} &= 0,415685(6).\end{aligned}\tag{3.4}$$

Továbbá ξ értékét úgy választottuk, hogy

$$\xi^{-1} = 0,56557.\tag{3.5}$$

3.2. Energiaszintek véges lánc esetén

A Blume–Capel modell konform térelméletekkel írható le a trikritikus pontjában, és ennek különböző perturbációit vizsgálhatjuk a következő Hamilton operátorral:

$$H = H_{CFT} + \lambda H_{pert},\tag{3.6}$$

ahol H_{CFT} egy minimális unitér konform elmélet Hamilton operátora, H_{pert} a perturbált Hamilton operátor és λ pedig egy valós szám, ami a konform térelmélettől való eltérés mértékét jellemzi. Egyes perturbációk integrálhatóak [28]. A Blume–Capel modellben a γ paraméter fix értéke esetén több integrálható irány adódik a megfelelő trikritikus pontból indulva. Ezek közül az alábbiakat nevezzük merőleges-fel és -le, illetve párhuzamos-fel és -le irányoknak (3.1. ábra), ahol a fel irány a (3.6) egyenletben $\lambda > 0$ -t jelent, míg a le irány $\lambda < 0$ -t. Ha $\gamma = 0$ esetén $\tan \theta$ a kritikus görbe meredeksége a trikritikus pontban, akkor a merőleges perturbációra feltételezhető a

$$H_{pert}^{\perp} = \sum_{i=1}^N \left(-\sin \theta (S_i^x)^2 + \cos \theta S_i^z \right)\tag{3.7}$$

alak és a párhuzamos perturbációra pedig a

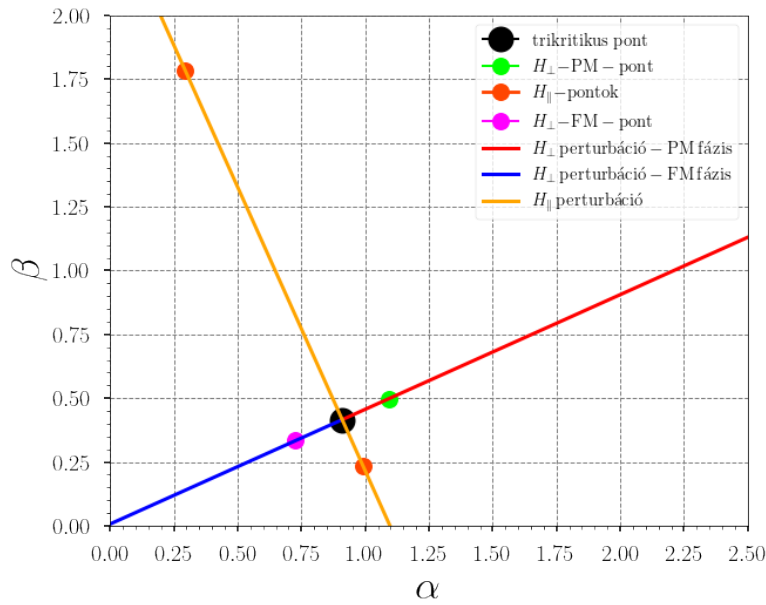
$$H_{pert}^{\parallel} = \sum_{i=1}^N \left(-\cos \theta (S_i^x)^2 - \sin \theta S_i^z \right)\tag{3.8}$$

alak.

A Blume–Capel modell trikritikus pontját a $c = 7/10$ cenrális töltéssel jellemzett konform térelmélet írja le. Ennek egy termális perturbációja az E_7 modell [22, 23], melyben 7 stabil részecske található, melyek tömegéből képzett tömegarányok a 3.2. táblázatban láthatók.

i	2	3	4	5	6	7
m_i/m_1	1,285	1,879	1,969	2,532	2,879	3,701

3.1. táblázat. Az E_7 spektrumban megjelenő kvázirészecskék közelítő tömegarányai [22, 23] alapján.



3.1. ábra. A Blume–Capel modell trikritikus pontjából induló négy integrálható perturbációs irány

Ezen tömegek igazolására egy nagyon egyszerű módszer, ha megnézzük a

$$\Delta E_i(N) = E_i(N) - E_0(N) \quad (3.9)$$

energiaszinteket különböző N hosszú láncok esetén. A [24] forrás ezt négy $\alpha - \beta$ paraméter-páros¹ esetén teszi meg, ahol a Blume–Capel modell paraméterterében ez a négy pont a négy különböző integrálható irányban húzott egyenesen van rajta (3.1.ábrán látható pontok) Én is ezekben a pontokban vizsgáltam meg az energiaszintek értékeit a modellre megírt saját programommal, melyben egzakt diagonalizációt alkalmaztam a Hamilton operátor spektrumának meghatározására.

N	$\Delta E_i(N)/\Delta E_1(N)$							
9	0	1	1,277705	1,870747	1,923333	2,405179	2,470943	2,585593
10	0	1	1,281513	1,913613	1,948981	2,189466	2,241903	2,373756
11	0	1	1,283245	1,941778	1,964535	2,355735	2,385915	2,502599
12	0	1	1,284031	1,956299	1,973068	2,240794	2,525531	2,768079

3.2. táblázat. $\alpha = 1,092616$, $\beta = 0,497703$

N	$\Delta E_i(N)/\Delta E_1(N)$							
9	0	1	2,199629	3,244564	3,592034	4,556583	4,789589	5,152363
10	0	1	2,170591	3,100133	3,380087	3,519029	4,293256	4,373800
11	0	1	2,147115	2,979107	3,458124	4,667610	4,413396	4,915838
12	0	1	2,127968	2,876529	3,381457	3,381457	3,406874	4,271193

3.3. táblázat. $\alpha = 0,295069$, $\beta = 1,783751$

Az eredményeimet a 3.2, 3.3, 3.4. és 3.5. táblázatok tartalmazzák. Az így kapott energiaszintek nem mindig felelnek meg a várt 3.2 tömegarányoknak, melynek oka az lehet, hogy véges

¹ $\gamma = 0$ rögzített

láncon végeztem a számításokat². Az általaam írt egzakt diagonalizációval az energiaszintekre öt tizedesjegy pontossáig visszakaptam a [24] cikkben bemutatott eredményeket.

N	$\Delta E_i(N)$							
8	0	0,253550	0,253623	0,969074	1,006415	1,394000	1,443772	1,842677
9	0	0,285219	0,285247	0,947192	0,978900	1,312642	1,356137	1,712890
10	0	0,316900	0,316912	0,933128	0,960952	1,252636	1,290728	1,610597
11	0	0,348587	0,348592	0,924206	0,949369	1,208189	1,241721	1,529505
12	0	0,380275	0,380277	0,918666	0,942034	1,175333	1,205059	1,464959

3.4. táblázat. $\alpha = 0,992225$, $\beta = 0,233276$

N	$\Delta E_i(N)$							
8	0	0,000003	1,625163	1,632767	2,307964	2,503016	2,732657	2,918642
9	0	0,000001	1,628566	1,630796	2,394225	2,475473	2,795331	3,044097
10	0	0,000000	1,629485	1,630148	2,427779	2,461672	2,851866	2,918626
11	0	0,000000	1,629743	1,629941	2,439574	2,454832	2,849365	3,009717
12	0	0,000000	1,629817	1,629877	2,444151	2,451432	2,830431	2,918625

3.5. táblázat. $\alpha = 0,727798$, $\beta = 0,333667$

3.3. Alapállapot energiásűrűségek

Mivel az energiaszintekre elég pontosan visszakaptam a [24] eredményeit, feltételezhető, hogy az egzakt diagonalizáció a modellen jól működik. Ez pedig egy jó ellenőrzésre ad lehetőséget, amivel az iTEBD, illetve TEBD algoritmusom működőképességét tesztelhetem. A ellenőrzés a következő: különböző N hosszú véges láncok esetén kiszámolom az alapállapot energiásűrűségét,

$$\epsilon_0 = \frac{E_0}{L}, \quad (3.10)$$

ahol $L = N$ a lánc hossza. Ugyanezt TEBD-vel is kiszámolom és a végtelen lánc esetén pedig iTEBD-vel, majd a véges és végtelen láncokra kapott eredményeket összehasonlítom.

Rögzített $\gamma = 0$ mellett több $\alpha - \beta$ paraméterpárosra elvégeztem ezt az ellenőrzést és mindegyik esetén hasonlót tapasztaltam. Ezekből az ellenőrzésekből kettőt mutatok itt be, melyek paraméterpárosai a 3.1. ábrán látható $H_\perp$ perturbációs irányon felvett paramágneses és ferromágneses pontokhoz tartoznak. A kapott alapállapot energiásűrűségeket a két pont esetén a 3.6. táblázat tartalmazza.

A véges láncra egzakt diagonalizációval és a végtelen láncra iTEBD-vel kapott alapállapot energiásűrűségek az $\alpha = 1,092616$, $\beta = 0,497703$ paramágneses pontban négy tizedesjegyre, míg az $\alpha = 0,727798$, $\beta = 0,333667$ ferromágneses pontban öt tizedesjegyre egyeznek meg. Megfigyelhető továbbá, hogy ahogy növeljük a lánc hosszát az alapállapot energiásűrűség értéke a végtelen láncra kapott eredmény felé közelít. Ebből következik, hogy az iTEBD algoritmusunkkal jól szimulálható és vizsgálható a Blume–Capel modell.

A TEBD algoritmusban, akár csak az egzakt diagonalizációban, véges láncot vizsgálunk. Tehát azt váránk, hogy a TEBD-vel számolt alapállapot energiásűrűség jobb egyezést mutat az egzakt diagonalizációs eredménnyel, mint a végtelen láncra kiszámolt érték. Nem ezt tapasztaljuk azonban, a TEBD algoritmus nem alkalmas alapállapot keresésre.

²A véges láncok vizsgálatánál periodikus határfeltételt használtam.

Alapállapotí energiasűrűségek						
$\alpha = 1,092616 ; \beta = 0,497703$						
Egzakt Diag		iTEBD	TEBD		iTEBD+TEBD	
N=8	-0,35748126	-0,35741872	N=8	-0,35651490	N=8	-0,35747476
N=10	-0,35747561		N=10	-0,35761678	N=10	-0,35747489
N=12	-0,35747511		N=12	-0,35768050	N=12	-0,35747491
$\alpha = 0,727798 ; \beta = 0,333667$						
Egzakt Diag		iTEBD	TEBD		iTEBD+TEBD	
N=8	-0,56038783	-0,56038067	N=8	-0,56030998	N=8	-0,56038694
N=10	-0,56038765		N=10	-0,56040977	N=10	-0,56038695
N=12	-0,56038764		N=12	-0,56041187	N=12	-0,56038695

3.6. táblázat. Alapállapotí energiasűrűség értékei véges és végtelen láncok esetén

A korábban már említett transzlációinvariancia miatt, ami a végtelen láncokra jellemző, elengedhetetlen a későbbi fejezetekben bemutatott dinamikus kétpont függvények tanulmányozásához a TEBD használata.

A probléma megoldására az ötlet a következő: keressünk az iTEBD-vel alapállapotot, majd az ott kiszámolt tenzorokat adjuk meg a TEBD-ben kezdőállapotként és a véges láncra csak a valós időfejlődést vizsgáljuk a TEBD algoritmussal. A végtelen láncra megkeresett alapállapotból nyert tenzorokkal, a véges láncra TEBD-vel kiszámolt alapállapotí energiasűrűség hat tizedesjegyre megegyezik az egzakt eredménnyel (3.6. táblázat iTEBD+TEBD oszlopa). Így a későbbiekben minden lánc vizsgálatakor ezt az eljárást használjuk.

4. fejezet

Dinamikai kétpont-függvények és struktúra faktorok

A későbbi fejezetekben bemutatásra kerülő E_8 és E_7 modellek dinamikai struktúra faktorait vizsgáltam véges láncon a TEBD algoritmus segítségével. Ezek mérhető mennyiségek, amelyek ismerete hozzájárul a modellek kísérleti megvalósításához. Az E_8 modell esetén már végeztek hasonló szimulációkat a dinamikai struktúra faktorokra tett térelméleti jóslat igazolására, azonban az E_7 modellben még nem születtek ilyen szimulációs eredmények. A további fejezetekben először az E_8 -ra vonatkozó térelméleti jóslatokat vetjük össze a szimulációs eredményeinkkel ezzel letesztelve, hogy jól működik a dinamikai struktúra faktort számoló módszerünk. Ezt követően pedig az E_7 modellt vizsgáljuk meg.

Ebben a fejezetben a dinamikai kétpont függvényről és a dinamikai struktúra faktorokról adunk egy rövid elméleti összefoglalót, majd ismertetjük ezek számolását a TEBD algoritmus segítségével.

4.1. Korrelációs függvények form faktor kifejtésben

A térelméletben nagyon fontosak a korrelációs függvények. Most az ezekből megkapható dinamikai struktúra faktorokra koncentrálunk és a térelméleti leírásukat ismertetjük röviden [29] alapján.

Tekintve az $\mathcal{O}_i$ operátorok halmazát egy tetszőleges kétpont-függvény, vagy korrelációs függvény, a következőképp írható fel

$$\langle \mathcal{O}(x, t) \mathcal{O}(0, 0) \rangle. \quad (4.1)$$

Ezek Fourier transzformáját hívjuk dinamikai struktúra faktornak:

$$S^{ij}(\omega, q) = \int dx dt e^{i\omega t - iqx} \langle \mathcal{O}_i(x, t) \mathcal{O}_j(0, 0) \rangle. \quad (4.2)$$

Az identitás operátor kifejezhető aszimptotikus többrészeske állapotokkal

$$\mathbb{I} = \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{\{a_i\}} \prod_{k=1}^{\mathcal{N}} \left(\frac{1}{\mathcal{N}_k^{\{a_i\}}!} \right) \int \frac{d\theta_1}{2\pi} \cdots \frac{d\theta_n}{2\pi} |a_1, \theta_1; \dots; a_n, \theta_n\rangle \langle a_n, \theta_n; \dots; a_1, \theta_1|, \quad (4.3)$$

amely tetszőleges n számú, tetszőleges θ_i , $i = 1, \dots, n$ rapiditású és $1 \leq a_i \leq \mathcal{N}$ egész számmal jelölt részecskefajtákat összegez fel, ahol $a_1 \leq a_2 \leq \dots \leq a_n$. Az $\mathcal{N}_k^{\{a_i\}}$ egész szám pedig a k típusú részecskék száma az $\{a_i\}$ halmazban. Ennek felhasználásával a kétpont függvények kiértékelhetők spektrális felbontás használatával. Így a (4.2) felírható n -részeske kontribúciók összegeként:

$$S^{ij}(\omega, q) = \sum_{n=1}^{\infty} S_n^{ij}(\omega, q), \quad (4.4)$$

ahol az n -részecske kontribúciók

$$S_n^{ij}(\omega, q) = \sum_{\{a_i\}} \prod_{k=1}^N \left(\frac{1}{\mathcal{N}_k^{\{a_i\}}!} \right) \int \frac{d\theta_1}{2\pi} \cdots \frac{d\theta_n}{2\pi} F_{a_1, a_2, \dots, a_n}^{\mathcal{O}_i}(\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_n) F_{a_1, a_2, \dots, a_n}^{\mathcal{O}_i^*}(\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_n) \times \\ \times (2\pi)^2 \delta\left(\omega - \sum_{i=1}^n E_i\right) \delta\left(q - \sum_{i=1}^n P_i\right), \quad (4.5)$$

ahol az $F_{a_1, a_2, \dots, a_n}^{\mathcal{O}_i}(\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_n)$ az $\mathcal{O}_i$ operátor $a_1, a_2, \dots, a_n$ részecskékkel vett n -részecske form faktora

$$F_{a_1, a_2, \dots, a_n}^{\mathcal{O}_i}(\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_n) = \langle 0 | \mathcal{O}_i | a_1, a_2, \dots, a_n \rangle, \quad (4.6)$$

ahol $|a_1, a_2, \dots, a_n\rangle$ az $a_1, a_2, \dots, a_n$ részecskékhez tartozó n -részecske állapot.

A (4.5) végtelen összegben általában nem lehet minden tagot kiértékelni, de erre nincs is szükség, mivel ez az összeg jellemzően gyorsan konvergál és csak az első néhány kis számú n -részecske fog járulékot adni. Továbbá egy tömeges elméletben a végtelen összeg csonkolása alacsony ω energiáknál egzakt eredményhez vezet az energiaküszöbök jelenléte miatt.

A következőkben nulla impulzus ($q = 0$) mellett vizsgáljuk az $S^{ij}(\omega, q = 0)$ dinamikai struktúra faktort, ugyanis a Lorentz invariancia miatt ez meghatározza a teljes $S^{ij}(\omega, q)$ struktúra faktort is. Tegyük fel, hogy a részecskék tömegei $m_1 \leq m_2 \leq \dots$ sorrendben vannak, ez a megfelelő form faktorok kiszámolásával egzaktul megadja a dinamikai struktúra faktort $\omega < 4m_1$ kis energiák esetén.

Az $S^{ij}(\omega, q = 0)$ 1-részecske járuléka a következőképp adhatók meg

$$S_1^{ij}(\omega, q = 0) = \sum_a \frac{2\pi}{m_a} \delta(\omega - m_a) F_a^i F_a^{j*}, \quad (4.7)$$

ahol a jelöli az összes különböző részecskét, ami az $\mathcal{O}_i$ és $\mathcal{O}_j$ operátorokat összekapcsolja, az ilyen 1-részecske állapotok tehát izolált delta-függvény csúcsokkal járulnak hozzá a teljes struktúra faktorhoz. A 2-részecske kontribúciók pedig

$$S_2^{ij}(\omega, q = 0) = \sum_{a_1 \leq a_2} \left(\frac{1}{2} \right)^{\delta_{a_1, a_2}} \frac{\Theta(\omega - (m_{a_1} + m_{a_2}))}{m_{a_1} m_{a_2} |\sinh(\theta_1 - \theta_2)|} F_{a_1, a_2}^i(\theta_1 - \theta_2) F_{a_2, a_1}^{j*}(\theta_1 - \theta_2) \quad (4.8)$$

alakban adhatók meg, ahol

$$\theta_1 - \theta_2 = \operatorname{arccosh} \left(\frac{\omega^2 - m_{a_i}^2 - m_{a_j}^2}{2m_{a_i} m_{a_j}} \right) \quad (4.9)$$

az energia-impulzus megmaradás miatt. A 2-részecske állapotok járuléka tehát egy inkoherens kontinuum, amely az adott (a_1, a_2) 2-részecske párra az $\omega = m_{a_1} + m_{a_2}$ energiaküszöbön nyílik meg.

4.2. Dinamikai kétpont-függvény számolása TEBD-vel

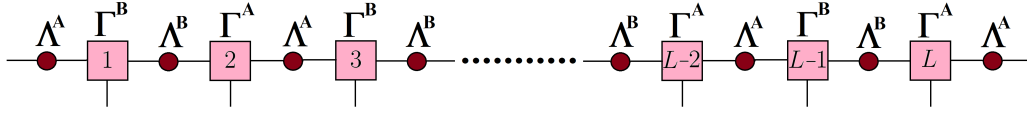
Fentebb bemutattuk hogyan számolhatók térelméletben a dinamikai struktúra faktorok, most nézzük meg a TEBD segítségével hogyan lehet ezeket meghatározni.

