

Rendezetlen és korrelált
kvantumrendszerek elméleti vizsgálata

PHD TÉZISFÜZET

WERNER MIKLÓS ANTAL

TÉMAVEZETŐ: DR. ZARÁND GERGELY

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem

2019

1. A kutatások előzménye

A sok részecskét tartalmazó kvantumrendszerek megértése és leírása közel egy évszázada állítja komoly kihívás elé a kutatókat. Az elméleti kutatókat foglalkoztató kérdéseket gyakran egy-egy új kísérleti módszer lehetőségei motiválták, ezért az elmúlt évszázad során számtalan kvantumrendszer volt már vizsgálat tárgya. Az ultrahideg atomi kísérleti technika elmúlt évtizedekben látott fejlődése lehetővé tette zárt kvantumrendszerek egyensúlyi állapotának és dinamikájának igen precíz vizsgálatát [Bloch et al., 2012]. Részben ezen kísérleteknek köszönhetően nagy érdeklődés övezi a megfelelő kvantumrendszerek alapállapotának és dinamikájának pontos elméleti leírását. A kísérleti technikák fejlődésén túl a vizsgálható kérdések köre lényegesen bővült a digitális számítógépek robbanásszerű fejlődésének köszönhetően is. Számítógépek segítségével lehetőség nyílik igen komplex kvantumrendszerek részletekbe menő szimulációjára. Bár a klasszikus számítógépek lehetőségei igen korlátozottak, ha kvantumrendszerek leírására használjuk őket [Feynman, 1982], az elmúlt évtizedekben klasszikus algoritmusok sorát dolgozták ki, melyek speciális esetekben igen hatékonyan képesek kvantumrendszereket szimulálni. Doktori disszertációmban ilyen algoritmusok segítségével vizsgálok különféle kvantumrendszerek dinamikáját rendezetlen ill. alacsony dimenziós kölcsönható rendszerekre koncentrálva.

Az ultrahideg atomi rendszerekben alkalmazott kísérleti technikák lehetővé teszik olyan egyszerű kvantummodellek kvantum-szimulációját, melyek fundamentális szerepet töltenek be az elméleti szilárdtestfizikában. Így például optikai rácsok segítségével a szilárd testek periodikus szerkezetét [Bloch, 2005], szemcsés lézerfény segítségével pedig a rendszerek rendezetlenségét lehet modellezni [Billy et al., 2008]. Ezen két módszer – ötvözve a kölcsönhatók hangolhatóságával [Chin et al., 2010] – tette lehetővé az Anderson-féle lokalizáció kísérleti demonstrációját egy és három dimenzióban [Billy et al., 2008, Jendrzejewski et al., 2012]. Ezek a kísérletek a lokalizált állapotok jelenlétét mélyen a lokalizált fázisban mutatták ki, a lokalizált és kiterjedt fázisok határán megjelenő kritikus állapotok feltérképezése azonban jóval nehezebb feladat ennél. Nem véletlen ezért, hogy bár a kritikus állapot multifraktál jellemzői jól ismertek numerikus szimulációk alapján, az elméleti jóslatokkal egyező kísérleti eredmények mai napig nem állnak rendelkezésre. Disszertációm 2. fejezetében rendezetlen ultrahideg bozonok rendszerét, ezen belül a kritikus állapot precíz gerjesztését és multifraktál tulajdonságainak kísérleti meghatározhatóságát vizsgálok.

Disszertációm második felében egydimenziós kölcsönható rendszerek numerikus szimulációjával foglalkozom. Ultrahideg atomi rendszerekben anizotrop csapdázás segítségével elérhető, hogy az atomok mozgása egy dimenzióban legyen csak lehetséges [Paredes et al., 2004]. Az ilyen zárt egydimenziós kvantumrendszerek igen népszerűek az elméleti kutatók körében, mivel leírásukra sok olyan elméleti módszer áll rendelkezésre (Bethe ansatz, bozonizáció, konform térelmélet), melyek alkalmazhatósága éppen a rendszer egydimenziós topológiája miatt lehetséges. Az atomok közötti kölcsönhatás hatása egy dimenzióban ráadásul lényegesen erősebb, így a kialakuló kvantumállapotok erős, egzotikus korrelációkat tartalmaznak, melyek feltérképezése érdekes feladat. Az egydimenziós rendszerek alacsony energiás kvantumállapotai hatékonyan leírhatók ún. mátrix szorzat állapotok segítségével, így olyan hatékony numerikus algoritmusok állnak rendelkezésünkre, mint például a sűrűségmátrix renormálási csoport (DMRG) [Schollwöck, 2011] és az időfejlesztő blokkdecimálás (TEBD) [Vidal, 2004]. A fent felsorolt elméleti és numerikus eszköztárnak köszönhetően egydimenziós rendszerekben közvetlenül is vizsgálhatók olyan alapvető állítások, melyekre a magasabb dimenziós statisztikus- vagy részecskefizikai modelljeink felépítésénél csupán intuitív módon támaszkodhatunk.

