

A K73361/K73455 számú
"Kvantum fázisok és fázisátalakulások hangolható korrelált rendszerekben"
című

konzorciális OTKA pályázat zárójelentése

Témavezetők: Zaránd Gergely/Penc Karlo

Összegzés

A K73361 számú OTKA pályázat célja egyfelől mezoszkópikus áramkörökbeli korrelált állapotok tanulmányozása volt nem egyensúlyi körülmények között, másfelől pedig ultrahideg atomi rendszerek illetve korrelált modellek egzotikus állapotainak feltérképezését tűztük ki célul. A kutatás eredményeképp többek között 11 Physical Review Letters közlemény, 1 Physical Review X, 1 Nanoscale publikáció és 39 Physical Review cikk született (nem számítva azokat a munkákat, amikről az OTKA támogatás jelzése valamilyen okból lemaradt, köztük pl. egy Nature Physics közleményt). A projekthez kapcsolódóan eddig megjelent közleményeink (becsült) kumulatív impakt faktora mintegy 280.

A kutatásba 11 diákot vontunk be. A kutatáshoz kapcsolódóan 7 TDK dolgozat (Kanász-Nagy Márton, Werner Miklós, Újfalussy László, Sárkány Lőrinc, Varjas Dániel, Németh Márton (2db)), 4 BSc diplomamunka (Lencsés Máté, Szarvas Tamás, Újfalusi László, Lovas Izabella), 4 MSc diplomamunka (Varjas Dániel, Kanász-Nagy Márton, Újfalussy László, Siska Ádám), és három doktori disszertáció (Romhányi Judit, Tóth Tamás András, Horváth Bertalan) született, és két további MSc diplomamunka (Werner Miklós, Sárkány Lőrinc) illetve két PhD disszertáció (Kanász-Nagy Márton, Lajkó Miklós) befejezése várható a következő év során.

A projekthez kapcsolódóan összesen mintegy 28 (a konzorciális partnerekkel együtt k.b. 40) meghívott előadást illetve kollokviumot tartottunk nemzetközi konferenciákon és iskolákon (lásd melléklet), nem számítva a számtalan meghívott szemináriumot és a nem meghívott konferencia-előadásokat.

A projekt számtalan eredménye közül talán hatot emelnék ki:

1. Kiemelném nemzetközi együttműködésben végzett úttörő munkásságunkat az N-komponensű Mott szigetelők (csapdázott ultrahideg atomok, spin-pálya rendszerek) alapállapotának vizsgálatában, amelyben a legkorszerűbb numerikus és analitikus módszerekkel kimutattunk rendezett (SU(3) négyetrácson), dimerizált (SU(4) négyetrácson) ill. algebrai spin-folyadék (SU(4) hatszögrácson) fázisokat. [Tóth et al., Phys. Rev. Lett. 105, 265301 (2010); P. Corboz et al., Phys. Rev. Lett. 107, 215301 (2011); P. Corboz et al., Phys. Rev. X 2, 041013 (2012)].
2. Kiemelném a Luttinger folyadékbeli kvantum kvencs, azaz a paraméterek hirtelen megváltoztatása során kialakuló tranziens dinamika és munkastatisztika vizsgálatát [Dóra et al, Phys. Rev. Lett. 106, 156406 (2011); Dóra et al, Phys. Rev. B 86,

161109(R) (2012)], melyben csoportunk úttörő munkát végezve megmutatta, hogy a kvantum kvencs lefutása jelentősen befolyásolja a kvencs után mérhető korrelációs függvények viselkedését valamint a munkastatisztika alakját is, és emellett megmutatta, hogy a munkastatisztika jól leírható egy általánosított Gibbs sokasággal.

3. Kiemelném nemzetközi együttműködésben végzett munkásságunkat a kvantum jég vizsgálatában. Többek között megmutattuk, hogy az $U(1)$ spinfolyadék fázisban a frakcionális gerjesztések kötetlenül terjednek, valamint kiszámoltuk a struktúra faktort, amely segíthet a fázis kísérleti azonosításában pl. ritkaföldfém piroklórokban. [O. Sikora et al., Phys. Rev. Lett. 103, 247001 (2009), Shannon et al., Phys. Rev. Lett. 108, 067204 (2012)].
4. Kiemelném a mágneses szennyezők fém-szigetelő átalakulás közelében való viselkedésének analízisét [Kettemann et al, Phys. Rev. Lett. 103, 126401 (2009); Kettemann et al, Physical Review B 85, 115112 (2012)], melyben nemzetközi együttműködésben megmutattuk, hogy mind az Anderson-féle fém-szigetelő átmenetet jellemző kritikus rendezetlenség, mind pedig a kritikus exponens megváltozik már a legcsekélyebb mágneses rendezetlenség hatására is.
5. Kiemelném továbbá a rendezetlen ultrahideg atomok Bose-Fermi keverékére vonatkozó számításainkat, melyekben megmutattuk, hogy ebben a rendszerben az Anderson üveg mellett megjelenik egy Bose-Fermi üveg kvantum fázis, melyet kétszintű replika szimmetria-sértés jellemez. Tudomásunk szerint ez az első olyan kvantum üveg rendszer, melynek üveg állapotát nem egyszintű (level one) replika szimmetria-sértés jellemzi [Crepin et al, Phys. Rev. Lett. 105, 115301 (2011); Phys. Rev. A 85, 023625 (2012)].
6. Végül pedig kiemelném egy valós idejű funkcionális renormálási csoport módszer kifejlesztését, mellyel lehetővé vált nem egyensúlyi körülmények között időfüggő korrelációs függvényeket számítani erősen korrelált mezoszkópikus rendszerekben, s melynek jóslatait végül egy francia csoporttal együttműködve kísérletileg is igazoltuk egy szén nanocső kvantum doton végzett nagyfrekvenciás zajmérés segítségével [Moca et al, Phys. Rev. B 83, R201303 (2011); Basset et al, Phys. Rev. Lett. 108, 046802 (2012)].

A projekt eredmények felsorolása

Az alábbiakban a kutatómunka eredményeit időrendben, projektévekre bontva foglaljuk össze.