Tekintsünk egy L hosszú spinláncot és legyen $1 \leq j, k \leq L$ két tetszőleges rácshely. Ekkor az $\mathcal{O}$ operátor dinamikai kétpont-függvénye az alábbi lesz:

$$\langle \mathcal{O}(l, t) \mathcal{O}(k, 0) \rangle = \langle \Psi_0 | e^{iHt} \mathcal{O}(j, 0) e^{-iHt} \mathcal{O}(k, 0) | \Psi_0 \rangle, \quad (4.10)$$

ahol $|\Psi_0\rangle$ a rendszer alapállapota. Az ilyen kétpont-függvények numerikus meghatározására írtam egy algoritmust, ami a TEBD módszeren alapszik. Az algoritmus lépései a következők:

1. Vesszük az adott modellnek megfelelő végtelen láncot és az iTEBD módszer imaginárius időfejlesztésével megkeressük a rendszer alapállapotát. Majd a végtelen translációinvariáns láncra kapott Γ^A , Γ^B , Λ^A és Λ^B tenzorokból felépítünk egy L hosszú láncot (L páros) a 4.1. ábra szerint és ez lesz a véges lánc $|\Psi_0\rangle$ alapállapota.



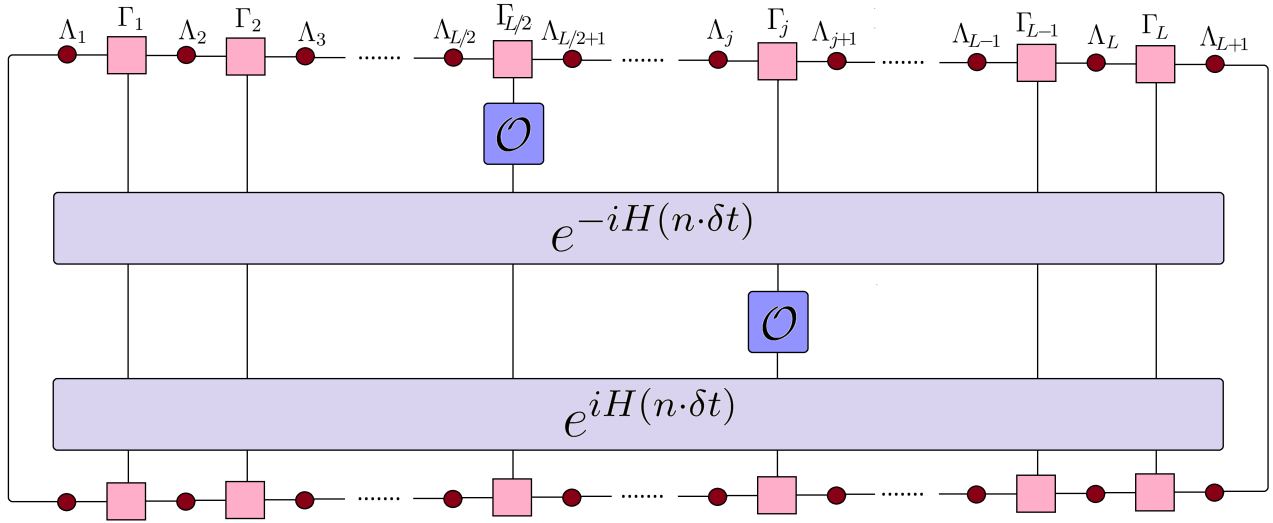
4.1. ábra. Az iTEBD-vel megkeresett alapállapot véges láncra

2. Ezt követően a $t = 0$ időpontban ($n = 0$) a $|\Psi_0\rangle$ alapállapotra hatunk az $\mathcal{O}(k, 0)$ operátorral. A k rácshelyet érdemes a lánc közepének megválasztani, hogy elkerüljük a lánc véges méretéből adódó határeffektusokat a lánc szélén. Tehát $k = L/2$ és az új állapot $|\Psi\rangle = \mathcal{O}(L/2, 0) |\Psi_0\rangle$.
3. Dinamikai kétpont-függvény számolásához valós időfejlesztjük a $|\Psi\rangle$ állapotot $e^{-iH(n\cdot\delta t)}$ időfejlesztő operátorral, ahol $n = 0, 1, 2, \dots, N$ a végrehajtott időlépések számát adja meg, míg δt maga az időlépés.
4. A (4.10) kétpont-függvényben a $\langle\Psi_0|e^{iHt}$ átírható $(e^{-iHt}|\Psi_0\rangle)^*$ alakban vagy $e^{iE_0t}\langle\Psi_0|$ alakban. Az elsőt használva minden időlépésnél a $|\Psi_0\rangle$ alapállapotot is időfejlesztetni kell, majd kiszámolni a konjugáltját. Kihasználva azonban a második esetben, hogy a $|\Psi_0\rangle$ sajátállapota a H Hamilton operátornak elég beszorozni az e^{iE_0t} szorzófaktorral, ahol E_0 az alapállapoti energia, ami az előző fejezetben vizsgált alapállapoti energiasűrűségből egyszerűen kiszámolható a (3.10) képlettel.
5. Így a kétpont-függvények számolása különböző állapotok közötti egypont-függvények számolására egyszerűsödik, nevezetesen a $(e^{-i(n\cdot\delta t)}|\Psi_0\rangle)^*$ és $e^{iH(n\cdot\delta t)}|\Psi\rangle$ állapotok közé beszúrt $\mathcal{O}(j, 0)$ operátor egypont-függvényének meghatározására, ahol $k \neq j \leq L$. Minden időlépésnél kiszámoljuk a $L/2 < j \ll L$ megfelelő egypont-függvényeket. Itt $j \ll L$ csak annyit jelent, hogy elég távoli rácshelyet választunk j -nek ahhoz, hogy a határeffektusok ne befolyásolják az eredményt.

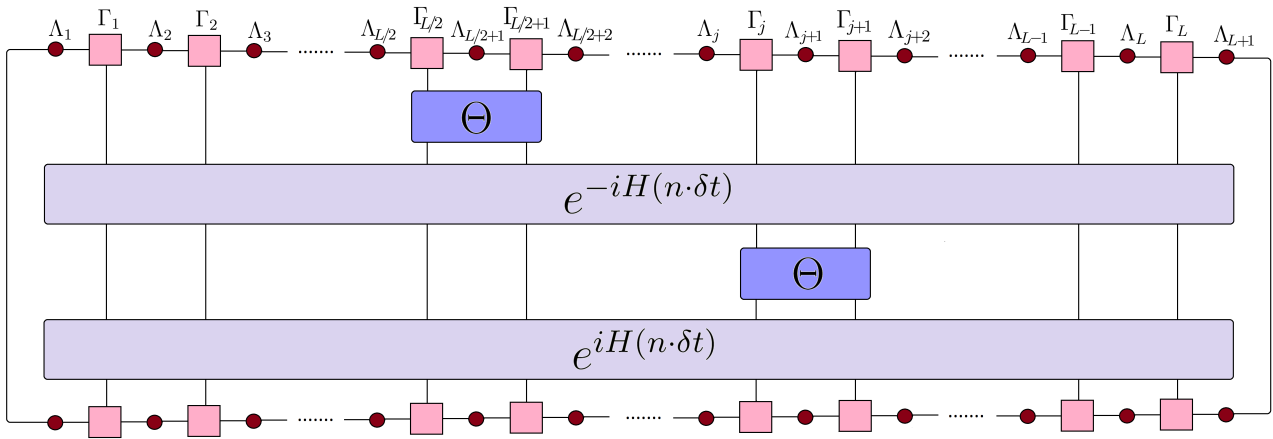
A pontokba szedett TEBD-n alapuló kétpont-függvényt számoló algoritmus sematikus rajza a 4.2. ábrán látható.

A későbbi fejezetekben az E_8 modell esetén a 4.2. ábra alapján fogjuk meghatározni a σ^x , σ^y és σ^z operátorok, illetve az E_7 modellhez tartozó S^x mágnesezettség dinamikai kétpont-függvényeit. Az E_7 modellben azonban szükségünk lesz a Θ perturbáló operátor kétpont-függvényeire is, azonban ahogy azt majd látni fogjuk Θ két egymás melletti rácshelyre fejt ki egyszerre hatást. A módszer nem változik, csak a Θ operátorokat két szomszédos rácshelyen haddatjuk és a 4.3. ábra szerint számoljuk ki a dinamikai kétpont-függvényeket.

A numerikusan meghatározott kétpont-függvények Fourier transzformációjával megkapjuk a dinamikai struktúra faktorokat és ezeket vetjük össze a térelméleti jóslatokkal a következő fejezetekben, de még mielőtt erre rátérnénk elvégezzünk majd egy rövid ellenőrzést, hogy megbizonyosodjunk róla, hogy a bemutatott kétpont-függvényt számoló algoritmusunk jól működik.



4.2. ábra. Egyspin operátorok numerikus kétpont függvényei



4.3. ábra. Kétszín operátorok numerikus kétpont-függvényei

5. fejezet

Az E_8 modell dinamikai kétpont-függvényei

Ebben a fejezetben a transzverz kvantum Ising modellből kiindulva a térelméleti háttérrel nem részletezve megmutatjuk, hogy mi a kapcsolat a szóban forgó Ising modell és a speciális E_8 modell között. Itt az Ising modell leírásához a [30] könyvet vesszük alapul.

Ezt követően pedig a [31]-ben bemutatott E_8 modellre vonatkozó eredményeket reprodukáljuk a 4. fejezetben bemutatott dinamikai kétpont függvény alkalmazásával.

A következő fejezetben pedig ugyanezt a vizsgálatot fogjuk majd elvégezni az algoritmus kiterjesztésével egy olyan modellre, amely esetén még nem születtek az E_8 modellhez hasonló szimulációeredmények, nevezetesen az E_7 modellre.

5.1. A transzverz Ising modell és az E_8 modell

Az előző fejezetekben már volt szó spinláncról, illetve olyan Hamilton-operátorról, amely kizárólag elsőszomszéd kölcsönhatást tartalmaz. Egy konkrét példaként, továbbra is az egydimenziós kvantumrendszerekre (spinláncokra) hagyatkozva, tekintsük a transzverz kvantum Ising modellt, amely a

$$H = -J \left[g \sum_{i=1}^N \sigma_i^x + \sum_{i=1}^N \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z \right] \quad (5.1)$$

Hamilton-operátorral írható le, ahol $J > 0$ a kicserélődési energia és $g > 0$ egy dimenzió nélküli csatolás. A Hamilton-operátorban szereplő első tag a külső keresztirányú mágneses mezőt írja le, míg a második tag az elsőszomszéd kölcsönhatásokat. Az ezekben megjelenő operátorok pedig a szokásos 2×2 -es Pauli-mátrixok:

$$\sigma_i^x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}_i, \quad \sigma_i^z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}_i. \quad (5.2)$$

A Hamilton-operátor vizsgálata során két esetről beszélhetünk: $g \gg 1$ és $g \ll 1$. Ha $g \gg 1$, akkor a Hamilton-operátor első tagja fog dominálni és a második tag gyakorlatilag el is hanyagolható. Ekkor a spinlánc alapállapota az lesz, amikor minden spin vagy jobbra ($|\rightarrow\rangle$) vagy balra ($|\leftarrow\rangle$) mutat (σ^x alapállapotai). Ilyen Hamilton-operátor mellett ha megvizsgáljuk a korrelációs függvényt, akkor könnyen belátható, hogy minél nagyobb a távolság két spin között, annál kevésbé fejtenek ki egymásra hatást, sőt, gyakorlatilag nincs is korreláció a spinek között, ezt matematikailag a

$$\langle 0 | \sigma_i^z \otimes \sigma_j^z | 0 \rangle = \delta_{ij}, \quad (5.3)$$

várható értékkel fejezhetjük ki, ahol $|0\rangle$ a spinlánc alapállapotát jelöli. Ha a g paramétert csökkentjük, akkor a Hamilton-operátor második tagja is elkezd hatást gyakorolni és egyre több spin veszi fel a σ^z operátor sajátállapotát ($|\uparrow\rangle$ vagy $|\downarrow\rangle$). Ekkor a spinek már nem lesznek teljesen korrelálatlanok, hanem egy exponenciális függvény alapján fog lecsengeni a korrelációs függvény:

$$\langle 0 | \sigma_i^z \otimes \sigma_j^z | 0 \rangle \sim e^{-|x_i - x_j|/\xi}, \quad (5.4)$$

ahol $|x_i - x_j|$ a spinek közti távolságot jelöli és ξ pedig a korrelációs hosszt.

A $g \ll 1$ esetben az alapállapot jellege változik a $g \gg 1$ határesethez képest, tehát a kettő között egy kvantum fázisátalakulásnak kell lennie valamilyen g_c kritikus pontban, ez a kritikus pont a $g_c = 1$. Szükségszerűen tehát két fázisállapota van a rendszernek, melyeket a σ_i^z alapállapottal vett várhatóérték, azaz a mágnesezettség segítségével jellemezhetünk. Ferromágneses vagy rendezett fázisról beszélünk, ha a mágnesezettség abszolút értéke egy véges pozitív szám és paramágneses vagy rendezetlen fázisról, ha ez 0. Ezt képletek formájában az alábbi módon fogalmazhatjuk meg:

$$|\langle \psi_{GS} | \sigma_i^z | \psi_{GS} \rangle| \approx \begin{cases} C(g) > 0 & FM \\ 0 & PM \end{cases} \quad (5.5)$$

ahol $C(g)$ egy pozitív számot jelöl.

Egészítsük ki az Ising modellt egy longitudinális mágneses teret leíró taggal is:

$$H = -J \left[g \sum_{i=1}^N \sigma_i^x + h \sum_{i=1}^N \sigma_i^z + \sum_{i=1}^N \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z \right], \quad (5.6)$$

ekkor az új paraméter h és az ilyen Hamilton operátor által leírt rendszer kritikus pontja a $g = 1$, $h = 0$ pontban van. Ha a rendszer közel van ehhez a kritikus ponthoz, akkor a korrelációs hossz nagy lesz, jóval nagyobb a rácstávolságnál (két spin közti távolság). Emiatt feltételezhetjük, hogy a spinek simán változnak a közelben és ezért a rendszert hatékonyan tudjuk modellezni kvantumtérelmélet segítségével. A fentebb tárgyalt egydimenziós Ising modellhez $h = 0$ esetben a megfelelő folytonos elmélet a szabad, spin nélküli fermionok kvantumtérelmélete $1 + 1$ téridő dimenzióban, míg a $g = 1, h \neq 0$ skálázó térelmélete az E_8 modell [32].

A rendszert a kritikus pontban konform térelméletek (CFT) írják le, amit a c centrális töltés jellemez. Az Ising típusú fázisátalakulást egy $c = 1/2$ centrális töltéshez tartozó konform térelmélet írja le és ha nagyon közel vagyunk a kritikus ponthoz ($g = 1$ és $h \neq 0$ kicsi), akkor a térelmélet azt jósolja, hogy a longitudinális mágneses térrel kiegészített transzverz Ising spinlánc spektrumát az E_8 szimmetriacsoport jellemzi. Ezért a $g = 1, h \neq 0$ (kicsi) paraméterpárosú (5.6)-nak megfelelő Hamilton operátorral rendelkező egydimenziós spinláncot E_8 modellnek hívjuk és ennek spektrumában az említett szimmetriacsoport összesen nyolc kvázirészecske megjelenését jósolja [33], melyek tömegarányát a 5.1. táblázat tartalmazza.

i	2	3	4	5	6	7	8
m_i/m_1	1,618	1,989	2,405	2,956	3,218	3,891	4,783

5.1. táblázat. Az E_8 spektrumban megjelenő kvázirészecske tömegarányok közelítő értékei [33] nyomán.

5.2. Kétpont-függvények az Ising modellben

A szimulációs eredményeink és a térelméleti jóslatok összevetése előtt vizsgáljuk meg, hogy a 4.2. alfejezetben bemutatott kétpont-függvényt számoló algoritmus jól működik-e. Ezt a következőképpen ellenőrizhetjük. Ismert, hogy a transzverz kvantum Ising modellben a korrelációs függvény exponenciálisan cseng le, ahogy azt a (5.4) képletben korábban mutattuk. Szorítkozunk most a paramágneses fázisra, ekkor a korrelációs függvény alakja nagy x távolságokra [34, 35]

$$C_p(x) \approx \frac{1}{\pi} K_0 \left(\frac{x}{\xi} \right) \approx \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{e^{-x/\xi}}{\sqrt{x/\xi}} \quad (5.7)$$

ahol K_0 a nulladik másodfajú módosított Bessel-függvény, a korrelációs hossz

$$\xi = \frac{a}{|1 - g|}, \quad (5.8)$$

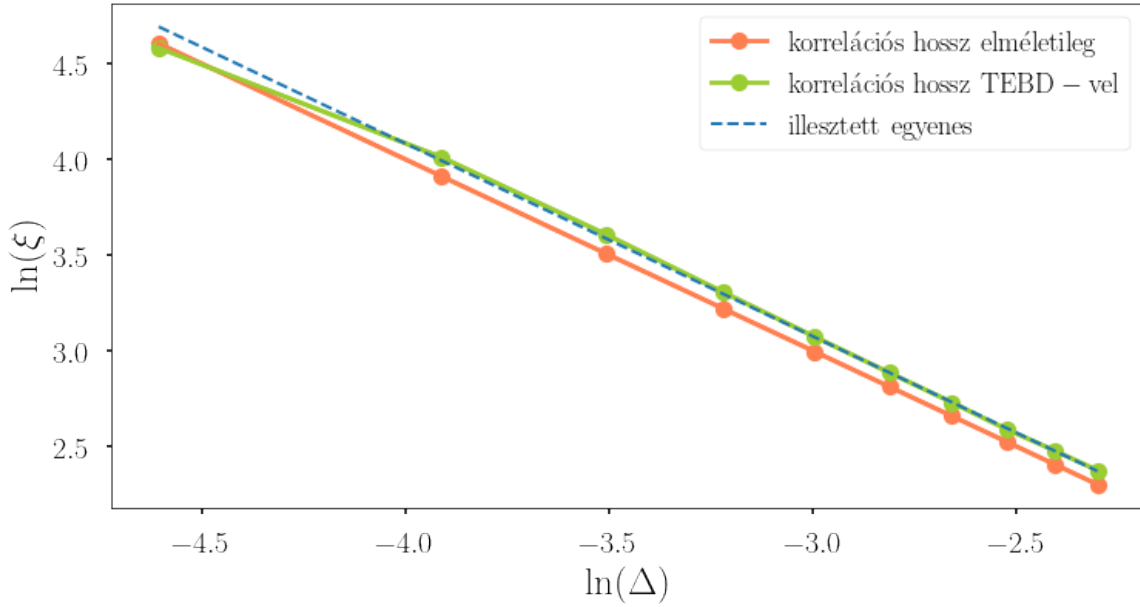
és esetünkben a rácsállandó $a = 1$. Különböző $g > 1$ paraméterválasztás esetén kiszámolható a ξ korrelációs hossz értéke. A kapott értékekkel pedig összehasonlíthatjuk az algoritmusunkkal számolt értékeket, amiket úgy kapunk, hogy $N = 7000$ időlépést végezve az iTEDB algoritmusmal megkeressük a rendszer alapállapotát, majd egy $L = 500$ hosszú láncon elég messze a lánc végétől, $x_1 = 100$ -ban az alapállapoton hattatjuk az első σ^z operátort, majd a másodikat az $x_2 \in [101, 250]$ intervallumban, és kiszámoljuk a $C_p(x_2 - x_1) = \langle \sigma^z(x_1) \sigma^z(x_2) \rangle$ korrelációkat.