2. Célkitűzések

Első célkitűzésem az Anderson lokalizáció kritikus állapotának ultrahideg atomi vizsgálatához kapcsolódott, mely állapot gerjesztésével, és az atomok nagy pontosságú lefényképezésével lehetővé válik a kritikus állapot univerzális korrelációinak és multifraktalitásának kísérleti meghatározása. A kritikus pont ezen univerzális jellemzői numerikusan nagy pontossággal ismertek [Rodriguez et al., 2009], azonban a korábbi kísérletek, melyeket szennyezett félvezetőkben [Richardella et al., 2010], vagy rendezetlen hullámtérben klasszikus ultrahang segítségével hajtottak végre [Faez et al., 2009] az elméletileg várt adatoktól durván eltérő, azokkal csak kvalitatív egyező eredményeket szolgáltatottak. A célunk egy olyan kísérleti protokoll megalkotása és tanulmányozása volt, melynek segítségével az univerzális multifraktál spektrum meghatározható, és a kísérlet a ma rendelkezésre álló kísérleti technikákkal meg is valósítható. Előzetes várakozásaink alapján először az ún. repülési idő (time of flight) képekben kerestünk multifraktál jellemzőket, ez azonban nem vezetett pozitív eredményre. Célunkat módosítva ezért valós térben vizsgáltuk meg a háromdimenziós atomfelhő kétdimenziós képét. A

javasolt kétkomponensű Bose-Einstein kondenzátumon végrehajtandó kísérletet a kétkomponensű, rendezetlen Gross-Pitaevskii egyenlet precíz numerikus megoldásával, az atomok közötti kölcsönhatásokat átlagtér szinten figyelembe véve analizáltuk.

Disszertációm többi célkitűzése egydimenziós korrelált rendszerek vizsgálatához kapcsolódott. Elsőként egy olyan mátrix szorzat állapotokon (MPS) alapuló szimulációs programcsomag létrehozását tűztük ki célul, melyben a vizsgált rendszer abeli és nemabeli szimmetriái lehetőleg egyszerűen és flexibilis módon kihasználhatók. Ezen belül célunk volt, hogy akár alapállapot (DMRG-) számításokat, akár dinamikai (TEBD-) szimulációkat végre lehessen hajtani. Bár a legtöbb MPS kód lehetőséget biztosít abeli kvantumszámok figyelembe vételére, a nemabeli szimmetriák kihasználása lényegesen nehezebb, miközben nagy szimmetriájú modellek esetén nagyságrendekkel nagyobb futási sebesség ill. pontosság érhető el egy nemabeli szimmetriákat kihasználó algoritmussal.

Dolgozatom harmadik célkitűzése egydimenziós spinláncok kvantumkvencs utáni dinamikájához és relaxációjához kapcsolódott. Szimmetriákat kihasználó TEBD algoritmus segítségével vizsgáltuk integrálható spinláncok termalizációjának kérdését. Ezt a területet igen nagy érdeklődés övezi, hiszen integrálható modellekben a statisztikus fizikai egyensúlyi állapot az elméleti várakozások szerint lényegesen eltér a szokásos termodinamikai egyensúlyi állapottól [Rigol et al., 2007], ezt azonban kölcsönható rendszeren végrehajtott mikroszkopikus szimulációval korábban nem sikerült igazolni. Munkánknak az adott külön aktualitást, hogy két versengő elméleti megközelítés: a lokális töltésekre alapozott általánosított Gibbs-sokaság [Rigol et al., 2007] és az ún. kvencs hatás formalizmus [Caux et al., 2013] egymástól eltérő stacionárius állapotot jósoltak, így ezt a kérdést tervezük mikroszkopikus szimulációkkal eldönteni.

