



M Ű E G Y E T E M 1 7 8 2

TDK DOLGOZAT

Termális állapotok modellezése tóruszon, külső homogén mágneses térben

Galambos Tamás

Konzulens: Tőke Csaba
Egyetemi docens
BME Fizika Intézet
Elméleti Fizika Tanszék

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem

2016.

Termális állapotok modellezése tóruszon, külső homogén mágneses térben

TDK Dolgozat

Galambos Tamás

(Témavezető: Dr. Tőke Csaba)

Absztrakt

A pályaintegrál Monte Carlo (PIMC) nem perturbatív, véges hőmérsékletű szimulációs módszer első sikereit cseppfolyós hélium vizsgálatában érte el.¹ Azóta kölcsönható bozonikus kvantum folyadékok széles paramétertartományban való vizsgálatát tette lehetővé, illetve kifejlesztették a fermion előjel problémát kezelni képes (de már nem egzakt) variánsait.²³

Távlati célom az, hogy alacsony hőmérsékleten, erős mágneses térbe helyezett kétdimenziós elektrongáz véges hőmérsékletű fázisdiagrammját tudjam vizsgálni kvantum Hall állapotú tartomány környékén. Ehhez a PIMC módszer mágneses térben használható verziójának kidolgozásán és egy ezt megvalósító szimulációs program létrehozásán dolgozok.

A PIMC technikában központi szerepet játszó mennyiség az egyrészecke termális sűrűségmátrix, mely mágneses tér jelenléte esetén több tulajdonságában lényegesen eltér a szokásosan használt nem mágneses verziótól. Például abban, hogy komplex értékű és így valószínűségi mintavételezése (MC) közvetlenül nem lehetséges, szükségessé válik az ún. fázis rögzítés.⁴ Továbbá a tömbi mennyiségek szimulációjához kompakt geometriájú, periodikus rendszerre van szükség, ezért a sűrűségmátrix lapos, általános szögű tóruszon érvényes alakja keresendő.

Jelen TDK dolgozat keretein belül bemutatom a fent megfogalmazottaknak megfelelő mágneses, kváziperiodikus termális sűrűségmátrix analitikus levezetését a ferdeszögű tóruszok egy széles családjára, megvizsgálom analitikusan és numerikusan a szimuláció szempontjából fontos tulajdonságait. Ismertetem azokat az egyszerűsítési lehetőségeket, melyekkel a numerikus számolás lényegesen gyorsítható. Végül megvizsgálom, hogy a pályamozgatásra használt „Bisection method”¹ mágneses esetben ideális mintavételezési eloszlásának általunk javasolt közelítése mennyire hatékony.

¹D. M. Ceperley, „Path integrals in the theory of condensed helium,” *Rev. Mod. Phys.* **67** (Apr, 1995) 279–355. <http://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.67.279>

²D. M. Ceperley, „Path-integral calculations of normal liquid ³He,” *Phys. Rev. Lett.* **69** (Jul, 1992) 331–334. <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.69.331>

³T. Schoof, S. Groth, J. Vorberger, and M. Bonitz, „*Ab Initio* thermodynamic results for the degenerate electron gas at finite temperature,” *Phys. Rev. Lett.* **115** (Sep, 2015) 130402. <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.115.130402>

⁴V. Akkineni, *Pairing and superfluid properties of polarized dilute fermion gases in the BCS-BEC crossover*. PhD thesis, University of Illinois at Urbana-Champaign, 2008

Simulation of thermal states on the torus in uniform external magnetic field

TDK⁵ study

Galambos Tamás

(Supervisor: Dr. Tóke Csaba)

Abstract

The Path Integral Monte Carlo (PIMC) non-perturbative, finite temperature simulation method reached its first successes in the study of liquid helium.⁶ It has contributed majorly ever since to the investigation of interacting Bose quantum liquids within a wide parameter range, and variants treating the fermion sign problem (not exact methods anymore) have also been developed.⁷⁸

My long-term goal is to be able to study the finite temperature phase diagram of the two dimensional electron gas (2DEG) at low temperature and in strong magnetic field, near the Quantum Hall regime. Therefore, I am developing a version of PIMC applicable in the presence of a magnetic field, and I am working also on a simulation code implementing it.

The single particle thermal density matrix plays a central role in the PIMC technique and it differs in many features from its non-magnetic version when a magnetic field present. For example it becomes complex-valued and its direct probabilistic sampling (MC) is no longer possible, phase-fixing⁹ becomes necessary. Furthermore, in order to simulate bulk properties, one needs a compact geometric, periodic system. Therefore, the form of the density matrix on a flat torus with arbitrary angle is needed.

In this TDK paper I present the derivation of the magnetic, quasi-periodic single particle thermal density matrix for a wide class of angled tori, I examine analytically and numerically its important properties with regard to the simulation. I expound those simplification possibilities that could accelerate the numerical calculations. In the end, I investigate the efficiency of our proposed approximation of the ideal magnetic sampling distribution for the path resampling “Bisection” method.⁶

⁵Scientific Students’ Association

⁶D. M. Ceperley, „Path integrals in the theory of condensed helium,” *Rev. Mod. Phys.* **67** (Apr, 1995) 279–355. <http://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.67.279>

⁷D. M. Ceperley, „Path-integral calculations of normal liquid ³He,” *Phys. Rev. Lett.* **69** (Jul, 1992) 331–334. <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.69.331>

⁸T. Schoof, S. Groth, J. Vorberger, and M. Bonitz, „*Ab Initio* thermodynamic results for the degenerate electron gas at finite temperature,” *Phys. Rev. Lett.* **115** (Sep, 2015) 130402. <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.115.130402>

⁹V. Akkineni, *Pairing and superfluid properties of polarized dilute fermion gases in the BCS-BEC crossover*. PhD thesis, University of Illinois at Urbana-Champaign, 2008

Köszönetnyilvánítás

Köszönöm témavezetőmnek, Tóke Csabának az együttműködés lehetőségét, útmutatását, rengeteg hasznos tanácsát. Hálás vagyok mind munkám során, mind a dolgozat megírásában nyújtott alapos, időt nem sajnáló segítségéért, a rendszeres konzultációkért, a többszöri alapos átolvasásért. Külön köszönöm a nyári szakmai gyakorlat során való intenzív együttműködést, mely nagyban hozzájárult ahhoz, hogy ezt a dolgozatot megírhasam.

Köszönet illeti az Elméleti Fizika Tanszéket és különösen Udvardi Lászlót, hogy a tanszéki klaszterhez hozzáférést és használatához segítséget adott.

Tartalomjegyzék

Tartalomjegyzék	1
1. Bevezető	2
2. A pályaintegrál Monte Carlo (PIMC) módszer alapjai	4
2.1. A pályaintegrál formalizmus	4
2.2. Monte Carlo	7
2.3. Előjelprobléma, nódus-, fázisfixálás	8
3. Egyrészeske termális sűrűségmátrix	9
3.1. A sűrűségmátrix	9
3.2. Szabad részeske szabad határfeltételekkel	10
3.3. Töltött részeske mágneses térben szabad határfeltételekkel	11
3.4. Szabad részeske periodikus határfeltételekkel	13
3.5. Mágneses egyrészeske termális sűrűségmátrix tóruszon	14
3.5.1. A mágneses tér és a geometria adta megfontolások	14
3.5.2. Egyrészeske sajátállapotok	17
3.5.3. A termális sűrűségmátrix	19
3.5.4. Transzlációs tulajdonságok	20
3.5.5. A $\beta \rightarrow 0$ és $\beta \rightarrow \infty$ viselkedés	23
3.5.6. Zérusok	24
3.5.7. Numerikus megfontolások, egyszerűsítési lehetőségek	28
3.5.8. Véges méret effektus	31
4. Fázisfixálás, mintavételezés	33
4.1. Fázisfixálás	33
4.2. Mintavételezés	35
4.2.1. Általános megfontolások, klasszikus technika	35
4.2.2. Nem-mágneses, periodikus eset	36
4.2.3. Mágneses, periodikus eset	38
5. Összefoglaló	45
5.1. kitekintés	45
A. Jacobi elliptikus Theta függvények	46
Irodalomjegyzék	50

1. fejezet

Bevezető

A fizika kondenzált anyagokkal foglalkozó területének egyik központi és ma is aktívan kutatott kérdésköre a kvantumos jelenségeket mutató, erősen kölcsönható sokrészecske-rendszerek vizsgálata. A probléma bonyolultságának köszönhetően az analitikus leírás mellett óriási szerep jut e rendszerek numerikus módszerekkel való kezelésének, szimulációjának. E technikák egy nagy csoportja az ún. kvantum Monte Carlo módszerek, melyek közös vonása, hogy a vizsgálandó kvantum sokrészecske-rendszer megfelelő leírásából származó sokdimenziós integrálokat Monte Carlo módszerrel kiértékelve szolgáltatják a rendszerre jellemző fizikai mennyiségek becsléseit. A kvantum Monte Carlo módszerek közül kiemelkedő az általánosan is használt pályaintegrál Monte Carlo (PIMC) technika abból a szempontból, hogy egyensúlyi rendszerek véges hőmérsékleten való vizsgálatára ad lehetőséget. A PIMC egy széleskörben alkalmazott módszer, első nagy sikereit cseppfolyós hélium vizsgálatában érte el [1] és azóta kölcsönható bozonikus kvantum folyadékok széles paramétertartományban való vizsgálatát tette lehetővé, illetve kifejlesztették a fermion előjel problémát kezelni képes (de már nem egzakt) variánsait [2], [3].

Célom alacsony hőmérsékleten, erős mágneses térbe helyezett kétdimenziós elektron-gáz véges hőmérsékletű fázisdiagrammjának vizsgálata kvantum Hall állapotú tartomány környékén. Hogy ez a vizsgálat pályaintegrál Monte Carlo módszerrel kivitelezhető legyen, a klasszikus technika néhány alapvető részletén kell komolyabb változtatást eszközölni. A módszerben központi szerepet játszó egyrészecske termális sűrűségmátrix a mágneses tér jelenléte miatt erősen módosul, melynek legszembetűnőbb aspektusa, hogy valós értékűről komplex értékűre változik. Így az amúgy is fellépő fermion előjel probléma helyett egy tetszőleges komplex fázissal rendelkező mennyiség mintavételezésévé bonyolódik a feladat. E probléma megoldására szolgál az ún. fázisrögzítés módszere [4], mely azonban a fermion probléma kezelésekor hasz-

nálatos nódus-fixáláshoz hasonlóan közelítést visz az amúgy tetszőlegesen pontossá tehető technikába.

További szempont, hogy makroszkópikus rendszert, tömbi egyensúlyi tulajdonságokat szeretnék vizsgálni. Ez szimuláció szempontjából azt jelenti, hogy mivel valóban makroszkópikus méretű rendszert szimulálni számítástechnikai korlátok miatt gyakorlatilag lehetetlen, véges méretű, de periodikus határfeltételekkel végtelenné tett rendszert kell szimulációsan megvalósítani. Ilyen kompakt geometria egy általános ferdeszögű lapostórusz, vagyis paralelogramma, melynek szemközti oldalait azonosítjuk. E geometriában az egyrészecske sűrűségmátrix közelíthető a végtelen síkra érvényes, könnyen kiszámítható alakjával amíg a részecskék termális hullámhossza nem összemérhető a paralelogramma cellaméretével, utána azonban a periodikus képek hatása jelentőssé válik. Mivel a szimulációban számos okból adódik hiba a számított fizikai mennyiségekhez (Fázisfixálás, végesméret effektus, kölcsönhatás kezelése, statisztikus szórás), fontos, hogy amire lehetőség van, egzaktul legyen kiszámítva és beépítve a technikába. Mindezeket megfontolva szükséges a mágneses egyrészecske termális sűrűségmátrix általános szögű lapostóruszon érvényes alakjának megtalálása, melyet az irodalomban nem sikerült fellelni.

E TDK dolgozatban elsőként ismertetem a klasszikus PIMC technika alapjait. Majd bemutatom a keresett sűrűségmátrix alakjának levezetését igen általános feltételek mellett, vizsgálom e mennyiség szimulációs szempontból érdekes tulajdonságait, paramétereiktől való függését, mind analitikusan, mind a korábban általam írt klasszikus PIMC kód bázis továbbfejlesztésének, kiegészítésének köszönhetően numerikusan. Ezután ismertetem a fázisfixálás módszerét és annak következményét a Monte Carlo technikával mintavételezendő mennyiségekre. Végül a klasszikus technikában alkalmazott pályamintavételezési módszer periodikus és mágneses-periodikus esetben alkalmazandó, általam fejlesztett, javítását mutatom be és demonstrálom hatékonyságát. Befejezésképpen összefoglalom az e dolgozat keretében megvalósult és a még elvégzendő fejlesztéseket.

2. fejezet

A pályaintegrál Monte Carlo (PIMC) módszer alapjai

E fejezetben egy rövid és teljességre nem törekvő bemutatását szeretném adni a pályaintegrál Monte Carlo (*Path Integral Monte Carlo*) módszer elméleti alapjainak és működésének. Jelen dolgozatnak nem témája a hagyományos módszer vizsgálata, az itt leírtak kizárólag a későbbiek megértését, kontextusba helyezését szolgálják. Az alap technika részletesebb ismertetése megtalálható BSc szakdolgozatomban [5], illetve a terület alapirodalmának számító [1] D. Ceperley cikkben.

2.1. A pályaintegrál formalizmus

Dirac [6] nyomán Feynman [7] adta a kvantummechanika pályaintegrállal való ekvivalens megfogalmazását, melynek lényege, hogy egy időeltolás-invariáns és spinfüggetlen $\hat{\mathcal{H}}$ Hamilton-operátorral leírható kvantumrendszer

$$U(t) = \exp\left(-\frac{it\hat{\mathcal{H}}}{\hbar}\right) \quad (2.1)$$

propagátorának két konfigurációs-térbeli, \mathbf{R} és \mathbf{R}' rendszerkoordinátával jellemzett állapotára vett $U(\mathbf{R}, \mathbf{R}', t) = \langle \mathbf{R}' | U(t) | \mathbf{R} \rangle$ mátrixeleme előáll

$$U(\mathbf{R}, \mathbf{R}', t) = \int \mathcal{D}\mathbf{R}(t') e^{\frac{i}{\hbar} S[\mathbf{R}(t')]} \quad (2.2)$$

alakban, ahol az integrálás a konfigurációs tér minden \mathbf{R} kezdetű és \mathbf{R}' végű, t idejű pályájára történik, és az egyes pályák olyan fázissal interferálnak, mint a klasszikusként kezelt rendszer adott pályán való végighaladásával kapott S hatás. Ha áttérünk egy Wick-forgatással képzetes $t = -i\beta/\hbar$ időre, úgy, hogy $\beta = 1/k_B T$ az inverz hő-

mérséklet, (2.1) éppen a (3.3) termális sűrűségoperátort adja, mely a 3.1 részben leírtak szerint hordozza a termodinamikai egyensúlyban lévő rendszerről az egyensúlyi várható értékek és lineáris válasz erejéig dinamikai mennyiségek megszerzéséhez szükséges összes információt. Kapjuk tehát, hogy

$$\begin{aligned}\rho(\mathbf{R}, \mathbf{R}', \beta) &= \int \mathcal{D}\mathbf{R}(\tau) \exp(-S_E[\mathbf{R}(\tau)]) = \\ &= \lim_{M \rightarrow \infty} \int d\mathbf{R}_1 d\mathbf{R}_2 \cdots d\mathbf{R}_{M-1} \exp\left(-\sum_{m=1}^M S^m\right),\end{aligned}\quad (2.3)$$

ahol S_E az ún. Euklideszi-hatás (a benne szereplő Lagrange-függvényben a potenciális energia negatív helyett pozitív előjellel szerepel), valamint

$$S^m = -\ln(\rho(\mathbf{R}_{m-1}, \mathbf{R}_m, \tau)), \quad \tau = \frac{\beta}{M}, \quad \mathbf{R}_0 = \mathbf{R}, \quad \mathbf{R}_M = \mathbf{R}'. \quad (2.4)$$

Megjegyzendő, hogy (2.3) egyenlőség a határértékképzés minden lépésére, M bármely értékére egzaktul teljesül, nem csak aszimptotikusan, ez a (3.6) szorzattulajdonság alapján látható be. Minden véges M -re tehát egy M -élű törött vonal töréspontjait a konfigurációs térben mozgatva integrálunk. Az m és $m-1$ indexekkel jellemzett mennyiségeket az m -edik linkhez tartozó mennyiségeknek, az \mathbf{R}_m rendszerkoordinátával jellemzett konfigurációs térbeli pontot pedig az m -edik időszletnek nevezzük. Mi az előnye, hogy felbontottuk az alacsonyhőmérsékletű (β nagy) sűrűségmátrixot magasabb hőmérsékletű sűrűségmátrixok sokszoros konvolúciójára, ha az eredeti kölcsönható sokrészeske rendszer sűrűségmátrixának alakját továbbra se ismerjük? A Baker-Campbell-Hausdorff illetve Suzuki-Trotter formulák szerint (ha a Hamilton-operátor $\hat{\mathcal{H}} = \hat{T} + \hat{V}$ alakú, kinetikus- és potenciális energia operátorokkal, melyek általában nem cserélnek fel):

$$e^{-\tau(\hat{T}+\hat{V})} = e^{-\tau\hat{T}} e^{-\tau\hat{V}} e^{-\frac{\tau^2}{2}[\hat{T},\hat{V}]} \left(1 + \mathcal{O}(\tau^3)\right) = e^{-\tau\hat{T}} e^{-\tau\hat{V}} \left(1 + \mathcal{O}(\tau^2)\right), \quad (2.5)$$

$$e^{-\beta(\hat{T}+\hat{V})} = \lim_{M \rightarrow \infty} \left(e^{-\frac{\beta}{M}\hat{T}} e^{-\frac{\beta}{M}\hat{V}}\right)^M, \quad (2.6)$$

elsőrendben tehát a magashőmérsékletű sűrűségmátrix

$$\rho(\mathbf{R}_{m-1}, \mathbf{R}_m, \tau) \approx \int d\mathbf{R}' \langle \mathbf{R}_{m-1} | e^{-\tau\hat{T}} | \mathbf{R}' \rangle \langle \mathbf{R}' | e^{-\tau\hat{V}} | \mathbf{R}_m \rangle \quad (2.7)$$

alakú, melyet primitív közelítésnek hívunk [1]. Általánosabban az $S^m = K^m + U^m$ felbontást alkalmazzuk, ahol a K^m kinetikus hatásban leválasztjuk a kölcsönhatás-

mentes rendszert:

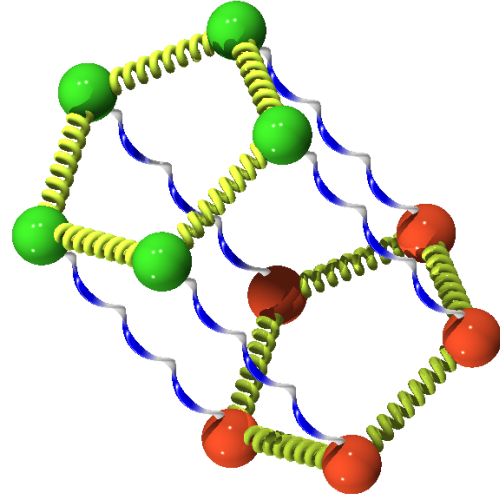
$$K^m = -\ln(\rho_0(\mathbf{R}_{\mathbf{m}-1}, \mathbf{R}_{\mathbf{m}}, \tau)), \quad U^m = S^m - K^m, \quad (2.8)$$

ahol ρ_0 a kölcsönhatásmentes rendszer sűrűségmátrixa, mely a 3. fejezet fő vizsgálati tárgyát képezi, U^m kölcsön-hatás pedig primitív közelítésben $U^m = \tau V(\mathbf{R}_{\mathbf{m}})$, de számos szofisztikáltabb módszerrel [1] lehet e közelítést javítani. Legegyszerűbb esetben, egyforma részecskékre, primitív közelítést alkalmazva és a szabad sűrűségmátrixot (3.13) egyenlet alapján számítva a link-hatás

$$S^m = \frac{DN}{2} \ln(4\pi\lambda\tau) + \frac{(\mathbf{R}_{\mathbf{m}} - \mathbf{R}_{\mathbf{m}-1})^2}{4\lambda\tau} + \tau V(\mathbf{R}_{\mathbf{m}}) \quad (2.9)$$

alakú, ahol D a rendszer térbeli dimenziója, N a részecskék száma és $\lambda = \hbar^2/2m$.

Ezt az alakot kombinálva a sűrűségmátrix (2.3) alakjával adódik a Feynman [8] által megfogalmazott klasszikus analógia, mely szerint a kvantum rendszer sűrűségmátrixa segítségével számítható egyensúlyi mennyiségek (melyek kiszámítása (3.1) szerint magába foglal egy nyom-képzést és így a két végpont \mathbf{R} és \mathbf{R}' azonosítását) megkaphatóak egy klasszikus rendszer konfigurációs terében egy Boltzmann-faktor szerinti valószínűségi sűrűséggel képzett várható értéként. A klasszikus fizikai rendszer (2.9) alakja szerint egy különle-



2.1. ábra. PIMC klasszikus analógia¹

ges gyűrűpolimerekből álló rendszer. Minden valóságos részecskének egy M részecskéből álló gyűrűpolimer felel meg, melyben az élek harmonikus potenciált biztosító rugók, a polimer egyes részecskéi az adott valóságos részecske különböző időszelletei. A polimerek között olyan a kölcsönhatás, mint amit V leír, de csak az azonos időszelethez tartozó részecskék között hat, mint azt a 2.1 ábra szemlélteti.