Majd az így kapott $\ln C_p(x_2 - x_1)$ függvényre a (5.7) alapján

$$\ln C_p(x) = -\frac{1}{\xi}x - \frac{1}{2} \ln \left(\frac{x}{\xi} \right) + \text{const} \quad (5.9)$$

alakú függvényt illesztünk, ezzel meghatározva az adott $\Delta = |1 - g|$ -hoz tartozó ξ korrelációs hosszakat. A kapott értékeket és a (5.8) képletből számolt elméleti korrelációs hosszakat a 5.2. táblázatban tüntettük fel és a 5.1. ábrán log-log skálán ábrázoltuk Δ függvényében. Látható, hogy az általunk mért értékek nagyon közel vannak az elméleti értékekhez, illetve kijelenthetjük, hogy nagyobb N választás esetén pontosabb alapállapottal nagyobb egyezés is kapható.

g		1,01	1,02	1,03	1,04	1,05	1,06	1,07	1,08	1,09	1,1
ξ	TEBD	97,72	55,23	36,84	27,25	21,61	17,93	15,34	13,42	11,94	10,76
	elmélet	100	50	33,33	25	20	16,67	14,29	12,5	11,11	10



5.1. ábra. A transzverz kvantum Ising modell paramágneses fázisában a $g = 1$ kritikus ponthoz közel számolt korrelációs hosszak Δ függése

Továbbá ismert, hogy a kritikus pont közelében a kritikus exponensekkel vizsgáljuk, hogy bizonyos mennyiségek hogyan skálázódnak. A korrelációs hosszt a ν kritikus exponens jellemzi:

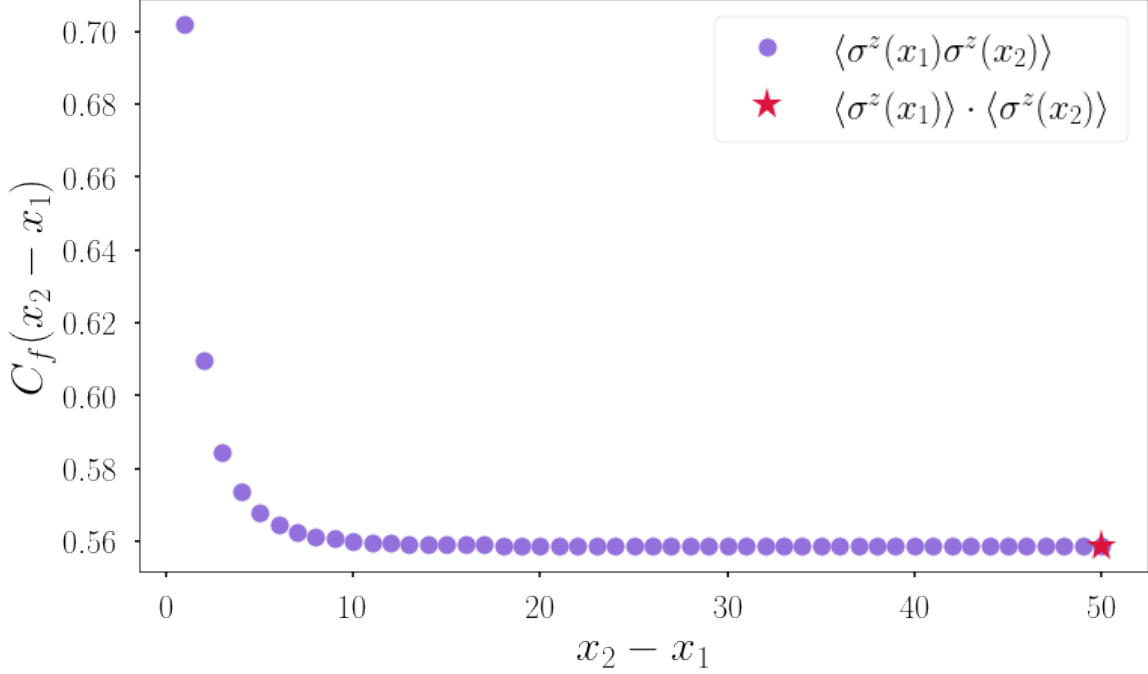
$$\xi \sim \Delta^{-\nu}. \quad (5.10)$$

A transzverz kvantum Ising modellben ez $\nu = 1$. A 5.1. ábrán a TEBD kétpont-függvényt számoló algoritmusunkkal kapott zöld görbére egyenest illesztve a meredekség -1 -szerese a kritikus exponens lesz, amire a $\nu = 0,98$ értéket kaptuk, ami megintcsak nagyon közel van az elméleti $\nu = 1$ értékhez.

Egy további vizsgálat lehet, ha megnézzük, hogy nagy távolságok esetén milyen értékhez tart az adott korrelációs függvény. Ismert ugyanis, hogy egy kétpont-függvény nagy távolságok esetén exponenciálisan tart két egy pont-függvény szorzatához, azaz tetszőleges $\mathcal{O}_1$ és $\mathcal{O}_2$ operátorok esetén igaz, hogy

$$\langle \mathcal{O}_1(x_1) \mathcal{O}_2(x_2) \rangle = \langle \mathcal{O}_1(x_1) \rangle \cdot \langle \mathcal{O}_2(x_2) \rangle, \quad (5.11)$$

ahol $x_2 - x_1$ elegendően nagy. Ezt is megvizsgáltam az algoritmusom segítségével. Egy $L = 200$ hosszú lánc esetén, ahol $g = 0.95$ (ferromágneses fázis), az $\mathcal{O}_1 = \mathcal{O}_2 = \sigma^z$ operátort nézve az $x_1 = 50$ és $x_2 \in [51, 150]$ pontokban számoltam ki a kétpont-függvények értékét és a 5.2. ábrán kirajoltam az ebből kapott görbét, illetve a két egypont-függvény szorzatának értékét. Jól látszik, hogy a görbe tényleg ehhez az értékhez tart.



5.2. ábra. A transzverz kvantum Ising modell ferromágneses fázisában a $g = 0.95$ paraméternél számolt $\langle \sigma^z \sigma^z \rangle$ kétpont-függvények nagy távolságok esetén tartanak a $\langle \sigma^z \rangle \langle \sigma^z \rangle$ egypont-függvények szorzatához

A két egypont-függvény szorzata csak egy konstans, ezt általában kivonjuk az adott korrelátorból:

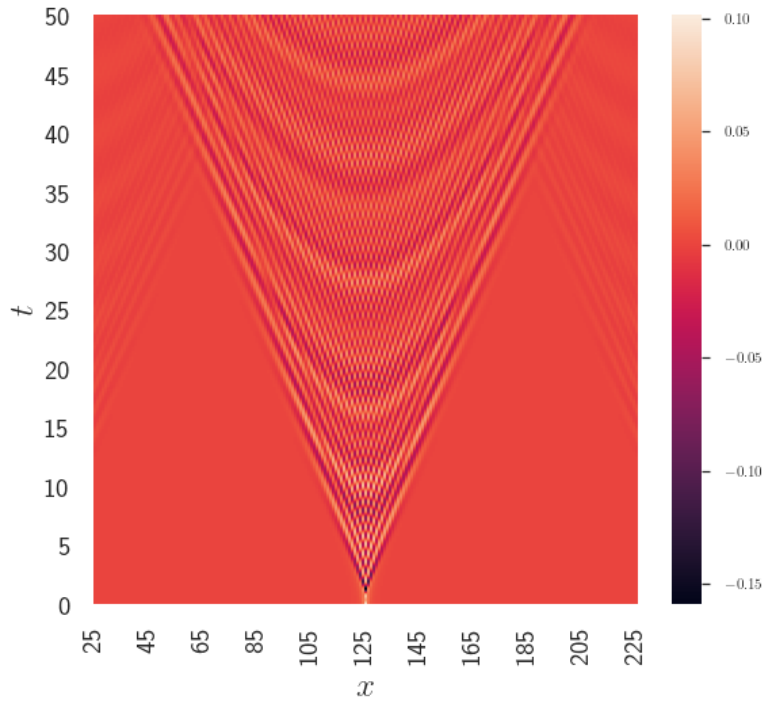
$$C^{(c)}(x_2 - x_1) = \langle \mathcal{O}_1(x_1) \mathcal{O}_2(x_2) \rangle - \langle \mathcal{O}_1(x_1) \rangle \cdot \langle \mathcal{O}_2(x_2) \rangle, \quad (5.12)$$

és a $C^{(c)}$ -t hívjuk összefüggő (connected) korrelációnak. A dolgozat további részében kizárólag az összefüggő korrelációkat fogom vizsgálni.

A fenti vizsgálatokkal tehát meggyőződünk arról, hogy a 4.2. alfejezetben bemutatott kétpont-függvényt számoló algoritmusunk jól működik. A továbbiakban ezt használva az E_8 , illetve a következő fejezetben az E_7 modell dinamikai kétpont-függvényeit vizsgáljuk majd és vetjük össze az elméleti jóslatokkal.

5.3. E_8 modell dinamikai kétpont-függvényei és dinamikai struktúra faktorai

Ebben az alfejezetben az E_8 modell (4.2) dinamikai struktúra faktorait vizsgáljuk különböző $\mathcal{O}_i$ és $\mathcal{O}_j$ operátorpárosok esetén. Fontos megjegyezni azonban, hogy a (4.2) képlet egy térelméleti formula, ahol a translációinvariancia miatt bármely pontot megválaszthatjuk az $x = 0$ pontnak, így a kétpont-függvény $t = 0$ időhöz tartozó $\mathcal{O}_j$ operátora mindig lehet az $x = 0$ -ban. Mi azonban véges spinláncot vizsgáltunk, ahol nincs translációinvariancia, ezért a $t = 0$ időpontban az $\mathcal{O}_j$ operátort mindig az L hosszú lánc közepén lévő spinen hattattuk. Továbbá mivel véges rendszerrel dolgoztunk a térelméletben szereplő integrálokat összegzésekre cseréltük és a Lorentz-invariancia miatt csak a $q = 0$ -hoz tartozó struktúra faktorokat néztük.


 5.3. ábra. A $C^{xx}(x, t)$ korrelációkhoz tartozó sűrűség diagram

Mindezt összefoglalva a (4.2) térelméleti formula a rácson a következő:

$$S^{ij}(\omega, q = 0) = \sum_x \sum_t e^{i\omega t} \langle \mathcal{O}_i(x, t) \mathcal{O}_j(L/2, 0) \rangle. \quad (5.13)$$

Kizárólag olyan összefüggő korrelációkat néztünk, melyek esetén $\mathcal{O}_i = \mathcal{O}_j$, vagyis

$$C^{ii}(x - L/2, t) = \langle \mathcal{O}_i(x, t) \mathcal{O}_i(L/2, 0) \rangle, \quad (5.14)$$

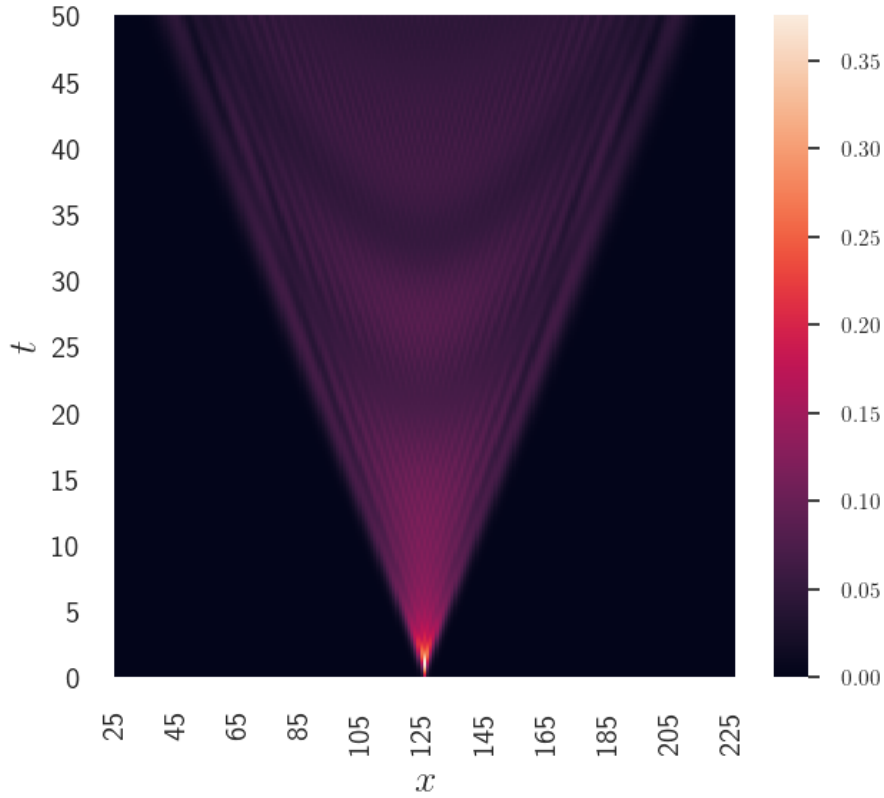
ahol $i = x, y$ vagy z a $\sigma^x, \sigma^y, \sigma^z$ operátoroknak megfelelően, és $x > L/2$, de elég messze van a spinlánc végétől. Az $x < L/2$ korrelációkat pedig egyszerűen megkaphatjuk, kihasználva a korrelációs függvények

$$C(x_1 - x_2, t) = C(x_2 - x_1, t) \quad (5.15)$$

szimmetriáját.

Az így kapott tér- és időfüggő korrelációk sűrűség diagramján megfigyelhető, hogy egy bizonyos sebességnél gyorsabban nem terjednek a részecskék, így a relativitáselmélettel analóg fénykúpot kapunk. Ezt a jelenséget a Lieb-Robinson elmélettel magyarázhatjuk, ami kimondja, hogy egy véges kvantumrendszerben a korrelációk csak véges sebességgel terjedhetnek. Tehát a részecskének van egy maximális sebessége, ezt hívjuk Lieb-Robinson sebességhatárnak. Az E_8 modellben ezt a határt a leggyorsabb részecske sebessége adja. Ennek értelmében a fénykúpon belül a $C^{ii}(x, t)$ korrelációk végesek lesznek, azon kívül pedig nullák.

Mindhárom korrelátor esetén egy $L = 250$ hosszú láncot vizsgáltunk $g = 1$ és $h = 0,0525$ (σ^x esetén) vagy $h = 0,02525$ (σ^y és σ^z esetén) paraméterek mellett. A $t = 0$ -ban az $L/2 = 125$ helyen hattattuk az első operátort, majd a másodikat minden időpontban az $x \in [126, 225]$ helyeken, és az így számolt korrelációkból készítettünk sűrűség diagramokat. Mindhárom esetben az iTEBD-vel határoztuk meg a rendszer alapállapotát, majd TEBD-vel időfejlesztettük és mindkét algoritmusban $\delta t = 0,005$ időlépéseket használtunk. A C^{yy} és C^{zz} korrelátorok esetén $N = 10000$ időlépéssel kerestük meg az alapállapotot, míg a C^{xx} korrelátor esetén $N = 50000$ lépéssel. A TEBD-ben ugyanennyi N időpontban számoltuk ki a korrelációkat is, és az iTEBD és TEBD algoritmusokban is $\chi_{max} = 100$ bond-dimenziót használtunk. Az így kapott sűrűség


 5.4. ábra. A $C^{yy}(x, t)$ korrelációkhoz tartozó sűrűség diagram

diagramok a 5.3., 5.4. és 5.5. ábrákon láthatók. Megjegyzendő, hogy a 5.3. ábra nem tartalmazza a C^{xx} korrelátorhoz tartozó teljes sűrűség diagramot, csak az első 10000 időlépéshez tartozó korrelációkat.

