

Kvantumos Munkastatisztika,
Univerzalitás és Adiabaticus Időfejlődés
Kaotikus Fermionikus Rendszerekben

PHD TÉZISFÜZET

GRABARITS ANDRÁS

Témavezető: DR. KORMOS MÁRTON
tudományos főmunkatárs
BME Fizikai Intézet
Elméleti Fizika Tanszék



M Ű E G Y E T E M 1 7 8 2

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem

2023

Bevezetés

Forradalmi fejlődésnek lehetünk szemtanúi a nanorendszereken végzett kísérletek területén, amely lehetővé teszi kvantumrendszerek manipulációját akár egyetlen elektron szintjén is. Leginkább ez nyitotta meg a lehetőséget arra, hogy kvantumrendszerek esetén eddig soha nem látott rövid hossz-skálákon vizsgáljuk a nemegyensúlyi folyamatokat. Míg az egyensúlyi statisztikus mechanika az elmúlt évszázadok során teljesen megalapozottá vált, a nemegyensúlyi megfelelője még messze nem teljes, hiszen hatalmas területet ölel fel megannyi korántsem triviális, megválaszolatlan kérdéssel. Különösen érdekes irányt jelent az univerzalitás fogalmának a nemegyensúlyi dinamikára való általánosítása, mivel itt sokkal tágabb értelemben is vizsgálhatóvá válik a jelenség, például dinamikus fázisátalakulások vagy általánosabban tetszőleges kritikus pontok keresztezése nélküli folyamatok során alapvető mennyiségek, például az impulzus, az energia, stb. statisztikáján keresztül. Ennek megfelelően az egyik legkézenfekvőbb választás az energia statisztikus tulajdonságaira összpontosítani, amely az egyensúlyi helyzettől eltávolodva fluktuáló viselkedést mutat.

Míg az olyan közelítő módszerek, mint a kvázistacionárius folyamatok vagy a lineáris válaszelmélet sikeresen írják le az energia statisztikus fluktuációit egyensúlyközeli helyzetek esetén mind klasszikus, mind kvantumos rendszerekben, addig egzakt fluktuáció relációkat csak a közelmúltban tudtak levezetni klasszikus rendszerek esetén, amelyek az egyensúlyon kívüli energiaváltozást az egyensúlyi szabadenergiához kapcsolják.

Kvantumrendszerek esetében azonban komoly módosításokra van szükség, mivel a *munka* fogalmával azonosított energiaváltozás nem ágyazható be egy sajátérték-problémába a klasszikus függvények operátorokkal való megfeleltetésével. Ennek oka, hogy a munka lehetséges mérési eredményei nem határozhatók meg egyidejű mérésekkel. Egészen érthető módon szükség van egy mérésre a folyamat elején és egy másikra a folyamat végén, ez utóbbi a nemegyensúlyi dinamika során indukált további véletlenszerűség természetes következménye. Ezen a *kettő méréses protokollon* keresztül a munka fogalma megfelelően kiterjeszthető kvantumrendszerek esetére is általános nem-

egyensúlyi folyamatok során. Az operátor megfeleltetés helyett a legtöbb tulajdonságát az eloszlásfüggvényével, a *munkastatisztikával* lehet jellemezni, amely sok szempontból a szabadenergia természetes kiterjesztésének felel meg az általános egyensúlytól távoli szituációkban. Ennek megfelelően ebben a dolgozatban a kvantum munkastatisztikájának és statisztikus természetének általános megértése felé teszek egy fontos lépést a véges frekvenciával hajtott külső perturbációknak kitett, rendezetlen, kaotikus fermionikus nanorendszerek esetén.

Célkitűzések

Disszertációm központi célja az volt, hogy megvizsgáljam a rendezetlenség, a hőmérséklet és a véges időtartamú nemegyensúlyi gerjesztések közös hatását kaotikus fermionikus rendszerek munkastatisztikájára és az elektron-lyuk gerjesztések dinamikájára.