Első projektév (2008-2009):

Tanulmányoztuk a Kondo korrelációs felhőt és megmutattuk, hogy az $S=1$ spinű, részlegesen árnyékolt mágneses szennyező körül felépülő spinkorrelációk térben lassabban csengenek le, mint $S=1/2$ spinű szennyezés esetén. Érdekes eredmény, hogy a spin-korrelátor előjelet vált a távolság függvényében, tehát az antiferromágneses csatolás ellenére ferromágneses

korrelációk is fellépnek a szennyező és a vezetési elektronok között [Phys. Rev. B 79, 100408(R) (2009)].

Kiszámítottuk a réz felületen adszorbált kobalt monomer és dimer STM spektrumát, és a kísérleti eredményekhez jól illeszkedő görbéket kaptunk. Elsőként kombináltuk a szubsztrát és az adatok ab initio leírását az erős korrelációk korrekt számításával [Europhys. Lett. 85, 47002 (2009)].

Analitikus és numerikus eszközökkel vizsgáltuk a disszipatív környezettel kölcsönható dobozba zárt részecske viselkedését. A disszipáció kis értékeinél a részecske megtalálási valószínűségének térbeli eloszlása egyre keskenyedik, míg nagy disszipáció esetén degenerált alapállapotba való fázisátalakulást kapunk, ami inhomogén effektív potenciál kialakulásához köthető [Phys. Rev. B 78, 085439 (2008)]. Megvizsgáltuk, hogy egy véges dobozba (fémcsőbe) zárt mágneses szennyező gerjesztési spektruma hogyan tükrözi az erős korrelációkat [Phys. Rev. B 80, 035318, 2009]. Megmutattuk, hogy a véges méret spektrum a mágneses szennyező Kondo hőmérsékletének illetve a szemcsé egyrészecske szinttávolság hányadosának függvényében jellegét tekintve megváltozik. Ezt az átcsapást későbbi kísérletek részletesen is igazolták.

A kvantum kritikus rendszerek viselkedésének tanulmányozása során is sikerült néhány izgalmas új eredményt elérnünk. Tanulmányoztuk rendezetlen mágneses rendszerekben a lokalizációs fázisátalakulás közelében jelentkező transzporttulajdonságokat és megmutattuk, hogy számos ferromágneses félvezetőben a Curie hőmérsékletnél látható anomália valójában a fém-szigetelő átalakulás hatására alakul ki, és kvantitatíven leírható a lokalizáció skálaelmélete segítségével [Phys. Rev. Lett. 102, 137203, 2009]. Emellett megmutattuk, hogy az Anderson-féle fém-szigetelő átalakulás közelében mágneses szennyezők hatására egy új, kritikus fémcső fázis jelenik meg [Phys. Rev. Lett. 103, 126401 (2009)].

A háromdimenziós spinfolyadékok egy különleges esete az U(1) folyadék, amelyben frakcionális gerjesztések (spinonok) szabadon terjedhetnek. A folyadék alacsonyenergiás effektív modellje megegyezik az elektrodinamika Maxwell egyenleteivel, ezért kapta az U(1) folyadék nevet. Az U(1) spinfolyadék fázist többek között kvantum-dimer modellben várjuk, ezért néhány éve elkezdtük vizsgálni a kvantum dimer modellt gyémántrácson. Green-függvény Monte-Carlo számolásaink megmutatták, hogy a folyadékfázisban az alacsonyenergiás végesméret spektrum követi az U(1) térelmélet által jósolt viselkedést, valamint hogy a frakcionális gerjesztések közötti hűrfeszültség eltűnik [Phys. Rev. Lett. 103, 247001 (2009)].

A Wilson-féle numerikus renormálási csoport eljárás (NRG) az utóbbi néhány évben nagy fejlődésen ment keresztül, megjelentek például olyan algoritmusok, melyekben teljesülnek a spektrális összesszabályok. A konzorcialis együttműködéshez kapcsolódóan olyan flexibils kódot készítettünk és tettünk publikussá, mely lehetővé teszi tetszőleges számú és típusú szimmetriák kezelését [Ö. Legeza, C. P. Moca, A. I. Tóth, I. Weymann, G. Zaránd, cond-mat/08093143].

A félig töltött egydimenziós kiterjesztett Hubbard-modell fázisdiagramját vizsgáltuk kvantuminformációs entrópia függvények és a nem-lokális sűrűségmátrixos renormálás csoport algoritmus (DMRG) segítségével, a Neumann-féle kvantuminformációs entrópia segítségével. Meghatároztuk a fázisdiagramm szerkezetét és a fázisátalakulások típusát. [C. Mund et al., Phys. Rev. B 79, 245130 (2009)].

Második projektév (2009-2010)

A második projektévben kutatásaink egy része szintén kvantum pöttyök vizsgálatához kapcsolódott. Sikertel perturbatív módszerekkel leírnunk az ún. szingulett-triplett átmenetet, nem egyensúlyi iteratív perturbáció számítást, illetve az úgynevezett fluktuáció kicserélési közelítést, (egy végtelen rendű diagrammsorozat felösszegzését) használva. Ehhez a munkához kapcsolódóan egy rövid összefoglalónk jelent meg [J. Phys. C **200**, 012063 (2010)]. Emellett NRG módszerrel vizsgáltuk a ferromágneses elektródákhoz csatolt $S=1$ spinű kvantum dot alacsony hőmérsékletű viselkedését. Megmutattuk, hogy a részlegesen árnyékolt Kondo effektus nagyon érzékeny a spin-aszimmetriára [Phys. Rev. B 81, 115445 (2010)]. Szintén NRG módszerrel illetve analitikus technikákkal (kvantum mester-egyenlet a Keldysh kontúron) tanulmányoztuk a kvantum-pöttyön átfolyó spin áram zajának frekvenciaspektrumát [Phys. Rev. B 81, 241305(RC) (2010)], és megmutattuk, hogy azt két univerzális függvény segítségével lehet jellemezni, melyeket mind numerikusan mind pedig analitikusan meghatároztunk renormálási csoport módszerek segítségével. Egy másik munkánkban megmutattuk, hogy spin-pálya kölcsönhatás jelenlétében lehetséges egy két-szintű kvantum pöttyön pusztán kapufeszültség modulációkkal spint pumpálni a nem ábeli Berry fázist kihasználva [Phys. Rev. B 82, (RC)041309, 2010].