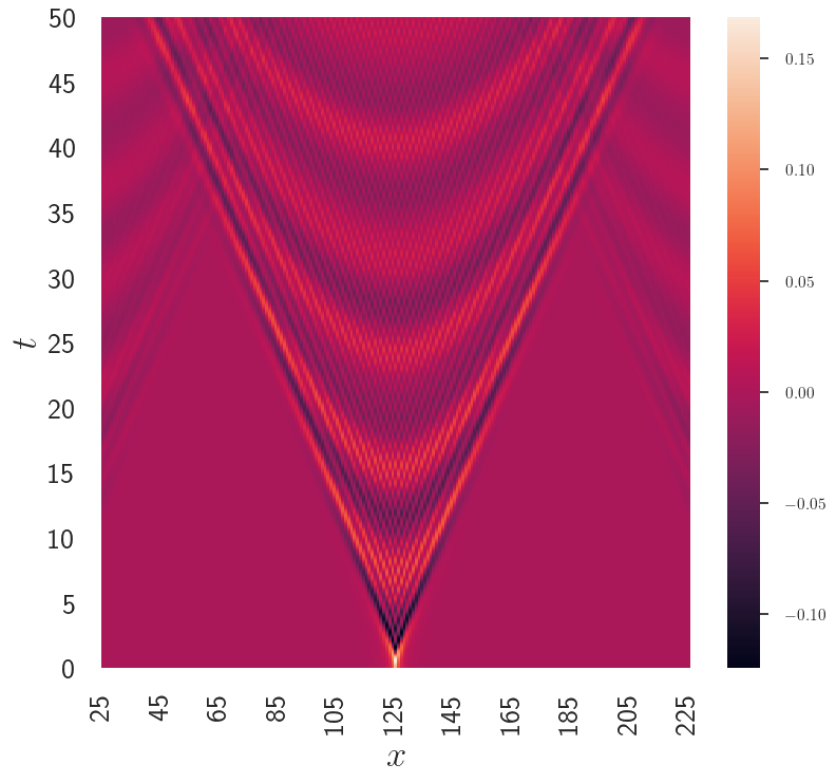
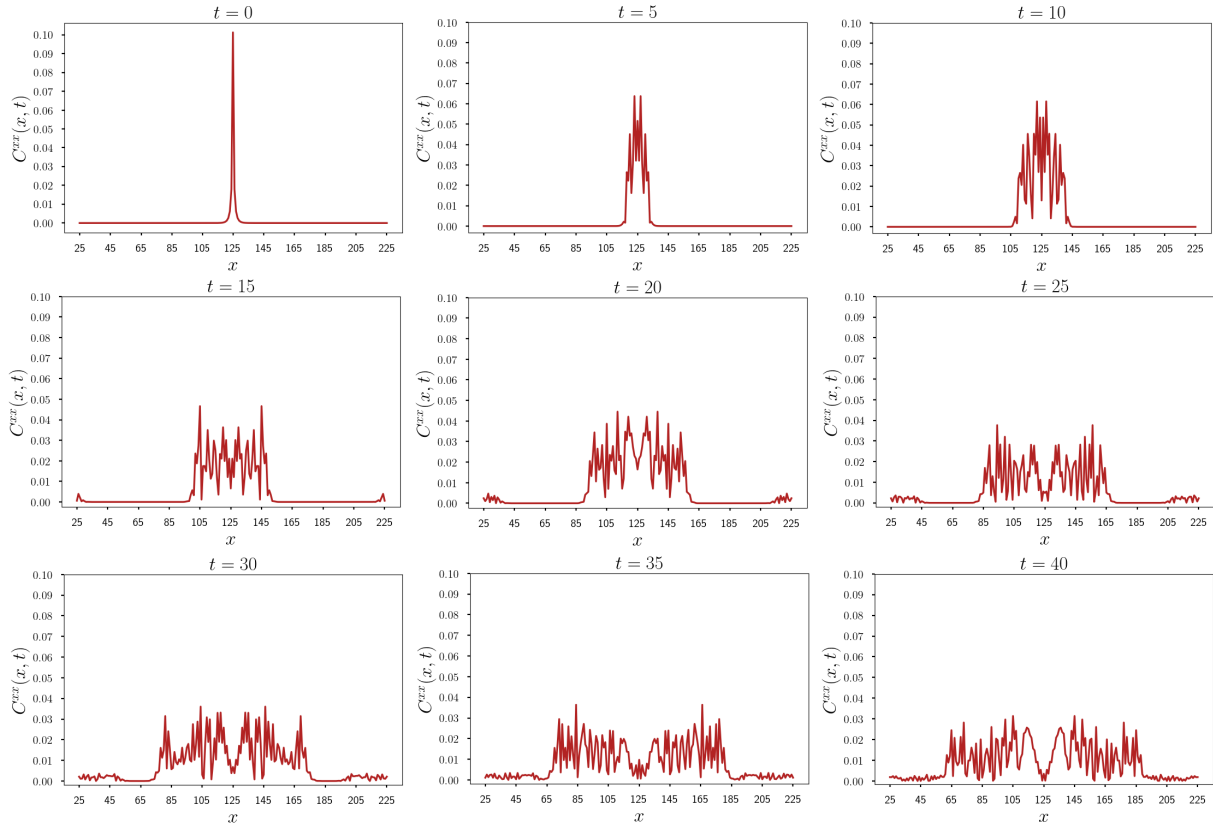
A 5.5. ábrán leginkább megfigyelhető fénykúpon kívüli nemnulla korreláció értékek nem fizikaiak, ez a TEBD algoritmus tulajdonságaiból fakadhat vagy a kétpont-függvényt számoló algoritmus lánc végén történő nem megfelelő viselkedéséből. Célunk a jövőben ezt jobban megvizsgálni és megérteni.

A sűrűség diagramokon a $C^{ii}(x, t)$ ($i = x, y, z$) korrelációkat láttuk a $t \in [0, N\delta t]$ és $x \in [25, 225]$ intervallumokban. Ebből kimetszve egy időszeletet megkapjuk a C^{ii} korrelátor helyfüggését az adott időpontban, és ábrázolva az egyes t időszeltekhez tartozó $C^{ii}(x)$ korrelációs függvényt, megnézhetjük hogyan terjednek az időben a részecskék és hogyan tágul a megfelelő fénykúp. A 5.6., 5.7. és 5.8. ábrákon a $t \in [0, 40]$ időintervallumból 9 időszelhet esetén ábrázoltuk a korrelátorok helyfüggéseit. Az ábrákon az $x = 25$ és $x = 225$ rácshelyekhez közel látott zavar szintén a nem fizikai jelenség oka.

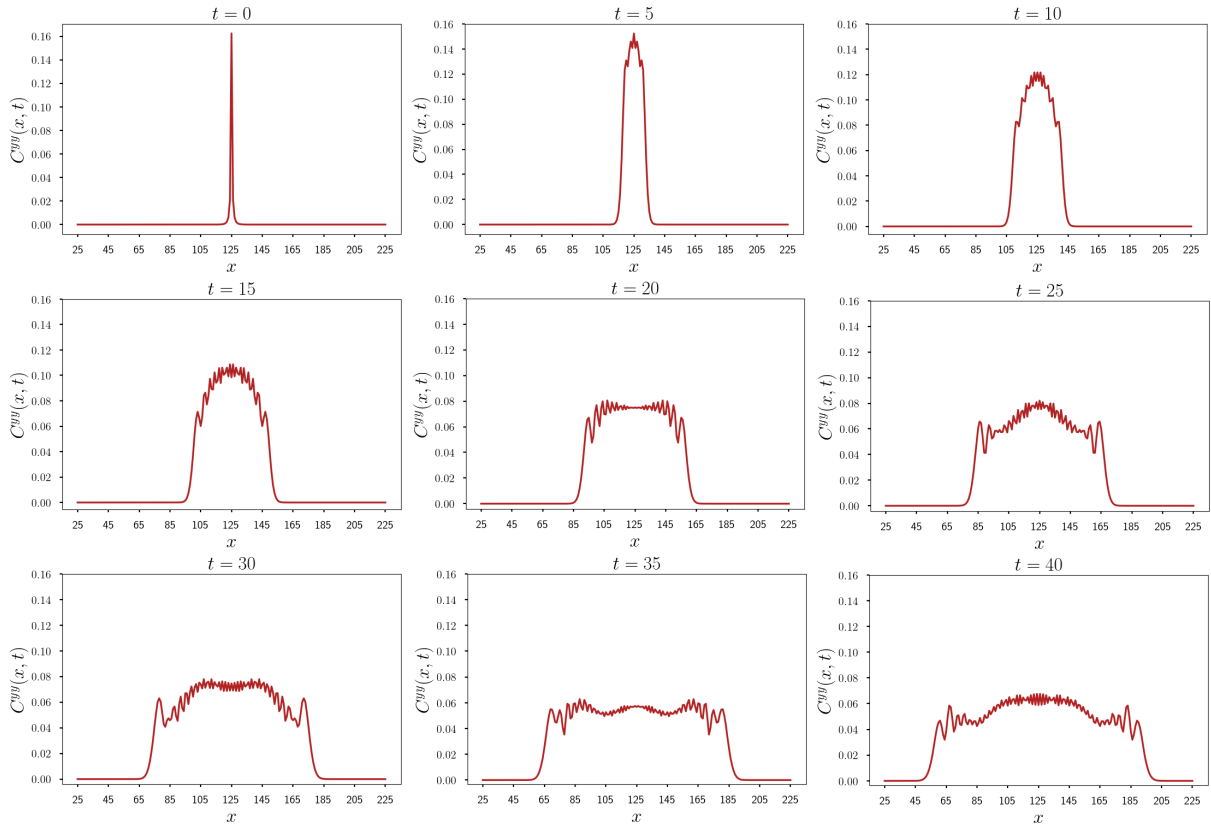
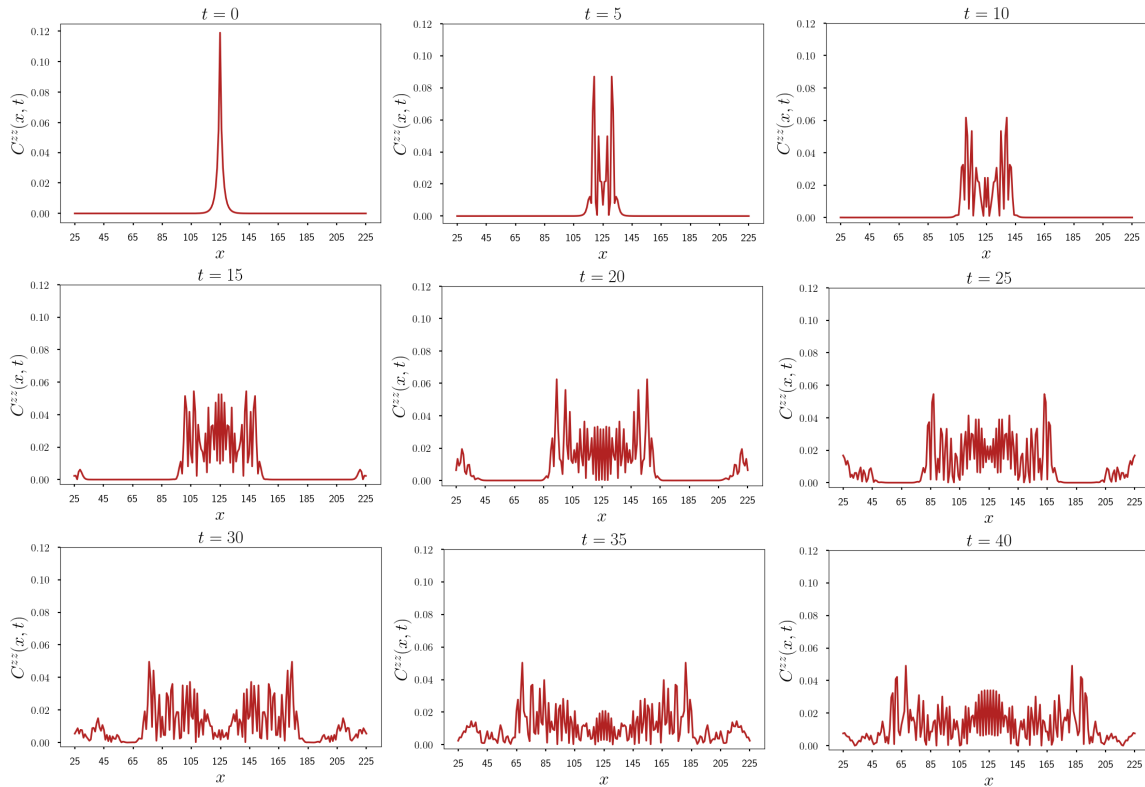
A fent bemutatott $C^{ii}(x, t)$ összefüggő korrelációkhoz tartozó struktúra faktorok a 5.13 alapján a következők lesznek:

$$S^{ii}(\omega, q) = \sum_x \sum_t e^{i\omega t - iqx} \langle \sigma^i(l, t) \sigma^i(L/2, 0) \rangle, \quad (5.16)$$

ahol $i = x, y$ vagy z , $L = 250$ és $l \in [25, 225]$.


 5.5. ábra. A $C^{zz}(x, t)$ korrelációkhoz tartozó sűrűség diagram

 5.6. ábra. A $C^{xx}(x, t)$ korrelátor helyfüggése különböző időpontokban

A $q = 0$ esetet vizsgáltuk mindhárom korrelátor esetén, de mielőtt erre rátérnénk, tegyünk egy kis kitérőt és nézzünk meg egy példát, amikor $q \neq 0$. Egy $L = 170$ hosszú lánc $g = 1$,

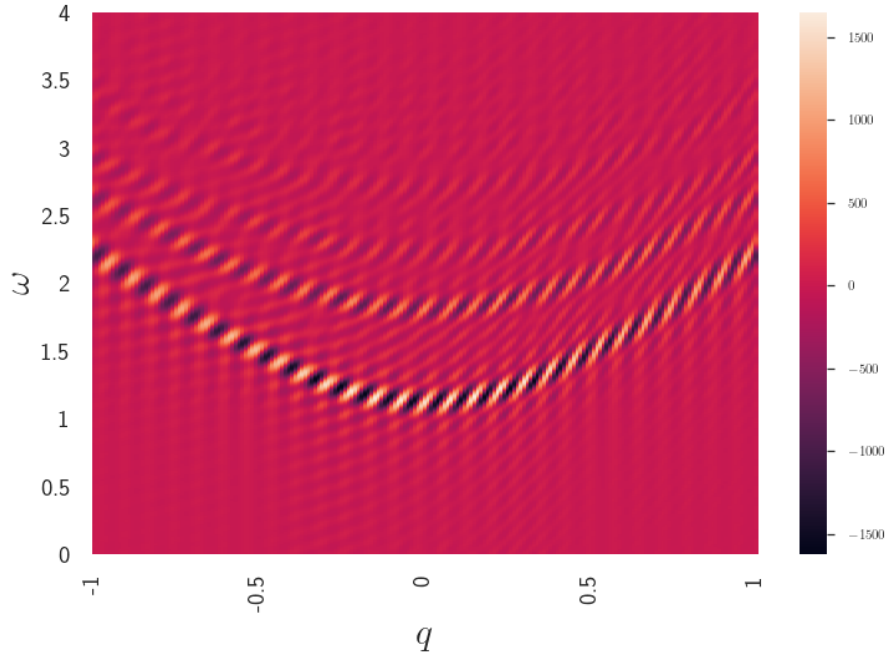

 5.7. ábra. A $C^{yy}(x, t)$ korrelátor helyfüggése különböző időpontokban

 5.8. ábra. A $C^{zz}(x, t)$ korrelátor helyfüggése különböző időpontokban

$h = 0,0525$ paraméterválasztása mellett $N = 10000$ db. $\delta t = 0,005$ időlépéssel a σ^x operátor

dinamikus struktúra faktorait vizsgáltuk különböző q értékek esetén, vagyis a

$$S^{xx}(\omega, q) = \sum_x \sum_t e^{i\omega t - iqx} \langle \sigma^x(l, t) \sigma^x(L/2, 0) \rangle, \quad (5.17)$$

függvényt, ahol $l \in [25, 145]$. Az így kapott struktúra faktorok ω frekvencia- és q impulzusfüggő sűrűség diagramjáról leolvashatók az egyrészecske diszperziós relációk. Ezt ebben a munkában részletesen nem vizsgálatuk. (5.9. ábra). A továbbiakban csak a dinamikus struktúra faktor $q = 0$ -ban függőlegesen kimetszett szeletével foglalkozunk.



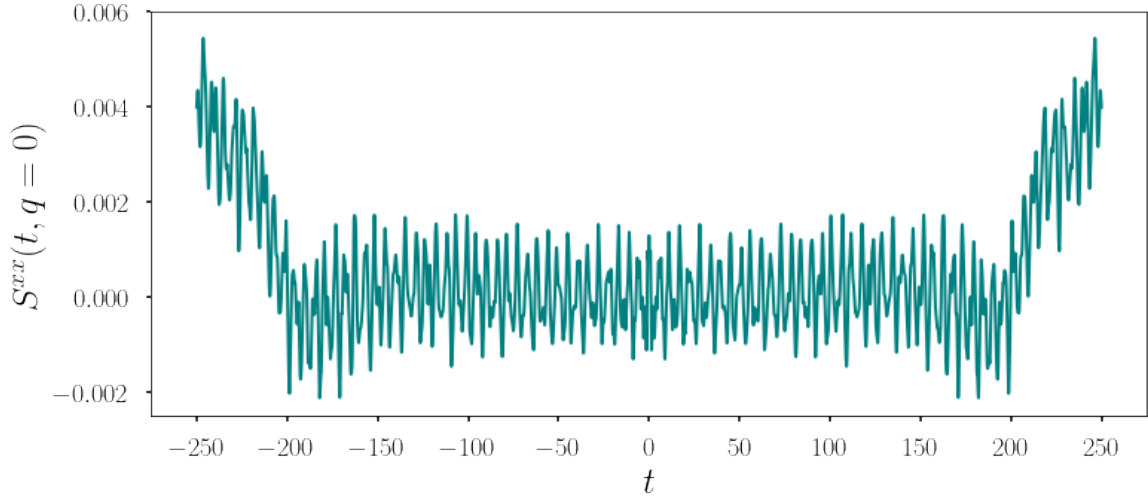
5.9. ábra. Az $S^{xx}(\omega, q)$ dinamikai struktúra faktorokhoz tartozó diszperziós reláció

A kis kitérő után folytassuk a fentebb bemutatott C^{ii} korrelátorok vizsgálatát. Ehhez a 4.1. alfejezetben a dinamikai struktúra faktorokról adott általános elméleti összefoglalót fogjuk most az E_8 modellre specifikálni és azzal összevetni a szimulációs eredményeinket.

Első lépésként a fentebb bemutatott $C^{ii}(x - L/2, t)$ ($i = x, y, z$) korrelációs függvényeken elvégezzük az x rácshelyekre történő összegzést, ami a $q = 0$ esetben csak egy átlagolást fog jelenteni, azaz egy adott t időpillanathoz az

$$S^{ii}(t, q = 0) = \frac{1}{l_{max} - L/2} \sum_{x=25}^{225} C^{ii}(x - L/2, t), \quad (5.18)$$

függvény fog tartozni, ahol $l_{max} - L/2 = 100$. Az átlagolással kapott $S^{xx}(t, q = 0)$, $S^{yy}(t, q = 0)$ és $S^{zz}(t, q = 0)$ függvényeket kell Fourier-transzformálni ahhoz, hogy megkapjuk a keresett dinamikai struktúra faktorokat.


 5.10. ábra. Az $S^{xx}(t, q=0)$ függvény

A jobb Fourier-spektrum érdekében érdemes az $S^{xx}(t, q=0)$, $S^{yy}(t, q=0)$ és $S^{zz}(t, q=0)$ függvényeket kiterjeszteni negatív t időkre is, ezt pedig a korrelációs függvények

$$C(x, t) = \overline{C(x, -t)} \quad (5.19)$$

tulajdonságát kihasználva tehetjük meg. Ez a tulajdonság egyszerűen belátható:

$$\begin{aligned} C(x, t) &= \langle \mathcal{O}(x, t) \mathcal{O}(0, 0) \rangle = \langle \mathcal{O}(x, 0) \mathcal{O}(0, -t) \rangle = \\ &= \overline{\langle \mathcal{O}(0, -t) \mathcal{O}(x, 0) \rangle} = \overline{\langle \mathcal{O}(-x, -t) \mathcal{O}(0, 0) \rangle} = \overline{C(-x, -t)}, \end{aligned} \quad (5.20)$$

ahol kihasználva a (5.15) szimmetriát kapjuk a korrelációs függvények (5.20) tulajdonságát. A negatív időkre kiterjesztett $S^{xx}(t, q=0)$, $S^{yy}(t, q=0)$ és $S^{zz}(t, q=0)$ függvények a 5.10., 5.11. és 5.12. ábrákon láthatók, ahol az időintervallum $[-N\delta t, N\delta t]$, vagyis az $i = y, z$ esetén $t \in [-50, 50]$ és $i = x$ esetén $t \in [-250, 250]$.