¹Forrás: http://www.sklogwiki.org/SklogWiki/images/7/7e/5bead_pathIntegra_ij.png

2.2. Monte Carlo

A klasszikus rendszer sokdimenziós konfigurációs térben számítandó integrálok kiértékelésére kiválóan alkalmas a széleskörben használt Metropolis Monte Carlo algoritmus [9]. Ennek lényege, hogy a konfigurációs térbeli egyensúlyi valószínűségi eloszlást mintavételezi egy Markov-lánc megkonstruálásával és ezen számolja a vizsgálandó fizikai mennyiség becslőjének átlagát. A Markov-lánc tetszőleges s_0 konfigurációból indítható és feltételez egy dinamikát, melyet a két különböző konfiguráció közti átmeneti valószínűség, $P(s \rightarrow s')$ ír le. Ha ez a dinamika ergodikus és teljesül rá a

$$\pi(s) P(s \rightarrow s') = \pi(s') P(s' \rightarrow s) \quad (2.10)$$

részletes egyensúly, ahol $\pi(s)$ az s konfiguráció egyensúlyi valószínűsége, a Markov-láncbeli s_i állapotok eloszlása az egyensúlyi eloszláshoz fog konvergálni. A Metropolis algoritmus az átmeneti valószínűséget két részre bontja:

$$P(s \rightarrow s') = T(s \rightarrow s') A(s \rightarrow s'), \quad (2.11)$$

melyben $T(s \rightarrow s')$ írja le, hogyan mintavételezzük a következő konfigurációt az aktuális alapján és $A(s \rightarrow s')$ annak a valószínűsége, hogy ezt a javasolt átmenetet elfogadjuk. Amennyiben például a szokásos konvenció szerint

$$A(s \rightarrow s') = \min \left\{ 1, \frac{T(s' \rightarrow s) \pi(s')}{T(s \rightarrow s') \pi(s)} \right\} \quad (2.12)$$

választással élünk, teljesül a részletes egyensúly, várhatóan bizonyos számú lépés után nagyjából elérjük az egyensúlyi eloszlást, persze e konvergencia sebességének növelése illetve az ergodicitást javító technikák konstruálása további megfontolásokat igényel [1]. A hatékonyság egyik alapkritériuma, hogy az elfogadás valószínűsége nagy legyen, vagyis, hogy egy lépésben az új konfigurációt az egyensúlyihoz közeli eloszlásból tudjuk választani. Tegyük fel, hogy olyan a dinamika, hogy egyszerre egy \mathbf{R}_i időszelvet mozgatunk, a polimerek maradékát, így az \mathbf{R}_{i-1} és \mathbf{R}_{i+1} szomszédokat is helybenhagyva. Ekkor egységnyi az elfogadási valószínűség, ha az új \mathbf{R}'_i konfigurációt

$$T(\mathbf{R}_i \rightarrow \mathbf{R}'_i) = \frac{\rho(\mathbf{R}_{i-1}, \mathbf{R}'_i, \tau) \rho(\mathbf{R}'_i, \mathbf{R}_{i+1}, \tau)}{\int d\mathbf{R}'_i \rho(\mathbf{R}_{i-1}, \mathbf{R}'_i, \tau) \rho(\mathbf{R}'_i, \mathbf{R}_{i+1}, \tau)} = \frac{\rho(\mathbf{R}_{i-1}, \mathbf{R}'_i, \tau) \rho(\mathbf{R}'_i, \mathbf{R}_{i+1}, \tau)}{\rho(\mathbf{R}_{i-1}, \mathbf{R}_{i+1}, 2\tau)} \quad (2.13)$$

mintavételezéssel választjuk (nyilván, ha ezt egzaktul meg tudnánk tenni, nem lenne szükség a szimulációra). Ezt nevezik *Heat Bath Transition Rule*-nak [1]. Ennek minél

jobb közelítésével foglalkozik a 4.2. rész.

2.3. Előjelprobléma, nódus-, fázisfixálás

Amennyiben a rendszer részecskéi nem megkülönböztethetők, a sűrűségmátrix alakja

$$\rho_{B/F}(\mathbf{R}, \mathbf{R}', \beta) = \frac{1}{N!} \sum_{\mathcal{P}} (\pm 1)^{\sigma(\mathcal{P})} \int \cdots \int d\mathbf{R}_1 d\mathbf{R}_2 \cdots d\mathbf{R}_{M-1} \rho(\mathbf{R}, \mathbf{R}_1, \tau) \rho(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2, \tau) \cdots \rho(\mathbf{R}_{M-1}, \mathcal{P}\mathbf{R}', \tau) \quad (2.14)$$

lesz, ahol B jelöli a bozonikus, F a fermionikus esetet. Így a térbeli mintavételezésen kívül a permutációs tér hatékony bejárását is meg kell oldani, a klasszikus analógiában ez a zárt gyűrűk átkereszteződésének feleltethető meg. Míg bozonok esetén egy mindenhol pozitív eloszlást kell mintavételezni, addig fermionok esetén a sűrűség pozitív és negatív tagok között váltakozik, mely azt eredményezi, hogy az integrálok direkt numerikus kiértékelése lehetetlenné válik, mivel a nagy, különböző előjelű tagok összegéből számított nagy hibájú mennyiségek hibacsökkentése hosszabb átlagolással a rendszerkoordináta dimenziójával exponenciálisan skálázódva lesz egyre kevésbé hatékony. Ennek kezelésére találták ki és alkalmazzák az ún. nódusfixálás technikáját [2],[3], melyben valamilyen feltételezések alapján kitalálják milyen lehet az egzakt sűrűségmátrix csomófelületeinek szerkezete, és utána nem engedik a szimulációt kimenni a kezdőkonfiguráció által kijelölt és a feltételezett csomósíkokkal határolt tartományból. Ennek a technikának a fő hátránya, hogy az eddig az M paraméterrel tetszőleges pontosságúvá tehető, jól kontrollált közelítést adó alapmódszert egy nem kontrollált közelítéssé teszi, nehéz ellenőrizni a nódusszerkezet megfelelő választását.

Ha a sűrűségmátrix komplex értékű, mint például mágneses esetben, az előjelprobléma egy tetszőleges fázis problémájává válik, melyet a valószínűségi kiértékeléshez szintén valahogy rögzíteni kell, ennek kérdésével foglalkozik a 4.1 rész.

3. fejezet

Egyrészesecske termális sűrűségmátrix

3.1. A sűrűségmátrix

Környezetükkel összeköttetésben álló kvantumrendszerek esetén a szokásos hullámfüggvények nem tudják kimerítően jellemezni a rendszer állapotát. Ennek oka, hogy a teljes zárt rendszert (rendszer+környezet) jellemző állapotból a rendszer vizsgálatakor kiprojektálódnak a környezet állapotai, ami különböző statisztikai súlyokat ad a rendszer állapotainak, így abban egy fizikai mennyiség várható értékét nem egyetlen hullámfüggvénnyel való várhatóérték-képzéssel kapjuk, hanem ilyenek valószínűségekké súlyozott összegeként. A vizsgált rendszerünk általában kevert állapotban van, vagyis az előbbi összeg nem egytagú. Az ilyen kevert állapotban lévő rendszerek jellemzésére alkalmas a sűrűségoperátor $\hat{\rho}$, melynek segítségével egy \hat{O} operátorhoz tartozó fizikai mennyiség várható értéke

$$\langle \hat{O} \rangle = \frac{\text{Tr} \{ \hat{\rho} \hat{O} \}}{\text{Tr} \{ \hat{\rho} \}}. \quad (3.1)$$

A sűrűségoperátort a rendszer tetszőleges bázisán kifejtve kapjuk az adott bázishoz tartozó sűrűségmátrixot

$$\rho_{i,j} : \hat{\rho} = \sum_{i,j} \rho_{i,j} |i\rangle \langle j|. \quad (3.2)$$

Minket az a speciális eset érdekel, mikor a vizsgált rendszer a környezetével csak termikus kapcsolatban áll, és egyensúlyban van. Ekkor statisztikusan az állapot egy kanonikus sokaságként kezelhető. Ha a vizsgált rendszer állapotait a rendszer hermitikus Hamilton-operátorának $\hat{\mathcal{H}}$ ortonormált bázisán $\{\Psi_i\}_i$ fejtjük ki és $\hat{\mathcal{H}}\Psi_i = E_i\Psi_i$, akkor az egyes állapotok megjelenési valószínűsége $\exp(-\beta E_i)$ Boltzmann-

faktorral lesz arányos, ahol $\beta = 1/k_B T$ az inverz hőmérséklet. Így a rendszert leíró termális sűrűségoperátor alakja

$$\hat{\rho} = \sum_i e^{-\beta E_i} |\Psi_i\rangle \langle \Psi_i| = e^{-\beta \hat{H}}, \quad (3.3)$$

mely utóbbi alak teljesen bázisfüggetlen. Ez a sűrűségmátrix nem normált, ezért a várható értékek számolásához, mely az egyes állapotokban kapott várható értékek valószínűségekkel súlyozott összege, be kell vezetni a normáló állapotösszeget

$$Z = \text{Tr} \{ \hat{\rho} \} = \sum_i e^{-\beta E_i}, \quad (3.4)$$

melynek segítségével bármilyen fizikai mennyiség egyensúlyi várható értéke (3.1) alapján számolható. A pályaintegrál Monte Carlo technika használatához, mint a 2. fejezetben láttuk, a mennyiségek pozícióreprezentációban adódó alakjára van szükségünk, így a termális sűrűségmátrix, melyet két folytonos $N \cdot d$ dimenziós (N részecske d -dimenziós térben) \mathbf{R} és \mathbf{R}' rendszerkoordináta és β paraméterez,

$$\rho(\mathbf{R}, \mathbf{R}', \beta) = \sum_i e^{-\beta E_i} \Psi_i^*(\mathbf{R}') \Psi_i(\mathbf{R}) \quad (3.5)$$

alakú lesz. A sűrűségoperátor bázisfüggetlen (3.3) alakját figyelembe véve könnyen belátható (egy teljes bázis beillesztésével) a sűrűségmátrix pályaintegrál Monte Carlo szempontjából rendkívül fontos szorzattulajdonsága: minden $\beta = \beta_1 + \beta_2$ felbontásra igaz, hogy

$$\rho(\mathbf{R}, \mathbf{R}', \beta) = \int d\mathbf{R}_1 \rho(\mathbf{R}, \mathbf{R}_1, \beta_1) \rho(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}', \beta_2). \quad (3.6)$$

A 4.1. fejezetben leírtak alapján (illetve (3.3) és (3.5) egyenletekből is láthatóan) a termális sűrűségmátrixnak, mint képzetes idejű propagátornak β képzetes időbeli diffúzív fejlődését a Bloch-egyenlet írja le:

$$\frac{d}{d\beta} \rho(\mathbf{R}, \mathbf{R}', \beta) = -\hat{H} \rho(\mathbf{R}, \mathbf{R}', \beta) \quad (3.7)$$

$$\rho(\mathbf{R}, \mathbf{R}', 0) = \delta(\mathbf{R} - \mathbf{R}') \quad (3.8)$$

3.2. Szabad részecske szabad határfeltételekkel

Tekintsük elsőként a legegyszerűbb esetet, mikor a nem-relativisztikus, egyforma, megkülönböztethető részecskék nem hatnak kölcsön és szabadon mozoghatnak a

térben, vagyis rendszerünket a

$$\hat{\mathcal{H}} = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{n=1}^N \sum_{i=1}^d \partial_{n,i}^2 \quad (3.9)$$

Hamilton-operátor írja le. Látható, hogy mind részecskékben, mind dimenzióban szétesik a probléma, elég egy dimenzióban az egy részecske sűrűségmátrixát ismereni, ez egyébként a kiinduló alapmennyisége a legtöbb pályaintegrál Monte Carlo módszernek [1].

A Hamilton-operátor sajátállapotai és a hozzájuk tartozó sajátértékek a végtelen vonalon ($k \in (-\infty, \infty)$) folytonos spektrummal)

$$\Psi(r, k) = \frac{e^{ikr}}{\sqrt{2\pi}} \quad (3.10)$$

$$E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (3.11)$$

alakúak, ahol az állapotok normálása a teljességből következik:

$$\int dk \Psi^*(r', k) \Psi(r, k) = \delta(r - r'). \quad (3.12)$$

Ebből a termális sűrűségmátrix, ha $\lambda = \frac{\hbar^2}{2m}$

$$\rho(r, r', \beta) = \frac{1}{2\pi} \int dk \exp\left(-\beta \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + ik(r - r')\right) = \frac{1}{\sqrt{4\pi\lambda\beta}} e^{-\frac{(r-r')^2}{4\lambda\beta}}, \quad (3.13)$$

ami könnyen beláthatóan teljesíti a (3.7)és (3.8) Bloch-egyenletet és a β képzetes időben történő diffúzió Green-függvénye. Ez a megoldás véges rendszerre (L oldalú szimulációs doboz) is kielégítő tud lenni, mindaddig, míg $L \gg \sqrt{\lambda\beta}$, ha ez nem teljesül, periodikus határfeltételeket alkalmazva kell a sűrűségmátrixot meghatározni (lásd. 3.4).

3.3. Töltött részecske mágneses térben szabad határfeltételekkel

Ebben az esetben is egyrészecske mennyiségeket keresünk, még hozzá célkitűzéseinknek megfelelően $d = 2$ dimenzióban, úgy hogy a végtelen $x - y$ síkon egy $\mathbf{B} = B\hat{\mathbf{z}}$ homogén mágneses tér hat (a probléma $d = 3$ dimenzióra triviálisan általánosodik).

Ekkor az egyrészecske Hamilton-operátor alakja

$$\hat{\mathcal{H}} = \frac{(\mathbf{p} + q\mathbf{A})^2}{2m}, \quad (3.14)$$

ahol q esetünkben $q = -e$, mivel elektronokat szeretnénk vizsgálni és \mathbf{A} a mágneses teret jellemző vektorpotenciál, melyre $\text{rot}\mathbf{A} = \mathbf{B}$ és a továbbiakban mindig az alábbi Landau-mérték választást használjuk:

$$\mathbf{A} = -By\hat{\mathbf{x}}. \quad (3.15)$$

A szokásos megoldás menetét követve e választással a Hamilton-operátor alakja koordinátákban felbontva

$$\hat{\mathcal{H}} = \frac{(p_x - eBy)^2}{2m} + \frac{p_y^2}{2m}, \quad (3.16)$$

amiben nem szerepel az x koordináta, így a szorzathullámfüggvény x -irányú komponensét kereshetjük ismét (3.10) momentum-sajátfüggvény alakban, ezt behelyettesítve a Schrödinger-egyenletbe a szorzathullámfüggvény y -komponensére

$$\left(\frac{p_y^2}{2m} + \frac{e^2 B^2}{2m} \left(y - \frac{\hbar}{eB} k \right)^2 \right) Y_{n,k}(y) = E_{n,k} Y(y) \quad (3.17)$$

alakot kapjuk, mely egy eltolt nyugalmi helyzetű harmonikus oszcillátor egyenlete (az n kvantumszámot megelőlegezve a Landau-szinteknek)

$$\omega_c = \frac{eB}{m} \quad \ell = \sqrt{\frac{\hbar}{eB}} \quad (3.18)$$

ciklotron-frekvenciával és mágneses hosszal. Ennek megoldása ismert, a sajátfüggvények, illetve sajátenergiák:

$$\eta_{n,k}(x, y) = \frac{\exp(ikx)}{\sqrt{2\pi \cdot \sqrt{\pi} \cdot \ell \cdot 2^n \cdot n!}} \exp\left(-\frac{(y - \ell^2 k)^2}{2\ell^2}\right) H_n\left(\frac{y - \ell^2 k}{\ell}\right), \quad (3.19)$$

$$E_{n,k} = \hbar\omega_c \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad n \in \mathbb{N}, \quad k \in \mathbb{R}, \quad (3.20)$$

ahol H_n az n -edrendű Hermite-polinóm. Látható, hogy a Landau-szint energiája nem függ k -tól, végtelen síkon minden pálya végtelenül degenerált, ami persze egy közelítés, valójában minden fizikai rendszer véges méretű, mely diszkrétte teszi a k paramétert és végessé a degenerált állapotok számát (lásd. 3.5).

Ezek a Landau-pályák ortonormáltak, így a mágneses termális egyrészecske sűrű-

ségmátrix

$$\rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \beta) = \sum_{n=0}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dk \eta_{n,k}^*(x', y') \eta_{n,k}(x, y) \exp(-\beta E_{n,k}) \quad (3.21)$$

alakban számolható. Vezessük be az $u = \exp(-\beta \hbar \omega_c)$ mennyiséget. Mehler formuláját [10]

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_n(x) H_n(y)}{n!} \left(\frac{u}{2}\right)^n = \frac{1}{\sqrt{1-u^2}} \exp\left(-\frac{u^2(x^2 + y^2) - 2uxy}{(1-u^2)}\right) \quad (3.22)$$

felhasználva az n -re való összegzés elvégezhető, ami után a k -szerinti integrált is elemi módon számolhatjuk. Rendezés után megkapjuk a szabad határfeltételű, mágneses termális egyrészecske sűrűségmátrixot:

$$\rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \beta) = \frac{1}{2\pi\ell^2} \frac{\sqrt{u}}{1-u} \exp\left(-\frac{1}{4\ell^2} \frac{1+u}{1-u} |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^2 + \frac{i(x' - x)(y + y')}{2\ell^2}\right). \quad (3.23)$$

Alapvetően nagyon hasonlít ennek alakja az időtükrözésre szimmetrikus eset (3.13) alakjára, ez is egy képzetes időben történő diffúziót ír le, de értéke komplex, van benne egy mértékfüggő fázisfaktor, ami megtöri az eltolásinvarianciát (bár az abszolútértékre nem) és a diffúzió sebessége is megváltozik, míg nem-mágneses esetben a kiterjedés $\sigma(\beta) \sim \sqrt{\lambda\beta}$, addig mágneses esetben $\sigma(\beta) \sim \sqrt{\tanh\left(\frac{\beta\hbar\omega_c}{2}\right)} \leq 1$, megáll a kiterjedés. A $\beta \rightarrow 0$ határeset:

$$\rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}', 0) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \exp\left(\frac{i(x' - x)(y + y')}{2\ell^2}\right) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (3.24)$$

3.4. Szabad részecske periodikus határfeltételekkel

Egy tömbi fizikai rendszer szimulációjához vagy egy óriási rendszert kéne számítógépen megvalósítani, ami nagyon költséges, sőt többnyire lehetetlen lenne a számítástechnika mai fejlettsége mellett, vagy végessé kell tenni a geometriát úgy, hogy az éleffektusok ne zavarjanak, melynek egyik legelterjedtebb módja periodikus határfeltételek alkalmazása. Mi is ezt fogjuk alkalmazni a derékszögű dobozba zárt szabad részecskék rendszerére. Ebben a speciális esetben az irányok függetlenek így ismét elég az egyrészecske sűrűségmátrix megkonstruálását egy dimenzióban végezni.

Legyen ezen dimenzió mentén a doboz mérete L , a koordináta x , a Hamiltonoperátor pedig $\hat{\mathcal{H}} = -\lambda \frac{d^2}{dx^2}$, a már ismert $\lambda = \frac{\hbar^2}{2m}$ értékkel. A Schrödinger-egyenlet megoldásainak tudniuk kell a periodikusságot: $\Psi(x + L) = \Psi(x)$ és alakjuk

$\Psi_k(x) = \frac{e^{ikx}}{\sqrt{L}}$, melyre a periodikusság a $k = \frac{2\pi}{L}n$, megkötést adja, ahol $n \in \mathbb{Z}$. Az adott állapothoz tartozó sajátenergia $E_k = \lambda k^2$. A sajátállapotok persze ortonormáltak, így a sűrűségmátrix (3.5) alapján

$$\rho(x, x', \beta) = \frac{1}{L} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \exp\left(-\beta\lambda \left(\frac{2\pi}{L}\right)^2 n^2 + i(x - x')\frac{2\pi}{L}n\right), \quad (3.25)$$

melyet összevetve (A.20) egyenlettel kapjuk, hogy

$$\rho(x, x', \beta) = \frac{1}{L} \vartheta_3(z, q), \quad z = \frac{\pi}{L}(x - x'), \quad q = \exp\left(-\beta\lambda \left(\frac{2\pi}{L}\right)^2\right), \quad (3.26)$$

ami tehát tudja a periodicitást és valós értékű, mint azt vártuk is.

3.5. Mágneses egyrészecske termális sűrűségmátrix tóruszon

Az eddigi felvezetéssel rátérhetünk végre a minket igazán érdeklő mennyiség megkonstruálására, amely egyszerre ad számot a síkra merőleges, homogén mágneses tér jelenlétéről és a véges periodikus geometriáról. Az utóbbi fogalmát a levezetéshez némileg tovább általánosítjuk és tetszőleges ferdeszögű lapos tóruszt megengedünk (ezt később valamelyest ismét szigorítanunk kell), vagyis θ hajlásszögű paralelogrammát, melynek átellenes oldalait azonosítjuk. Továbbá a periodikus határfeltételeket annyiban lazítjuk, hogy ún. csavart periodikus határfeltételeket (*Twisted Periodic Boundary Conditions* [11]) kell csak kielégíteniük az állapotoknak, mely azt jelenti, hogy a paralelogramma oldalainak összeillesztésénél egy fázisfaktori szabadságot megengedünk. Ez a szimulációkban a véges méret effektusok csökkentésére használható, illetve javíthat a Metropolis Monte Carlo bejárás ergodikusságán.

