

VÁLASZ IGLÓI FERENC, MTA DOKTORA, BÍRÁLATÁRA

Először is meg szeretném köszönni a bíráló munkáját és feltett kérdéseit.

I. A FELTETT KÉRDÉSEK ELŐTT MEGJELENŐ MEGJEGYZÉSEK, KÉRDÉSEK, 2-3 OLDAL

1. Megjegyzés: A bíráló az első oldal alján és második oldal legelején megjegyzi, hogy hazai szerzők tollából írt művek kevésbé szerepelnek az idézetek között.

Válasz:

Megjegyzem, hogy a munkámhoz közvetlenül kapcsolódó cikkek szerepelnek az irodalomjegyzékben: [106], [167], [170]-ben ott van Fazekas Patrik neve, [265]-ben pedig Dóra Balázs és Virosztek Attila neve is szerepel.

A választ azért folytatom, mert a bírálóban, ezen a ponton, meg van említve Fazekas Patrik. El kell mondanom hogy személyes baráti viszonyban voltam Patrikkal, és talán vannak még olyanok ebben a közösségben akik emlékeznek rá, hogy annakidején (fiatal kezdő koromban) Patrik engem személyesen nagyon sokat segített, szárnya alá vett, többször meghívott Budapestre akkor amikor mozgási lehetőségeim sokkal korlátozottabbak voltak mint most. Habár Patrik ma fizikailag már nincs közöttünk, szeretném ezt az alkalmat felhasználni arra, hogy megköszönjem neki mindazt, amit értem tett.

2. Megjegyzés: A bíráló a 3-ik oldal aljától számított 7. sorban azt írja: “A B-9 külön tézispontként történő szerepeltetését nem tartom indokoltnak”. Ez a gondolat már előbb is megjelent a bíráló második oldalának alján, a következő formában: “A módszer régóta ismert volt a szakirodalomban”, és ugyancsak szerepel a bíráló végén az összefoglalóban, az utolsó előtti mondatban, amelynek erre vonatkozólag az a lényege, hogy a bíráló, a B.9. tézispontot, amely a módszertani fejlesztéseket emeli ki, nem ismeri el. Ezért szeretnék erre megjegyzésre reagálni.

Válasz:

Hangsúlyozni szeretném, hogy azt a tényt, hogy egy pozitív szemidefinit operátornak a legkisebb sajátértéke zéró, triviálisan mindenki ismerte talán amióta az operátor fogalom létezik. Mindennek ellenére 1992-ben Brandt és Giesekus tudatosította [136], hogy ezt a triviális információt fel lehet arra használni, hogy alapállapotokat tanulmányozzon vele az ember (később kiderült hogy 10 évvel azelőtt Klein is használta ezt a gondola-

tot [135]). Most annakidején, (beleértve Strack [137], Vollhardt [140,141], Ovchinnikov [138], Montorsi és Campbell [142] munkáit is) ez a módszer úgy működött, hogy egy $|\Psi_{var}\rangle$ variációs hullámfüggvényből $E_f \geq E_g$ felső határt számoltak ki az alapállapot energiához (E_g), majd egy pozitív szemidefinites felbontásból, szintén E_g -hez, alsó korlátot állapítottak meg $E_f \geq E_a$. Ezután, a paramétertérben, az E_g -re számolt alsó és felső korlátot egymásba tolták $E_f = E_a$. Így lett kiszámolva az alapállapot energiája E_g és a hozzá tartozó hullámvektor $|\Psi_{var}\rangle$. Megfigyelhető, hogy ebben a stratégiában a $|\Psi_{var}\rangle$ (azaz a végén kapott alapállapot hullámfüggvény) kiindulópont volt. Ennek alapján a módszer oda fejlődött, hogy ráálltak egy előre ismert hullámfüggvényre, és megkonstruálták azt a Hamilton operátort ami ezt a hullámfüggvényt adta alapállapotként.

Az én módszerem nem ez, és pontosan fordítva működik. Nálam a kiindulópont (mint minden más many-body számításnál), egy Hamilton operátor ami érdekel \hat{H} . Én tudatosan azokat a módszereket fejlesztettem, amelyek megengedik, hogy \hat{H} -ból kiindulva, anélkül hogy tudnák valamit az alapállapotról, hozzá eljussak. Tipikus példa erre a XVII fejezet, 177-es oldal: egy adott kiinduló szituációba van helyezve a Hamilton operátor (493), ami érdekel (494) (azaz $U = 0$ -ra makroszkópicusan degenerált szigetelő). És ebből a kiindulópontból jutunk el az alapállapot hullámfüggvényéhez (512,513), amelybe belépő \hat{W} operátor olyan bonyolult, hogy öt ábrán keresztül (43,44,45,46,47-es ábrák) kell szemléltetni hogy hogyan néz ki. Tehát kiindulópontként fogalmunk sem volt arról hogy milyen. A disszertáció többi fejezeteiben bemutatott és pozitív szemidefinites felbontással megoldott probléma is ilyen. A rendezetlen 2D rendszerekre vonatkozó XIII-ik fejezetben a módszer használata után kialakult (441,444)-es alapállapot hullámfüggvényről még a (442,443) enyhítő kondíciók után (melyek a fedési egyenletek megoldását segítették elő) sem lehetett látni hogy milyenek. Hasonlóan a polimér láncoknál levezetett eredmények (XV,XVI fejezetek), vagy a csík létrejöttére vonatkozó megállapítások (XIV-ik fejezet), vagy a 3D pontos nem-Fermi folyadék a periodikus Anderson modell esetében (XII-ik fejezet) nem voltak ismertek az induló Hamilton operátor tanulmányozásának elkezdése pillanatában. Hangsúlyozni szeretném azt is, hogy a módszertani fejlesztések alapján a módszer képes mostmár nemcsak egy adott Hamilton operátort, hanem egy “szituációba helyezett problémát” is tárgyalni (lásd XVI, vagy XVII-ik fejezet), úgy ahogy ezt minden many-body módszertől elvárjuk (pl. XVII-ik fejezet: 2D makroszkópicusan degenerált szigetelő $U=0$ -ra. Ha U -t bekapcsoljuk, delokalizál e?). Pontos módszerrel, 2D-ben, ilyenszerű probléma tárgyalást előttem, tudomásom szerint

nem végzett senki.

Jó, akkor mondható, hogy rendben van, Hamilton operátorból indulunk, és egy nem ismert alapállapotú hullámfüggvényhez jutunk, akár problémára való beállítással is, de hogy ezt megtegyük, ott vannak pl. a másodsomszéd hoppingok, vagy hibridizációk pl. a periodikus Anderson modellnél (azért választom példázatként ezt a modellt, mert még 1D változatában sem integrálható egyetlen pontban sem).

Most hadd mondjam el, az összes cikk emi előtttem a pozitív szemidefinites eljárást használta és a periodikus Anderson modellel foglalkozott, beleértve Brandt [136] és Strack [137] munkáit is, a periodikus Anderson modellre csak $U = \infty$ esetre tudott eredményt kihozni, mikor is az f-dupla betöltés szigorúan tiltott. A disszertációban leírt módszereknek köszönhető, hogy ma, fel tudunk írni erre a modellre olyan pontos alapállapotokat is akár 2D vagy 3D-ben, amelyekben van dupla f-betöltés, tehát sokkal reálisabbak [lásd (424)], azaz véges U -ra élnek. Ezen túlmenően, meg szeretném jegyezni, hogy kezdetben, a 2D-3D periodikus Anderson modellre, eredmények csak képzetes hibridizációra, csak f-ugrásokat feltételezve (nem f-nívóra, úgy ahogy az eredeti modellben van), csak másodsomszéd hopping és hibridizációra, és csak különböző nagyságú Bravais vektorokkal leírt rácsra jöttek ki. De ragaszkodtam az adott, kiindulópontként választott Hamilton operátorhoz, és külön, minden lépéshez új módszertani fejlesztésekkel sorra lehetővé tettem, hogy számolni lehessen véges U -val (pl. [11]), képzetes hibridizáció nélkül [12], az f-hoppingok helyett f-nívóval [2], másodsomszédok nélkül [3], és nem torzított ráccsal [3].

Ezenkívül, módszertani eljárásokat dolgoztam ki az alapállapotú hullámfüggvény levezetési módjára vonatkozólag, úgy, hogy a Hamilton operátor adott, attól függően, hogy az induló Hamilton operátor milyen, és hogy milyen koncentrációtartományban vagyunk (V.B.3 alfejezet), hogyan érdemes az unicitást érteni, a magra kell irányítani, és hogyan kell számolni (V.B.4 alfejezet).

Én mindezt értéknek érzem, és pedig az előző tézispontok egyedi esetei felett álló értéknek. Ezért született meg a B.9-es tézispont.

3. Megjegyzés:

i) A II.B.3. pontban a 19. lap tetején a rendezetlen és kvázi-periodikus rendszerek esetén “pont olyan viselkedésről” ír a szerző. Ez a megfogalmazás a legtöbb fizikai jellemzőre szigorú értelemben nem igaz. Kérem, hogy fejtse ki pontosan és részletesebben az előző mondatban

leírtakat.

Válasz:

A teljes mondat ami a disszertációban szerepel az a következő: “konkrét esetek ismertek amelyekben a rendezetlenség ilyenszerű bevezetése (pl. kvázi-periodicitáson keresztül) pont olyan viselkedést kölcsönöz a rendszernek, mint a teljesen rendezetlen potenciál”. Az elkövetkezőkben ez a kijelentésemet fejtem ki részletesen:

Az első jellemző ami pont olyan, az alapállapot nagyfokú degeneráltsága. A második, hogy lokalizált állapot adódik akkor mikor az adott körülmények közötti rendezetlen ikerpár modell alapállapota is az. Első látásra úgy tűnik, hogy az analógia itt megszűnik, de ez távolról sem igaz. Ezt az ember akkor veszi észre, mikor egy pontos megoldáson keresztül, pontosan lehet ellenőrizni a viselkedés hasonlóságát. Egy ilyen megoldás pl. a D.G. Gempel et. al. Phys.Rev.Lett. 49, 833 (1982). Itt egy 1D erős kötés (tight-binding) modellel mely legközelebbi szomszédra vett ugrást tartalmaz és periodikus diagonális potenciállal rendelkezik (azaz lokális egyrészecske potenciál van jelen), a ráccsal összemérhetetlen (azaz inkomenszurábilis) potenciállal állítják be a kvázi-periodicitást, és szolgáltatnak egy pontos megoldást. A megoldásból az látszik, hogy a lokalizált állapot ugyanazon lokalizációs hosszal rendelkezik mint a modell rendezetlen ikerpára a paramétertartomány legnagyobb részén. De ennél több is van, mert az állapotsűrűség is egyezik a rendezetlen pármodell állapotsűrűségével. Tehát minden fizikai tulajdonság ami az állapotsűrűség függvénye, identikus. Ezen analóg viselkedést máshol is megemlítik [187].

4. Megjegyzés:

ii) A 19. lap második bekezdésében az “independens (független) elektron közelítésben” a rendszer Hamilton operátorát csak kinetikus tagból állónak írja le. Ez így nem igaz, mivel van egy véletlen (vagy kvázi-periodikus) külső potenciál a rendszerben.

Válasz:

Természetesen, van egy véletlen potenciál a rendszerben, de másodkvantált szinten felírva, ez szintén egyrészecske járuléka (pl. $\sum_{i,\sigma} V_i \hat{n}_{i,\sigma}$, ahol V_i rendezetlen) tehát beolvasztható a Hamilton operátor kinetikus (egyrészecske, pl.

$$\hat{H} = \sum_{i,j,\sigma} (t_{i,j} \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,\sigma} + H.c) + \sum_{i,\sigma} \epsilon_i \hat{n}_{i,\sigma}$$

tagjába), és a végeredmény igaz, renormált ($E_i = \epsilon_i + V_i$) lokális egyrészecske potenciállal, de ugyanolyan formájú marad:

$$\hat{H} = \sum_{i,j,\sigma} (t_{i,j} \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,\sigma} + H.c) + \sum_{i,\sigma} E_i \hat{n}_{i,\sigma}.$$

Ennek mondja a szakirodalom, hogy “diagonális” rendezetlenség, azaz a rendezetlenség onnan ered, hogy a lokális egyrészecske potenciálok rendezetlenek. Én az elmondottak szellemében értettem a disszertációban leírt mondatot.

5. Megjegyzés:

iii) A 24. lap (4)-es egyenlet jobboldalán egy 1/2 tényező hiányzik.

Válasz:

Véleményem szerint, a 24. lap (4)-es egyenlet jobboldalán a koefficiens helyes (Pl. P. Fazekas, Lecture notes on Electron Correlation and Magnetism, World Scientific, (7.14,7.15)-ös egyenletek, 352-ik oldal).

6. Megjegyzés:

iv) Az 56. lap 2. sorában a [101] helyett a [102] referencia szerepel. Továbbá nem tartom szerencsésnek, hogy egy Metzner-Vollhardt cikkről mint a “Vollhardt csoportja” eredményről ír a szerző

Válasz:

Igen itt elírás történt, [101] egy Brandow cikk, [102] idézet kell ide. A “csoportra” vett utalást megjegyeztem, nem fogom többé használni.

7. Megjegyzés:

v) A 104. lapon a (353) egyenlet felett a (4,5) referencia szerepel, ami nem látszik közvetlen kapcsolatban állni a fenti egyenlettel.

Válasz:

A (4,5) referencia célja az volt hogy jelezze: a \hat{H}_{eff} átlagtér közelítésben volt felírva, és hogy spin sűrűség hullámot leíró anomális Green függvény megjelentetése volt a cél, hiszen a $\tau^{\pm\sigma}$ átlagértékek voltak zérótól különbözőeknek tekintve. De a megjegyzés helytálló, mert az előbb említett specifikációkat tényleg szerencsésebb lett volna a disszertáció szövegébe megtalálni. A többszöri helynyerés miatti törlések vezettek ide.

8. Megjegyzés:

vii) A 176. lapon a 39.a Ábra szerepel, ez helyesen a 40.a Ábra.

Válasz:

A megjegyzés helyes, a 176. lapon a 40.a Ábráról van szó.

A további két: vi) és viii) megjegyzéseket a 4. oldalon az “abundancia” és “réteges” szóhasználatokra vonatkozólag, köszönöm, elfogadom, és alkalmazni is fogom.

II. A DISSZERTÁCIÓVAL KAPCSOLATBAN FELTETT KÉRDÉSEK, 4. OLDAL

1. Kérdés:

A disszertációban számos kvantummechanikai modellrendszer szerepel. Kérem, hogy írja fel összefoglalóan ezek Hamilton operátorát és adja meg ezek egymás közötti kapcsolatát. A közelítésmentes megoldások esetén ismertesse és szemléltesse a paramétertér azon részét, ahol az egzakt megoldások találhatóak!

A. Válasz a kérdés első részére:

A fonalszerű klaszterképződést kivéve (XI. fejezet), a többi fejezet kvantummechanikai tárgyalást alkalmaz. Ezen rendszerek tanulmányozásakor az a Hamilton operátor amely mindent magába foglal egy D-dimenziós, minden csomóponton két orbitált tartalmazó bővített fermionikus Hubbard modell, amelyben a bővítési tagok elsőszomszéd kétrészecske kölcsönhatások. Ennek megfelelően, az általános és közös Hamilton operátor $\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2$ formában írható. Ebben a kifejezésben, \hat{H}_1 az induló kétorbitális ($b, b' = d, f$) Hubbard modell Hamilton operátora:

$$\hat{H}_1 = \sum_{\sigma} \sum_{i,j} \sum_{b,b'=d,f} (t_{i,j}^{b,b'} \hat{b}_{i,\sigma}^{\dagger} \hat{b}_{j,\sigma} + H.c.) + \sum_{b=d,f} \sum_i U_i^b \hat{n}_{i,\uparrow}^b \hat{n}_{i,\downarrow}^b$$

ahol a lokális egyrészecske potenciálok $\epsilon_i^b = [t_{i,i}^{b,b} + (t_{i,i}^{b,b})^*]$ formában, a lokális ($i = j$) hibridizációs ($b \neq b'$) tagok ($V_{i,j}^{b,b'} \hat{b}_{i,\sigma}^{\dagger} \hat{b}_{j,\sigma}$) csatolásai $V_{i,i}^{b,b'} = [t_{i,i}^{b,b'} + (t_{i,i}^{b',b})^*]$ formában, a nemlokális ($i \neq j$) hibridizációs ($b \neq b'$) tagok ($V_{i,j}^{b,b'} \hat{b}_{i,\sigma}^{\dagger} \hat{b}_{j,\sigma}$) csatolásai $V_{i,j}^{b,b'} = [t_{i,j}^{b,b'} + (t_{j,i}^{b',b})^*]$ formában, a hopping $b' = b, i \neq j$ tagok ($t_{i,j}^b \hat{b}_{i,\sigma}^{\dagger} \hat{b}_{j,\sigma}$) koefficiensei pedig $t_{i,j}^b = [t_{i,j}^{b,b} + (t_{j,i}^{b,b})^*]$ formában vannak feltüntetve ez esetben. Hogy minden tanulmányozott szituáció beleférjen, a $t_{i,j}^{b,b'}$ csatolások (a Peierls fázisfaktorok miatt, azaz $b = b'$ esetben, illetve az esetleges képzetes hibridizációk miatt $b \neq b'$ esetben) komplexek, az $|i - j|$ távolságok pedig (a 3D eredmények miatt) harmadszomszéd távolságig mennek. Azt is megjegyezném, hogy egyedül a XIII-ik fejezetben (ez vonatkozik a 2D rendezetlen rendszerekre), $t_{i,j}^{b,b'}$ spinfüggő is lehet, tehát ott $t_{i,j}^{b,b'}$ spinfüggőnek értendő (azaz $t_{i,j,\sigma}^{b,b'}$). Mivel ez, a rendezetlenséget nem tartalmazó modellek

esetében a disszertáció többi kvantummechanikailag tárgyalt fejezetében nem fordul elő, és a rendezetlen paramétereket úgysem lehet rendezett paraméterekkel rendelkező Hamilton operátor paraméterterébe behelyezni, a \hat{H}_1 egyrészesecske csatolásait spinfüggés nélkül írtam fel.

A \hat{H}_2 kiterjesztési tag teljes általánosságban kétrészesecske kölcsönhatásokat tartalmaz

$$\hat{H}_2 = \sum_{i_1, i_2, i_3, i_4} \sum_{\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3, \sigma_4} \sum_{b, b'} [V_{b, b'; \{i_j\}, \{\sigma_{i_j}\}} \hat{b}_{i_1, \sigma_1}^\dagger \hat{b}'_{i_2, \sigma_2} \hat{b}'_{i_3, \sigma_3}^\dagger \hat{b}_{i_4, \sigma_4} + H.c.]$$

általános formában, ahol $b, b' = d, f$. Hangsúlyoznom kell azonban, hogy ezen összefüggésbe a VII. fejezet anyaga tulajdonképpen nem olvasztható közvetlenül bele, mert réteges szerkezetű rendszer más fejezetben nem szerepel, rétegek közti csatolás más fejezetekbe nincs, továbbá a VII-ik fejezet a rétegeket (2D síkokat) folytonosan tárgyalja, a többi fejezet pedig (kivéve a filiform klaszter esetet a XI. fejezetben) diszkrét csomópontokból álló rendszert tárgyal. De a közös jellemzés kedvéért, később még a VII-ik fejezetre visszatérek.

A figyelembe vett nemzéró $V_{b, b'; \{i_j\}, \{\sigma_{i_j}\}}$ csatolási állandók ha két különböző b, b' egyszerre jelen van

$$V_{b, b'; i_1, i_2+j, i_1+j, i_2; \sigma, \sigma', \sigma', \sigma} \quad (1)$$

illetve

$$V_{b, b'; i_1, i_1, i_2, i_2; \sigma, \sigma', \sigma', \sigma}, \quad V_{b, b'; i_1, i_1, i_2, i_2; \sigma, \sigma', \sigma'', \sigma''} (\sigma_{\sigma, \sigma'} \cdot \sigma_{\sigma', \sigma''}) \quad (2)$$

formájúak. Ha viszont nincs csak egy sáv jelen (azaz mindig $b' = b$), a számítások során alkalmazott tagokban elsőszomszéd járulékok csak vannak jelen, és a nemzéró tagok

$$V_{b, b; i, j, j, i; \sigma, \sigma, \sigma', \sigma'}, \quad V_{b, b; i, i, j, j; \sigma, \sigma, \sigma, \sigma}, \quad V_{b, b; i, i, j, j; \sigma, \sigma, -\sigma, -\sigma}, \quad V_{b, b; i, j, i, j; \sigma, \sigma, -\sigma, -\sigma}, \quad (3)$$

illetve fonon közvetített kölcsönhatások [259]-ből, amelyek közül az első kettő a (3) formáira hozható, az utolsó pedig [(352)-es képlet \bar{g}_3] nem szerepel a végeredményekben.

