

# Kvantum fázisátalakulások kölcönható rendszerekben

(Ph.D. tázisfüzet)

**Rapp Ákos**

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem  
Elméleti Fizika Tanszék

Témavezető:

Prof. Zaránd Gergely

2008. június 20.



---

## Háttér

Számos erős korrelációkat mutató anyag és fizikai rendszer anomálishan viselkedik alacsony hőmérsékleten. Sok esetben ezen anomáliák eredete egy zérus hőmérsékleten bekövetkező, másodrendű kvantum fázisátalakulásban keresendő. A modern kondenzált anyagok fizikája egyik legnagyobb kihívást jelentő problémái közé tartozik az ilyen átalakulásból fakadó kvantum kritikus viselkedés teljes megértése.

A kvantum fázisátalakulások hatékonyan vizsgálhatók egy dimenzióban, mivel az alacsony dimenziós modellek erőteljes matematikai módszerekkel analizálhatók. Az egy dimenziós spin-modellek alapállapotú dinamikáját már széles körben tanulmányozták, és sok esetben a véges hőmérsékleti, sztatikus tulajdonságait is tárgyalták. Másfelől az energiaréssal rendelkező egy dimenziós modellek véges hőmérsékleti dinamikáját kevésbé sikerült megérteni. Jelen dolgozat egy részének célja az energiaréssal rendelkező rendszerek dinamikus tulajdonságainak megértése egy dimenzióban, különös tekintettel a belső szabadsági fokok szerepére.

A munka másik fele ultrahideg atomi rendszerekben történő kvantum fázisátalakulások tanulmányozására koncentrál. Mostanában vált lehetővé bozonikus, illetve fermionikus atomok csapdázása optikai rácsokban ultrahideg körülmények között, ráadásul már olyan keverékeket is létre tudnak hozni, amelyben mindkét ré-

---

szecsketípus megtalálható. Az atomok hiperfinom kvantumszáma változatos lehetőségeket biztosít a kísérletekben, ezzel új területeket teremtve az elméleti kutatók számára is. Az ultrahideg atomokból álló gázokkal végzett kísérletekben olyan rendszereket lehet rácsra létrehozni, ahol a részecskék lokálisan hatnak kölcsön és a „spin komponensek” száma nem csak kettő lehet. Az ilyen rendszerek jól jellemezhetők a Hubbard-modell több spin komponenset tartalmazó általánosításával. Annak ellenére, hogy a két komponensű Hubbard-modell intenzív kutatás tárgyát képezi, az általános több komponensű változatok alapállapotát még nem vizsgálták nagy részletességgel.

---

## Célkitűzések

A dolgozat első felében a  $Q = 3$  állapotú kvantum Potts-modell véges hőmérsékletű korrelációit vizsgálom egy dimenzióban. A kvantum Potts-modellben fázisátalakulás történik zérus hőmérsékleten, egy ferromágneses és egy kvantum paramágneses alapállapot között. A kvantum kritikus tartomány és az alacsony hőmérsékletű, energiaréssal rendelkező fázisok tárgyalása eltérő megközelítésekkel lehetséges. A kvantum kritikus tartományban a dinamikát a kvantum kritikus pont skálaki-tevői határozzák meg. A konform térelmélet eszközeinek alkalmazásával levezethető a dinamikus szuszceptibilitás ebben a tartományban. Másfelől a belső kvantumszámokkal rendelkező kvázirészecskék szóródása nemtriviális dinamikához vezet az energiaréssal rendelkező tartományokban. Ugyan szemiklasszikus közelítésben kiszámítható a korrelációs függvény, ehhez először meg kell érteni a kétrészecske-ütközések kvantummechanikáját. Azt is tárgyalom, hogy a Potts-modell esetén alkalmazott szemiklasszikus módszer használható-e más, egy dimenziós modellek esetén.

A dolgozat második felében a vonzó, három komponensű Hubbard-modell alapállapot tulajdonságait tárgyalom végtelen dimenzióban, egy Gutzwiller-számítás keretében. A két komponensű esethez hasonlóan átalakulás történik a kölcsönhatás erősségének függvényében két határeset között, a kinetikus vagy a kölcsön-

---

hatási energia túlsúlyának megfelelően. Ezt az átmenetet fogom tanulmányozni, mely valójában egy fázisátalakulás. Targyalom a gyengén- illetve erősen kölcsönható határeseteket, hogy megtaláljam a megfelelő Gutzwiller variációs hullámfüggvényt, amivel az alapállapot közelíthető. A Gutzwiller várható értékek kiszámítása összetett sokrészecskés probléma: egy funkcionál integrál formalizmust fejleszttek ki a várható értékek egzakt meghatározására végtelen dimenzióban. Ezen végtelen dimenziós Gutzwiller számítások eredményeit értelmezem a lehetséges kísérleti megvalósítások tekintetében.

