

Összefonódás és párkölcsönhatás kétnukleonrendszerekben

Kovács József

HUN-REN Atommagkutató Intézet

kovacs.jozsef@atomki.hun-ren.hu

XVII. Magyar Magfizikus Találkozó
2024 szeptember 3-5.

- 1 Az összefonódás szerepe a többtestprobléma vizsgálatában
- 2 Összefonódás kétnukleonrendszerekben

A kvantummechanikai többtestprobléma

Célunk a kvantummechanikai többtestprobléma vizsgálata.

- A mikroszkopikus tárgyalás igényli a Slater-determinánsok szuperpozíciójaként megadott hullámfüggvényt.
- Általában kezelhetetlenül sok tag szerepel a szuperpozícióban.

Kulcskérdés

Közelíthető-e a vizsgált állapot kevesebb Slater-determinánssal?

Technikai segédeszköz: a betöltésszám-reprezentáció

Nagyon előnyös betöltésszám-reprezentációt alkalmazni. Ezáltal a Slater-determinánsok tenzorszorzatnak feleltethetőek meg.

Példa

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{vmatrix} \varphi_2(x_1) & \varphi_2(x_2) & \varphi_2(x_3) \\ \varphi_3(x_1) & \varphi_3(x_2) & \varphi_3(x_3) \\ \varphi_5(x_1) & \varphi_5(x_2) & \varphi_5(x_3) \end{vmatrix}$$

\Downarrow

$$\psi = |0, 1, 1, 0, 1, \dots\rangle$$

\Downarrow

$$\psi = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes \dots$$

A hullámfüggvény kifejezése részrendszerek hullámfüggvényeinek szorzataival

- A teljes rendszert két részrendszerre osztjuk A-ra és B-re.
- A teljes rendszer hullámfüggvénye tetszőleges bázisokat alkalmazva

$$\Psi(x_A, x_B) = \sum_{k,l} C_{k,l} \phi_k(x_A) \psi_l(x_B). \quad (1)$$

- Okosan választva a bázisokat az egzakt hullámfüggvény

$$\Psi(x_A, x_B) = \sum_k \sqrt{\alpha_k} \tilde{\phi}_k(x_A) \tilde{\psi}_k(x_B), \quad (2)$$

ahol az α_k együtthatók az egyik részrendszer redukált sűrűségmátrixának pozitív sajátértékei. (A részrendszerek sűrűségmátrixainak pozitív sajátértékei közösek.)

A hullámfüggvény közelítése részrendszerek hullámfüggvényeinek szorzataival

- Az optimális közelítés során (lásd például [Schollwöck, Ann. Phys. 326, 96]) a

$$\Psi(x_A, x_B) = \sum_k \sqrt{\alpha_k} \tilde{\phi}_k(x_A) \tilde{\psi}_k(x_B) \quad (3)$$

összegeből azokat a tagokat hagyjuk el, amelyek $\sqrt{\alpha_k}$ együtthatója a legkisebb.

- Ez következetesen alkalmazható a modell tér szűkítésére a **sűrűségmátrixos renormálási csoport (DMRG)** módszer [White, Phys. Rev. Lett. 69, 2863] keretében.

A közelítés minőségének jellemzése

- A közelítés minőségét a részrendszerhez tartozó sűrűségmátrix pozitív sajátértékeinek eloszlása határozza meg. Ennek jellemzésére egy iránymutató mennyiség a sűrűségmátrix entrópiája, $S[\rho] \equiv -\sum_k \alpha_k \log_2(\alpha_k)$.
 - Maximális entrópia \Rightarrow minden tag egyformán fontos \Rightarrow nem hatékony a közelítés.
 - Alacsony entrópia \Rightarrow a kisebb együttthatójú tagok kevésbé fontosak \Rightarrow hatékony a közelítés.
Ha $S = 0 \Rightarrow \Psi(x_A, x_B) = \tilde{\phi}(x_A)\tilde{\psi}(x_B)$, az összeg csak 1 tagból áll.
- Az állapot összefonódottságának mértékét az entrópiával jellemzik.

Összefoglalva:

Az összefonódás vizsgálatának jelentősége

A részrendszerek közötti összefonódás gyengesége a teljes rendszer állapotának hatékony közelítésére ad lehetőséget.

A legegyszerűbb részrendszerek

A legegyszerűbb esetekben az egyik részrendszert csupán 1 vagy 2 egyrészeckskepálya alkotja és az összes többi pálya a másik részrendszerhez tartozik.

Ekkor fontos mennyiségek:

- Egypálya-entrópia
 - $S_i \equiv S[\rho_i]$
- Kétpálya-entrópia
 - $S_{i,j} \equiv S[\rho_{i,j}]$
- Kölcsönös információ
 - $I_{i,j} \equiv S_i + S_j - S_{i,j}$
 - $I_{j,i} = I_{i,j}$
 - Az i . és a j . pálya közötti korrelációkat jellemzi.

A hosszútávú célunk e mennyiségek felhasználása a DMRG-számítások optimalizálása során.