A következőkben, a különböző fejezetekben szereplő Hamilton operátorokat az előbb felvázolt közös jelölés szerint jellemzem. A jellemzés három alfejezetre van bontva, amelyek római számokkal vannak jelölve:

I. A \hat{H}_2 járulékok csak a közelítési módszerrel tárgyalt VI., VII., és VIII. fejezetben kerültek alkalmazásra a következő képpen:

I.i) Egyszerre két sáv (b, b') csak a VIII.B.2 alfejezetben volt kizárólagosan alkalmazva, mert itt Cr ötvözetek leírásáról volt szó és ezek jellemzése tradicionálisan kétsávós modellben történik [28]. Az (1)-es tag adja a szupravezető állapotot a $-\hat{b}_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger \hat{b}'_{-\mathbf{k}, \sigma'} \hat{b}'_{-\mathbf{k}, \sigma'} \hat{b}_{\mathbf{k}, \sigma}$ Fourier

transzformáltján keresztül, úgy sávon belül $b = b'$, mint sávok közötti ($b \neq b'$) változatban, [(385)-ös képlet] (a Fourier transzformáció előtt a csatolási állandó $(1/N) \sum_{i_1, i_2, j}$, alatt áll, és a transzformáció közben (i_1, i_2, j) függése elhanyagolt). A (2)-es képlet első (második) csatolási állandójával rendelkező tagja adja a töltés sűrűség hullámot (spin sűrűség hullámot). A Fourier transzformáltak (a csatolási állandók (i_1, i_2) függése itt is elhanyagolt) $\hat{b}_{\mathbf{k}, \alpha}^\dagger \hat{b}'_{\mathbf{k}, \beta} \hat{b}'_{\mathbf{k}', \gamma} \hat{b}_{\mathbf{k}', \delta}$ szorzatot adnak, lásd (384). Máshol (a \hat{H}_2 szinten) nem szerepel kétsávós rendszer, ezért (1) és (2) csatolási állandóinak összehasonlítása a többi fejezetben tárgyalt csatolási állandókkal mérvadóan nem lehetséges. Első ránézésre a (2)-es sor csatolási állandói hasonlítanak ugyan a (3)-as sor második és harmadik csatolási állandóihoz, de egy valóságos anyagban ezen útbóbbiak értéke más, mert ők, a plusz elektronok ottlétét nem érzik.

I.ii) Mindezek után, a \hat{H}_2 segítségével tárgyalt egysávós rendszerek közül a VII. fejezet réteges szerkezetű szupravezetőinek tanulmányozása kilóg, azért mert (amint említettem már), szupravezető tulajdonságot adó rétegek közötti csatolás más fejezetekben nincs jelen, továbbá itt a rétegek folytonosan tárgyaltak, ami szintén nem fordul elő máshol. De ha diszkrét analogiát keresünk, akkor (1) felelne meg a kölcsönhatási tagnak $b = b'$ változatban, mégpedig síkon belül és síkok közötti variánsban felírva.

I.iii) Az elmondottak következtében, egysávós \hat{H}_2 használata két helyen marad, és pedig a VIII.B.1 alfejezetben és a VI. fejezetben. Ezen két fejezetben a (3) sor minden csatolása szerepel. A (3) sor tagjait sorrendben követve, ezek jelölése (bal oldal a VI. fejezetből, jobb oldal a VIII.B.1 alfejezetből):

$$-\bar{g}_1 = -V_1; V = V_3; -J = -V_2; -I = -V_4.$$

II. Az egzakt megoldásokat tartalmazó fejezetekben, illetve a IX., X., fejezetekben \hat{H}_2 nem szerepel. Az itt használt modellek Hubbard modellek, hogy minden beleférjen, két orbitál per csomópont esetben általánosan, és ezekben csak Hubbard kölcsönhatás szerepel, \hat{H}_2 nem. A különböző fejezetekben tárgyalt modellek esetére ez a rész is alrészekre bomlik, amely alrészeket itt a II. pontban a közelítési módszerekkel még fennmaradt modellekre tárgyalok.

II.i) A X. fejezetben egysávós Hubbard model, egy orbitál per csomópont, D=2 dimenzióban csak elsőszomszéd, egymással egyenlő ($t = t_1 = t_x = t_y$) ugrásokkal tárgyalt zérótól félig töltött sávban, tetszőleges $t_1 \neq 0$ és $U \geq 0$ értékre. A jelölések itt standardok. A \hat{H}_1 jelöléseit használva $b = b'$, $U_i^b = U$, $t_{i,j}^{b,b' \neq b} = 0$, $t_{i,i}^{b,b} = 0$, $t_{i,j,|j-i|=a}^b = t$, ahol a a

négyzetcellás rendszer rácsállandója.

II.ii) A IX. fejezetben két orbitál per csomópont szerepel ugyan $D=1,2,3$ dimenzióban, de Hubbard $U \geq 0$ csak egy orbitálra hat, így ez a modell, mint tradicionálisan, a periodikus Anderson modell nevet viseli. A model f-nívóra használt (azaz nincs f-hopping jelen), a d-elektronokra csak elsőszomszéd ugrás szerepel, de $E_f = -U/2$ (szimmetrikus eset) áll fenn, a rendszer félig töltött. A hibridizáció k-térben felírt összefüggéssel használt de r-térben lokális. A \hat{H}_1 jelöléseit használva $\epsilon_{i,\sigma}^{b=f} = E_f$, $\epsilon_{i,\sigma}^{b=d} = 0$, $U_i^f = U$, $U_i^d = 0$, $t_{i,j \neq i}^f = 0$, $t_{i,j,|j-i|=a}^d = t$, $t_{i,j,|j-i|>a}^d = 0$, $V_{i,i}^{d,f} = V_{i,i}^{f,d} = V$, $V_{i,j \neq i}^{b,b' \neq b} = 0$, és a a rácsállandó.

III. Ebbe a pontba tartoznak az egzakt kvantummechanikai megoldásokat tartalmazó fejezetek (XII - XVII). Ezen esetekben nincs \hat{H}_2 jelen, kétrészecske kölcsönhatásként csak a Hubbard U hat. Ezen fejezetek négy alrészre (i,ii,iii,iv) bomlanak:

III.i) Első csoportként tárgyalnám itt azon fejezeteket amelyekben nincs két orbitál jelen egy csomóponton, de a Bravais rács bázisa m atomból áll, így m sáv van jelen a sáv szerkezetben. Ide tartoznak a XV. és XVI. fejezetek, melyekben a polimérek tárgyaltak mint 1D Bravais ráccsal rendelkező rendszerek. Ezen fejezetek Hamilton operátor paramétereiből felépített fázisdiagramot nem lehet összehasonlítani a többi fejezet fázisdiagramjával (amelyekben a bázis egy atomból áll), ezért tárgyalom ezen eseteket különálló csoportként (a többi fejezet Hamilton operátorában mindenhol két orbitál per csomópont van jelen). Az itt leírt rendszerek Hamilton operátorai azonban a \hat{H}_1 sémájában megadhatóak, úgy, hogy \hat{H}_1 -ben csak egy b indexet tekintünk jelen.

A XV. fejezetben tárgyalt négyszögű cellával rendelkező polimérek esetében, a Hubbard U -n kívül 4 Hamilton operátor paraméter van jelen, és pedig a legközelebbi szomszédra vett ugrás t , a négyszög átlós ugrásai t_{\perp} és t_{\parallel} (mint "másodszomszéd" hoppingok, párhuzamos és merőleges itt a Bravais rács rácsvektorára értendő), illetve a négyszög felső és alsó csomópontjának, egyenlőnek tekintett lokális egyrészecske potenciálja: ϵ . Ez esetben $t_{\perp}, t_{\parallel}, \epsilon$ nem kiterjesztési tagok, hanem nélkülözhetetlen tagok. Mindez azért, mert ha a négyszög vertikálisan lapított rombusz, akkor $|t_{\perp}| > |t|$, ha vízszintesen lapított rombusz, akkor $|t_{\parallel}| > |t|$, az ϵ pedig pl. lokális külső elektromos térrel (vagy atomcserével) kísérletileg változtatható. Ezen kívül, a polimér síkjára merőlegesen külső mágneses tér hat mely következtében t mellé egy $\exp(i\delta/2)$ Peierls fázisfaktor tapad, hol $\delta = 2\pi\Phi/\Phi_0$, Φ lévén a négyzeten áthaladó mágneses fluxus, és Φ_0 a fluxuskvantum. A \hat{H}_1 jelöléseit felhasználva: a) $t_{jj}^b = \epsilon$, ahol

$\mathbf{j} = \mathbf{i} + \mathbf{r}_1$ vagy $\mathbf{j} = \mathbf{i} + \mathbf{r}_2$, amelyben \mathbf{i} egy tetszőleges Bravais rácsvektor, $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2$ pedig adott négyszögen belül jelzi, a rácsvektorra merőleges mentén elhelyezkedő felső és alsó atom \mathbf{i} -hez mért helyzetét. Ugyanakkor $t_{\mathbf{i},\mathbf{i}}^b = 0$. b) $t_{\mathbf{i},\mathbf{i}+\mathbf{r}_1}^b = t_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_2,\mathbf{i}}^b = t_{\mathbf{i}+\mathbf{a},\mathbf{i}+\mathbf{r}_2}^b = t_{\mathbf{i}+\mathbf{a},\mathbf{i}+\mathbf{r}_1}^b = te^{i\delta/2}$ az elsőszomszéd ugrások, c) $t_{\mathbf{i},\mathbf{i}+\mathbf{a}}^b = t_{\parallel}$, $t_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_1,\mathbf{i}+\mathbf{r}_2}^b = t_{\perp}$, a négyzet diagonálisa mentén vett ugrások, és d) $U_{\mathbf{i}',\mathbf{i}'}^b = U$ ahol \mathbf{i}' a rendszer tetszőleges csomópontját jelöli, és U a Hubbard kölcsönhatás.

A XVI. fejezetben az ötszögű cellával rendelkező polimérek tárgyaltak. Egy cellában 6 atom található melyek között elsőszomszéd ugrások vannak figyelembevételre. Ha \mathbf{r}_n , $n = 1, 2, \dots, 6$ jelöli a cellán belül az atomok helyzetét, akkor a jelen lévő elsőszomszéd ugrások a \hat{H}_1 jelölésében $t_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_5,\mathbf{i}+\mathbf{r}_6}^b = t_f$, (felső antennán lévő hopping); $t_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_3,\mathbf{i}+\mathbf{r}_2}^b = t_h$, (alsó vízszintes hopping); $t_{\mathbf{i}+\mathbf{a},\mathbf{i}+\mathbf{r}_4}^b = t_c$, (középső vízszintes hopping); $t_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_1,\mathbf{i}+\mathbf{r}_5}^b = t_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_2,\mathbf{i}+\mathbf{r}_1}^b = t_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_4,\mathbf{i}+\mathbf{r}_3}^b = t_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_5,\mathbf{i}+\mathbf{r}_4}^b = t$, (a ferde szakaszok ugrásai), ahol \mathbf{i} rács csomópont. A disszertáció nem tárgyalt olyan esetet amikor az ötszögű cellában kiterjedt orbitállal rendelkező atom áll, ezért másodszomszéd ugrások a Hamilton operátorban nincsenek jelen. Lokális egyrészesecske potenciál (melyekkel lokális elektromos terek hatását pl. figyelembe lehet venni), összesen 4 darab van, és pedig $t_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_6,\mathbf{i}+\mathbf{r}_6}^b = \epsilon_6$, $t_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_5,\mathbf{i}+\mathbf{r}_5}^b = \epsilon_5$, (felső antenna csomópontjai); $t_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_2,\mathbf{i}+\mathbf{r}_2}^b = t_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_3,\mathbf{i}+\mathbf{r}_3}^b = \epsilon_2$, (alsó vízszintes szakasz csomópontjai); $t_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_1,\mathbf{i}+\mathbf{r}_1}^b = t_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_4,\mathbf{i}+\mathbf{r}_4}^b = \epsilon_1$, (a lánc vonalán elhelyezkedő két atom helyzetében). A Hubbard U a cellán belül lokálisan változhat, és pedig $U_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_6}^b = U_6$, $U_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_5}^b = U_5$, $U_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_1}^b = U_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_4}^b = U_1$, $U_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_2}^b = U_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_3}^b = U_2$ (azaz Hubbard U -ból is van négy darab). Itt az a tény van figyelembe véve, hogy valós anyagoknál az U adott csomóponti értékét a csomópontba elhelyezkedő atom, és annak közvetlen környezete együttesen befolyásolja [pl. N. Dasary et al. arXiv:1511.01371]. A modellben más Hamilton operátor paraméter nincs jelen.

III.ii) Az egzakt megoldásokat tartalmazó fejezetekből második csoportként szintén különválasztanám a XIII. fejezet anyagát amely 2D rendezetlen és kölcsönható rendszereket tárgyal. Itt már két orbitál van csomópontonként, de a bázis csak egy atomból áll, így az itt alkalmazott modell típus kétsávós, és a még megmaradt másik három kvantummechanikai pontos megoldásokat tartalmazó XII., XIV., és XVII. fejezet is ilyen. Amiben viszont merőben különbözik a XIII. fejezet modellje a többi (XII., XIV., XVII.) fejezetek modelljétől az kétrétű, és pedig a) mindkét orbitálban külön hat a Hubbard kölcsönhatás, és b) a modell rendezetlen paraméterekkel rendelkezik. Főképp a rendezetlenség miatt, rendezett model (Hamilton operátor paramétereiből felépített) paraméterterébe ezt a modellt nem

lehet egy lokális tartományba behelyezni. Ezért tárgyalom ezt a modellt is külön. A modell 2D négyzetes rácsot használ, és kinetikus részében minden másodszomszédig menő tag megtalálható, még spinfüggő változatban is. A \hat{H}_1 csatolási állandóiból tehát, az U_i^b , $b = d, f$ mellett, minden $t_{i,i+r,\sigma}^{b,b'}$, $|\mathbf{r}| \leq [|\mathbf{a}_x|^2 + |\mathbf{a}_y|^2]^{1/2}$ ott van (azzal a kikötéssel, hogy most \hat{H}_1 -ben $\sum_{i,j}$ helyét $\sum_{i,r}$ veszi át), amelyben $\mathbf{a}_x, \mathbf{a}_y$ a két Bravais primitív vektor.

III.iii) Az egzakt megoldásos módszereket alkalmazó megmaradt három fejezetből most a XII. és XVII. fejezeteket elemzem. Mindkettő periodikus Anderson modellt használ. Azaz két orbitál van csomópontonként, egy atom alkotta bázis, a 2D eset (XVII. fejezet), illetve a 3D eset (XII. fejezet) négyzetes, illetve egyszerű ortorhombikus cellát használ, két sáv van jelen, és a Hubbard U csak az egyik (éspedig f) elektrontípusra hat.

A XVII. fejezet a 2D változatot tartalmazza, f-hopping benne nincs, csak f-nívó (ehhez, a lokális egyrészecske potenciál az E_f tartozik), d-hopping $\mathbf{a}_x, \mathbf{a}_y, 2\mathbf{a}_x, 2\mathbf{a}_y, \mathbf{a}_y \pm \mathbf{a}_x$ szakaszok mentén elhelyezkedő ugrásokat használ, a hibridizáció lokális és elsőszomszéd tagokat tartalmaz, a kétrészecske kölcsönhatás szintjén csak $U_i^f = U$ van jelen. Az egyrészecske járulékok a \hat{H}_1 jelölésében $\epsilon_i^{b=f} = E_f$, $t_{i,i+r}^d = t_{r,d}$, $V_{i,i}^{d,f} = V_0$, $V_{i,i+r}^{b,b'} = V_r^{b,b'}$.

A XII. fejezetben ugyanennek a modellnek a 3D változata szerepel. Ebben az esetben viszont az f-elektronokra is van hopping tag, és a d, f ugrások illetve a hibridizációs tagok az orthorhombikus cellába behelyezhető összes rács csomópont közötti szakaszt lefedik, azaz harmadszomszédig vannak figyelembe véve. Az $U_i^{b=f} = U$ Hubbard kölcsönhatáson kívül szereplő csatolási állandók a \hat{H}_1 jelölésében ezek szerint $V_{i,i}^{d,f} = V_0$, $V_{i,i+r}^{d,f} = V_{i,i+r}^{f,d} = V_r$, $\epsilon_i^{b=f} = E_f$, $t_{i,i+r}^d = t_r^d$, $t_{i,i+r}^f = t_r^f$

III.iv) A közelítésmentes megoldások fejezetei közül a csíkos megoldási lehetőségeket tartalmazó XIV. fejezet maradt csak hátra. E fejezetben 2D periodikus Anderson modell használt. f-ugrás itt is jelen van, és a d,f ugrások meg a nemlokális hibridizációs tagok az $\mathbf{a}_x, \mathbf{a}_y, \mathbf{a}_y \pm \mathbf{a}_x$ szakaszokat fedik le. A csatolási állandók a \hat{H}_1 jelölései szerint $V_{i,i}^{d,f} = V_0$, $V_{i,i+r}^{d,f} = V_{i,i+r}^{f,d} = V_r$, $\epsilon_i^{b=f} = E_f$, $t_{i,i+r}^d = t_r^d$, $t_{i,i+r}^f = t_r^f$, $U_i^{b=f} = U$.

A XIV. fejezetet azért választottam külön, mert amikor az elemzés során kiderül, hogy a 2D periodikus Anderson modell alapján csík megoldás csupán erősen degenerált klaszter megoldásokkal lép csak fel a degeneráción belül, megmutattam, hogy plusz, lényegében "iránykitüntető" tagok figyelembevételével a periodikus Anderson modell mellett, nem-degenerált tiszta csík megoldások adódnak eredményül. Ilyen lehetőségeket pl. periodikus töltéseloszlás, vagy dimerizáció adhat, mely egyrészecske járulékként \hat{H}_1 egyrészecske tagja

keretei között felírható. Ilyen járulékok matematikai formába öltve nagyon sokfélék lehetnek, és minden forma más és más csík struktúra stabilizálását éri el.

Például

$$\hat{H}_A = -|W_1| \sum_{i \in I_{st}} \hat{n}_i$$

amelyhez hozzáadható egy $\hat{H}'_A = |W_2| \sum_{i \notin I_{st}} \hat{n}_i$ tag is (amely \hat{H}_A hatásán, a jelen esetben nem változtat), ahol I_{st} a rendszernek egy periodikusan ismétlődő tartománya ($I_{st} = \sum_j I_{st,j}$, lásd 158-ik oldal). Ha most $I_{st,j}$ például a 30.a ábra (157-es oldal) d_1 szélességű (a rendszer j -ik) oszlopának csomópontjait jelenti, (és ennek megfelelően, az $i \notin I_{st}$ a d_2 szélességű, periodikusan ismétlődő vertikális tartomány, a rendszer I_{st} -be be nem számolt csomópontjait tartalmazza), akkor \hat{H}_A egy periodikus töltéeloszlást jelent. Ez esetben a 30.a ábra $R = I$ vertikális stripja stabilizálódik (azaz mint nem degenerált alapállapotú megoldás jelentkezik) ha a rendszerben a részecskeszám N_p^s alatt (lásd 158-ik oldal, N_p^s egy negyed rendszertöltés alatt van) helyezkedik el, az elsősomszéd d-ugrások a másodsomszéd d-ugrások kétszeresénél nagyobbak (pontosan $(t_x^d)^2, (t_y^d)^2 \geq 4t_{y+x}^d t_{y-x}^d$), és a 33. ábra feltételei teljesülnek. Az így létrejövő csík vonalai lokalizált paramágnesként viselkednek.

Ha viszont \hat{H}_A -ban I_{st} minden diagonális vonal mentén csupán minden második atomot tartalmazza, akkor $d_1 = d_2 = 2$ saktábla szerkezet lesz stabil a 32-es ábrából (158-as oldal).

A \hat{H}_A járulék a \hat{H}_1 jelöléseivel $|W_1| \sum_{i \in I_{st}} \sum_b \sum_\sigma \hat{b}_{i,\sigma}^\dagger \hat{b}_{i,\sigma}$ formában írható fel, ahol minden $\epsilon_i^b = |W_1|$.