Végül, negyedik célkitűzésem tömegréssel rendelkező de nem integrálható modellek kvencs utáni dinamikájához kapcsolódott. Ezekben a modellekben a kvencs utáni időfejlődés a mikroszkopikus szimulációknál egyszerűbben, a szemiklasszikus és a hibrid szemi-szemiklasszikus leírásokkal is meghatározható, melyek a posztkvencs állapotot a modell kvázirészecskéinek híg gázaként írják le [Kormos et al., 2016, Moca et al., 2017]. A különbség a két közelítés között, hogy míg a szemiklasszikus elméletben az kvázirészecskék ütközéseit az alacsony energiás határesetnek megfelelően teljes reflexióként közelíti, addig a hibrid elmélet az ütközési eseményeknél a teljes kvantumos S-mátrixot figyelembe veszi. Ezen nem kontrollált közelítések nagyon hatékonyak, azonban korábban nem vetették össze jóslataikat mikroszkopikus szimulációkkal, így ezen közelítések tesz-

telése fontos célunk volt. Ehhez az $S=1$ Heisenberg láncot vizsgáltuk, ahol a kváziré-
szecskek transzportját nemabeli TEBD szimulációkból kinyerhető fél-lánc spineloszlás
segítségével követtük nyomon. Ugyanez az eloszlás a szemiklasszikus és hibrid szemi-
szemiklasszikus elmélet keretein belül is meghatározható, így ezen eloszlás segítségével
a közelítések pontossága jól tesztelhető volt.

3. Új tudományos eredmények

1. Javaslatot tettem egy kétkomponensű rendezetlen ultrahideg Bose-Einstein kon-
denzáttal végrehajtható kísérletre, melyben az Anderson-féle lokalizáció kri-
tikus állapota gerjeszthető és lefényképezhető. Megmutattam, hogy a kritikus
sajátállapotok projekciója a háromdimenziós hullámfüggvényhez hasonlóan kri-
tikus korrelációkat valamint kritikus multifraktál fluktuációkat tartalmaz. Meg-
mutattam, hogy a kölcsönható kondenzátum hullámfüggvényéből kinyerhetőek a
kritikus korrelációk és a multifraktál spektrum. [W1]
2. Az XXZ spinlánc kvantumkvencs utáni dinamikáját végtelen láncú TEBD algo-
ritmus segítségével szimulálva megmutattam, hogy a rövidtávú spin-spin korrelá-
ciók a kvencs hatás formalizmus által jóslott értékekhez relaxálnak, míg a lokális
töltéseken alapuló általánosított Gibbs-sokaság hibás eredményt jósol. [W2, W3]
3. Megalkottam a mátrix szorzat állapotok (MPS) olyan általánosítását, melyben
tetszőleges abeli és nemabeli belső szimmetria kihasználható. A bevezetett nem-
abeli MPS (NA-MPS) állapotokra alapozva kifejlesztettem az időfejlesztő blokk-
decimálás (TEBD) és sűrűségmátrix renormálási csoport (DMRG) algoritmusok
tetszőleges szimmetriát kihasználó hatékony változatát. [még nem publikált]
4. $SU(2)$ szimmetrikus TEBD szimulációk segítségével meghatároztam az $S=1$ spinű
Heisenberg spinlánc időfejlődését az elsőszomszéd bikvadratikus csatolás kikap-
csolása által definiált kvantumkvencs után, majd az időfüggő állapotban meg-
határoztam a fél-lánc teljes spinjének eloszlását. Ugyanezt a spineloszlást meg-
határoztam a szemiklasszikus és hibrid szemi-szemiklasszikus elméletek keretein
belül, és megmutattam, hogy míg a szemiklasszikus leírás elégtelennek bizonyul,
a hibrid elmélet által jóslott spineloszlás nagy pontossággal egyezik a TEBD szi-
mulációk eredményével. [W4]

5. Konstruáltam egy relativisztikus minimálmodellt az $S=1$ spinű Heisenberg spinlánc kvencseinek leírására. Perturbációs számítás segítségével meghatároztam a kvencs utáni állapotban kvázirészecskék sűrűségét és sebességeloszlását, ezekből pedig meghatároztam az állapot energiasűrűségének és az ún. ütközési időnek szorzatát, melyet összevetettem az $SU(2)$ szimmetrikus TEBD szimulációk jóslatával és lassú kvencsek esetén meglepően jó egyezést találtam. [W4]

