

dc_890_14

**KORRELÁLT SOKRÉSZECSKÉS RENDSZEREK RENDEZETTSÉGRE VALÓ
TÖREKVÉSÉNEK LEÍRÁSA.**

Dr. Gulácsi Zsolt

Debreceni Egyetem
Elméleti Fizikai Tanszék

AKADÉMIAI DOKTORI ÉRTEKEZÉS

Debrecen, 2014.

TARTALOMJEGYZÉK

BEVEZETŐ RÉSZ	1
I. Bevezetés	1
I.A. Előszó	1
I.B. A tartalomról	1
I.B.1. A használt rendeződési fogalom	1
I.B.2. A fejezetek központi rendeződési formái	2
I.B.3. A bemutatás vonala	2
I.B.4. A sokszínűség jelenléte és az eredmények egymásutánisága	3
I.B.4.I. A közelítéseket alkalmazó fejezetek esete	3
I.B.4.II. A közelítéseket nem alkalmazó fejezetek esete	4
I.C. A saját eredményekről	5
I.C.1. A saját eredmények és elhelyezésük a bemutatott anyagban	5
I.C.2. A saját eredményeket tükröző publikációkról	5
I.D. A további bemutatásra kerülő anyag szerkezete	7
ELŐZMÉNYEK BEMUTATÁSA	8
II. Előzmények	8
II.A. Közelítéssel levezetett eredmények előzményei	8
II.A.1. Anizotrópikus spin-sűrűség hullámok	8
II.A.2. Síkok közötti csatolás hatása réteges felépítésű szupravezetőkre	9
II.A.3. Spin-sűrűség hullám és szupravezető koegzisztencia	10
II.A.4. Spin-sűrűség hullám a periodikus Anderson modellben	11
II.A.5. Gutzwiller hullámfüggvénnyel jellemzett kétdimenziós Hubbard modell	13
II.B. Közelítésmentesen levezetett eredmények előzményei	14

II.B.1. Egzakt filiform klaszterképződés	14
II.B.2. Egzakt alapállapotok a háromdimenziós periodikus Anderson modellben	15
II.B.2.a. A módszerre vonatkozó előzmények	15
II.B.2.b. Az eredményekre vonatkozó előzmények	16
II.B.3. Lokalizáció-delokalizációs átmenet rendezetlen kölcsönható és kétdimenziós rendszerekben	18
II.B.4. Sakktábla és stripe állapotok két dimenzióban	19
II.B.5. Négyzetes Hubbard láncok alapállapotai	20
II.B.6. Pentagon Hubbard láncok alapállapotai	21
II.B.7. Lokális Coulomb taszítás okozta delokalizáció	22
A MÓDSZEREK ISMERTETÉSE	23
III. Az alkalmazott módszerekről	23
IV. Közelítéssel nyert eredmények levezetésénél alkalmazott módszerek	23
IV.A. A Green-függvényes módszer	23
IV.A.1. Bevezető	23
IV.A.2. A fizikai Green-függvény	23
IV.A.3. Átlagértékek kifejezése a Green-függvény segítségével	25
IV.A.4. Az energetikai stabilitás vizsgálata	26
IV.A.4.a. A $T = 0$ eset	26
IV.A.4.b. A $T \neq 0$ eset	26
IV.A.5. A fajhő és a szuszceptibilitás	27
IV.B. A Gutzwiller hullámfüggvénnyel számolt átlagértékek a Hubbard modellre	27
IV.B.1. Bevezető	27
IV.B.2. A kölcsönhatási tag átlagértéke	28
IV.B.3. A kinetikus energia tag átlagértéke	31

IV.C. A Gutzwiller hullámfüggvénnyel adott átlagértékek kiszámítása D	
dimenzióban	34
IV.C.1. Bevezetés	34
IV.C.2. A kölcsönhatási tag átlagértékébe tartozó diagramok	
kiszámítása D dimenzióban	35
IV.C.2.a. A T_1 tag kifejezése	36
IV.C.2.b. A G^D speciális függvény	41
IV.C.2.c. A T_2 tag kifejezése	44
IV.C.2.d. A tetszőleges T_j tag kifejezése	46
IV.C.2.e. Tetszőleges diagram értékének felírása D-dimenzióban	47
IV.C.2.f. A C_m tagok kifejezése $m = 7$ -ed rendig	49
IV.C.2.g. Megjegyzések	50
IV.C.3. A kinetikus energia tag átlagértékébe tartozó diagramértékek	
számolása D dimenzióban	51
IV.C.3.a. Az $f_{m,\sigma}(\mathbf{k})$ diagramjárulékok megszerkeztése	51
IV.C.3.b. Az $f_{m,\sigma}(\mathbf{k})$ diagramjárulékok kiszámolása	52
IV.C.3.c. Az $f_{m,\sigma}(\mathbf{k})$ tagok kiintegrálása	53
IV.C.3.d. Az $f_{m,\sigma}(\mathbf{k})$ tagok hatodrendig menő kifejezése	55
IV.C.3.e. Megjegyzések	55
IV.D. Variációs hullámfüggvény alkalmazása a periodikus Anderson	
modellre	56
IV.D.1. Bevezetés	56
IV.D.2. Periodikus Anderson modellben Gutzwiller projektált	
spin-sűrűség hullám esetére vett alkalmazás	57
IV.D.2.a. A variációs hullámfüggvény felírása	57
IV.D.2.b. A Hamilton operátor	58
IV.D.2.c. Az átlagértékek kiszámítása	59

IV.D.2.d. A variációs paraméterek meghatározása	60
IV.D.2.e. Az alapállapot energiája	61
IV.D.2.f. Különböző más várhatóértékek számolása	62
IV.D.2.g. A paramágneses állapot	62
V. Egzakt eredmények levezetésénél alkalmazott módszerek	63
V.A. Geometriai valószínűségekre alapozott egzakt eredmények	
levezetésében alkalmazott módszer	63
V.A.1. Bevezetés	63
V.A.1.a. Klaszterképződési modell	64
V.A.2. A bevezetett modellhez kapcsolódó valószínűségek levezetése	65
V.A.2.a. A kétkomponensű klaszter esete	65
V.A.2.b. A háromkomponensű klaszter esete	65
V.A.2.c. A négykomponensű klaszter esete	66
V.A.2.d. Az M-komponensű klaszter esete	66
V.A.3. Rigurózus valószínűségi tér jelenléte	68
V.A.3.a. A pozitív szemidefinit mivolt	68
V.A.3.b. A teljességi reláció	68
V.A.4. Az átlagos klaszterméret	70
V.A.5. Specifikus határesetek elemzése	71
V.A.6. A P_M valószínűségek kondenzált formája	71
V.A.7. A klaszter spin	72
V.A.7.a. Az $\bar{S}_2$ esete	74
V.A.7.b. Az $\bar{S}_3$ esete	75
V.A.7.c. Az $\bar{S}_4$ esete	76
V.A.7.d. Az $\bar{S}_M$, $M \geq 5$ esete	78
V.A.8. A mágneses szuszceptibilitás	78
V.A.9. A hőmérsékletfüggő klaszterképződési folyamat	79

V.A.9.a. Egy konkrét alkalmazás	79
V.A.10. Fizikai alkalmazhatóság	81
V.B. Kvantummechanikai sokrészecskés rendszerekre vonatkozó egzakt eredmények levezetésénél alkalmazott módszerek	81
V.B.1. Alapfogalmak és az eljárás alapgondolata	82
V.B.2. A Hamilton operátor pozitív szemidefinit formára vett átalakítása	83
V.B.2.A. Bevezetés	83
V.B.2.B. Az első (a) eset részletes elemzése	83
V.B.2.C. Egy szemléltető példa	84
V.B.2.D. A második (b) eset részletes elemzése	89
V.B.2.E. Kölcsönhatási tagok transzformálása	89
V.B.2.F. További megjegyzések	90
V.B.3. Az alapállapotok megkonstruálása	90
V.B.3.A. Bevezetés	90
V.B.3.B. Ha $\hat{P}_n = \hat{\Omega}_n^\dagger \hat{\Omega}_n$ típusú operátorok vannak jelen $\hat{H}$ -ban	91
V.B.3.C. Ha $\hat{P}_n = \hat{\Omega}_n \hat{\Omega}_n^\dagger$ típusú operátorok vannak jelen $\hat{H}$ -ban	93
V.B.3.D. Az alacsonyenergiájú gerjesztett állapotok	95
V.B.4. Az unicitás igazolásának lehetősége	95
V.B.4.A. A $\hat{P}_n = \hat{\Omega}_n^\dagger \hat{\Omega}_n$ esete	96
V.B.4.B. A $\hat{P}_n = \hat{\Omega}_n \hat{\Omega}_n^\dagger$ esete	97
V.B.5. A levezetett alapállapot fizikai tulajdonságainak elemzése	101
V.B.5.A. Vezető vagy szigetelő jelleg	101
V.B.5.B. Fermi vagy nem-Fermi folyadék jelleg vezető tulajdonság esetén	102
V.B.5.C. Ferromágneses tulajdonság vagy paramágneses jelleg	102
SAJÁT MODELL-EREDMÉNYEK: ELSŐ RÉSZ	

KÖZELÍTÉSEK NYOMÁN KAPOTT EREDMÉNYEK	103
VI. Anizotrópikus spin-sűrűség hullámok	103
VI.A. Körülmények	103
VI.B. A modell és eredmények	103
VI.C. Következmények	107
VI.D. További eredmények	108
VII. Réteges felépítésű szupravezetők kritikus hőmérsékletének növekedése a síkok közötti csatolás következtében	108
VII.A. Körülmények	108
VII.B. A modell és eredmények	109
VII.C. Következmények	111
VII.D. További eredmények	111
VIII. Szupravezető és spin-sűrűség hullám koegzisztencia	112
VIII.A. Körülmények	112
VIII.B. A modell eredmények	112
VIII.B.1. Nehézfermionos rendszerek esete	112
VIII.B.2. Kétsávós rendszerek esete	115
VIII.C. Következmények	119
VIII.D. További eredmények	120
IX. Spin-sűrűség hullám fázis a periodikus Anderson modellben	120
IX.A. Körülmények	120
IX.B. A modell és eredmények	121
IX.C. Következmények	124
IX.D. További eredmények	125
X. Kétdimenziós Hubbard modell Gutzwiller hullámfüggvénnyel jellemezve	125
X.A. Körülmények	125

X.B. A modell és eredmények	126
X.B.1. A kölcsönhatási tag	126
X.B.2. A kinetikus energia tag	129
X.B.3. Az alapállapot energiája	130
X.C. Következmények	131
SAJÁT MODELL-EREDMÉNYEK: MÁSODIK RÉSZ	
KÖZELÍTÉSMENTES EREDMÉNYEK	132
XI. Egzakt leírás fonalszerű klaszterek hőmérsékletfüggő növekedésére	132
XI.A. Körülmények	132
XI.B. Modell és eredmények	133
XI.B.1. A probléma modellszerű megfogalmazása	133
XI.B.2. A vizsgált klaszterizációs eset	134
XI.B.3. A megoldás	134
XI.C. Kísérleti következmények	136
XI.D. További eredmények	137
XII. Egzakt alapállapotok a háromdimenziós periodikus Anderson modellre	137
XII.A. Körülmények	137
XII.B. A modell és eredmények	138
XII.B.1. Alapállapotok $3/4$ rendszertöltésre	140
XII.B.2. Alapállapotok $1/4$ rendszertöltésre	143
XII.C. Következmények	144
XII.D. További fejlemények	145
XIII. Lokalizáció-delokalizáció átalakulás rendezetlen és kölcsönható	
kétdimenziós rendszerekben	145
XIII.A. Körülmények	145
XIII.B. Modell és a Hamilton operátor	146
XIII.C. Pozitív szemidefinit formára vett transzformálás	147

XIII.D. Az egzakt alapállapotú hullámfüggvények	149
XIII.E. Fizikai tulajdonságok	151
XIII.F. További eredmények, következmények	152
XIV. Sakktábla és stripe megoldások mint egzakt alapállapotok két	
dimenzióban	153
XIV.A. Körülmények	153
XIV.B. A modell és a Hamilton operátor átalakítása	154
XIV.C. Alapállapotú megoldások	155
XIV.C.1. Alapállapotok egynegyed rendszer feltöltésén	156
XIV.C.2. Alapállapotok egynegyed feltöltés alatt	156
XIV.C.2.a. Rendezetlen klaszter (droplet) megoldások	156
XIV.C.2.b. Degenerált periodikus csík (stripe) és sakktábla	
megoldások	158
XIV.C.2.c. Fizikai aspektusok	158
XIV.C.3. Nem degenerált stripe és sakktábla alapállapot megoldások	159
XIV.D. Következmények	161
XV. Négyzetes cellájú Hubbard láncok egzakt alapállapotai	162
XV.A. Körülmények	162
XV.B. A modell és a Hamilton operátor	163
XV.C. A levezetett egzakt alapállapotok	164
XV.C.1. Az $n \leq 1/3$ -hoz tartozó esetek	164
XV.C.2. Az $n \geq 4/3$ -hoz tartozó esetek	166
XV.C.3. A $\delta \in (-\pi/2, +\pi/2)$ külső mágneses tér függő alapállapotok	167
XV.D. Következmények	169
XV.E. További eredmények	169
XVI. Ötszögű cellájú Hubbard láncok egzakt alapállapotai	170
XVI.A. Körülmények	170

XVI.B. A modell és a Hamilton operátor	170
XVI.C. A levezetett egzakt alapállapotok	171
XVI.C.1. A pozitív szemidefinit formára való átalakítás.....	171
XVI.C.2. Az egzakt alapállapotok.....	173
XVI.D. Effektív felső sáv	173
XVI.E. A fizikai okok vizsgálata	175
XVI.F. Következmények	176
XVI.G. További eredmények	176
XVII. Sávszigetelőre ható Hubbard kölcsönhatás okozta delokalizált állapot	177
XVII.A. Körülmények	177
XVII.B. A modell és a Hamilton operátor	178
XVII.B.1. Az alkalmazott stratégia	178
XVII.B.2. A modell Hamilton operátor	179
XVII.B.3. Az $U = 0$ nemkölcsönható eset	179
XVII.C. A Hamilton operátor pozitív szemidefinit formára vett transzformálása	180
XVII.C.1. Pozitív szemidefinit formára való átalakítás	180
XVII.C.2. A $\hat{D}, \hat{F}$ operátorok fizikai jelentése	182
XVII.D. Az egzakt kölcsönható alapállapot	182
XVII.D.1. Az alapállapot hullámfüggvény operátorai	182
XVII.D.2. Az alapállapot hullámfüggvény	186
XVII.E. Az egyrészecske lokalizációs hossz kölcsönható esetben	187
XVII.F. Következmények	188
ÖSSZEFOGLATÓ RÉSZ	190
XVIII. Összefoglalás	190
XVIII.A. Klaszterizáció	190
XVIII.A.1. Rendezetlen klaszterek	190

XVIII.A.2. Stripe és sakktábla rendeződés	190
XVIII.B. Szigetelő állapotok	191
XVIII.C. Delokalizált állapotok	192
XVIII.D. Különleges vezető állapotok	192
XVIII.E. Szupravezető	193
XVIII.F. Spin-sűrűség hullám	193
XVIII.G. Ferromágnesesség	194
XVIII.H. Különleges paramágnesek	194
Saját fejlesztésű módszerek összefoglalása	195
I. Gutzwiller hullámfüggvénnyel kifejezett átlagértékek tetszőleges dimenzióban vett és más közelítések nélküli számolása	195
II. Fonalszerű és hőmérsékletfüggő klaszternövekedési modell kidolgozása .	196
III. Sokrészeszkés kvantummechanikai rendszerek egzakt alapállapotát megadó pontos módszer kidolgozása	196
XIX. Az elért új tudományos eredmények tézisszerű összefoglalása	196
XIX.A. Közelítéssel elért eredmények	196
XIX.B. Közelítésmentes eredmények	197
BIBLIOGRÁFIA	199
XX. Bibliográfiai összefoglaló	200

dc_890_14

BEVEZETŐ RÉSZ

A. Előszó

A PhD fokozatomat mely tematikája a rendezetlen, többnyire fagyott rendszerekkel volt kapcsolatos, az 1984-ben lezajlott védés után 1985-ben kaptam meg a Bábes Bolyai Tudományegyetemen (Kolozsvár). Ezt minősítette Kandidátusi fokozattá a Tudományos Minősítő Bizottság 1993-ban (Budapest). Az itt bemutatott anyag így, az 1985 évet követő, majdnem 30 éves tudományos tevékenységek eredményeiből válogat a megválasztott tematika alapján. E tevékenységem, az aránylag nagy időtartam miatt eléggé sokszínű volt, de a bemutatás során a különböző altémakörök összefonódnak egyetlen fő vezérfonal mentén. Végül is, a korrelált sokrészecskés rendszerek tág értelemben vett rendezettségére való törekvése, e folyamat jellemezhetősége, törvényszerűségei, leírási lehetőségei, és rejtett szabályosságai kötöttek le mindig¹, ezt próbáltam jellemezni különböző körülmények között.