Egy másik lehetséges lehetőség stripe stabilizálásra a

$$\hat{H}_B = \sum_\sigma \sum_{i \in I_E} \hat{E}_{i,\sigma}^\dagger \hat{E}_{i,\sigma}$$

dimerizáció szerű járulék amelyben $\hat{E}_{i,\sigma} = \sum_{p=d,f} (e_{1,p} \hat{p}_{i,\sigma} + e_{2,p} \hat{p}_{i+a_x,\sigma})$, és az I_E tartomány a rács vízszintes rácsvonalai minden második csomópontját tartalmazzák. A \hat{H}_B járulék a 30.b ábrán feltüntetett csíkot stabilizálja, azaz $R = II$ megoldást. Fizikailag ez itineráns és ferromágneses stripe vonalakat jelöl, amelyekben viszont a stripe csíkok egymás között nem korreláltak. A \hat{H}_1 jelöléseivel felírva, a \hat{H}_B operátor csatolási állandóira a következő nemzéró járulékokat kapjuk:

$$\epsilon_i^d = |e_{1,d}|^2, \epsilon_{i+a_x}^d = |e_{2,d}|^2, \epsilon_i^f = |e_{1,f}|^2, \epsilon_{i+a_x}^f = |e_{2,f}|^2, V_{i,i}^{d,f} = e_{1,d}^* e_{1,f}, V_{i+a_x,i+a_x}^{d,f} = e_{2,d}^* e_{2,f}, t_{i,i+a_x}^d = e_{1,d}^* e_{2,d}, t_{i,i+a_x}^f = e_{1,f}^* e_{2,f}, V_{i,i+a_x}^{d,f} = e_{1,d}^* e_{2,f}, V_{i,i+a_x}^{f,d} = e_{1,f}^* e_{2,d},$$

és ezen átjelölések következtében

$$\hat{H}_B = \sum_{i \in I_E} \sum_\sigma [\epsilon_i^d \hat{n}_{i,\sigma}^d + \epsilon_{i+a_x}^d \hat{n}_{i+a_x,\sigma}^d + \epsilon_i^f \hat{n}_{i,\sigma}^f + \epsilon_{i+a_x}^f \hat{n}_{i+a_x,\sigma}^f + (V_{i,i}^{d,f} \hat{d}_{i,\sigma}^\dagger \hat{f}_{i,\sigma} + V_{i+a_x,i+a_x}^{d,f} \hat{d}_{i+a_x,\sigma}^\dagger \hat{f}_{i+a_x,\sigma} + V_{i,i+a_x}^{d,f} \hat{d}_{i,\sigma}^\dagger \hat{f}_{i+a_x,\sigma} + V_{i,i+a_x}^{f,d} \hat{f}_{i,\sigma}^\dagger \hat{d}_{i+a_x,\sigma} + H.c.) + (t_{i,i+a_x}^d \hat{d}_{i,\sigma}^\dagger \hat{d}_{i+a_x,\sigma} +$$

$$t_{i,i+a_x}^f \hat{f}_{i,\sigma}^\dagger \hat{f}_{i+a_x,\sigma} + H.c)].$$

B. Válasz a kérdés második részére:

A kérdés megválaszolásakor az előző A. válaszok III.i), III.ii), III.iii), és III.iv) rendszerezését fogom követni az alábbiakban.

III.i): Polimér láncok esete:

XV. Fejezet: Négyszögű cellájú láncok:

Minden megoldás esetében $U > 0$, $t \neq 0, \infty$, de tetszőlegesek. Ezen túlmenően, 3 megoldáscsoport van (N_c a rács csomópontok számát jelöli, N az elektronok számát, a teljes rendszertöltés $6 N_c$ elektront jelent. A hoppingok és ϵ , $2t$ egységekben vannak megadva):

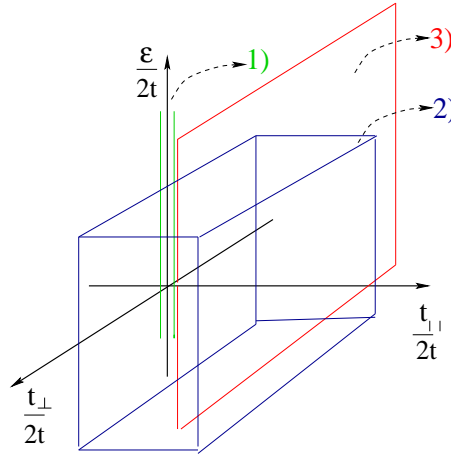


FIG. 1. A XV. fejezetben talált megoldások paramétertérben való elhelyezkedése: 1) esetben a teljes $\epsilon/(2t)$ tengely, 2) esetben, a $t_{\parallel}/(2t) > 0$ térrész, 3) esetben a $t_{\perp} < 0$ -hoz tartozó $t_{\parallel} = 0$ félsík.

1) $N \leq N_c$, $t_{\perp} = t_{\parallel} = 0$, ϵ tetszőleges (ez folytonosan változtatható külső – statikus, és a lánc síkjára merőleges – elektromos térnek felel meg). $t \neq 0, \infty$ de tetszőleges, $U > 0$ de tetszőleges, $\delta = \pi/2$.

Ez külső rögzített mágneses térre adott két megoldás, $N = N_c$ és $N < N_c$ esetekre.

2) $4N_c \leq N < 5N_c$, $t \neq 0, \infty$ de tetszőleges, $U > 0$ de tetszőleges, $t_{\parallel} > 0$ de tetszőleges, $\delta = \pi$, $\epsilon = 1/(2t_{\perp}) - t_{\perp}$ (azaz $t_{\perp} \neq 0, \infty$ tetszőleges, de lokális külső elektromos tér van jelen).

Ez rögzített külső mágneses térre, és egy behangolt külső elektromos térre vonatkozó két megoldás, $N = 4N_c$ és $4N_c < N < 5N_c$ esetekre.

3) $N \geq 5N_c$, $t_{\parallel} = 0$, $t \neq 0, \infty$ de másként tetszőleges, $U > 0$ de ezen túlmenően

tetszőleges, $0 > t_{\perp} \neq -\infty$, de másképp tetszőleges, $\delta \in [-\pi/2, +\pi/2]$ de ezen belül tetszőleges, $\epsilon = b - 1/b$ ahol $b = (-1/t_{\perp}) \cos \delta$.

Ez folytonosan változtatható külső mágneses térre, és egy behangolt külső elektromos térre vonatkozó két megoldás, és pedig $N = 5N_c$ és $N > 5N_c$ esetekre.

Az 1),2),3) megoldások paraméterterébeli elhelyezkedését az első ábra mutatja.

Mivel egzakt megoldásokat a fázisdiagram diszkrét pontjaiban gyűjtik sokszor (pl. a t-J modell egzakt megoldása 1D-ben, a Hamilton operátor paraméterterének egyetlen pontjában ismert – mert csak egyetlen pontban integrálható a modell –), továbbá pl. a háromszög cellájú láncra, még közelítő módszerekkel is, kezdetben, gyakorlatilag majdnem paraméterter pontokként gyűltek az adatok [K. Penc et al. Phys.Rev. B54, 4056 (1996)], szeretnék néhány gondolatot leírni a megoldások elvi fontosságáról is.

Amint a disszertáció 20. oldalán ez említésbe került, Vidal és munkatársai [226] az itt tanulmányozott négyszögű cellával rendelkező rendszeren egy két elektron probléma perturbatív kezeléséből arra a következtetésre jutottak, hogy $U=0$ -ban “több ráccsomópontos csapda” állapotokba (cage states) zárt elektronok delokalizálódnak, ha a Hubbard U -t bekapcsoljuk. Ebből a tapasztalatból azt a sejtést fogalmazták meg a szerzők, hogy mindez, véges elektronkoncentráción is megtörhet a tanulmányozott rendszerben, mégpedig nagykoncentrációs tartományon. Én az itt szóban forgó publikációkban [13,14], ezt a sejtést igazoltam. Az említett “csapda” állapotok lapos sávban fordulnak elő (itt nem egy, hanem makroszkópikus számú négyszögbe befogott elektronról van szó), így a Hamilton operátor “problémába tétele” lapos sávok körül mozgott. Ilyen körülmények között a 2) pontban $4N_c < N < 5N_c$ esetben kapott megoldás igazolta Vidal és társai [226] sejtését. Több más nagyon érdekes alapállapot is felszínre került, de a kérdés keretei között részletesen erre nem térhetek ki.

XVI. Fejezet: Ötszögű cellájú láncok:

Az N_c ez esetben is a Bravais ráccsomópontok száma. 6 atom van bázisonként tehát 6 sáv van jelen. A teljes rendszertöltést $N = 12N_c$ adja, ahol N az elektronok száma. A paraméterek száma 12 (4 ugrás tag, 4 lokális egyrészecske potenciál és 4 Hubbard U érték), hozzátennem, valóságos, az érdeklődés központjában álló anyagról van szó.

Habár a [23]-as, tézispontokhoz tartozó publikációban más koncentrációtartományon is szerepelnek levezetett pontos alapállapotok, a disszertáció (az oldalszám restriktiók miatt) csak a nagykoncentrációs ($N \geq 11N_c$) megoldásokat tartalmazza. Ezek fellépéséhez

szükséges paramétertartomány (487)-es relációkban adott, mely öt egyenlőtlenséget és egy egyenlőséget tartalmaz. Az egyenlőségbe mind a 12 paraméter szerepel, tehát szerepel az ötszöghöz kapcsolódó antenna külső végéhez tartozó lokális egyrészesecske potenciál is (ϵ_6), amely külső lokális elektromos potenciál révén könnyen befojásolható. Ennek következtében, miután ϵ_6 behangolása (beállítása) megtörtént (az erre vonatkozó összefüggés $\epsilon_6 = q_U - U_6 - Q_3^2$ ahol Q_3 és q_U a (486)-ban adott), gyakorlatilag a (487)-es relációbeli egyenlőtlenségek határozzák meg azt a paraméterter tartományt, ahol a megoldások fellépnek. Ezen egyenlőtlenségek között egyben, szerepel ϵ_6 is de $U_6 + \epsilon_6 > \epsilon_6$ formában, ami nyilvánvalóan igaz, ha $U_6 > 0$. Ennek következtében a (487) nyomán, a keresett paramétertartományt meghatározó egyenlőtlenségek

$$t_h < 0, U_5 > 0, U_6 > 0, q_U - \frac{(q_U - U_2 - \epsilon_2)^2 - t_h^2}{|t_h|} > U_5 + \epsilon_5$$

formára hozhatók. Ezek közül az első három egyedi paraméter előjelet rögzít, amelyek figyelembevétele mellett egyetlen egyenlőtlenség marad amely a keresett paraméterter tartományt megadja, és pedig

$$(q_U + |t_h|)|t_h| > (q_U - U_2 - \epsilon_2)^2 + (U_5 + \epsilon_5)|t_h|, \quad (4)$$

ahol [lásd (486)-ot]:

$$q_U = (1/2)\{(U_1 + \epsilon_1 + |t_c|) + (U_2 + \epsilon_2 + |t_h|) + [(U_2 + \epsilon_2 + |t_h| - U_1 - \epsilon_1 - |t_c|)^2 + 4t^2]^{1/2}\}$$

Meg kell azt is jegyezni, hogy amint az értekezés 174-ik oldalán a 39. ábra felett 5 sorral az aláhúzza van, $U_n = U$ homogén Hubbard U értékekre a megoldás nem létezik, tehát az U_n tagokat különbözőknek kell tartani. Azt is alá kell húznom, hogy a Hamilton operátor (482) pozitív szemidefinit felbontásában az U_n tagok a \hat{P}_n pozitív szemidefinit operátorokat szorozzák, tehát nem lehetnek negatívak, azaz, $U_n > 0, n = 1, 2, \dots, 6$ teljesül.

Mindezek után a (4)-es egyenlőtlenséget

$$Y^2 - Y - P_5 < 0, \quad P_5 = (U_2 - U_5)/|t_h| + (\epsilon_2 - \epsilon_5)/|t_h| + 1, \quad (5)$$

formában fel lehet írni (itt minden t egységben van megadva), ahol

$$Y = 1 - P_1/(2|t_h|) + [1/(2|t_h|)]\sqrt{P_1^2 + 4}, \quad P_1 = (U_2 - U_1) + (\epsilon_2 - \epsilon_1) + (|t_h| - |t_c|). \quad (6)$$

Ennek megfelelően, (5) első kifejezésének mint egyenlőségnek különböző valós gyökei kell legyenek, és maga az Y mint kifejezés, ezen valós gyökök között kell legyen elhelyezve. A valós különböző gyökök feltétele $P_5 > -1/4$ azaz:

$$\frac{U_2 - U_5}{|t_h|} + \frac{\epsilon_2 - \epsilon_5}{|t_h|} > -\frac{5}{4} \quad (7)$$

ered, a gyökök közötti elhelyezkedést pedig

$$-(\sqrt{1 + 4P_5} + 1) < \frac{1}{|t_h|}[\sqrt{P_1^2 + 4} - P_1] < \sqrt{1 + 4P_5} - 1$$

adja. Mivel ez utóbbi bal oldala mindig igaz, az ebből eredő egyenlőtlenség

$$\sqrt{P_1^2 + 4} - P_1 < |t_h|(\sqrt{1 + 4P_5} - 1) \quad (8)$$

ahol minden fizikai paraméter t egységekben van. A keresett paramétertér tartományt tehát (7) és (8) együttese adja. A 2-es ábra példázza a tartományokat [az a) ábrarész egyetlen választott pontját szemlélteti b)].

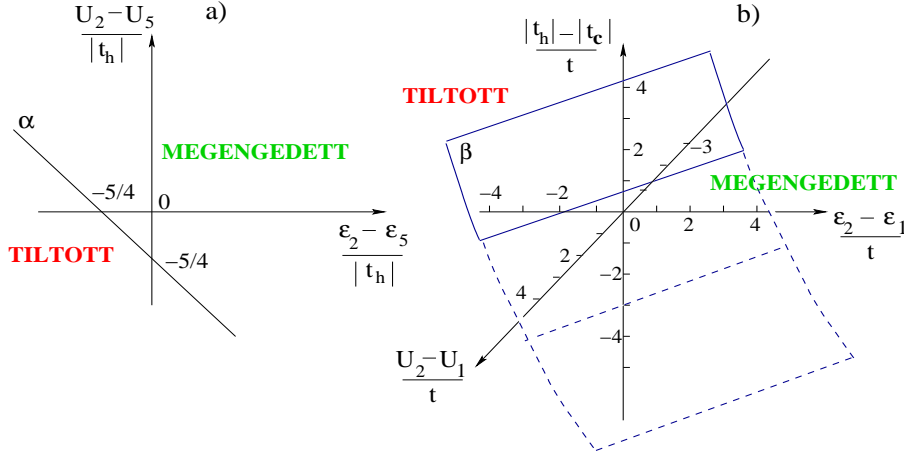


FIG. 2. A XVI. fejezetben talált megoldások paramétertérben való elhelyezkedése. a) A (7)-es egyenlőtlenség az α egyenes felett teljesül. b) Az a) ábra egyetlen $(|t_h|/t = (U_2 - U_5)/|t_h| = (\epsilon_2 - \epsilon_5)/|t_h| = 1)$ pontjához kötötten, a (8)-as egyenlőtlenség a β felület felett teljesül. Ha P_5 nő és $|t_h|/t$ nagyságrendje marad, akkor a β felület hátrafele mozog (negatív (x,y) tartományon távolodik az origótól).

A tárgyalt megoldások fontosságával kapcsolatban a következőket szeretném megjegyezni: Brooks és társai [235] (disszertáció 21-ik oldala, alólról a 15. sor) kétrészecske szinten véges pentagon láncokban (politiófen oligomerek) végzett számításaik nyomán azt a sejtést fogalmazták meg 2004-ben, hogy az inter-elektron kölcsönhatás figyelembevétele mágneses fázist stabilizálhat ezen rendszerekben magas koncentrációtartományban (megjegyzem, ezért volt nagykoncentrációs tartományra ráállítva a számítás). A publikált eredményeim ezt a sejtést igazolták egy sokrészecskes szinten végzett egzakt eredmény formájában. A számolás teljesen diszperzív sáv szerkezetből indul, és egy pontos eredmény szintjén szemlélteti hogy a kölcsönhatás hogyan képes ebből egy effektív (azaz kölcsönhatásfüggő) lapos sávot legyártani, és azon ferromágneses rendezettséget létrehozni, ami többszörösen különbözik a Mielke-Tasaki féle [320] laposáv ferromágnesességtől (disszertáció 176 oldal XVI.F. alfejezet). Az eredmény azt is tükrözi, hogy különböző csomópontok különböző Hubbard U

értékei nagymértékben elősegíthetik a ferromágnesesség fellépését.

Azt is aláhúzni szeretném, hogy igazoltam [24], hogy a diszperzív sávból effektív, U által legyártott lapos sáv mechanizmus független az ötszögű cellától, és egy adott komplexitáson felül, tetszőleges polimérben felléphet.

III.ii): 2D rendezetlen rendszerek:

Az itt tárgyalt esetet, a csatolási állandók rendezetlen mivolta miatt, a Hamilton operátor paraméterterében nem lehet ábrázolni. Ezen túlmenően, a megoldás nagy rendezetlenséghez tartozó megoldás (lásd a 3. kérdés első felére adott választ később).

III.iii): 2D - 3D periodikus Anderson modellek esete:

XII. Fejezet: 3D periodikus Anderson modell:

A modell megengedi hogy teljesen általános 3D Bravais ráccsal és általános kétorbital per csomópontos rendszerrel számoljunk, ezáltal a Hamilton operátorban minden primitív cellán belüli csomópontokat összekötő szakaszhoz d és f ugrás illetve nemlokális hibridizáció rendelhető, ami összesen 26 paramétert jelent. Ezen kívül V_0, E_f, U paraméterek jellemzik a lokális tulajdonságokat, tehát a modellben 29 paraméter szerepel.

Hangsúlyozni szeretném, hogy egy valóságos anyag, mind a 29 paraméter egy egyedi értékével rendelkezik, tehát csak a harmadszomszédok figyelembevételével, és csak lokális Coulomb taszítással egy valóságos (itt tanulmányozott) rendszer, egy pontot jelent ebben a 29 dimenziós paraméterterben.

A jelölésekben N_Λ a rács csomópontjainak a számát, és N az elektronok számát jelöli, a teljes rendszertöltés $N_t = 4N_\Lambda$ -t jelent. Két koncentrációtartományhoz kapcsolódóan tartalmaz a disszertáció eredményeket, éspedig A) $N/N_t \geq 3/4$, és B) $N/N_t \leq 1/4$.

A különböző megoldásokhoz tartozó jellemzők a következők:

A.1.) Szigetelő megoldás $N/N_t = 3/4$ esetben:

Az első jellemző ami fennáll (és ami a fedési egyenletekből következik)

$$t_r^f = t_r^d/p^2, V_r = t_r^d/p, (U+E_f)/V_0 = (1-p^2)/p \quad (9)$$

ahol p egy valós szám. Megfigyelhető, hogy $|p| > 1$ -re, a hopping és hibridizációs tagok nagyságrendjére vonatkozólag a fedési egyenletek megoldásai a fizikailag elvárható nagyságrendeket tükrözik, pl. $|t_{\mathbf{a}_x}^f| < |t_{\mathbf{a}_x}^d|, |t_{\mathbf{a}_x+\mathbf{a}_y}^d| < |t_{\mathbf{a}_x}^d|, |t_{\mathbf{a}_x+\mathbf{a}_y}^f| < |t_{\mathbf{a}_x}^f|$, etc. (ahol \mathbf{a}_α vektorok a Bravais primitív vektorokat jelentik). A megoldás teljesen általános rácsra is megkapható

(ekkor minden t_r^d más), de köbös esetben a paraméterszám az $t_{\mathbf{a}_\alpha=1,2,3}^d = t_1^d, t_{\mathbf{a}_{\alpha_1} \pm \mathbf{a}_{\alpha_2 \neq \alpha_1}}^d = t_2^d, t_{\mathbf{a}_z \pm \mathbf{a}_y \pm \mathbf{a}_x}^d = t_3^d$ összefüggések miatt 12-re csökken (3 darab t_r^d , 3 darab t_r^f , 3 nemlokális hibridizáció, és 3 lokális paraméter: V_0, E_f, U). Ezek közül 6 paraméter, a (9)-es egyenlőségek első 2 egyenletében

$$t_r^f = w^2 t_r^d, V_r = w t_r^d \quad (10)$$

formában van rögzítve, ahol $w = 1/p$, mely formákat gyakran átfedési integrálok numerikus számításánál is tapasztalnak valós anyagokban [313], tehát ez elfogadható megkötést jelent. Így marad 6 független paraméter és w , mely egyikével (mint energia egységgel) minden paramétert normálni lehet (legyen ez t_1^d). A w helyett a t_1^f paramétert használva, e pillanatban a független paraméterek (t_1^d egységekben) $t_2^d, t_3^d, V_0, E_f, U, t_1^f$. Továbbá, a fedési egyenletekből a t_3^d bekerül minden blokk operátor paramétert szorzó faktorba, ezzel a faktoral minden Hamilton operátor paraméter szorzódik, tehát a Hamilton operátor paraméter arányokból kiesik. Így a fázisdiagramhoz (V_0/t_1^d helyett V_1/V_0 -al számolva), e pillanatban

$$t_1^f/t_1^d, t_2^d/t_1^d, E_f/t_1^d, U/t_1^d, V_1/V_0$$

5 független paraméter marad. Ezek közül az utolsót, a (9) utolsó egyenlősége kiejti, így a fázisdiagram rész felrajzolásához ahol a tárgyalt megoldás megjelenik, négy független paraméter marad, és pedig

$$t_1^f/t_1^d, t_2^d/t_1^d, E_f/t_1^d, U/t_1^d. \quad (11)$$

Ezen paraméterek vannak jelen a disszertáció 141-es oldalán a 26. ábrában. Ezen ábra I_1 és I_2 felületei tartalmazzák az itt tárgyalt megoldást. Ebben a megoldást tartalmazó tartományt képviselő felületben azonban a V_1/V_0 kifejezése is benne van, tehát külön ábrában ábrázolni nem kell (lásd a 26. ábra alatti ábramagyarázó szöveget).