3.5.1. A mágneses tér és a geometria adta megfontolások

Mint a 3.3 részben is láttuk, az egyrészecske-probléma Hamilton-operátora és az általunk választott Landau-mérték

$$\hat{\mathcal{H}} = \frac{(\mathbf{p} - e\mathbf{A})^2}{2m} \quad \mathbf{A} = -By\hat{\mathbf{x}} \quad (3.27)$$

alakú, ahol B a felületre merőleges, $\hat{\mathbf{z}}$ -irányba mutató homogén mágneses tér nagysága, és bevezetjük a

$$\mathbf{\Pi} = \mathbf{p} - e\mathbf{A} = \frac{\hbar}{i}\mathbf{D} \quad \hat{\mathcal{H}} = \frac{\mathbf{\Pi}^2}{2m} = -\lambda\mathbf{D}^2 \quad \mathbf{D} = \nabla - \frac{ie}{\hbar}\mathbf{A} \quad (3.28)$$

kinetikus momentum fogalmát, mely mágneses tér jelenlétében láthatóan különbözik a kanonikus \mathbf{p} momentumtól, valamint a szokásos $\lambda = \hbar^2/2m$ jelöléssel a \mathbf{D} kovariáns differenciáloperátort. Fontos észrevétel, hogy se a kovariáns derivált, se a kinetikus momentum komponensei nem cserélnek fel egymással, analóg módon a kanonikus impulzussal és koordinátával

$$[\Pi_x, \Pi_y] = i\hbar eB, \quad [D_x, D_y] = -\frac{i}{\ell^2}, \quad (3.29)$$

(3.18) szerint, mely analógia alapján a Hamilton-operátor azonosítható egy harmonikus-oszcillátoréval a következő Landau-szint léptetőoperátorokkal

$$\hat{a} = \sqrt{\frac{1}{2\hbar eB}}(\Pi_x + i\Pi_y), \quad \hat{a}^\dagger = \sqrt{\frac{1}{2\hbar eB}}(\Pi_x - i\Pi_y), \quad (3.30)$$

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1, \quad \hat{\mathcal{H}} = \hbar\omega_c \left(\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \right). \quad (3.31)$$

Érdeemes a két dimenziós síkot azonosítanunk a komplex síkkal és áttérni komplex változókra, ezek szerint $z = x + iy$, $\bar{z} = x - iy$, $\partial_z = \frac{1}{2}(\partial_x - i\partial_y)$, $\partial_{\bar{z}} = \frac{1}{2}(\partial_x + i\partial_y)$, $A_z = \frac{1}{2}(A_x - iA_y)$ és $A_{\bar{z}} = \frac{1}{2}(A_x + iA_y)$. Így az operátorok alakja

$$\hat{a} = -i\sqrt{2}\ell \left(\partial_{\bar{z}} - i\frac{e}{\hbar}A_{\bar{z}} \right), \quad \hat{a}^\dagger = -i\sqrt{2}\ell \left(\partial_z - i\frac{e}{\hbar}A_z \right), \quad (3.32)$$

ha, mindkettőt (-1) -gyel megszorozzuk, semmi nem történik, de ezzel az általunk választott mértékben

$$\hat{a} = \frac{\ell}{\sqrt{2}} \left(i\partial_x - \partial_y - \frac{y}{\ell^2} \right), \quad \hat{a}^\dagger = \frac{\ell}{\sqrt{2}} \left(i\partial_x + \partial_y - \frac{y}{\ell^2} \right) \quad (3.33)$$

alakot kapunk, amik segítségével az alap és gerjesztett állapotok megkereshetőek. Fontos látni, hogy mágneses térben a szokásos $\exp\left(\frac{i}{\hbar}\mathbf{Lp}\right) = \exp(\mathbf{L}\nabla)$ operátor, az \mathbf{L} vektorral való eltolás operátora nem cserél fel a mágneses Hamilton-operátorral, mivel az tartalmaz helyfüggést a vektorpotenciálon keresztül. Ezért olyan eltolásokra lesz szükségünk, mely egy mértéktranszformációval korrigálja az eltolt hullámfüggvény, sűrűségmátrix fázisát. Ilyenek a mágneses eltolásoperátorok [12], melyek alakja

a kétdimenziós, z -irányú homogén mágneses tér esetében

$$t(\mathbf{L}) = \exp\left(\mathbf{L}\left(\mathbf{D} - \frac{i}{\ell^2}(\mathbf{r} \times \hat{\mathbf{z}})\right)\right), \quad (3.34)$$

konkrétan (3.15) szerinti mértékben

$$t(\mathbf{L}) = \exp\left(\mathbf{L}\left(\nabla + \frac{i}{\ell^2}x\hat{\mathbf{y}}\right)\right), \quad t(\mathbf{L})\Psi(\mathbf{r}) = \exp\left(\frac{ixL_y}{\ell^2}\right)\Psi(\mathbf{r} + \mathbf{L}). \quad (3.35)$$

Ezek az operátorok könnyen ellenőrizhető, hogy felcserélnek a mágneses Hamilton-operátorral bármilyen mértékválasztás mellett. Továbbá az ilyen alakú operátorok reprezentálják a mágneses eltoláscsoportot, ha teljesül a csoportszorzás

$$t(\mathbf{L}_1)t(\mathbf{L}_2) = t(\mathbf{L}_1 + \mathbf{L}_2) \quad (3.36)$$

alakja. Ez csak az \mathbf{L}_i vektorok speciális megválasztása mellett lesz így. Ennek belátásához a Baker-Campbell-Hausdorff formula degenerált ($[X, [X, Y]] = [Y, [X, Y]] = 0$ fennállása esetén igaz) $e^Xe^Y = e^{X+Y+\frac{1}{2}[X,Y]}$ alakja ad segítséget, melyből a feltétel

$$\begin{aligned} \left[\mathbf{L}_1\left(\mathbf{D} - \frac{i}{\ell^2}(\mathbf{r} \times \hat{\mathbf{z}})\right), \mathbf{L}_2\left(\mathbf{D} - \frac{i}{\ell^2}(\mathbf{r} \times \hat{\mathbf{z}})\right)\right] &= \\ &= \frac{i|\mathbf{L}_1 \times \mathbf{L}_2|}{\ell^2} = \begin{cases} i2\pi N_\phi, & N_\phi \pmod{2} = 0 \\ i4\pi N_\phi, & N_\phi \pmod{2} = 1 \end{cases} \end{aligned} \quad (3.37)$$

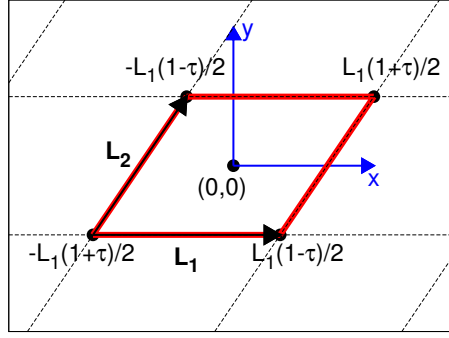
ami azt jelenti, hogy a két vektor által kifeszített paralelogramma területének olyanak kell lenni, hogy a rajta átmenő mágneses fluxus a $\Phi_0 = \frac{h}{e}$ (nem szupravezető) fluxuskvantum páros egész számú többszöröse.

Tekintsük most a vizsgált lapos tórusz geometriát. A kétdimenziós síkon, melyet azonosíthatunk a komplex síkkal, a mágneses egységcellát az $(\mathbf{L}_1, \mathbf{L}_2)$, θ szöget bezáró vektorpár feszíti ki a 3.1 ábra szerint és ezek mentén történnek a periodikus képekhez való eltolások. $\tau = \frac{L_1}{L_2}e^{i\theta}$, így a komplex síkon a periódus L_1 és $L_1\tau$. A csavart periodikus határfeltételeket és a mágneses eltolást figyelembe véve minden állapotra

$$t(\mathbf{L}_1)\Psi = e^{i\phi_1}\Psi, \quad t(\mathbf{L}_2)\Psi = e^{i\phi_2}\Psi, \quad (3.38)$$

teljesülését követeljük meg, és azt, hogy a kétféle rácsvektorral való eltolás sorrendje felcserélhető legyen, mely gyengébb kritérium, mint (3.37) és csak simán

$$[t(\mathbf{L}_1), t(\mathbf{L}_2)] = 0 \quad \frac{|\mathbf{L}_1 \times \mathbf{L}_2|}{2\pi\ell^2} = N_\phi \quad (3.39)$$



3.1. ábra. Mágneses egységcella a lapos tóruszon

összefüggés kell teljesüljön, N_ϕ paritásától függetlenül. A ϕ_1 és ϕ_2 tetszőleges paramétereknek szemléletes fizikai jelentésük van, úgy képzelhetőek el, mint mágneses fluxusok körbejárásának Aharonov-Bohm effektusa [13],[14]. Ha három dimenzióban képzeljük el a síkból összehajtogatott tóruszt, a külső, síkra merőleges mágneses teret a tórusz toroidális irányú tengelyén lévő gyűrű alakú mágneses monopólus szolgáltatja, ϕ_1 a tórusz közepén lévő lyukon átmenő fiktív mágneses fluxus h/e egységekben, ϕ_2 pedig a tórusz keresztmetszetén toroidális irányban átmenő fluxusként értelmezhető.

3.5.2. Egyrészcseke sajátállapotok

Minden elő van készítve a tóruszon kváziperiodikus mágneses sajátállapotok megkereséséhez. [15] nyomán belátjuk, hogy a legalacsonyabb ($n = 0$) Landau szint hullámfüggvénye Landau-mértékben,

$$\hat{a}\psi_0 = \left(i\sqrt{2}\ell\partial_{\bar{z}} - \frac{y}{\sqrt{2}\ell} \right) \psi_0(z) = \frac{\ell}{\sqrt{2}} \left(i\partial_x - \partial_y - \frac{y}{\ell^2} \right) \psi_0(x, y) = 0 \quad (3.40)$$

alapján általánosan

$$\psi_0(z) = f(z)e^{-\frac{y^2}{2\ell^2}} \quad (3.41)$$

alakú, ahol $f(z)$ tetszőleges alakú analitikus függvény. Mivel azt szeretnénk, hogy az állapot a tóruszon kváziperiodikus legyen, az $f(z)$ -t (A.1) formájú függvények terében keressük, ugyanis a Jacobi elliptikus Theta függvények (lásd. az A. függelékben) a komplex síkon duplán kváziperiodikus analitikus függvények terének egy teljes bázisát adják. [16] és [17] alapján, felhasználva a mágneses eltolásokat kapjuk,

hogy

$$f(z + L_1) = \exp(i\phi_1) f(z), \quad (3.42)$$

$$f(z + L_1\tau) = \exp\left(i\phi_2 - \frac{2\pi izN_\phi}{L_1} - i\pi N_\phi\tau + i\pi N_\phi\Re\{\tau\}\right) f(z), \quad (3.43)$$

amit összevetve az (A.2) egyenletekkel kapunk N_ϕ különböző normált állapotot a legalacsonyabb Landau-szinten:

$$\psi_{0,m}(z) = \frac{1}{\sqrt{\ell L_1} \sqrt{\pi}} \vartheta \begin{bmatrix} a_m \\ b_m \end{bmatrix} \left(\frac{\pi N_\phi z}{L_1} \middle| N_\phi \tau \right) e^{-\frac{y^2}{2\ell^2}}, \quad (3.44)$$

$m = 0 \dots (N_\phi - 1)$ egész és

$$a_m = \frac{\phi_1}{2\pi N_\phi} + \frac{m}{N_\phi}, \quad b_m = -\frac{\phi_2}{2\pi} - \frac{N_\phi \Re\{\tau\}}{2}. \quad (3.45)$$

A fenti állapotok ortonormáltak a mágneses egységcellán

$$\int_0^{L_2 \sin \theta} dy \int_{y \operatorname{ctg} \theta}^{y \operatorname{ctg} \theta + L_1} dx \psi_{n',m'}^*(x + iy) \psi_{n,m}(x + iy) = \delta_{n,n'} \delta_{m,m'}, \quad (3.46)$$

és mindnek N_ϕ zérusa van az egységcellában, egy vízszintes vonal mentén, egymástól egyforma L_1/N_ϕ távolságra.

Képezzük a magasabb Landau-szintek állapotait

$$\psi_{n,m}(z) = \frac{(\hat{a}^\dagger)^n}{\sqrt{n!}} \psi_{0,m}(z) \quad (3.47)$$

segítségével, melyek így továbbra is ortonormáltak maradnak és mivel az m index nem változik vagy keveredik a léptetés során, látszik, hogy minden szintnek ugyanakkora, N_ϕ -szeres degenerációja marad, mint az alapállapotnak, ellentétben a kvantált Hall effektus irodalomban gyakran használt másik kompakt geometria, a Haldane-gömb [18],[19],[20] esetével. Egyszerű algebrai átalakításokkal és az Hermite-polinomok rekurzív előállítását ismerve kapjuk a

$$\begin{aligned} \psi_{n,m}(z) = & \frac{1}{\sqrt{\ell L_1} 2^n n! \sqrt{\pi}} \sum_{p=-\infty}^{\infty} \exp\left(i\pi N_\phi \tau (p + a_m)^2 + 2i(p + a_m) b_m\right) \times \\ & \times \exp\left(\frac{C_{p,m}^2}{2\ell^2} + \frac{iC_{p,m}x}{\ell^2}\right) H_n\left(\frac{y + C_{p,m}}{\ell}\right) \exp\left(-\frac{(y + C_{p,m})^2}{2\ell^2}\right) \end{aligned} \quad (3.48)$$

kifejezést, amelyben

$$C_{p,m} = \frac{2\pi\ell^2 N_\phi}{L_1} (p + a_m) = L_1 \Im\{\tau\} (p + a_m). \quad (3.49)$$

3.5.3. A termális sűrűségmátrix

A már megszokott módon fel kell összegezni az összes állapotot a megfelelő Boltzmann-faktorokkal

$$\rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \beta) = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{N_\phi-1} \psi_{n,m}^*(\mathbf{r}') \psi_{n,m}(\mathbf{r}) u^{(n+\frac{1}{2})}, \quad (3.50)$$

melyből először a 3.5. részben látott módon az n -szerinti összegzést végezzük el a (3.22) Mehler-formula szerint:

$$\begin{aligned} \rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \beta) &= \frac{\sqrt{u}}{\ell L_1 \sqrt{\pi} \sqrt{1-u^2}} \sum_{m=0}^{N_\phi-1} \sum_{p,p'} \exp\left(i\pi\tau N_\phi (p+a_m)^2 - i\pi\tau^* N_\phi (p'+a_m)^2\right. \\ &\quad \left.+ 2\pi i(p+a_m)b_m - 2\pi i(p'+a_m)b_m + \frac{C_{p,m}^2}{2\ell^2} + \frac{iC_{p,m}x}{\ell^2} + \frac{C_{p',m}^2}{2\ell^2} - \frac{iC_{p',m}x'}{\ell^2}\right) \times \\ &\quad \times \exp\left(-\frac{1}{2} \frac{1+u^2}{1-u^2} (A^2+B^2) + \frac{2u}{1-u^2} AB\right), \quad (3.51) \end{aligned}$$

ahol $A = \frac{y+C_{p,m}}{\ell}$ és $B = \frac{y'+C_{p',m}}{\ell}$. Láthatóan a p és p' szerinti összegzés az utolsó AB -t tartalmazó tag kivételével szétválik, amiket (A.1) ismeretében szebb alakra hozhatnánk. Vezessük ezért be az $n_1 = p + p'$ és $n_2 = p - p'$ új összegzőindexeket, mellyekkel az összegzések szétválaszthatóvá válnak. Két dologra kell figyelni, az egyik, hogy $n_1 - n_2$ mindig páros, vagyis akkor kapjuk a korábbi összeget, ha egyszerre vagy n_1 és n_2 is páros, vagy mindkettő páratlan. A másik, hogy ez a változcseré akkor vezet csak tényleg teljesen szétválasztható összegzésre, ha a tórusz alakjának tetszőlegességét kicsit megszorítjuk és a

$$\exp(i\pi N_\phi n_1 n_2 \Re\{\tau\}) = 1 \quad \frac{N_\phi \Re\{\tau\}}{2} = \frac{N_\phi L_2 \cos\theta}{2L_1} = k \quad k \in \mathbb{Z} \quad (3.52)$$

feltétel teljesül.

Ebben az esetben egy sor egyszerű algebrai átalakítás után a következő alakot kap-

juk:

$$\begin{aligned} \rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \beta) = & \frac{\sqrt{u}}{\ell L_1 \sqrt{\pi} \sqrt{1-u^2}} \exp\left(-\frac{1}{2\ell^2} \frac{1+u^2}{1-u^2} (y^2 + y'^2) + \frac{2u}{1-u^2} \frac{yy'}{\ell^2}\right) \times \\ & \times \sum_{m=0}^{N_\phi-1} \left\{ \vartheta \begin{bmatrix} a_m \\ 0 \end{bmatrix} (z_1|\tau_1) \vartheta \begin{bmatrix} 0 \\ 2b_m + 2N_\phi a_m \Re\{\tau\} \end{bmatrix} (z_2|\tau_2) + \right. \\ & \left. + \vartheta \begin{bmatrix} a_m + \frac{1}{2} \\ 0 \end{bmatrix} (z_1|\tau_1) \vartheta \begin{bmatrix} \frac{1}{2} \\ 2b_m + 2N_\phi a_m \Re\{\tau\} \end{bmatrix} (z_2|\tau_2) \right\}, \quad (3.53) \end{aligned}$$

amelyben az újonnan bevezetett változók jelentése

$$\tau_1 = i\pi \left(\frac{2\ell N_\phi}{L_1}\right)^2 \frac{1-u}{1+u}, \quad z_1 = \frac{\pi N_\phi}{L_1} \left((x-x') + i(y+y') \frac{1-u}{1+u}\right), \quad (3.54)$$

$$\tau_2 = i\pi \left(\frac{2\ell N_\phi}{L_1}\right)^2 \frac{1+u}{1-u}, \quad z_2 = \frac{\pi N_\phi}{L_1} \left((x+x') + i(y-y') \frac{1+u}{1-u}\right). \quad (3.55)$$

3.5.4. Transzlációs tulajdonságok

(A.2) és (A.5) alapján egyszerűen belátható a $\rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \beta)$ termális sűrűségmátrix mágneses eltolásokkal szembeni kváziperiodikus viselkedése (természetesen az \mathbf{r}' változóban konjugálva kell eltolni):

$$t_{\mathbf{r}}(\pm \mathbf{L}_1) \rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \beta) = e^{\pm i\phi_1} \rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \beta), \quad (3.56)$$

$$t_{\mathbf{r}'}^*(\pm \mathbf{L}_1) \rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \beta) = e^{\mp i\phi_1} \rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \beta), \quad (3.57)$$

$$t_{\mathbf{r}}(\pm \mathbf{L}_2) \rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \beta) = e^{\pm i\phi_2} \rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \beta), \quad (3.58)$$

$$t_{\mathbf{r}'}^*(\pm \mathbf{L}_2) \rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \beta) = e^{\mp i\phi_2} \rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \beta). \quad (3.59)$$

A (3.53) kifejezés szép és kompakt. Numerikus szempontból előny, hogy a Theta-függvények komplex τ_1, τ_2 periódusa tisztán képzetes, viszont szerencsétlen $T \rightarrow \infty$, $u \rightarrow 1$ klasszikus limeszbeli különböző $\tau_1 \rightarrow 0$ és $\tau_2 \rightarrow \infty$ szélsőséges értékük. Továbbá kitüntetett az y -irány, nem szimmetrikus a kifejezés a tér két irányára, nem látszik az egyes tagok jelentése. Ezért érdemes elvégezni egy (A.24) moduláris

transzformációt a (z_1, τ_1) párban. Ezzel a következő intuitívabb alakot kapjuk:

$$\begin{aligned} \rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \beta) &= \frac{1}{2\pi\ell^2} \frac{\sqrt{u}}{1-u} \exp\left(-\frac{1}{4\ell^2} \frac{1+u}{1-u} |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^2 + \frac{i(x' - x)(y + y')}{2\ell^2}\right) \times \\ &\times \frac{1}{N_\phi} \sum_{m=0}^{N_\phi-1} \left\{ \vartheta \begin{bmatrix} 0 \\ a_m \end{bmatrix} \left(\frac{z_1}{\tau_1} \middle| \left(\frac{L_1}{2\ell N_\phi \sqrt{\pi}} \right)^4 \tau_2 \right) \vartheta \begin{bmatrix} 0 \\ 2b_m + 2N_\phi a_m \Re\{\tau\} \end{bmatrix} (z_2 | \tau_2) + \right. \\ &\left. + \vartheta \begin{bmatrix} 0 \\ a_m + \frac{1}{2} \end{bmatrix} \left(\frac{z_1}{\tau_1} \middle| \left(\frac{L_1}{2\ell N_\phi \sqrt{\pi}} \right)^4 \tau_2 \right) \vartheta \begin{bmatrix} \frac{1}{2} \\ 2b_m + 2N_\phi a_m \Re\{\tau\} \end{bmatrix} (z_2 | \tau_2) \right\}, \quad (3.60) \end{aligned}$$

ahol az új argumentumok alakja

$$\tau_1' = \left(\frac{L_1}{2\ell N_\phi \sqrt{\pi}} \right)^4 \tau_2 = \frac{i}{\pi} \left(\frac{L_1}{2\ell N_\phi} \right)^2 \frac{1+u}{1-u}, \quad (3.61)$$

$$\frac{z_1}{\tau_1} = \frac{L_1}{4\ell^2 N_\phi} \left((y + y') + i(x' - x) \frac{1+u}{1-u} \right). \quad (3.62)$$

Összehasonlítva a sűrűségmátrix nem periodikus alakját (3.23) és a kapott (3.60) alakot, azt találjuk, hogy a hőmérsékletfüggő előtagok, a koordináták különbségét tartalmazó Gauss-i tag és a hőmérsékletfüggetlen fázisfaktor is megegyeznek, ami pedig azok után következik, biztosítja a függvény (3.56-3.59) szerinti periodikus viselkedését. Mind a prefaktorban, mind a Theta-függvény párok összegében az x és y irányok változói közti aszimmetria megszűnt, a különbségi $\mathbf{r} - \mathbf{r}'$ koordináta x és y komponense lesz mindkét z változóban a képzetes és hőmérsékletfüggő, míg a tömegközépponti $\frac{\mathbf{r} + \mathbf{r}'}{2}$ vektor komponensei a valós összetevők.