A szennyezési sáv alapján felépített elméletet hoztunk létre, mely alkalmas mély donor illetve akceptor nívók esetében a lokalizációs fázisátalakulás közelében az optikai vezetőképesség leírására. Eredményeink meglepően jó egyezést mutatnak a kísérleti adatokkal GaMnAs esetében [Phys. Rev. B 80, 165202 (2009)].

A kritikusan rendezetlen PBRM modell kétcsatornás vezetési eloszlásfüggvényének meghatározására numerikus szimulációkat végeztünk. Eredményünk szerint a tipikus vezetéssel normálva az eloszlás skála-független és kis vezetésre univerzális [Annalen der Physik **18**, 891 (2009)]. Kritikusan rendezetlen PBRM modell néhány csatornás szórási és vezetési tulajdonságait vizsgáltuk numerikusan az időtükrözési szimmetria sérülése esetén és összevetettük az eredményeket a véletlen mátrix elmélet jóslataival, melyet a fémes határesetben kaptunk vissza [Annalen der Physik **18**, 896 (2009)]. Egydimenziós, rendezetlen félvezető struktúrában levő exciton tömegközépponti mozgását tanulmányoztuk numerikusan. A szokásos aszimmetrikus nemlineáris optikai spektrum a legalacsonyabb energiájú, domináns átmenetek hatására Fano-típusúnak bizonyult. A tanulmányozott tight binding modell mind a nehéz, mind pedig a könnyű lyuk excitonokat tartalmazza, és a

kísérletekkel összhangban kisebb inhomogén kiszélesedést ad a könnyű lyuk excitonok esetében [Annalen der Physik **18**, 905 (2009); Phys. Rev. B **81**, 075307 (2010)].

Au(110) felületen a megjelenő relatív gap miatt felületi állapotok jelennek meg. Kidolgoztunk egy a felületi állapotok leírására használható k.p perturbáció számítást, mely alkalmas a relatív gapban lévő állapotok szisztematikus felépítésére, és megmutattuk, hogy ebben az esetben a spin-pálya kölcsönhatás anizotróp Rashba effektushoz vezet. Ezt ab initio számításokkal is igazoltuk [Phys. Rev. B **81**, 235438 (2010)].

A nem-lokális DMRG algoritmus egy újabb alkalmazásaként elemi gerjesztéseket vizsgáltunk poli-diacetilén láncok π elektronjaira. Reprodukáltuk a kísérletileg mért egy-excitonos kötési energiát és polarizálhatóságot, illetve meghatároztuk az exciton hullámfüggvény alakját. Ezen felül kimutattunk ún. optikailag sötét gerjesztéseket az egy-exciton gerjesztés alatt, ami szintén összhangban van a kísérleti eredményekkel. Egy gyengén kötött második exciton gerjesztést is találtunk, amit az ún. „piros lánc”-cal azonosítottunk, a poly-3BCMU anyagokban mért effektusok alapján. [Phys. Rev. B **81**, 045103 (2010)].

Nem-lokális kölcsönhatásokat tartalmazó kvantum-modellek vizsgálatával és az ehhez szükséges algoritmusok kifejlesztésével is foglalkoztunk. A DMRG két-dimenzióban az entrópia felületszabály miatt nem alkalmazható. A kvantum-információelmélet összefüggéseit felhasználva egy olyan tenzor-hálózat alapú renormálási módszert dolgoztunk ki, melyben az összefonódottságot egy Bethe-rács kötési közvetítik a rácspontok között (Tree-Tensor-Network-State, TTNS). Az új módszerben a koordinációs szám szabadon változtatható az adott rácspont kvantumentrópiája alapján, és határesetként a mátrix-szorzat-hullámfüggvényre egyszerűsödik. Az TTNS a DMRG-nál jobb skálázódással rendelkezik és a hosszútávú kölcsönhatások esetében a korrelált rácspontok közötti távolság nagyban csökkenthető, mely az algoritmus erőforrásigényét meghatározó blokk entrópia csökkenéséhez vezet. Módszerünket kétdimenziós spin és fermion rendszerekre alkalmaztuk [Phys. Rev. B **82**, 205105 (2010)].

Háromkomponensű csapdázott hideg atomok (fermionok) Mott-szigetelő fázisának effektív modelljét, az SU(3) Heisenberg modellt vizsgáltuk négyzetrácson. Ellentétben a szokásos SU(2) modellel, amely kétalrács Néel rendet valósít meg, az SU(3) esetben az átlagtér megoldás makroszkopikusan elfajult. Megmutattuk, hogy kvantumfluktuációk hatására az elfajulás feloldódik, és háromalrács “stripe” fázis alakul ki [Phys. Rev. Lett. **105**, 265301 (2010)].

A $\text{PrBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+x}$ rendszer anomális mágneses rendeződését tanulmányoztuk egy kristálytér modell segítségével, mely a Pr multipólus szabadsági fokai mellett figyelembe veszi ezen multipólus momentumok csatolódását is a Cu ionokhoz. A modell azonosítja a Pr rendeződés természetét, valamint számot tud adni a neutronszerelési kísérletekben megfigyelt Cu spinek elfordulásáról a rendezett fázisban, és az alacsonyhőmérsékleti ESR spektrumokkal is összhangban áll [Phys. Rev. B **82**, 174413 (2010)].

Harmadik projektév (2010-2011)

Tanulmányoztuk hirtelen kvantum kvencselt (fagyasztott) Luttinger folyadék rendszer dinamikai tulajdonságait [Phys. Rev. Lett. 106, 156406 (2011)]. Megmutattuk, hogy véges idő alatt történő kvencs esetén a sűrűség-sűrűség korrelációkban egyszerre találhatók olyan tartományok, melyeket az egyensúlyi exponensek írnak le, illetve olyan tartományok is, melyeket a hirtelen kvencs exponensek jellemeznek. Úgy gondoljuk, hogy ezek a tartományok megfigyelhetők hideg atomi rendszerekben.