Megjegyzés: Alá szeretném húzni, hogy [12] C-mellékletében (appendixében) igazolva van, hogy az itt jellemzett fázis nem-köbös más 3D rácsban is létrejön, és tartalmazza a szigetelő fázis elhagyásakor a kompresszibilitási anomáliát. Azaz, az itt bemutatott levezetett fázis és tulajdonságai nem tekinthetők egy adott szituáció partikuláris eredményének.

A.2.) Itineráns megoldás $N/N_t \geq 3/4$ esetben:

A.2.a) Eset:

Az itineráns esetben ugyanarról a Hamilton operátorról van szó mint az előbb, csak a (9)-es egyenlet helyébe kerülő összefüggésben, amelyet a fedési egyenletek adnak, képzetes p kerül, és ennek megfelelően a (9)-es összefüggések

$$t_{r_1}^f = t_{r_1}^d/|p|^2, t_{r_2}^f = -t_{r_2}^d/|p|^2, V_{r_2} = p t_{r_2}^f, V_{r_1} = 0, U + E_f = [(|p|^2 - 1)/|p|^2] \sum_{n=1}^8 |a_{n,d}|^2,$$

$$V_0 p^* = \sum_{n=5}^8 |a_{n,d}|^2 - \sum_{n=1}^4 |a_{n,d}|^2, \quad (12)$$

formát öltének. Az adott kifejezésekben $\mathbf{r}_1 = \mathbf{a}_x, \mathbf{a}_y, \mathbf{a}_y \pm \mathbf{a}_x$, továbbá $\mathbf{r}_2 = \mathbf{a}_z, \mathbf{a}_z \pm \mathbf{a}_x, \mathbf{a}_z \pm \mathbf{a}_y, \mathbf{a}_z \pm \mathbf{a}_y \pm \mathbf{a}_x$, továbbá $V_{r_1} = 0$ miatt (azaz 4 darab nemlokális hibridizáció nincs jelen), csak 25 paraméterrel számol a modell általános Bravais rácsra. A képzetes p a (12) alapján képzetes hibridizációkat ad, de ez megengedett mert a Hamilton operátor Hermitikus marad. A (12) első három egyenletének (10) szerű értelmezése most is lehetséges (egy adott tengely irányába előjelváltás [313] szerint előállhat. Ugyanakkor zéró hibridizációs járulékok a különböző orbitálok között szintén előfordulnak). Köbös rendszer esetében az A.1) esethez hasonlóan itt is t_1^d egységekben számolva 6 független paraméter marad ($t_2^d, t_3^d, V_0, E_f, U, t_1^f$), az arányokból t_3^d kiesik, és ez esetben a fedési egyenletekből adódó (12) utolsó egyenlősége $V_0 = 0$ értéket adja. Ennek megfelelően, a független paraméterek a (11)-ben adottakkal egyeznek

$$t_1^f/t_1^d, t_2^d/t_1^d, E_f/t_1^d, U/t_1^d, \quad (13)$$

de azzal a különbséggel, hogy most a V_0 -t tartalmazó tag zéró mivolta miatt esik ki. A (13)-ban található paraméterekkel, a disszertáció 141-es oldalán lévő 26. ábra C felülete tartalmazza a megoldásokat.

Egy megjegyzést szeretnék tenni itt a (12)-es egyenletek első három egyenlőségére vonatkozólag, amelyek a (10)-es formát teljesítik. Ha (10) létjogosultságát nem tartjuk elfogadhatónak a tanulmányozott rendszerre, akkor a (10)-es forma típus, a C felülethez képest, a t_r^f és V_r paramétereket érintve új szupplementáris megkötéseket jelent. De amint az A.2.b-d) esetek igazolják, ezek fizikailag nem számítanak semmit a végeredmények szintjén, hiszen ugyanazt visszkapjuk az f-hoppingok nélkül is, mikor is a (10)-es egyenlőségek nem léteznek. Mindez az A.1. esetben bemutatott szigetelő fázisra is igaz (lásd [12]-nek C-melléklete, illetve [3]). Ebből eredőleg, az f-ugrásokhoz tartozó (10)-es típusú összefüggések a fedési egyenletek (a végeredménybe fizikailag nem belépő) termékeiként voltak általában kezelve. Voltaképpen az f-hopping kiiktatása törölte el ezeket (lásd alább).

A.2.b) Eset:

A disszertáció 143. oldalán említve van, hogy az A.2.a) esetben kapott vezető fázis más fázisdiagram tartományon is levezetve volt. A [12] IV.B. fejezetben (075130-7 oldal) ténylegesen, az itt tárgyalt Hamilton operátorból kiindulva, de elnyújtott primitív cellára (lásd a 3. ábra) az előbbieken használt Hamilton operátorra, de f-ugrások nélkül, a következő fedési egyenletek adódnak:

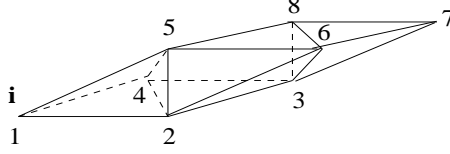


FIG. 3. Az A.2.b) esetben használt elnyújtott primitív cella.

$$\begin{aligned}
t_{\mathbf{a}_x}^d &= -a_{1,d}^* a_{2,d}, t_{\mathbf{a}_y}^d = -a_{1,d}^* a_{4,d}, t_{\mathbf{a}_z}^d = -a_{1,d}^* a_{5,d}, \\
t_{\mathbf{a}_y - \mathbf{a}_x}^d &= -a_{2,d}^* a_{4,d}, t_{\mathbf{a}_z - \mathbf{a}_x}^d = -a_{2,d}^* a_{5,d}, t_{\mathbf{a}_z - \mathbf{a}_y}^d = -a_{4,d}^* a_{5,d}, \\
V_{\mathbf{a}_x}^{f,d} &= -a_{1,f}^* a_{2,d}, V_{\mathbf{a}_y}^{f,d} = -a_{1,f}^* a_{4,d}, V_{\mathbf{a}_z}^{f,d} = -a_{1,f}^* a_{5,d}, \\
V_0 &= -a_{1,d}^* a_{1,f}, U + E_f = -|a_{1,f}|^2 + \sum_{n=1,2,4,5} |a_{n,d}|^2.
\end{aligned}$$

A blokk operátorok formája a disszertációban adott (421) kifejezéssel egyezik, csak ebben csupán a $a_{1,f}$, $a_{1,d}$, $a_{2,d}$, $a_{4,d}$, $a_{5,d}$ koefficiensek zérótól különbözőek. A transzformált Hamilton operátor szintén (422) formájú, de most ebben $K_d = \sum_{n=1,2,4,5} |a_{n,d}|^2$. Továbbmenőleg, az (1, 3), (1, 6), (1, 8) és hasonló (lásd: 3. ábra) másodsomszéd ugrásokat a harmadszomszéd ugrásokkal együtt (a szakasz hosszúsága miatt, zérónak tekintünk). Az alapállapot hullámfüggvény szintén (424) formájú, de ebben $a_{n,d}^* = p a_{n,f}^*$ nem teljesül minden $n = 1, 2, \dots, 8$ -ra $p = p^*$ kikötéssel, ennek következtében, az alapállapot nem lokalizált. A (426)-os egyenlőség is teljesül minden következményével, azaz az alapállapot pont olyan nem-Fermi folyadék mint ami az itt bemutatott A.2.a) esetben volt.

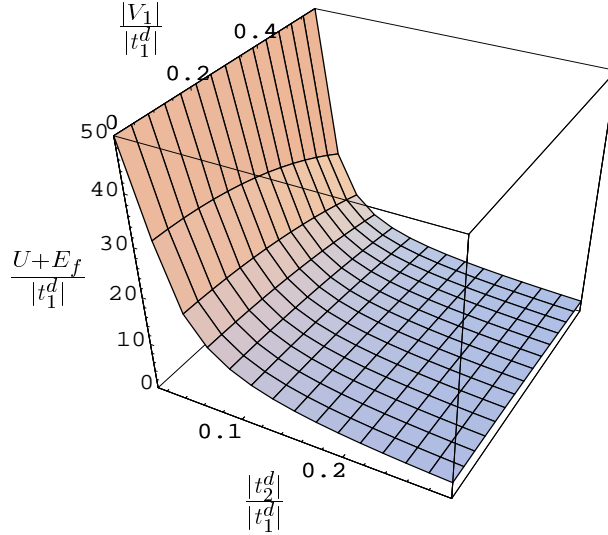


FIG. 4. Az A.2.b) eset itineráns megoldás megjelenési tartománya a felületen található. A $|t_2^d|/|t_1^d| \rightarrow 0$ határesetben a felület a $(|V_1|/|t_1^d|, (U + E_f)/|t_1^d|)$ síkhoz aszimptótikusan közeledik.

A paramétereiket illetőleg $t_1^d = t_{\mathbf{a}_\alpha}^d, V_1 = V_{\mathbf{a}_\alpha}^{f,d}, t_2^d = t_{\mathbf{a}_\alpha - \mathbf{a}_{\alpha'}}^d$ bevezetésével 6 független paraméterünk van, és pedig $t_1^d, t_2^d, V_0, V_1, E_f, U$. A t_1^d -el mindent normálva, 5 független mennyiség marad (mostmár t_1^d egységekben kifejezve):

$$t_2^d, V_0, V_1, E_f, U \quad (14)$$

A keresett megoldás során a hoppingok valóságosak, a hibridizációk képzetesek, de $V_0 V_1$ szorzat valós (mert $V_0 \sim V_1^*$ teljesül, de a nagyságrendek helyesek, azaz $|V_0| > |V_1|$), megoldás $V_0 V_1 / t_1^d < 0, t_2^d < 0$ esetben áll elő, miközben (14)-ből V_0 kiesik. A megmaradt 4 független változó tehát (mostmár t_1^d -el normálva felírva):

$$t_2^d / t_1^d, V_1 / t_1^d, E_f / t_1^d, U / t_1^d \quad (15)$$

A tartomány ahol a megoldás megjelenik, a (15)-ben szereplő paraméterekkel felírva, a 4. ábrában látható felület.

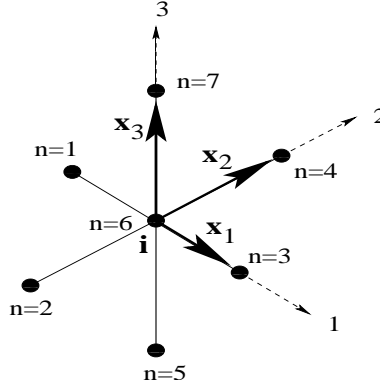


FIG. 5. Az A.2.c) esethez tartozó oktahedron blokk. A fekete pontok jelentik a rács csomópontokat amelyek a blokkhoz tartoznak, $\mathbf{x}_\alpha, \alpha = 1, 2, 3$ a Bravais primitív vektorok, az $n = 1, 2, \dots, 8$ pedig a csomópontok jelölése az \mathbf{i} tetszőleges csomóponton értelmezett blokkon belül.

A.2.c) Eset:

A következőkben ([12], V. fejezet, 075130-10 oldal) egy olyan új tartományt mutatok be ahol az A.2.a) és A.2.b) esetben jellemzett itineráns fázis ugyanolyan tulajdonságokkal szintén létezik. Az induló Hamilton operátor ugyanaz, de a felbontás olyan módon van végrehajtva, hogy f-ugrások ne legyenek jelen, hibridizációs tagok csak elsőszomszéd járulékgig legyenek figyelembe véve és ezek közül az elsőszomszédosak legyenek valóságosak, továbbá a rács ne legyen lapított. Mindezt egy oktahedron formájú blokkra épített blokk operátorral értem el, melynek csak a középpontjában van f-elektron elhelyezve.

A fedési egyenletek [12]-nek (55)-ös egyenletében találhatóak, a d-ugrások $\mathbf{a}_x, \mathbf{a}_y, \mathbf{a}_z, 2\mathbf{a}_x, 2\mathbf{a}_y,$

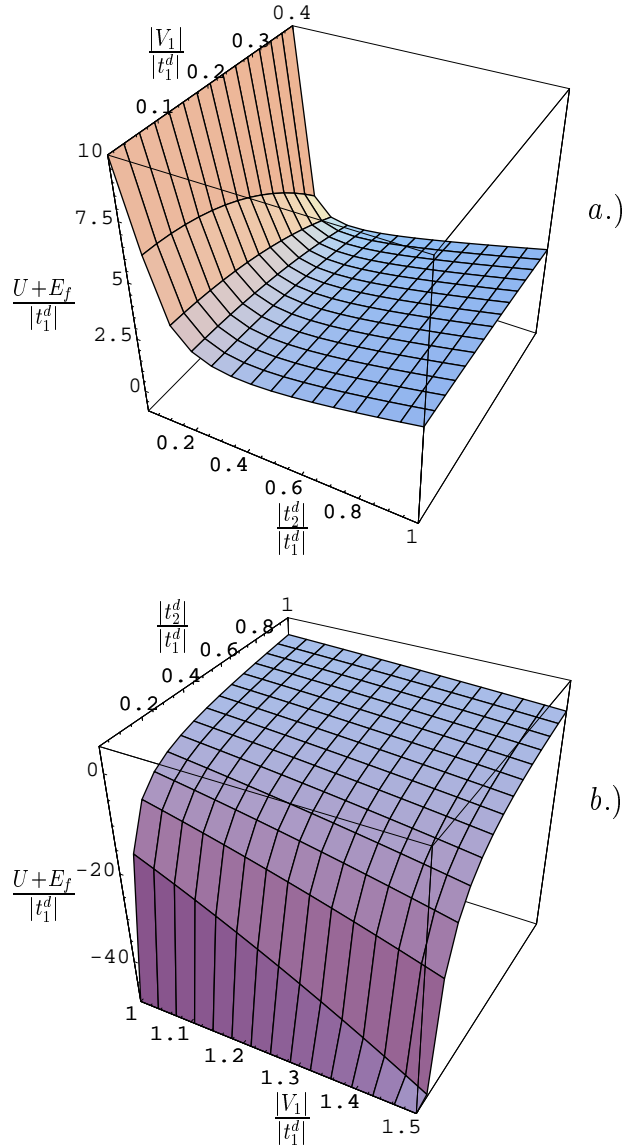


FIG. 6. Az A.2.c) eset itineráns megjelenési tartománya a bemutatott felületek felett található. a) $|V_1|/|t_1^d| < 1/2$ eset. Ekkor $[(U + E_f)/|t_1^d|, |V_1|/|t_1^d| - 1]$ síkhoz aszimptótikusan közeledik a felület $|t_2^d|/|t_1^d| \rightarrow 0$ határesetben, b) $|V_1|/|t_1^d| > 1/2$. Az A.2.b) esettel ellentétesen, most V_1 valós.

$2\mathbf{a}_z, \mathbf{a}_z \pm \mathbf{a}_x, \mathbf{a}_z \pm \mathbf{a}_y, \mathbf{a}_y \pm \mathbf{a}_x$ szakaszokat fedik le (az 5-ös ábrában $\mathbf{a}_\alpha = \mathbf{x}_\alpha$ jelölésben szerepelnek a Bravais vektorok). Kőbös rácsra $t_1^d = t_{\mathbf{a}_\alpha=1,2,3}$, $t_2^d = t_{\mathbf{a}_\alpha \pm \mathbf{a}_{\alpha' \neq \alpha}}$, $t_2^d = t_{2\mathbf{a}_\alpha=1,2,3}$, $V_1 = V_{\mathbf{a}_\alpha=1,2,3}$, V_0, E_f, U paraméterek vannak, továbbá a megoldás $t_2^d = 2t_1^d$ esetben vizsgált. Mindent t_1^d -el normálva 5 paraméter marad, éspedig (t_1^d egységekben): t_2^d, V_0, V_1, E_f, U . Azonban, a megoldásból, tetszőleges esetben komplex V_0 adódik úgy, hogy $Re(V_0) = -t_1^d V_1 / |t_2^d|$, de $Im(V_0)$ tetszőleges marad. A négy valós független paraméter ($t_2^d/t_1^d, V_1/t_1^d, E_f/t_1^d, U/t_1^d$)

kerül be a fázisdiagram részbe amely a megoldásokat tartalmazza (6-os ábra), amelyekben a térbeli kiterjedést a tetszőleges $Im(V_0)$ adja. Igazoltam, hogy a megoldás fizikai tulajdonságai egyeznek az A.2.a-b)-ben kapott fizikai tulajdonságokkal, de az is megfigyelhető, hogy $|t_1^d/t_2^d| > 6$ esetben valós V_0 megoldások is előállnak, melyek mellett a fizikai tulajdonságai az alapállapotnak megmaradnak.

Megjegyzések

I. Ugyanarról az állapotról igazoltam, hogy ugyanazon Hamilton operátor paraméterterében három különböző tartományban (azaz három különböző szeleten) létezik, tehát paramétertér térfogatban jelenik meg.

II. Az A.2.a) esettel ellentétben, az A.2.b) esetben mostmár nincs szükség f-hoppingokra ahhoz, hogy az alapállapot előálljon. Továbbá A.2.c) eredményei értelmében, lapított rácstra, és komplex hibridizációkra sincs szükség ehhez. Tehát a bemutatott 3D nem-Fermi folyadék nem igényel sem f-ugrásokat, sem komplex hibridizációt sem torzított (lapított) rácsot.

III. Módszertani előrelépés kellett ahhoz, hogy A.2.a)-tól A.2.c)-ig eljussunk. A megoldás lépésekben abból áll, hogy inhomogén módon kell az $a_{n,f}$ koefficienseket a blokk operátorokban megjelentetni (azaz nem szabad minden csomóponton őket definiálni), és ez után a blokk operátorokat nem a konvencionális cellán kell értelmezni.

A.2.d) Eset:

Az előző három esetben [A.2,a-c)], végül is csak nagy $|V_0|$ szituációban adódnak valós hibridizációk az itineráns megoldáshoz. De ezt is ki lehet küszöbölni [2]. Az eredményem ez esetben 2D-ben van, de szemlélteti, hogy az állítás igaz.

Az induló Hamilton operátor f-ugrásokat nem tartalmaz, hibridizáció csak elsőszomszédig megy, a d-hopping $\mathbf{a}_x, \mathbf{a}_y, 2\mathbf{a}_x, 2\mathbf{a}_y, \mathbf{a}_y \pm \mathbf{a}_x$ szakaszokat fed le. Az eljárás során egy olyan blokk operátor kerül alkalmazásra mely nagysága a primitív cellának kétszeresére, és csak a közepében van $a_{n,f}$ blokk operátor koefficienst értelmezve. A fedési egyenletek valós hibridizációkat adnak eredményül olyan körülmények között, hogy a cella nem lapított. Az alapállapotú megoldás matematikai formája ugyanaz, a koncentrációtartomány is azonos, és a tartomány, ahol az itineráns megoldás megjelenik az 7. ábrában szemléltetett felület.

A jelölések négyszögcellát fednek $t_x = t_{\mathbf{a}_x} = t_{\mathbf{a}_y}$, $V_x = V_{\mathbf{a}_x} = V_{\mathbf{a}_y} \sim V_0$, $t_{2x} = t_{2\mathbf{a}_x} = t_{2\mathbf{a}_y}$, a bemutatott megoldás során $t_{\mathbf{a}_y+\mathbf{a}_x} = t_{\mathbf{a}_y-\mathbf{a}_x} = 2t_{2x}$ áll fenn. Független paraméter 5 van, az ami az 5. ábrán látható (beleértve t_x -et is).

Mostmár csak a d-hoppingokból van több szomszédot felölölő. Ezt is ki lehet küszöbölni

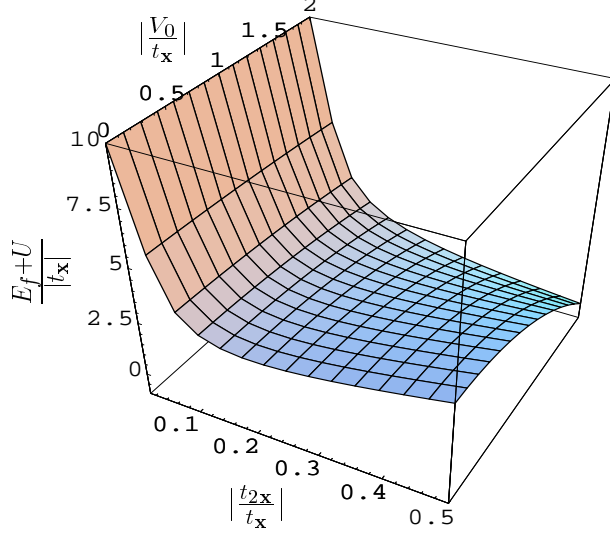


FIG. 7. Az A.2.d) eset itineráns megoldás megjelenési tartománya a felületen található. A $|t_{2x}|/|t_x| \rightarrow 0$ határesetben a felület a $(|V_0/t_x|, (U + E_f)/|t_x|)$ síkhoz aszimptótikusan közeledik.

