Doktori Disszertáció

Az Unitér és Permutációs Szimmetriák Összjátéka Összetett Kvantumrendszerekben

Szerző:
Jakab Dávid

Témavezetők:
Dr. Zimborás Zoltán
Dr. Szirmai Gergely

Pécsi Tudományegyetem
Fizika Doktori Iskola
Kvantumoptika és Kvantuminformatika Program

Wigner Fizikai Kutatóközpont

2022

1. Bevezetés

A disszertációban három különböző kérdéskört vizsgálok. A közös motívum ami ezek mindegyikében megjelenik, a permutáció és SU(d) szimmetriák összjátéka. Az első két projektben erősen szimmetrikus mágneses rendszerek alapállapoti problémáit vizsgálom, a harmadikban pedig megoldom a kvantumos megoszthatóság problémáját két különböző kétrészű kvantumállapot család esetére.

A mágneses rendszereket elméleti szemszögből közelítem meg abban az értelemben, hogy olyan modelleket keresek amik elég egyszerűek ahhoz, hogy lehetséges legyen egzakt állításokat tenni az alapállapotaikra vonatkozóan; ugyanakkor mégis elég általánosak ahhoz, hogy az eredmények tágabb értelemben is hasznosnak bizonyuljanak. A modellek egyszerűségét a permutáció szimmetria megkövetelése adja. Az így kapott modellek átlagtér elméleteknek is tekinthetőek. A kapcsolatot az átlagtér elmélet közismert értelmezése, és e permutáció-szimmetrikus értelmezés között a de Finetti tételek kvantumos általánosításai teszik formálissá [5–8]. A permutáció szimmetria, és a kölcsönhatások SU(d) szimmetriái együtt lehetővé teszik a Hamilton-operátorok egzakt diagonalizálását a Lie-csoportok ábrázoláselméletének felhasználásával.

Mikor lehetnek egy összetett kvantumrendszer átfedő részrendszereinek korrelációi egymással kompatibilisek? A kvantummechanikának ez az alapvető kérdése a kvantum marginális probléma. A disszertáció utolsó témaköre, a kvantumos megoszthatóság, ennek a problémának egy permutáció-szimmetrikus részesete.

Az általam vizsgált SU(d)-szimmetrikus kvantumállapotok megoszthatósági problémája, matematikai értelemben szorosan kapcsolódik a disszertációban vizsgált mágneses rendszerek alapállapoti problémáihoz. Tulajdonképpen, fel lehet fogni az egyik ilyen probléma magasabb dimenziós általánosításának egy alternatív nézőpontból megfogalmazva.

2. A bilineáris-bikvadratikus modell teljes gráfon

Ebben a projektben egy három-szintű, SU(2)-szimmetrikus kéttest kölcsönhatással ellátott, permutáció-szimmetrikus spinrendszer alapállapotait tanulmányozom. Ez a Heisenberg-modell egyik lehetséges három-szintű általánosítása. A kéttest Hilbert-tér SU(2) transzformációk alatt felbomlik a 0, 1 és 2-es spinek által címkézett irreducibilis alterekre. Ennek megfelelően, a legáltalánosabb, előírt szimmetriákkal rendelkező kölcsönhatás előállítható az identitás, és két másik SU(2) invariáns, lineárisan független kéttest operátor lineáris kombinációjaként. Ezt a két operátort az SU(2) és SU(3) csoportok kvadratikus Casimir-operátorainak választom a kétrészecske reprezentációban. Az így eredményül kapott kölcsönhatás normálás után egyedül a θ szabad paramétert tartalmazza.

$$H_{ij} = \sin(\theta) C_{ij}^{\mathrm{SU}(3)} + \cos(\theta) C_{ij}^{\mathrm{SU}(2)}. \tag{1}$$

Ez a kétrészecske kölcsönhatás régóta ismert a szilárdtest fizikában bilineáris-bikvadratikus (BLBQ) kölcsönhatás néven. A hagyományos alakjában Casimir-operátorok helyett két másik SU(2)-szimmetrikus operátorral fejezik ki,

$$H_{ij} = \cos(\gamma)\mathbf{S}_i\mathbf{S}_j + \sin(\gamma)(\mathbf{S}_i\mathbf{S}_j)^2. \tag{2}$$

A BLBQ kölcsönhatás azután került elsőnek a figyelem középpontjába, hogy Haldane a 80-as években felfedezte, hogy az 1-es spinű Heisenberg-láncoknak, az 1/2-spinűekkel ellentétben, lehet gapes gerjesztési spektruma [9, 10]. Ez a figyelemre méltó különbség a BLBQ kölcsönhatás fázisainak beható tanulmányozását eredményezte, elsősorban a lánc esetében.