Tanulmányoztuk egy dimenziós rendezetlen hideg atomi Bose-Fermi keverékek fázisdiagrammját replika térbeli variációs módszer segítségével [Phys. Rev. Lett. 105, 115301 (2010)]. Megmutattuk, hogy a keverékben új kvantum üveg fázisok jelennek meg, melyek optikai módszerekkel detektálhatók. Azt találtuk, hogy az ún. Bose-Fermi üveg fázist kétszintű replika szimmetria-sértés jellemzi.

Folytattuk a nem egyensúlyi mezoszkópikus rendszerek tanulmányozását. Kidolgoztunk egy új funkcionális renormálási csoport módszert, melynek segítségével lehetséges időbeli korrelációk számítása, és meghatároztuk egy kvantum pötty zaj spektrumát véges előfeszítés esetében [Phys. Rev. B 83, R201303 (2011)]. Megjelent az a munkánk is, amiben megmutatjuk, hogy egy általánosított nem egyensúlyi iteratív perturbációs számítás segítségével leírható az ún. szingulett-triplett átalakulás minden lényeges vonása [Phys. Rev. B 82, 165129 (2010)].

Numerikus renormálási csoport segítségével vizsgáltunk továbbá több kvantum-szennyezés modellbeli fázisátalakulást, így a gapes Anderson modellbeli fázisátalakulást, [Phys. Rev. B 81, 235106 (2010)], és a két csatornás Kondo modell kvantum kritikus pontja közelében a hővezetést [Phys. Rev. B 83, 245308, 2011]. Utóbbi munkánkban megmutattuk, hogy alacsony hőmérsékleten a Lorentz szám univerzális értéket vesz fel.

Befejeztük azt a munkát, amiben egy izolált elektron spinjének spin-pálya kölcsönhatás indukálta relaxációját vizsgáljuk fémes környezetben, az elektromágneses kvantum fluktuációk hatására [Europhysics Letters 95, 57004, 2011]. Megmutattuk, hogy a spin nagyságát (g faktorát) gyenge kölcsönhatás esetén csak renormálják a fluktuációk, de nagy csatolás esetén a spin valószínűleg teljesen „eltűnik” a kvantum fluktuációk hatására.

Befejeztük a piroklór rácson való frusztrált antiferromágnes vizsgálatát. Megmutattuk, hogy a spin-pálya kölcsönhatás jelenlétében új fázisok jelentkeznek a fázisdiagramon, melyek a degenerált alapállapotú sokaságok struktúrájával illetve azok fluktuációinak szerkezetével hozhatók kapcsolatba/magyarázhatók. A munka a konzorciumban közös témavezetéssel készült, eredményeképp idén egy diplomamunka és egy az OTDK-n dicséretet nyert TDK dolgozat született [Varjas Daniel munkái].

A ZnCr_2O_4 egy tipikus erősen frusztrált mágneses anyag. Az erős antiferromágneses kicserélődések ellenére csak alacsony hőmérsékleten (a Néel hőmérséklet a kicserélődés egy százaléka) rendeződik. Az ISSP Megagauss laboratórium (Tokyo Egyetem) kutatóival együttműködve egy 4-alrács fázist azonosítottunk ZnCr_2O_4 -ben 120-140 T mágneses térben 4.2 K hőmérsékleten, a feles mágneszettségi plató alatt. A 4-alrács fázisban nemcsak a mágneses tér irányára merőleges komponense rendezett, hanem a térrel párhuzamos komponense is modulált, ezáltal egyfajta mágneses "supersolid"-ként fogható fel. Az állapot a frusztrált kicserélődés és a ráctorzulások összejátszásának következtében alakul ki. [Miyata et al., J. Phys. Soc. Jpn. 80, 074709 (2011)]

Kvantum Monte-Carlo módszerrel megmutattuk, hogy a kvantum-jég model (kvantum 6-vertex model gyémántrácson) 3-dimenzióban folyadék fázist valósít meg (hasnolón a kvantum-dimer modellhez), amely egy effektív $U(1)$ térelmélettel írható le. A model a ritkaföldfém spin-jég anyagokat írja le, a modell frakcionális gerjesztései a $\text{Dy}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ spin-jégben nemrég észlelt mágneses monopólusok [Shannon et al., Phys. Rev. Lett. 108, 067204 (2012)].

Háromlábú spin létrák fázisait vizsgáltuk projekciós Hamilton operátor segítségével analitikus és numerikus módszerekkel. Három fázist mutattunk ki, a gapelt fázisban egzakt alapállapotot írtunk fel, továbbá a kvantum-fázishatáron sikerült olyan nemtriviális egzakt alapállapotot felírunk, amely gapnélküli spektrummal rendelkezik. [Lajkó et al., Phys. Rev. Lett. 108, 017205 (2012)].

A $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$ -ban vizsgáltuk a Dzsalosinszkij-Moriya kicserélődés hatását a spin-gerjesztésekre, és figyelembevételével reprodukáltuk a mért ESR és infravörös spektrumokat. [Romhányi et al., Phys. Rev. B 83, 024413 (2011)]

A sűrűségmátrix-renormálásicsoport-algoritmust (DMRG) alkalmaztuk átmeneti fémoxidok izomerjeinek vizsgálatához. A világon eddig fellelhető legpontosabb eredményeket állítottuk elő, a kvantuminformációs entrópia és kölcsönös információ alkalmazásával. Az izomerek relatív energiának meghatározása mellett meghatároztuk az erősen összefonódott molekulapályákat és értelmeztük a oxigénkötések felbontásával járó folyamatot a kvantum információs entrópia alapján [Phys. Rev. A 83, 012508(2011)]

Negyedik - fél évvel meghosszabbított - projektév (2011-2012)

Számos, az első három évben megkezdett kutatás eredménye ebben az utolsó projektévben érett be.

Az alacsony dimenziós kvantum rendszerek vizsgálatát folytatva megvizsgáltuk a különféle rétegződésű grafén réteg-felbontott vezetőképességét [Phys. Rev. B 85, 033403 (2012)]. A réteg-felbontott Hall vezetőképesség nem kvantált. AB rétegződés esetén negatív értékeket is felvehet a vezetőképesség a rétegek távolságától függően. Megmutattuk, hogy réteg-

felbontott vezetőképesség erős mágneses tér függése alapján akár mágneses kapcsolóként is működhet.