Kétfermion-hullámfüggvények Slater-felbontott alakja

$$|\psi\rangle = 2 \sum_s \lambda_s c_{2s-1}^\dagger c_{2s}^\dagger |0\rangle, \text{ ahol } \lambda > 0 \text{ [Eckert et al, Ann. Phys. 299, 88].}$$

- Minden pálya csak egy tagban fordul elő.
- Az állapot akkor összefonódott, ha legalább 2 tagból áll az összeg.
- Egyes impulzuszómomentum- és izospincsatolt hullámfüggvények analitikus módon Slater-felbontott alakra hozhatóak. Például két alhéj pályáinak egyszerű csatolásával kapott függvények, pl. $\left(\Psi = \left[1d_{\frac{3}{2}} \otimes 1d_{\frac{5}{2}} \right]_{J_z, T_z}^{J, T} \right)$.

A vizsgált modellek jellemzői:

- A legegyszerűbb $L = 0, J = 0, T = 1$ csatolású és $L = 0, J = 1, T = 0$ csatolású párkölcsönhatások. (A kölcsönhatás erőssége egyetlen paramétertől függ.)
- Kétféle eset vizsgálata:
 - azonos energiájúnak tekintett alhéjak (**degenerált eset** elnevezés),
 - különböző energiájú alhéjak (**nemdegenerált eset** elnevezés).

A degenerált eset

A degenerált eset (azonos energiájú alhéjak) különleges tulajdonságai:

- Sokféle szimmetria: L , L_z , S és S_z is jó kvantumszám.
- Nagyon egyszerű analitikus megoldás az alapállapotra.

Egyenlő energiájú alhéjakat tekintve mind izovektor, mind izoskalár párkölcsönhatás esetén a $T_z = J_z = 0$ alapállapotban:

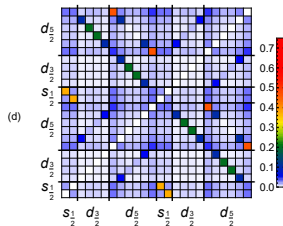
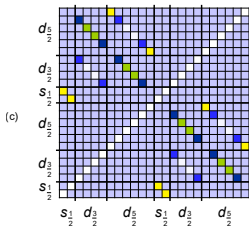
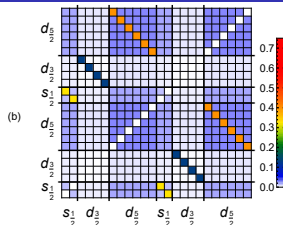
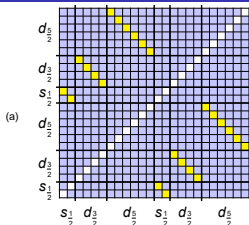
- Minden egyes pálya egypálya-entrópiája megegyezik.
- Az egypálya-entrópiák nem függenek attól, hogy milyen pályákat (ortonormált egyrészecske hullámfüggvényeket) tekintünk.
- Az egypálya-entrópiák összege maximális.

A numerikusan vizsgálatok részletei:

- Az $d_{\frac{5}{2}}$, $s_{\frac{1}{2}}$ és $d_{\frac{3}{2}}$ alhéjakhoz tartozó 24 pálya vizsgálata.
- A nemdegenerált esetben az USD kölcsönhatás egyrészecke-energiáinak alkalmazása.
- A Mathematica program alkalmazása és másodkvantált formalizmusban végzett számítások a SNEG programkönyvtár [Žitko, Comp. Phys. Comm. 182, 2259] által.

A héjszerkezet és a szimmeriák tükrödése a kölcsönös információkban

a) $J = 0, T = 1, T_z = 0$ degenerált eset, b) $J = 0, T = 1, T_z = 0$ nemdegenerált eset,
 c) $J = 1, T = 0, J_z = 0$ degenerált eset, d) $J = 1, T = 0, J_z = 0$ nemdegenerált eset



Az előkészületben lévő kézirat ([Entanglement and pairing in two-nucleon systems](#)) társszerzői:

- Kruppa András (HUN-REN Atomki)
- Salamon Péter (HUN-REN Atomki)
- Legeza Örs (HUN-REN Wigner FK)

A kutatást támogatta a Nemzeti Kutatási Fejlesztési és Innovációs Alap K18 pályázati programjának K 128729 számú projektje.

Köszönöm a figyelmet!

- A részrendszerek közötti összefonódás gyengesége a teljes rendszer állapotának hatékony közelítésére ad lehetőséget. Ez motivációt jelent arra, hogy többtestrendszereket az összefonódás szempontjából vizsgáljunk.
- Kétnukleonrendszerek vizsgálata során:
 - Egyes egyszerű impulzusmomentum és izospin szerint csatolt hullámfüggvények esetén analitikus formulákat vezettünk le összefonódást jellemző mennyiségekre.
 - Párkölcsonhatás esetén az alapállapotban az összefonódást és a pályák közötti korrelációkat vizsgálva megfigyeltük a szimmetriák és a héjszerkezet hatásának megnyilvánulását.