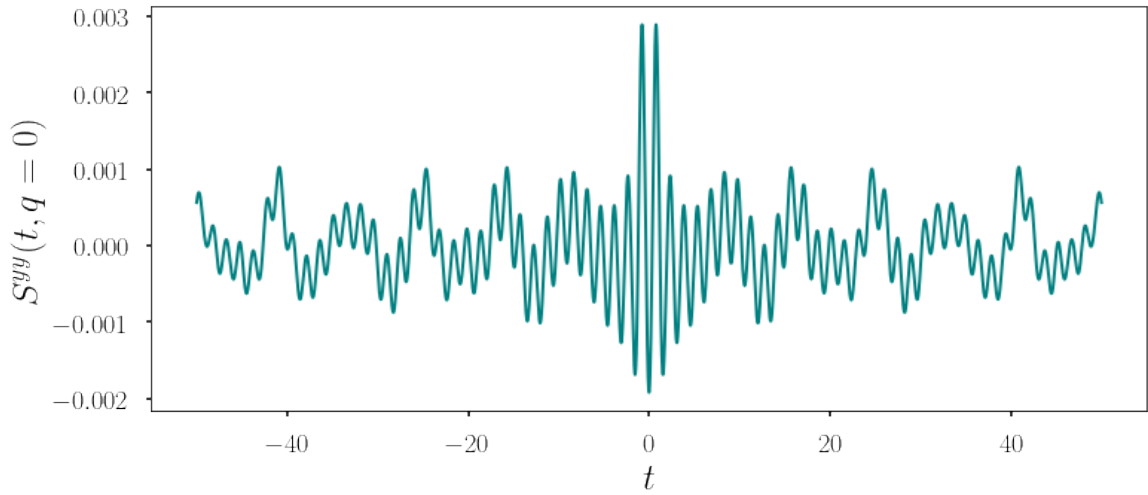
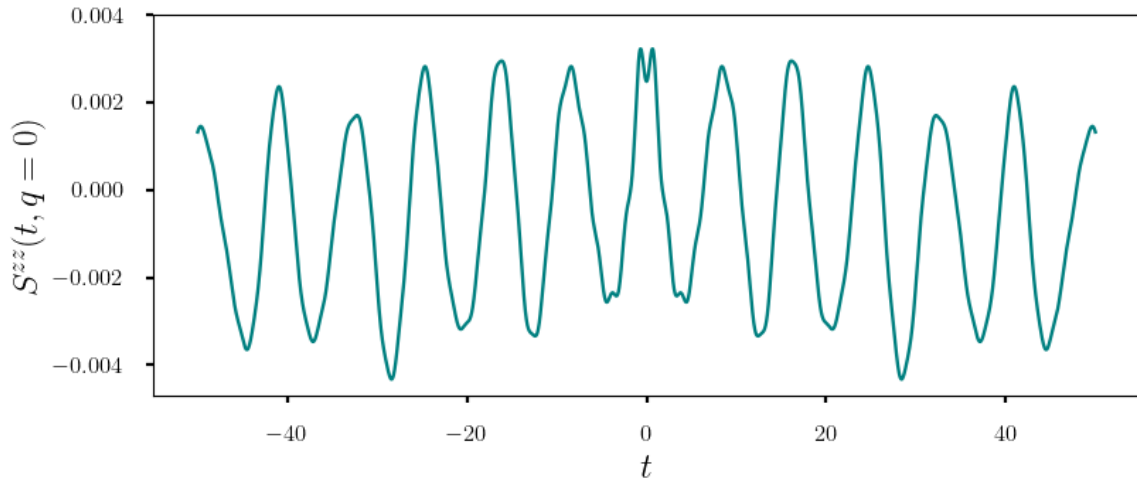
Az E_8 modellben megjelenő kvázirészecskéket a 5.1. táblázatban mutattuk be. Az ehhez tartozó 1- és 2-részecske állapotokat térelméletben a (4.7) és (4.8) összefüggésekből kapjuk. Az elméleti jóslat tehát az, hogy mindhárom dinamikai struktúra faktorhoz tartozó Fourier-spektrumban a 8 kvázirészecske, illetve a belőlük képezhető többrészecske állapotok fognak megjelenni megfelelő energiákkal. A 5.1. táblázat alapján tudunk elméleti jóslatot tenni arra, hogy milyen sorrendben, milyen csúcsok fognak megjelenni, azaz ismert az 1- és többrészecske állapotokhoz tartozó tömegek aránya az m_1 legkönnyebb részecskéhez viszonyítva. Illetve a Fourier-spektrumban megjelenő 1-részecske csúcsok amplitúdóinak arányára is tudunk elméleti jóslatot tenni az alábbi összefüggés alapján [29]:

$$|S^{\alpha\alpha}(\omega, q=0)| = 2\pi \frac{|F_i^\alpha|^2}{m_i}, \quad (5.21)$$

ahol $\alpha = x, z$ a megfelelő operátort jelöli, $i \in \{1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8\}$ pedig a megfelelő kvázirészecskére utal és F_i^α a σ^α operátor m_i részecskéhez tartozó egyrészecske form faktora. A σ^x longitudinális mágnesezettség és a σ^z transzverz mágnesezettség operátorokhoz tartozó egyrészecske form faktorokat a 5.3. táblázatban foglaltam össze [36].

A numerikusan számolt dinamikai struktúra faktorokat pedig az $S^{xx}(t, q=0)$, $S^{yy}(t, q=0)$ és $S^{zz}(t, q=0)$ függvények Fourier transzformációjából kapjuk:

$$S^{\alpha\alpha}(\omega, q=0) = \sum_{t=-N\delta t}^{N\delta t} e^{i\omega t} S^{\alpha\alpha}(t, q=0), \quad (5.22)$$


 5.11. ábra. Az $S^{zz}(t, q=0)$ függvény

 5.12. ábra. Az $S^{yy}(t, q=0)$ függvény

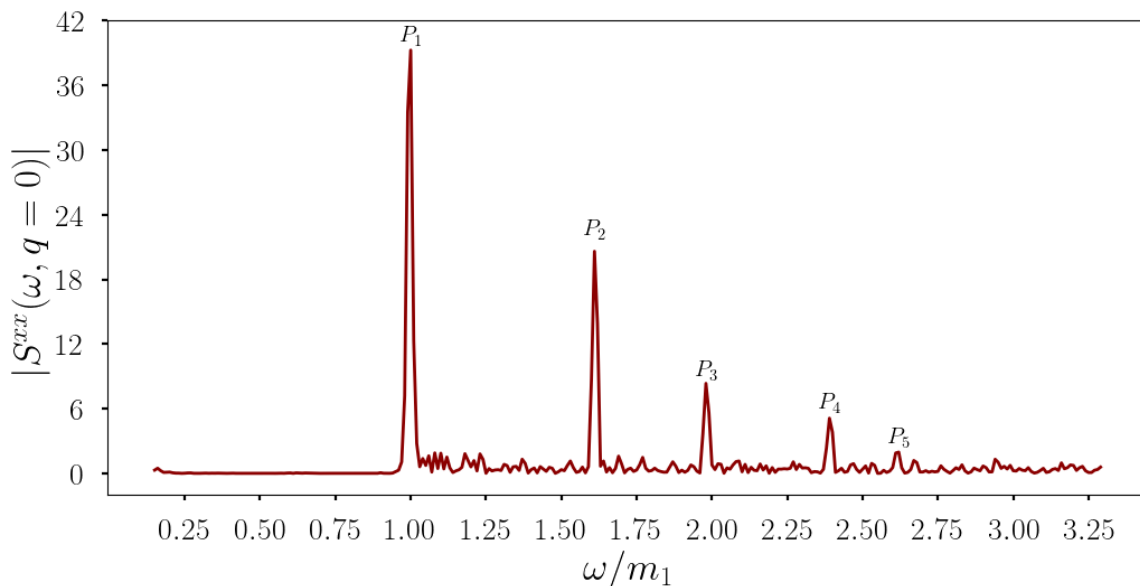
i	F_i^x	F_i^z
1	-0,64090211	-3,70658437
2	0,33867436	3,42228876
3	-0,18662854	-2,38433446
4	0,14277176	2,26840624
5	0,06032607	1,21338371
6	-0,04338937	-0,96176431
7	0,01642569	0,45230320
8	-0,00303607	-0,10584899

ahol $\alpha = x, y, z$. A keresett $S^{xx}(\omega, q=0)$, $S^{yy}(\omega, q=0)$ és $S^{zz}(\omega, q=0)$ dinamikai struktúra faktorok abszolút értékei a 5.13., 5.14. és 5.15. ábrákon láthatók.

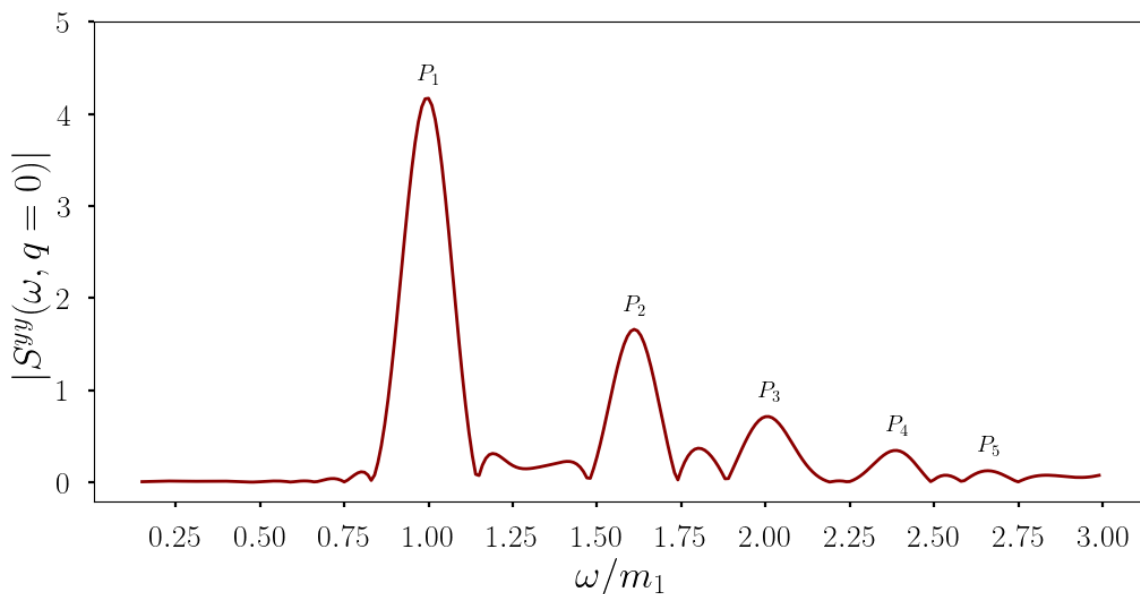
Fontos megjegyezni, hogy a Fourier transzformáció elvégzésekor Hanning-ablakot használtunk:

$$W(n) = \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \cos\left(\frac{2\pi n}{\mathcal{N}}\right), \quad (5.23)$$

ahol $\mathcal{N}$ az ablak hossza, ami esetünkben $2N$.

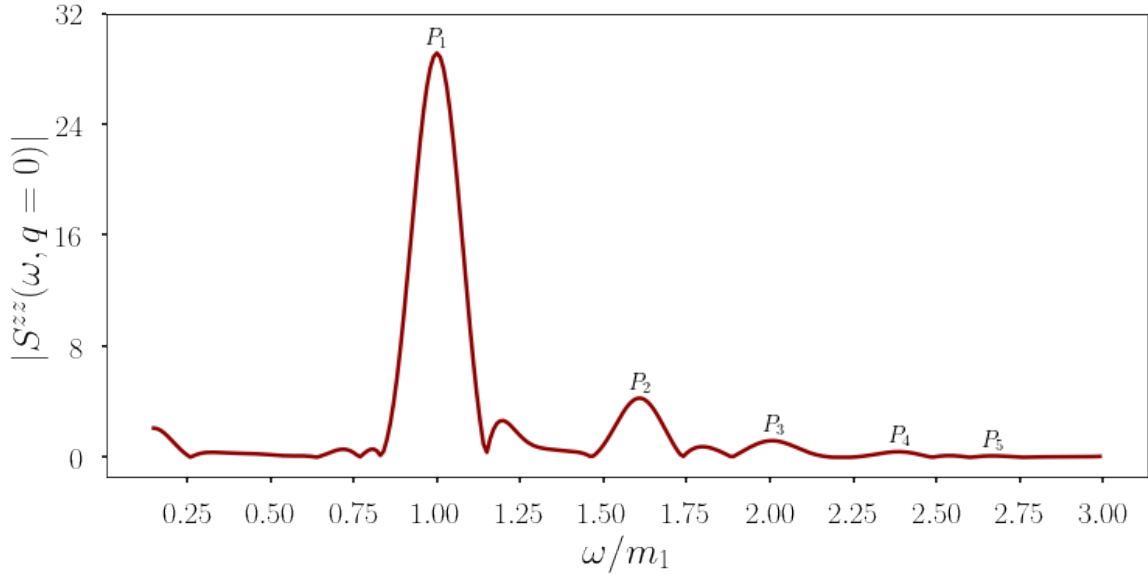

 5.13. ábra. A $S^{xx}(\omega, q = 0)$ dinamikai struktúra faktor abszolút értéke

Megfigyelhető, hogy az $S^{xx}(\omega, q = 0)$ dinamikai struktúra faktor esetén, mivel nagyobb időablakot használtunk, sokkal kisebb a zaj és a csúcsok jobban kirajzolódnak, valamint az 1-részecske csúcsok sokkal inkább hasonlítanak az elméletben számolt (4.7) Dirac-deltákhoz. Tehát megállapíthatjuk, hogy minél nagyobb időablakot használunk, annál pontosabb eredményt fogunk kapni.


 5.14. ábra. A $S^{yy}(\omega, q = 0)$ dinamikai struktúra faktor abszolút értéke

A három dinamikai struktúra faktorhoz tartozó Fourier-spektrumban megjelenő csúcsok közül a P_1, P_2 és P_4 1-részecske állapotokhoz tartozik, a P_5 egy 2-részecske állapot és a P_3 pedig az m_3 1-részecske állapotához és a $2m_1$ 2-részecske állapothoz van nagyon közel, de ekkora felbontás mellett nem lehet egyértelműen kijelenteni, hogy melyik állapotot is látjuk valójában.

Az csúcsok helyeinek és amplitúdóinak P_1 -gyel vett arányát és az elméleti jóslatokat a 5.3. és 5.3. táblázatokban foglaltuk össze, ahol az $S^{yy}(\omega, q = 0)$ struktúra faktorhoz tartozó elméleti


 5.15. ábra. A $S^{zz}(\omega, q = 0)$ dinamikai struktúra faktor abszolút értéke

amplitúdó arányokat az $S^{zz}(\omega, q = 0)$ struktúra faktor segítségével határoztuk meg [31]:

$$S^{yy}(\omega, q = 0) = \omega^2 S^{zz} = \sum_{i=1}^8 2\pi\omega^2 \frac{|F_i^z|^2}{m_i} \frac{1}{4J^2} \delta(\omega - m_i), \quad (5.24)$$

ebből az m_i részecskéhez tartozó amplitúdó az alábbi lesz:

$$\begin{aligned} |S^{yy}(\omega, q = 0)| &= 2\pi m_i^2 \frac{|F_i^z|^2}{m_i} \frac{1}{4J^2} = \\ &= \frac{\pi}{2J^2} m_i |F_i^z|^2 = \frac{\pi}{2J^2} m_1 \frac{m_i}{m_1} |F_i^z|^2, \end{aligned} \quad (5.25)$$

így az amplitúdó arányok számolása során a $\pi m_1/2J^2$ ki fog esni, az m_i/m_1 tömegarányokat ismerjük.

csúcsok helyeinek aránya					
csúcsok	részecskék	szimuláció			elmélet
		σ^x	σ^y	σ^z	
P_1	m_1	1	1	1	1
P_2	m_2	1,61	1,61	1,61	1,618
P_3	$m_3; 2m_1$	1,98	2,01	2,01	1,989; 2
P_4	m_4	2,39	2,39	2,39	2,405
P_5	$m_1 + m_2$	2,62	2,66	2,67	2,618

5.2. táblázat. A numerikusan meghatározott Fourier-spektrumban látott csúcsokhoz tartozó 1- és 2-részecske állapotok tömegarányai és az elméleti tömegarányok

Mindent összegezve a 5.3. táblázatban látható, hogy a numerikus és elméleti tömegek jól egyeznek. A 5.3. táblázatban szereplő amplitúdók is közel vannak egymáshoz, de nem mutatnak olyan jó egyezést, mint a tömegek, ennek oka, hogy a csúcsok szét vannak kenve, nagyobb időablakkal és nagyobb felbontással bizonyára lehetne javítani ezeken az értékeken, de az jól látszik, hogy mindegyik megközelíti az elméleti értéket.

csúcsok amplitúdóinak aránya							
csúcsok	részecskék	σ^x		σ^y		σ^z	
		szim.	elm.	szim.	elm.	szim.	elm.
P_1	m_1	1	1	1	1	1	1
P_2	m_2	0,525	0,527	0,398	0,452	0,147	0,173
P_3	m_3	0,143	0,208	0,171	0,169	0,041	0,043
P_4	m_4	0,130	0,156	0,082	0,119	0,014	0,021

5.3. táblázat. A numerikusan meghatározott Fourier-spektrumban látott csúcsok amplitúdóinak arányai és az elméleti arányok

Továbbá látható, hogy mindhárom Fourier-spektrumban a frekvencia át lett skálázva az

$$m_1 \approx 5,42553 \cdot h^{8/15} \quad (5.26)$$

tömegcsatolás összefüggéssel [37], ahol m_1 a 3.2. táblázatban is megjelenő m_1 tömeget jelöli. Ezzel az átskálázással az m_1 1-részecske állapothoz tartozó csúcs került az $\omega/m_1 = 1$ pontba.

Ebben a fejezetben tehát az E_8 modell dinamikai struktúra faktorait jártuk körbe a σ^x longitudinális, σ^z transzverz és a σ^y y-irányú mágnesezettségek esetén. Megnéztük a korrelációkhoz tartozó sűrűség diagramokat és lépésről-lépésre végül eljutottunk a dinamikai struktúra faktorokhoz. Majd a kapott 1- és 2-részecske állapotokat összehasonlítottuk az elméleti jóslattal és egyezést találtunk a numerikus és elméleti eredmények között.

6. fejezet

Az E_7 modell dinamikai kétpont-függvényei

Az előző fejezetben körbejárt E_8 modell numerikusan számolt dinamikai struktúra faktori alátámasztották a várt térelméleti jóslatot. Ebben a fejezetben az E_7 modell dinamikai struktúra faktorait fogjuk megvizsgálni.

Azonban még mielőtt ebbe belekezdenénk fontos néhány szót szólni az E_7 modellről. Visszatérünk majd a korábban már megemlített Z_2 szimmetriára, ugyanis ez szoros kapcsolatban áll a Fourier-spektrumban megjelenő csúcsokkal. Ebből tudunk következtetni arra, hogy az általunk vizsgálni kívánt E_7 modell dinamikai struktúra faktori esetén mely részecskeállapotok megjelenését várhatjuk. Ebben a fejezetben a Z_2 szimmetriát figyelembe véve az E_7 modellre vonatkozó térelméleti jóslatok igazolása a célunk különböző operátorpárosok esetén.