Az évek multával, a tanulmányozott folyamatban az erős kölcsönhatási hatások és korreláltság fontosságának kidomborodása következtében, továbbá a modellkiértékelés lehetőségének fenntartása következményeként, a tevékenységem folyamán, fokozatosan hangsúlyozottabbá vált a pontosság, a közelítések fokozatos elhagyása. Ennek következtében, a PhD utáni periódusom két egymáshoz kapcsolódó, de technikai és módszertani alapon elkülöníthető szakaszra bomlik: az első, nagyjából egy évtizednyi periódus, a közelítések alkalmazásának időszaka, az ezt követő rész pedig, amely hosszúságban nagyságrendileg nagyjából kétszer akkora terjedelmű, a közelítésmentesség periódusa (hangsúlyozni szeretném: itt modellkörülmények között vett tárgyalásbeli egzaktságról van szó). Az előzmények és módszerek ismertetése után ez indokolja a modell-szintű tárgyalásokból eredő saját eredményanyag két részre való felbontását. A sokszínűség háttérében és a két részt átívelő módon, a fejezetek és a tárgyalásmód azonban egy logikai sorrendet követ, amely a korrelációk erősségének és ezeknek, a leírás szintjén vett pontosabb figyelembevételének növekedése irányába mutat.

B. A tartalomról

1. A használt rendeződési fogalom

A disszertáció különböző, tág értelemben vett rendeződési formák modellkörülmények között vett megjelenési lehetőségeit elemzi és mutatja be. A „tág értelemben vett” jelző egyszerűen azt húzza alá itt, hogy a tárgyalt állapot nem szükségszerűen Landau-féle rend-paraméterrel jellemzett, de amúgy eltér a magashőmérsékletű rendezetlen fázistól (mint pl. a klaszter, a stripe (fonal), a szigetelő, vagy a *half-metal* értelemmel bíró félfém), vagy, tulajdonságaiban teljesen különbözik attól, amit a magashőmérsékletű rendezetlen fázistól intuitive elvárunk (mint pl. a $D > 1$ dimenziós nem-Fermi folyadék kölcsönható fermionikus de nem kondenzált rendszerekben, effektív kölcsönhatás által létrehozott lapos sáv, vagy, a makroszkópikus degeneráció jelenlétében ható lokális Coulomb taszítás hatására fellépő delokalizált állapot). A jellemzés során nem szükségszerűen az állapot az érdekes csupán, hanem az is, hogy a leírás, vagy a modell képes e számotadni róla vagy sem.

A szóba kerülő és rögzített modellkörülmények között bemutatott, az ismertető fejezetek központjába álló állapotok száma nagy. A közelítő módszerekkel tárgyalt esetekben jellemzésre kerül (sorrendben): a1) anizotrópikus spin-sűrűség hullám, a2) síkok közötti csatolás jelenlétében fellépő szupravezető, a3) spin-sűrűség hullám és szupravezető koegzisztencia, a4) kétsávós modell keretei közt tárgyalt spin-sűrűség hullám, illetve a5) szigetelő megjelenési lehetősége a Gutzwiller hullámfüggvény tükrében.

A pontosan tárgyalt esetekben, sorrendben, bemutatásra kerül b1) fonalszerű (filiform) klaszterképződés, b2) kétsávós modell keretei között megjelenő szigetelő, háromdimenziós normál nem-Fermi folyadék, illetve ferromágneses fázis, b3) delokalizáció és lokalizáció rendezetlen és kölcsönható 2D rendszerekben, b4) sakktábla, stripe (stabil vonalas felépítésű rendeződés) és rendezetlen klaszter állapotok két dimenzióban, b5) négyszögű cellával rendelkező Hubbard láncokban fellépő rendeződési formák (ferromágnes, korrelált félfém, vezető és szigetelő fázisok), b6) ötszögű cellával rendelkező láncokban a kölcsönhatás hatására fellépő effektív lapos sáv és következményei, végül b7) lokális Coulomb kölcsönhatás által előidézett delokalizáció.

A felsorolt, amúgy széles spektrumon elterülő folyamatokban a közös a kölcsönhatás okozta átrendeződés, amely a fennálló körülmények függvényében különböző kimenetelű (és tág értelemben vett) rendezettséget eredményez. A kimenetel, mint új állapot, *de facto* a korrelációs függvények megváltozásával érzékelhető, de nem szükségszerűen rendparaméter megjelenéséhez kötött. A háttérben elhelyezkedő célkitűzés ilyenszerű folyamatok leírása, megértése, modellezhetőségének és törvényszerűségeinek tanulmányozása volt. Az e törekvésből eredő eredmények alapköveire épül fel a disszertáció.

3. A bemutatás vonala

A modellkörnyezetben levezetett saját eredmények bemutatása, az előzmények (II. fejezet) és módszerek (III. - V. fejezetek) ismertetése után, a VI. - XVII. fejezetekben történik. Ezen fejezeteket, a mindegyik fejezet elején található és „Körülmények”-nek nevezett bevezetők kapcsolják össze. A bemutatás sorrendje lényegében a korrelációs hatások mind fokozottabb mértékben történő figyelembevételének láncolata által meghatározott. Így a VI. - VIII. fejezetek átlagtér elméleti szintjéről (minimális figyelembe vett korrelációs hatások), IX. fejezetben található dinamikus átlagtér elemekkel ecsetelt Gutzwiller projektált variációs hullámfüggvény jellemzés (főképp időbeli korrelációs hatások figyelembevétele), majd a X. fejezet Gutzwiller variációs hullámfüggvény pontos megragadásán keresztül (térbeli korrelációk variációs szinten vett figyelembevétele) jutok el a XI. fejezethez kezdődő pontos eredményekig, ahol a korrelációs hatások (modell szinten vett) figyelembevétele egzakt.

A XI. - XVII. fejezetekben előrehaladva, újból a korrelációs hatások (mostmár pontosan figyelembe vett) erősödésének irányába mutat a bemutatás vonala. A XI. fejezet lényegében klasszikus rövid hatótávolságú korrelációkat tartalmazó rendszere az indító anyag e von-

alon, amely után a kvantumosan viselkedő rendszereket tartalmazó XII. - XVII. fejezetek következnek, hol a korrelációs hatások számottevőek. Azonban a XII. fejezettől kezdődően a XVI. fejezetig a félig töltött rendszertől távoli koncentrációs tartományokon mozgom (itt a korrelációs hatások a félig töltött rendszer korrelációs hatásainál kisebbek). Ezen a szakaszon a korrelációs hatások erősítése a dimenzió csökkentésével történik, mégpedig úgy, hogy a XII. fejezet $D = 3$ dimenziójából a XIII. fejezet $D = 2$ rendezetlen de kölcsönható rendszeren keresztül, majd a XIV. fejezet nematikus (fonalszerű) rendeződésének útján jutok el a XV-XVI. fejezetekben tárgyalt kváziegydimenziós (de nem integrálható) láncokig. Ez után következik a XVII. fejezet, amelyben a kvantumos $D = 2$ rendszer (a pontos eredményeket tartalmazó fejezetek közül egyedüli módon) félig töltött állapotban vizsgált. A korrelációs hatások itt a legerősebbek, és ezt nemcsak az alapállapot hullámvektorban megjelenő operátorok különös mivolta, hanem kiterjedt jellege is jelzi.

4. A sokszínűség jelenléte és az eredmények egymásutánisága

A korrelációs hatások erősödése és ezen hatásoknak a leírásban vett hangsúlyozottabb és hangsúlyozottabb figyelembevétel útján haladva, majdnem lehetetlen egyetlen rendeződési formát figyelembe venni csupán. Ez magyarázza lényegében a bemutatásra kerülő rendeződési formák sokszínűségét. A korrelációs hatásokra vonatkozó és I B 3. alfejezetben bemutatott ösvényén mozogva, adott ponton bemutatásra kerülő rendeződési forma lényegében a *különlegesség* által meghatározott.

4.I. A közelítéseket alkalmazó fejezetek esete

A kezdeti szakasz (VI. - VIII. fejezetek) fő jellemzője az energetikailag stabil koegzisztencia, amely ezen a szinten (a korrelációs hatások tényleges figyelembevételének alacsony szintjén) az érdekesség és különlegesség forrása. A koegzisztencia maga, az első két saját modelleredményeket ismertető fejezetben (VI. és VII.) ugyanazon típusú rendeződési formák között tárgyalt (spin-sűrűség hullámok külön a VI. fejezetben, majd szupravezető fázisok külön a VII. fejezetben). Az ezekre következő VIII. fejezet a két különböző rendeződési forma (spin-sűrűség hullám és szupravezető) energetikailag stabil együttlétezési lehetőségeit tárgyalja. Az eredményül kapott különlegesség a felsorolt esetekben az energiarés $\mathbf{k}$ függése – anizotrópiája – (a VI. fejezetben), a kritikus hőmérséklet növelhetősége (a VII. fejezetben), illetve, az ugyanazon Fermi felületi tartományrészről származó elektronok által stabil formában keltett két, nagyon különböző fázis koegzisztenciája (VIII. fejezet).

Persze a háttérben fizikai okok is jelen vannak melyek a fizikai oldalról a „különlegesség” előállítását segítik, s melyek figyelembevételére a gördülékeny előrehaladáshoz szükséges. Ezen faktorok kidomborodnak a bemutatás során és lényegében a VI. fejezetben a legközelebbi szomszédok közötti spinfüggő kétrészecske kölcsönhatás, a VII. fejezetben a síkok közötti (egy- és kétrészecske szinten jelentkező) csatolás, míg a VIII. fejezetben a szinglet, de tömegközéppontú momentummal rendelkező szupravezető párosodás, és (kétsávós esetben) dopolás formájában jelentkeznek.

A IX. majd X. fejezetektől kezdődően, a leírás a korrelációs hatások valamivel erősebb szintű figyelembevétele mellett történik (egyelőre közelítések szintjén). Ettől a ponttól kezdve a különlegesség okozója lényegében a korreláció. Ez a hatás lehet pozitív, illetve negatív jellegű is, amely lehetőségeket, sorra, a IX. és X. fejezetek hivatottak szemléltetni. Ezek közül a pozitív jellegű hatást a IX. fejezet mutatja be, melyben egy variációs spin-sűrűség hullám típusú állapotra egy Gutzwiller korrelátor (projektor) alkalmazott. Spin-sűrűség hullám a szemléltető itt mert ez már a VI. és VIII. fejezetekben előfordult, továbbá a pozitív jelleg abban mutatkozik, hogy korrelációs hatások figyelembevétele mellett, a modell (szimmetrikus periodikus Anderson modell) teljes paraméterterében nagyon jó minőségű leírás adódik. Ezzel kerül ellentétben a X. fejezet, amely szintén Gutzwiller projektorral figyelembe vett korrelációs hatás jellemzésére hivatott a 2D Hubbard modell keretei között (Fermi tengerre mint vákuumra alkalmazott Gutzwiller projektor nem más mint a Gutzwiller variációs hullámfüggvény amely a vizsgálat középpontjában áll). Ez esetben azonban a korrelációs hatások figyelembevétele nélkül (azaz Gutzwiller közelítésben) kapott fém-szigetelő átmenetet mint eredményt, a Gutzwiller hullámfüggvény pontos kezelése teljesen semmissé nyilvánítja, azaz eltörli és a rendszer végig fémes jellegű marad. Ezt a tényt illetően “negatív” jelzővel, ami itt egyáltalán nem a korrelációs hatások figyelembevétele szempontjából diminatív, hanem a Gutzwiller hullámfüggvény gyengésségeit domborítja ki csupán.

4.II. A közelítéseket nem alkalmazó fejezetek esete

A korrelációs hatások figyelembevételének további erősítése vezet az egzakt eredmények területére. A X. fejezet eredménye, és az a tény hogy erősen korrelált rendszerekkel foglalkoztam többnyire, talán érthetővé teszi, hogy miért vetődtem munkásságom során e témakörbe. Megjegyzem, hogy az egzaktság modellkörülmények közötti egzaktságot, a modell pedig nem integrálható modellt jelent az elkövetkezőkben, ezen terület nyitottsága és perspektívái kötöttek ugyanis le.

A pontosságot el lehet úgy érni, hogy a modellkörülményeket szabjuk úgy meg, hogy az egzaktság elérhető legyen. Indulásképpen ezt szemlélteti a XI. fejezet egy specifikus (fili-form) klaszternövekedési problémával a kiskoncentrációs határesetben, amely lényegében klasszikus folyamatokat fed. A korrelációs hatások itt csak rövid hatótávolságúak, de kísérleti mérésekkel jól összemérhetőek a számolás eredményei.

Az ez után következő fejezetekben, kezdve a XII. fejezettől, a modelltípust a szakirodalom már rég rögzítette, így az eljárást kell úgy megszabni, hogy pontos eredményekhez vezessen. Ezen rendszerek már kvantummechanikaiak, az eredmények meg sokrészecskés, részecskeszámfüggő alapállapotú hullámfüggvényeket jelentenek, amelyek segítségével a kialakuló rendeződés (állapot) tulajdonságait kell átlátni. A kontinuitás biztosítása érdekében a klaszterizáció e szinten is továbbra is jelen van a XII - XV fejezetekben, mégpedig a kiskoncentrációs esetekben, de az egyik fő kidomborított mondanivaló e fejezetrészekben az, hogy amit a X. fejezet közelítések szintjén képtelen megtenni (azaz a fémből szigetelőbe való átmenet a kölcsönhatás okozta korrelációs hatásokon keresztül), azt egy egzakt tárgyalás könnyedén és rendkívül változatos végeredmények formájában megteszi.