A teljes permutáció szimmetria egy kéttest-kölcsönható spin modell esetében azt jelenti, hogy a spinek kapcsolatát egy rács helyett a teljes gráf írja le. A teljes gráfon értelmezett klasszikus spin modellek, például a Sherrington–Kirkpatrick [11], vagy a Curie–Weiss modell, fontos szerepet játszanak a statisztikus mechanikában. Ennek az oka, hogy az ilyen permutáció-szimmetrikus modellek könnyen kezelhetőek, ugyanakkor mégis jó becsléseket adnak a megfelelő kölcsönhatások tulajdonságaira magas-dimenziós rácsok esetén. Az átlagtér elméletként való hasznosíthatóság mellett, az ultrahideg atomokkal végzett kísérletek lehetőséget adnak a teljes gráfon értelmezett SU(d)-szimmetrikus modellek kísérleti megvalósítására is, például abban a formában amit [12]-ben indítványoznak.

A modell teljes permutáció szimmetriájának következménye, hogy az egész rendszert leíró Hamilton-operátorban a **??**. egyenlet két Casimir-operátorátorának N-részecskés ábrázolásai jelennek meg,

$$H_{\mathrm{BLBQ}} = \sin(\theta) C_N^{\mathrm{SU}(3)} + \cos(\theta) C_N^{\mathrm{SU}(2)}. \tag{3}$$

Ennek a Hamilton-operátornak az alapállapotát az SU(2) és SU(3)-szimmetrikus tagok közötti versengés határozza meg, a sajátérték problémája pedig megoldható tisztán csoportelméleti módszerekkel. Mivel a 3. egyenlet Casimir operátorai kommutálnak, és a sajátaltereik az N-részecske Hilbert-tér SU(2) és SU(3) irreducibilis alterei, H_{BLBQ} sajátaltereit egy SU(2) és egy SU(3) irreducibilis ábrázolásból (irrepből) álló párokkal tudjuk címkézni. A sajátérték probléma megoldásának kulcsa annak a meghatározása, hogy mik az egymással kompatibilis SU(2) és SU(3) irrepek. Az SU(2) csoport 1-es spinű ábrázolásának képe egy részcsoportja SU(3)-nak. Ebből kifolyólag, amikor megszorítjuk erre a részcsoportra, minden SU(3) irrep felbomlik valamilyen SU(2) irrepek direkt összegére. A kompatibilis irrep-párokat ennek a felbontásnak a meghatározásán keresztül találom meg.

3. Kollektív SU(3) spinrendszer kétrészű permutáció szimmetriával

Ez a projekt, egy újabb variációja a korábbi témának. Itt is a Heisenberg-modell egy általánosítását vizsgálom egy erősen permutáció-szimmetrikus felállításban. A különbség az, hogy a spinek most egy SU(3)-szimmetrikus kicserélődési kölcsönhatással hatnak kölcsön; és ahelyett, hogy a korábbi modellhez hasonlóan, megtörném az SU(3) szimmetriát, a permutáció szimmetriát töröm meg részlegesen azzal, hogy a rendszert két, egyenlő nagyságú alrendszerre bontom, és csupán ezeken belül követelek meg permutáció szimmetriát. Ez azt jelenti, hogy a rendszert két, különböző csatolási állandójú kicserélődési kölcsönhatás jellemzi. Egy a részrendszereken belül, egy pedig azok között hat. Egy ilyen kétrészű struktúra bevezetése egy átlagtér modellbe érdekesebbé teszi a fázisstruktúrát, mivel relaxálja a teljes gráfban megjelenő extrém frusztrációt, és megnyitja a lehetőséget a kétrészű kicserélődési szimmetria megsértésére. Mint kiderült, a két csatolási állandó megfelelő aránya mellett valóban megjelenik egy, a kétrészű kicserélési szimmetriát sértő alapállapot. Figyelemre méltó, hogy már ebben az egyszerű, hosszútávú kölcsönhatást tartalmazó modellben megjelenik egy ilyen szimmetriasértő fázis amire, az eddigi ismereteink alapján, nincs példa rövidtávú kölcsönhatások esetén.