Erősen szennyezett ferromágnesekben a ferromágneses szigetek közötti nem mágneses, de itineráns elektronokból álló tartományok egy RKKY jellegű kölcsönhatást közvetítenek a szigetek között. Ennek hatására a szigetek egymáshoz képest ferromágnesesen rendeződnek. Ezt a jelenséget vizsgáltuk meg a $\text{Sr}_{1-x}\text{Ca}_x\text{RuO}_3$ anyagban [Phys. Rev. Lett. 108, 1857012 (2012)]. A kísérleti eredmények jó egyezést mutatnak az elméleti eredményekkel.

Hideg atomi rendszerekben lehetőség van a kölcsönhatás időbeli változtatására. Egy ilyen folyamat hatására egy Luttinger folyadékon végzett munka statisztikáját vizsgáltuk. Azt találtuk, hogy a munka eloszlásfüggvénye függ a rendszer méretétől, az időbeli bekapcsolás tulajdonságaitól és a kölcsönhatás erősségétől, és fokozatosan Poisson eloszlásból Gumbel eloszlásba csap át, miközben az adiabatikus folyamat amplitúdója eltűnik [Phys. Rev. B 86, 161109(R) (2012)]. Eredményeinket egy általánosított Gibbs sokasággal is le tudtuk írni.

A Luttinger folyadékon végzett korábbi munkánkat folytatva tovább vizsgáltuk kvantum kvencsek hatását [arXiv:1211.1195 (Phys. Rev. B RC, közlésre elfogadva)]. Megmutattuk, hogy analitikus eredményeink összhangban vannak az XXZ Heisenberg modellen végzett numerikus eredményekkel (iTEBD). A vizsgált mennyiségek a rendszer energia változása, a spinek fluktuációja egy véges méretű dobozban és a spin-flip korrelációs függvény voltak. Ezzel lehetővé vált az egyensúlyra bevezetett Luttinger folyadék kép nem-egyensúlyi kiterjesztése.

Káliummal dúsított grafit tulajdonságait vizsgáltuk [Phys. Rev. B 85, 235405 (2012)]. Az ESR vonalszélesség anizotropak adódott, míg a g-faktor erős anizotrópiát mutatott. A vonalszélesség skálázódik az ellenállással, ahogy azt az Elliott-Yafet elmélet keretében várnánk.

Közös alapokra helyeztük az Elliott-Yafet és a D'yakonov-Perel' spin relaxációs folyamatot [arXiv:1211.0826]. Korábbi munkánkat folytatva megmutattuk, hogy mindkét folyamat tud a másikkra jellemző spin relaxációs idő-momentum relaxációs idő arányosságot produkálni. Ez a relaxációs idő és a spin pálya csatolással összekötött állapotok távolságától függ.

A sűrűségmátrix renormálási csoport segítségével numerikusan meghatároztuk a $q=3$ állapotú kvantum Potts-modell alacsony energiájú gerjesztéseit az egy dimenziós láncon periodikus határfeltételek mellett [New Journal of Physics 15, 013058 (2013)]. Ennek segítségével meghatároztuk a gerjesztések szórási S-mátrixának alacsony momentumú aszimptotikus alakját, ami eltér a kvantum kritikus viselkedést leíró konform térelméletből (a vezető releváns operátorral perturbálva) következő ún., diagonális alakról, viszont megegyezik az általában nemintegrálható rendszerekben található, ún., kicserélődési alakokkal. Az S-mátrix aszimptotikus alakja döntően befolyásolja bizonyos dinamikus korrelációs függvények időbeli lecsengését, amit a dinamikus struktúra faktor mérésével lehet összevetni. Ezen felül numerikusan és analitikusan bizonyítottuk, hogy dualitási relációkkal a kvantum kritikus pont

ellentétes oldalain a Hamilton-operátorok bizonyos alterek között egzakt módon egymásba képezhetők.

Tanulmányoztuk egy gyengén kölcsönható három komponensű fermionikus atomi gáz fázisdiagramját a teljes hőmérséklet-tartományban [Phys. Rev. B 86, 064519 (2012)]. Ehhez egy mozgásegyenleten alapuló és egy variációs átlagtér elméleti módszert használtunk, amik képesek a szuperfolyadék és a mágneses rendeződést egyenrangúan figyelembe venni, és leírni a kölcsönhatásukat. Ez a kölcsönhatás jelentősen módosítja a fázisdiagramot, különösen a szuperfolyadék-normál fázishatárokat. A kritikus hőmérséklet közelében, és kis kémiai potenciál-aszimmetria estén a fázisdiagram hasonló a Cherng és munkatársai [Cherng et al, Phys. Rev. Lett. 99 130406 (2007)] által megjósolthoz, azonban a fázisdiagram távolabbi tartományai jóval komplexebb struktúrával rendelkeznek: új első- és másodrendű fázishatárok és multikritikus pontok valamint $O(2,2)$ szimmetriájú bikritikus vonalak jelennek meg. Ebből a munkából, mely megkapta a Physical Review megtisztelő Editor's Choice jelölést is, egy konferenciakiadvány is készült.

Numerikus szimulációval a Bohigas-Giannoni-Schmit sejtés fordítottját vizsgáltuk egydimenziós rendszeren. Inverziós módszerrel is azt találtuk [Physical Review E 84, 016230 (2011)], hogy az N sajátértéket reprodukáló potenciál létezik, de az határesetben sehol sem differenciálható, sőt nem is folytonos, vagyis szigorúan véve nem létezik, tehát nem lehet ellenpéldát találni a sejtéssel szemben.

Véletlen mátrix modell segítségével numerikus szimulációval igazoltuk azt 2009-ben Phys. Rev. Lett.-ben már bemutatott elképzelést, miszerint a kritikusan rendezetlen fémekben kialakuló multifraktál állapot bizonyos helyeken eltűnő lokális állapot sűrűség, ún. pszeudogap kialakulásához vezet, és az ilyen helyeken előforduló mágneses szennyezések árnyékolása nem valósul meg, vagyis szabad mágneses momentumot képeznek [Int. J. Mod. Phys: Conference Series, 11, 102 (2012)].