E mellett egyrészt specifikus sokszínűséget tükröznek az eredmények, mint pl. a 3D nem-Fermi folyadék a XII. fejezetben, a 2D és rendezetlen körülmények között megjelenő fémszigetelő átmenet a XIII. fejezetben, a korrelált félfém a XV. fejezetben, vagy a kölcsönhatás okozta effektív lapos sáv a XVI fejezetben. Másrészt olyan rendeződési formák is megjelennek, melyek több fejezet tárgyköréhez is hozzátartoznak, mint pl. a ferromágnesesség (XII - XVI fejezetek), vagy szigetelő állapotok (XII - XVII fejezetek). Közben, a fejezetek sorozatában előre haladva, a korrelációk fokozása érdekében előre tör a nematikus jelleg, de ellentétben a XI. fejezettel ahol modellkörülmények domborítják ki, itt kezdetben bizonyos fajta anizotropiák (pl. disztorziós vonalak), vagy valamilyen fajta jelenlévő rendeződés (pl. dimerizáció, vagy sűrűség hullámok) segítik – lásd XIV. fejezet –, majd később a behatároltság idézi elő – lásd XV- XVI fejezeteket.

Végül, a XII - XVI fejezetek félig töltött rendszertől távoli eredményei mellett a XVII. fejezet félig töltött esetre vonatkozó eredményei következnek, ahol a korrelációs hatások rendkívül hangsúlyozottak. Itt a különlegesség nemcsak a Hubbard kölcsönhatás (amelyről megszoktuk hogy általában lokalizál) delokalizáló hatásában rejlik, hanem egy bizonyos fajta alrács rendeződésben, amit okoz (hasonló hatás a XV. fejezetben is előfordul), továbbá a kompenzációról alkotott képben is (ami a IX. fejezet tartozéka is).

C. A saját eredményekről

1. A saját eredmények és elhelyezésük a bemutatott anyagban

Saját eredményeim két típusúak: egyrészt a saját magam által kifejlesztett módszerekből állnak, másrészt a bemutatott modelleredményekből tevődnek össze.

A saját módszerek bemutatása a következő alfejezetekben található: IV C : Gutzwiller hullámfüggvényekkel de Gutzwiller közelítés nélküli számolástechnika két (vagy nagyobb) dimenzióban; V A: Fonalszerű klaszterképződés leírása; V B: pozitív szemidefinit operátorokra alapuló módszer egzakt eredmények levezetésére sokrészecskes kvantum rendszerekben.

A saját modelleredmények a VI. - XVII. fejezetben találhatók. Az ezen fejezetekben ismertetett eredményekhez tartozó publikációk amelyeket a XIX. tézisszerű összefoglaló fejezetben kiemelttem és felhasználtam, a Bibliográfia legelején, az 1-25 idézetekben találhatók meg¹⁻²⁵.

2. A saját eredményeket tükröző publikációkról

A XIX. fejezet 14 tézispontjához tartozó publikációk, 4 tézispont esetében (B.3; B.4: B.8; B.9) nem tartalmaznak társszerzőt^{2-6,23-25}. Ezen pontok a XIII., a XVII., és részben (a 2D esetben) a XII. modellszintű sajátéredményeket bemutató fejezetekhez tartoznak, illetve a XII. - XVII. fejezetek módszertanát képviselik. Mivel társszerzők nincsenek jelen, ezen fejezetekkel nem foglalkozom itt részletesen.

Marad 10 fejezet (VI-XII, XIV, XV-XVI) melyhez tartozó (és XIX. fejezetben felhasznált) cikkek társszerzővel kerültek publikálásra. Ezek közül a XVI. fejezet esetében, a részletező cikkekben^{23,24} nincs társszerzőm, ami bizonyítja, hogy e fejezetben a munka

oroslánrésze az enyém (tézisszerű összefoglaló B.7 pont). Ezen fejezethez tartozó harmadik publikáció²² külföldi társszerzői az eredmények értelmezésében játszottak szerepet.

A megmaradt 9 fejezet közül kettőben (IX. és X. fejezetek) az eredeti Humboldt ösztöndíjamhoz kapcsolódó munkám került. Így, i) a X. fejezetben lényegében az ösztöndíj előkészítő (pályázati) anyag található (melyben a társszerző fiatal munkatársak kik diákjaim voltak – M.G. 1984 (1991), B.J. 1991 (1996)-ban szerezték meg fizikusi (illetve PhD) oklevelüket –, a numerikus feldolgozásban segítettek). E fejezethez tartozik a XIX tézisszerű összefoglaló A.5 pontja, a Ref.^[7–9] publikációkkal. Továbbmenőleg, ii) a IX. fejezetben foglalt anyagrész (a XIX tézisszerű összefoglaló fejezet A.4 pontja, Ref.^[10]) a Humboldt ösztöndíj alatti munkám eredménye, mely a módszer asszimilálása után szintén oroslánrészt az enyém.

Mindezek után még 7 fejezetre vonatkozólag kell információt szolgáltatnom. A Humboldt kezdeti ösztöndíjam német vezetője (D.V.), kihez ma is szoros professzionális kollaborációs vonalak fűznek, ezen fejezetek közül még két másik bemutatott fejezet (XII. és XV.) esetében szerepel társszerzőként a 2003-2008 időintervallumból származó 4 cikken (lásd a XIX tézisszerű összefoglaló fejezet B.2 pontjához tartozó Ref.^[11,12], B.6 pontjához tartozó Ref.^[13,14] publikációkat). E cikkek teljes módszertana és matematikai eredményei a saját munkám eredményei. A XII. fejezet esetében a tematikát is én választottam ki (a XV. fejezeti cikkek esetében a témakört A. Kampf javasolta). A külföldi társszerzők e két fejezet esetében a különlegesebb alapállapotok fizikai tulajdonságainak jellemzésében játszottak szerepet. Továbbá az alkalmazott módszertannal 1997-2014 között egyik itteni társszerző sem publikált cikket külön, ami bizonyítja hogy a teljes módszertan és eljárás az én munkám eredménye.

A megmaradt 5 fejezet (VI,VII,VIII, XI,XIV) esetében, az utolsó kettő (XI. és XIV). fejezetek cikkeire szintén megemlíthető, hogy a teljes módszertanuk és eljárási folyamatuk az én munkám eredményét képezik (lásd a XIX tézisszerű összefoglaló fejezet B.1. pontjához tartozó Ref.^[15], illetve B.5. pontjához tartozó Ref.^[16] publikációkat). Ezen esetekben a társszerző a numerikus feldolgozásban segített.

Az eddig még nem tárgyalt 3 fejezetben (VI., VII., VIII.) a levezetések átlagtér elmélet szinten kezelt Green függvény technikával történtek (ezen eredményekhez tartoznak a XIX. tézisszerű összefoglaló fejezet A.1, A.2, A.3 pontjai). Ezekre vonatkozólag megjegyzem, hogy magát a módszert még hallgatói koromban jómagam asszimiláltam 1977-1979 periódusban²⁶, majd 1979-1995 időszakban publikáltam segítségével több mint 15 éven keresztül. Ezen periódus első 4 évében, a 1979-1982 időszakban, mindez történt saját tanítványok nélkül (lásd Ref.^[27,28]), majd 1983-tól saját tanítványokkal (többek között az itt szóban forgó három fejezethez tartozó cikkek fiatal társszerzőjével), kiknek a teljes módszertant én adtam át. Megjegyzem továbbá, hogy a VII. fejezethez tartozó egyik cikkemen (lásd Ref.^[17]) szereplő I. Pop társszerző, előbb a hivatalos diplomamunka vezetőm volt, kísérleti fizikus, ki a kísérleti aspektusok szemléltetésére figyelt. Ilyen körülmények között, a szóban forgó három fejezethez tartozó publikációs anyag (XIX. tézisszerű összefoglaló fejezet A.1. pontjához tartozó Ref.^[18,19], A.2. pontjához tartozó Ref.^[17], és A.3. pontjához tartozó Ref.^[20,21] publikációk, melyek 1986-1989 periódusban kerültek nyomtatás alá) tematika kiválasztója,

stratégiai megtervezője, értelmezője és fő végrehajtója is voltam egyben.

Az előző mondatban elhangzottak vonatkoznak a VII. fejezethez tartozó és topologikus fázisátalakulásokra koncentráló cikkekre is¹. Ez esetben renormálási csoport tárgyalás vezet az ismert végeredményhez²⁹, mely részleteiben ezelőtt nem volt publikálva soha. Kezdetben, ezt a részletezést azért tettem meg mert tanítani kezdtem az anyagot³⁰. De a témakör elemzése a felmerülő lehetőségek olyan széles spektrumának átfésülését és megvizsgálását eredményezte, valamint olyan tág modellspektrumhoz való viszonyát tisztázta, illetve tisztán kifejtette, hogy ezáltal messze túllépte a Ref.[²⁹] induló keretet és önálló publikációként állt elő. Két dimenzióban a figyelembe vett járulékok végül is nem eredményeztek új releváns paramétert, azaz új rendeződési formát, ezért nem szenteltem külön fejezetet az itt bemutatott eredményeknek.

Végezetül megemlítem, hogy a XIX. tézisszerű összefoglaló fejezetben feltüntetett publikációk magyar nemzetiségű (de nem Magyarországon élő) társszerzői [B.J. (A.5. pont) és M.G. (A.1,A.2,A.3,A.5,B.1,B.5 pontok)] lemondó társszerzői nyilatkozattal támogatták az MTA doktori pályázatomat. Aláhúzom azt a tényt is, hogy a német társszerzőkre tett itteni állításaimat, a volt Humboldt ösztöndíj vezetőm a 2010-es MTA doktori pályázatához küldött ajánlólevelében – mely másolatát bármikor szolgáltathatja –, igazolta.

D. A további bemutatásra kerülő anyag szerkezete

A Disszertáció további része a következő képpen van struktúrálna: a II. fejezet az előzményeket mutatja be, a III. fejezet módszerekre vonatkozó bevezetője után, az alkalmazott módszerek részletezése a IV. fejezetben (közelítési módszerek esete), illetve az V. fejezetben (egzakt eredményekhez vezető módszerek esete) történik. Mindezek után a saját modell-eredmények bemutatása következik két részre bontva, éspedig, a VI. - X. fejezetek a közelítések alkalmazásával levezetett eredményeket, illetve a XI. - XVII. fejezetek a közelítések nélkül levezetett eredményeket részletezik.

Ez után következnek az összefoglalók, amelyek két részre tagolódnak eképpen: i) a XVIII. fejezet egy fizikai összefoglalót tartalmaz, és végül ii) a XIX. fejezet az elért tudományos eredmények tézisszerű összefoglalását mutatja be (ez a fejezet lévén a Tézisfüzet magja). Az anyagot a Bibliográfiai összefoglaló XX. fejezet zárja.

A terjedelmet illetőleg megemlítem, hogy a tartalomjegyzék és bibliográfia oldalszámlázást nem tartalmaz. Ezen túlmenőleg, a bebutatott anyag 199 oldal, 48 ábrát, 516 képletet és 327 bibliográfiai referenciát tartalmaz.

dc_890_14

ELŐZMÉNYEK BEMUTATÁSA

Egy több mint negyed évszázadot betöltő és a fizika területén zajló tudományos tevékenység előzményeiről beszélni rendkívül komplikált feladat, hisz e periódus alatt maga a tudományág is sokat fejlődik és felhalmozott ismeretei nagyon sokat gyarapodnak. Ennek megfelelően, a bemutatott előzmények altémakörökhöz (adott körülmények között vett rendeződési formákhoz és tendenciákhoz) kapcsolódnak és nyilvánvalóan, az időskálán lokálisak. Ennek ellenére képet adnak arról hogy milyen tudományos indokok kényszerítették ki az illető irányba befektetett munkát, mi indokolta az illető új ismeretadag levezetésének szükségességét.

A. Közelítéssel levezetett eredmények előzményei

1. Anizotrópikus spin-sűrűség hullámok

A hatvanas évek elejére összegyűlt kísérleti adatok alapján világossá vált hogy antiferromágneses spin rendeződés nemcsak kizárólagosan lokalizált mágneses momentumoknak köszönhetőleg jöhet létre, hiszen itineráns rendszerek is létrehozhatnak hasonló rendeződést. Ez esetben a vezetési elektronok rendeződnek antiferromágneses módon, mégpedig úgy, hogy a rendszerben, bizonyos körülmények között a spin-sűrűség (a geometriai pozíció szerint és spontán módon) periodikusan kezd változni. Ez indokolja a megjelenő rendeződési forma spin-sűrűség hullám elnevezését, melyet legelőször Overhauser³¹ írt le elméletileg. A Cr esetre végzett sávszerkezeti számítások után³² (ma világos hogy a króm a legtipikusabb elem amely sáv antiferromágnesességet mutat és amelyben megjelenő spin-sűrűség hullám már szobahőmérsékleti tartományon is elemezhető³³), Fedders és Martin³⁴ továbbfejlesztették e rendeződési forma elméleti jellemzését rámutatva arra, hogy átlagtér elmélet szintjén ez (matematikai vonalon) nagyon hasonló a Green-függvények segítségével történő szupravezető fázis (BSC-szinten vett) leírásához.

A kísérleti vonal eredményeinek következtében közben nagymértékben bővült azon anyagok halmaza amelyek spin-sűrűség hullám rendezettséget mutatnak³⁵⁻³⁷, továbbá szennyeződések hatását is vizsgálni kezdték úgy elméleti³⁸, mint kísérleti³⁹ munkákban, illetve az elméleti jellemzéseket is továbbfejlesztették⁴⁰. Meg kell jegyeznem azonban, hogy ebben a periódusban konkrétan ismert itineráns antiferromágnesek kizárólagosan $\mathbf{k}$ -független (azaz izotrópikus) energiaréssal rendelkeztek, továbbá minden észlelt tulajdonságot kis csatolási állandók feltételezése mellett gyakorlatilag átlagtér elméleti vonalon meg lehetett érteni és magyarázni.

Ezen szintről, a spin-sűrűség hullámok területének új és mondhatni kvalitatív fejlődési periódusa a nyolcvanas évek első felére tehető. E szakasz kezdetét a nehézfermionos rendszerek 1979-re írható és Steglich által vezérelt felfedezése jelentette⁴¹. Ezen anyagok viselkedése sehogy sem fért bele a rendezett itineráns rendszerekben fellépő fázisok BSC-típusú matematikai jellemzésekbe. Mindez kísérletileg abban nyilvánult meg, hogy különböző mérhető termodinamikai mennyiségben tapasztalt függvényszerű viselkedés (például T , vagy ω függés)

teljesen más volt mint az, amit izotrópikus energiérés mellett alkalmazott átlagtér elmélet adott. A nehézfermionos rendszerek különböző rendezett fázisokat eredményeznek és ezek között megtalálható a spin-sűrűség hullám is⁴². Olyan itineráns antiferromágneses állapotok jelennek meg itt amelyek alacsonyhőmérsékleti T függése nagyon hasonló az anizotrópikus szupravezetőkben tapasztalt T függésekhez⁴³ (azaz nem exponenciális, hanem polinomiális jellegűek). Ez indokolta az anizotrópikus spin-sűrűség hullámok elméleti leírásának szükségességét.