Érdekes megfigyelni, hogy míg a szabad határfeltételű (3.23) sűrűségmátrix esetében $|\rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \beta)|$ invariáns az \mathbf{r} és \mathbf{r}' együttes, \mathbf{d} vektorral való eltolására (a tömegközépponti koordináta mozgatására), addig a periodikus határfeltétel, (3.60) esetében ez nem igaz, a mágneses egységcella nem tolható el tetszőlegesen. A Theta-függvények (A.1) definíciójából látszik, hogy a z változó valós része egyszerűen additív módon inkorporálható a b karakterisztikába, amivel a (3.60) sűrűségmátrix egy

újabb alakját kaphatjuk:

$$\begin{aligned}
\rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \beta) &= \frac{1}{2\pi\ell^2} \frac{\sqrt{u}}{1-u} \exp\left(-\frac{1}{4\ell^2} \frac{1+u}{1-u} |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^2 + \frac{i(x'-x)(y+y')}{2\ell^2}\right) \times \\
&\times \frac{1}{N_\phi} \sum_{m=0}^{N_\phi-1} \left\{ \vartheta \begin{bmatrix} 0 \\ a_m + \frac{L_1}{4\pi\ell^2 N_\phi} (y+y') \end{bmatrix} \left(\pi N_\phi \frac{(x'-x)}{L_1} \tau_1' \middle| \tau_1' \right) \times \right. \\
&\times \vartheta \begin{bmatrix} 0 \\ 2b_m + 2N_\phi a_m \Re\{\tau\} + \frac{N_\phi}{L_1} (x+x') \end{bmatrix} \left(\frac{\pi}{2} \frac{(y-y')}{L_2 \sin\theta} \tau_2 \middle| \tau_2 \right) + \\
&+ \vartheta \begin{bmatrix} 0 \\ a_m + \frac{1}{2} + \frac{L_1}{4\pi\ell^2 N_\phi} (y+y') \end{bmatrix} \left(\pi N_\phi \frac{(x'-x)}{L_1} \tau_1' \middle| \tau_1' \right) \times \\
&\left. \times \vartheta \begin{bmatrix} \frac{1}{2} \\ 2b_m + 2N_\phi a_m \Re\{\tau\} + \frac{N_\phi}{L_1} (x+x') \end{bmatrix} \left(\frac{\pi}{2} \frac{(y-y')}{L_2 \sin\theta} \tau_2 \middle| \tau_2 \right) \right\}. \quad (3.63)
\end{aligned}$$

Jól elkülöníthetővé válik a tömegközépponti koordináta szerepe, mely a függvények karakterisztikájába épül be és a relatív koordináta, mely a Theta-függvények argumentumát adja, kiemelve a periodicitást. Az egységcella, vagyis a tömegközéppont \mathbf{d} vektorral való eltolása az eredeti a_m és b_m karakterisztikák

$$b_m \rightarrow b_m + \frac{N_\phi}{L_1} d_x \quad a_m \rightarrow a_m + \frac{L_1}{2\pi\ell^2 N_\phi} d_y \quad (3.64)$$

változásának fogható fel, melyek (3.45) alakjából következik, hogy ez a csavart periodikus határfeltételekben bevezetett fluxusok

$$\phi_2 \rightarrow \phi_2 - \frac{2\pi N_\phi}{L_1} d_x \quad \phi_1 \rightarrow \phi_1 + \frac{L_1}{\ell^2} d_y \quad (3.65)$$

megváltozásaként értelmezhető. A határfeltételek invarianciájához ezek a fluxusok csak kvantáltan változhatnak, így a sűrűségmátrix abszolútértéke is csak az egységcella diszkrét eltolásaira invariáns:

$$\mathbf{d} = \left(\frac{L_1}{N_\phi} n_1, \frac{2\pi\ell^2}{L_1} n_2 \right) = \left(\frac{L_1}{N_\phi} n_1, \frac{L_2 \sin\theta}{N_\phi} n_2 \right), \quad n_1, n_2 \in \mathbb{Z}. \quad (3.66)$$

Megjegyzendő, hogy (3.60) párjaként végezhetjük volna a $\tau_2 \rightarrow -\frac{1}{\tau_2}$, $z_2 \rightarrow \frac{z_2}{\tau_2}$

moduláris transzformációt is, így egy nagyon hasonló alakot kapunk,

$$\begin{aligned} \rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \beta) &= \frac{1}{2\pi\ell^2} \frac{\sqrt{u}}{1+u} \exp\left(-\frac{1}{4\ell^2} \frac{1-u}{1+u} |\mathbf{r} + \mathbf{r}'|^2 + \frac{i(x'+x)(y'-y)}{2\ell^2}\right) \times \\ &\times \frac{1}{N_\phi} \sum_{m=0}^{N_\phi-1} \left\{ \vartheta \begin{bmatrix} a_m \\ 0 \end{bmatrix} (z_1|\tau_1) \vartheta \begin{bmatrix} -2(b_m + N_\phi a_m \Re\{\tau\}) \\ 0 \end{bmatrix} \left(\frac{z_2}{\tau_2} \middle| \left(\frac{L_1}{2\ell N_\phi \sqrt{\pi}}\right)^4 \tau_1\right) + \right. \\ &\left. + \vartheta \begin{bmatrix} a_m + \frac{1}{2} \\ 0 \end{bmatrix} (z_1|\tau_1) \vartheta \begin{bmatrix} -2(b_m + N_\phi a_m \Re\{\tau\}) \\ \frac{1}{2} \end{bmatrix} \left(\frac{z_2}{\tau_2} \middle| \left(\frac{L_1}{2\ell N_\phi \sqrt{\pi}}\right)^4 \tau_1\right) \right\}, \quad (3.67) \end{aligned}$$

ahol az új változók

$$\tau_2' = \left(\frac{L_1}{2\ell N_\phi \sqrt{\pi}}\right)^4 \tau_1 = \frac{i}{\pi} \left(\frac{L_1}{2\ell N_\phi}\right)^2 \frac{1-u}{1+u}, \quad (3.68)$$

$$\frac{z_2}{\tau_2} = \frac{L_1}{4\ell^2 N_\phi} \left((y-y') - i(x+x') \frac{1-u}{1+u} \right). \quad (3.69)$$

Ezúttal a tömegközépponti és relatív koordináták szerepe felcserélődik és a $\mathbf{r} - \mathbf{r}'$ relatív koordinátában való eltolások feleltethetők meg fluxusváltozásnak.

3.5.5. A $\beta \rightarrow 0$ és $\beta \rightarrow \infty$ viselkedés

A sűrűségmátrix magashőmérsékletű, vagyis $\beta \rightarrow 0$ határértékben vissza kell adnia a (3.8) Bloch-egyenlet kezdőfeltételét. A periodikus geometria természetesen ezt némileg módosítja. A levezetéshez (3.60) egyenletből indulunk ki, és kihasználjuk a Theta-függvények (A.25) felírását. Csak a vezetőrendű tagokat megtartva kihasználjuk a következő összefüggést

$$\sum_{k=-\infty}^{\infty} \delta(t - kT) = \frac{1}{T} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \exp\left(2\pi i n \frac{t}{T}\right), \quad (3.70)$$

végül elvégezve az m -re való összegzést kapjuk a

$$\begin{aligned} \rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \beta \rightarrow 0) &= \sum_{k_1, k_2} \exp\left(-\frac{ixk_2 L_2 \sin \theta}{\ell^2} + ik_1 \phi_1 + ik_2 \phi_2\right) \times \\ &\times \delta(x - x' - k_1 L_1 - k_2 L_2 \cos \theta) \delta(y - y' - k_2 L_2 \sin \theta), \quad (3.71) \end{aligned}$$

alakot, mely pontosan megfelel az (3.56)-(3.59) eltolási szabályoknak.

Az alacsony hőmérsékletű, $\beta \rightarrow \infty$ határesetben (3.60) alakja jelentősen egyszerűsödik és analitikus struktúrája is sokkal jobban láthatóvá válik. Ebben az esetben $u \rightarrow 0$ és így $\frac{1+u}{1-u} \rightarrow 1$. Láthatóan az egész sűrűségmátrix amplitúdója is nullához

tart a \sqrt{u} szorzó miatt, ezt kompenzáljuk egy valószínűségi normálással:

$$\rho_{prob}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \beta) = \frac{\rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \beta)}{Z(\beta)}, \quad Z(\beta) = \sum_{n=0}^{\infty} u^{n+\frac{1}{2}} = \frac{\sqrt{u}}{1-u}. \quad (3.72)$$

Így kapjuk a következő alakot

$$\rho_{prob}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \infty) = \frac{1}{2\pi\ell^2} \exp\left(-\frac{1}{4\ell^2}|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^2 + \frac{i(x' - x)(y + y')}{2\ell^2}\right) f_{\infty}(z, z'), \quad (3.73)$$

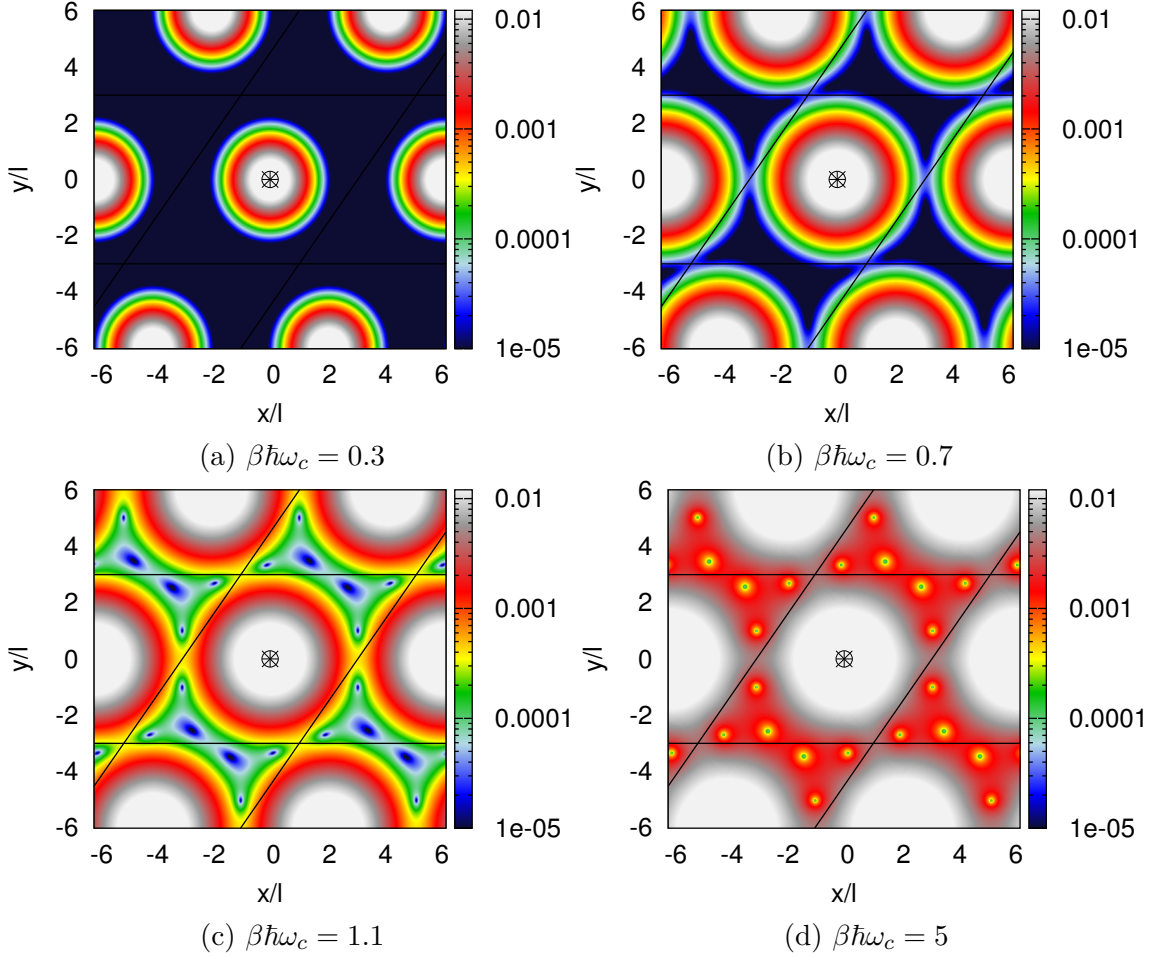
melyben az előtagoknak láthatóan nincs zérusuk a teljes komplex síkon, az $f_{\infty}(z, z')$ pedig z -ben holomorf, z' -ben pedig antiholomorf és alakja:

$$\begin{aligned} f_{\infty}(z, z') = & \frac{1}{N_{\phi}} \sum_{m=0}^{N_{\phi}-1} \left\{ \vartheta \begin{bmatrix} 0 \\ a_m \end{bmatrix} \left(\frac{iL_1}{4\ell^2 N_{\phi}} (z'^* - z) \middle| \frac{i}{\pi} \left(\frac{L_1}{2\ell N_{\phi}} \right)^2 \right) \times \right. \\ & \times \vartheta \left[\begin{array}{c} 0 \\ 2b_m + 2N_{\phi} a_m \Re\{\tau\} \end{array} \right] \left(\frac{\pi N_{\phi}}{L_1} (z'^* + z) \middle| i\pi \left(\frac{2\ell^2 N_{\phi}}{L_1} \right)^2 \right) + \\ & + \vartheta \begin{bmatrix} 0 \\ a_m + \frac{1}{2} \end{bmatrix} \left(\frac{iL_1}{4\ell^2 N_{\phi}} (z'^* - z) \middle| \frac{i}{\pi} \left(\frac{L_1}{2\ell N_{\phi}} \right)^2 \right) \times \\ & \left. \times \vartheta \left[\begin{array}{c} \frac{1}{2} \\ 2b_m + 2N_{\phi} a_m \Re\{\tau\} \end{array} \right] \left(\frac{\pi N_{\phi}}{L_1} (z'^* + z) \middle| i\pi \left(\frac{2\ell^2 N_{\phi}}{L_1} \right)^2 \right) \right\}. \quad (3.74) \end{aligned}$$

A termális sűrűségmátrix hőmérséklettől függő viselkedését a két vizsgált határérték között a 3.2 ábra szemlélteti. Rögzítve az \mathbf{r}' végpontot megfigyelhető, hogy magas hőmérsékleten, kis β értékekre a sűrűségmátrix kiterjedése kicsi az egységcellában, ahogy csökken a hőmérséklet, úgy terül szét a képzetes idejű diffúzióval, a szomszédos cellákkal összefolyik, de láthatóan a cellák széle felé akadályokba, fix zérusokba ütközik a terjedés, ezt vizsgáljuk a 3.5.6 részben.

3.5.6. Zérusok

A zárt tóruszfelületet N_{ϕ} fluxuskvantumnyi mágneses fluxus szűrja át, aminek egész fluxuskvantumokat tartalmazó vortexekben kell áthaladnia a felületen, melyek körül minden tiszta állapothoz tartozó hullámfüggvény fázisa 2π ugrást szenved és így a hozzá tartozó sűrűség nullához tart. Tekintsük például az alapállapotú egyrészesce pályák (3.44) zérusszerkezetét. A termális sűrűségmátrix azonban e pályák súlyozott keveréke, ennek zérusszerkezetéről intuitíve nehéz állítást tenni. $T = 0$ esetben azonban analitikusan megszámlálhatóak a sűrűségmátrix zérusai (3.74) felhasználásával és a komplex függvények Reziduuum-tételének ügyes alkalmazásával (3.75).

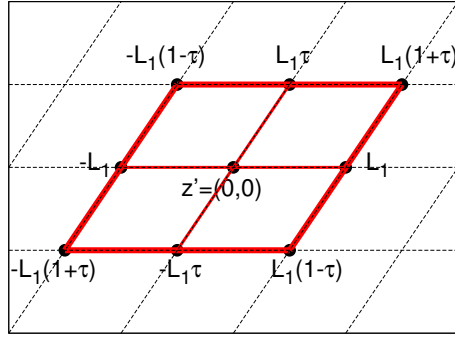


3.2. ábra. A termális sűrűségmátrix abszolútértékének hőmérsékletfüggése vagyis a β képzetes időbeli diffúzió, $N_\phi = 6$, $L_2/L_1 = 1.17$, $\theta \approx 55^\circ$, $\mathbf{r}' = (0, 0)$, $\phi_1 = \phi_2 = 0$

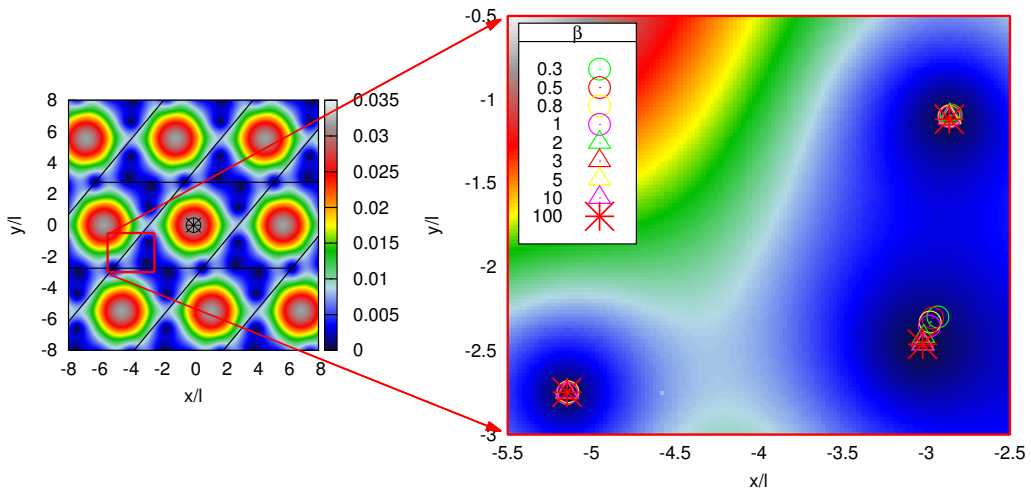
Fixáljuk z' -t és válasszuk a vizsgálat területének a 3.3 ábrán látható $z' + L_1(\pm 1 \pm \tau)$, 2×2 egységcellából álló területet, melynek kontúrja Q (így használható ki jól páros és páratlan N_ϕ esetén is a $f_\infty(z, z')$ függvény tagjainak periodikussága). Az $f_\infty(z, z')$ függvény tagjainak egyszerű periodikus viselkedése miatt az alábbi

$$\oint_Q \frac{d}{dz} \ln(f_\infty(z, z')) dz = \sum_{\Delta z \in Q} \ln \left(\frac{f_\infty(z + \Delta z, z')}{f_\infty(z, z')} \right) = -8\pi i N_\phi \quad (3.75)$$

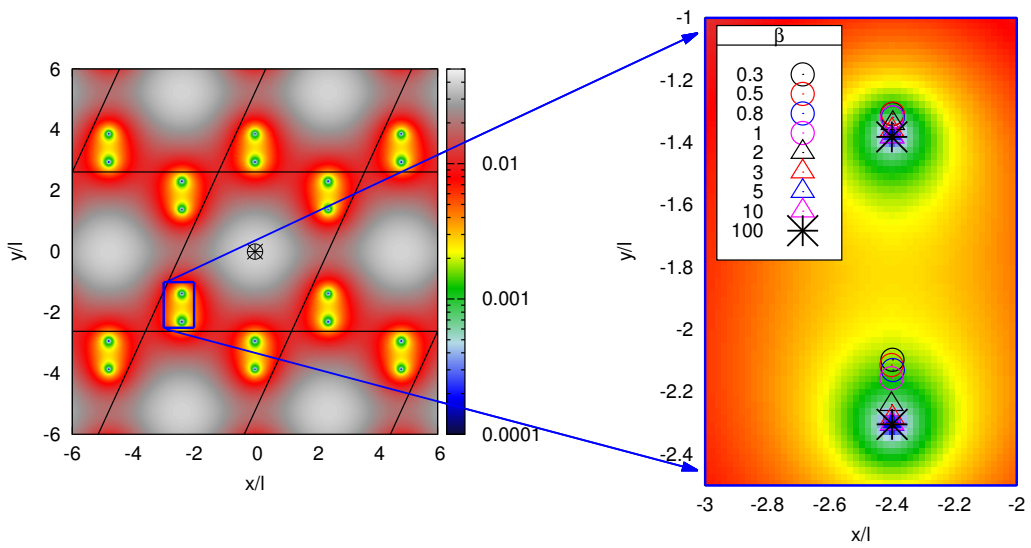
kifejezés könnyen kiértékelhető és igazolja, hogy egységcellánként N_ϕ zérusa van a sűrűségmátrixnak, legalábbis $T = 0$ hőmérsékleten. A végeshőmérsékletű zérusszerkezet analitikusan nehezen vizsgálható, de numerikus eredményeink alapján az látszik, hogy a zérusok száma megmarad véges hőmérsékleten is, a hőmérséklet függvényében a zérusok kevés mozgással, gyorsan eléri aszimptotikus $\beta = \infty$ pozíciójukat és sima pályán mozognak, erre mutatnak példát a 3.4 és 3.5 ábrák. A 3.4 ábra esetén azt látjuk, hogy vannak zérushelyek, melyek egyáltalán nem mozognak. Tipikus ilyen példa a páratlan N_ϕ -k esetén ($\mathbf{r}' = 0$, $\phi_1 = \phi_2 = 0$) az egységcella csúcsában (a pa-