6.1. Z_2 szimmetria

A Z_2 szimmetria a rendszer állapotain ábrázolódik ± 1 értékkel, ugyanis a spinláncnak vannak páros és páratlan konfigurációi. Párosak azok az állapotok, amelyek nem változnak meg azzal, ha minden spint átfordítunk a láncban és páratlanok azok, amelyek egy ilyen átfordítás után az állapotot egy negatív előjellel módosítják. Az előbbieken ábrázolódik a Z_2 szimmetria $+1$ -el, az utóbbiakon -1 -el. A jobb érthetőség kedvéért, íme két nagyon egyszerű példa a fenti diszkusszióra:

$$\begin{aligned} \text{páros állapot: } & \dots \uparrow\uparrow\uparrow\uparrow \dots + \dots \downarrow\downarrow\downarrow\downarrow \dots = (+1) \cdot (\dots \downarrow\downarrow\downarrow\downarrow \dots + \dots \uparrow\uparrow\uparrow\uparrow \dots) \\ \text{páratlan állapot } & \dots \uparrow\uparrow\uparrow\uparrow \dots - \dots \downarrow\downarrow\downarrow\downarrow \dots = (-1) \cdot (\dots \downarrow\downarrow\downarrow\downarrow \dots - \dots \uparrow\uparrow\uparrow\uparrow \dots) \end{aligned} \quad (6.1)$$

A Blume–Capel modellben a Z_2 szimmetria abból ered, hogy ha a modellt leíró (3.2) Hamilton operátorban az S^x mátrixot $-S^x$ -re cseréljük, akkor ugyanazt a Hamilton operátort kapjuk ugyanazokkal az állapotokkal.

A konform térelméleteken belül van még egy külön osztály, az ún. szuperkonform térelméletek, és ennek szuperszimmetriája is van, ami a szuperkonformális unitér minimális sorozat, ezt ezen a szinten most csak megemlítjük, ami lényeges, hogy ehhez tartoznak a Neveu-Schwarz-nak és a Ramond-nak nevezett szektorok (mezők), amik a Hilbert-teret két részre bontják. Ezek a szektorok állnak kapcsolatban a Z_2 szimmetriával, mégpedig a Neveu-Schwarz-szektor a Z_2 -páros szektornak és a Ramond-szektor a Z_2 -páratlan szektornak felel meg. A Blume–Capel modellben megjelenő kvázirészecskék tömegei is függnek attól, hogy éppen melyik szektroban van a rendszer, így az m_2, m_4, m_5 és m_7 tömegek a Z_2 -páros szektorban, míg az m_1, m_3 és m_6 tömegek a Z_2 -páratlan szektorban jelennek meg a spektrumban.

A leírtak alapján levonhatunk következtetéseket a kvázirészecskék paritását illetően. Ennek érdekében a következő kérdést kell körbejárni. Mit várunk a spektrumtól? Ha véges láncot

tekintünk és periodikus határfeltételt feltételezünk, akkor a rendezett és rendezetlen fázisok spektruma különböző lesz. Rendezetlen fázisban egy alapállapota van a rendszernek és a részecskék efeletti gerjesztések. Ebben az esetben a spektrumban páros és páratlan részecskék is megfigyelhetők. Rendezett fázis esetén viszont két alapállapota van a rendszernek és a páratlan részecskék a két állapot között interpoláló kinkok. Így periodikus határfeltétel mellett nem jelenhetnek meg magukban. A páros részecskék pedig ezek kötött állapotai és párban jelennek meg a két vákuum fölött. Itt fontos megjegyezni, hogy a rendezett fázis spektruma erősen függ a határfeltételtől.

Összegezve tehát, az E_7 modell paramágneses fázisában a páros operátorok páros részecske konfigurációkhoz, míg a páratlanok a páratlanokhoz csatolódnak. A ferromágneses fázisban, pont ellenkezőleg: páros operátorok páratlan, páratlan operátorok páros konfigurációkhoz csatolódnak. Ezen megfigyelések meghatározzák, hogy milyen csúcsokat várhatunk a különböző Fourier-spektrumokban. Páros és páratlan részecske konfigurációk összeállhatnak különböző részecskékből: például két páros vagy páratlan részecske páros, egy páros és egy páratlan részecske páratlan konfigurációt ad.

Kicsit konkrétan tehát azt várjuk, hogy a páros operátorokra számolt dinamikai struktúra faktor esetén az m_2 , m_4 , m_5 és m_7 1-részecske állapotok jelenjenek meg a Fourier-spektrumban, illetve ezekből képezhető többrészecske állapotok, valamint páros számú kinkből (páratlan részecskékből) álló többrészecske állapotok. Így két páratlan részecske tömegösszegénél, például $2m_1$ -nél vagy $m_1 + m_3$ -nál, indulhat egy kontinuum.

A 6.1. táblázatban feltüntettük, hogy egyes operátorok milyen paritású részecskékhez csatolódnak az E_7 modell megfelelő fázisában. Ezek között szerepel az S^x longitudinális, az S^z transzverz és az S^y y-irányú mágnesezettség, valamint a $\Theta \propto H_{pert}$ energia-impulzus tenzor. A továbbiakban az egyszerűség kedvéért a $\Theta = H_{pert}$ azonosítással élünk. Valamint a $\sigma' = (S^z)^2 S^x$ magasabb rendű mágnesezettséget (subleading magnetiation/submagnetization) is feltüntettük a táblázatban.

részecske-konfigurációk paritása		
fázisok	operátorok	
	Θ, S^z, S^y	$S^x, S^{\sigma'}$
PM	páros	páratlan
FM	páratlan	páros

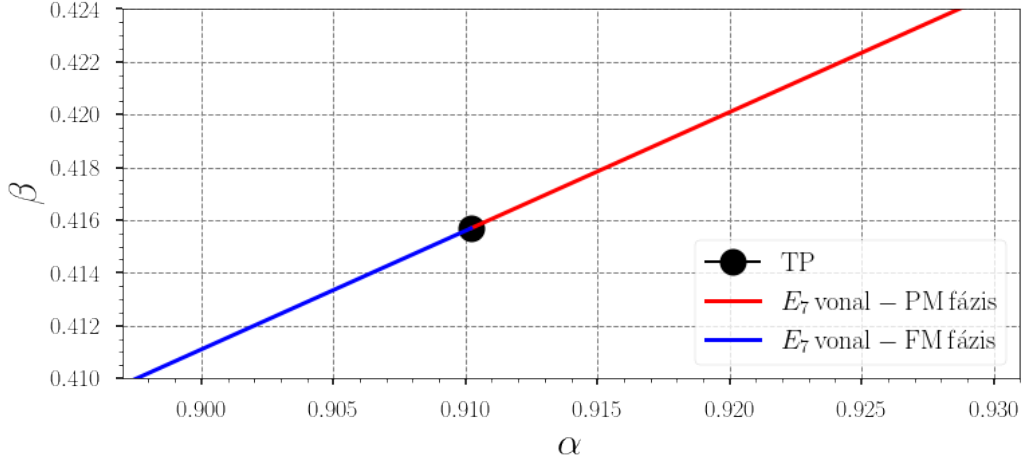
6.1. táblázat. A részecske-konfigurációk paritása az E_7 modell egyes operátorai esetén

6.2. E_7 vonal

Ahogy az már korábban is szerepelt, a Blume–Capel modell trikritikus pontját a $c = 7/10$ centrális töltéssel jellemzett konform térelmélet írja le, melynek egy termális perturbációja az E_7 modell [22, 23]. Ebben a modellben az E_7 szimmetriacsoportnak megfelelően 7 stabil kvázirészecske található, melyek tömegarányait a korábban már bemutatott 3.2. táblázat tartalmazza.

Világos, hogy az E_7 modellben a részecskéket az E_7 szimmetriacsoport generálja, de hogyan realizálható maga az E_7 modell? A Blume–Capel spinláncnak van egy trikritikus pontja, mely a skálázó határesetben konform térelmélettel írható le. Skálázó határeset alatt azt értjük, hogy a rácsállandóval tartunk 0-ba és a (3.2)-ban szereplő ξ paraméterrel tartunk végtelenbe, mindemellett a többi paramétert megfelelően állítjuk be ahhoz, hogy a kívánt tömeget kapjuk a térelméletben. Ha elég közel vagyunk a skálázó limeszhez, akkor léteznek olyan irányok, ahol már az E_7 spektrum megfigyelhető és leírható az E_7 modellel. Az E_7 vonal ilyen irányokat ír le, de E_7 modell csak a trikritikus ponthoz nagyon közel lesz jó leírás.

A trikritikus pontból a 3. fejezetben bemutatott (3.6) egyenlet alapján tudunk kimozdulni és az E_7 vonal az ebben a fejezetben bemutatott integrálható irányok közül a (3.7) perturbált Hamilton operátorral kapott merőleges irány, ami a Blume–Capel modell paraméterterében a 6.1. ábra alapján azt jelenti, hogy a merőleges-fel irány a rendezetlen fázis, míg a merőleges-le irány a rendezett fázis.



6.1. ábra. A Blume–Capel modell trikritikus pontjából induló E_7 vonal paramágneses és ferromágneses fázisa

E_7 pontokat a (3.6) és (3.7) alapján rögzített $\gamma = 0$ mellett $\tan \theta = 2,224$ ismeretében a következőképpen tudunk generálni:

$$\begin{aligned}\alpha &= \alpha_{tp} \pm \lambda \sin \theta \\ \beta &= \beta_{tp} \pm \lambda \cos \theta,\end{aligned}\tag{6.2}$$

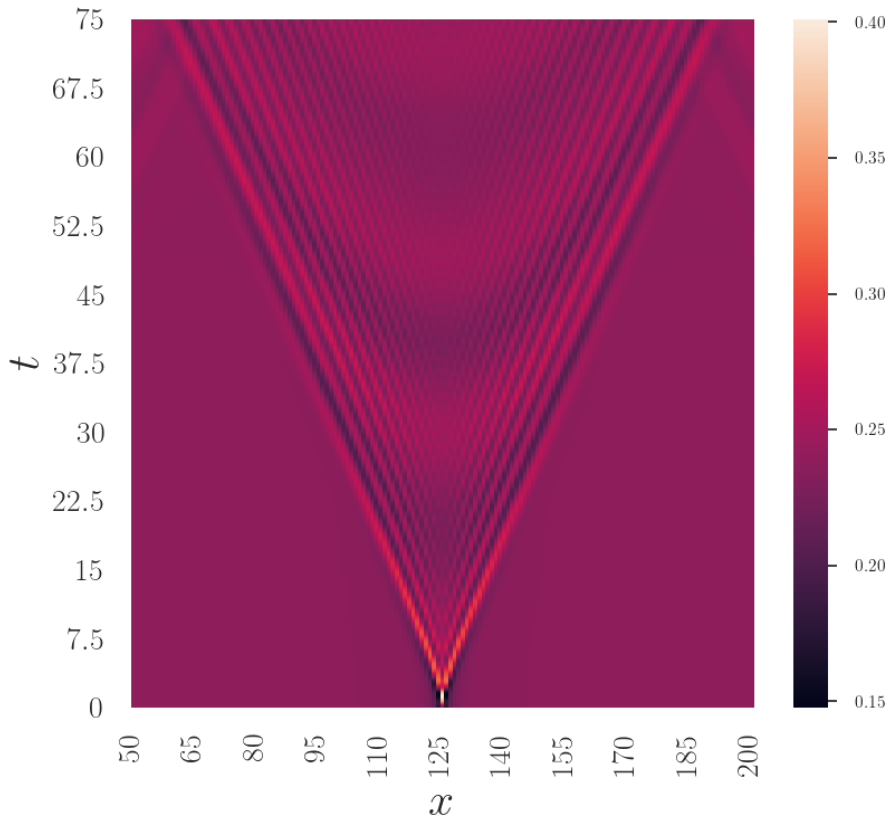
ahol α_{tp} és β_{tp} a (3.4)-ban megadott trikritikus pont paraméterei és az egyenletekben az összeadás esetén kapunk rendezetlen fázisú E_7 pontot és kivonás esetén rendezett fázisú E_7 pontot (6.1. ábra).

6.3. E_7 modell dinamikai kétpont-függvényei és dinamikai struktúra faktorai

A 5.3. alfejezetben az E_8 modell dinamikai struktúra faktorait vizsgáltuk, most ugyanezt a vizsgálatot fogjuk elvégezni az E_7 modellre is.

Az E_7 modellt 7 kvázirészecske alkotja, azonban a modell Z_2 szimmetriája miatt attól függően, hogy a modell melyik fázisában melyik operátor struktúra faktorait nézzük, a spektrumban vagy csak a páratlan vagy csak a páros részecske-konfigurációk fognak megjelenni. A továbbiakban két operátor dinamikai struktúra faktorát fogjuk megnézni a paramágneses fázisban, a Θ energia-impulzus tenzor és az S^x longitudinális mágnesezettség struktúra faktorát. Mindezt az E_8 modellben vizsgált korrelátorokhoz hasonlóan tesszük, vagyis most is mindkét esetben $C^{ii}(x, t)$ alakú korrelátorokat fogunk nézni. Ahogy azt a 6.1. táblázatban összefoglaltuk, várakozásaink szerint a Θ energia-impulzus tenzor egy páros operátor, így a paramágneses fázisban a struktúra faktorát a páros részecske-konfigurációk fogják meghatározni. Ezzel ellentétben az S^x longitudinális mágnesezettség egy páratlan operátor, így a paramágneses fázisban páratlan részecske-konfigurációkat fog csatolódn.

Mindkét operátor esetén egy $L = 250$ hosszú spinláncot vizsgáltunk. Az energia-impulzus tenzor vagy perturbáció esetén $N = 15000$, a mágnesezettség esetén pedig $N = 10000$ időlépést


 6.2. ábra. A $C^{\Theta\Theta}(x, t)$ korrelációkhoz tartozó sűrűség diagram

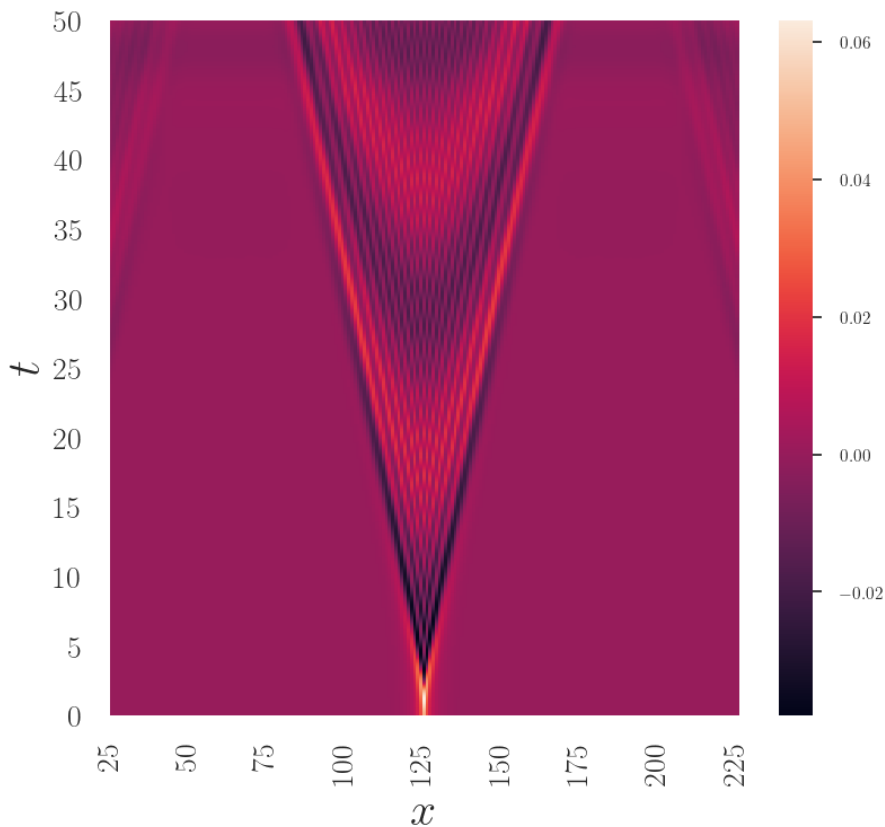
hajtottunk végre az iTEBD imaginárius időfejlesztésénél is és a TEBD valós időfejlesztésénél is. A bond dimenziót továbbra $\chi_{max} = 100$ -nak választottuk meg. A perturbációnál $l_{max} = 75$ spin volt a lánc közepétől legmesszebb, amin hattatuk az operátort, majd kiszámoltuk a korrelációt. A mágnesezettség esetén viszont $l_{max} = 100$ volt.

A modell paramétereit pedig (6.2) szerint állítottuk be. Mindkét esetben a csatolásnak a $\lambda = 0,01$ értéket választottuk, ugyanis korábbi munkáim során, amikor E_7 pontból E_7 pontba történő kvencs utáni dinamikát vizsgáltam [38], akkor ennél a csatolásnál a mágnesezettség és a perturbáció operátorok várható értékére kapott skálázó limeszbeli görbék nagyon jó egyezést mutattak a térelméleti jóslattal. Tehát a $\lambda = 0,01$ választás elegendően közeli E_7 pontot eredményez a trikritikus ponthoz ahhoz, hogy a Blume–Capel modell skálázó limeszében legyünk. Egyszóval a $\lambda = 0,01$ választással biztosak lehetünk benne, hogy az E_7 modell dinamikai struktúra faktorait vizsgáljuk.

Az 4.2. alfejezetben bemutatott kétpont-függvényt számoló algoritmust használva ismételtén, kiszámoltam a korrelációkat. Majd kihasználva a korrelációs függvények térszimmetriáját, meghatároztam az $x < L/2$ letett operátorra vonatkozó korrelációkat is, ezzel megkapva a korrelációk tér- és időfüggő sűrűség diagramjait. A Θ -hoz tartozó diagram a 6.2. ábrán, az S^x -hez tartozó diagram pedig a 6.3. ábrán látható.

Érdekes megfigyelni, hogy a két fénykúp nem ugyanazzal a sebességgel tágul. Az E_8 esetén azt mondtuk, hogy a részecskék Lieb–Robinson sebességhatárát a leggyorsabb részecske sebessége adja. Ez az állítás itt is igaz, csak hogy most a nem ugyanazok a részecskék alkotják a fénykúpot. A páratlanoknál, azaz az S^x mágnesezettség esetén a leggyorsabb részecske az m_1 lesz, de a párosaknál, a Θ energia-impulzus tenzor esetén az m_2 .

A Lieb–Robinson sebességet naivan meg lehetne határozni, ha egyenest illeszténk a fénykúp egyik oldalára. Ez egyenértékű azzal, mintha különböző időpontokban megnéznénk a $C^{\Theta\Theta}(x, t)$ vagy $C^{xx}(x, t)$ korrelátorok helyfüggéseit és leolvasnánk, hogy az adott t időpontban


 6.3. ábra. A $C^{xx}(x, t)$ korrelációkhoz tartozó sűrűség diagram

milyen széles a görbe, ugyanis a nemnulla részének a szélessége adja a fénykúp szélességét az adott időpontban. Azonban ennek a sebességhatárnak a pontos meghatározásához a diszperziós relációt kellene ismerni.