Megvizsgáltuk híg mágneses szennyezők hatását rendezetlen Fermi folyadékban, ami az Anderson-féle átalakulásban, vagy annak közelében van. Ilyen esetben a multifraktál viselkedés hatására pszeudogap alakulhat ki, ami szabadon hagyja a mágneses momentumokat. Ennek hatására a szigetelő oldal unitér, míg a fémes oldalon orthogonális szimmetriát mutat. Emiatt mind a kritikus rendezetlenség, mind a kritikus exponens is megváltozik már a legcsekélyebb mágneses rendezetlenség hatására [Phys. Rev. B 85, 115112 (2012)]. Ebben a cikkben, mely a korábban közölt, Physical Review Lettersben megjelent munkánk szerves folytatása, bizonyos egyszerűsítések mellett meghatároztuk a lokális Kondo-hőmérséklet eloszlását, sőt lehetőség nyílt a mágneses indukció és a hőmérséklet mellett meghatároztuk a probléma kiterjesztett fázisdiagrammját is. Úgy látjuk, létezik véges hőmérséklet mellett is létezik átalakulás a fémes, szigetelő és félfémes viselkedés között. Ezeket az átalakulásokat neveztük el Kondo-Anderson átalakulásnak.

Nagy, de nem végtelen nagy rendezetlenség hatására az Anderson modellben a sávközéptől távolodva a sajátállapotok egyre lokalizáltabbak [Phys. Rev. B 86, 125143 (2012)]. Azonban a sávszél felé nem csökken a lokalizáció egy rácspont környezetére, hanem két- illetve több rácspontos állapotok lesznek jellemzőek. Ennek matematikai részleteit tisztáztuk egy-, két- illetve háromdimenziós rendszereket közelítő két-rácspontos, effektív modelleken. Az effektív modell jóslatai jól illeszkednek a numerikus szimulációk eredményeire.

Heurisztikus érveléssel megmutattuk, hogy sejtésünk szerint általában a multifraktál dimenziók között egyszerű kapcsolat áll fenn bizonyos intervallumon belül [EPL 98, 37006 (2012)]. Ennek megfelelően a szintkompresszibilitás és az általános dimenziók között is egyszerű kapcsolat áll fenn. Ezzel sikerült egy 1996-ban illetve 2011-ben talált összefüggést közös alapra hoztuk. Több, független véletlen mátrix modellen is igazoltuk a sejtést.

Továbbfejlesztettük a 2010-ben publikált nem egyensúlyi perturbatív technikákat, és kifejlesztettük az ún. nem egyensúlyi FLEX (fluctuation exchange approximation) módszert, melyet sikeresen alkalmaztunk a szingulett-triplett átmenet leírására [Phys. Rev. B 84, 205117 (2011)]. Numerikus renormálási csoport számításokkal ill. kísérleti eredményekkel összevetve azt találtuk, hogy a FLEX számítások a perturbatív tartományban helyesen adják vissza a Kondo hőmérsékletet (Fermi folyadék skálát) és emellett képesek visszaadni a szingulett-triplett átmenet során kísérletileg megfigyelt komplikált dI/dV struktúrát is. Ezekre a számításokra épült Horváth Bertalan "A nemegyensúlyi Anderson szennyező modell vizsgálata perturbatív térelméleti módszerekkel" című disszertációja, amelyet 2012 elején védett meg sikeresen [Horváth Bertalan, PhD disszertáció, BME, 2012].

Hibrid ferromágnes-kvantum dot-normál elektróda rendszer transzport tulajdonságait vizsgálva megmutattuk, hogy ez a rendszer egyetlen gate elektróda segítségével vezérelhető, és így egy atomi skálán is működő, rendkívül gyors (GHz frekvencián is működő) spin injektort javasoltunk [Nanoscale, 4, 3635-3639 (2012)]. Megmutattuk, hogy ez az áramkör spin áram erősítőként is működik, és az injektált áram polarizáltsága elérheti a 90%-ot is, messze meghaladva a mai leghatékonyabb spin injektorok teljesítményét.

Befejeztük a Budapest DM-NRG kód fejlesztését, és elkészítettünk annak béta-verzióját, amely már az $su(n)$ -hez hasonló struktúrájú szimmetriákat valamint komplex mátrixokat is tud kezelni. Az új kódot az ún. $SU(3)$ Anderson modellen teszteltük, melynek vezetési tulajdonságait csakúgy mint különféle spektrálfüggvényeit meghatároztuk. Az ezekből a számításokból készült publikáció a Physical Review B-ben jelent meg [Phys. Rev. B 86, 195128 (2012)]. A beta-verziót 2013 nyarára kívánjuk publikussá tenni.

A 2011-ben általunk fejlesztett funkcionális renormálási módszer rendkívül gyümölcsözőnek bizonyult: segítségével nemzetközi együttműködés keretein belül sikerült leírnunk Richard Deblock kísérleti csoportjának mérési eredményeit [J. Basset et al, Phys. Rev. Lett. 108, 046802 (2012)]. Richard DeBlock és csoportja on-chip technológiát alkalmazva megmérte egy szén nanocső kvantum pötty zajspektrumát, és kimutatta azokat az anomáliákat, amiket

az elméleti számítások jósltak. Ugyanakkor a dekoherencia hatása a vártnál nagyobbak adódott.

A berlini Freie Universitaeten Felix von Oppen csoportjával együttműködve sikerült meghatároznunk, hogy hogyan hat vissza az adiabatikus pumpálást végző paraméterre egy mezoszkópikus rendszer. A számításokat szórási formalizmus segítségével végeztük, és megmutattuk, hogy többféle erőtag jelenik meg egy előfeszített rendszerben, melyek mindegyike a szórási mátrix paramétereivel hozhatók kapcsolatba; a szokásos Born-Oppenheimer tag mellett megjelenik egy disszipatív tag, és emellett egy nem konzervatív erőtag is [M. Thomas et al., Phys. Rev. B 86, 195419 (2012)].