Az első elméleti munka amely anizotrópikus sűrűséghullám létezésének lehetőségét megjosolja 1968-ból származik Halperin és Rice munkássága nyomán⁴⁴. E munkában egy excitonikus szigetelő formájában (azaz egy makroszkópikus koherens kvantum állapot amely egy bizonyos kritikus hőmérséklet alatt elválaszt egy félvezető és egy félfém állapotot) képzelték el az anizotrópikus sűrűség hullámot. Ezen körülmények között megjelenő spin-sűrűség hullám léte azonban a mai napig kísérleti bizonyíték nélküli és kérdéses⁴⁵.

Tudomásom szerint, az első anizotrópikus spin-sűrűség hullám (mikroszkópikus jellemzőktől kiinduló és egész termodinamikai mérhető mennyiségekig menő) elméleti leírás egy konkrét rendszertípusban, amelyben mértek is ilyenszerű állapotot, az én munkámból származik^{18,19}. Ez van bemutatva a közelítéssel nyert eredmények legelső fejezetében (lásd a VI. fejezetben).

2. Síkok közötti csatolás hatása réteges felépítésű szupravezetőkre

Bednorz és Müller 1986-ban publikálták az első magashőmérsékleti szupravezetőkre vonatkozó mérési adatokat⁴⁶, és hamarosan, a Chu csoportjából származó mérések alapján⁴⁷, 1987 elején, a magashőmérsékletű szupravezetők kritikus hőmérséklete már 90 K körül mozgott. A struktúra elemzések nagyon hamar rámutattak arra, hogy rézoxid síkokból álló réteges felépítésű rendszerekről van szó és ez polarizálta a szilárdtestfizikai közösség nagyon nagy hányadát a réteges struktúrájú anyagok irányába a nyolcvanas évek végén.

El kell azonban mondanom, hogy a réteges felépítésű szupravezetők iránti figyelem kezdete nem 1986-volt, ugyanis a nyolcvanas évek elején konvencionális szupravezető rendszerekből (pl. Nb -ból) mű-szuperrácsokat állítottak elő^{48,49} és ezek tulajdonságait vizsgálták. Rendkívül érdekes hatásokat tapasztaltak ezen rendszerekre, mint például a T függésekben mutatott dimenziális „crossover” típusú átmeneteket, vagy a réteg-vastagság függvényében a H_{c2} -ben tapasztalt maximumokat^{50,51}, amelyek magyarázatra vártak.

Ezen típusú rendszerek sík-indexre alapozott elméleti leírásának technikáját már a hetvenes évek legelején Kats⁵², illetve Lawrence és Doniach⁵³ munkássága nyomán tisztázták. A módszert legelőször arra használták hogy a kétdimenziós szupravezetőkbe fellépő fluktuációs hatásokat tanulmányozzák⁵⁴, de a későbbiekben, a legtöbb elemzés a felső kritikus mágneses tér megértése körül összpontosult⁵⁵. Ezen túlmenően azonban, p-hullám típusú szupravezető fellépési lehetőségét⁵⁶, az anizotrópiák a szuperrács viselkedésére vett hatását⁵⁷, illetve a rendszer hővezető képességének viselkedését⁵⁸ is tanulmányozták.

Ezen háttér létezésének ellenére azonban tagadhatatlan, hogy a réteges felépítésű szupravezetők iránti és a nyolcvanas évek második felére tehető figyelem a magashőmérsék-

letű szupravezetőknek köszönhető. Ezen szupravezetők tanulmányozásában nyilvánvalóan az egyik központi elem a rézoxid síkban lejátszódó mechanizmus volt⁵⁹, de a síkok közötti valamilyenfajta kapcsolat jelenléte implicite mindig ott volt a tudományos köztudatban, hiszen, rigurózus keretek között nincs szupravezető rendeződés $2D$ -ben, és ezt a kérdést nem lehet egyszerűen a rendszer kvázi kétdimenziós jellegének hangsúlyoztatásával megkerülni, mert ezáltal magának a lejátszódó jelenségnek a megértéséből veszünk⁶⁰. De mindezen elméleti argumentumok mellett, Chu csoportjából származó kísérleti adatok is mutatták, többek között konkrétan az $ABe_2Cu_3O_{6+}$ szupravezetők esetében, hogy az intersík kapcsolat pozitív szerepet játszodhat a szupravezető kritikus hőmérséklet növelésében⁶¹.

A síkok közötti kapcsolat elméleti leírásban vett első figyelembevétel a hetvenes évek első felére tehető⁶², amikor Gerhardtts egyrészcseke inter-sík hopping tag hatását vizsgálta, kétrészcseke kölcsönhatási tag nélkül, és megállapította, hogy a hatás kicsi, továbbá a szupravezetőre nézve destruktív. Mindezek után kétrészcseke inter-sík kölcsönhatási tagot is figyelembe vettek az elméleti jellemzésben⁵⁶, de ezt a szupravezető p-hullám kialakulás lehetőségének vizsgálatára használták.

Ez az a pillanat amikor a saját munkám született¹⁷, melyben egyrészcseke inter-sík hopping tag van figyelembe véve inter-sík kétrészcseke kölcsönhatás jelenlétében, de úgy, hogy intra- és inter-sík egyszerre fellépő gap-koegzisztencia vizsgálatán van a hangsúly. Tudomásom szerint ez volt az első olyan elméleti eredmény amely inter-layer kapcsolat jelenlétében a szupravezető kritikus hőmérséklet növelésének lehetőségét igazolta (lásd VII. fejezet).

3. Spin-sűrűség hullám és szupravezető koegzisztencia

A szupravezető állapot és mágnesesség egymásrahatásának témaköre, a Meisner effektus révén tulajdonképpen a szupravezető lényegi tulajdonságaiból eredő kutatási terület^{63,64}, hisz kis mágneses tér jelenlétében a szupravezető teljesen kitaszítja magából a mágneses tér erővonalakat és ezáltal tökéletes diamágnesként viselkedik. Így már a hatvanas évek elején világos volt hogy a ferromágnesesség destruktív módon hat a szupravezetőre (pontosan: s-hullám esetében és egy kritikus spin-spin csatolás felett^{65–67}), továbbá, hogy az együttlétezés tartományának kiterjesztése véges-momentum Cooper-pár megjelenését igényli^{68,69}. Végeredményben tehát a mágnesesség és szupravezetés, a ferromágnesesség szempontjából, a hetvenes évek közepétől elkönnyvelten kevésbé kompatibilis fázisoknak látszottak⁷⁰, de amint az a nyolcvanas évek elejére kiderült, más mágneses rendeződések esetében ez egyáltalán nem igaz. Példát szolgáltatott erre a helikális spin rendeződés⁷¹, továbbá a spin-üveg⁷² esete.

Az antiferromágnes is ez utóbbi kategóriába tartozik. A kísérleti eredmények amelyek a szupravezető és az itineráns antiferromágnes koegzisztenciáját igazolták a hetvenes évek második felére vezethetők vissza. Az első vegyületek amelyekben ezen együttlétezés tapasztalható volt, a Chevrel vegyületek (RMo_6S_8 ⁷³, RMo_6Se_8 ⁷⁴), ritkaföldfém boridok⁷⁵, illetve anizotrópikus organikus $TMTSF$ típusú anyagok⁷⁶ voltak. A Cr ötvözetekben a koegzisztencia jelenség kísérleti igazolása későbbre, a nyolcvanas évek közepére tehető⁷⁷.

Hamarosan e kategóriába lettek sorolhatóak a nehézfermionos anyagok is. Az első

nehézferrionos rendszerben megjelentő szupravezető fázist 1979-ben fedezte fel Steglich a $CeCu_2Si_2$ vegyületben ($T_c = 0.65K$)⁷⁸. Mivel $CeCu_2Ge_2$ ugyanazon rács és elektronszerkezettel rendelkezett, de $T_N = 4.15K$ alatt antiferromágneses tulajdonságot mutatott, már előrejelezte az itineráns antiferro-szupravezető koegzisztencia lehetőségét. Az első kísérleti adatok e területen $(U_{1-x}Th_x)X_{13}$ ahol $X = Pt$ ⁷⁹ illetve $X = Be$ ⁸⁰, $U(Pt_{1-x}Pd_x)_3$ ⁸¹, továbbá URu_2Si_2 ⁸² esetéből származtak.

Az elméleti leírást illetőleg, a legelső munka e területen 1963-ra tehető, amikor Baltensperger és Strassler⁸³ megmutatták hogy egy lokalizált antiferromágnesben lévő elektron gáz szupravezető tranzíciót mutathat. Öt évvel később Petalas és Baltensperger⁸⁴ mutatták meg hogy egy spin-sűrűség hullám állapotban lévő elektron gáz szimultán szupravezető állapotba is átmehet. Mindezek után, a nyolcvanas évek elejétől az új kísérleti adatokra koncentrálva jelentek meg az elméleti tanulmányok. Machida, Nokura és Matsubara⁸⁵ antiferromágneses molekuláris térbe helyezett elektron gáz esetében egy Fulde-Ferrel-Larkin-Ovchinnikov^{68,69} féle szupravezetőhöz hasonló fázist javasolt, de Nass, Levin és Grest⁸⁶ megmutatták, hogy egy szelf-konzisztens tárgyalás ezt a hatást eltörli. Hasonló módszerrel, a termodinamikai potenciálra koncentrálva, Umezawa csoportja a spin-sűrűség hullámnak a szupravezető Hc_2 -re vett hatását tanulmányozta $DyMo_6S_8$ esetében⁸⁷. Megemlítem, hogy közben egyirányú, csupán a szupravezetőre vett hatás tanulmányozása is folyt⁸⁸.

Az első elfogadott koegzisztencia jellemzés az organikus kvázi 1D anyagokra történt^{89,90}. Ez esetben a kvázi-egydimenziós rendszer Fermi felületének diszjunk részei adták a két különböző rendeződési formát, így jött létre a koegzisztencia állapot. Közben 1985-ben kristályosodtak ki a Cr ötvözetekre vonatkozó kísérleti adatok, melyek azt mutatták, hogy ugyanazon d -elektronok hozzák létre ez esetben úgy a szupravezető, mint a spin-sűrűség hullám kondenzátumot⁹¹. Ezek magyarázatára 1986-ban jelent meg saját munkám amely, tudomásom szerint, Cr -vegyületekre sajátos kétsávós rendszerre tárgyalta először a koegzisztencia problémát²¹.

A nehézferrionos rendszerekre az első elméleti próbálkozás 1987-re tehető és Machida és Katotól származik^{92,93}. Itt a szupravezető anizotrópikus módon, de a spin-sűrűség hullám k -független formában volt tárgyalva, továbbá az $(U_{1-x}Th_x)Be_{13}$ -ra vett alkalmazás kísérleti adatoknak ellentmondott^{94,95}. Ekkor jelent meg az én munkám²⁰, amely első alkalommal tárgyalta a spin-sűrűség hullámot is anizotrópikus módon a koegzisztencia problémákban.

Az eredményeim bemutatása a VIII. fejezetben található.

4. Spin-sűrűség hullám a periodikus Anderson modellben

Az eredeti (egy szennyeződéses) Anderson modell 1961-ben jelent meg⁹⁶, három évre rá vált ismerté a Kondo modell⁹⁷, majd 1966-ban kiderült, hogy egy unitér transzformáció révén, a két modell (specifikus paramétertartományon) ekvivalens⁹⁸. Ezen vonalon az individuális szennyeződés hatását próbálták fémekben jellemezni. A nehézferrionos rendszerek felfedezése után⁴¹, gyakorlatilag a nyolcvanas évek elejétől, a szennyezők periodikussá tétele (rácsban, minden rácsponton való elhelyezése) jelentette meg az Anderson modell periodikus változatát, amelyet ma periodikus Anderson modell néven ismerünk és amely első hivatása

a nehézfermionos rendszerek leírása volt⁹⁹.

Végeredményben ez egy Hubbard típusú kétsávós modell, a két sáv hibridizációs taggal (V) lévén összekapcsolva, továbbá a Hubbard kölcsönhatás U csak az egyik sávban hat. Ebből eredőleg, a nyolcvanas évek közepére tehető első elméleti leírások^{100,101} a Hubbard modellnél alkalmazott Gutzwiller variációs hullámfüggvényre alapoztak, de ezt csupán Gutzwiller közelítésben használták amely köztudottan csak végtelen dimenzióban válik pontos¹⁰². Így módon, az alapállapot energiára, egy U -ban lineáris tag után, $-U/V^2$ szerint exponenciálisan lecsengő járulék adódott¹⁰⁰. Ez az eredmény a megjelenése pillanatában sikeresnek volt elkönnyvelhető, hiszen a várakozások az egyszennyeződéses eredeti Anderson modellhez hasonló Kondo viselkedést reméltek, amelyett az exponenciális tag szentesített¹⁰³. Megjegyzem továbbá, hogy a Ref.[¹⁰⁰]-ban levezetett eredmény, numerikus szimulációs adatokkal összemérve¹⁰⁴ és kis U -ra jó egyezést adott.

Viszont hamarosan az is kiderült, hogy az egyszennyeződéses Anderson modell és a Kondo modell analógiáját nem szabad egyszerűen extrapolálni a periodikus Anderson modellre, hiszen a rendszerben nincs annyi elektron hogy a Kondo kompenzációt a rácsban úgy megtegye mint egyetlen szennyeződés esetében¹⁰⁵. Az alapállapot energia szintjén áttételesen, ez az észrevétel például abban nyilvánult meg, hogy V -re végzett egyszerű perturbációs számítás^{104,106,107} az exponenciális $-U/V^2$ -es tag helyett lineáris $-V^2/U$ járulékot jelentetett meg, amiről a Gutzwiller közelítéssel tárgyalt Gutzwiller hullámfüggvény nem tudott számot adni. Lényeges továbbá megjegyezni, hogy nagy U esetében sem az $\exp(-U/V^2)$ járulékos, sem a $-V^2/U$ járulékos tag nem adott megfelelő leírást¹⁰⁴.

Az alapállapot energia elméleti leírásának további javítása, úgy hogy az a nagy U tartományon is megfelelő eredményeket adjon, a kilencvenes évek legelejére tehető. Ekkor ugyanis Strack és Vollhardt¹⁰⁷ egy olyan variációs hullámfüggvényt javasolt amely induló állapota az f -elektronok (Hartree-Fock szinten leírt) spin-sűrűség hullám, illetve a c -elektronok paramágneses Fermi-tenger állapotából áll (itt f a korrelált, míg c a nemkölcsönható sáv elektronjait jelöli), és erre hat egy a variációs paramétereket tartalmazó korrelátor amely a hibridizációs tagot, illetve a lokális f -elektron energiát optimalizálja. Ezzel, a kis és nagy U tartomány leírása megfelelően megtörtént, de közepes U értékekre nagy különbségek maradtak jelen a szimulációs¹⁰⁴ adatokhoz képest.

A variációs leírás további fejlesztését a Müller-Hartmann csoportja végezte el¹⁰⁸. Ők megmutatták, hogy a Ref.[¹⁰⁷] hullámfüggvényhez egy új tagot hozzáadva, a legáltalánosabb kétrészecske-szorzas hullámfüggvényt kapjuk eredményül amely bilineáris keltő-operátor szorzatból áll és amely itineráns antiferromágnes rendeződést megenged a szimmetrikus periodikus Anderson modell esetében (félig töltött rendszerre). Ez a variációs hullámfüggvény, mindannak ellenére hogy kétrészecske korrelációs hatásokat nem tartalmazott (és ez volt a gyengéje), kis mértékben javított a középső U tartományon az alapállapot energia viselkedésén.