---

## Új tudományos eredmények

- I. A  $d = 2$  dimenziós,  $Q = 3$  állapotú klasszikus Potts model kritikus exponenseinek felhasználásával felírható az  $d = 1$  dimenziós kvantum Potts-modell korrelációs függvénye a kritikus pontban,  $g = g_c$  és  $T = 0$ -n. Konformális leképezést alkalmaztam, hogy ebből megkapjam a képzetes időbeli dinamikus korrelációs függvényt véges hőmérsékleten. Ennek a kifejezésnek az analitikus tulajdonságainak a felhasználásával egy Fourier-transzformációt és analitikus elfolytatást hajtottam végre, hogy kiszámítsam a dinamikus szuszceptibilitást a kvantum kritikus tartományban,  $g = g_c$  és  $T > 0$  esetén [1].
- II. Két érvet hoztam fel, hogy a  $Q = 3$  kvantum Potts-modell energiarésszel rendelkező fázisaiban a kétré-szecs-kés szórásmátrix az alacsony impulzusú határesetben tisztán kicserélődési típusú. Az  $S$ -mátrix ezen szerkezete lehetővé tette, hogy analitikusan kiszámítsam a dinamikus korrelációs függvényeket a szemiklasszikus határesetben,  $T \ll \Delta$  esetén. A korrelációk relaxációs függvénye univerzális diffúzív viselkedést mutatott, mind a ferromágneses, mind pedig a kvantum paramágneses oldalon. Egyszerű módon visszanyertem a transzverzális térbeli Ising-modellre vonatkozó szemiklasszikus eredményeket is, a  $Q = 2$  határesetben [1].

---

III. A szemiklasszikus módszerrel az  $O(3)$  kvantum rotor-modell  $n^z - n^z$  dinamikus korrelációs függvényét is kiszámítottam, ami az  $S=1$  antiferromágneses Heisenberg-láncon történő rugalmatlan neutron-szórás  $q \approx \pi$  hullámszám körüli vonalalakjával van kapcsolatban. Általánosítottam az eljárást  $O(N)$  szimmetriájú rotor-modellek esetére, és azt is megmutattam, hogy a már tárgyalt relaxációs függvény írja le a korrelációkat a sine-Gordon-modell szemiklasszikus határesetében is. Így azt találtam, hogy a relaxációs függvény, amit analitikusan meghatároztam a kvantum Potts-modell esetére, más rendszerek esetében is alkalmazható. Megállapítottam, hogy az említett függvény lecsengése hosszú idők esetén exponenciális a  $Q = 2$  paraméter-érték esetén, míg diffúzív a  $Q > 2$  esetben [4].

IV. Szimmetria-megfontolások alapján megmutattam, hogy az  $SU(3)$  vonzó Hubbard-modellben fázisátalakulás történik zérus hőmérsékleten a kölcsönhatás erősségének függvényében. Az erős csatolású határeset vizsgálatával megállapítottam, hogy a legfontosabb korrelációk megragadhatók egy Gutzwiller típusú hullámfüggvénnyel, amivel (a  $d = \infty$  dimenziós határesetben) a szín szuperfolyadék – trionikus fázis közötti átalakulás jellemezhető. A Gutzwiller várható értékeket leképeztem funkcionál integrálokra egy effektív térelméletben. Ez a funkció-



---

nál integrál formalizmus általánosítható egyéb Gutzwiller - számítások esetére is [2, 3].

V. A dinamikus átlagtér-elmélet egy módszere segítségével megoldottam az effektív térelméletet a  $d = \infty$  dimenziós határesetben. Egzaktul meghatároztam a Gutzwiller várható értékeket a rendes sajátenergia-mátrix függvényében végtelen dimenzióban. A sajátenergia-mátrixra vonatkozó önkonzisztencia-egyenleteket numerikusan oldottam meg. A Gutzwiller-számítás eredményei azt mutatták, hogy a szín szuperfolyadék és a trionikus fázis közötti kvantum fázisátalakulás másodrendű, a rács  $\rho = 1/2$ -től eltérő betöltése esetén. Meghatároztam a kölcsönhatás erősségének kritikus értékeit a betöltöttség függvényében. Azt is megfigyeltem, hogy a szuperfolyékony rendparaméter által létrehozott spontán szimmetriasértés „ferromágnességgel” jár együtt [2, 3].

---

VI. Végeztem módosított Gutzwiller-számításokat is, egyfelől félkör típusú egyrészesekes állapotsűrűséget, másfelől a hiperfinom komponensek közötti anizotrop kölcsönhatást – mely explicit módon sérti az  $SU(3)$  szimmetriát – feltételezve. Megfigyeléseim szerint nincs kvalitatív különbség az  $SU(3)$  szimmetriájú esethez képest, az átalakulás ezekben az esetekben is folytonos maradt. Ezek az eredmények arra utalnak, hogy a fázisátalakulás kísérletileg is megfigyelhető [3].

---

## Hivatkozások

- [1] Ákos Rapp and Gergely Zaránd  
Dynamical correlations and quantum phase transition  
in the quantum Potts model  
Phys. Rev. B **74**, 014433 (2006).
- [2] Ákos Rapp, Gergely Zaránd, Carsten Honerkamp,  
and Walter Hofstetter  
Color Superfluidity and „Baryon” Formation in  
Ultracold Fermions  
Phys. Rev. Lett. **98**, 160405 (2007).
- [3] Ákos Rapp, Walter Hofstetter, Gergely Zaránd  
Trionic phase of ultracold fermions in an optical  
lattice: a variational study  
Phys. Rev. B **77**, 144520 (2008).
- [4] Ákos Rapp and Gergely Zaránd  
Universal Diffusive Decay of Correlations in Gapped  
One-Dimensional Systems  
preprint (2008).