[3] (éspedig több blokk operátor járulékok bevezetésével a kiejtendő szakaszon). De ez a konkrét számítás a szóban forgó megoldásra 3D-ben nem volt elvégezve ([3] az A.1. szigetelő fázist tárgyalja 2D-ben).

B.1.) Megoldások $N/N_t \leq 1/4$ esetben:

B.1.a) Eset: Szigetelő megoldás $N/N_t = 1/4$ -re:

Itt a [12] V.B.1 fejezetében megadott megoldásról van szó (075130-12 oldal). A fedési egyenletek által szolgáltatott megoldás az amely [12]-nek (59)-es transzformált Hamilton operátorához tartozik és $a_{n,d}/a_{n,f} = p$ (p valós) kikötésnek eleget tesz. Az induló Hamilton operátor a minden járulékot tartalmazó A.2.a) induló Hamilton operátorával egyezik, f-ugrások, minden primitív cella csomópont közötti szakaszon hopping és hibridizáció jelen van.

A fedési egyenletek által szolgáltatott megoldás konkrét formája tetszőleges $U > 0$ esetén és köbös rácsra

$$t_r^f = t_r^d/p^2, V_r = t_r^d/p, E_f = V_0(p^2-1)/p \quad (16)$$

továbbá

$$V_0 = |a_1|^2[(1+u^2)^3/p], t_2^d = |a_1|^2 u^2(1+u^2), t_1^d = |a_1|^2(u^5+2u^3+u) \quad (17)$$

ahol $|a_1|^2 = t_3^d/u^3$. Látható hogy a paraméterek arányából t_3^d kiesik. A (16)-os összefüggés első 2 egyenlősége (10) formájú, amelyet, amint említettem már, numerikus ab initio

számítások is eredményeznek, tehát ezek elfogadhatóak (lásd alább). A megmaradt 4 összefüggés [azaz (16) utolsó, és (17) három egyenlete] arányok révén

$$V_0/t_1^d = [(t_2^d/t_1^d)p]^{-1}, E_f/t_1^d = [(p^2-1)/p^2][(t_2^d/t_1^d)^{-1}] \quad (18)$$

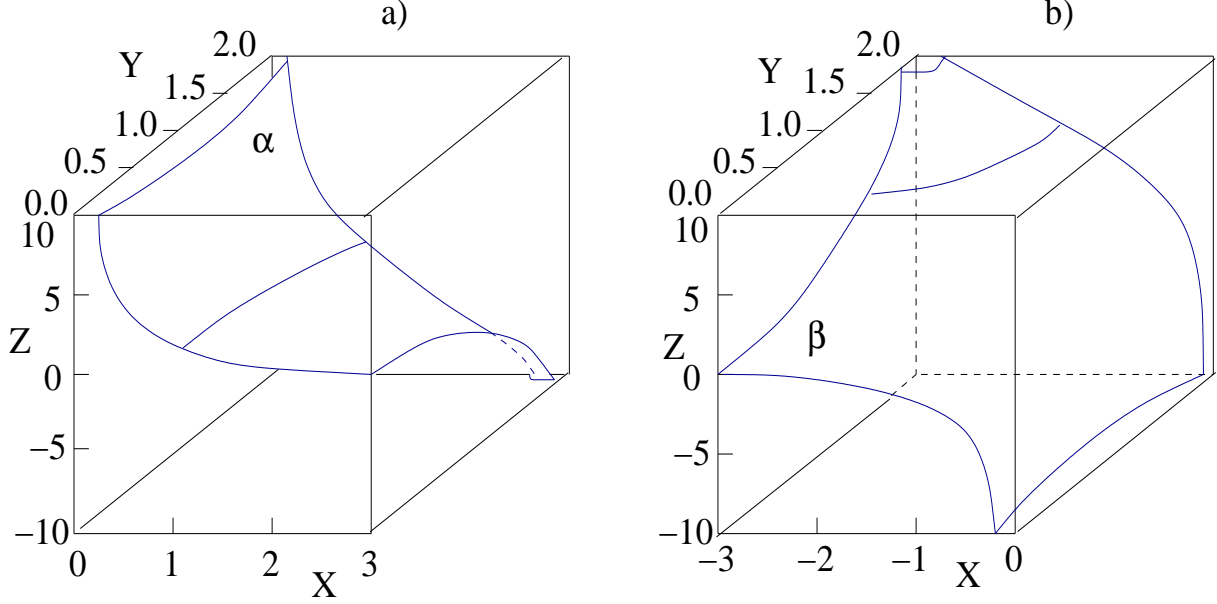


FIG. 8. Az B.1.a) eset szigetelő megoldás megjelenési tartománya a felületeken található. A jelölés: $X = t_2^d/t_1^d$, $Y = V_0/t_1^d$, $Z = E_f/t_1^d$, és $U > 0$ tetszőleges. Az a) felület $X > 0$, a b) felület pedig $X < 0$ esetet szemlélteti. A rajzokon a vágott részek az ábrázolási tartományból kilógó felületrészeket jelentenek.

formában írható fel, ahol 3 darab t_1^d -el normált paraméter arány szerepel (V_0/t_1^d , E_f/t_1^d , t_2^d/t_1^d) és $p \neq 0, \infty$ tetszőleges valós paraméter. A (18)-as relációk adják meg a megoldás létezésének paraméter tartományát. Ez egy 3D felület, amely (18)-ban paraméteres formában van felírva. Használva az

$$t_2^d/t_1^d = X, V_0/t_1^d = Y, E_f/t_1^d = Z \quad (19)$$

jelöléseket, (18) a 8. ábrában van szemléltetve.

Ha a tanulmányozott konkrét anyag esetében a (16) első két egyenletét is plusz megszorító feltételként kezeljük a használt induló Hamilton operátorból levezetett eredményre, akkor (18-19) mellé az a követelés is fennáll, hogy \underline{r} távolságra vett $V_{\underline{r}}$ hibridizáció, az ugyanazon \underline{r} távolságra vett d és f hopping mértani közepe legyen (azaz $V_{\underline{r}}^2 = t_{\underline{r}}^d t_{\underline{r}}^f$ teljesüljön). Az f -hopping kiiktatásával a szigetelő fázis levezetése elvileg szintén megtehető, de 3D-ben a tanulmányozott koncentráció tartományon, ezt nem vizsgáltam részletesen.

Megjegyzem, hogy az itt bemutatott megoldás tetszőleges 3D Bravais rács primitív cellára levezethető [12].

B.1.b) Eset: Itineráns megoldás $N/N_t \leq 1/4$ -re:

Ezen eset [12] V.B.2 fejezetének felel meg. A megoldások akkor lépnek fel ha az alsó sáv lapos. A nemkölcönható rendszer sávszerkezetét a \mathbf{k} -függő λ megoldások révén a

$$\begin{aligned} & [2 \sum_{\mathbf{r}} t_{\mathbf{r}}^d \cos \mathbf{k}\mathbf{r} - \lambda][E_f + 2 \sum_{\mathbf{r}} t_{\mathbf{r}}^f \cos \mathbf{k}\mathbf{r} - \lambda] - [V_0 + \sum_{\mathbf{r}} (V_{\mathbf{r}}^{d,f} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} + V_{\mathbf{r}}^{*f,d} e^{+i\mathbf{k}\mathbf{r}})] \cdot \\ & [V_0^* + \sum_{\mathbf{r}} (V_{\mathbf{r}}^{f,d} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} + V_{\mathbf{r}}^{*d,f} e^{+i\mathbf{k}\mathbf{r}})] = 0 \end{aligned} \quad (20)$$

egyenlet adja, az U által létrehozott alsó effektív lapos sávok pontosan nem ismertek, ezért itt most csak (20)-ra tudok hivatkozni, amely a levezetett alapállapotú megoldás megjelenési tartományának csak egy részét adja majd. A (20)-ban az \mathbf{r} a disszertáció 25. ábrájában feltüntetett szakaszokra vonatkozik, és benne az egyszerűség kedvéért minde hopping amplitúdó valószínű volt tekintve. Az itt tárgyalt alapállapotú megoldások akkor jelennek meg, amikor (20) által adott teljes első Brillouin zónán legkisebb $\lambda_1 < \lambda_2$ megoldás \mathbf{k} független. Ezen problémának a teljes általános 3D esetét és a lehetséges összes itt megjelenő Hamilton operátor csatolási állandókat figyelembe véve, nagyon sok lehetséges megoldása van a teljes paraméterter különböző véges tartományain, amelyeket közösen egy grafikonban szemléltetni nem lehet.

De példaként egy egyszerű esetet be tudok mutatni, hogy látni lehessen hogyan alakulnak ki a lapos sáv kondíciók. Vegyük pl. az egyszerű köbös rácsot elsőszomszéd hopping és hibridizációkkal, amelyek minden irányba egyenlőek. Ekkor (20)-ból azt kapjuk hogy:

$$\begin{aligned} & \lambda^2 - \lambda[E_f + 2C_{\mathbf{k}}(t_1^d + t_1^f)] + [4C_{\mathbf{k}}^2(t_1^d t_1^f - V_1^2) + 2C_{\mathbf{k}}(t_1^d E_f - 2V_0 V_1)] = 0, \\ & (4t_1^d t_1^f - 4V_1^2)C_{\mathbf{k}}^2 + [2t_1^d E_f - 4V_0 V_1 - (2t_1^f + 2t_1^d)\lambda]C_{\mathbf{k}} + (\lambda^2 - \lambda E_f) = 0 \end{aligned} \quad (21)$$

ahol tudatosan (21) második sora ugyanazon egyenletet mutatja be, de nem λ hatványai szerint, hanem $C_{\mathbf{k}} = \cos xk_x + \cos yk_y + \cos zk_z$ hatványai szerint rendezve. A λ kifejezéséből akkor esik ki a \mathbf{k} (azaz lesz a sáv lapos), ha $C_{\mathbf{k}}$ minden $n = 0, 1, 2$ hatványát szorzó koefficiens egyszerre zéró. A konkrét (21)-el adott esetben ez azt jelenti, hogy

$$4t_1^d t_1^f - 4V_1^2 = 0, \quad 2t_1^d E_f - 4V_0 V_1 - (2t_1^f + 2t_1^d)\lambda = 0, \quad (\lambda^2 - \lambda E_f) = 0. \quad (22)$$

A (22) minden egyenlősége által adott megoldás külön sorokban felírva így néz ki:

$$\begin{aligned} & V_1^2 = t_1^d t_1^f, \\ & \lambda = (t_1^d E_f - 2V_0 V_1) / [2(t_1^d + t_1^f)], \\ & \lambda_a = 0, \quad \text{vagy} \quad \lambda_b = E_f. \end{aligned} \quad (23)$$

Ha egyszerre tudjuk teljesíteni (23)-at az jele annak, hogy lapos sáv kerül a sáv szerkezetbe. Ha nem, akkor mindez még plusz kondíciók figyelembevételével történhet csak meg. Tehát (23) mindig egy minimális kondíciószámmal felruházott útat mutat a lapos sáv előállításának irányába.

Ha most felírjuk (21)-nek λ szerinti gyökeit, az eredmény a következő képpen néz ki:

$$\begin{aligned}\lambda_{1,2} &= (1/2)[A \pm \sqrt{D}], \\ A &= E_f + 2(t_1^d + t_1^f)C_{\mathbf{k}}, \\ D &= E_f^2 + 4C^2(t_1^d + t_1^f)^2 + 4E_f(t_1^d + t_1^f)C_{\mathbf{k}} - 8(E_f t_1^d - 2V_0 V_1) - 16(t_1^d t_1^f - V_1^2)\end{aligned}\quad (24)$$

Ekkor, (23) alapján, D -ben $V_1^2 = t_1^d t_1^f$, $t_1^d E_f = 2V_0 V_1$ figyelembevételével

$$\lambda_1 = 0, \lambda_2 = A$$

eredmény adódik. Ennek megfelelően

$$\begin{aligned}\lambda_2 &= E_f + 2(t_1^d + t_1^f)C_{\mathbf{k}}, \quad \lambda_1 = 0 \\ V_1^2 &= t_1^d t_1^f, \quad E_f t_1^d = 2V_0 V_1.\end{aligned}\quad (25)$$

Továbbá, hogy λ_1 tényleg alsó sáv legyen, oda az kell hogy $E_f > 6|t_1^d + t_1^f|$. Azaz a lapos sáv kondíciók az adott esetben

$$V_1^2 = t_1^d t_1^f, \quad E_f t_1^d = 2V_0 V_1, \quad E_f > 6|t_1^d + t_1^f|. \quad (26)$$

A másik lehetőség amit (23) felkínál, az $E_f = (E_f t_1^d - 2V_0 V_1) / [2(t_1^d + t_1^f)]$. Ez esetben $D = [E_2 - 2C_{\mathbf{k}}(t_1^d + t_1^f)]^2$ ered, és $V_1^2 = t_1^d t_1^f$ kondíciót is újból felhasználva

$$\begin{aligned}\lambda_1 &= E_f, \quad \lambda_2 = 2(t_1^d + t_1^f)C_{\mathbf{k}} \\ V_1^2 &= t_1^d t_1^f, \quad E_f = -V_0 V_1 / (t_1^d + 2t_1^f), \\ E_f &= -V_0 V_1 / ((t_1^d + 2t_1^f) < -6|t_1^d + t_1^f|\end{aligned}\quad (27)$$

kondíciók erednek, azaz az új alsó lapos sáv kondíció

$$\begin{aligned}V_1^2 &= t_1^d t_1^f, \quad E_f = -V_0 V_1 / (t_1^d + 2t_1^f), \\ -V_0 V_1 &/ ((t_1^d + 2t_1^f) < -6|t_1^d + t_1^f|\end{aligned}\quad (28)$$

A jelen esetben más alsó lapos sáv lehetőség nincs. Elvileg, (23) megkerülésével azt meg lehetne próbálni, hogy (24) D kifejezését $D = (E_f + X C_{\mathbf{k}})^2$ formára alakítani, majd kondíciók bevezetésével $A \pm (E_f + X C_{\mathbf{k}})$ egyik tagjából $C_{\mathbf{k}}$ -t kiejteni, de ez az út ellentmondáshoz vezet.

Összefoglalás: Kőbös rendszerben, valós elsőszomszédig menő, x,y,z tengelyek irányába egyenlő csatolások esetében és a nemkölsönható rendszerre vonatkozólag, lapos alsó sávra a (26,28) lehetőségeink vannak. Megfigyelhető hogy ez véges és különböző tartományokat jelent. Ha a rendszer bonyolódik, ezen tartományok száma és diverzifikálódása nő.

A paramétertérben ezen tartományok felületekként foghatók fel. A tanulmányozott esetben 6 paraméter van jelen: $t_1^d, t_1^f, V_0, V_1, E_f, U$ ahol $U > 0$, amúgy tetszőleges (tehát az U tengely mentén ezen felületek, pozitív U tartományon bárhova tölhatók). Az U kiemelésével 5 paraméter marad, ha pedig t_1^d -el normálunk, akkor 4, éspedig:

$$t_1^f/t_1^d = p, V_0/t_1^d = x, V_1/t_1^d = y, E_f/t_1^d = z.$$

Most megfigyelhető hogy (26) esetében a kapott kondíciók

$$z = x\sqrt{p}, y = \sqrt{p}$$

egy térbeli felület tetszőleges x =konstant síkban vett paraméteres metszeteit jelentik, ahol a paraméter $p = t_1^f/t_1^d$ egy pozitív (nem zéró és nem végtelen), amúgy tetszőleges szám. Ezen a $z = xy$ felületen $z > 6(1 + y^2)$ az a tartomány ahol a megoldás él.

Hasonlóan, a (28) esetben, a felület a következő formában adható meg

$$z = -x\sqrt{p}/(1 + 2p), y = \sqrt{p}$$

ahol a paraméter nélkül felírt $z = -xy/(1 + 2y^2)$ felületen a $z < -6(1 + y^2)$ tartomány számít. A két tartományt a 9. ábra szemlélteti.

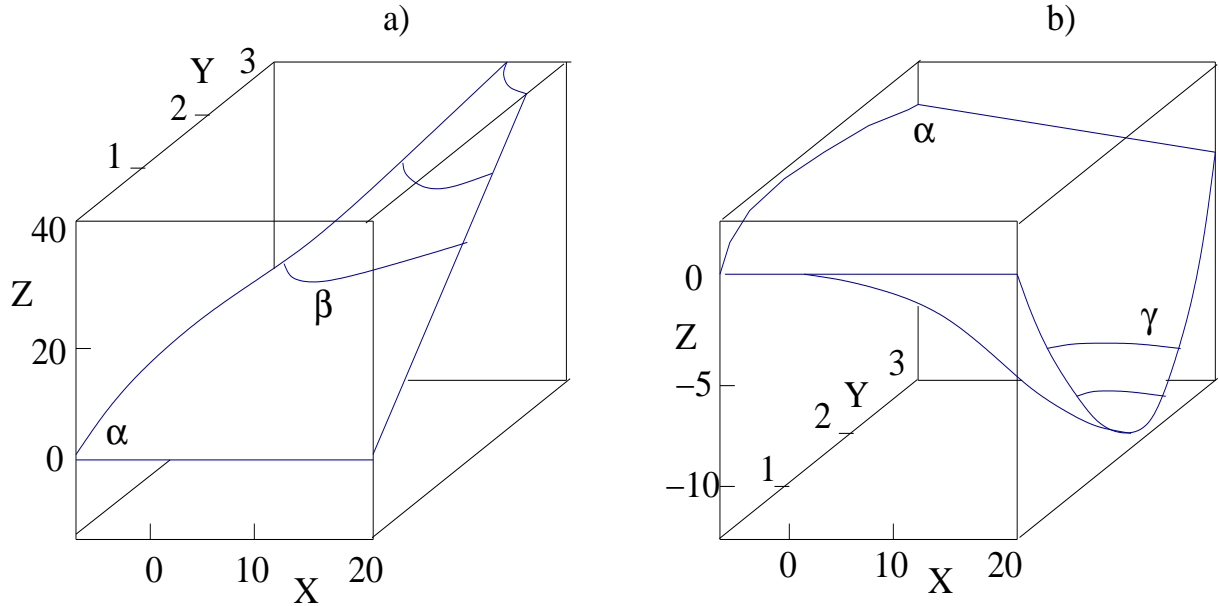


FIG. 9. Az B.1.b) esetben tárgyalt (26) és (28) egyenletekből származó tartományok az itineráns megoldáshoz: a) a (26) által adott α felületen a β görbe feletti tartományban teljesülnek a feltételek. b) a (28) által adott α felületen a γ görbe alatt teljesülnek a feltételek. Mindkét rajzban $X = V_0/t_1^d$, $Y = V_1/t_1^d$, $Z = E_f/t_1^d$.

Ha figyelembe vesszük a 3D Bravais rácsok adta összes lehetőséget, a 9. ábrán bemutatott

felületekhez hasonló felületek nagy sokaságát kapjuk eredményül, melyek együttesen a teljes paraméterteret hálózatként átszelik.

Ne felejtjük el azt a tényt sem, hogy pl. köbös rendszerre, elsőszomszédokig menőleg, ez csak a valós csatolások esete volt. A csatolások lehetnek képzetesek, sőt komplexek, a hibridizációkon kívül a hoppingokat is beleértve, hisz ez utóbbiakat a Peierls fázisfaktorokon keresztül külső mágneses térrel befolyásolni tudunk, így ráadásul, a szóban forgó felületeket mozgathatjuk is.

Fontosság:

A disszertáció XII. fejezetének fontosságaként a következőket mondanám el: i) Tudomásom szerint az egyedüli egzakt leírás egy $D > 1$ fermionokból álló normálfázisú nem-Fermi folyadékra vonatkozólag az itt bemutatott A.2. eredmény. ii) Megmutattam, hogy a periodikus Anderson modell önmaga, egy szigetelő fázisból való kilépéskor képes kompresszibilitási anomáliát jelezni fononikus járulékok nélkül. iii) 3D periodikus Anderson modellre ezek az egyedüli pontos megoldások, és ezért, a ferromágnesességgel kapcsolatos részeket két Mattis könyv is idézi. (lásd MTMT adatok). iv) Mivel a módszerrel kapcsolatos megjegyzések is szerepelnek a bírálóknak, kénytelen vagyok aláhúzni, hogy az itt bemutatott megoldások mind véges U -ra vannak, amit a periodikus Anderson modellre, a Strack [137] idejében alkalmazott eljárás, még 1D-ben sem volt képes megtenni.