Hasonlóan a teljes gráfon értelmezett bilineáris-bikvadratikus modell esetéhez, a permutáció szimmetria lehetővé teszi, hogy a teljes rendszer Hamilton-operátorát Casimir-operátorok lineáris kombinációjaként fejezzük ki. Ebben az esetben SU(3) kvadratikus Casimir-operátora jelenik meg, a teljes rendszeren ($C_{\mathrm{AB}}^{\mathrm{SU(3)}}$), és a részrendszereken ($C_{\mathrm{A}}^{\mathrm{SU(3)}}$, $C_{\mathrm{B}}^{\mathrm{SU(3)}}$) vett szorzatábrázolásokban, a normált Hamilton-operátor pedig egy szabad paramétert tartalmaz,

$$H_{\mathrm{CBE}} = \sin(\theta) C_{\mathrm{AB}}^{\mathrm{SU(3)}} + \cos(\theta) \left(C_{\mathrm{A}}^{\mathrm{SU(3)}} + C_{\mathrm{B}}^{\mathrm{SU(3)}} \right). \tag{4}$$

Ebből az a fizikai intuíció nyerhető, hogy a megfelelő paraméterek a rendszer leírásához valójában nem a részrendszereken belüli és azok közötti kölcsönhatások erősségei, hanem a $C_{\mathrm{AB}}^{\mathrm{SU(3)}}$ által leírt uniform „háttér” kölcsönhatás erőssége, valamint az erre rátevődő,

$C_{\mathrm{A}}^{\mathrm{SU}(3)}$ és $C_{\mathrm{B}}^{\mathrm{SU}(3)}$ által leírt részrendszereken belüli kölcsönhatás erőssége.

A 4. egyenletben megjelenő Casimir-operátorok ismét lehetővé teszik az alapállapoti probléma egzakt megoldását ábrázoláselmélet segítségével. H_{CBE} sajátértékeit SU(3) irrepek hármasaival lehetséges címkézni. Ezek közül kettő az alrendszereknek felel meg, egy pedig a teljes rendszernek. Azt hogy három tetszőleges irrep kompatibilis-e egymással az SU(3) csoport fúziós szabálya, az úgynevezett Littlewood–Richardson szabály határozza meg. Ez egy Young-diagramokkal megfogalmazott kombinatorikai algoritmus. A disszertációban felhasználom a Littlewood–Richardson algoritmus eredményének, Schlosser által meghatározott [13], zárt alakú kifejezését arra, hogy megoldjak egy az algoritmussal összefüggő kombinatorikai problémát. A megoldás segítségével lecsökkentem az alapállapoti probléma változóinak számát két SU(3) irrepre, ami lehetővé teszi a hátramaradt egyenletrendszer megoldását.

4. A Werner- és izotropikus állapotok megoszthatósága

A kvantumos megoszthatósági probléma lényege a következő: Aliz és Bob kapnak egy-egy, n_{A} illetve n_{B} méretű, kompozit kvantumrendszert, amik ugyanannak a Hilbert-térnek a másolataiból állnak. Lehetséges-e, hogy a kettőjük összetett rendszere olyan kvantumállapotban legyen, ami mellett minden kétrészű alrendszer, aminek egyik része Alizé a másik pedig Bobé, ugyanabban a ρ kvantumállapotban van? Ha egy adott ρ kétrészű kvantumállapotra ez lehetséges, akkor ρ-t n_{A}-n_{B} megoszthatónak nevezzük. Egyrészt a tiszta, összefonódott állapotok nyilvánvalóan nem, vagyis a terminológiánk szerint csupán 1-1 megoszthatóak. Másrészt pedig, a szeparábilis állapotok pontosan megegyeznek a tetszőlegesen, vagyis ∞-∞ megosztható állapotokkal. Általában véve azt lehet elmondani, hogy egy állapot minél jobban összefonódott, annál kevésbé megosztható.

Abból a célból ,hogy a problémát némileg megközelíthetőbbé tegyem, leszűkítem a lehetséges ρ kvantumállapotok halmazát két $\mathrm{U}(d)$-szimmetrikus állapotcsaládra: A Werner-állapotokra, amik invariánsak a globális unitér transzformációkra, valamint az izotropikus állapotokra, amik invariánsak az $U \otimes U^*$ alakú transzformációkra, ahol $U \in \mathrm{U}(d)$, és $*$ a komplex konjugálást jelöli. Mindkét állapotcsalád fontos szerepet játszik a kvantum-összefonódás megértésében, különösképp a Werner-állapotok, amiket eredetileg ugyanabban a cikkben definiáltak mint magát az összefonódást [14]. A megoszthatósági probléma inherens kétrészű permutációs szimmetriájának, valamint az általam vizsgált állapotok unitér szimmetriájának köszönhetően, lehetséges a problémát ábrázoláselmélet segítségével megoldani. Korábban ugyanebből a megközelítésből indult ki Johnson és Viola [15], akiknek sikerült szükséges és elégséges feltételeket megadniuk a Werner- és izotropikus állapotok 1-n_{B} megoszthatóságára. A munkám során ezt az eredményt kiterjesztem n_{A} és n_{B} tetszőleges értékeire.