Ez az a pillanat amikor az én munkám kezdődött. Én egy olyan variációs hullámfüggvénnyel dolgoztam amely a Müller-Hartmann-féle hullámfüggvényt tekintette kiindulópontul, és erre, a korrelációs hatások figyelembevétele végett egy Gutzwiller korrelátort alkalmazott. Az eredmények, amelyek tudomásom szerint ma is a periodikus An-

derson modell legjobb variációs leírását adják, 1993-ban jelentek meg publikálásban¹⁰ (lásd IX. fejezet).

5. Gutzwiller hullámfüggvénnyel jellemzett kétdimenziós Hubbard modell

A Hubbard modell jellemzésére, a hatvanas évek elején Gutzwiller¹⁰⁹ egy variációs hullámfüggvényt („GWF” formában rövidíti a szakirodalom) javasolt (mely ma a nevét viseli) s amely a nemkölcsonható sokrészesek és fermionikus hullámfüggvényre egy, a direkt $\mathbf{r}$ -térben értelmezett lokális korrelációs faktorról hat. Habár e variációs hullámfüggvény analitikus formája első látásra egyszerűnek tűnt, mégis átlagértékek számolására túl bonyolultnak bizonyult. Ezért Gutzwiller, a GWF alkalmazása mellett (konkrétan az alapállapot energiájának kiszámítása céljából) egy külön approximációt vezetett be¹¹⁰ amely Gutzwiller közelítés néven ismeretes (és amelyet „GA” formában rövidít a szakirodalom). A GA lényege hogy teljesen elhanyagolja a térbeli korrelációkat. Megmutatták, hogy a GA lényegében olyan közelítést jelent amely a klasszikus statisztikus súlyával veszi figyelembe az átlagértékekben a különböző spin-konfigurációk járulékait¹¹¹, illetve átlagtér-elmélet ekvivalens nyeregpontra közelítéssel egyenértékű¹¹².

E ponton alá kell húznom, hogy a Hubbard modell egyik lényegi hivatása a fém-szigetelő átmenet jellemzése¹¹³, ezért a megjelenése pillanatától ezen átalakulás leírása egyik központi témaköre volt. A GA publikálása után Brinkman és Rice¹¹⁴ észrevették, hogy a GA Gutzwiller approximáció, félig töltött sávban és egy véges lokális Coulomb taszítás felett, fém-szigetelő tranzíciót ír le. Ez okból kifolyólag, a Gutzwiller variációs hullámfüggvény, a GA közelítéssel alkalmazva lett a prototípusa a korrelációs hatások által okozott fém-szigetelő tranzíció leírásának¹¹⁵.

A tudományos közösséget azonban a nyolcvanas évek elejétől komolyan kezdte érdekelni, hogy a Hubbard modellben, a Gutzwiller hullámfüggvénnyel kapott fém-szigetelő átmenet a Gutzwiller közelítés (GA) következménye-e, vagy ténylegesen a GWF jellemzője. A kérdés tisztázása céljából meg kellett próbálni GWF-el átlagértékeket számolni GA közelítés nélkül. Az első ilyenzerű számítások Fulde csoportjából indultak^{116,117}, numerikusak voltak és 1D véges gyűrűkre vonatkoztak. Amint látható, mindannak ellenére, hogy a Hubbard modell 1D egzakt megoldása már ismert volt¹¹⁸, az egydimenziós Hubbard modellt érintőleg továbbra is intenzív munka folyt hiszen a modell korrelációs viselkedéséről csak nagyon kevés információ volt ismert¹¹⁹, és ezt közelítések alapján is próbálták kihámozni.

A GWF-el de GA nélkül végzett számítások tovább pontosodtak. Hashimotonak¹²⁰ analitikus és numerikus módszerek kombinációjával a termodinamikai limesz esetére sikerült közelítő eredményeket levezetni úgy, hogy a ferromágnesesség fellépésének lehetőségét vizsgálta. Aztán perturbációs módszerek alkalmazásával Baeriswyl és Maki kis Hubbard U esetre vezetett le alapállapot energiájára vonatkozó eredményeket¹²¹. Közben, numerikus úton korrelációs függvényeket is sikerült számolni 1D-ben és végtelen U -ra¹²², illetve véges U esetre¹²³.

Igy jutunk el 1987-ben addig a pontig, amikor Vollhardt csoportja pontosan kiszámolta 1D esetben a Hubbard modell GWF jellemzőit GA nélkül analitikusan és egzaktul^{124–126}. Az

eredmények azt mutatták, hogy a Gutzwiller variációs hullámfüggvény, Gutzwiller közelítés nélkül nem ad fém-szigetelő átmenetet és ezáltal, a GWF csak fémes állapotot képes leírni. Mivel az 1D eset eléggé specifikus, ekkor merült fel a szükségessége egy a Vollhardték számításához pontosságban közelálló, de két dimenzióban végzett hasonló elemzésnek.

Ez az a pillanat amikor a GWF felhasználásával, de GA nélkül a 2D Hubbard eseten kezdtem el dolgozni. Az eredmények a kilencvenes évek elején jelentek meg^{7,8} és egyértelműen igazolták, hogy $D = 2$ dimenzióban is, a GWF a Gutzwiller közelítés (GA) nélkül nem ad fém-szigetelő átmenetet és a rendszer tetszőleges U -ra fémes jellegű marad. Tudomásom szerint, két dimenzióban, a Gutzwiller hullámfüggvénnyel, de Gutzwiller közelítés nélkül, ilyen pontosságú számítás termodinamikai határesetben és tetszőleges Hubbard U -ra egyedülálló (lásd a X. fejezetet).

B. Közelítésmentesen levezetett eredmények előzményei

1. Egzakt filiform klaszterképződés

1994 előtt is léteztek olyan tematikák amelyek rögzített modellkörülmények között definiált klaszterképződési folyamathoz kapcsolódtak, és ennek keretei között pontos megoldásokat kerestek. Ilyen körülmények között szolgáltatott és 1994 előttről származó egzakt megoldás viszont, csak egy ismeretes. Ez a modellszámítás Wu csoportjához fűződik¹²⁷, 1987-ben volt publikálva, továbbá a „bűnös” szomszéd néven ismeretes a szakirodalomban: Egy adott pillanatban N személy p valószínűséggel lelövi a legközelebbi szomszédját (a „lövés” aktusa felel meg a „kötés”-nek), s a nyomkövetett kérdés az volt hogy mi a valószínűsége annak, hogy egy adott személy a „lövés” után életben maradjon. Egy pontos megoldás sokszor nagyon sokat érلódik. A példában felhozott esetben például két évtizedet, hiszen a probléma feltevése 1967-re tehető¹²⁸, igaz, 1986-ban jutalmat tűztek ki a megoldásért¹²⁷.

Én olyan körülmények között foglalkoztam e témakörrel mikor nem N , a részecskeszám rögzített, hanem a koncentráció. Ez esetben annak a valószínűsége, hogy a $D = 3$ dimenziós rendezetlen rendszerben egy egyednek, r távolságig ne legyen szomszédja ismert volt már a negyvenes évektől, és fizikai vonalon legelőször asztrofizikai klaszterizációk elemzésénél alkalmazták¹²⁹. Ezen geometriai valószínűséget a hetvenes évek végén Abrikosov csoportja kezdte el spin-rendszerekre használni¹³⁰, miközben rövid hatótávolságú spin-spin kölcsönhatás következményeit vizsgálta rendezetlen rendszerekben¹³¹. Ezen munka során kristályosodott ki, hogy a hőmérséklet kötést „vághat”, illetve, hogy értelmes kis koncentrációs határesetben csak a legközelebbi szomszédval vett kölcsönhatást figyelembe venni egy klaszterképződési folyamatban, rövid hatótávolságú kölcsönhatások jelenlétében¹³².

Így jutottam el arra a következtetésre, hogy ha modellszinten a klaszterképződést a legközelebbi szomszéd bevonására korlátozom (azaz a klaszter filiform), továbbá a hőmérsékletet kötővágó formában használom, olyan modell áll elő, ami hőmérsékletfüggő formában esetleges megoldhatósággal kecsegtet. A megoldás kikristályosodása éveket vett igénybe, továbbá nagyon sok időbe telt amíg kísérleti adatokat sikerült gyűjteni az alkalmazhatóság bizonyítására. Az anyag publikálásra 1994-ben került¹⁵ (lásd XI. fejezet).

a) A módszerre vonatkozó előzmények

Az elkövetkezőkben a pozitív szemidefinit operátorok módszerével különböző körülmények között levezetett eredményekről lesz szó, így, bevezetőként, a módszerre vonatkozó előzményeket mutatom be.

A sokrészecskés integrálható rendszerekre vonatkozó egzakt megoldásoknak óriási szakirodalma van¹³³. Ez esetben az egzakt megoldás a teljes energiaspektrum kifejezését jelenti az energiaértékekhez tartozó sajátvektorokkal együtt. De az integrálhatóság végeredményben egy túlhatározottságot jelent amely lényegében megköveteli a mozgásállandók számának a szabadságfokok számával vett egyenlőségét¹³⁴, ami sokrészecskés esetben Avogadro szám nagyságrendű. A legtöbb esetben ez csupán specifikus és egydimenziós modellekre teljesül, továbbá a fizikai leírásban használt modellek nagyon nagy hányada ezzel a túlhatározottsággal nem rendelkezik. Ezen utóbbi modellek a nem-integrálható rendszerek gyűjtőnevet viselik és (elnyomó többségük miatt) a fizikai jelenségek megértése és leírása szempontjából kulcs-szerepet játszanak. Például, a periodikus Anderson modell még egy dimenzióban sem integrálható, a $t - J$ modell csak egydimenziós paraméterterének egyetlen pontjában integrálható, az egysávos Hubbard modell csak egydimenzióban integrálható, stb. Viszont, a nem-integrálható modellek esetében is a pontos eredmények fontos szerepet játszanak a leírási folyamatokban és a modellfejlesztésekben is. De, amíg az integrálható rendszerek kezelési módja a Bethe-ansatz-hoz kapcsolódó módszertani eljárások révén lényegében kikristályosodott formában létezik, addig a nem-integrálható rendszerek esetében alkalmazható eljárások módszertana ma még majdnem teljesen nyitott fejezet. Ezen a területen kínál lehetőséget a pozitív szemidefinit operátorok módszere. Segítségével az alapállapotra (esetleg e felett, az alacsonyan fekvő gerjesztett állapotokra) vonatkozólag van lehetőség pontos információt gyűjteni, azt is csak a paramétertér bizonyos tartományain (szeletein).

A pozitív szemidefinit operátorok fizikában alkalmazott módszertanának történetét általában 1992-től mérik (habár ezen tárgykörhöz kapcsolódó eljárásokat előbb is alkalmaztak¹³⁵). 1992 a Brandt és Gieseke¹³⁶ cikkének megjelenési időpontja, kik a hiperkübös $D \geq 2$ dimenziós Hubbard $U = \infty$ esetében vezettek le pontos eredményeket a Hubbard és periodikus Anderson modellre, melyek halmazát egy évre rá növelte (ugyancsak $U = \infty$) esetben Strack¹³⁷. Annakidején ez a módszer a következő képpen működött^{136,137}: a Hamilton operátort pozitív szemidefinit formára hozták ($\hat{H} = \hat{P} + C$, ahol $\hat{P}$ egy pozitív szemidefinit operátor és C egy skalár) és ezáltal az E_g alapállapot energiájának egy pontos alsó korlát adódott ($C \leq E_g$). Ezután, a variációs elv alapján, egy variációs $|\Psi_{var}\rangle$ hullámfüggvénnyel pontos felső korlátot számítottak ki $E_{var} = \langle \Psi_{var} | \hat{H} | \Psi_{var} \rangle / \langle \Psi_{var} | \Psi_{var} \rangle \geq E_g$ alapján az alapállapot energiához. Ezáltal $C \leq E_g \leq E_{var}$ egyenlőtlenségek fennállása mellett, a paramétertérben egymásba tolták a C és E_{var} értékeket. Tehát kezdetben, ez a módszer az alapállapot energiája adott paramétertartományon vett levezetésére volt csupán csak alkalmas, ezért alapállapot hullámfüggvényről nem is beszéltek tényszerűen, hanem

csak azt említették meg¹³⁷ hogy példázni tudnak egy hullámfüggvényt $|\Psi_{var}\rangle$, amely az $E_g = C = E_{var}$ sajátértéket visszaadja. Ebből eredőleg, a módszert magát, a variációs módszer továbbfejlesztéseként is tarthatnánk számon (legalábbis, a kilencvenes évek első felében létező variánsában). Ez a megjegyzés azért is helyénvaló, mert a módszernek sok más válfaja is kifejlődött, amelyben a pontos alsó korlát meghatározása más úton történt, pl. a Gerschgorin tétel segítségével, melyet e vonatkozásban Ovchinikov használt először^{138,139}.

Mivel volt olyan eset amikor $|\Psi_{var}\rangle$ unicitását átlátni lehetett $E_g = C = E_{var}$ esetében, a felső korlát megállapításánál használt hullámfüggvényt alapállapotú hullámfüggvényként keztek kezelni^{139,140}. A módszer úgy fejlődött tovább, hogy valamilyenfajta előre elképzelt hullámfüggvényre álltak rá és a Hamilton operátort addig „gazdagították” kibővítő tagokkal, míg az előre elképzelt hullámfüggvény alapállapotú hullámfüggvény nem lett. Tipikus példa erre az eta-pár szupravezető¹³⁹, a töltés sűrűség hullám¹⁴⁰, vagy a ferromágnes¹⁴¹ esete. Ez a tendencia sokáig megmaradt^{142,143} és bizonyos csoportok tevékenységében ma is él¹⁴⁴. Ez a periódus (habár sok esetben technikai aspektusokat tisztázott) nem volt modellközpontú. Inkább a hullámfüggvényre koncentrált, továbbá a pozitív szemidefinit formára való átalakítás a Hamilton operátorba beépített (sokszor nagyszámú) kiterjesztési tag segítségével történt. Ezáltal, az alkalmazott pozitív szemidefinit operátor tagok egyszerű „szakasz” (kötés, bond, azaz két különböző pontban ható operátorpárból álló) típusúak voltak, és az eljárás többnyire nem volt modell elemzésre alkalmazható. El kell azonban mondanom hogy e fejlődési szakasz sok matematikai aspektust tisztázott és jómagam is sokat tanultam e periódus alatt publikált eredményekből^{2,3,145–149}.