3.3. ábra. A zérusszámláláshoz használt 2×2 egységcella

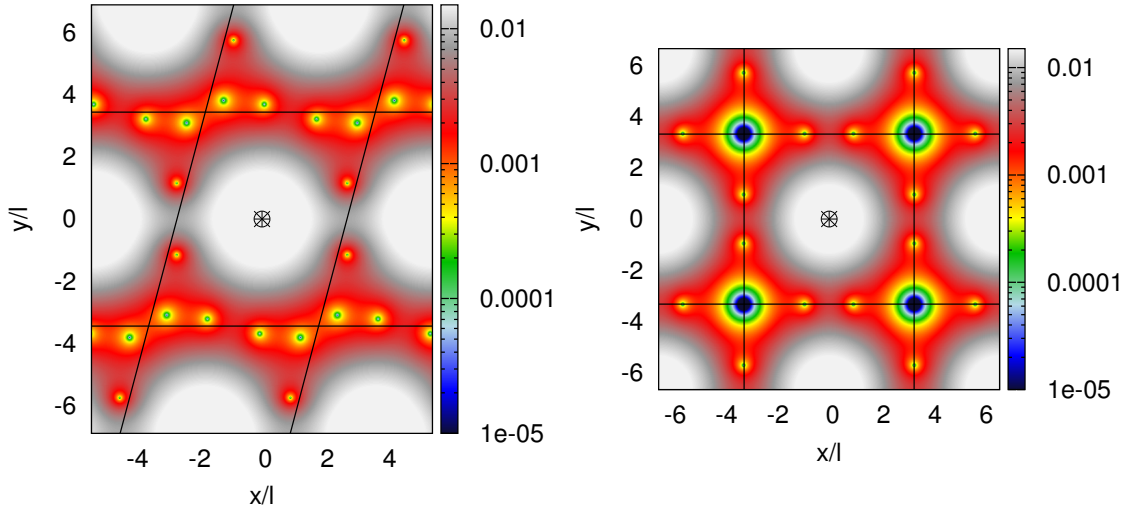


3.4. ábra. Zérushelyek mozgása a hőmérséklet függvényében, páratlan, $N_\phi = 5$ fluxuskvantum esetén, $L_2/L_1 = 1.25$, $\theta \approx 50^\circ$, $\mathbf{r}' = (0, 0)$, $\phi_1 = \phi_2 = 0$



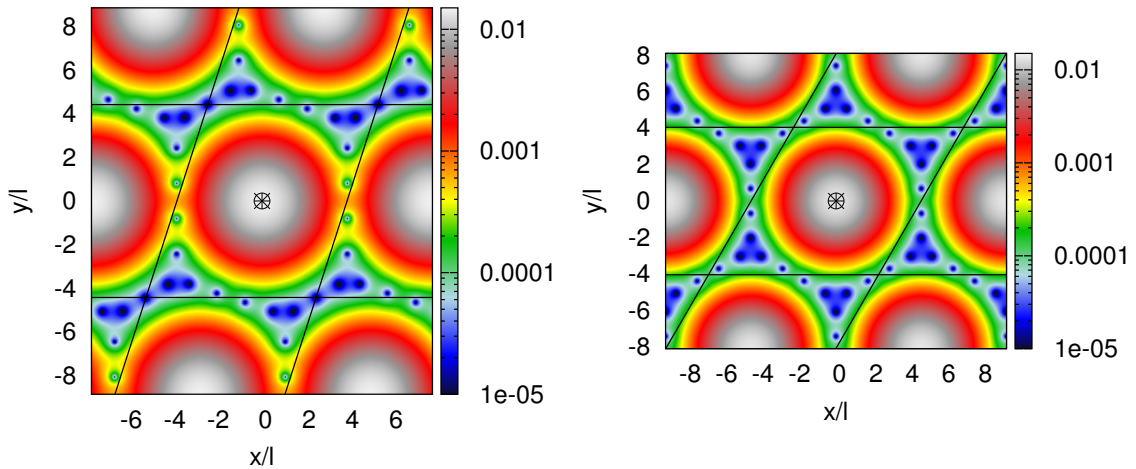
3.5. ábra. Zérushelyek mozgása a hőmérséklet függvényében, páros, $N_\phi = 4$ fluxuskvantum esetén, $L_2/L_1 = 1.2$, $\theta \approx 65^\circ$, $\mathbf{r}' = (0, 0)$, $\phi_1 = \phi_2 = 0$

raleogramma minden csúcsában van, de ezek topológiailag ekvivalens pontok) lévő zérus. Igen érdekes és szép szerkezete van általában a zérushelyeknek, ezt demonstrálja a 3.6 ábra is, melyen szintén látszik, hogy páratlan N_ϕ -re a csúcsokba mindig kerül zérus (3.7b és 3.6c ábrák). Megfigyelhető, hogy szabályos geometriák esetén



(a) $N_\phi = 6$, $L_2/L_1 = 1.3$, $\theta \approx 75^\circ$

(b) $N_\phi = 7$, $L_2/L_1 = 1.0$, $\theta = 90^\circ$



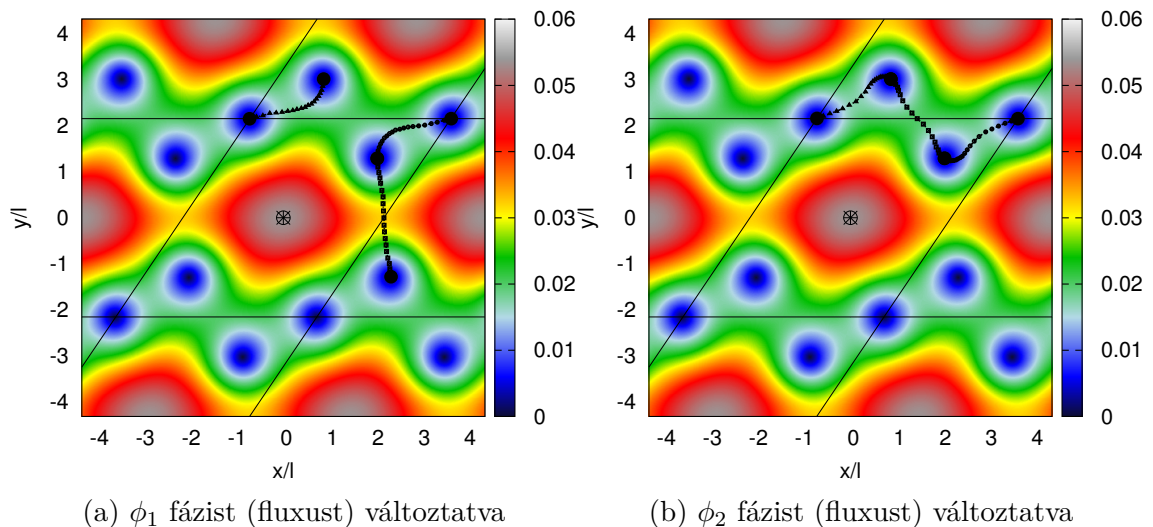
(c) $N_\phi = 11$, $L_2/L_1 = 1.19$, $\theta \approx 72^\circ$

(d) $N_\phi = 12$, $L_2/L_1 = 1.0$, $\theta = 60^\circ$

3.6. ábra. Zérushelyek struktúrája különböző geometriájú tóruszokon különböző N_ϕ értékekre, $\beta\hbar\omega_c = 200$, $\mathbf{r}' = (0, 0)$, $\phi_1 = \phi_2 = 0$

jellemzők a többszörös zérusok is (3.7b ábra), melyek a geometria szabályossága miatt erősen kötöttek a helyükre, jobban gátolják a képzetes idejű diffúziót, veszélyesek lehetnek a szimuláció ergodikus térbejárása szempontjából. A szintén szabályos hatszög rácson (3.6d) a szabályosan elhelyezkedő zérusok látványosan nagy hányadát foglalják el az egységcellának.

A csavart határfeltételek bevezetése azért lehet előnyös, mert több szimulációt futtatva különböző véletlen ϕ_1 , ϕ_2 értékek mellett az eredményeket átlagolva [11] a teljes konfigurációs tér nagyobb részéből és egyenletesebben merít értékeket a Metropolis Monte Carlo bolyongás, a kapott mennyiségek közelebb lesznek a valós értékekhez. A kompakt geometria miatt megjelent zérusok a képzetes idejű diffúzió gátlásával ergodicitási problémát okozhatnak, ezért fontos látni, mennyire mozognak a ϕ_1 , ϕ_2 fázisok változtatásával, erre példa a 3.7 ábra, melyen a zérusok trajektóriái láthatóak a fázisok 2π -vel való csavarásának hatására. Az ábrák tanulsága,



3.7. ábra. Zérushelyek mozgásának trajektóriája a csavart periodikus határfeltétel ϕ_1 illetve ϕ_2 fázisát változtatva, $\beta\hbar\omega_c = 200$, $N_\phi = 3$, $L_2/L_1 = 1.19$, $\theta \approx 56^\circ$, $\mathbf{r}' = (0, 0)$

hogy a vizsgált esetben a zérusok erősen mozognak, a véletlen fáziscsavarásokra való átlagolás valószínűleg hatékonyan javít az eredményeken. Megjegyzendő, inkább érdekes hasonlatképpen, mint egzakt fizikai állításként, hogy a zérusok úgy mozognak a fázisok csavarásának hatására, mint a Hall-áram. A ϕ_1 változtatása a tórusz forgásszimmetria-tengelyével párhuzamosan, a tóruszgyűrű nyílásán átmenő mágneses fluxus változását jelenti, mely toroidális irányú elektromotoros erőt generál, ami toroidális irányba mozgatná a töltött részecskéket. Viszont a tórusz felületére merőleges állandó mágneses tér hatására az áram poloidális irányba eltérül, ez a Hall-áram. ϕ_2 esetén toroidális irányú fluxusváltozás lép fel, erre poloidális áram indulna, melyet a mágneses tér toroidális irányba eltérít.

3.5.7. Numerikus megfontolások, egyszerűsítési lehetőségek

Míg elméletileg a sűrűségmátrix (3.53), (3.60) és (3.67) alakjai matematikailag mind ekvivalensek kihasználva a Theta-függvények moduláris transzformációs (A.25) tulajdonságát, addig numerikus kiértékelés szempontjából nagy különbségek-

kel bírnak. A Theta-függvények implementációjában a függvényérték eltolt Gauss-i tagok és fázisfaktorok szorzatának csonkolt végtelen összege, ezért fontos, hogy az összeadandó Gauss-i tagok hamar lecsengjenek, kicsi legyen a szélességük. Vizsgáljuk a tisztán képzetes τ_1 és τ_2 határértékeit a hőmérséklet függvényében

$$\lim_{\beta \rightarrow \infty} |\tau_1| = \lim_{\beta \rightarrow \infty} |\tau_2| = 2N_\phi \frac{L_2}{L_2} \sin \theta, \quad (3.76)$$

$$\lim_{\beta \rightarrow 0} |\tau_1| = 0, \quad (3.77)$$

$$\lim_{\beta \rightarrow 0} |\tau_2| = \infty. \quad (3.78)$$

A Theta-függvényeket kifejtve a sűrűségmátrix alakja

$$\begin{aligned} \rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \beta) = \frac{1}{\ell L_1 \sqrt{\pi}} \sqrt{\frac{u}{1-u^2}} \sum_{m=0}^{N_\phi-1} \left\{ \sum_{n_1=-\infty}^{\infty} A^{(\prime)}(m, n_1, 0) \sum_{n_2=-\infty}^{\infty} B^{(\prime)}(m, n_2, 0) + \right. \\ \left. + \sum_{n_1=-\infty}^{\infty} A^{(\prime)}\left(m, n_1, \frac{1}{2}\right) \sum_{n_2=-\infty}^{\infty} B^{(\prime)}\left(m, n_2, \frac{1}{2}\right) \right\}, \quad (3.79) \end{aligned}$$

ahol

$$\begin{aligned} A(m, n_1, d) = \exp \left\{ i\pi\tau_1 \left(n_1 + a_m + d + \frac{y+y'}{2L_2 \sin \theta} \right)^2 + \right. \\ \left. + 2\pi i N_\phi (n_1 + a_m + d) \frac{x-x'}{L_1} \right\}, \quad (3.80) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} A'(m, n_1, d) = \sqrt{\frac{i}{\tau_1}} \exp \left\{ \frac{i(x'-x)(y+y')}{2\ell^2} + \frac{\pi}{i\tau_1} \left(n_1 + N_\phi \frac{x'-x}{L_1} \right)^2 + \right. \\ \left. + 2\pi i n_1 \left(\frac{y+y'}{2L_2 \sin \theta} + a_m + d \right) \right\}, \quad (3.81) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} B(m, n_2, d) = \exp \left\{ i\pi\tau_2 \left(n_2 + d + \frac{y-y'}{2L_2 \sin \theta} \right)^2 + \right. \\ \left. + 2\pi i (n_2 + d) \left(N_\phi \frac{x+x'}{L_1} + 2b_m + 2N_\phi a_m \Re\{\tau\} \right) \right\}, \quad (3.82) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} B'(m, n_2, d) = \sqrt{\frac{i}{\tau_2}} \exp \left\{ \frac{i(y'-y)(x+x')}{2\ell^2} + i\pi \frac{(y'-y)(2b_m + 2N_\phi a_m \Re\{\tau\})}{L_2 \sin \theta} + \right. \\ \left. + \frac{\pi}{i\tau_2} \left(n_2 - N_\phi \frac{x+x'}{L_1} - (2b_m + 2N_\phi a_m \Re\{\tau\}) \right)^2 + 2\pi i n_2 \left(\frac{y-y'}{2L_2 \sin \theta} + d \right) \right\}. \quad (3.83) \end{aligned}$$

Akkor érdemes A -t használni, ha β nagy és $\text{th}\left(\frac{\beta\hbar\omega_c}{2}\right) > \frac{L_1}{2N_\phi L_2 \sin \theta}$, egyébként, és kis β esetén mindig A' -t. B és B' közül szinte minden esetben B használandó, kivéve

ha a tórusz nagyon lapított, N_ϕ kicsi és β nagy. Megjegyzendő, hogy a vesszős és vesszőtlen mennyiségek tagonként nem egyenlőek, csak összegzés után ekvivalensek.

Használjuk (3.81) és (3.82) alakokat, melyek garantáltan a teljes hőmérséklettartományon relatíve jól teljesítenek, különösen kis β esetén. (3.45) és (3.52) alapján el tudjuk végezni az m -re való összegzést, ha $\Re\{\tau\} \in \mathbb{Z}$, vagyis ha

$$\Re\{\tau\} = \frac{2k}{N_\phi} = k', \quad k' \in \mathbb{Z}, \quad (3.84)$$

mely egy szigorúbb feltétel, mint (3.52), de természetesen derékszögű tóruszra, ami a szimuláció szempontjából is a legrelevánsabb lehet, mindkettő triviálisan teljesül. Ezzel kapjuk a következő kifejezést:

$$\begin{aligned} \rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \beta) &= \frac{1}{2\pi\ell^2} \frac{\sqrt{u}}{1-u} \exp\left(i \frac{(x' - x)(y + y')}{2\ell^2}\right) \times \\ &\quad \left\{ \sum_{n_1=-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{\left(\frac{1+u}{1-u}\right)}{4\ell^2} (x - x' - n_1 L_1)^2 + \pi i n_1 \left(N_\phi \frac{y + y'}{L_2 \sin \theta} + \frac{\phi_1}{\pi}\right)\right) \times \right. \\ &\quad \times \sum_{n_2=-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{\left(\frac{1+u}{1-u}\right)}{4\ell^2} (y - y' + (2n_2)L_2 \sin \theta)^2 + \right. \\ &\quad \left. \left. + \pi i (2n_2) \left(N_\phi \frac{x + x'}{L_1} - \frac{\phi_2 - k' \phi_1}{\pi} - N_\phi k'\right)\right) + \right. \\ &+ \sum_{n_1=-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{\left(\frac{1+u}{1-u}\right)}{4\ell^2} (x - x' - n_1 L_1)^2 + \pi i n_1 \left(N_\phi \frac{y + y'}{L_2 \sin \theta} + \frac{\phi_1}{\pi} + N_\phi\right)\right) \times \\ &\quad \times \sum_{n_2=-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{\left(\frac{1+u}{1-u}\right)}{4\ell^2} (y - y' + (2n_2 + 1)L_2 \sin \theta)^2 + \right. \\ &\quad \left. \left. + \pi i (2n_2 + 1) \left(N_\phi \frac{x + x'}{L_1} - \frac{\phi_2 - k' \phi_1}{\pi} - N_\phi k'\right)\right) \right\}, \quad (3.85) \end{aligned}$$

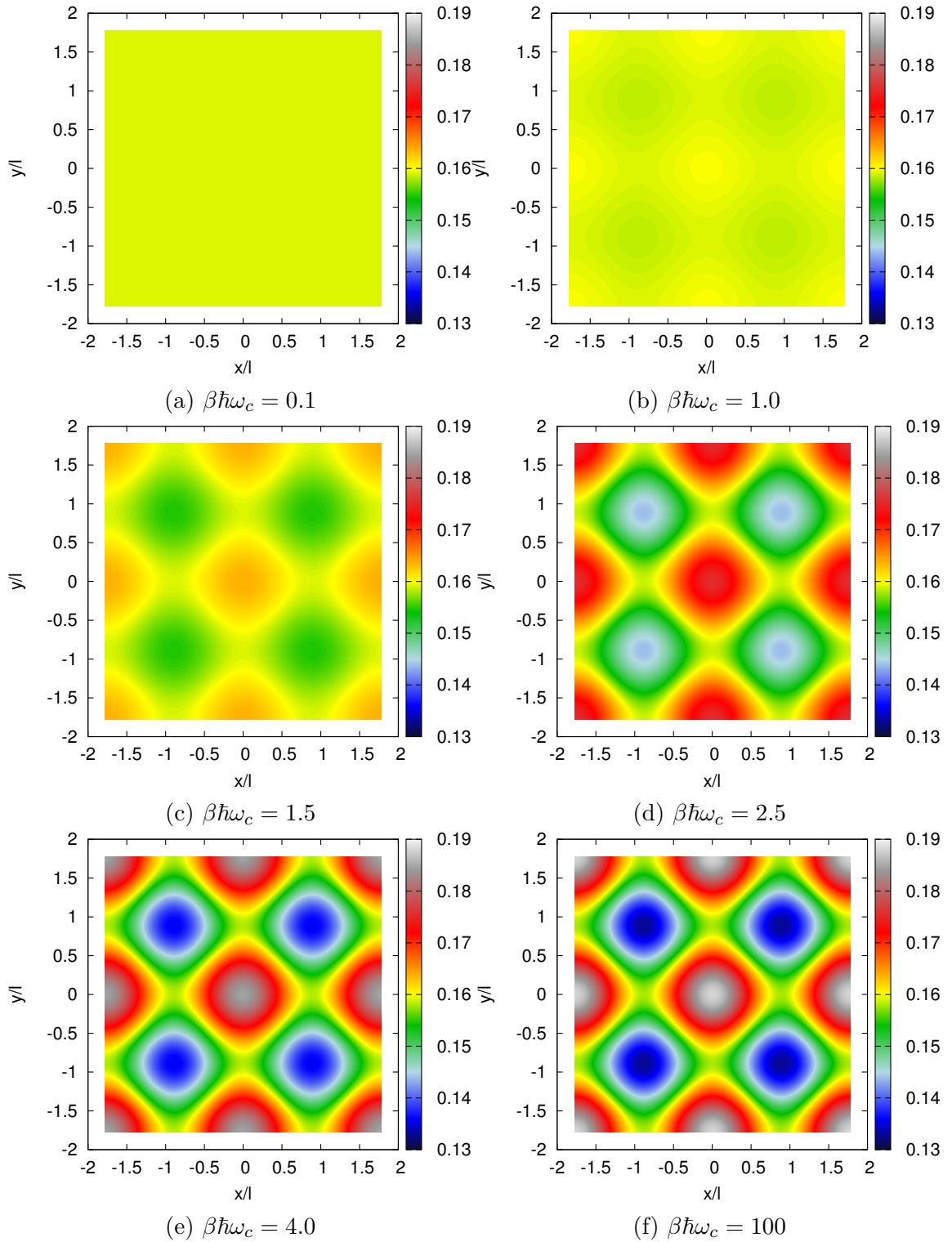
amelyben már $4N_\phi$ helyett csak 4 összegzést kell végezni, ami főleg nagy N_ϕ értékek esetén nagy nyereség. Ez a szimuláció szempontjából releváns, ha nem nagyon kevés részecskére szeretnénk futtatni, hiszen $(\nu = \frac{N_e}{N_\phi})$, ahol ν a fizikailag adott paraméter, a Landau-szintek betöltöttsége, N_e az elektronok száma a szimulációban. Ha

ráadásul N_ϕ páros, akkor összevonható a nagy összeg két tagja:

$$\begin{aligned} \rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \beta) &= \frac{1}{2\pi\ell^2} \frac{\sqrt{u}}{1-u} \exp\left(i \frac{(x' - x)(y + y')}{2\ell^2}\right) \times \\ &\quad \left\{ \sum_{n_1=-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{\left(\frac{1+u}{1-u}\right)}{4\ell^2} (x - x' - n_1 L_1)^2 + \pi i n_1 \left(N_\phi \frac{y + y'}{L_2 \sin \theta} + \frac{\phi_1}{\pi}\right)\right) \times \right. \\ &\quad \left. \times \sum_{n_2=-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{\left(\frac{1+u}{1-u}\right)}{4\ell^2} (y - y' + n_2 L_2 \sin \theta)^2 + \pi i n_2 \left(N_\phi \frac{x + x'}{L_1} - \frac{\phi_2 - k' \phi_1}{\pi}\right)\right) \right\}. \end{aligned} \quad (3.86)$$

3.5.8. Véges méret effektus

A kompakt geometria lehetővé teszi, hogy kis szimulációs rendszerrel tömbi tulajdonságokat vizsgáljunk, de a véges méret torzítani is fogja az eredményeket a végtelen vagyis makroszkópikus rendszerben mérhetőkhöz képest. Egyszerűen tetten érhető ez az itt vizsgált tórusz-rendszeren is például a térbeli sűrűséget vizsgálva. A részecskesűrűség operátorának pozíció-bázisbeli mátrixeleme $\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$. Ennek várhatóértékét képezve (3.1) alapján az egyrészecske termális sűrűségmátrixszal (3.86) adódik az egyrészecske rendszer adott hőmérsékleten mérhető átlagos térbeli sűrűségeloszlása. Erre azt várjuk, hogy az ideális végtelen rendszerben teljesen homogén, hiszen semmi nem bontja meg a térbeli szimmetriát. Különböző hőmérsékleteken ábrázolva a várható részecskesűrűséget a tórusz principális tartományában (3.8. ábra), vagyis abban az egységcellában, melyet a periodikus képek közül kitüntetünk, mint középső, azt találjuk, hogy alacsony hőmérsékleteken, mikor a részecske mágneses termális hullámhossza $\lambda_T \propto \ell \sqrt{\left(\frac{1-u}{1+u}\right)}$ összemérhetővé válik a tórusz L_1 illetve L_2 méreteivel, térbeli fluktuációk adódnak a sűrűségben. ϕ_1 és ϕ_2 fázisok forgatásával térben mozgathatók a fluktuációk, így kiátlagolható a véges méret effektus [11].