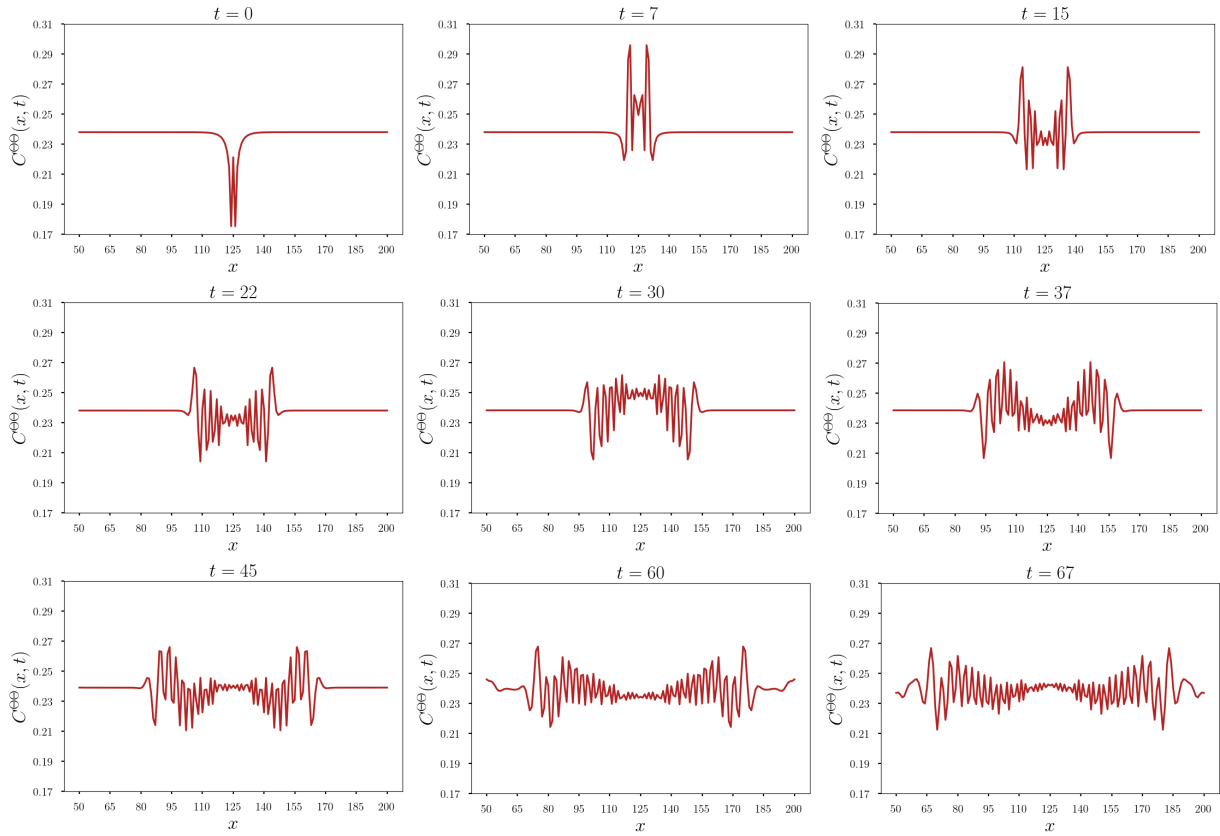
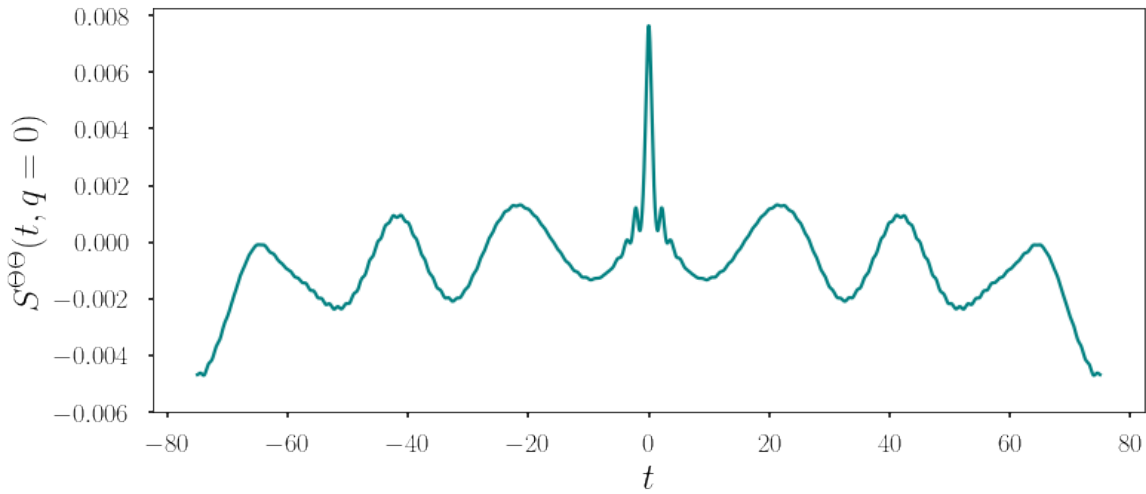
A korrelátorok helyfüggése különböző időpontokban a 6.4. és a 6.6. ábrákon látható. A perturbáció korrelátorának helyfüggését a $t \in [0, 67]$ időintervallumban felvett 9 idő esetén ábrázoltuk, míg a mágneszettség korrelátorának helyfüggését a $t \in [0, 40]$ intervallumban.

Az E_8 modellhez hasonlóan most is csak a $q = 0$ esetet vizsgáljuk mindkét operátor dinamikai struktúra faktoránál. Tehát az x -re való összegzés most is csak egy átlagolás lesz, amiből megkapjuk az $S^{\Theta\Theta}(t, q = 0)$ és $S^{xx}(t, q = 0)$ függvényeket, melyek a 6.5. és 6.7. ábrákon láthatók.

Megfigyelhető, hogy a 6.7. ábra hasonlít az E_8 modellnél látott 5.10. ábrára, csak az E_8 -nál sokkal nagyobb időablakkal dolgoztunk. Várhatóan ha itt is hosszabb időfejlődést csinálnánk, akkor a 6.7. ábra is ehhez hasonló lenne.

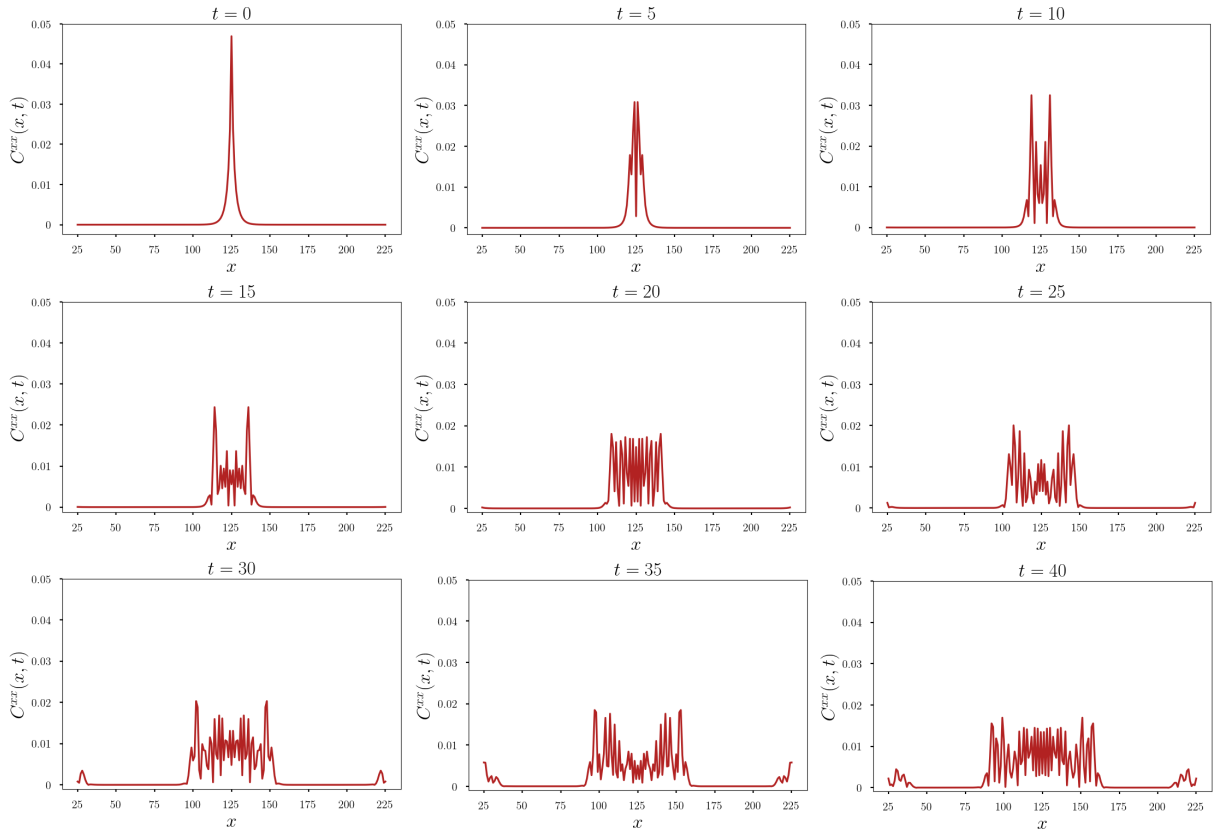
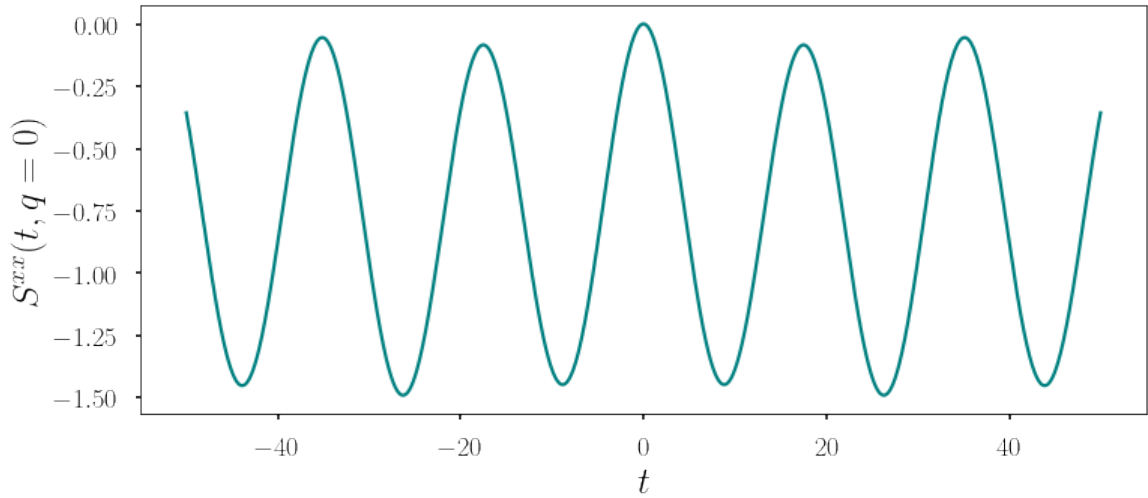
Végül elvégezve a Fourier transzformációt, megkapjuk az $S^{\Theta\Theta}(\omega, q = 0)$ és az $S^{xx}(\omega, q = 0)$ dinamikai struktúra faktorokat. Vizsgáljuk meg először a perturbációhoz tartozó struktúra faktort. Ahogy azt fentebb említettük, a perturbáció egy páros operátor, így a paramágneses fázisban páros részecskéket fog kelteni. A kapott Fourier-spektrum a 6.8. ábrán látható. Az ω frekvenciát átskáláztam úgy, hogy a legnagyobb csúcs kerüljön 1-be, nevezetesen a legkisebb tömegű páros 1-részecske állapot, az m_2 . Összesen három csúcsot figyelhetünk meg a spektrumban, ezek m_2 -vel vett arányából rájöhettünk, hogy az m_4 és m_5 páros 1-részecskékhez tartozik a másik két csúcs. A csúcsok helyeinek arányait a 6.2. táblázatban hasonlítom össze az elméletből számolt értékekkel. Az E_8 modellhez hasonlóan itt is jó egyezést találtunk a szimulációs eredmények és az elméleti jóslat között.

Vegyük észre továbbá, hogy elindul egy kontinuum, erre ülnek rá az m_4 és m_5 részecskék. A térelméleti jóslat szerint egy $2m_1$ kontinuumot kellene látnunk. Ennek elméletileg $\omega/m_2 =$


 6.4. ábra. A $C^{\Theta\Theta}(x, t)$ korrelátor helyfüggése különböző időpontokban

 6.5. ábra. A $C^{\Theta\Theta}(t, q = 0)$ függvény

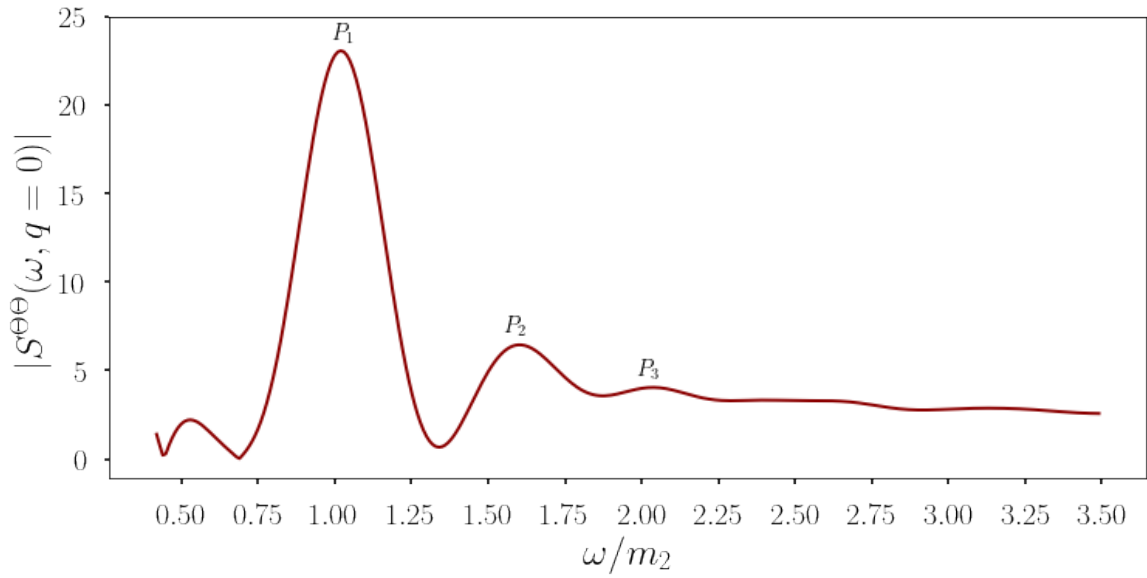
$2m_1/m_2 = 1,556$ -ból kellene indulnia, de itt ekkora felbontásnál nem pont ezt látjuk, viszont ha kirajzoljuk a görbét, akkor látszik, hogy a részecskék egy kontinuumon ülnek, ami ha 1.556 -ból indul, az nincs ellentmondásban az itt látottakkal. (6.9. ábra).

A $S^{\Theta\Theta}(\omega, q = 0)$ struktúra faktorral ellenben, az $S^{xx}(\omega, q = 0)$ Fourier-spektrumában a páratlan részecskék megjelenését várjuk, ahogy azt a 6.10. ábrán is láthatjuk. Bár a kis időablak használata miatt egyelőre csak kettő páratlan részecskét látunk, de már ez is összhangban van az elméleti jóslattal.

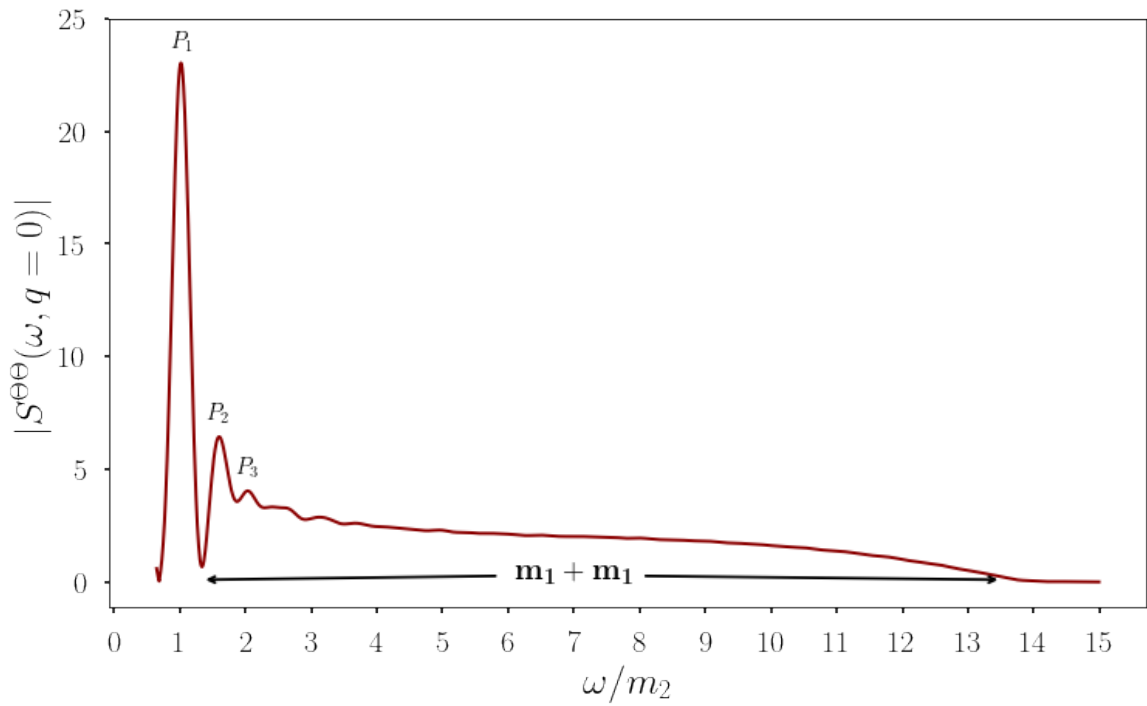

 6.6. ábra. A $C^{xx}(x, t)$ korrelátor helyfüggése különböző időpontokban

 6.7. ábra. A $C^{xx}(t, q = 0)$ függvény

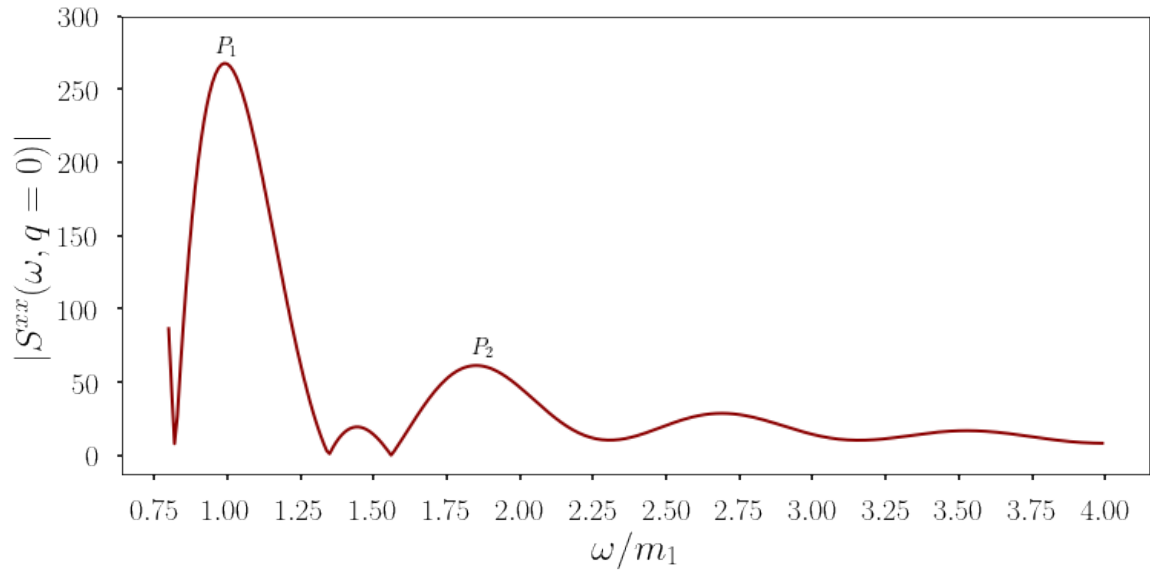
A 6.10. ábrán a frekvenciát úgy skáláztuk át, hogy az m_1 tömegű részecske kerüljön az 1-be. A csúcsok helyeinek arányát pedig a 6.3. táblázatban tüntettük fel az elméleti m_1 -gyel vett tömegarányokkal együtt.