Ezen háttérre alapozva, a módszert én úgy alakítottam, hogy modellközpontú legyen^{2,3,11,12}, azaz nem egy előre elképzelt alapállapotú hullámfüggvény legyen a kiindulópont, hanem egy modell Hamilton operátor. Ennek első feltétele az volt, hogy a modell megválasztása után az első célkitűzés a Hamilton operátor pozitív szemidefinit formára való átalakítása legyen modell-idegen bővítési tagok nélkül, továbbá teljesen nélkülözve e lépésben a hullámfüggvényre vonatkozó prekonceptiókat. E mozzanat végrehajtása végett én alkalmaztam először blokk operátorokat. A pozitív szemidefinit formára való átalakítás után, a felső korlát meghatározásához használatos variációs lépést kihagytam. Ezzel szemben arra koncentráltam, hogy a kialakított pozitív szemidefinit forma mit ad önmaga, saját alapállapotaként eredményül. Azaz, a $\hat{P}|\Psi_g\rangle = 0$ legáltalánosabb megoldásában (ez adja a módszerben az alapállapotú hullámfüggvényt), $|\Psi_g\rangle$ meghatározását helyeztem előtérbe, és ezen egyenlet másodkvantált szinten vett megoldására dolgoztam ki módszereket. Ezen eljárás egy plusz lépéssel egészítette ki a módszert, hiszen $|\Psi_g\rangle$ levezetése után, legtöbbször ránézésre nem látszik, hogy ezen állapotvektor milyen fizikai tulajdonságokat kölcsönöz a rendszernek, ezt egy későbbi lépésben, átlagértékek kiszámítása révén kell tisztázni.

Így alakult ki az a módszer amelyet a módszertani eljárások során ismertetek részletesen (V B. alfejezet).

b) Az eredményekre vonatkozó előzmények

A periodikus Anderson modellre vonatkozólag, a saját munkám^{11,12} megjelenése előtt vagy csak $U = \infty$ esetben^{136,137,146}, vagy csak alacsony dimenzióban ($D \leq$

2)^{150,143,144,147–149,2,3} voltak ^{egzakt} eredmények ismeretesek, és ezeket (a modell nehézfermionos és ritkaföldfém tartalmú anyagok jellemzésénél vett kitüntetett fontossága mellett) főként a modell még egy dimenzióban is fennálló nem-integrálható mivoltának kihívása motiválta és generálta¹⁵¹. Az első véges nem-zéró U esetben és 3D-ben publikált eredmények az én munkámhoz kapcsolódnak^{11,12}, 3/4 és 1/4 sávtöltésre vonatkoznak és azért is gondolok mindig meleg szívvvel rájuk mert a végeredmények szintjén végül is egy 55 egyenletből álló csatolt, nemlineáris és komplex síkon értelmezett egyenletrendszer megoldásából származnak.

Az eredmények (3/4 sávtöltésre) egy szigetelő és egy nem-Fermi folyadék vezető, illetve (1/4 sávtöltésre) egy ferromágneses fázist adtak eredményül. E fázisokra vonatkozó előzmények a következők voltak:

Egy olyan alapjában véve fémes jellegű rendszerben mint a periodikus Anderson modell, egy szigetelő fázisnak a fém-szigetelő átmenet jelenléte szempontjából van fontos szerepe. Ritkaföldfémek esetében mint a Ce , ezen átmenet az $\alpha \rightarrow \gamma$ tranzíció néven ismeretes. Ezen tranzíció elméleti vizsgálata a hetvenes évek elejétől folyik¹⁵², de az ezredforduló környékén, numerikus és különböző közelítések szintjén az elemzések intenzitása nagymértékben megnőtt^{153–155}. Ennek oka az volt, hogy hasonlóságok jelentkeztek a Hubbard modellben lezajló és a periodikus Anderson modellben végbemenő fém-szigetelő átmenetek között, mégpedig akkor, ha az utóbbiban, a hopping és hibridizációs tagok mindegyike egymásmelletti csomópontokat is összeköt^{156–159}. Egzakt eredmények nem voltak ismeretesek, és intenzíven vizsgálták, hogy a jelenség leírására elegendő e a periodikus Anderson modell, vagy kiterjesztő járulékok bevezetésére van szükség. Ekkor született a saját eredményem, amely az átmenet léte mellett igazolta^{11,12}, hogy az e tranzíciónál tapasztalt kompresszibilitási ugrás is tisztán a periodikus Anderson modellből levezethető.

A $D > 1$ dimenziós kölcsönható fermionikus rendszerek nem-Fermi folyadék szerű viselkedése szintén intenzív vizsgálatok célpontja, főként azért, mert sok erősen kölcsönható rendszer, mint pl. a magas hőmérsékletű szupravezetők normálállapota (aláhúdom, hogy ezek $D > 1$ dimenziós rendszerek) nem-Fermi folyadék¹⁶⁰. De pontos módon tárgyalt és leírt nem-Fermi folyadék csak 1D-ben ismert. Ez a Luttinger-folyadék^{161,162}. Hogy hogyan jöhet létre nem-Fermi folyadék $D > 1$ dimenzióban pillanatnyilag vita tárgya. A szakirodalomban több olyan javaslat is született amely szerint $D > 1$ esetben fellépő nem-Fermi folyadék tulajdonság „lapos-sáv” viselkedéssel kapcsolatos^{163–165}. Ezen a vonalon szolgáltatam közelítésmentes eredményeket^{11,12}, olyan nem-Fermi folyadék háromdimenziós fázis kimutatásával, amelyre a Luttinger-tétel¹⁶⁶ alkalmazhatósága sem áll fenn.

A periodikus Anderson modellben 1/4 sávtöltés körül fellépő ferromágneses viselkedés elméleti tanulmányozására vonatkozó munkák kezdete a kilencvenes évek elejére vezethető vissza. A jellemzések a Kondo rács szintjén kezdődtek¹⁶⁷, majd a periodikus Anderson modellben először jelzett ferro fázis $U \rightarrow \infty$ -ben került publikálásra¹⁶⁸. Az első véges U -ra publikált ferromágneses fázis levezetése slave-boson módszerrel történt 1993-ban és a Wölffe csoportjából származik¹⁶⁹. Az 1/4 sávtöltés körüli ferromágneses viselkedés számos közelítéssel jelezve volt, először 1997 körül^{170–174}, majd az ezredforduló után^{175–178}. Látható, hogy a témakör intenzíven foglalkoztatta a szilárdtestfizikai közösséget, de egzakt eredmény

a területen csak 1D-ben született és csak $\mathcal{T} = \infty$ esetben¹⁵⁰. Az első 3D-ben és véges U -ra levezetett pontos eredmény az enyém volt és 2005-ben jelent meg publikált formában¹² (lásd XII. fejezet). Az eredmény a D. C. Mattis mágnesesség könyvébe is bekerült¹⁷⁹.

3. Lokalizáció-delokalizációs átmenet rendezetlen kölcsönható és kétdimenziós rendszerekben

Mivel a természetben a rendezetlenséghez képest inkább a kristályos állapot a kivétel, nem pedig a szabály¹⁸⁰, a rendezetlenség tanulmányozása mindig is erőteljesen folyt¹⁸¹. E területen a kétdimenziós rendszerekre fordított figyelem kihangsúlyozott. Ennek az az oka, hogy az 1979-ben született¹⁸², annakidején általános érvényűnek hitt és ma „nem-kölcsönható skálatörvény” néven ismert törvényszerűség kétdimenziós rendezetlen rendszerekben megtiltja a fém-szigetelő átmenetet, de a kilencvenes évek közepétől, kísérleti szempontból világossá vált, hogy ez az állítás, teljes általánosságában nem igaz¹⁸³. A feltételezések szerint, a kísérletes tapasztalt fém-szigetelő átmenet a kölcsönhatás következménye¹⁸⁴, de mikéntje nem rendelkezik általánosan elfogadott scénárióval.

Az elméleti leírás szintjén, a rendezetlenség közelítésmentes jellemzésének nehézségeibe ágyazva, a rendezetlen rendszerek tanulmányozása nagyrészt különböző approkszimációkon alapszik. Az utolsó évtized során azonban kiderült, hogy ez nem egy szerencsés helyzet, hiszen nemcsak az 1979-ben született skálatörvényt¹⁸² támadták élesen a kilencvenes évektől az új kísérleti adatok, hanem más, addig szentesített és diskúció felettinek hitt közelítési eljárások is komolyan érintve lettek, még a kismértékű rendezetlenség jelenlétében végzett Boltzmann-féle leírása az alacsony hőmérsékletű fajlagos ellenállásnak is¹⁸⁰. Továbbmenőleg, a szakirodalomban világosan kidomborodott, hogy a rendezetlenség nem-perturbatív kezelése határozott előrehaladást hozhat a rendezetlen rendszerek viselkedésének megértésében és leírásában¹⁸⁵. Ezzel párhuzamosan, több olyan eset ismert, mikor a hullámfüggvény rendezetlenség és kölcsönhatás jelenlétében vett pontos megadásától várnak lényegi előrelépést a rendezetlenség hatásának megértésében, pl. kritikus pontok közelében¹⁸¹, vagy kvantum interferenciák jelenlétében¹⁸⁶.

Ezen háttér mellett, az első lépések a rendezetlen rendszereket érintő egzakt eredmények levezetésében már a nyolcvanas évek elejétől megszülettek. Ezen a vonalon főként különböző nem-periodikus modelleket tanulmányoztak. E munkákban a nem-periodicitás vezette be tulajdonképpen a rendezetlenséget a Schrödinger egyenletbe, a nem-periodikus mivolt okozója pedig különböző féle képpen volt figyelembe véve, pl. a potenciálban vett nem-analitikus viselkedés formájában¹⁸⁷, nem-komenzurált potenciál jelenlétével¹⁸⁸, kváziperiodikus potenciál bevezetésével¹⁸⁹, mozaik-jelleghez kötött topologikus rendezetlenség formájával¹⁹⁰, lokális bond-orientációs rendezetlenség bevezetésével¹⁹¹, stb. Megemlítem, hogy ezen lehetőségek nem tekinthetőek egymástól teljesen függetleneknek, mert közöttük sokszor kapcsolatokat, vagy összefüggéseket lehet kimutatni. Aláhúzom továbbá, hogy a rendezetlenség hatásának ezen leírási módját, habár első látásra kezdetlegesnek tűnik, elhamarkodott egyszerű játékszerű modellezésnek tekinteni. Ennek egyrészt az az oka, hogy sok reális fizikai rendszer létezik amely ilyen (az előbbiekben felsorolt) tulajdonságokkal rendelkezik^{181,187,188,191}, másrészt konkrét esetek ismertek, amelyekben a rendezetlenség

ilyenszerű bevezetése (pl. kvázi-periodicitáson keresztül) pont olyan viselkedést kölcsönöz a rendszernek, mint a teljesen rendezetlen potenciál^{187,188}.

A dimenzió szerinti megosztást követve, a $D = 1$ dimenziós egzakt eredmények többsége¹⁸¹ a Fibanocci-féle rácshoz kapcsolódik^{187,192,193}. A $D = 2$ esetben amelyre itt koncentrálok, az első egzakt eredmények kvázikristályos rendszerre vonatkoztak. Kezdetben e vonalon a struktúrával kapcsolatos tételeket vezettek le, mint pl. a Conway tétel^{194,195}. Később, a nyolcvanas évek második felétől az ezredfordulóig, főként Kohmoto és Sutherland tevékenységének köszönhetőleg egzakt állapotok és alapállapotok levezetése is megtörtént a 2D Penrose rács esetére^{196–199}. A Penrose rács a kvázikristályos rendszerek prototípusa²⁰⁰, lényegében egy széles és egy keskeny rombusz síkbefedő, de rendezetlen elhelyezéséből jön létre és az érdeklődés központjába azért került²⁰¹ mert sok, a természetben megfigyelhető szituációban előfordul, pl. túlhűtött folyadékok vagy fémes tulajdonságú üvegek esetében¹⁹¹.

Hangsúlyozni szeretném, hogy a 2004 előtt publikált és az előbb bemutatott egzakt eredmények mind independens elektron közelítésben születtek, azaz olyan aperiodikus rendszer egzakt alapállapotait képezik amely Hamilton operátora csak kinetikus tagból áll és $\mathbf{r}$ -térben vett egyetlen elektron mozgását írja le.

Ilyen előzmények mellett született az én munkám⁵, amely első esetben szolgáltat egzakt eredményeket multielektronikus formában 2D rendezetlen és kölcsönható rendszerre. A megoldás lehetőségét az adta, hogy a pozitív szemidefinites felbontást olyan blokk operátorokkal végeztem melyek paraméterei lokálisak. Megoldást egy esetben tudtam szolgáltatni, mégpedig akkor, ha az összes lokális egyrészecske potenciál ϵ_i pozitív, azaz taszító jellegű. Tudomásom szerint ez az egyedüli pontos eredmény 2D-ben rendezetlen és kölcsönható esetben. Az eredmény fém-szigetelő átmenetet ad (XIII. fejezet).

4. Sakktábla és stripe állapotok két dimenzióban

A „stripok”, csíkszerű képződmények kétdimenziós rendszerekben²⁰², az önrendező struktúrák önmagukban is érdekes fejezetéhez tartozó képződmények, a magashőmérsékletű szupravezetők viszonylatában kerültek intenzív módon a tudományos közösség érdeklődési központjába²⁰³. Ilyen texturák nemcsak szupravezető rézvegyületek, hanem manganátok²⁰⁴, nikkel vegyületek²⁰⁵, mágneses anyagok²⁰⁶, sőt ritkaföldfémekben is²⁰⁷ jelen vannak. Bizonyos esetekben sakktábla formában is megjelenhetnek²⁰⁸, de ugyanakkor olyan esetek is ismertek amikor a textura rendezetlen paca (folt, csepp, klaszter) formát is ölthet^{209,210}. Magashőmérsékletű szupravezetőkben gyakran fordulnak elő, ezért több csoport feltételezi, hogy a nagy szupravezető T_c kialakításában is szerepet játszanak^{211,212}.

E képződmények elméleti leírása a nyolcvanas évek végétől megkezdődött²⁰², de a magashőmérsékletű szupravezetők tanulmányozása miatt, az ezredforduló után vonzotta igazán az érdeklődést^{203,204}. Hosszú hatótávolságú kölcsönhatások jelenlétében „stripe” nem jöhet létre, de ha ilyen típusú kölcsönhatás nincs jelen, az elektron koncentráció függvényében vagy „stripe” alakul ki, vagy rendezetlen csepp (klaszter) struktúra^{210,213}. Vitatott kérdés volt, hogy minek függvényében választ a rendszer a két lehetőség között.

Ilyen előzmények mellett jelent meg a saját munkám¹⁶, amely tudomásom szerint ma is az

egyedüli egzakt eredményeket tartalmazó munka a területen, kétdimenziós rendszerekre. A levezetett eredmények szerint, kis sávtöltés mellett (ahol ilyen textura megjelenik), a stripe és rendezetlen klaszter típusú képződmények ugyanazon degenerált alapállapot járulékai. Ezek közül a stripe akkor választódik ki, ha a rendszerben olyan fizikai tényezők vannak jelen mint pl. disztorziós vonalak, dimerizáció, vagy sűrűség hullámok. Továbbmenőleg, a sakktábla állapot egy specifikus stripe állapotnak felel meg (XIV. fejezet).

5. Négyzetes Hubbard láncok alapállapotai

Az ezredfordulótól kezdődőleg a nanotechnológiai potenciális alkalmazások során mind jobban előtérbe kerültek a molekuláris periodikus láncok²¹⁴. A témakör a vezető polimérek felfedezése miatt került az érdeklődés központjába, és ezt a területet A. Heeger, A. MacDiarmid és H. Shirakawa révén épp 2000-ben tüntették ki a kémiai Nobel díjjal. Ezek a rendszerek lényegében valamilyen bonyolultabb többatomos cella periodikus ismétlődése révén kialakuló kvázi-egydimenziós láncot képeznek, amelyek többsége organikus. Ez utóbbi tény alkotta (és alkotja) a vonzóerőt itt, hiszen eddig elképzelhetetlen alkalmazási lehetőségekkel kecsegtet: műanyag szupravezető, félvezető²¹⁵ vagy ferromágnes²¹⁶, műanyag és ezáltal flexibilis elektronika²¹⁷, oldódó elektronika mely pl. a testbe helyezhető, lokálisan gyógyszert adagol, majd feloldódik²¹⁸, stb.