3.8. ábra. A mérhető részecskesűrűség várható értékének ($\rho_{prob}(\mathbf{r}, \mathbf{r}, \beta)$) véges cellaméret miatti $1/2\pi$ átlagérték körüli térbeli fluktuációja a principális tartományban, a hőmérséklet függvényében, $N_\phi = 2$, $L_1/L_2 = 1$, $\theta = 90^\circ$, $\phi_1 = \phi_2 = 0$

4. fejezet

Fázisfixálás, mintavételezés

E fejezetben bemutatom, milyen további megfontolások mellett lehetséges mágneses esetben is használni a pályaintegrál Monte Carlo technikát és ismertetem az általam kitalált, a szimuláció léptetését szolgáló közelítő mintavételezési technikát periodikus, nem-mágneses és mágneses esetekben, valamint összefoglalom a technika hatékonyságának vizsgálata során tapasztaltakat.

4.1. Fázisfixálás

Abban az esetben, ha a termális sűrűségmátrix komplex értékű, mint mágneses tér jelenléte esetén 3.3 és 3.5 részekben láttuk, a 2. fejezetben bemutatott valószínűségi értelmezésen alapuló Metropolis Monte Carlo kiértékelés közvetlenül nem végezhető el. Akkineni nyomán [4] tekintsük a kölcsönható sokrészecske rendszer komplex sűrűségmátrixát

$$\rho(\mathbf{R}, \mathbf{R}', \beta) = \tilde{\rho}(\mathbf{R}, \mathbf{R}', \beta) \exp(i\phi(\mathbf{R}, \mathbf{R}', \beta)) \quad (4.1)$$

alakban, ahol $\tilde{\rho}$ a sűrűségmátrix abszolútértéke, ϕ pedig a fázisa (mely persze $n \times 2\pi$ erejéig nem egyértelmű). Vizsgáljuk a sűrűségmátrix β képzetes időbeli fejlődését (3.7) Bloch-egyenlet alapján (3.27) mágneses Hamilton operátorral! Szétválasztva a valós és képzetes részét a kapott egyenletnek adódik, hogy

$$\frac{d\tilde{\rho}}{d\beta} = \lambda \nabla^2 \tilde{\rho} - \left[V + \lambda \left((\nabla\phi)^2 - 2\frac{e}{\hbar} \mathbf{A} \nabla\phi - \frac{e^2}{\hbar^2} \mathbf{A}^2 \right) \right] \tilde{\rho} = \quad (4.2)$$

$$= \lambda \nabla^2 \tilde{\rho} - \left[V + \lambda (\Im \{ \mathbf{D}\phi \})^2 \right] \tilde{\rho},$$
$$\frac{d\phi}{d\beta} = \lambda \left[\nabla^2 \phi + 2 \frac{\nabla\tilde{\rho} \nabla\phi}{\tilde{\rho}} - 2 \frac{e}{\hbar} \frac{\mathbf{A} \nabla\tilde{\rho}}{\tilde{\rho}} - \frac{e}{\hbar} \operatorname{div} \mathbf{A} \right], \quad (4.3)$$

ahol a jelölések (3.28) alapján értendők, szokásosan $\lambda = \hbar^2/2m$. Ez egy csatolt, nem-lineáris differenciálegyenlet rendszer, a megoldása valószínűleg reménytelen próbálkozás lenne, viszont ha élünk azzal a közelítéssel, hogy a fázis nem fejlődik képzetes időben, vagyis $\frac{d\phi}{d\beta} = 0$, a fennmaradó (4.2) egyenlet segít egy mintavételezhető rendszer megalkotásában. A fázisfixálás, vagyis a fázis változatlanóságának feltevése egy nem jól kontrollált közelítés, működésének helyességét tapasztalati úton ellenőrizhetjük utólagosan. (4.2) alakját tekintve (a fázis rögzítése után) egy Bloch-egyenlet $\tilde{\rho}$ -ra nézve, melyben az effektív potenciál

$$V_{eff}(\mathbf{R}) = V(\mathbf{R}) + \lambda (\Im \{ \mathbf{D}\phi(\mathbf{R}) \})^2. \quad (4.4)$$

A továbbiakban tehát mágneses rendszert úgy kezelhetünk, szimulálhatunk, hogy (2.8) alapján

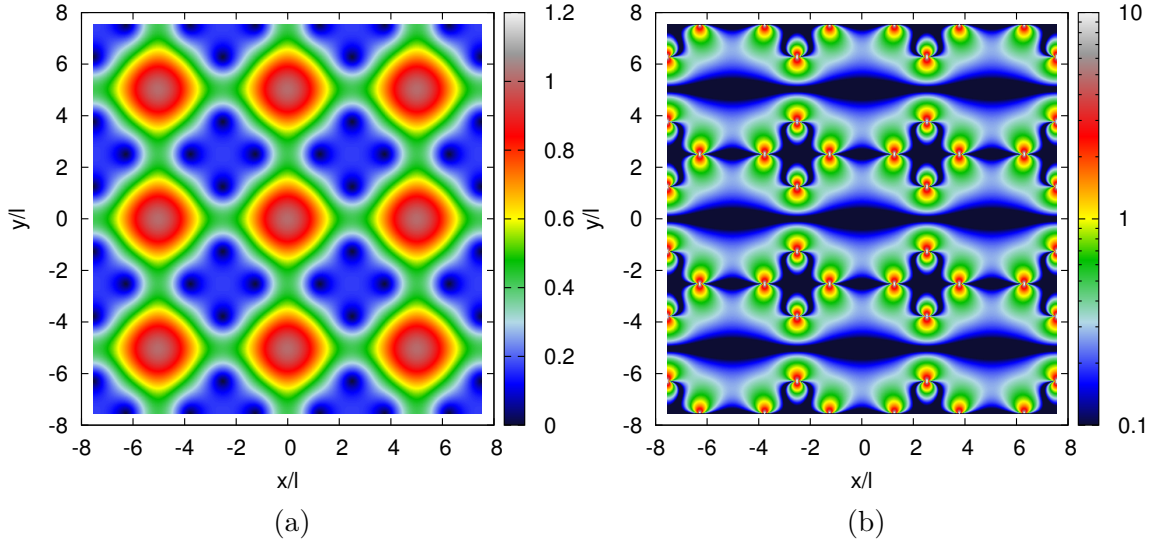
$$K^m = -\ln \left(\left| \rho_0 \left(\mathbf{R}_{m-1}, \mathbf{R}_m, \frac{\beta}{M} \right) \right| \right) \quad (4.5)$$

kinetikus link-hatást választunk, ahol ρ_0 a mágneses egyrészecske termális sűrűségmátrix, a kölcsönhatást pedig U^m adja, melyet a használt közelítés és az effektív V_{eff} potenciál alapján készítünk el, és ami akkor sem tűnik el, ha a valódi rendszer kölcsönhatásmentes. A fázis rögzítését a vizsgálandó rendszer tulajdonságainak függvényében kell végezni, például $T = 0$ hőmérsékletű, ismert hullámfüggvényű, megfelelő sokrészecskés korrelációkat tartalmazó állapot $\Psi^*(\mathbf{R}')\Psi(\mathbf{R})$ sűrűségmátrixának fázisához, vagy ha van jobb közelítésünk, mely véges hőmérsékletű gerjesztéseket is figyelembe tud venni, akkor ahhoz. A fázis gradienseinek számításához hasznos a

$$\nabla\phi = \Im \left\{ \frac{\mathbf{D}\rho}{\rho} \right\} + \frac{e}{\hbar} \mathbf{A} \quad (4.6)$$

képlet, mivel a sima gradiens nem, míg a kovariáns derivált felcserél a mágneses eltolásokkal.

Szemléletes kép kapható V_{eff} szerepéről a 4.1. ábra alapján. Ezen a mágneses egyrészecske termális sűrűségmátrix $\tilde{\rho}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \beta)$ abszolútértéke (4.1a. ábra) és ugyanezen mennyiségből $V = 0$ esetén számított $V_{eff}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ potenciál (4.1b. ábra) látható. A potenciál értéke ott nő élesen nagyra, ahol a sűrűségmátrixnak zérusai vannak, máshol elég sima. Vagyis szimulációbeli hatása az, hogy a fázistérben bolyongó időszeltek elől elzárja a rögzítésre szolgáló állapot zérushelyeit, azok elkerülésére kényszeríti őket, ezzel a kívánt korrelációkat beépítve a szimulációba.



4.1. ábra. (a) A sűrűségmátrix $\tilde{\rho}$ abszolútértéke (valószínűségi normálással), és (b) a (4.4) szerinti V_{eff} értéke $V(\mathbf{R}) = 0$ esetén egy 3×3 cellarácson, $N_\phi = 4$, $\beta\hbar\omega_c = 10$, $L_1/L_2 = 1$, $\theta = 90^\circ$, $\phi_1 = \phi_2 = 0$, $\mathbf{r}' = (0, 0)$, ((b) értékkészlete a jobb láthatóság érdekében csonkítva lett, valójában $0 - 10^{16}$ tartományon vesz fel értékeket)

4.2. Mintavételezés

4.2.1. Általános megfontolások, klasszikus technika

A 2. fejezet (2.13) képlete mutatja be, hogyan lehetne egyszerre egyetlen időszületet mozgatva a lehető leghatékonyabb mintavételezést és így a leggyorsabban konvergáló szimulációt végezni. Ezt neveztük *Heat Bath Transition Rule*-nak, aminek használata esetén minden javasolt mozdítás elfogadásra kerülne a Metropolis algoritmusban, hiszen éppen abból az eloszlásból mintavételezzük, mely a két szomszéd adott rögzítése melletti egzakt egyensúlyi eloszlását írja le a vizsgált időszaknak. Két szépséghibája van ennek az elméletileg tökéletes megoldásnak: az első, hogy a kölcsönható sokrészecske rendszer egzakt sűrűségmátrixát nem ismerjük, hiszen ha ismernénk, analitikusan vizsgálhatnánk a rendszert és nem lenne szükség szimulációra. A másik probléma, hogy ha nem a teljes időszakot, csak néhány részecskét például és/vagy nem a teljes térben, csak a korábbi pozíció egy véges környezetében szeretnék mozgatni, akkor a mintavételi eloszlás normálása (2.13) egyenlettel ellentétben, ahol ki tudtuk használni a sűrűségmátrix szorzattulajdonságát, nehezzé és költségessé válik. Ezért klasszikusan azt a közelítést szokás alkalmazni [1], hogy a mintavételezést a szabad sűrűségmátrix alapján végezzük és a visszautasítás gondoskodik majd a helyes eloszlásról, persze ezzel veszítve az elfogadási rátában, viszont a szabad sűrűségmátrix adta eloszlást gyorsan és hatékonyan elő lehet állítani. (3.13) szabad, nem-periodikus, nem-mágneses sűrűségmátrix alakját figyelembe véve, egy

m időszel n -edik részecskéjének egy dimenzióbeli $x_m^{(n)}$ koordinátájára (hiszen ez az alak triviálisan faktorizálódik), rögzítve a szomszédos időszeltek $x_{m-1}^{(n)}$ és $x_{m+1}^{(n)}$ koordinátáit

$$\begin{aligned}
T(x_m^{(n)}) &= \frac{\rho_0(x_{m-1}^{(n)}, x_m^{(n)}, \tau) \rho_0(x_m^{(n)}, x_{m+1}^{(n)}, \tau)}{\rho_0(x_{m-1}^{(n)}, x_{m+1}^{(n)}, 2\tau)} = \\
&= \frac{\sqrt{8\pi\lambda\tau}}{4\pi\lambda\tau} \exp\left(-\frac{(x_{m-1}^{(n)} - x_m^{(n)})^2}{4\lambda\tau} - \frac{(x_m^{(n)} - x_{m+1}^{(n)})^2}{4\lambda\tau} + \frac{(x_{m-1}^{(n)} - x_{m+1}^{(n)})^2}{8\lambda\tau}\right) = (4.7) \\
&= \frac{1}{\sqrt{2\pi\lambda\tau}} \exp\left(-\frac{\left(x_m^{(n)} - \frac{x_{m-1}^{(n)} + x_{m+1}^{(n)}}{2}\right)^2}{2\lambda\tau}\right)
\end{aligned}$$

mintavételezési eloszlás adódik. Ez egy normált Gauss-i eloszlás a rögzített szomszédok tömegközéppontja körül, amit sztenderd algoritmusokkal hatékonyan és könnyen lehet mintavételezni számítógépen egyenletes pszeudorandom számokból való előállításal. Ha nincs kölcsönhatás a rendszerben, az elfogadás ideális, kölcsönható esetben a potenciál alakjától erősen függ e módszer hatékonysága, mely egyénileg tesztelendő. Ezt a technikát nevezi Ceperley [1] *Free-Particle Sampling*-nek, vagyis szabad részecske mintavételezésnek, melynek óriási előnye, hogy egyszerűen kiterjeszhető egyszerre több időszelre mozgó mintavételezésre (*Multislice sampling*), mellyel drasztikus mértékben meggyorsítható a fázistér bejárása és mely nélkül a *PIMC* technika használhatatlannak bizonyult volna. E módszer hatékony, többszintű megvalósítása az ún. *Bisection method* (részletesen lásd. [1],[5]), melynek lényege, hogy az időszel-gyűrűk egy 2^k link-ből álló szakaszát kivágja és a végpontok megtartásával intervallumot felezve először a középső szeletet sorsolja újra, majd ha ezt az adott szinten elfogadja, rekurzívan folytatja az intervallumfelező sorsolást, amíg vissza nem épül a kivágott szakasz. Nagy előny, hogy így sokkal nagyobb ugrásokban konvergálhat a klasszikus polimerrendszer az egyensúlyi helyzethez, nem ragad meg a konfigurációs tér egy valószínűtlen tartományában, illetve a valószínűtlen konfigurációk a visszaépítés korai szakaszában elvetődnek, nem végzünk feleslegesen finom mozgást, ha a durvább felbontású mozgás eredménye nagyon valószínűtlen.

4.2.2. Nem-mágneses, periodikus eset

Ha továbbra is nem-mágneses esetet nézünk, de periodikus határfeltételekkel egy derékszögű d -dimenziós dobozban (tehát amiben a sűrűségmátrix részecskékre és dimenzióra is faktorizálható), a rendszer egy részecskéjének egy dimenzióra adódó nem kölcsönható sűrűségmátrixa (3.26) alakú. Az előző rész alapján ebből kellene

egy módosított *Free-Particle Sampling* módszert kidolgozni. A módosításra azért van szükség, mert a periodikus képek hatása a principális tartományban erősen belóghat, módosíthatja a nem periodikus esetben adódó, egycsúcsú Gauss-eloszlást. (3.26) sűrűségmátrixra elvégezve (A.22) moduláris transzformációt adódik, hogy

$$\rho(x, x', \beta) = \frac{1}{\sqrt{4\pi\lambda\beta}} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{(x - x' + nL)^2}{4\lambda\beta}\right). \quad (4.8)$$

Ezt az alakot felhasználva (4.7) egyenletben, kapjuk a mintavételezési eloszlásra, némi átalakítás után (szintén $m-1$ és $m+1$ rögzített időszelék között mintavételezve az m -ediket, τ inverz hőmérsékletű linkekkel), hogy

$$\begin{aligned} T(x'_m, [x_{m-1}, x_{m+1}, \tau]) &= \\ &= \alpha_0(x_{m-1}, x_{m+1}, \tau) \sum_{k=-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{((x_{m-1} + x_{m+1})/2 - x'_m + kL)^2}{2\lambda\tau}\right) + \\ &+ \alpha_1(x_{m-1}, x_{m+1}, \tau) \sum_{k=-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{((x_{m-1} + x_{m+1} + L)/2 - x'_m + kL)^2}{2\lambda\tau}\right), \end{aligned} \quad (4.9)$$

melyben

$$\alpha_0(x_{m-1}, x_{m+1}, \tau) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\lambda\tau}} \frac{\sum_{k'=-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{((x_{m-1} - x_{m+1})/2 + k'L)^2}{(2\lambda\tau)}\right)}{\sum_{k''=-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{((x_{m-1} - x_{m+1})/2 + k''L/2)^2}{(2\lambda\tau)}\right)}, \quad (4.10)$$

$$\alpha_1(x_{m-1}, x_{m+1}, \tau) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\lambda\tau}} \frac{\sum_{k'=-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{((x_{m-1} - x_{m+1} + L)/2 + k'L)^2}{(2\lambda\tau)}\right)}{\sum_{k''=-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{((x_{m-1} - x_{m+1})/2 + k''L/2)^2}{(2\lambda\tau)}\right)}. \quad (4.11)$$

Láthatóan ez az eloszlás Gauss-i csúcsok összege, így megtehetnénk, hogy x_{m-1} -et a principális tartományban rögzítve megkeressük a környező periodikus képeket is figyelembe véve a hozzá legközelebb eső x_{m+1} képet, és a kettő között félúton egy Gauss-csúcsot elhelyezve úgy járnánk el, mint nem-periodikus esetben. Ez akkor lenne jó közelítés, ha csak egy domináns csúcsa lenne az eloszlásnak a principális tartományban, ami általában nem teljesül. (4.9) tulajdonságait vizsgálva azt találjuk, hogy domináns csúcs $(x_{m-1} + x_{m+1})/2$ periodikus képeinél van, amennyiben a principális tartománybeli koordinátákat nézve $|x_{m-1} - x_{m+1}| \ll L/2$, $(x_{m-1} + x_{m+1} + L)/2$ periodikus képeinél, ha $|x_{m-1} - x_{m+1}| \gg L/2$, viszont két hasonló nagyságrendű csúcs jelenik meg az előbb leírt centrumokon, amennyiben $|x_{m-1} - x_{m+1}| \approx L/2$. A periodikus képek mind ekvivalensek, ezért a következő mintavételezési algoritmus tűnik célravezetőnek: nézzük a principális tartománybeli x_{m-1} és x_{m+1} koordinátákat

és válasszunk egy olyan eloszlást, ami két Gauss-i csúcs összege, melyek centrumai $(x_{m-1} + x_{m+1})/2$ illetve $(x_{m-1} + x_{m+1} + L)/2$, akkor is ha ezek esetleg nem a principális tartományba esnek. Szórásuk egyformán $\sigma = \sqrt{\lambda\tau}$ és relatív súlyuk $\alpha_0/(\alpha_0 + \alpha_1)$ illetve $\alpha_1/(\alpha_0 + \alpha_1)$, így igazából ezek (4.10) és (4.11) szerinti normálására nincs is szükség, sajnos még így is költséges a kiszámításuk. Két ismert eloszlás súlyozott összegét úgy mintavételezhetjük [21] alapján, hogy először a relatív súlyok szerinti valószínűséggel választunk egy eloszlást, majd ebből az eloszlásból veszünk egy mintát. Ha ez megvan, visszaskálázzuk a kapott x'_m pontot a principális tartományba és az elfogadás valószínűsége, miután a visszaskálázás bármelyik periodikus képből jöhetett,

$$A(x_m \rightarrow x'_m) = \tag{4.12}$$

$$\min \left(1, \frac{\sum_{k=-\infty}^{\infty} \sum_{l=0}^1 \exp \left(- \left((x_{m-1} + x_{m+1} + lL)/2 - x'_m + kL \right)^2 / (2\lambda\tau) \right)}{\sum_{k=-\infty}^{\infty} \sum_{l=0}^1 \exp \left(- \left((x_{m-1} + x_{m+1} + lL)/2 - x_m + kL \right)^2 / (2\lambda\tau) \right)} \right).$$

Szabad részecske szimulációjában kiprobálva e módszert, egyetértésben azzal, hogy a mintavételezés ebben az esetben tulajdonképpen egzaktul teljesíti a *Heat Bath Transition Rule*-t, az elfogadási ráta minden szinten 1-nek adódik.