Végezetül az utolsó projektév során publikáltunk két, korábban befejezett munkánk folytatásaként két részletes elemzést. Az egyik cikkünkben a az ultrahideg Bose-Fermi keverékek üvegállapotát leíró rendkívül komplikált számítások részleteit közöltük [Phys. Rev. A 85, 023625 (2012)], a másik munkánkban pedig a korábbi spin áram zaj számítást mutattuk be részleteiben az egyensúlyi esetben. Ez utóbbi munkában kitértünk a valós idejű spin áram válaszra is, és megmutattuk, hogy annak logaritmikus szingularitása van a Kondo effektus következtében, valamint részletesen elemeztük az egyensúlyi spin áram fluktuációk spektrumát a hőmérséklet függvényében is numerikus és analitikus renormálási csoport módszereket használva [Phys. Rev. B 84, 235441 (2011)].

A fenti közlemények/eredmények mellett a projekthez kapcsolódóan az utolsó projektévben két TDK munka is készült (a kapcsolódó diplomamunkákat diákjaink várhatóan 2013-ban védik majd meg). *Sárkány Lőrinc* munkájában szén nanocsőben létrejövő Wigner kristályt vizsgált [<http://tdk.bme.hu/TTK/ElmFiz/Wigner kristaly-elmeleti-vizsgalata-felvezeto>]. Szén nanocsővekben a spin szabadsági fok mellett az elektronok egy ún. izospin szabadsági fokkal is rendelkeznek. *Sárkány Lőrinc* dolgozatában a Wigner-kristály elektronjai közt fellépő kicserélődési kölcsönhatást tanulmányozta, és azt kapta, hogy a Wigner-kristály igen nagy pontossággal leírható egy SU(4) szimmetrikus effektív modellel. *Werner Miklós* "Topologikus fázisátalakulás, a Thouless-formula vizsgálata kvantum-Hall rendszeren" című dolgozatában a kvantum-Hall rendszerek kétparaméteres skálázását vizsgálta, és numerikusan igazolta a Pruisken és Khmelnitskii által jóslott viselkedést. Ezekből az eredményekből egy folyóiratcikk is készül.

Vizsgáltuk alacsonydimenziós korrelált elektronrendszerek dinamikus válaszfüggvényeit analitikusan és numerikusan, és azonosítottuk a jellegzetes vonalak eredetét [Phys. Rev. B 85, 165132 (2012); Phys. Rev. B 84, 045112 (2011)].

A multiferroikus Ba₂CoGe₂O₇ optikai (infravörös) és ESR gerjesztéseinek spektruma értékes információkat nyújt az anyag paramétereiről. A mágneses Co ionok tetrahedrális O környezetben helyezkednek el, az inverziós szimmetria hiánya lehetővé teszi a mágneses és elektromos terek egymásra hatását. Ennek következtében több gerjesztési módus jelenik meg a kísérleti spektrumokban mint egy egyszerű antiferromágnesben. A gerjesztési spektrumot 0-33T mágneses térben sikeresen tudtuk értelmezni egy egyszerű modell keretében, amely

figyelembe veszi a szimmetriák által megengedett csatolásokat a spin és az elektromos polarizáció között. A modell átlagtérmegoldása antiferromágneses spinkonfigurációt ad, amelyben a spinek hossza kisebb mint a teljes megengedett hossz (van kvadrupoláris komponensük is). Az átlagtér megoldásra alapozva, a multipoláris spin komponenseket is figyelembevevő bozonokkal kiterjesztett spinhulámelmélettel sikeresen reprodukáltuk a kísérletileg mért gerjesztési spektrumot [Phys. Rev. Lett. 108, 257203 (2012); Phys. Rev. B 86, 174428 (2012); Phys. Rev. B 84, 224419 (2011); Phys. Rev. B 84, 184427 (2011)].

A spin és pálya szabadsági fokokkal rendelkező Mott szigetelők legmagasabb szimmetriájú modellje az $SU(N)$ Heisenberg modell, amelyben mind az N komponens azonosan szerepel. Ugyanúgy ez a modell írja le optikai rácson csapdázott alkáli földfémek Mott állapotát is, ahol a F nukleáris spin adja a szabadsági fokokat (így $N=2F+1$). Numerikus és analitikus vizsgálataink alapján négyzetrácson az $SU(4)$ Heisenberg modellben először összefonódott dimer párok alakulnak ki, a dimereken effektív 6-dimenziós irreducibilis reprezentációt alkotnak a spinek. Ezek a párok később rövid távon antiferromágnesesen rendeződnek [P. Corboz et al., Phys. Rev. Lett. 107, 215301 (2011)]. Az $SU(4)$ Heisenberg modell hatszögrácson viszont sokkal érdekesebb: algebrai spin-pálya folyadék alakul ki, amely sem az $SU(4)$, sem a tércsoport szimmetriáit nem sérti [P. Corboz et al., Phys. Rev. X 2, 041013 (2012)]. Az $SU(3)$ illetve az $S=1$ bilineáris -bikvadratikus Heisenberg modell négyzetrácson három alrácson rendeződik [Phys. Rev. B 85, 125116 (2012); Phys. Rev. B 85, 140403(R) (2012)].

A konzorciális munka értékelése

A Penc Karlo vezette konzorciális társ pályázat önmagában a BME-s csoporthoz hasonlóan sikeres pályázati munkát mondhat magáénak. A két csoport között a következő együttműködési felületek jöttek létre:

- Penc Karlo és Zaránd Gergely közösen végezték Varjas Dániel MSc témavezetését, melynek eredményeképp egy második helyezett TDK munka és egy kiváló MSc diplomamunka született. Varjas Dániel azonban az MSc fokozat megszerzése után Berkeleyben folytatta PhD tanulmányait, így ez az együttműködés megszakadt.
- Legeza Örszel együttműködve több projektbe is belekezdünk, így például a rendezetlen Bose rendszerek ill. Bose-Fermi keverékek DMRG vizsgálatába, azonban ezek a projektek lassan haladtak előre, jelenleg is függőben vannak.
- A két csoport közötti konzultációk számos projekthez járultak hozzá közvetett vagy közvetlen módon. A BME-n folytatott DM-NRG fejlesztések illetve a Wiegner csoport DMRG fejlesztései sok szempontból segítették egymást, és egészen biztos, hogy a két csoport közötti együttműködés a konzorciális pályázat végétével sem fog megszűnni.