Összefoglalva tehát, ebben a fejezetben először megmutattuk, hogy hogyan kell megválasztani a Blume–Capel modell paramétereit, hogy annak skálázó limeszét, az E_7 modellt kapjuk, illetve beszéltünk az E_7 Z_2 szimmetriájáról. Majd megvizsgáltuk a perturbációhoz és a longitudinális mágnesezettséghez tartozó dinamikai struktúra faktorokat, különösen figyelve az elméleti jóslatra. Így sikerlt az E_7 modell 7 kvázirészecskéje közül megtalálni az első ötöt, ezzel igazolva, hogy bár ezek még nem annyira jó felbontású Fourier-spektrumok, de látszik, hogy


 6.8. ábra. Az $S^{\Theta\Theta}(\omega, q = 0)$ dinamikai struktúra faktor abszolút értéke

$S^{\Theta\Theta}$ - csúcsok helyeinek aránya			
csúcsok	részecskék	szimuláció	elmélet
P_1	m_2	1	1
P_2	m_4	1,559	1,532
P_3	m_5	2	1,97

 6.2. táblázat. A $S^{\Theta\Theta}(\omega, q = 0)$ dinamikai struktúra faktorhoz tartozó Fourier-spektrumban látott csúcsok helyeinek aránya és az m_2 -vel vett elméleti tömegarányok

 6.9. ábra. Az $S^{\Theta\Theta}(\omega, q = 0)$ dinamikai struktúra faktor abszolút értékénél látott $2m_1$ kontinuum


 6.10. ábra. Az $S^{xx}(\omega, q = 0)$ dinamikai struktúra faktor abszolút értéke

S^{xx} - csúcsok helyeinek aránya			
csúcsok	részecskék	szimuláció	elmélet
P_1	m_1	1	1
P_2	m_3	1.869	1.879

 6.3. táblázat. A $S^{xx}(\omega, q = 0)$ dinamikai struktúra faktorhoz tartozó Fourier-spektrumban látott csúcsok helyeinek aránya és az m_1 -gyel vett elméleti tömegarányok

működik a módszer és visszkapjuk a térelméleti jóslatot. A jövőben pedig végzünk további pontosabb szimulációkat is ezek vizsgálatára.

7. fejezet

Összefoglalás és kitekintés

A TDK munka célja a E_7 modell dinamikai struktúra faktoraira vonatkozó elméleti jóslatok [29] igazolása. Ennek érdekében a Blume–Capel modellt vizsgáltam mátrix szorzat állapotokat használó közelítésekkel, a skálázó határesetben.

Először egzakt diagonalizációval vizsgáltam a véges Blume–Capel láncot és a [24]-ban szereplő energiaréseket öt tizedesjegy pontossággal reprodukáltam. Majd a véges láncokra egzakt diagonalizációval, illetve TEBD-vel és a végtelen láncra iTEBD-vel kiszámolt alapállapot energiásűrűségek összehasonlításából meggyőződtem az iTEBD és TEBD helyes működéséről. Továbbá azt tapasztaltam, hogy a TEBD algoritmussal nem lehet olyan pontosan meghatározni az alapállapotot, de észrevettem, hogy az iTEBD imaginárius időfejlesztésével megkeresett alapállathoz tartozó tenzorokat megfelelő módon beillesztve a TEBD algoritmusba, majd azon alapállapot energiásűrűséget számolva az eredmény hat tizedesjegyre megegyezik az egzakt eredménnyel.

Ezt követően egy általános elméleti összefoglalót adtam a dinamikai kétpont-függvényekről és a dinamikai struktúra faktorokról. Majd ismertettem a kétpont-függvényt számoló algoritmusom.

A dolgozatban a dinamikai struktúra faktorok vizsgálata volt a cél az E_8 és E_7 modellekben. Az E_8 modellben már végeztek hasonló vizsgálatokat [31, 39], az E_7 -ben viszont az irodalomban nem találhatók ilyen eredmények.

Az E_8 modellt vizsgáltam először, de még mielőtt rátértem a dinamikai struktúra faktorokra, először végeztem egy kis ellenőrzést, hogy megbizonyosodjak róla, hogy a kétpont-függvényt számoló algoritmus jól működik-e. Ehhez az transzverz Ising paramágneses fázisában kiszámoltam több pontban is a korrelációs hosszt, majd összevettem az elméleti értékekkel. Ezt követően kimértem a korrelációs hosszhoz tartozó ν kritikus exponenst, ami szintén jó egyezést mutatott az elmélettel. Végül ellenőriztem, hogy egy kétpont-függvény értéke nagy távolságok esetén két egypont-függvény szorzatához tart. Ez tehát meggyőzött arról, hogy az algoritmus jól működik, a további vizsgálatokat ezzel végeztem.

Az E_8 modellben olyan kétpont-függvényeket számoltam, ahol a két operátor megegyezik. Összesen három ilyen struktúra faktort néztem, nevezetesen a σ^x , σ^y és σ^z operátorokhoz tartozó struktúra faktorokat. A kapott eredményeket összevettem a térelméleti jóslattal és mindhárom esetben egyezést találtam a csúcsok helyeinek arányát, illetve a csúcsok amplitúdóinak arányát tekintve is.

Végül az E_7 modellt is vizsgáltam. Fontos kiemelni, hogy ennek Z_2 szimmetriája van, így vannak páros és páratlan részecskék is a modellben. Tehát attól függően, hogy milyen fázisban melyik operátor struktúra faktort nézzük vagy a páros vagy a páratlan részecske-konfigurációk fognak megjelenni a Fourier spektrumban. Itt is olyan korrelátorokat vizsgáltam, melyekben a két operátor megegyezik. A Θ energia-impulzus tenzor egy páros operátor, így a paramágneses fázisban páros részecske konfigurációkhoz csatolódik. Az erre végzett szimulációmmal sikerült az m_2 , m_4 és m_5 részecskéket megtalálni, valamint a spektrumban megjelent a $2m_1$ kontinuum

is. Az S^x longitudinális mágnesezettség viszont egy páratlan operátor, vagyis a paramágneses fázisban páratlan részecskéket kelt. Ezek közül a kis felbontás miatt egyelőre csak az m_1 -et és m_3 -at találtam meg. A jövőben azonban további pontosabb szimulációkat végzünk majd az E_7 modell dinamikai struktúra faktorainak vizsgálatára, más operátorok korrelátorait tekintve is, illetve a ferromágneses fázisban is vizsgálódunk majd.

Továbbá a jövőben szeretnénk meghatározni az E_7 modell ún. *twist* operátor form faktorait, hogy a [37]-ben található összefonódás jóslatot az E_7 modellben is meg tudjuk konstruálni

Irodalom

- [1] P. Christe és G. Mussardo. “Integrable systems away from critically: The Toda field theory and S-matrix of the tricritical Ising model”. *Nuclear Physics B* 330.2 (1990), 465–487. old. ISSN: 0550-3213. DOI: [https://doi.org/10.1016/0550-3213\(90\)90119-X](https://doi.org/10.1016/0550-3213(90)90119-X). URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/055032139090119X>.
- [2] V.A. Fateev és A.B. Zamolodchikov. *Conformal Field Theory and Purely Elastic S-matrices*. 1990.
- [3] M. Blume. “Theory of the First-Order Magnetic Phase Change in UO_2 ”. *Phys. Rev.* 141 (2 1966. jan.), 517–524. old. DOI: 10.1103/PhysRev.141.517. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.141.517>.
- [4] H. W. Capel. “On the possibility of first-order phase transitions in Ising systems of triplet ions with zero-field splitting”. *Physica* 32.5 (1966. máj.), 966–988. old. DOI: 10.1016/0031-8914(66)90027-9.
- [5] R. Coldea és tsai. “Quantum Criticality in an Ising Chain: Experimental Evidence for Emergent $E_{\text{sub}8/\text{sub}}$ Symmetry”. *Science* 327.5962 (2010. jan.), 177–180. old. DOI: 10.1126/science.1180085. URL: <https://doi.org/10.1126/science.1180085>.
- [6] Haiyuan Zou és tsai. “ E_g Spectra of Quasi-One-Dimensional Antiferromagnet $\text{BaCo}_2\text{V}_2\text{O}_8$ under Transverse Field”. *Phys. Rev. Lett.* 127 (7 2021. aug.), 77201. old. DOI: 10.1103/PhysRevLett.127.077201. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.127.077201>.
- [7] Axel Cortés Cubero és tsai. “Duality and form factors in the thermally deformed two-dimensional tricritical Ising model”. *SciPost Phys.* 12 (2022), 162. old. DOI: 10.21468/SciPostPhys.12.5.162. URL: <https://scipost.org/10.21468/SciPostPhys.12.5.162>.
- [8] M. Lencsés, G. Mussardo és G. Takács. *Quantum Integrability vs Experiments: Correlation Functions and Dynamical Structure Factors*. 2023. arXiv: 2303.16556 [cond-mat.stat-mech].
- [9] Lorenzo Maffi és tsai. *Quantum simulation of the tricritical Ising model in tunable Josephson junction ladders*. 2023. arXiv: 2310.18300 [cond-mat.mes-hall].
- [10] Guifré Vidal. “Efficient Classical Simulation of Slightly Entangled Quantum Computations”. *Physical Review Letters* 91.14 (2003. okt.). DOI: 10.1103/physrevlett.91.147902. URL: <https://doi.org/10.1103/physrevlett.91.147902>.
- [11] Frank Pollmann. “Efficient Numerical Simulations Using Matrix-Product States”. (2016). URL: https://www.ggi.infn.it/sft/SFT_2016/LectureNotes/Pollmann.pdf.
- [12] L. Tagliacozzo és tsai. “Scaling of entanglement support for matrix product states”. 78.2, 024410 (2008. júl.), 24410. old. DOI: 10.1103/PhysRevB.78.024410. arXiv: 0712.1976 [cond-mat.stat-mech].
- [13] Pasquale Calabrese és John Cardy. “Entanglement entropy and quantum field theory”. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment* 2004.6 (2004. jún.), 6002. old. DOI: 10.1088/1742-5468/2004/06/P06002. arXiv: hep-th/0405152 [hep-th].

- [14] Pasquale Calabrese és Alexandre Lefevre. “Entanglement spectrum in one-dimensional systems”. 78.3, 032329 (2008. szept.), 32329. old. DOI: 10.1103/PhysRevA.78.032329. arXiv: 0806.3059 [cond-mat.str-el].
- [15] Frank Pollmann és tsai. “Theory of Finite-Entanglement Scaling at One-Dimensional Quantum Critical Points”. 102.25, 255701 (2009. jún.), 255701. old. DOI: 10.1103/PhysRevLett.102.255701. arXiv: 0812.2903 [cond-mat.str-el].
- [16] Stellan Östlund és Stefan Rommer. “Thermodynamic Limit of Density Matrix Renormalization”. 75.19 (1995. nov.), 3537–3540. old. DOI: 10.1103/PhysRevLett.75.3537. arXiv: cond-mat/9503107 [cond-mat].
- [17] Stefan Rommer és Stellan Östlund. “Class of ansatz wave functions for one-dimensional spin systems and their relation to the density matrix renormalization group”. 55.4 (1997. jan.), 2164–2181. old. DOI: 10.1103/PhysRevB.55.2164. arXiv: cond-mat/9606213 [cond-mat].
- [18] D. Perez-Garcia és tsai. “Matrix Product State Representations”. *arXiv e-prints*, quant-ph/0608197 (2006. aug.), quant-ph/0608197. arXiv: quant-ph/0608197 [quant-ph].
- [19] R. Orús és G. Vidal. “Infinite time-evolving block decimation algorithm beyond unitary evolution”. 78.15, 155117 (2008. okt.), 155117. old. DOI: 10.1103/PhysRevB.78.155117. arXiv: 0711.3960 [cond-mat.stat-mech].
- [20] G. Vidal. “Classical Simulation of Infinite-Size Quantum Lattice Systems in One Spatial Dimension”. 98.7, 070201 (2007. febr.), 70201. old. DOI: 10.1103/PhysRevLett.98.070201. arXiv: cond-mat/0605597 [cond-mat.str-el].
- [21] *The time-evolution block-decimation (TEBD)*. URL: <https://tensornetwork.org/mps/algorithms/timeevo/tebd.html>.
- [22] P. Christe és G. Mussardo. “Integrable systems away from critically: The Toda field theory and S-matrix of the tricritical Ising model”. *Nuclear Physics B* 330.2 (1990), 465–487. old. ISSN: 0550-3213. DOI: [https://doi.org/10.1016/0550-3213\(90\)90119-X](https://doi.org/10.1016/0550-3213(90)90119-X). URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/055032139090119X>.
- [23] V. A. Fateev és A. B. Zamolodchikov. “Conformal Field Theory and Purely Elastic S-Matrices”. *International Journal of Modern Physics A* 5.6 (1990. jan.), 1025–1048. old. DOI: 10.1142/S0217751X90000477.
- [24] G. von Gehlen. “Off-criticality behaviour of the Blume-Capel quantum chain as a check of Zamolodchikov’s conjecture”. *Nuclear Physics B* 330.2 (1990), 741–756. old. ISSN: 0550-3213. DOI: [https://doi.org/10.1016/0550-3213\(90\)90130-6](https://doi.org/10.1016/0550-3213(90)90130-6). URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0550321390901306>.
- [25] Yuval Gefen, Yoseph Imry és David Mukamel. “Phase diagram of spin-1 quantum Ising models: Applications to systems of weakly coupled classical Ising chains”. *Phys. Rev. B* 23 (11 1981. jún.), 6099–6105. old. DOI: 10.1103/PhysRevB.23.6099. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.23.6099>.
- [26] F. C. Alcaraz és tsai. “Hamiltonian studies of the Blume-Emery-Griffiths model”. *Phys. Rev. B* 32 (11 1985. dec.), 7469–7475. old. DOI: 10.1103/PhysRevB.32.7469. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.32.7469>.
- [27] D B Balbao és J R Drugowich de Felicio. “Operator content of the Blume-Capel quantum chain”. *Journal of Physics A: Mathematical and General* 20.4 (1987. márc.), L207. old. DOI: 10.1088/0305-4470/20/4/005. URL: <https://dx.doi.org/10.1088/03054470/20/4/005>.
- [28] A. B. Zamolodchikov. “Integrable field theory from conformal field theory”. *Adv. Stud. Pure Math.* 19 (1989). Szerk. M. Jimbo, T. Miwa és A. Tsuchiya, 641–674. old.

- [29] Axel Cortes Cubero és tsai. “Duality and form factors in the thermally deformed two-dimensional tricritical Ising model”. *SciPost Physics* 12.5 (2022. máj.). DOI: 10.21468/scipostphys.12.5.162. URL: <https://doi.org/10.21468%2Fscipostphys.12.5.162>.
- [30] Subir Sachdev. *Quantum Phase Transitions*. 2. kiad. Cambridge: United States of America by Cambridge University Press, 2011.
- [31] Xiao Wang és tsai. “Cascade of singularities in the spin dynamics of a perturbed quantum critical Ising chain”. *Physical Review B* 103.23 (2021. jún.). DOI: 10.1103/physrevb.103.235117. URL: <https://doi.org/10.1103%2Fphysrevb.103.235117>.
- [32] Giuseppe Mussardo. *Statistical Field Theory*. 1. kiad. New York: Oxford University Press Inc., 2010.
- [33] A. B. Zamolodchikov. “Integrals of Motion and S Matrix of the (Scaled) $T=T(c)$ Ising Model with Magnetic Field”. *Int. J. Mod. Phys. A* 4 (1989), 4235. old. DOI: 10.1142/S0217751X8900176X.
- [34] G. Delfino és P. Simonetti. “Correlation functions in the two-dimensional Ising model in a magnetic field at $T = T_c$ ”. *Physics Letters B* 383.4 (1996), 450–456. old. ISSN: 0370-2693. DOI: [https://doi.org/10.1016/0370-2693\(96\)00783-6](https://doi.org/10.1016/0370-2693(96)00783-6). URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0370269396007836>.
- [35] Csépanyi István. *Finite temperature dynamical correlation functions in the Ising Quantum Field Theory, TDK paper*. 2023.
- [36] G. Delfino és P. Simonetti. “Correlation functions in the two-dimensional Ising model in a magnetic field at $T = T_c$ ”. *Physics Letters B* 383.4 (1996. szept.), 450–456. old. DOI: 10.1016/0370-2693(96)00783-6. URL: <https://doi.org/10.1016%2F0370-2693%2896%2900783-6>.
- [37] Olalla A. Castro-Alvaredo és tsai. “Entanglement Oscillations near a Quantum Critical Point”. *Phys. Rev. Lett.* 124 (23 2020. jún.), 230601. old. DOI: 10.1103/PhysRevLett.124.230601. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.124.230601>.
- [38] Király Csilla. *Kvencs dinamika a Blume–Capel modellben, TDK dolgozat*. 2022.
- [39] Haiyuan Zou és tsai. “ E_8 Spectra of Quasi-one dimensional Antiferromagnet $BaCo_2V_2O_8$ under Transverse Field”. *Physical Review Letters* 127.7 (2021. aug.). DOI: 10.1103/physrevlett.127.077201. URL: <https://doi.org/10.1103%2Fphysrevlett.127.077201>.