4.2.3. Mágneses, periodikus eset

A 4.1 részbeli megfontolások, a két dimenziós mágneses egyrészecske sűrűségmátrix derékszögű tóruszon érvényes (3.86) alakja és az eddigi mintavételezéssel kapcsolatos részek tapasztalatai alapján a

$$T(x'_m, y'_m, [x_{m-1}, y_{m-1}, x_{m+1}, y_{m+1}, \tau]) \propto$$

$$\propto |\rho_0(x_{m-1}, y_{m-1}, x'_m, y'_m, \tau) \rho_0(x'_m, y'_m, x_{m+1}, y_{m+1}, \tau)| \tag{4.13}$$

eloszlás egy alkalmas becslését kéne megtalálni, ahol ρ_0 (3.86) alakú, mivel a szimuláció hatékonysága szempontjából ez a speciális választás a legkedvezőbb ($k' = 0$, $\theta = 90^\circ$, N_ϕ páros). A normálásról a közelítés megalkotása után gondoskodunk. Ami itt jelentősen megnehezíti a dolgot, az a Gauss-i csúcsok komplex fázisfaktorokkal való összeadása, mely azt eredményezi, hogy a burkolófelület (abszolútérték) Gauss-ok összegeként való közelítése sokkal bonyolultabb, mint nem-mágneses esetben. A

keresett eloszlás alakja:

$$\begin{aligned}
& T(x'_m, y'_m, [x_{m-1}, y_{m-1}, x_{m+1}, y_{m+1}, \tau]) \propto \\
& \propto \left| \sum_{l=0}^1 \left(\sum_{k_1} \exp \left(-\frac{\left(\frac{1+u}{1-u}\right)}{2\ell^2} \left((x_{m-1} + x_{m+1} + lL_1)/2 - x'_m + k_1L_1 \right)^2 \right) \times \right. \right. \\
& \quad \times \sum_{k_2} \exp \left(-\frac{\left(\frac{1+u}{1-u}\right)}{2\ell^2} \left((x_{m-1} - x_{m+1} + lL_1)/2 + k_2L_1 \right)^2 - \right. \\
& \quad \left. \left. -i(2k_2 + l) \left(\phi_1 + \frac{\pi N_\phi}{L_2} (2y'_m + y_{m-1} + y_{m+1}) \right) \right) \right| \times \\
& \times \left| \sum_{l=0}^1 \left(\sum_{k_1} \exp \left(-\frac{\left(\frac{1+u}{1-u}\right)}{2\ell^2} \left((y_{m-1} + y_{m+1} + lL_2)/2 - y'_m + k_1L_2 \right)^2 \right) \times \right. \right. \\
& \quad \times \sum_{k_2} \exp \left(-\frac{\left(\frac{1+u}{1-u}\right)}{2\ell^2} \left((y_{m-1} - y_{m+1} + lL_2)/2 + k_2L_2 \right)^2 - \right. \\
& \quad \left. \left. -i(2k_2 + l) \left(\phi_2 - \frac{\pi N_\phi}{L_1} (2x'_m + x_{m-1} + x_{m+1}) \right) \right) \right|. \quad (4.14)
\end{aligned}$$

Hasonló szerkezetet találunk, mint nem-mágneses esetben (4.9), de sajnálatos módon itt a Gauss-i csúcsokat súlyozó faktorokban is megmaradnak a vesszős y'_m illetve x'_m koordináták, ami miatt a csúcsok súlyai nem lesznek állandók és a komplex interferencia miatt a burkoló csúcsai sem feltétlenül ott lesznek, ahol az első szummákban szereplő Gauss-csúcsok. Jobb megoldási módszer hiányában próbálkozzunk a 4.2.2 részben bevált technikával, mellyel azonban lemondunk a csúcsok helyének többek között a ϕ_1 és ϕ_2 fázisoktól való függésének figyelembevételéről. Tehát most a két dimenzióban összesen négy csúcsot használunk $\mathbf{r}_{i,j} = ((x_{m-1} + x_{m+1})/2 + iL_1/2, (y_{m-1} + y_{m+1})/2 + jL_2/2)$ helyekre centrálva, ahol $i, j = 0, 1$. A csúcsok súlyait $\alpha_{i,j} = T(\mathbf{r}_{i,j}, [\mathbf{r}_{m-1}, \mathbf{r}_{m+1}, \tau])$ értékek adják, az egyes csúcsok szórása $\sigma = \sqrt{(1-u)/(1+u)}\ell$. Mintavételkor sorsolunk egy csúcsot $\alpha_{i,j}$ -vel arányos valószínűséggel, majd e csúcsra centrált 2D normáloszlásból mintavételezünk egy pontot a síkon, amit visszaskálázunk a principális tartományba, végül az elfogadás-kor felösszegzünk a periodikus eltoltakra is, mint korábban.

Mivel e módszer erősen közelítő, rendkívül fontos annak tesztelése, mennyire fed át a javasolt mintavételezési eloszlás a valódi nem-kölcsönható mintavételezési eloszlással. Ennek direkt módja a két eloszlás különbségét jól jellemző hibamértékek definiálása és vizsgálata a paraméterek függvényében. Közvetve szimulációk elfogadási rátájának vizsgálatával mérhetjük fel módszerünk hatékonyságát (lásd. 4.7. ábra). A direkt vizsgálathoz jelöljük $T(\mathbf{r}', \mathbf{r}_0, \mathbf{r}_2, \beta)$ -vel a tényleges- és $T_A(\mathbf{r}', \mathbf{r}_0, \mathbf{r}_2, \beta)$ -vel a közelítő eloszlást, \mathbf{r}' a mintavételezendő időszelvény, \mathbf{r}_0 és \mathbf{r}_2 a rögzített szomszédos

időszeletek, β a link inverz hőmérséklete. Jelölje D a principális tartományt. T és T_A nem feltétlenül megfelelően normáltak a numerikus kiértékelés során, így legyenek

$$N = \int_D d\mathbf{r}' T(\mathbf{r}', \mathbf{r}_0, \mathbf{r}_2, \beta), \quad N_A = \int_D d\mathbf{r}' T_A(\mathbf{r}', \mathbf{r}_0, \mathbf{r}_2, \beta) \quad (4.15)$$

a megfelelő normák. Két féle hibamértéket értelmes bevezetni, a Relatív Hibát:

$$\Delta_{rel} = \frac{1}{(\int_D d\mathbf{r}')} \int_D d\mathbf{r}' \left| \frac{\frac{T_A(\mathbf{r}', \mathbf{r}_0, \mathbf{r}_2, \beta)}{N_A} - \frac{T(\mathbf{r}', \mathbf{r}_0, \mathbf{r}_2, \beta)}{N}}{\frac{T_A(\mathbf{r}', \mathbf{r}_0, \mathbf{r}_2, \beta)}{N_A} + \frac{T(\mathbf{r}', \mathbf{r}_0, \mathbf{r}_2, \beta)}{N}} \right|, \quad (4.16)$$

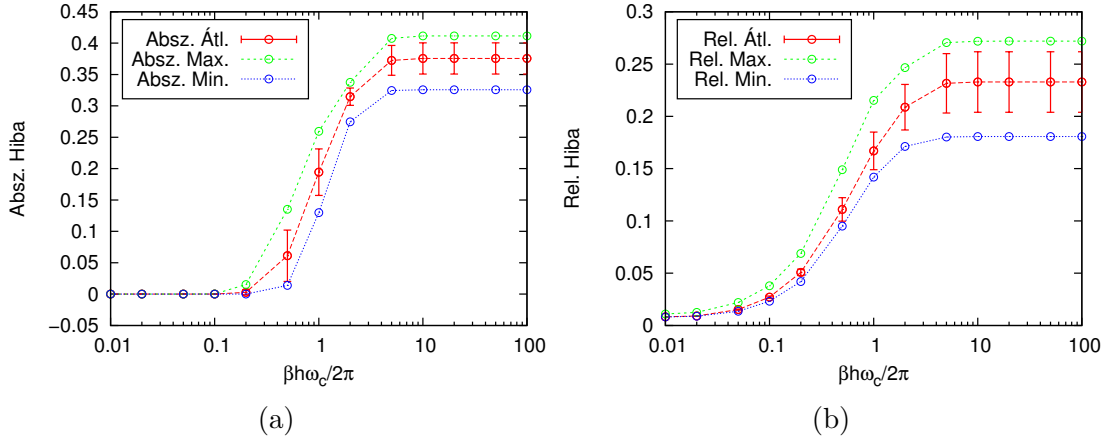
és az Abszolút Hibát:

$$\Delta_{abs} = \frac{1}{(\int_D d\mathbf{r}')} \int_D d\mathbf{r}' \left| \frac{T_A(\mathbf{r}', \mathbf{r}_0, \mathbf{r}_2, \beta)}{N_A} - \frac{T(\mathbf{r}', \mathbf{r}_0, \mathbf{r}_2, \beta)}{N} \right|. \quad (4.17)$$

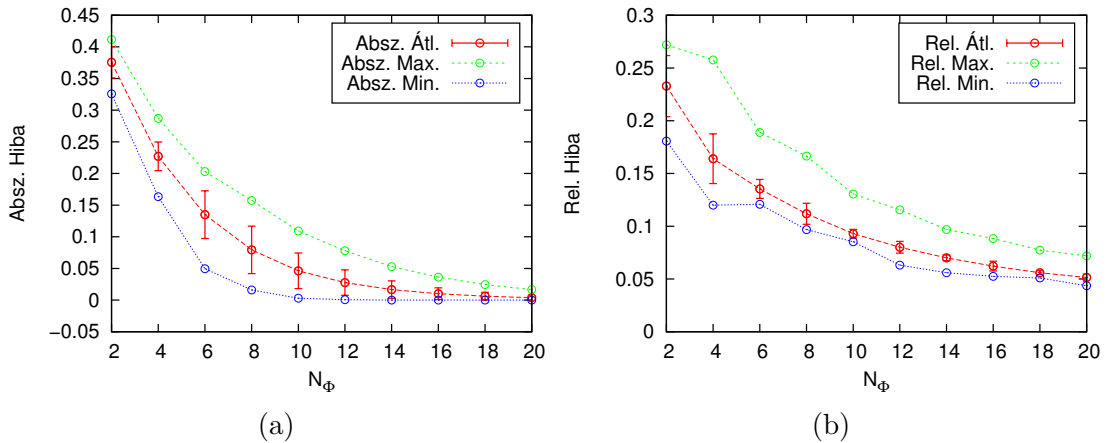
A Relatív Hiba előnyös abból a szempontból, hogy van egy természetes skálája, értéke átlagos százalékos eltérést jelent, viszont hátránya, hogy kis függvényértékek esetén a kis abszolútértékű hibákat felnagyítja, túlsúlyozza ahhoz képest, hogy a közelítés jónak ítélese szempontjából mennyire relevánsak. Az Abszolút Hiba nem értékel túl kis eltéréseket, viszont nincs természetes skálája, értéke azt mutatja meg, hogy abszolútértékben a két egyre normált függvény átlagosan egy pontban mekkora értékkel tér el, ez az érték egynél akár nagyobb is lehet.

Az illeszkedés különböző paramétereiktől való függésének vizsgálatára a séma a következő: feltételezhető, hogy \mathbf{r}_0 és \mathbf{r}_2 szerepe egyforma, rögzítsük tehát $\mathbf{r}_0 = (0, 0)$ értéket a továbbiakban (később ennek mozgatásának függvényében is vizsgáljuk a hibamértékek alakulását) és az \mathbf{r}_2 időszeletet a D principális tartományon végigmozgatva rögzített paraméterek mellett számoljuk a hibamértékek átlagát, szórását, minimális és maximális értékét. A paraméterek: β inverz hőmérséklet, N_ϕ fluxuskvantumok száma, L_2/L_1 arány, ϕ_1 és ϕ_2 fázisszögek és \mathbf{r}_0 . Ennyi paramétertől való függést egyszerre nehéz vizsgálni, ezért érdemesebb egyszerre csak egyet változtatva, a többit pedig az addigi legkedvezőtlenebb értéken hagyva feltérképezni a függések tendenciáját és mértékét. Az eredmények tanúsága szerint a hiba erősen függ a link hőmérsékletétől (4.2. ábra), minél melegebb, klasszikusabb a rendszer (vagy M minél nagyobb), annál jobb az illeszkedés. Erősen függ a hiba továbbá N_ϕ értékétől (4.3. ábra), melyből illeszkedés szempontjából a minél nagyobb érték szerencsés, biztató, hogy $N_\phi = 10$ fölött mindkét hibamérték 0.1 alatti nagy β érték mellett is. Megfigyelhető, hogy erősen függ a hiba nagysága a tórusz oldalainak hosszarányától (4.4. ábra), egyértelműen a négyzetes tórusz választása a legelőnyösebb a jó illeszkedés érdekében. Érdekes módon a ϕ_1 és ϕ_2

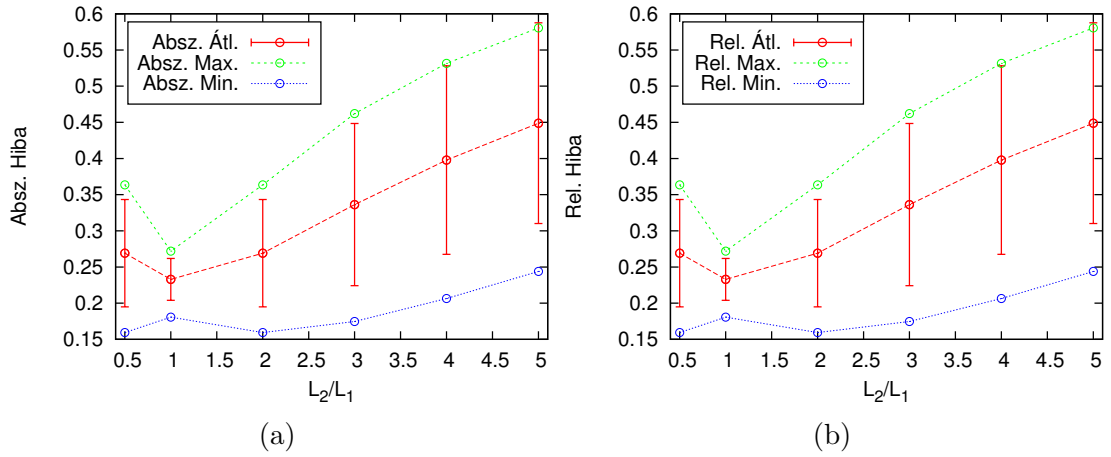
szögektől való függés gyenge (4.5. ábra), mint ahogy az \mathbf{r}_0 időszelvény koordináta választásától is alig függ a hibák értéke (4.6a. és 4.6b. ábrák). A 4.6c. és 4.6d. ábrák azt mutatják be, hogy $\mathbf{r}_0 = (-0.25L, 0.25L)$ választás esetén \mathbf{r}_2 függvényében hogyan alakulnak a hibamértékek (a korábbiakban erre a bejárásra történt az átlagolás és a statisztikák számítása). Láthatóan a hiba térben igen inhomogén és minimális, ha $\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_0 = \frac{L}{2}\mathbf{n}$ és $\mathbf{n} \in \mathbb{Z}^2$.



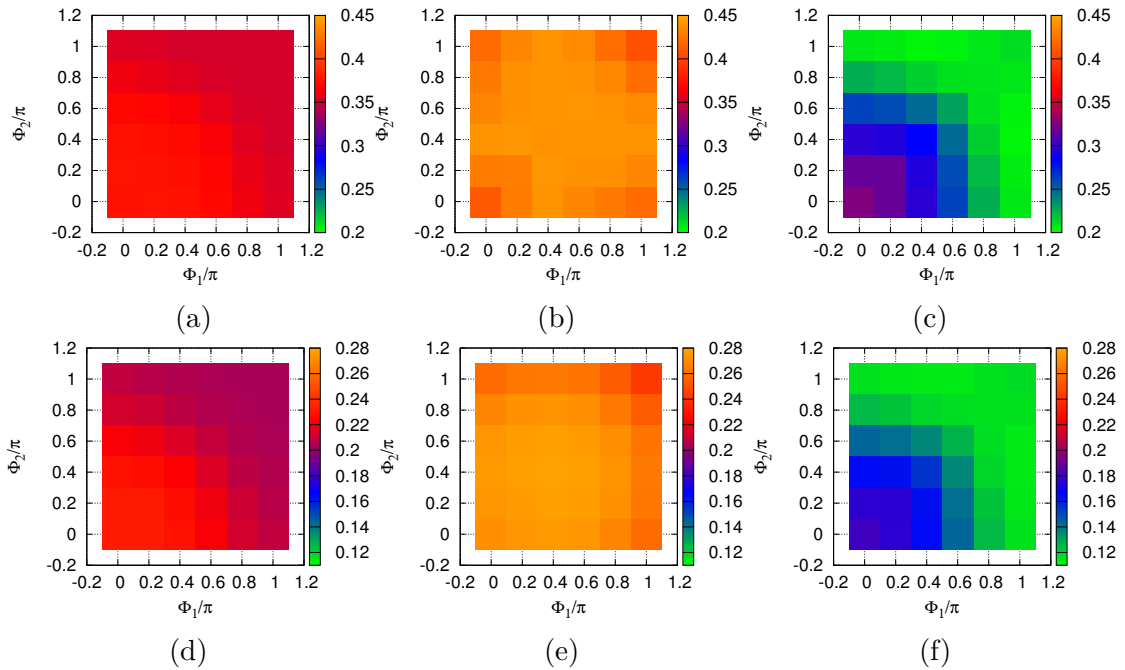
4.2. ábra. Az (a) Abszolút és (b) Relatív Hiba alakulása a link hőmérsékletének függvényében, $N_\phi = 2$, $L_2/L_1 = 1$, $\phi_1 = \phi_2 = 0$, $\mathbf{r}_0 = (0, 0)$.



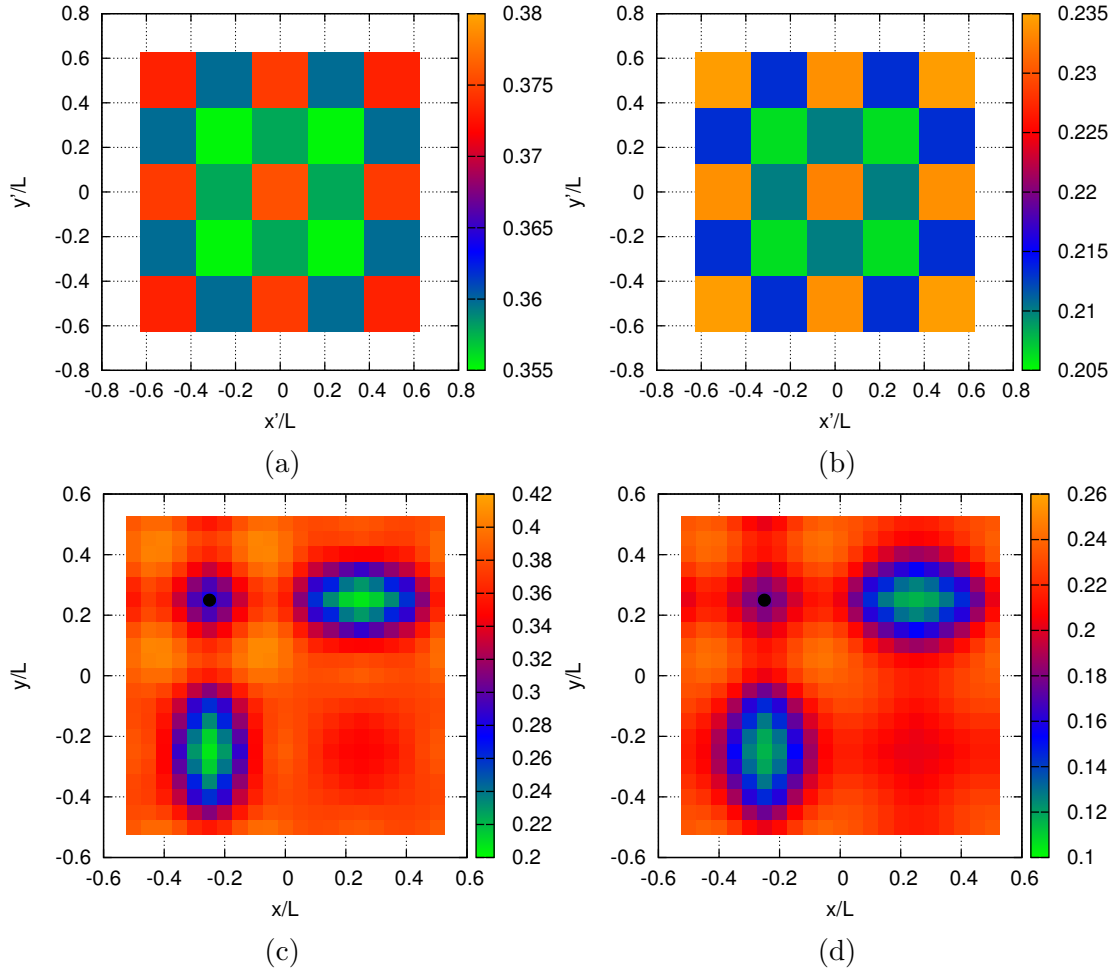
4.3. ábra. Az (a) Abszolút és (b) Relatív Hiba alakulása N_ϕ függvényében, $\beta\hbar\omega_c = 100$, $L_2/L_1 = 1$, $\phi_1 = \phi_2 = 0$, $\mathbf{r}_0 = (0, 0)$.