A legegyszerűbb ilyenszerű láncok lényegében gyűrű formájú cellával rendelkeznek. Ezek közül a háromszög a legsimplább, így e terület tanulmányozása a háromszög cellájú láncokkal kezdődött, lényegében még a kilencvenes évek közepén^{219–221}. Főként a ferromágnesesség kialakulásának lehetősége miatt vizsgálták^{222,223} és lényegében e témakörhöz kapcsolódó érdeklődés a mai napig is fennmaradt^{224,225}.

A négyzetes cellájú láncok tanulmányozása később kezdődött és az ezredforduló környékén a lokalizáció-delokalizáció tárgykörével volt kapcsolatos²²⁶. A motivációk megértése céljából megemlítem, hogy az első vezető polimérekkel foglalkozó elméleti munkák az elektronok közötti Coulomb kölcsönhatást nem tartották fontosnak e rendszerekben²²⁷. Később világossá vált hogy elhanyagolni e kölcsönhatást nem lehet, de azt gondolták hogy jelenlétét a nemkölcsönható fázis Fermi-folyadék paramétereinek renormálásával meg lehet oldani²²⁸. Ma már világos, hogy a Coulomb kölcsönhatás vezető polimérekben való jelenléte lényegi korrelációs hatásokat eredményez²²⁹, ezért a sokrészecskés rendszer tárgyaláskor kitüntetett figyelmet kell fordítani rá. Ilyen körülmények között, továbbá a korrelációk minél pontosabb tárgyalási lehetősége által motiválva, Doucot csoportjában pontosan keztek elemezni egy kétrészecske kölcsönható problémát egy négyzetes Hubbard láncban²²⁶. Érdekes módon azt találták, hogy a probléma paramétertartományának egy részén, a Hubbard kölcsönhatásnak (mint lokális Coulomb taszításnak) delokalizáló hatása van. Ebből az eredményből kiindulva, Vidal és társai azt a sejtést fogalmazták meg²²⁶, hogy a Hubbard kölcsönhatás, négyzetes láncokban, sokrészecskés esetben is előreláthatólag (és bizonyos körülmények között), delokalizáló hatással rendelkezhet.

Az előbb bemutatott sejtés alkotta a saját munkám kiindulópontját. A Hubbard kölcsönhatás delokalizáló hatása azért volt különös, mert ezt a kölcsönhatást a fém-szigetelő

átmenet tanulmányozásának lényegi szerepőjeként tartják nyilván a Hubbard típusú modellek keretei között, így általában lokalizáló faktorként emlegetik¹¹⁴. A kiinduló célom az volt, hogy a Vidal és társaitól származó sejtést valódi multielektronikus körülmények között pontosan ellenőrizsem. Így születtek meg a négyzetes Hubbard láncra vonatkozó eredményeim 2007-2008-ban^{13,14}. Ilyen lánc típusokra, ezen eredmények tartalmazzák az első kölcsönhatás jelenlétében számolt pontos és multielektronikus alapállapotokat (lásd XV. fejezet).

6. Pentagon Hubbard láncok alapállapotai

Az előbbi alfejezetben elemzett négyszöges cellájú kvázi-egydimenziós rendszerekkel párhuzamosan, a tudományos világ intenzíven tanulmányozta a pentagon cellájú 1D rendszereket is. Ennek fő oka az volt, hogy a vezető polimérek területén ilyen típusú az egyik legelterjedtebb rendszer-csoport, ilyen formában állítottak legelőször vezető polimért elő²³⁰, és kísérleti tények támasztották alá a ferromágnesesség jelenlétét e láncformákban²³¹.

Meg kell említenem, hogy e tárgykör vonzaskörét az is növeli, hogy teljesen szerves vegyület az alany, ráadásul vezető is, és aránylag egyszerűen előállítható. Mindez, a potenciális lehetőségek szintjén azt jelenti, hogy minden rendeződési forma amely közönséges fémekben előáll, itt is (elvileg) megvalósítható. Engem is ez vonzott e területre.

Az pentagon láncokban megjelenő ferromágnesesség elméleti magyarázásával, főként kis rendszereken vett egzakt diagonalizáció vagy átlagtér megközelítésben, japán csoportok kezdtek el foglalkozni közvetlenül az ezredforduló után²³². Ezt az időszakot különböző más közelítések követték, amellyek még a periodikus Anderson modellhez kapcsolódó ismereteket is próbálták hasznosítani a polimérek mágneses viselkedésének értelmezésében²³³. Az erős Coulomb kölcsönhatás illetve az erős korrelációs hatások jelenléte²²⁹ (lásd Ref.[²³⁴]ot is), azonban idokoltá tette e rendszerek pontos tárgyalását. A motiváló okok közé, ezen túlmenőleg, más aspektus is beletartozott: a numerikusan pontos (de csupán kétrészecske kontextusban levezetett) eredmények nagy koncentrációs tartományra jeleztek elő mágneses viselkedést²³⁵, az addigi közelítéssel módszerekkel levezetett eredmények pedig²³² nagykoncentrációs tartományt sohasem érintettek. Másfelől, minden előző elméleti próbálkozás a kinetikus energia Hamilton operátor ($\hat{H}_0$) által szolgáltatott alsó lapos sávot ("bare flat band") tartott kiindulópontnak^{232,233}, ennek jelenlétét azonban (pl. kísérleti oldalról sem) semmi sem támasztotta alá.

Jómagam 2005-ben kezdtem el a pentagon láncokkal foglalkozni, és a publikációim e területen 2010-től jelentek meg²²⁻²⁴. Teljesen diszperzív $\hat{H}_0$ által szolgáltatott sáv szerkezettel dolgoztam nagykoncentrációs tartományon. Az eredmények, mindamellett hogy a ferromágneses fázis pentagon láncokban való megjelenését egzakt módszerekkel igazolták, első alkalommal mutatták meg, hogy teljesen diszperzív sáv szerkezetben a kölcsönhatások képesek effektív lapos sáv képződményeket kialakítani. Az eredmények a XVI. fejezetben kerülnek bemutatásra.

A lokális Coulomb taszítás okozta esetleges delokalizációs hatás 2006 után más kontextusban is előtérbe került. Az okozó az „ionikus Hubbard modell” volt amely tulajdonképpen egy kétsávós modell mely elektronjai két alrácson mozoghatnak, Hubbard (lokális Coulomb) taszítást (U) érzékelnek, de a két alrácson lokális egyrészecske potenciáljai különböznek. E modell nem újkeletű és még maga Hubbard is tanulmányozta a nyolcvanas évek legelején²³⁶. A kilencvenes évek közepétől, főképp a modell egy-két dimenziós változata intenzív elemzés tárgya volt különböző közelítésekben^{237–242}, majd a tízes évek közepétől komoly bizonyítékok támasztották alá^{243–245}, hogy e rendszerben a Hubbard kölcsönhatás növelésével, egy adott pontban, szigetelő-fém átalakulás érhető el. A delokalizációs hatás félig töltött rendszerben jön létre, egy olyan paraméterter pontban, melyben a rendszer makroszkópusan degenerált. E pontban U növelésével a rendszer sáv-szigetelőből fémes állapotba megy át (a legtöbb adat 2D-ből származik). Ez azért rendkívül érdekes, mert az U növelésével, úgy ahogy azt a Mott tranzíció esetében tapasztaljuk²⁴⁶, a rendszer fémből megy át szigetelőbe, itt pedig épp a fordított hatást tapasztaljuk hiszen rendszerünk szigetelőből alakul fémmé.

Ez a témakör sok szempontból érdekes. i) Először is, tudvalevő, hogy a rendezetlenség lokalizál¹⁸⁵, de ezt a lokalizált állapotot (pl. 2D-ben), a kölcsönhatás fémes jellegűvé teheti¹⁸³. De a rendezetlenség mellett a periodikus potenciál is lokalizálhat sáv-szigetelő formájában. Így tehát jogos az a kérdés, hogy ez esetben, miért nem delokalizálhatna a kölcsönhatás ? ii) Ha makroszkópikus degeneráció jelenlétében kölcsönhatás kezd hatni, az mindig érdekes fizikai hatásokat okoz. Ezt tapasztaljuk pl. a Laughlin állapot esetében 2D-ben²⁴⁷, vagy a geometriailag frusztrált spin-rendszerek példájában²⁴⁸. Nem meglepő tehát, hogy érdekes hatás áll elő egy kétsávós rendszerben is (mint pl. az ionikus Hubbard modell), amikor makroszkópikus degeneráció hátterében kölcsönhatás kezd hatni a rendszerre.

Az elmondottak ragadták meg a figyelmemet és ilyen előzmények mellett, ekkor kezdtem el a problémával foglalkozni. Az érdekelt, hogy fizikailag, hogyan is lehetséges a Hubbard kölcsönhatás számára az, hogy delokalizáljon, azaz hogy megnövelje a lokalizációs hosszt. Hogy mérvadó eredmény szülessen, két dimenzióban pontos eredményt szolgáltatattam e kérdéskörre vonatkozólag. Az eredményem 2008-ban jelent meg⁶. Az eredmény érdekessége abban is rejlik, hogy félig töltött rendszerre vonatkozik, amikor is a korrelációs hatások a legerőteljesebbek (bemutatás a XVII. fejezetben).

dc_890_14

A MÓDSZEREK ISMERETÉSE

A bemutatott eredmények módszertani származtatása aránylag széles skálát ölel fel, közelítéssel és egzakt eljárásokat is tartalmaz, ezért bemutatásukat külön fejezetekben csoportosítom alább, követve azonban a közelítéssel, és pontos eredmények bemutatási rendjét.

A közelítéssel levezetett eredmények származtatásában alkalmazott módszerek ismertetése a következő IV. fejezetben található és három alfejezetre bomlik. Ezek közül az első a Green-függvényes módszert mutatja be (ismertsége miatt) röviden, a második a Gutzwiller hullámfüggvénnyel számított átlagértékek kifejezését ismerteti tetszőleges dimenzióban a Gutzwiller közelítés alkalmazása nélkül, végül a harmadik egy variációs módszernek a periodikus Anderson modellre vett alkalmazását részletezi. E módszerek közül a második a saját magam által kidolgozott, ezért ez van nagy részletességgel ismertetve.

A pontos eredmények levezetésére alkalmazott módszerek bemutatása a V. fejezetben történik. Ez a fejezet két alfejezetre bomlik, amelyek közül az első a geometriai valószínűségekre alapozott klaszternövekedés jellemzését szolgáló módszert ismerteti, a második pedig kvantummechanikai sokrészecskés rendszerekre alkalmazható és egzakt alapállapotok levezetését szolgáltató módszert mutatja be. Mindkét módszer saját fejlesztésű, ezért ismertetésük nagy részletességgel történik.

IV. KÖZELÍTÉSSEL NYERT EREDMÉNYEK LEVEZETÉSÉNÉL

ALKALMAZOTT MÓDSZEREK

A. Green-függvényes módszer

1. Bevezető

A kvantumtérelméleti módszerek statisztikus fizikában vett alkalmazásának egyik standard módszere a propagátor fogalmára alapszik mely a rendszer Green-függvényét képezi. A szakirodalomban, közelítések alkalmazása esetében nagyon gyakran használt módszerről van szó amely nagyon részletes bemutatása számos szakkönyvben megtalálható^{63,64,249}. Ismertsége miatt, a következőkben, a módszer itt felhasznált elvi lépéseit mutatom be röviden.

2. A fizikai Green függvény

Az $\hat{A}$, $\hat{B}$ operátorokkal értelmezett (fizikai) Green-függvény definíció szerint

$$G_{\mathbf{r},\mathbf{r}'}^{\sigma,\sigma'} = \langle \langle \hat{A}_{\mathbf{r},\sigma} | \hat{B}_{\mathbf{r}',\sigma'} \rangle \rangle = \begin{cases} -i \frac{\langle \Psi_0 | T(\hat{A}_{\mathbf{r},\sigma}(t) \hat{B}_{\mathbf{r}',\sigma'}(t')) | \Psi_0 \rangle}{\langle \Psi_0 | \Psi_0 \rangle}, & T = 0, \\ -Tr \{ \hat{\rho} T_{\tau}(\hat{A}_{\mathbf{r},\sigma}(\tau) \hat{B}_{\mathbf{r}',\sigma'}(\tau')) \}, & T > 0, \end{cases} \quad (1)$$

ahol a hőmérséklet (T) egyenlő zéró esetben $|\Psi_0\rangle$ a sokrészecskés és kölcsönható rendszer egzakt Heisenberg képben vett alapállapota, $T(\dots)$ az időrendezési szorzat, továbbá a $T > 0$ esetben $\hat{\rho}$ a sűrűségmatrix, $\tau = it$ a képzetes időváltozó, $T_{\tau}(\dots)$ a τ változó szerinti időrendezési szorzat, Tr pedig a trace (spur) jelölése. A továbbiakban $G_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}^{\sigma,\sigma'}$ jelöli a $G_{\mathbf{r},\mathbf{r}'}^{\sigma,\sigma'}$ Green-függvény $\mathbf{r}, \mathbf{r}'$ változók szerinti Fourier transzformáltját.

Amennyiben $\hat{A} = \hat{\Psi}$, $\hat{B} = \hat{\Psi}^\dagger$, ahol $\hat{\Psi}$ a teroperátor, a Green-függvény a normális Green-függvényt (azaz egyrészeske propagátort) jelöli. Azonban $\hat{A}$ és $\hat{B}$ másfajta megválasztása számtalan másféle (anomálisnak nevezett) Green-függvény értelmezését engedi meg, melyek különböző rendeződési formák és kondenzátumok jellemzését teszik lehetővé.

A Green-függvény meghatározása több úton lehetséges (pl. a Dayson egyenletből a szelfenergia részen keresztül), de itt a disszertációban, én a mozgásegyenletből (Gorkov-egyenlet) való meghatározást (levezetést) használom. A Green-függvény mozgásegyenlete ($T > 0$ hőmérsékleten felírva)

$$i\omega_n \langle \langle \hat{A}_{\mathbf{k},\sigma} | \hat{B}_{\mathbf{k}',\sigma'} \rangle \rangle = \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \delta_{\sigma,\sigma'} + \langle \langle [\hat{A}_{\mathbf{k},\sigma}, \hat{H}] | \hat{B}_{\mathbf{k}',\sigma'} \rangle \rangle, \quad (2)$$

ahol ω_n a Matsubara frekvenciát jelöli amely a τ változó szerinti Fourier transzformáltakat jellemzi

$$G(\tau) = \beta^{-1} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} e^{-i\omega_n \tau} G(\omega_n), \quad G(\omega_n) = \int_0^{+\infty} e^{+i\omega_n \tau} G(\tau) d\tau, \quad (3)$$

formában, továbbá $\omega_n = 2n\pi k_B T$ a bozonikus, $\omega_n = (2n+1)\pi k_B T$ a fermionikus esetben, k_B a Boltzman állandó és $\beta^{-1} = k_B T$, $\hat{H}$ pedig a tanulmányozott rendszer Hamilton operátora. A $T = 0$ esetben (2) egyenletben $i\omega_n \rightarrow \omega$ változtatás szükséges, hol ω a t időváltozónak a standard Fourier transzformált változója.