A rendezetlenség szerepének általános tárgyalásához az egyszerű részecske energiaspektrumot véletlen mátrixelmélettel modelleztem, amely ideális alapot biztosít a rendezetlen kvantumpöttyök vizsgálatához. Ugyanakkor az is izgalmas kérdés, hogy milyen feltételek mellett érvényesek a véletlen mátrix elmélet eredményei térben kiterjedt gerjesztett Anderson-modellek esetén.

Ennek érdekében először a nulla hőmérsékletű határeset vizsgálatát tűztem ki célul, az univerzális aspektusokra, a kvantum munkastatisztikus viselkedésére, valamint a részecske-lyuk gerjesztések dinamikájára koncentrálni. További célom volt, hogy megvizsgáljam a kvantummechanikai eredmények egyezését a klasszikus Markov-féle megközelítéssel. Ez az irány különös jelentőségre tesz szert, mivel ideális kiindulási pontot nyújthat a munkastatisztika és a nemegyensúlyi dinamika analitikus vizsgálatára. Ezen felül meg kívántam mutatni, hogy a fenti sokrészecskés eredmények általánosíthatóak egy kétdimenziós Anderson-modellre is, melyet egy időben deformálódó potenciál hatása alá helyezünk.

A dolgozat következő fő célja a munkastatisztika és az adiabatikus időfejlődés valószínűségének vizsgálata analitikus módszerekkel.

A harmadik cél a fenti keretrendszer kiterjesztése véges hőmérsékletre, ahol a fenti kérdések mindegyikének megválaszolása több erő-

feszítést igényel. Mindazonáltal célul tűztem ki az analitikus karakterisztikák megtalálását az alacsony és magas hőmérsékletű határesetekben, illetve a további termikus hatások beépítését az általános rendezetlen és kaotikus nanoszemcsékben végbemenő nemegyensúlyi folyamatok univerzalitásának teljes jellemzésére.

Végezetül további általános gerjesztési mechanizmusokat vizsgáltam kétdimenziós Anderson-modellekben, és célul tűztem ki, hogy tágabb értelemben megmutassam a feltételeit a véletlen mátrix modellel azonos nemegyensúlyi dinamikának. Ezenfelül, további érdekes kérdésnek ígérkezett az energiaszintek parametrikus időfejlődésének vizsgálata és azok összehasonlítása a véletlen mátrix modellbeli eredményekkel.

Módszerek

A fenti tudományos célok eléréséhez numerikus és analitikus eszközöket egyaránt alkalmaztam. A numerikus eredményekhez az egyrészecske Schrödinger-egyenletet Runge-Kutta 4 algoritmussal, Simpson-integrál közelítésekkel és sűrű Hamilton-mátrixok egzakt diagonalizációjával vizsgáltam. Emellett véges hőmérsékletű soktest formalizmust használtam a munkastatisztika meghatározására az egyrészecske eredmények felhasználásával. Továbbá különböző Monte Carlo szimulációkat is végrehajtottam a klasszikus leírás tanulmányozására. Több különböző átlagtérelméleten és bozonizáción alapuló analitikus megközelítést is alkalmaztam a kvantumos munka alapvető jellemzőinek, a részecske-lyuk gerjesztések dinamikájának és az energiaszintek parametrikus időfejlődésének vizsgálatára gerjesztett Anderson-modellekben.

Új tudományos eredmények

1. Megmutattam, hogy mind gerjesztett véletlen mátrix, mind kétdimenziós Anderson-modellekben a munkastatisztikát és az átlagos betöltési számokat univerzális függvények írják le zérus hőmérsékleten, melyeket függetlenül a rendszer mikroszkopikus paramétereitől, csak az átlagos munka jellemez. A nemegyen-

súlyi dinamikát és a megfigyelt univerzalitást sikeresen leírtam egy klasszikus energiatérbeli diffúziós modellel, a szimmetrikus kizárási folyamattal, amelyet egy diszkrét idejű Monte Carlo szimulációval valósítottam meg [1, 2].