4.4. ábra. Az (a) Abszolút és (b) Relatív Hiba alakulása az L_2/L_1 arány függvényében, $\beta\hbar\omega_c = 100$, $N_\phi = 2$, $\phi_1 = \phi_2 = 0$, $\mathbf{r}_0 = (0, 0)$.

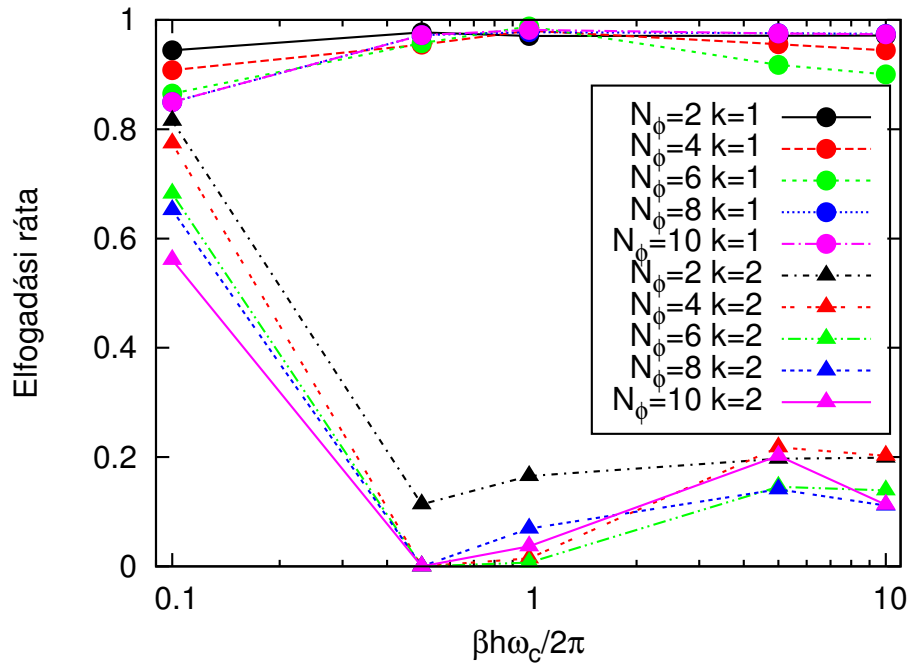


4.5. ábra. Az Abszolút Hiba (a) átlaga, (b) minimuma és (c) maximuma, valamint a Relatív Hiba (d) átlaga, (e) minimuma és (f) maximuma a ϕ_1 és ϕ_2 fázisszögek függvényében, $\beta\hbar\omega_c = 10$, $N_\phi = 2$, $L_2/L_1 = 1$, $\mathbf{r}_0 = (0, 0)$.



4.6. ábra. Az (a) Abszolút és (b) Relatív hiba átlagának alakulása az \mathbf{r}_0 változtatásának függvényében. Az alsó ábrák $\mathbf{r}_0 = (-0.25L, 0.25L)$ időszületet rögzítve (c) Abszolút és (d) Relatív hibamértékek \mathbf{r}_2 mozgatasának függvényében adódó térbeli inhomogenitását szemléltetik, $\beta\hbar\omega_c = 10$, $N_\phi = 2$, $L_2/L_1 = 1$, $\phi_1 = \phi_2 = 0$.

Megvalósítottam egy egyszerű szimulációt a javasolt mintavételezési módszer gyakorlati tesztelésére. Ebben egyetlen szabad töltött részecskét szimulálok 2-dimenzióban, mágneses térben. A fázisrögzítés ennek alapján közvetlenül az egy-részecske termális sűrűségmátrixhoz történik, a V_{eff} hatását a kölcsön-hatás U_{SC} szemiklasszikus közelítésében kezelem [1], [4]. A mozgások elfogadásának arányát különböző hőmérsékleten, különböző N_ϕ értékek esetén és a *Bisection method* $k = 1$ szimpla egyszeletes mozgatás és $k = 2$, háromszeletes (4 link) változatának használatával a 4.7. ábra mutatja. Láthatóan a sima, egyszeletes mozgatások esetén az



4.7. ábra. Egy szabad, mágneses térben mozgó részecskére fázisfixálással végzett szimulációban a léptetés elfogadási rátája a hőmérséklet függvényében különböző N_ϕ értékekre, 2^k linket mozgató, k -szintű *Bisection method* használata esetén

elfogadási ráta igen magas, bár az analitikus megközelítésből jóslott tendenciák nem látszanak igazolódni. A $k = 2$ eset mutatja, hogy hosszabb képzetes idejű szakaszok (linkek) esetén a közelítés jobban elromlik, bár a 20% körüli elfogadás még nem rossz. Az eredmény biztató, de láthatóan van még lehetőség javításra, hogy nagyobb rendszereket is hatékonyan lehessen szimulálni.

5. fejezet

Összefoglaló

E TDK dolgozat előző fejezeteiben ismertettem célkitűzésemet, miszerint mágneses térbe helyezett kétdimenziós elektronrendszerek véges hőmérsékletű fázisdiagramját szeretném vizsgálni kvantum Hall állapotú tartomány környékén, pályaintegrál Monte Carlo módszerű szimulációk segítségével. Ismertettem a klasszikus PIMC technikát és az ahhoz képesti különbségeket, melyeket a fenti probléma kezelése igényel. Sikerült levezetnem a szimuláció szempontjából központi szerepű kváziperiodikus lapostóruszon érvényes egyrészecske termális sűrűségmátrix alakját igen általános feltételek mellett. Részletesen vizsgáltam e mennyiség számos, szimulációs szempontból is fontos tulajdonságát mind analitikusan, mind numerikusan, az általam fejlesztett kódok segítségével. Komplex értékű mennyiségről lévén szó, bemutattam a Monte Carlo kiértékeléshez szükséges fázisrögzítési módszert. Végül kidolgoztam periodikus, nem-mágneses és mágneses esetekben használható mintavételezési technikákat, melyek hatékonyságát numerikusan és szimulálva is teszteltem.

5.1. kitekintés

E munka folytatásaként a közeljövőben a mintavételezés további javítását, a fázisrögzítési technika alapos kitapasztalását és tesztelését valamint a periodikus Coulomb-kölcsönhatás (Ewald-összegzés) implementálását szeretném elvégezni.

A. függelék

Jacobi elliptikus Theta függvények

Periodikus rendszerek vizsgálatánál hamar belátjuk, hogy ezen függvények és tulajdonságaik ismerete igen fontos, éppen ezért ebben a részben összefoglaljuk róluk azt, amit e dolgozatban hasznosítunk. Az irodalomban sok különböző jelölési konvenció található, a következőkben a különböző forrásokból [22], [23], [16], [24], [25] származó összefüggéseket egységesen az általunk használt konvencióban közöljük.

A Jacobi Theta függvények az elliptikus függvények családjába tartozó, két komplex változós, komplex értékű, a komplex síkon az első változójukban duplán kvázi-periodikus analitikus függvények. Általános alakjuk

$$\vartheta \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} (z|\tau) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \exp \left(i\pi\tau(n+a)^2 + 2i(n+a)(z+b\pi) \right), \quad (\text{A.1})$$

ahol $z \in \mathbb{C}$, $\Im\{\tau\} > 0$, $a, b \in \mathbb{R}$, $n \in \mathbb{Z}$, amiből látszik, hogy $0 \leq a, b < 1$ megszorítás elég az általánossághoz. A következő két kvázi-periodicitással rendelkeznek a z változóban ($k \in \mathbb{Z}$):

$$\vartheta \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} (z + k\pi|\tau) = \exp(2i\pi ak) \vartheta \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} (z|\tau), \quad (\text{A.2})$$

$$\vartheta \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} (z + k\pi\tau|\tau) = \exp \left(-i\pi\tau k^2 - 2ik(z + b\pi) \right) \vartheta \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} (z|\tau). \quad (\text{A.3})$$

Könnyen belátható, hogy zérushelyeik $n, m \in \mathbb{Z}$ -re:

$$\left(m + \frac{1}{2} - b \right) \pi + \left(n + \frac{1}{2} - a \right) \pi\tau. \quad (\text{A.4})$$

A periodicitásból látszik, miért lesznek ezek a függvények relevánsak ferdeszögű lapos tóruszon lévő állapotok leírására, hiszen a két kvázi-periódus pont egy parallelogrammát feszít ki a komplex síkon $(\pi, \pi\tau)$ oldalakkal. Látható az is, hogy az a

paraméter a τ irány menti, míg a b a valós tengely menti eltolást kódolja ($s \in \mathbb{R}$):

$$\vartheta \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} (z + s\pi|\tau) = \vartheta \begin{bmatrix} a \\ b + s \end{bmatrix} (z|\tau), \quad (\text{A.5})$$

$$\vartheta \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} (z + s\pi\tau|\tau) = \exp(-i\pi\tau s^2 - 2is(z + b\pi)) \vartheta \begin{bmatrix} a + s \\ b \end{bmatrix} (z|\tau). \quad (\text{A.6})$$

Szükségünk lesz a továbbiakban e függvények deriváltjaira mind z szerint ϑ' , mind τ szerint $\dot{\vartheta}$:

$$\vartheta' \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} (z|\tau) = 2i \sum_n (n + a) \exp(i\pi\tau(n + a)^2 + 2i(n + a)(z + b\pi)), \quad (\text{A.7})$$

$$\vartheta'' \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} (z|\tau) = -4 \sum_n (n + a)^2 \exp(i\pi\tau(n + a)^2 + 2i(n + a)(z + b\pi)), \quad (\text{A.8})$$

$$\dot{\vartheta} \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} (z|\tau) = i\pi \sum_n (n + a)^2 \exp(i\pi\tau(n + a)^2 + 2i(n + a)(z + b\pi)), \quad (\text{A.9})$$

a periodicitás pedig

$$\vartheta' \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} (z + k\pi|\tau) = e^{2i\pi ak} \vartheta' \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} (z|\tau), \quad (\text{A.10})$$

$$\vartheta'' \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} (z + k\pi|\tau) = e^{2i\pi ak} \vartheta'' \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} (z|\tau), \quad (\text{A.11})$$

$$\dot{\vartheta} \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} (z + k\pi|\tau) = e^{2i\pi ak} \dot{\vartheta} \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} (z|\tau), \quad (\text{A.12})$$

$$\begin{aligned} \vartheta' \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} (z + k\pi\tau|\tau) &= \exp(-i\pi\tau k^2 - 2ik(z + b\pi)) \times \\ &\times \left(\vartheta' \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} (z|\tau) - 2ik\vartheta \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} (z|\tau) \right), \end{aligned} \quad (\text{A.13})$$

$$\begin{aligned} \vartheta'' \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} (z + k\pi\tau|\tau) &= \exp(-i\pi\tau k^2 - 2ik(z + b\pi)) \times \\ &\times \left(\vartheta'' \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} (z|\tau) - 4ik\vartheta' \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} (z|\tau) - 4k^2\vartheta \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} (z|\tau) \right), \end{aligned} \quad (\text{A.14})$$

$$\begin{aligned} \vartheta \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} (z + k\pi\tau|\tau) &= \exp\left(-i\pi\tau k^2 - 2ik(z + b\pi)\right) \times \\ &\times \left(\vartheta \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} (z|\tau) - \pi k \vartheta' \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} (z|\tau) + i\pi k^2 \vartheta \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} (z|\tau) \right) \end{aligned} \quad (\text{A.15})$$

szerint alakul. Speciálisan ϑ_1 , ϑ_2 , ϑ_3 és ϑ_4 függvényeknek hívják a

$$\vartheta \begin{bmatrix} \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} \end{bmatrix} (z|\tau) = -\vartheta_1(z|\tau), \quad \vartheta \begin{bmatrix} \frac{1}{2} \\ 0 \end{bmatrix} (z|\tau) = \vartheta_2(z|\tau), \quad (\text{A.16})$$

$$\vartheta \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix} (z|\tau) = \vartheta_3(z|\tau), \quad \vartheta \begin{bmatrix} 0 \\ \frac{1}{2} \end{bmatrix} (z|\tau) = \vartheta_4(z|\tau), \quad (\text{A.17})$$

paraméterekkel jellemzett eseteket. Ezek zérusai és periodikus viselkedése a korábbiak alapján könnyen feltérképezhető, bevezetve a $q = e^{i\pi\tau}$ mennyiséget, egy alternatív alakjuk

$$\vartheta_1(z, q) = 2 \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n q^{(n+1/2)^2} \sin((2n+1)z), \quad (\text{A.18})$$

$$\vartheta_2(z, q) = 2 \sum_{n=0}^{\infty} q^{(n+1/2)^2} \cos((2n+1)z), \quad (\text{A.19})$$

$$\vartheta_3(z, q) = 1 + 2 \sum_{n=1}^{\infty} q^{n^2} \cos(2nz), \quad (\text{A.20})$$

$$\vartheta_4(z, q) = 1 + 2 \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n q^{n^2} \cos(2nz). \quad (\text{A.21})$$

Nagyon hasznos összefüggést kapunk a függvények moduláris transzformációval szembeni viselkedéséből ($\tau \rightarrow -\frac{1}{\tau}$, $z \rightarrow \frac{z}{\tau}$):

$$\vartheta_3(z|\tau) = (-i\tau)^{-\frac{1}{2}} e^{-\frac{iz^2}{\pi\tau}} \vartheta_3\left(\frac{z}{\tau} \middle| -\frac{1}{\tau}\right) = \sqrt{\frac{i}{\tau}} \sum_n \exp\left(\frac{\pi}{i\tau} \left(\frac{z}{\pi} + n\right)^2\right), \quad (\text{A.22})$$

és mivel

$$\vartheta \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} (z|\tau) = \exp\left(i\pi\tau a^2 + 2ia(z + b\pi)\right) \vartheta_3(z + \pi b + \pi\tau a|\tau), \quad (\text{A.23})$$

általánosan

$$\vartheta \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} (z|\tau) = \sqrt{\frac{i}{\tau}} e^{-\frac{iz^2}{\pi\tau}} \vartheta \begin{bmatrix} (-b) \\ a \end{bmatrix} \left(\frac{z}{\tau} \middle| -\frac{1}{\tau} \right) \quad (\text{A.24})$$

$$\vartheta \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} (z|\tau) = \sqrt{\frac{i}{\tau}} \sum_n \exp(-2\pi i a n) \cdot \exp\left(\frac{\pi}{i\tau} \left(\frac{z + b\pi}{\pi} + n\right)^2\right). \quad (\text{A.25})$$

A Theta-függvények viselkedése olyan, hogy ha z tisztán valós, akkor a függvények abszolútértéke periodikus és korlátos lesz, τ irányban a periódus részben vagy teljesen imaginárius, így a függvények abszolútértéke a valós tengelyről elmozdulva exponenciálisan növekszik, ez numerikus megvalósítás esetén gyorsan katasztrófához vezethet. Numerikus szempontból a tisztán képzetes τ esete a legelőnyösebb, ekkor q tisztán valós, mind (A.1), mind (A.25) esetében az összegzés ekkor a leggyorsabban konvergens, ahogy a tórusz nyílásszöge csökken a derékszögtől, úgy lassul az összegzendő tagok lecsengése. A függvények numerikus implementálása szempontjából nagyon fontos, hogy szétválasszuk az $|\tau| < 1$ és $|\tau| > 1$ eseteket, előbbinél (A.25) használatával várható a tagok gyors lecsengése, míg utóbbinál (A.1) előnyösebb. Az implementált függvények teszteléséhez hasznos összefüggések

$$\vartheta_3(z, q = 0) = 1, \quad \vartheta_3\left(\frac{\pi}{2}(\tau + 1), q^3\right) = e^{-\frac{\pi i \tau}{12}} \cdot \eta(\tau), \quad (\text{A.26})$$

ahol η a Dedekind-féle Éta függvény, melynek értékei táblázatból, matematikai szoftverekből megszerezhetők. Hasznos speciális értékek továbbá a zérushelyek.

Irodalomjegyzék

- [1] D. M. Ceperley, „Path integrals in the theory of condensed helium,” *Rev. Mod. Phys.* **67** (Apr, 1995) 279–355.
<http://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.67.279>.
- [2] D. M. Ceperley, „Path-integral calculations of normal liquid ^3He ,” *Phys. Rev. Lett.* **69** (Jul, 1992) 331–334.
<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.69.331>.
- [3] T. Schoof, S. Groth, J. Vorberger, and M. Bonitz, „*Ab Initio* thermodynamic results for the degenerate electron gas at finite temperature,” *Phys. Rev. Lett.* **115** (Sep, 2015) 130402.
<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.115.130402>.
- [4] V. Akkineni, *Pairing and superfluid properties of polarized dilute fermion gases in the BCS-BEC crossover*. PhD thesis, University of Illinois at Urbana-Champaign, 2008.
- [5] T. Galambos, *Az útintegrál-kvantum Monte Carlo módszer egyszerű alkalmazása*. BSc thesis, Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, 2015.
- [6] P. A. M. Dirac, „The Lagrangian in quantum mechanics,” *Physikalische Zeitschrift der Sowjetunion* **3** no. 1, (1933) 64–72.
- [7] R. P. Feynman, „Space-time approach to non-relativistic quantum mechanics,” *Rev. Mod. Phys.* **20** (Apr, 1948) 367–387.
- [8] R. P. Feynman, *Statistical mechanics: a set of lectures by R. P. Feynman*. Frontiers in physics. W. A. Benjamin, Inc., New York, NY, USA, 1972.
- [9] N. Metropolis, A. W. Rosenbluth, M. N. Rosenbluth, A. H. Teller, and E. Teller, „Equation of state calculations by fast computing machines,” *Journal of Chemical Physics* **21** no. 6, (Jun, 1953) 1087–1092.
- [10] Wikipedia, „Mehler kernel — wikipedia, the free encyclopedia.” http://en.wikipedia.org/w/index.php?title=Mehler_kernel&oldid=664052183, 2016. [Online; megtekintés 2016.10.08.].
- [11] C. Lin, F. H. Zong, and D. M. Ceperley, „Twist-averaged boundary conditions in continuum quantum monte carlo algorithms,” *Phys. Rev. E* **64** (Jun, 2001) 016702. <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.64.016702>.

- [12] J. Zak, „Magnetic translation group,” *Phys. Rev.* **134** (Jun, 1964) A1602–A1606. <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.134.A1602>.
- [13] Y. Aharonov and D. Bohm, „Significance of electromagnetic potentials in the quantum theory,” *Phys. Rev.* **115** (Aug, 1959) 485–491. <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.115.485>.
- [14] N. Byers and C. N. Yang, „Theoretical considerations concerning quantized magnetic flux in superconducting cylinders,” *Phys. Rev. Lett.* **7** (Jul, 1961) 46–49. <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.7.46>.
- [15] F. D. M. Haldane and E. H. Rezayi, „Periodic Laughlin-Jastrow wave functions for the fractional quantized Hall effect,” *Phys. Rev. B* **31** (Feb, 1985) 2529–2531. <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.31.2529>.
- [16] N. Read and E. Rezayi, „Quasiholes and fermionic zero modes of paired fractional quantum Hall states: The mechanism for non-abelian statistics,” *Phys. Rev. B* **54** (Dec, 1996) 16864–16887. <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.54.16864>.
- [17] P. Lévy, „Berry phases for Landau Hamiltonians on deformed tori,” *Journal of Mathematical Physics* **36** no. 6, (1995) 2792–2802. <http://scitation.aip.org/content/aip/journal/jmp/36/6/10.1063/1.531066>.
- [18] F. D. M. Haldane, „Fractional quantization of the Hall effect: A hierarchy of incompressible quantum fluid states,” *Phys. Rev. Lett.* **51** (Aug, 1983) 605–608. <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.51.605>.
- [19] T. T. Wu and C. N. Yang, „Dirac monopole without strings: Monopole harmonics,” *Nucl. Phys. B* **107** (1976) 365.
- [20] T. T. Wu and C. N. Yang, „Some properties of monopole harmonics,” *Phys. Rev. D* **16** (Aug, 1977) 1018–1021. <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevD.16.1018>.
- [21] M. Kalos and P. Whitlock, *Monte Carlo Methods*. Wiley, 1986.
- [22] M. Abramowitz and I. A. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables*. Dover, New York, 1964.
- [23] D. Mumford, *Tata Lectures on Theta I*. Modern Birkhäuser Classics. Springer, 1987. <http://www.springer.com/us/book/9780817645724>.
- [24] Wikipedia, „Theta function — wikipedia, the free encyclopedia.” http://en.wikipedia.org/w/index.php?title=Theta_function&oldid=726558609, 2016. [Online; megtekintés 2016.10.09.].
- [25] E. W. Weisstein, „Jacobi theta functions.” <http://mathworld.wolfram.com/JacobiThetaFunctions.html>. [Online; megtekintés 2016.10.08.].