4. Irodalmi hivatkozások listája

- [Billy et al., 2008] J. Billy et al., *Nature* **453**, 891 (2008).
- [Bloch, 2005] I. Bloch, *Nature Physics* **1**, 1 (2005).
- [Bloch et al., 2012] I. Bloch, J. Dalibard, and S. Nascimbéne, *Nature Physics* **8**, 267 (2012).
- [Caux et al., 2013] J.-S. Caux and F. H. M. Essler, *Phys. Rev. Lett.* **110**, 257203 (2013).
- [Chin et al., 2010] C. Chin, R. Grimm, P. Julienne, and E. Tiesinga, *Rev. Mod. Phys.* **82**, 1225 (2010).
- [Faez et al., 2009] S. Faez et al., *Phys. Rev. Lett.* **103**, 155703 (2009).
- [Feynman, 1982] R. P. Feynman, *Int. J. of Theor. Phys.* **21**, 467 (1982).
- [Jendrzejewski et al., 2012] F. Jendrzejewski et al., *Nature Physics* **8**, 398 (2012).
- [Kormos et al., 2016] M. Kormos and G. Zaránd, *Phys. Rev. E* **93**, 062101 (2016).
- [Moca et al., 2017] C. P. Moca, M. Kormos, and G. Zaránd, *Phys. Rev. Lett.* **119**, 100603 (2017).
- [Paredes et al., 2004] B. Paredes et al., *Nature* **429**, 277 (2004).
- [Richardella et al., 2010] A. Richardella et al., *Science* **327**, 665 (2010).
- [Rigol et al., 2007] M. Rigol, V. Dunjko, V. Yurovsky, and M. Olshanii, *Phys. Rev. Lett.* **98**, 050405 (2007).

[Rodriguez et al., 2009] A. Rodriguez, L. J. Vasquez, and R. A. Römer *Phys. Rev. Lett.* **102**, 106406 (2009).

[Schollwöck, 2011] U. Schollwöck, *Annals of Physics* **326**, 96 (2011).

[Vidal, 2004] G. Vidal, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 040502 (2004).

5. A tézispontokhoz kapcsolódó tudományos közlemények

[W1] Miklós Antal Werner, Eugene Demler, Alain Aspect, and Gergely Zaránd, *Selective state spectroscopy and multifractality in disordered Bose-Einstein condensates: a numerical study*, Scientific Reports **8**, 3641 (2018).

[W2] Balázs Pozsgay, Márton Mestyán, Miklós Antal Werner, Márton Kormos, Gergely Zaránd, and Gábor Takács, *Correlations after Quantum Quenches in the XXZ Spin Chain: Failure of the Generalized Gibbs Ensemble*, Physical Review Letters **113**, 117203 (2014).

[W3] Márton Mestyán, Balázs Pozsgay, Gábor Takács, and Miklós Antal Werner, *Quenching the XXZ spin chain: quench action approach versus generalized Gibbs ensemble*, Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment 2015 (4) P04001.

[W4] Miklós Antal Werner, Cătălin Paşcu Moca, Örs Legeza, Márton Kormos, and Gergely Zaránd, *Spin fluctuations after quantum quenches in the $S = 1$ Haldane chain: numerical validation of the semi-semiclassical theory*, Physical Review B **100**, 035401 (2019).

6. További tudományos közlemények

[W5] Miklós Antal Werner, Arne Brataas, Felix von Oppen, and Gergely Zaránd, *Anderson localization and quantum Hall effect: Numerical observation of two-parameter scaling*, Physical Review B **91**, 125418 (2015).

- [W6] Balázs Pozsgay, Eric Vernier, Miklós Antal Werner, *On Generalized Gibbs Ensembles with an infinite set of conserved charges*, Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment 2017 (9), 093103.
- [W7] Balázs Dóra, Miklós Antal Werner, Cătălin Paşcu Moca, *Information scrambling at an impurity quantum critical point*, Physical Review B **96**, 155116 (2017).
- [W8] Miklós Antal Werner, Arne Brataas, Felix von Oppen, and Gergely Zaránd, *Universal Scaling Theory of the Boundary Geometric Tensor in Disordered Metals*, Physical Review Letters **122**, 106601 (2019).