2. Közelítő analitikus kifejezéseket vezettem le zérus hőmérsékleten a munkastatisztikára, annak fluktuációira és az adiabaticitás valószínűségére, a klasszikus diffúziós leírás keretein belül, bozonizációs és átlagtér módszerekkel. Megmutattam, hogy a munkastatisztika nem konvergál Gauss-eloszláshoz, hanem exponenciális viselkedést mutat a nagy munkák határesetében, az adiabaticitás valószínűsége elnyújtott exponenciálisként cseng le, és a munka fluktuációi szuperdiffúzívan nőnek, $\delta w^2 \sim \langle w \rangle^{3/2}$ [1, 2].
3. Levezettem egy általános determináns formulát a munkastatisztika karakterisztikus függvényére és analitikus kifejezést adtam az egyrészecke sajátállapotok átlagos betöltési valószínűségeire véges hőmérsékleten. Megmutattam, hogy a zérus hőmérsékleten tapasztalt univerzális tulajdonságok véges hőmérsékleten is érvényben maradnak, ahol a munkastatisztika és az átlagos betöltési számok az átlagos munkán felül a hőmérséklettől is függenek [3].
4. Megmutattam, hogy egy általánosított véges hőmérsékletű klasszikus energiatérbeli diffúziós modell pontosan reprodukálja a kvantummechanikai eredményeket. Megmutattam, hogy a munkastatisztika, annak fluktuációi és az adiabaticitás valószínűsége gyökeresen eltérő tulajdonságokat mutatnak a kis és nagy munka határesetekben, amely átmenetet a $\langle w \rangle$ átlagos munka és az $E_T \sim T^2$ átlagos termikus energia közötti viszony alapján lehet jellemezni. Míg a kis munkák, $\langle w \rangle < T^2$ határesetében a zérus hőmérsékleten tapasztalt karakterisztikák figyelhetőek meg, az ellenkező, $\langle w \rangle > T^2$ limeszben megmutattam, hogy a munkastatisztika normális eloszláshoz konvergál, diffúzív fluktuációkkal rendelkezik, $\delta w^2 \sim \langle w \rangle$, és az adiabaticitás valószínűsége exponenciális csökkenést mutat. [3].
5. Két általános nemegyensúlyi protokollt javasoltam kétdimen-

ziós Anderson-modellekben, és megmutattam, hogy bizonyos feltételek mellett az energiaszintek sebességének, görbületének és az elkerült szintkereszteződések statisztikáját ezekben a rendszerekben a véletlen mátrix elmélet által megadott, univerzális függvények írják le. Ebben a tartományban analitikus hatványfüggvény karakterisztikákat vezettem le a tipikus nagyságaikra és megmutattam, hogy az egyrészeske dinamika azonos a véletlen mátrix elmélettel leírt nemegyensúlyi folyamatokban tapasztaltakkal [4].

Publikációk

- [1] I. Lovas, A. Grabarits, M. Kormos, and G. Zaránd,
Theory of quantum work in metallic grains
Phys. Rev. Research, **2**, 023224 (2020)
- [2] A. Grabarits, M. Kormos, I. Lovas, and G. Zaránd,
Classical theory of universal quantum work distribution in chaotic and disordered non-interacting Fermi systems
Nat. Scientific Reports **12**, 15017 (2022)
- [3] A. Grabarits, M. Kormos, I. Lovas, and G. Zaránd,
Superdiffusive quantum work and adiabatic quantum evolution in finite temperature chaotic Fermi systems
Phys. Rev. B **106**, 064201 (2022)

- [4] A. Grabarits,
*Level dynamics and avoided level crossings in driven disordered
quantum dots*
Phys. Rev. B **107**, 014206 (2023)