XVII. Fejezet: U okozta delokalizáció 2D-ben:

A használt modell 2D periodikus Anderson modell, f -ugrások nélkül. A hibridizációk valóságosak és első szomszédig terjedők, a d -ugrások $\mathbf{a}_x, \mathbf{a}_y, 2\mathbf{a}_x, 2\mathbf{a}_y, \mathbf{a}_y \pm \mathbf{a}_x$ szakaszokat fedik (itt \mathbf{a}_α , $\alpha = x, y$ a Bravais primitív vektorokat jelölik), miközben a négyzetes cella esete tárgyalt. A számítás félig töltött rendszeren történik, amikor $N = 2N_\Lambda$, ahol N_Λ a rács csomópontjainak a száma, N pedig az elektronoké. A négyzetes cella miatt a paraméterek szimmetrikusnak választottak:

$$t_1 = t_{\mathbf{a}_x} = t_{\mathbf{a}_y}, t_2 = t_{\mathbf{a}_y \pm \mathbf{a}_x}, t'_2 = t_{2\mathbf{a}_x} = t_{2\mathbf{a}_y}, V_1 = V_{\mathbf{a}_x} = V_{\mathbf{a}_y}$$

miközben összesen 7 paraméter van jelen:

$$t_1, t_2, t'_2, V_0, V_1, E_f, U$$

A feladat végzése során rögzített (494)-es összefüggések azért nagyon specifikusak, mert egyszerűen a problémába való behelyezést valósítják meg. Ugyanis, az itt tárgyalt problémakör a következő: 2006-2007 periodusból származó 2D itineráns rendszerre vonatkozó Kvantum

Monte Carlo és DMFT (dinamikus mean-field) adatok szerint [243],[245] ha a rendszer a) szigetelő állapotban van, de úgy hogy b) az alapállapot makroszkópicusan degenerált, a Hubbard U növelésével delokalizáció áll elő. Ez azért nagyon érdekes, mert általában, U növelésével lokalizációt idézünk elő. Az adatok azt mutatták, hogy a kritikus U kis értékeket is felvehet, így én $U_c = 0$ esetet állítottam be. Ennek következtében, $U = 0$ -ban makroszkópicusan degenerált szigetelő fázis a kiindulópont. A feladat az, hogy lássuk egzakt szinten, mit tesz ekkor a Hubbard U , ha bekapcsolják. Hogy a probléma témakörébe helyezkedjek, vettem egy kétsávos rendszert (azaz periodikus Anderson modell), és az $U = 0$ esetre rákényszerítettem hogy szigetelő legyen (azaz a rendszer félig töltött, és a két sáv között energiárés van), illetve, hogy az állapot makroszkópicusan legyen degenerált (azaz az alsó sáv lapos). Ezeket a kondíciókat állítják be $U = 0$ esetére a (494) összefüggések. Ez után kapcsoltam be az $U \neq 0$ értéket, és a XVII-ik fejezet arról szól, hogy ekkor mi történik.

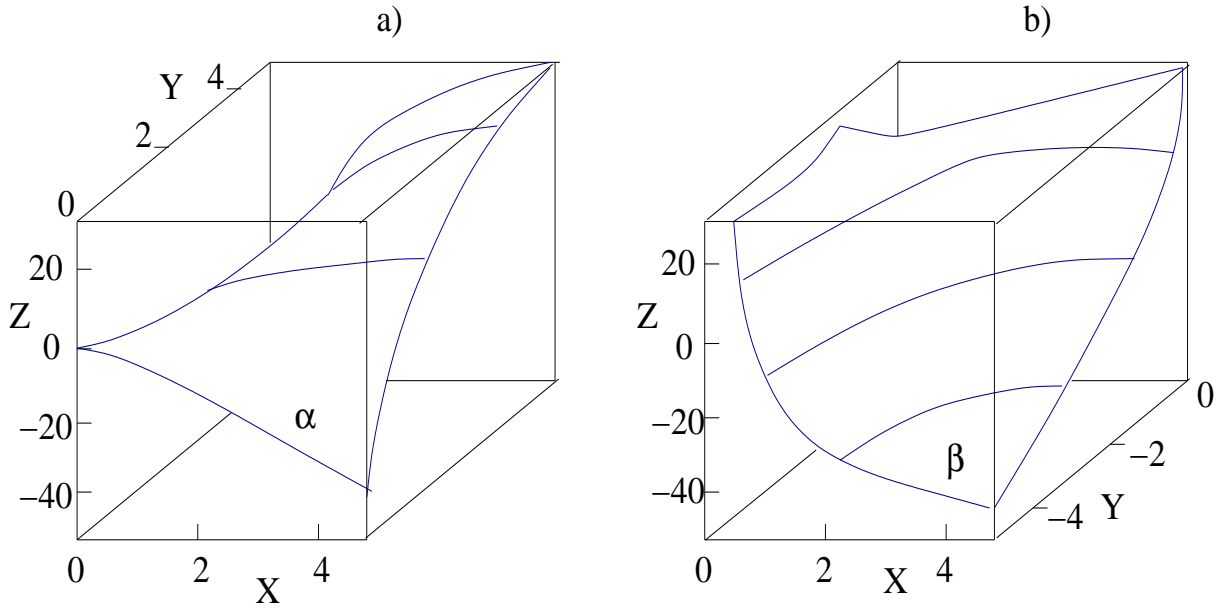


FIG. 10. A XVII fejezethez tartozó egyenletekből származó tartományok a paraméterterben: a) az $Y > 0$ ($p > 0$) esetben adott α felületen teljesülnek a feltételek. b) az $Y < 0$ ($p < 0$) esetben adott β felületen teljesülnek a feltételek. Mindkét rajzban $X = V_0/t_1$, $Y = V_1/t_1$, $Z = E_f/t_1$, a p paraméter pedig $p = t_2/t_1$ jelentéssel bír.

Mivel egy konkrét számítás folyik itt a felvázolt témakörben, és ezt a problémát nem lehet a teljes paraméterterre számolni, egy konkrét alsó lapos sáv kellett. Ez van kiválasztva (494)-ben. Hogy mit jelent egy lapos sáv a paraméterterben, ezt az előbbi B.1.b) esetben

részletesen tárgyaltam. Az ott elmondottakhoz hasonlóan, az itt megjelenő paraméterter felület konstans x metszeteinek paraméteres egyenletei

$$y = px, z = 2y^2/p - (p/2)(x/y)^2 - 2p$$

ahol $x = V_0/t_1, y = V_1/t_1, z = E_f/t_1$ és a $p = t_2/t_1$ paraméter $p \neq 0, \infty$ mellett tetszőleges (pozitív ha $t_1 > 0$, és negatív ha $t_1 < 0$). A felület, mely egyenlete $z = 2xy - x/(2y) - 2y/x$, a 10. ábrában látható a) $p > 0$ és b) $p < 0$ variánsban.

Hangsúlyozni szeretném, hogy a XVII-ik fejezetben az egyedüli plusz egyenlőség amit nem rögzít a tanulmányozott témakör, az a $t'_2 = t_2/2$. Ez az egyenlőség a nagyságrendi viszonyokat jól állítja be ugyan, de végül is matematikailag egy könnyítő feltételezés volt. Ezt, erre a választott konkrét alsó lapos sávra, a választott (499) pozitív szemidefinit operátor megtartásával úgy lehetne kiküszöbölni ahogy a nemkívánatos ugrás járulékokat a módszer kiejti, éspedig (499) mellé egy másik pozitív szemidefinit operátor bevezetésével (lásd disszertáció 88-ik oldal). Ez az amúgy is komplikált számítást elbonyolítja ugyan, de megvalósítható. De aláhúzom, hogy azt a fizikai tényt amely a fizikai oka a levezetett eredménynek, éspedig hogy $U = 0$ -ban az alapállapotban létező sok $(\hat{f}_{i,\uparrow}^\dagger \hat{f}_{i,\downarrow}^\dagger)(\hat{d}_{j,\uparrow}^\dagger \hat{d}_{j,\downarrow}^\dagger)$, $r_{i,j} = |\mathbf{j} - \mathbf{i}| \gg a$ állapotot az U bekapcsolása pl. $(\hat{f}_{i,\uparrow}^\dagger \hat{d}_{i,\downarrow}^\dagger)(\hat{d}_{j,\uparrow}^\dagger \hat{f}_{j,\downarrow}^\dagger)$ állapotá alakítja, és ezáltal szétszórja az f-elektronokat, mely következtében a hosszútávú f-hopping valószínűsége nagymértékben megnő, a t'_2/t_2 arány, elvileg nem tudja befolyásolni, mert, legalábbis az én véleményem szerint, erre fizikai ok nincs.

A XVII-ik fejezetbeli eredmények fontossága abban rejlik, hogy egy 2D egzakt megoldás keretei között szemléltette a Hubbard U delokalizáló hatását.

III.iv): Csíkos szerkezetek a 2D-ben:

A XIV-ik fejezetben kétsávós 2D rendszert periodikus Anderson modellel tárgyalok. N_Λ a csomópontok, N pedig az elektronok száma, a maximális rendszertöltés pedig $N_t = 4N_\Lambda$. A levezetett eredmények egynegyed és alatta elhelyezkedő rendszertöltésre vonatkoznak, azaz $N \leq N_\Lambda$ esetre. Az eredmények értelmében, bármelyik $N = N_\Lambda$ koncentráción megjelenő fázis (a stripetól való megkülönböztetés végett ezek vannak homogén fázisként emlegetve a disszertációban), a koncentráció csökkentésével tiszta (azaz nem degenerált) csík (stripe) fázist nem ad. Ezen homogén fázisok száma, és a paraméterterben elfoglalt helyük nagy, mert minden ide tartozik, ami $N = N_\Lambda$ -ra megjelenik. A XIV-ik fejezet a hangsúlyt nem az 1/4 rendszertöltésen kialakuló homogén fázisra teszi, ez bármi lehet. A XIV-ik fejezetben a

kérdés az, hogy ha már kialakult egy homogén fázis $N = N_\Lambda$ -ra, akkor hogyan jöhet létre a koncentráció csökkentésével ebből stripe fázis.

Az eredmények értelmében, az $N = N_\Lambda$ koncentráción kialakult homogén fázis, a koncentráció csökkentésével, erősen degenerált és rendezetlen klaszterekből felépített fázisra bomlik. A koncentrációt tovább csökkentve, a degenerált alapállapotban, a rendezetlen klaszterek mellett, csík (vagy sakktábla, mi egy specifikus diagonális stripe) képződmények is fellépnek, de az induló Hamilton operátor adta keretek között, ezekből tiszta (azaz nem degenerált) stripe alapállapot sohasem lesz. Ahhoz, hogy tiszta (azaz nem degenerált) csík állapot megjelenjen, a Hamilton operátorhoz kiegészítő tagokat kell hozzáadni, olyanokat, amelyek végül is egy irányt kitüntetnek. Amint azt a bírálói kérdés első felére adott válasz III.iv. pontjában elmondtam, ezek a kiegészítő tagok lehetnek pl. periodikus töltés eloszlás, vagy dimerizációs tagok (\hat{H}_A , vagy \hat{H}_B). Ezen járulékok, amint azt megmutattam, a \hat{H}_1 formára hozhatóak mint minden, a disszertációban használt Hamilton operátor tag. De nem a csatolási állandójuk nagysága számít, hanem térbeli formájuk. Attól függően, hogy ez milyen, különböző csík alakzatok stabilizálódhatnak (azaz nemdegenerált formában alapállapotként megjelenhetnek).

Szeretnék azonban ez esetben is egy példát adni. A homogén fázisokat amelyek $N = N_\Lambda$ esetben jelen vannak, matematikailag kezelni kell, és ezt a lehetőséget a fedési egyenletek teremtik meg. Ezeket a választott blokk operátorok (és a kívánt alacsonykoncentrációs transzformált Hamilton operátor forma, lásd disszertáció 93-ik oldal) határozzák meg. Sok blokk operátor forma lehetséges, és ezek mind más és más paramétertartományt fednek le. Ezek közül válasszunk egy egyszerű esetet, éspedig a 2D négyzetes rács négyzetekre épített blokk operátorainak esetét, amelyekben f-hopping is jelen van (a disszertációban is ez az eset van példázva).

Négyzetre épített blokk operátorok: Homogén fázisok:

A fedési egyenletek ekkor ($\mathbf{y} \pm \mathbf{x}$ jelölése itt \pm):

$$\begin{aligned}
t_{1,y}^d &= a_{1,d}^* a_{4,d} + a_{2,d}^* a_{3,d}; t_{1,x}^d = a_{2,d}^* a_{1,d} + a_{3,d}^* a_{4,d}; t_{2,+}^d = a_{3,d}^* a_{1,d}; t_{2,-}^d = a_{4,d}^* a_{2,d}; \\
t_{1,y}^f &= a_{1,f}^* a_{4,f} + a_{2,f}^* a_{3,f}; t_{1,x}^f = a_{2,f}^* a_{1,f} + a_{3,f}^* a_{4,f}; t_{2,+}^f = a_{3,d}^* a_{1,d}; t_{2,-}^f = a_{4,d}^* a_{2,d}; \\
V_{1,y} &= a_{1,d}^* a_{4,f} + a_{2,d}^* a_{3,f}; V_{1,x} = a_{2,d}^* a_{1,f} + a_{3,d}^* a_{4,f}; V_{2,+} = a_{3,d}^* a_{1,f}; V_{2,-} = a_{4,d}^* a_{2,f}; \\
V_0 &= \sum_{n=1}^4 a_{n,d}^* a_{n,f}; K = \sum_{n=1}^4 |a_{n,d}^*|^2; E_f = \sum_{n=1}^4 |a_{n,f}^*|^2 - K;
\end{aligned} \tag{29}$$

a) Eset: Az $a_{n,d}/a_{n,f} = p$, $n = 1, 2, 3, 4$, p valós esetben (29) az f-hopping és hibridizációkra (10)-ed adja $w = 1/p$ -vel, a blokk operátor paraméterekre kapott megoldás

pedig

$$\begin{aligned}
a_{1,d} &= \sqrt{XY^*} e^{i\phi_1}, a_{2,d} = (\sqrt{XY^*}/|X|) e^{i\phi_2}, \\
a_{3,d} &= (t_{2,+}^d/\sqrt{XY^*}) e^{i\phi_1}, a_{4,d} = (t_{2,-}^d|X|/\sqrt{XY^*}) e^{i\phi_2}, \\
K &= \sum_{n=1}^4 |a_{n,d}|^2 = |XY^*| \left[1 + \frac{1}{|X|^2} + \frac{(t_{2,+}^d)^2}{|XY^*|^2} + (t_{2,-}^d)^2 \frac{|X|^2}{|XY^*|^2} \right],
\end{aligned} \tag{30}$$

ahol XY^* valós és pozitív, ϕ_1, ϕ_2 tetszőleges, továbbá

$$\begin{aligned}
X &= (1/2)[\alpha \pm \sqrt{\alpha^2 - 4\beta}], Y = (t_{2,-}^d/2)[\gamma \pm \sqrt{\gamma^2 - 4\beta}] \\
\alpha &= t_{1,y}^d/t_{2,-}^d, \beta = t_{2,+}^d/t_{2,-}^d, \gamma = t_{1,x}^d/t_{2,-}^d,
\end{aligned} \tag{31}$$

A paraméterter tartományok ahol a megoldások léteznek a (V_0 itt valós)

$$E_f = (V_0)^2/K - K \tag{32}$$

összefüggéssel adottak (ásd 11-es ábra), amelyek (E_f, V_0) síkban 6 parabola családból kapott E_f értéket jelentenek (lásd (31), négy valós és két komplex konjugált X, Y^*), miközben α, β, γ hopping arányok tetszőlegesek, azzal a kikötéssel, hogy XY^* valós és pozitív, illetve blokk operátor paramétert nem lehet lenullázni, vagy végtelennek venni. Azért mondom hogy parabola család, mert (30-31)-ből ha K formáját rögzítjük (azaz “egy” $E_f = E_f(V_0)$ parabolánk van), a K érték változik, mert az ugrások, az előbb elmondott értelemben, tetszőlegesek.

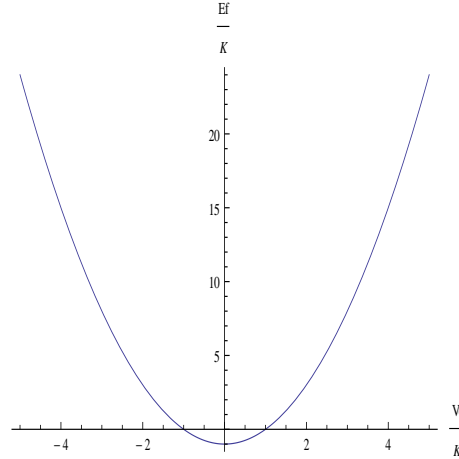


FIG. 11. A (32)-es egyenlethez tartozó, K -val skálázott $(E_f/K, V_0/K)$ változóknban megadott parabola amelyen az a) Eset megoldásai található. Megfigyelhető, hogy bármely (E_f, V_0) paraméter párhoz tartozik K érték (lásd $K = 1/2(\sqrt{E_f^2 + V_0^2} - E_f)$). A K paraméter, a hopping tagok függvényében, (30)-ban adott.

Aláhúzom, hogy (32) alapján bármelyik (E_f, V_0) paraméter párhoz tartozik $K = (1/2)(\sqrt{E_f^2 + V_0^2} - E_f)$ érték, tehát ha egy adott (E_f, V_0) érdekel, meg lehet hozzá

keresni azt a K formát, amelyben lévő ugrások a legjobban közelítik a valóságos hoppingokat.

A (31)-ből eredő 6 különböző K forma a következő X, Y kifejezésekből ered a (30) alapján:

| X | Y | Megjegyzés: | |
|---|---|---------------------------------|-------------|
| $(1/2)(\alpha + \sqrt{\alpha^2 - 4\beta})$, | $(t_{2,-}^d/2)(\gamma + \sqrt{\gamma^2 - 4\beta})$, | $\alpha^2, \gamma^2 > 4\beta$ | |
| $(1/2)(\alpha + \sqrt{\alpha^2 - 4\beta})$, | $(t_{2,-}^d/2)(\gamma - \sqrt{\gamma^2 - 4\beta})$, | $\alpha^2, \gamma^2 > 4\beta$ | |
| $(1/2)(\alpha - \sqrt{\alpha^2 - 4\beta})$, | $(t_{2,-}^d/2)(\gamma + \sqrt{\gamma^2 - 4\beta})$, | $\alpha^2, \gamma^2 > 4\beta$ | 1. Táblázat |
| $(1/2)(\alpha - \sqrt{\alpha^2 - 4\beta})$, | $(t_{2,-}^d/2)(\gamma - \sqrt{\gamma^2 - 4\beta})$, | $\alpha^2, \gamma^2 > 4\beta$ | |
| $(1/2)(\alpha + i\sqrt{4\beta - \alpha^2})$, | $(t_{2,-}^d/2)(\gamma + i\sqrt{4\beta - \gamma^2})$, | $\alpha^2, \gamma^2 < 4\beta$ | |
| $(1/2)(\alpha - i\sqrt{4\beta - \alpha^2})$, | $(t_{2,-}^d/2)(\gamma - i\sqrt{4\beta - \gamma^2})$, | $\alpha^2, \gamma^2 < 4\beta$, | |

lásd a 12. ábrát.