Összegezve elmondhatjuk, hogy bár kialakult együttműködés a konzorciális partnerek között, nem sikerült mégsem olyan erős együttműködést kialakítani, mint ahogy eredetileg szeretnénk volna. Ennek legfőbb oka véleményünk szerint az, hogy a konzorciumban résztvevő vezető

kutatók magyarországi anyagi nehézségeik miatt a projekt ideje alatt többször jelentős időre külföldön kényszerültek dolgozni. Ahogy az eredmények mutatják - ugyan ez nem hátráltatta lényegesen a BME ill. Wigner-SzFKI csoportok önálló pályázati munkáját, emiatt mégsem jöhetett létre a két csoport közötti *intenzív együttműködés* kialakításához elegendő *személyes kontaktus*.

Budapest, 2013. április 25.

Zaránd Gergely és Penc Karlo
témavezetők (BME)

Meléklet: Meghívott konferenciaelőadások és kollokviumok listája (BME)

2008

1. "Non-Fermi liquid states and quantum criticality in mesoscopic and nanoscale systems", Frankfurt, Theory Colloquium, June 2008. (Zaránd Gergely)
2. "Quantum criticality in coupled quantum dot systems", Regensburg, Spintronics Workshop, September 2008. (Zaránd Gergely)
3. "Dynamical correlations and conductance in mesoscopic systems", Coopenhagen, Quantum impurity workshop, July 2008. (Zaránd Gergely)
4. Power-law banded random matrices: a testing ground for the Anderson transition, 411. WE-Heraeus Seminar and School on „Network Models in Quantum Physics”, 2008. július 20-25. Bremen, Németország (Varga Imre).
5. Power-law banded random matrices: a testing ground for the Anderson transition, „Delocalisation Transition and Multifractality”, Workshop of „Mathematics and Physics of Anderson Localisation: 50 years after”, 2008. november 2-6, Gregynog Hall, Wales, UK (Varga Imre)

2009

6. Power-law banded random matrices: a testing ground for the Anderson transition, RMT-MEX09, Recent Achievements and New Challenges in Random Matrix Theory, and „Penetrating Physics by Random Matrices: Symposium in honour of Hans A. Weidenmüller” 2009. március 2-6, CICC Cuernavaca, Morelos, Mexico (Varga Imre)
7. "Disorder effects in interacting Bose-Fermi mixtures", Fermions 2009, Obergurgl, October 2009. (Zaránd Gergely)
8. "Geometrical phases and spin dynamics", Ortway Colloquium of ELTE, Budapest, December 2009. (Zaránd Gergely)
9. "Introduction to numerical renormalization group with symmetries", Lectures given on the International Workshop on New Renormalization Techniques in Condensed Matter Systems, Stellenbosch, South Africa, September, 2009. (Zaránd Gergely)
10. "Geometric spin decay in confined mesoscopic structures", Sakharov Conference, Moscow, May 2009. (Zaránd Gergely)
11. "Dynamical correlations in quantum dots", Mini-Workshop, Taiwan, January 2009. (Zaránd Gergely)

2010

12. Magnetic impurities, wave packet dynamics, transport in the presence of multifractal states, APCTP-POSTECH Advanced Materials Science Workshop on „Metal-Insulator Transitions in Disordered and Magnetic Systems, 2010. augusztus 30-szeptember 10, Pohang, Dél-Korea (Varga Imre).
13. „Non-Abelian geometrical spin relaxation and zero-temperature spin-dephasing”, Maratea, October 2010 (Zaránd Gergely)
14. "One-dimensional disordered Bose-Fermi mixtures in optical lattices", POSTECH-APCTP AMS Workshop, Pohang, September 2010 (Zaránd Gergely)

15. "Non-equilibrium noise spectrum through a quantum dot from functional renormalization group", Workshop on the physics of micro and nano scale systems, Ystad, Sweden, June 20-24, 2010 (Zaránd Gergely)
16. "Non-equilibrium frequency-dependent noise through quantum dots: a renormalization group approach", Conference on Computational Physics 2010, Trondheim, July 2010 (Zaránd Gergely)
17. "Quantum Phase Transitions in Optical Lattices", Plenary talk on the Statistical Physics Day, Budapest, March 2010 (Zaránd Gergely)

2011

18. Geometrical spin relaxation and spin-pumping , TU Karlsruhe, Theory Colloquium, December 2011 (Zaránd Gergely)
19. Geometrical spin relaxation and spin-pumping , TU Dresden, Theory Colloquium, November 2011 (Zaránd Gergely)
20. Quantum Noise of a Carbon Nanotube Quantum Dot in the Kondo Regime, SFB 658 Symposium on Transport through molecules, Berlin, October 2011 (Zaránd Gergely)
21. „Exotic correlated quantum phases of cold atomic gases: color superfluidity and "baryon" formation", Dahlem Center Colloquium, July 2011 (Zaránd Gergely)
22. „Spin current spectra of correlated quantum dots", Workshop on Nonlinear Spin and Charge Transport Through Nanoscopic Systems, Mallorca , June 2011 (Zaránd Gergely)
23. „Non-equilibrium noise spectrum through a quantum dot", QIMP11 Workshop, Dresden, June 2011 (Zaránd Gergely)

2012

24. Multifraktál állapotok az Anderson-féle fém-szigetelő átalakulásnál, Ortway kolloquium, 2012. április 19. (Varga Imre).
25. Optically engineering the topological properties of a spin Hall insulator, Topology and Correlation workshop, Drezda, 2012 május 2-4 (Dóra Balázs)
26. Cavity-coupled strongly correlated nanodevices, QD2012 conference, Chernogolovka, September 2012 (Zaránd Gergely)
27. Adiabatic to sudden interaction quench in a Luttinger liquid . Workshop on the dynamics and asymptotics in the Dicke model and quantum networks, Mátraháza, May 2012 (Zaránd Gergely)
28. "From shot noise to quantum noise", Ortway Kollokvium, May 2012 (Zaránd Gergely)