A tézisben megmutatom, hogy az n_{A}-n_{B} megosztható Werner-és izotropikus állapotok meghatározása ekvivalens bizonyos, a 4. egyenlet Hamilton-operátorához hasonó, lineáris operátorok extremális sajátértékeinek megtalálásával. A korábbi, kétrészű spinmodell alapállapoti problémájához hasonlóan, ezeknek a lineáris operátoroknak a sajátértékeit is Young-diagramok hármasaival lehetséges címkézni. A diagramok kompatibilitáshoz szükséges feltételeket pedig ismét a Littlewood–Richardson szabály adja. Az extremális sajátértékek megadásához a kétrészű spinrendszer alapállapoti problémájának megoldásához használt módszert terjesztem ki tetszőleges dimenzióra. Ehhez különösen fontosnak bizonyultak Lam [16] és Azenhas [17] eredményei amik meghatározzák a Littlewood–Richardson algoritmusban megjelenő Young-diagramok parciális rendezését.

5. Tézispontok

1. Egzaktul diagonalizáltam az 1-es spinű, teljes gráfon értelmezett bilineáris-bikvadratikus modell Hamilton-operátorát (3. egyenlet), és elemeztem az alapállapot fázisait a külső kontroll paraméter, θ függvényeként. Arra jutottam hogy a modellnek négy, különböző szimmetria szektorokhoz tartozó alapállapoti fázisa van: Egy ferromágneses fázis, egy gapnélküli részlegesen mágnesezett fázis amiben a kvantumszámok amik leírják az alapállapotot folytonosan változnak θ függvényeként, egy permutáció szimmetrikus SU(2) szinglet fázis, és egy fázis amiben az alapállapot egyszerre SU(3) és SU(2) szinglet. Erről a témáról a Journal of Physics A folyóiratban jelent meg egy cikkem [1].

2. Egzaktul diagonalizáltam a kollektív, kétrészű kicserélődési kölcsönhatás Hamilton-operátorát (4. egyenlet) a termodinamikai limeszben, és tanulmányoztam az alapállapot fázisait a külső kontroll paraméter θ függvényeként. A modell alapállapotának öt különböző fázisa van: Egy ferromágneses fázis, egy Néel-típusú antiferromágneses fázis ferromágnesesen rendezett alrendszerekkel, egy SU(3) szinglet fázis, egy gap-nélküli részlegesen mágnesezett fázis amiben az alapállapotot leíró kvantumszámok folytonosan változnak a θ paraméter függvényeként, valamint egy a kétrészű kicserélési szimmetriát sértő fázis, amiben az alrendszereken különböző SU(3) reprezentációk jelennek meg. Erről a témáról a Physical Review B folyóiratban jelent meg egy cikkem [2].

3. Meghatároztam a szükséges és elégséges feltételeket az SU(d) Werner- és izotropikus állapotok n_{A}-n_{B} megoszthatóságához n_{A}, n_{B} és d tetszőleges értékei esetén. A disszertáció írásának idején erről a témáról egy preprint cikk érhető el [3].

A szerző publikációi

[1] D. Jakab, G. Szirmai, and Z. Zimborás, Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical **51**, 105201 (2018).

[2] D. Jakab and Z. Zimborás, Physical Review B **103**, 214448 (2021).

[3] D. Jakab, A. Solymos, and Z. Zimborás, Extendibility of Werner States (2022), arXiv:2208.13743 [quant-ph] .

[4] D. Jakab, E. Szirmai, M. Lewenstein, and G. Szirmai, Physical Review B **93**, 064434 (2016)

Irodalomjegyzék

[5] F. Trimborn, R. F. Werner, and D. Witthaut, J. Phys. A **49**, 135302 (2016).

[6] M. Christandl, R. König, G. Mitchison, and R. Renner, Commun. Mat. Phys. **273**, 473 (2007).

[7] Z. Ammari and F. Nier, Annales Henri Poincaré **9**, 1503 (2008).

[8] C. Krumnow, Z. Zimborás, and J. Eisert, J. Math. Phys. **58**, 122204 (2017).

[9] F. D. M. Haldane, Phys. Lett. A **93**, 464 (1983).

[10] F. D. M. Haldane, Phys. Rev. Lett. **50**, 1153 (1983).

[11] D. Sherrington and S. Kirkpatrick, Phys. Rev. Lett. **35**, 1792 (1975).

[12] M. E. Beverland, G. Alagic, M. J. Martin, A. P. Koller, A. M. Rey, and A. V. Gorshkov, Physical Review A **93**, 10.1103/physreva.93.051601 (2016).

[13] H. Schlosser, Mathematische Nachrichten **134**, 237 (1987).

[14] R. F. Werner, Physical Review A **40**, 4277–4281 (1989).

[15] P. D. Johnson and L. Viola, Physical Review A **88**, 032323 (2013).

[16] T. Y. Lam, Journal of Pure and Applied Algebra **10**, 81 (1977).

[17] O. Azenhas, Linear and Multilinear Algebra **46**, 51 (1999)