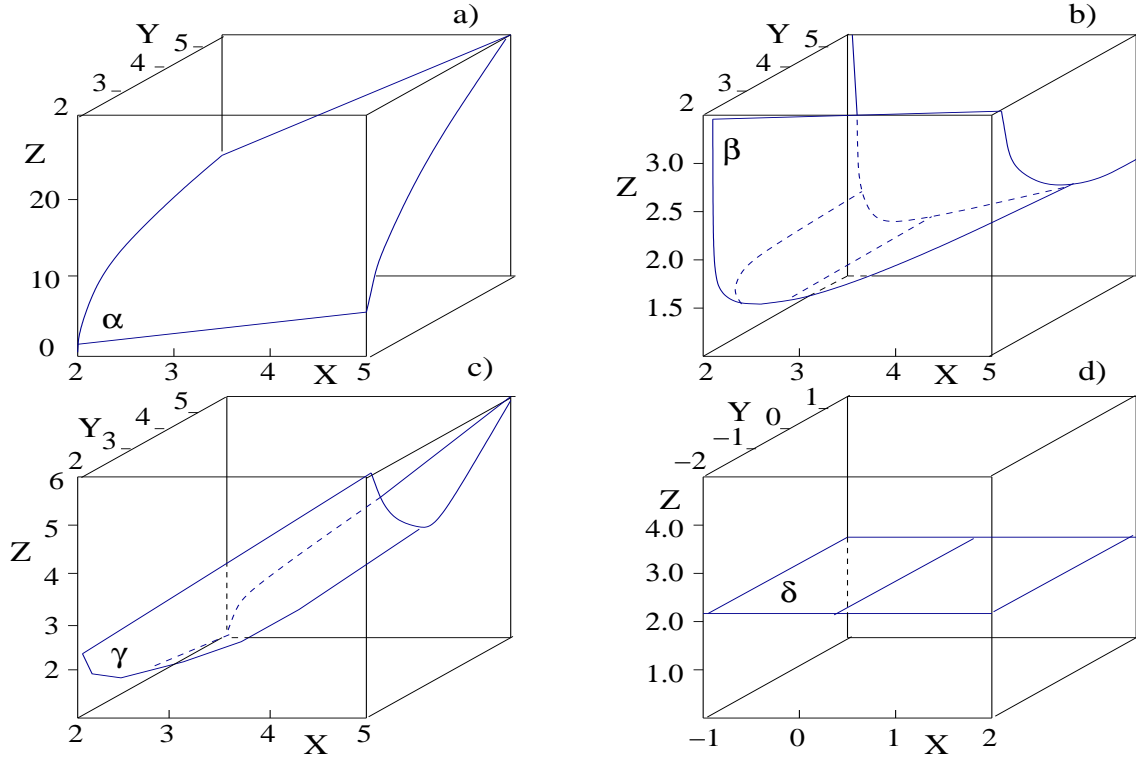


FIG. 12. A (30)-ból eredő $Z = K/t_{2,-}^d$ értékek változása $\beta = 1$ esetre szemléltetve, $X = t_{1,y}^d/t_{2,-}^d$, $Y = t_{1,x}^d/t_{2,-}^d$. A négy rajz az 1. Táblázat: a) első, b) negyedik, c) második, d) ötödik $|\alpha| = |\gamma|$ -val vett sorának felel meg. A megengedett paraméter tartomány az $\alpha, \beta, \gamma, \delta$ felületeken van. A d) esetben a vízszintes sík pozíciója a $\beta = t_{2,+}^d/t_{2,-}^d$ függvényében tetszőlegesen változtatható. Az 1. Táblázat harmadik sora a)-hoz hasonló, hatodik sora pedig d)-hez hasonló viselkedést ad. A β paraméter változtatásával, a felületek kvalitatív formája megmarad, de helyzetük változik.

Azt is meg kell említenem, hogy 6 parabolacsalád akkor van, ha (főképp ϕ_1, ϕ_2 segítségével) minden hoppingot valós értékre tudunk beállítani, vagy komplex hoppingok is meg vannak engedve úgy, hogy ezeket külső mágneses tér okozta Peierls fázisfaktorokkal hozunk létre. Ha ezen lehetőségek nincsenek jelen, a parabolacsaládok száma 4 (négy valós (X, Y) pár). A 12-es ábrában pl. a d) esethez tartozó elsőszomszéd d-hoppingokat Peierls fázisfaktorokkal kell beállítani. A többi rajzhoz tartozó hoppingok valóságok.

b) Eset: Ha az a) eset követelménye miszerint $a_{n,d}/a_{n,f} = p$ (ahol p valós) nem teljesül, a következő megoldásokat kapjuk:

Először is (a csak két blokk operátor koefficienst tartalmazó fedési egyenletekből) 6 blokk operátor paraméter meghatározható:

$$\begin{aligned} a_{1,f} &= (V_{2,+}/t_{2,+}^d)a_{1,d}; a_{2,f} = (V_{2,-}/t_{2,-}^d)a_{2,d}; a_{3,f} = (t_{2,+}^f t_{2,+}^d/V_{2,+}^*)(1/a_{1,d}); \\ a_{4,f} &= (t_{2,-}^f t_{2,-}^d/V_{2,-}^*)(1/a_{2,d}); a_{3,d} = t_{2,+}^d/a_{1,d}^*; a_{4,d} = t_{2,-}^d/a_{2,d}^*, \end{aligned} \quad (33)$$

továbbá, V_0 és E_f kifejezése a következő formákat ölti:

$$\begin{aligned} V_0 &= |a_{1,d}|^2(V_{2,+}/t_{2,+}^d) + |a_{2,d}|^2(V_{2,-}/t_{2,-}^d) + (1/|a_{1,d}|^2)[(t_{2,+}^d)^2 t_{2,+}^f/V_{2,+}^*] + (1/|a_{2,d}|^2)[(t_{2,-}^d)^2 t_{2,-}^f/V_{2,-}^*] \\ E_f + K &= |V_{2,+}/t_{2,+}^d|^2 |a_{1,d}|^2 + |V_{2,-}/t_{2,-}^d|^2 |a_{2,d}|^2 + (1/|a_{1,d}|^2)(t_{2,+}^f t_{2,+}^d/|V_{2,+}|^2) + (1/|a_{2,d}|^2)(t_{2,-}^f t_{2,-}^d/|V_{2,-}|^2) \\ K &= |a_{1,d}|^2 + |a_{2,d}|^2 + (t_{2,+}^d)^2/|a_{1,d}|^2 + (t_{2,-}^d)^2/|a_{2,d}|^2, \end{aligned} \quad (34)$$

Mindezek után 2 ismeretlen paraméter marad, éspedig $a_{1,d}, a_{2,d}$. Ezek meghatározására 6 egyenlet marad, éspedig $(X = a_{1,d}/a_{2,d}, Y = a_{2,d}^* a_{1,d})$:

$$\begin{aligned} 1. \quad t_{1,y}^d &= X t_{2,-}^d + (1/X) t_{2,+}^d, \\ 2. \quad t_{1,x}^d &= Y + (1/Y) t_{2,+}^d t_{2,-}^d, \\ 3. \quad t_{1,y}^f &= X(V_{2,+}/V_{2,-})(t_{2,-}^f t_{2,-}^d/t_{2,+}^d) + (1/X)(V_{2,-}/V_{2,+})(t_{2,+}^f t_{2,+}^d/t_{2,-}^d), \\ 4. \quad t_{1,x}^f &= Y(V_{2,+} V_{2,-}^*)/(t_{2,+}^d t_{2,-}^d) + (1/Y)(t_{2,+}^d t_{2,-}^d)(t_{2,+}^f t_{2,-}^f)/(V_{2,+} V_{2,-}^*), \\ 5. \quad V_{1,y}^* &= X(t_{2,-}^f t_{2,-}^d)/V_{2,-} + (1/X)(t_{2,+}^f t_{2,+}^d)/V_{2,+}, \\ 6. \quad V_{1,x} &= Y(V_{2,+}/t_{2,+}^d) + (1/Y)(t_{2,+}^d t_{2,-}^d - t_{2,-}^f)/V_{2,-}^*. \end{aligned} \quad (35)$$

Ettől a ponttól kezdve az eljárás a következő: Választunk (35)-ből egy tetszőleges X és egy tetszőleges Y egyenletpárt (ezt 9 féle képpen lehet megtenni). Az így kapott két ismeretlen egyenletrendszer megoldjuk, majd $X = a_{1,d}/a_{2,d}$ és $Y = a_{2,d}^* a_{1,d}$ ismeretében meghatározzuk a két ismeretlen blokk operátor paramétert, azaz

$$a_{1,d} = \sqrt{XY^*} e^{i\phi_1}, \quad a_{2,d} = (\sqrt{XY^*}/|X|) e^{i\phi_2} \quad (36)$$

ahol XY^* valós és pozitív, továbbá a ϕ_1, ϕ_2 fázisok tetszőlegesek. Mindezek után (36) behelyettesítve a (35) megmaradt 4 egyenletébe, 4 kondíciót ad, amelyet a paramétereknek

teljesítenie kell. Ezen 4 kondícióval, az (E_f, V_0) síkban lefedett tartományt, (36)-on keresztül, (34) határozza meg.

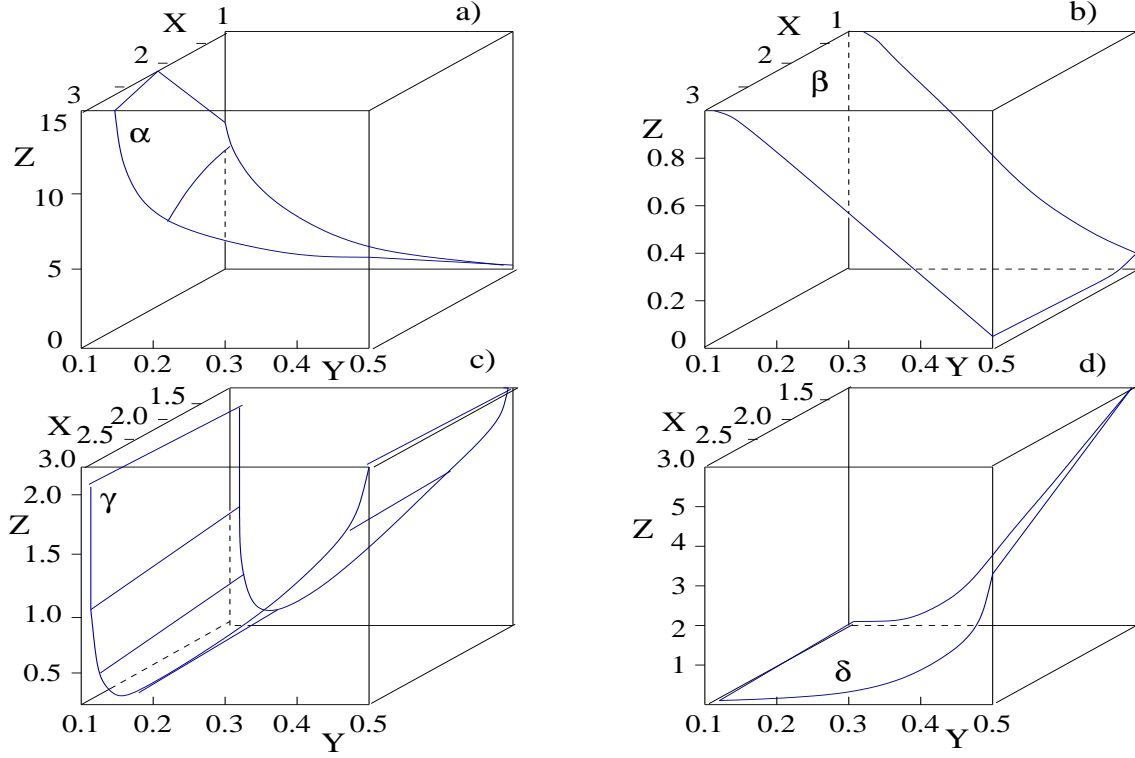


FIG. 13. A (37-38)-as megoldáspárhoz tartozó paramétertérész ($\alpha, \beta, \gamma, \delta$ felületek) példázata a $t_{1,x}^d$ egységeken adott $V_{2,+} = 0.05, V_{2,-} = 0.025, t_{2,+}^f = 0.15, t_{2,-}^f = 0.125, t_{2,-}^d = 0.25$ paraméterekre. Minden rajzon $X = t_{1,y}^d/t_{1,x}^d, Y = t_{2,+}^d/t_{1,x}^d$. A Z kifejezése a következő: a) $Z = E_f/t_{1,x}^d$, b) $Z = V_0/E_f$, c) $Z = t_{1,x}^f/t_{1,x}^d$, d) $Z = t_{1,x}^f/t_{1,y}^d$.

Megfigyelhető azonban, hogy a (36)-ot adó 2 egyenletből álló egyenletrendszer (úgy mint (30-32) esetében), 4-6 megoldást ad (ha külső mágneses térrel előidézett Peierls fázisfaktorok jelen vannak, vagy ha ennek hiányában minden hoppingot valós értékre tudunk beállítani, akkor a megoldások száma 6). Tehát $9 \cdot 6 = 54$ (vagy minimum $9 \cdot 4 = 36$) megoldásunk van összesen, és mindegyikhez külön-külön tartozik 4 paraméterek közötti egyenlőség, és egy tartomány az (E_f, V_0) síkban.

A 4 darab paraméterek közötti egyenlőségekbe összesen 12 paraméter lép be és pedig $t_{1,x}^d, t_{1,y}^d, t_{2,+}^d, t_{2,-}^d, t_{1,x}^f, t_{1,y}^f, t_{2,+}^f, t_{2,-}^f, V_{1,x}, V_{1,y}, V_{2,+}, V_{2,-}$. Ezek közül 4 paraméter lesz a többi függvénye, és mindez legalább 36 variánsban.

Egy példát szeretnék ezzel kapcsolatban is bemutatni. A két egyenletből álló egyenlet-

rendszernek ami az $X = a_{1,d}/a_{2,d}, Y = a_{2,d}^* a_{1,d}$ paramétereket meghatározza, válaszuk ki (35) két első egyenletét, és a lehetséges megoldások közül válasszunk ki egyet. Legyen ez

$$X = [1/(2t_{2,-}^d)](t_{1,y}^d + \sqrt{(t_{1,y}^d)^2 - 4t_{2,-}^d t_{2,+}^d}), Y = (1/2)(t_{1,x}^d + \sqrt{(t_{1,x}^d)^2 - 4t_{2,-}^d t_{2,+}^d}),$$

$$(t_{1,x}^d)^2, (t_{1,y}^d)^2 > 4t_{2,-}^d t_{2,+}^d. \quad (37)$$

Ekkor (36)-ból

$$a_{1,d} = [1/(2\sqrt{t_{2,-}^d})][(t_{1,y}^d + \sqrt{(t_{1,y}^d)^2 - 4t_{2,-}^d t_{2,+}^d})(t_{1,x}^d + \sqrt{(t_{1,x}^d)^2 - 4t_{2,-}^d t_{2,+}^d})]^{1/2} e^{i\phi_1},$$

$$a_{2,d} = [1/(2\sqrt{t_{2,-}^d})][(t_{1,y}^d + \sqrt{(t_{1,y}^d)^2 - 4t_{2,-}^d t_{2,+}^d})(t_{1,x}^d + \sqrt{(t_{1,x}^d)^2 - 4t_{2,-}^d t_{2,+}^d})]^{1/2} \{ [1/(2t_{2,-}^d)] \cdot$$

$$\cdot (t_{1,y}^d + \sqrt{(t_{1,y}^d)^2 - 4t_{2,-}^d t_{2,+}^d}) \} e^{i\phi_2}, \quad (38)$$

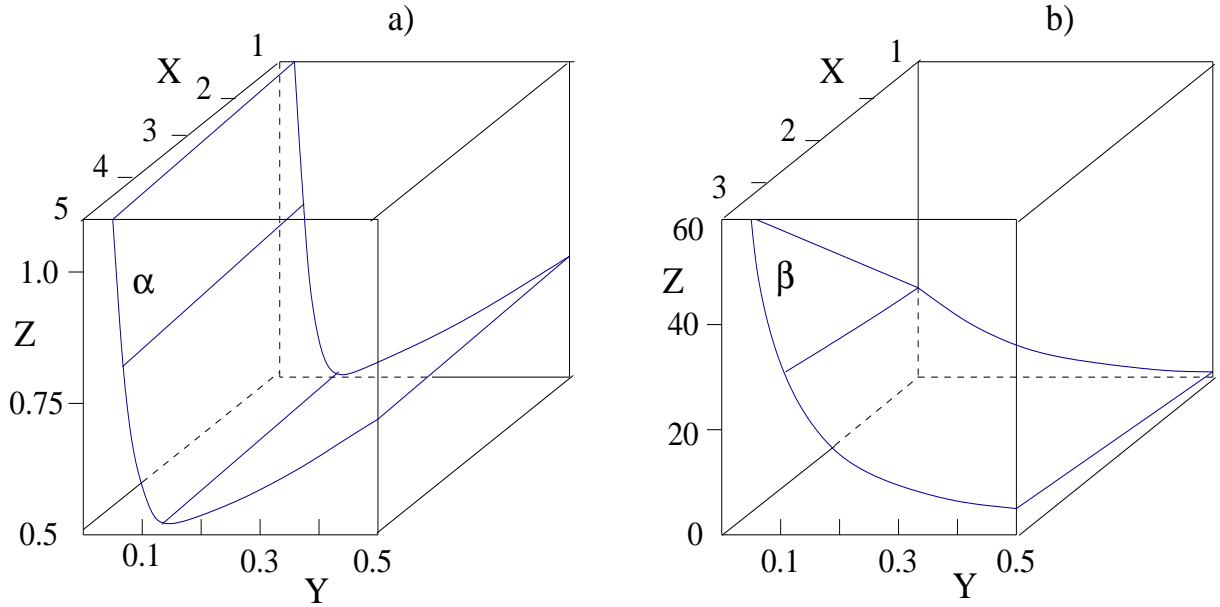


FIG. 14. A (37-38)-as megoldáspárhoz tartozó hibridizációs paraméterterréz (α, β felületek) példázata a $t_{1,x}^d$ egységekben adott $V_{2,+} = 0.05, V_{2,-} = 0.025, t_{2,+}^f = 0.15, t_{2,-}^f = 0.125, t_{2,-}^d = 0.25$ értékre. Minden rajzon $X = t_{1,y}^d/t_{1,x}^d, Y = t_{2,+}^d/t_{1,x}^d$. A Z kifejezése a következő: a) $Z = V_{1,x}/t_{1,x}^d$, b) $Z = V_{1,y}/V_{1,x}$.

A (37) behelyettesítve a (35)-nek 3.,4.,5.,6. egyenleteibe, megadják $t_{1,y}^f, t_{1,x}^f, V_{1,y}, V_{1,x}$ paramétereket. Ez után (38) behelyettesítve (34)-be megadja E_f, V_0 paramétereket, és $t_{1,x}^d, t_{1,y}^d, t_{2,+}^d, t_{2,-}^d, t_{2,+}^f, t_{2,-}^f, V_{2,+}, V_{2,-}$, azaz 8 paraméter tetszőleges marad (azzal a feltétellel, hogy nem zéró, nem végtelen, blokk operátor paramétereket nem nulláz le, továbbá (37) második sorában lévő kondíció teljesül). Grafikusan az eredményeket a 13-14-es ábrák példázzak. A rajzoknál használt rögzített paraméterek értékeinek változtatása a felületek formáján is változtat. Ennek ellenére, ha figyelembe vesszük, hogy a 13-14-es ábrák

“felületcsomagjaiból” minimum 36 van, látható, hogy a fedési egyenletek megoldásainak tartományai a teljes paraméterteret hálózatként átszövik [lásd c) Esetet is alább].

c) Eset: Ha az a) eset követelménye miszerint $a_{n,d}/a_{n,f} = p$ (ahol p valós) nem teljesül, másképp is megvalósítható, éspedig $|a_{n,d}|/|a_{n,f}| = |p|$ formában, ahol p komplex. Ez a megoldás sem szigetelő, tehát az itt tárgyalt itineráns esetek sorába tartozik. Erről az esetről viszont, ismétlések elkerülése végett, a csík fázisok jellemzésének 2) pontjában írok majd alább.

Négyzetre épített blokk operátorok: Csík fázisok:

A homogén fázisok a koncentráció csökkentésével rendezetlen klaszter fázisokra bomlanak, majd az ezekben megjelenő csík fázisokat extra Hamilton operátor tagok stabilizálják. Ezekből a disszertáció kettőt mutat be: \hat{H}_A és \hat{H}_B , amelyek az 1. kérdés első részére adott válasz III.iv pontjában ismertette voltak. Ezeknek esetében nem a csatolási állandó nagysága számít, tehát ha a paramétertérben szeretnénk őket elhelyezni, saját csatolásaik tengelyei mentén bárhova helyezhetnénk őket. Ezen tagok esetében a geometriai formájuk számít, amint az már említve volt.

Szemléltetem ez esetben alább a disszertációban bemutatott példákat:

1) Vegyük a \hat{H}_A esetét (Válaszok: 12-ik oldal, disszertáció 159-ik oldal), amely a disszertáció 160-ik oldalán lévő 33. ábrában feltüntetett paramétertartományban valósítja meg a disszertáció 157-es oldalán a 30.a ábrában bemutatott csík fázist, amely $R = I$ megoldásként az $N_\Lambda = L \times L$ rácsban $N < N_p^c = N_\Lambda - 2L$ részecskeszámra lép fel.

Ezt a stripot a (Válaszok) (29)-es fedési egyenletei adják a) Esetben (azaz szigetelőre), mely a Válaszok 32-ik oldalától kezdődőleg van jellemezve. Az $a_{n,d}/a_{n,f} = p = p^*$ kondíció miatt, a (29)-es fedési egyenletek két csoportra szakíthatók:

Egyrészt van a $t_{\mathbf{r}}^d$ -re, (\mathbf{r} itt $\mathbf{a}_x, \mathbf{a}_y, \mathbf{a}_y \pm \mathbf{a}_x$ lehet) felírt 4 egyenlet

$$\begin{aligned} t_{1,y}^d &= a_{1,d}^* a_{4,d} + a_{2,d}^* a_{3,d}, & t_{1,x}^d &= a_{2,d}^* a_{1,d} + a_{3,d}^* a_{4,d}, \\ t_{2,y+x}^d &= a_{3,d}^* a_{1,d}, & t_{2,y-x}^d &= a_{4,d}^* a_{2,d}, \end{aligned} \quad (39)$$

amely (29) első sora. Ezek az egyenletek adják a (31)-ben az X,Y megoldásokat, melyeken keresztül a (30)-ban szereplő K kifejezhető.

Másrészt, a (29) megmaradt 10 egyenlete a következő formára hozható:

$$\begin{aligned} t_{\mathbf{r}}^f / t_{\mathbf{r}}^d &= 1/p^2 = t, & t &> 0, \\ |V_{\mathbf{r}} / t_{\mathbf{r}}^d| &= 1/p = \sqrt{t}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
|V_0| &= (1/p)K, \\
E_f &= [(1 - p^2)/p^2]K.
\end{aligned} \tag{40}$$

Minden ami (39)-ben van, a K kifejezésébe kerül bele. Viszont K , a (40) két utolsó egyenlőségének arányából kiejthető

$$E_f/|V_0| = (1 - p^2)/p = \sqrt{t} - 1/\sqrt{t}. \tag{41}$$

Mivel p a (40) második sorában $p = \sqrt{t} > 0$ -ként reprezentált, kerül abszolút értékbe (40) második és harmadik sorának baloldala. Ezek szerint a teljes paraméterter ahol ez a stripe megoldás él (beleértve a (10)-es kondíciót is)

$$t_{\mathbf{r}}^f/t_{\mathbf{r}}^d = t, t > 0, |V_{\mathbf{r}}/t_{\mathbf{r}}^d| = \sqrt{t}, E_f/|V_0| = \sqrt{t} - 1/\sqrt{t}, \tag{42}$$

formában megadható, amely a disszertáció 160-ik oldalán, a 33. ábrában le van rajzolva. Mivel $1/p^2 = t$ -ből $1/p = -\sqrt{t}$ -is következik, ez azt jelenti, hogy $V_{\mathbf{r}}/t_{\mathbf{r}}^d$ illetve V_0 előjelére külön resztrikció nincs. Ekkor $V_{\mathbf{r}}/t_{\mathbf{r}}^d = -\sqrt{t}$, $V_0 = -(1/\sqrt{t})K$, mindig $K > 0$, azaz ez esetben $|V_{\mathbf{r}}/t_{\mathbf{r}}^d| = \sqrt{t}$, $|V_0| = (1/\sqrt{t})K$, és (42) továbbra is igaz marad.

Az egyedüli kikötés azonban amit (42)-vel kapcsolatban tenni kell, az az a tény, hogy (31)-ben X, Y valós megoldásokként vannak kezelve itt (mert az összes hopping most valós). De ennek a feltétele $(t_{1,x}^d)^2, (t_{1,y}^d)^2 > 4t_{2,y+x}^d t_{2,y-x}^d$. Ez az összefüggés be van azonban írva a disszertáció 33. ábrájának az ábraszövegébe.

2) A \hat{H}_B esetében a disszertáció 157-ik oldalán lévő 30.b ábrán bemutatott $R = II$ megoldáshoz tartozó itineráns csík fázis vonal stabilizálódik $N < N_p^c$ részecskeszámra a 160-ik oldal 34. ábrájának feltételei szerint. A hatás a Válaszok 12. oldalán bemutatott általános \hat{H}_B -re is jelen van, de a konkrétan bemutatott eredmény $e_{i,f} = 0, e_{1,d} = -e_{2,d} > 0$, ($e_{1,d}$ nagysága tetszőleges) paraméterekre él $t_{2,+}^d = t_{2,-}^d$ szituációban. Ebben az esetben, a fedési egyenletekre a Válaszok 38-ik oldalán említett c) eset megoldása érvényesül, amely szintén a 32-ik oldalon szereplő (29)-es egyenlethez tartozik, azzal a megjegyzéssel, hogy mivel ez esetben komplex hibridizáció is előfordul, a $V_{\mathbf{r}} = V_{\mathbf{r}}^{d,f} = V_{\mathbf{r}}^{f,d}$ összefüggést szigorúan ellenőrizni kell (pl. $V_{1,x}^{d,f} = a_{2,d}^* a_{1,f} + a_{3,d}^* a_{4,f}, V_{1,x}^{f,d} = a_{2,f}^* a_{1,d} + a_{3,f}^* a_{4,d}$), mert a (448) induló Hamilton operátorban ez explicit fel van használva. Az ez alkalommal levezetett fedési egyenlet megoldás

$$a_{1,f} = (1/p)a_{1,d}, a_{2,f} = (1/p)a_{2,d}, a_{3,f} = (1/p^*)a_{3,d}, a_{4,f} = (1/p^*)a_{4,d}$$

típusú, aminek következtében $V_0 = V_{1,x} = 0$ adódik. Az előbbi 1) esettel ellentétben most $|t_{\mathbf{r}}^f/t_{\mathbf{r}}^d| = |t|$ összefüggés értelmezi a t változót, és $\mathbf{r} = \mathbf{a}_y, \mathbf{a}_y \pm \mathbf{a}_x$ -re a (42) második összefüggése most

$$|V_{\mathbf{r}}/t_{\mathbf{r}}^d| = \sqrt{|t|} \quad (43)$$

formában érvényesül. Az induló paraméterek száma (mivel a másodsomszéd tagok $t_{2,+}^d = t_{2,-}^d = t_2^d$, $t_{2,+}^f = t_{2,-}^f = t_2^f$, $V_{2,+} = V_{2,-} = V_2$ formában vannak figyelembe véve), az $U > 0$ kivételével, amely végig nemzéró de tetszőleges értéken tartott: 9, és pedig $t_{1,x}^d, t_{1,y}^d, t_2^d, t_{1,x}^f, t_{1,y}^f, t_2^f, V_{1,y}, V_2, E_f$. A t_1^d -el normálva 8 paraméter marad, amelyből 4 szerepel a 34-es ábrán, 4 pedig (43)-ban. A homogén fázis a disszertáció 160. oldalán lévő 34-es ábra felületén található, miközben (43)-nak szintén érvényesülnie kell. A \hat{H}_B megjelentével (mivel pl. a stripe vonal mentén E_f az $|e_{1,d}|^2$ értékkel megnő) a 34-es ábra felülete feletti paraméter térrész tartalmazza a megoldásokat.

A XIV-ik fejezetben bemutatott eredmények fontossága abban rejlik, hogy mutatták: 2D és $N < N_{\Lambda}$ esetben a rendezetlen klaszter degenerált állapotban, a koncentráció csökkentésével megjelenhet aránylag könnyen csík szerkezet, de hogy ez nem elfajult alapállapottá fejlődjön, oda nagyon speciális körülmények kellenek, amelyek megteremtésére pl. a periodikus Anderson modell, mint egy klasszikus kétsávós modell, nem elég.

Megjegyzés az első kérdés második felére adott válaszok végén:

Az első kérdés második felére adott válaszok végén egy megjegyzést szeretnék tenni: Nem szabad szem elől téveszteni azt a tényt, hogy nem integrálható sokrészesekes rendszerek egzakt megoldásairól van szó. Itt az a tény ami integrálható rendszereknél tapasztalható volt, miszerint egyetlen matematikai formalizmusban a teljes paraméterteret ahol az integrálhatóság fennáll le tudom írni, megszűnt létezni. A nem integrálható rendszerek esetében csupán a paraméterter szeleteire lehet pontos eredményeket levezetni, és ha kiterjedtebb paramétertartomány érdekel, több szeletre kell megtegyem ugyanezt.

Azt szeretném még elmondani, hogy e részben bemutatott rajzok mind Mathematica programmal voltak futtatva és kirajzolva. Az eredeti rajzok bírtokomban vannak. De a Mathematica által szolgáltatott ps állomány, majd ennek eps-re alakított formája többször rajzonként 3.9 MB állományt eredményezett, nekem meg max. 8 MB nagyságú elektronikus levelet volt lehetőségem egyben küldeni. Ezért majdnem minden rajzot kézzel lemásolva helyeztem el e válaszokat tartalmazó anyagba.

2. Kérdés:

A 188. lapon a 48. Ábrán véges 12 x 12 rácson lettek a korrelációk kiszámolva. Mi ennek

az oka ? Az alapállapotú egzakt megoldás érvényes-e véges és végtelen rácson is ?

Válasz:

A XVII-ik fejezet (512,513) megoldása tetszőleges nagyságú rácra igaz, még végtelen nagyságú rácson is (mindkét irányba periodikus határfeltételekkel). A megoldásban szereplő operátor az (507)-es kifejezésben tetszőleges nagyságú rácra van megadva az (508)-ban található numerikus koefficienseivel együtt.

A korrelációs függvényt viszont numerikusan kellett kiszámolni a levezetett hullámfüggvényből, és numerikus lehetőségeim határozták meg a 12 x 12-es rácsot. Csak azt említtem itt még meg, hogy 2 különböző 1/2 spinnel rendelkező fermion per csomópont esetben, mikor 16 lehetséges állapot van csomópontonként, a 12 x 12 -es 2D kvantum rendszer, melynek a Hilbert tere $2.4 \cdot 10^{173}$ dimenziós, nem kicsi.

3. Kérdés:

A XIII. fejezetben felsorolt eredmények esetén a rendezetlenség konkrét alakja, erőssége befolyásolja-e az átalakulás jellegét ? Egyáltalán milyen típusú átalakulás várható ?

Válasz a kérdés első részére:

Ha a XIII-ik fejezet (435) fedési egyenleteiben, a különböző i csomópontokhoz kötött ϵ_i változók, a többi $\epsilon_{j \neq i}$ változótól független és tetszőleges pozitív számok, akkor következnek a tetszőleges $U_i > 0$ esetében a (444) [azaz ($N = N_\Lambda$)] és (445) [azaz ($N < N_\Lambda$)] alapállapotú megoldások. Amíg (444) és (445) összefüggések adják az alapállapotokat, az átalakulás jellege ugyanaz marad.

Namost ha megnézzük mit jelentenek fizikailag az itt felsorolt kondíciók, akkor az látszik, hogy mindez a rendszerben létező nagyfokú rendezetlenségre lesz igaz. Mindez azért van így, mert: i) Egyrészt, ha a fedési egyenletek jobb oldalán minden $\epsilon_i = konstans$, (435) nem ad megoldást mert bal oldala rendezetlen, és minél rendezetlenebb, annál jobban térnek el a lokális ϵ_i értékek közvetlen szomszédjaik értékétől. A $t_{i,i+r,r,\sigma}^{p,p'}$ tagok rendezetlenségét a rendszerbe bevitt szennyező atomok száma (koncentrációja) határozza meg, ami viszont a rendezetlenség mértékét jelenti. Továbbá: ii) A rendezetlen $U_i > 0$ értékeket szintén a rendszerbe bevitt szennyeződések okozzák, és ez esetben sem léteznek lokális korrelációk az U_i értékek között.

Ha viszont csökkentjük a rendezetlenséget, lokálisan kialakulnak olyan tartományok ahol az ϵ_i tagok szomszédjaik értékeivel egyeznek, és ekkor beolvaszthatók az $a_{n,d}$ koefficiensekbe,

vagy lokálisan az U_i értékek akár zéróra homogenizálódhatnak. Ekkor (444) és (445) kifejezések nem képeznek alapállapotot többé. Ilyen körülmények között az átalakulás jellege, vagy az átalakulás maga változhat. De ez az eset nem volt részletesen tanulmányozva, így a disszertációba sem került bele.

Válasz a kérdés második részére:

Most az átalakulás típusára vonatkozólag (tehát hogy milyen típusú átalakulás várható), még ma sincs teljesen elfogadott vélemény erről. Magát a tranzíciót mint kvantum fázisátalakulást kezelik mert csak itt lehet éles különbséget tenni $\sigma = 0$ és $\sigma \neq 0$ szigetelő és vezető állapotok között, ahol σ a fajlagos vezetőképesség. Továbbá $T > 0$ esetében a korrelációs hossz nem divergál [D. Popovic, arXiv:1603.06525, egy Kravchenko által szerkesztett megjelenőfélben lévő könyv anyagából]. A $T = 0$ tranzíció kritikus tartományban szerepel a paramétertérben, azaz olyan tartományban amelyben divergáló korrelációs hossz lehet értelmezni ($\xi \sim |\delta|^{-\nu}$, ahol δ a kontrolparaméter adimenziós értéke amely a rendszert a tranzícióhoz tolja, ν a korrelációs hossz (ξ) kritikus exponense), de szimmetriasérülés nincs (habár vannak akik szimmetriasérülést is asszociálnak a tranzícióhoz pl. spinrotációs sérülést [V. M. Pudalov, Physics Uspekhi 41,211 (1998)]). Ennek megfelelően [180], skálázhatóság, kritikus exponensek, rájuk vonatkozó skálatörvények, univerzalitási osztályok [P. V. Lin, et al. Phys. Rev. Lett. 114,166401(2015)] léteznek, de Landau értelemben vett rendparaméter, legalábbis a mai felfogás szerint, nem [E. Abrahams, 50 years of Anderson Localization, World Scientific, 2010, 49. oldal]. Ennek alapján nehéz fázisátalakulás rendről vagy jellegről egyértelműen beszélni itt, inkább azt lehet mondani, hogy a matematikai leírás, valamennyire “hasonlít” a folytonos fázisátalakuláséhoz. A $T = 0$ kvantumfázisátalakulás szerinti leírás elmélete itt logaritmikus korrekciókat eredményez a kritikus viselkedésben, de ezeket kísérletileg, nem tapasztalják [S. D. Sarma, et al. Phys. Rev. B90, 125410 (2014)].

De mindez nem egyöntetűen elfogadott álláspont. Vannak akik Kosterlitz-Thouless féle átalakulásnak gondolják, vannak akik effektív tömeg divergenciáként (Brinkman-Rice tranzíció) fogják fel [D. J. Scalapino et al. Phys. Rev. B47,7995(1993)], vannak akik a kritikus tartomány multifraktális jellegét emelik ki [E. Abrahams, 50 years of Anderson Localization, World Scientific, 2010, 108. oldal], sőt még “crossover”-ként is kezelik $T > 0$ esetben [S. D. Sarma, et al. Phys. Rev. B90, 125410 (2014)].

4. Kérdés:

A XIII. fejezetben ír arról, hogy Griffiths-féle fázis fellépése valószínűtlen. Előfordul-e bizonyos minták esetén, hogy a rendszer lokálisan a nem-domonás fázisban tartozkodik ?

Válasz:

Értelmezésem szerint ez a kérdés kísérleti mintákkal kapcsolatos. Erre vonatkozó választ bizonyosan, a kísérletezők pontosan (vagy legalábbis pontosabban) meg tudnák adni. Én ezzel kapcsolatban csak azt tudom, amit esetleg kísérletezők elmondtak. Így, tudok arról, hogy vannak olyan minták amelyeket “nem ideálisaknak” neveznek. Ezek egy összefoglaló cikkben is [T. Ando, et al. Rev. Mod. Phys. 54, 437 (1982), 520-ik oldal] említésre kerültek. Azért nevezték ezen mintákat így, mert nem támasztották alá a megjelenésük pillanatában elfogadott viselkedést. Az ezen mintákra vonatkozó leírásokból van olyan, amelyet úgy lehet értelmezni, hogy lokális tartományokon a rendszer másképp viselkedik, mint ahogy azt elvárják, de ezen “kérdéses” mintákat átlagban, nagy részletességgel nem tanulmányozták (bizonyosan azért is, mert nehéz volt publikálni ilyen mintákkal a területen). De az is ismert, hogy ilyen “nem ideális” mintákból kiindulva új jelenségeket fedeztek fel (a Kravchenko cikk publikálása után [183]), pl. a 2D rendezetlen rendszerekben $T \rightarrow 0$ esetben bizonyos fémes fázisban a fajlagos vezetőképesség konstans értéken marad és $d\sigma/dT > 0$ viselkedést mutat [X. G. Feng, et al. Phys. Rev. Lett. 86, 2625 (2001)] az elvárt $d\sigma/dT < 0$ helyett.

5. Kérdés:

Az [5] referenciában elért eredmények hogyan hozhatók kapcsolatba a sok-test lokalizáció (many-body localization) újabb vizsgálataival ?

Válasz:

Hadd kezdjem a választ azzal, hogy azon cikkeket amelyeket ténylegesen értékeseknek tartottam, mindig elküldtem a terület egyik kimagasló személyiségéhez. Így pl. a 3D PAM-hoz kapcsolódó egzakt megoldásokat D. C. Mattishoz küldtem el, [így két Mattis könyvbe is idézetként bekerültek (lásd MTMT adatbázis)]. Az [5] Phys. Rev. B-cikket David Huse-hoz küldtem el, aki a Princetoni Egyetemen foglalkozik rendezetlen rendszerekkel. Huse válaszában két dolgot emelt ki:

I.) Azt mondta, hogy a bevezető “kellemetlenül erős” (lehet nem pont ezeket a szavakat használta, de az értelem hasonló volt). Aki ezt a cikket olvasta, az talán megérti hogy miről is van itt szó, ugyanis a bevezetőben nagyon támadtam azokat akik valós rend-

szereket perturbatíván írják le úgy, hogy egy elektron közelítésben vannak kölcsönhatás figyelembevétele nélkül. Ezt azért tettem, mert én, az én eredményeimből azt láttam, hogy kölcsönhatás nélküli egy elektron eredményekről semmi nem biztosítja azt, hogy infinitezimális kölcsönhatás bevezetésével ezek életben maradjanak. Azaz, nem sok hívet szereztem magamnak.

II.) Azt mondta, hogy amit én számoltam, azt nem tudja használni, mert őt, az energia kifejezésének a struktúrája érdekli. Most én, a matematikai számítás megkönnyítése érdekében az energiaskála origóját az alapállapot energiára állítottam be, így nálam az alapállapot energiája struktúrája nem látszik.

Most az előbbi I. és II. pontokkal érthetően le tudom írni, hogy ma mit jelent a “many-body localization” és az hogyan viszonyul az [5]-ös cikkemhez.

Az ember azt várná, hogy a “many-body localization” valóságos rendezetlen próbatestekről szól, amelyek tehát many-body rendszerek, ha már valóságosak, akkor ott kölcsönhatás is van, és mivel valóságosak, egyben mérhetőek is. Nos a helyzet (általánosan nézve) teljesen más. Először is, hogy az I. pontban említett kérdések ne merülhessenek fel (ezeket sokan mások is látják nemcsak én [pl. összefoglaló Rev. Mod. Phys. cikkekben pl. Rev. Mod. Phys. 57,287(1985); 66, 014501 (2001)]), modellszinten teljesen külön választották a many-body lokalizációt az 1 elektron kölcsönhatásmentes lokalizációtól. Ugyanis a many-body lokalizációt teljesen zárt kvantummechanikai rendszerre vizsgálják, amelyhez még egy mérőműszert se tudok hozzáéríteni, mert akkor megzavarom a rendszert. Ezért mérési adat is nagyon kevés van (rosszakaratúan azt mondhatnám kvázi hiányzik, optikai rácsban próbálják megközelíteni ezt a témakört a kísérletezők), csak szimulációs eredmények vannak inkább. Az ok másik oldala az, hogy kvantumszámítógépek irányába tolták a területet, ahol a rendszer szintén teljesen elszigetelt a környezetétől (és persze ezen oldal hangoztatása a kutatási támogatás könnyebb elérését is megkönnyíti). Az [5]-ben (és a many-body lokalizáció előtti cikkek többségében) a rendszer kanonikus sokaság, a mai many-body lokalizációban pedig nem az.

Továbbmenőleg, ha a kvantummechanikai rendszer teljesen zárt, a lokalizáció ha létrejön, minden sajátvektorban vett lokalizációt jelent általában, és ezáltal többé nem az alapállapotot vizsgálják, mint ahogy azt én [5]-ben tettem, hanem az egész energiaspektrumhoz tartozó lokális energiasztruktúrát (lásd a II. aspektust) elemzik. Teszik ezt azért mert ha ilyenszerű lokalizáció van (és teljesen hiányzik a mozgás), a kezdeti állapot lokálisan is a

rendszer memóriájában megmarad. Ezt pedig, mivel a kvantumszámítógépekhez közelálló területen vagyunk mostmár, információtárolásként próbálják kezelni. Azaz, legtöbbször, kvantumszámítógép memória keresés formájában van feltüntetve a kutatás.

Kétségtelen, hogy az így kialakított many-body lokalizáció terület nagyon érdekes. Ebben a bírálati kérdésekre válaszokat adó anyagban részletesen a many-body lokalizációról nem írhatok többet. Csak megemlítem, hogy itt nincs termalizáció úgy ahogy azt a klasszikus statisztikus fizika érti, sajátállapot termalizációs hipotézis van, egy sajátállapot statisztikus mechanika van, a lokalizált rendszer fő jellemzője nem a DC vezetőképesség zéró értéke, [érdeklődők számára ajánlom pl. a arXiv:1404.0686, R. Nandkishore, D. A. Huse, Annual Rev. of Cond. Mat. Phys. 6, 15 (2015), anyagot], stb. De ez a terület mostmár nem az ami az én [5] cikkem megírásakor volt, mikor a kérdés ahhoz kapcsolódott, hogy egy valóságos rendezetlen, kézben megfogható rendszert mérek, és az eredményt próbálom megérteni.

Shenyang, 2016 május 7

Dr. Gulácsi Zsolt