A (2) jobboldali második tagja a magasabb rendű Green függvényeket eredményezi a kölcsönható és közelítésmentes esetben. Az ezzel a módszerrel számolt és a disszertációban szereplő eredmények azonban átlagtér közelítésben („mean-field”) voltak levezetve. Ezen közelítés lényege⁶⁴ a

$$\hat{O}_1 \hat{O}_2 \rightarrow \langle \hat{O}_1 \rangle \hat{O}_2 + \hat{O}_1 \langle \hat{O}_2 \rangle \quad (4)$$

közelítés, amit a Hamilton operátor kölcsönhatási részében végzünk a (2) felhasználása előtt. A (4) alkalmazásával a (2) mozgásegyenlet jobboldalán általában új típusú Green-függvények jelennek meg. Ezekre is a (2) mozgásegyenletet felírva az eljárást addig folytatjuk amíg a Green-függvényekből kialakuló egyenletrendszer zárul. Általában így egy lineáris nem-homogén egyenletrendszerhez jutunk, amely megoldása a rendszer Green-függvényeit szolgáltatja az alkalmazott (mean-field féle) közelítésben. Megjegyzem továbbá, hogy a (4) jobboldalába további skalárokat beírva, ezek a (2)-be való behelyettesítéskor kiesnek, így a rendszer Green függvényeiben nem játszanak szerepet.

Hangsúlyoznom kell, hogy (4)-ben szereplő $\hat{O}_1$ és $\hat{O}_2$ operátorok (Fermi rendszerek esetében) általában két darab fermionikus (keltő, vagy eltüntető) operátorból állnak. Így az $\hat{O}_1 \hat{O}_2$ szorzat (fermionikus sokrészesekes rendszer tárgyalásakor) négy darab kanonikus Fermi operátort tartalmaz, két keltő és két eltüntető jellegűt. Ilyen körülmények között a (4) lényegében a négy-operátoros tagot két-operátoros tagok összegére bontja, hol az ily módon nyert operátoriális tagok járulékait szorzó koefficiensek két-operátoros szorzatok átlagértékeiből épülnek fel.

Megjegyzem továbbá, hogy (1)-ben általánosan definiált Green-függvény két $\mathbf{r}$ (Fourier transzformált szinten két $\mathbf{k}$) változótól függ. Azonban, ha a rendszer homogén és izotróp, a

Green-függvény csupán $\mathbf{r}-\mathbf{r}'$ (illetve $\mathbf{k}$ -terben $\mathbf{k}-\mathbf{k}'$) változótól függ^{63,64}. Ez esetben $\mathbf{r}-\mathbf{r}' \rightarrow \mathbf{r}$ (illetve $\mathbf{k}-\mathbf{k}' \rightarrow \mathbf{k}$) átjelöléssel a Green-függvények egyetlen geometriai helyzetvektor (illetve impulzus) változótól függnek majd.

Az anomális Green-függvényekre vonatkozólag, a disszertációban spin-sűrűség hullám, illetve szupravezető fázis jellemzésére alkalmas anomális Green-függvények fordulnak elő. A sűrűség hullám esetében ez

$$F_{1,\mathbf{k},i\omega_n}^\sigma = \langle \langle \hat{a}_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\sigma} | \hat{a}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \rangle \rangle \quad (5)$$

típusú, ahol $\mathbf{Q}$ a „nesting” hullámvektor³⁴ [lásd (140) után tett megjegyzéseket is], szupravezető esetében pedig

$$F_{2,\mathbf{k},i\omega_n}^\sigma = \langle \langle \hat{a}_{-\mathbf{k},\sigma} | \hat{a}_{\mathbf{k},-\sigma} \rangle \rangle \quad (6)$$

formájú, $\hat{a}_{\mathbf{k},\sigma}$ lévén az elektronokat $(\mathbf{k}, \sigma)$ állapotban eltüntető kanonikus Fermi operátor.

A továbbiakban a disszertációban bemutatásra kerülő alkalmazások a fermionikus esetre vonatkoznak, így itt, a módszer bemutatása során is az alábbiakban, szintén a fermionikus esetet fogom követni.

3. Átlagértékek kifejezése a Green-függvény segítségével

A Green-függvények $T > 0$ esetben vett levezetése után, a Green-függvények birtokában, termodinamikai átlagértékeket lehet kiszámolni

$$\langle \hat{B}\hat{A} \rangle = \beta^{-1} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} G(\hat{A}\hat{B})e^{i\omega_n\eta}, \quad (7)$$

összefüggés szerint, ahol a $G(\hat{A}\hat{B})$ a $G(\hat{A}\hat{B}) = \langle \langle \hat{A} | \hat{B} \rangle \rangle$ formában értelmezett $T \neq 0$ Green-függvény. A kifejezésben szereplő konvergenciafaktorban $\eta \rightarrow +0$ értendő. A Matsubara frekvenciák szerinti összegek elvégzése szintén a standard⁶⁴ úton történik

$$\beta^{-1} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} W(i\omega_n)e^{i\omega_n\eta} = \sum_{\gamma} \text{Rez}(W(z)f(z))|_{z=z_{\gamma}}. \quad (8)$$

A (8) egyenlőségben $W(z)$ egy tetszőleges komplex változós függvény amelynek nincsenek exponenciális divergenciái és nem rendelkezik pólusokkal a képzetes tengelyen, $f(z) = 1/[1 + \exp(\beta z)]$ a komplex változóra általánosított Fermi függvény ($\hbar = 1$ egységekben dolgozom), végül a jobboldalon szereplő γ -szerinti összeg a $W(z)$ függvény $z = z_{\gamma}$ pólusai szerint történik.

A Green-függvények számítását mindig $T \neq 0$ hőmérsékleten végeztem. A mérhető átlagértékek Fermi függvényekkel vett kifejezése után $f(E(\mathbf{k}) - \mu) \rightarrow \Theta(\mu - E(\mathbf{k}))$ Heaviside theta függvényre való átmenet biztosította a $T = 0$ eredményeket (ez esetben az átlagértékek jelentése kvantummechanikai). Itt μ a kémiai potenciál, $E(\mathbf{k})$ pedig egy tetszőleges és skaláris értéket adó $\mathbf{k}$ függvény.

A $T = 0$ eset

Átlagtér elmélet jellegű közelítések mellett a $\hat{H}$ Hamilton operátor mindig $\hat{H}_{eff}$ effektív Hamilton operátorba megy át, mely kölcsönhatási része, a közelítés végrehajtása miatt, mostmár csak átlagértékekkel szorzott kétoperátoriális (két elemi kanonikus Fermi operátorból álló) tagokat tartalmaz. Ezen tagok mindegyikének átlagértékét a (7,8) összefüggések segítségével ki lehet számolni. Így $E = \langle \hat{H} \rangle$ kifejezhető, s mivel ez a rendszer teljes energiáját jelöli, energetikai stabilitás elemzés is végezhető a megjelenő rendezett fázisokon $T = 0$ hőmérsékleten. A rendezett fázisra vonatkozó energetikai stabilitás vizsgálata azt jelenti, hogy a rendezett fázis (rendparaméter különböző mint zéró értékekkel rendelkező fázis) E energiáját összehasonlítjuk a rendezetlen fázis (minden rendparaméter értéke zéró) ugyanazon $\hat{H}$ paraméterértékek mellett vett E_0 energiájával. A képezett $\delta E = E - E_0$ mennyiség $\delta E < 0$ negatív értéke mellett lesz a rendezett fázis stabil.

A $T \neq 0$ eset

Nemzéró hőmérsékleten energetikai stabilitás elemzés végzése csak a termodinamikai potenciál segítségével lehetséges. Ennek kifejezése a Green-függvények ismeretében szintén megadható, a számítás pedig általában a $\delta\Omega = \Omega - \Omega_0 = \int_0^\lambda (d\lambda'/\lambda') \langle \hat{H}_{int} \rangle$ összefüggésből kiindulva történik⁶⁴, ahol Ω_0 a normálfázis termodinamikai potenciálja, λ' a mozgó csatolási állandó, λ a fizikai csatolási állandó, illetve $\delta\Omega < 0$ jelzi a stabil rendezett fázis jelenlétét. Ebből kiindulva megmutatható⁶⁴ hogy a termodinamikai potenciál változás

$$\delta\Omega = \frac{\Delta^2}{g} - \frac{1}{L} \sum_{\mathbf{k}} \ln \frac{\cosh(\beta E_{\Delta}(\mathbf{k})/2)}{\cosh(\beta \epsilon(\mathbf{k})/2)}, \quad (9)$$

ahol g a Δ energiarés („gap”) egyenletében szereplő csatolási állandó, illetve $E_{\Delta}(\mathbf{k}) = [\epsilon(\mathbf{k})^2 + \Delta(\mathbf{k})^2]^{1/2}$, továbbá $\epsilon(\mathbf{k})$ a nemkölcsönható egyrészecske spektrum és L a ráccsomópontok száma. Többkomponensű gap esetében mikor $\Delta(\mathbf{k}) = \sum_i S_i(\mathbf{k})\Delta_i$ formájú ahol az $S_i(\mathbf{k})$ függvények lineárisan függetlenek, illetve a teljes $\mathbf{k}$ térre vett integrál végrehajtása mellett ortogonálisak, továbbá a Green-függvények pólusai a $\pm E(\mathbf{k})$ pontokban találhatók ahol $E(\mathbf{k}) = [\epsilon(\mathbf{k})^2 + |\Delta(\mathbf{k})|^2]^{1/2}$, a (9) összefüggés a következő képpen módosul⁴³

$$\delta\Omega = \sum_i \frac{|\Delta_i|^2}{g_i} - \frac{1}{L} \sum_{\mathbf{k}} \ln \frac{\cosh(\beta E(\mathbf{k})/2)}{\cosh(\beta \epsilon(\mathbf{k})/2)}. \quad (10)$$

Megemlítem, hogy teljesen általános esetben, ha a Hamilton operátor kölcsönhatási tagjában ($\hat{H}_I$) több (összesen n_I darab) csatolási állandó szerepel (g_i , $i = 1, 2, \dots, n_I$), továbbá ezek mindegyike külön-külön a Δ_i rendparamétert hozza létre, a termodinamikai potenciál változás kiszámítása

$$\begin{aligned} \delta\Omega = \Omega(\Delta_1, \Delta_2, \dots, \Delta_{n_I}) - \Omega(0, 0, \dots, 0) &= \int_0^{g_1} \frac{\partial\Omega(g'_1, 0, \dots, 0)}{\partial g'_1} dg'_1 + \int_0^{g_2} \frac{\partial\Omega(g_1, g'_2, \dots, 0)}{\partial g'_2} dg'_2 \\ &+ \int_0^{g_3} \frac{\partial\Omega(g_1, g_2, g'_3, \dots, 0)}{\partial g'_3} dg'_3 \dots + \int_0^{g_{n_I}} \frac{\partial\Omega(g_1, g_2, \dots, g_{n_I-1}, g'_{n_I})}{\partial g'_{n_I}} dg'_{n_I}, \end{aligned} \quad (11)$$

formában történik⁹³, ahol (lásd ^(64,93)) $\partial\Omega(g_1, g_2, \dots, g'_i, 0, 0, \dots, 0)/\partial g'_i = \langle \hat{H}_I(g_1, g_2, \dots, g'_i, 0, 0, \dots, 0) \rangle / g'_i$, továbbá $\langle \hat{H}_I \rangle$ kifejezése ugyanazon közelítéssel történik mint amilyen fel volt használva a (2) mozgásegyenlet megoldásakor.

A termodinamikai potenciálon kívül (de Ω ismeretében) más jellemző termodinamikai mennyiség is számolható^{63,64,249}. A fajhő a (10)-nek megfelelő körülmények között például⁴³

$$C(T) = \frac{\beta^2}{2} \frac{1}{L} \sum_{\mathbf{k}} E(\mathbf{k}) [E(\mathbf{k}) + \beta \frac{dE(\mathbf{k})}{d\beta}] \cosh^{-2} \frac{\beta E(\mathbf{k})}{2}. \quad (12)$$

A mágneses szuszceptibilitás kifejezése a rendezett fázis milyenségétől függő. Szupravezető esetében többkomponensű gapra Ref.[⁴³] tartalmazza a használt kifejezéseket és levezetéseket, míg spin-sűrűség hullám esetében a számítások Ref.[²⁵⁰] alapján történnek. Ezen módszer alapmennyiségei (a spin-sűrűség vektor irányát z iránynak tekintve)

$$\chi_1 = -\mu_B^2 \frac{1}{L} \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \beta^{-1} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} G_{\mathbf{k}, i\omega_n}^{\sigma, \sigma} G_{\mathbf{k}, i\omega_n}^{\sigma, \sigma}, \quad \chi_2 = -\mu_B^2 \frac{1}{L} \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \beta^{-1} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} F_{\mathbf{k}, i\omega_n}^{\sigma, \sigma} F_{\mathbf{k}, i\omega_n}^{\sigma, \sigma}, \quad (13)$$

amelyek alapján a mágneses szuszceptibilitás

$$\chi(T) = \frac{1}{3}(\chi_1 + \chi_2) + \frac{2}{3}(\chi_1 - \chi_2) \quad (14)$$

formában adható meg²⁵⁰. Itt $G_{\mathbf{k}, i\omega_n}^{\sigma, \sigma}$ illetve $F_{\mathbf{k}, i\omega_n}^{\sigma, \sigma}$ a rendszer normális és anomális Green-függvényei, és μ_B a Bohr magneton.

A Green-függvényes módszer a (VI, VII, VIII) fejezetekben kerül alkalmazásra.

B. A Gutzwiller hullámfüggvénnyel számolt átlagértékek a Hubbard modellre

1. Bevezető

Az alapállapot Gutzwiller variációs hullámfüggvénnyel vett származtatása egy közelítés. Ezzel a közelítéssel párhuzamosan, Gutzwiller hullámfüggvény feltételezése mellett számos más közelítést is alkalmaznak (*hangsúlyozom*: vele együttesen), ezért fontossá vált megtudni, hogy tisztán a Gutzwiller hullámfüggvény alkalmazása, semmi más közelítés igénybevétele nélkül milyen eredményt szolgáltat. Ha ezt a Hubbard modellre akarjuk megtudni, akkor: A) a Hubbard modell Hamilton operátorának tagjaira vonatkozó várhatóértéket kell a Gutzwiller hullámfüggvénnyel felírni, és B) ezen kifejezéseket semmilyen más közelítés felhasználása nélkül ki kell számítani.

A módszer bemutatása előtt hadd adjam meg a kiindulópontokat:

Maga a Hamilton operátor D dimenzióban

$$\hat{H} = \hat{H}_{kin} + \hat{H}_I, \quad \hat{H}_{kin} = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \epsilon(\mathbf{k}) \hat{n}_{\mathbf{k}, \sigma}, \quad \hat{H}_I = U \sum_{\mathbf{i}} \hat{n}_{\mathbf{i}, \uparrow} \hat{n}_{\mathbf{i}, \downarrow}, \quad (15)$$

ahol $\hat{n}_{\mathbf{i}, \sigma} = \hat{c}_{\mathbf{i}, \sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{i}, \sigma}$ az $\mathbf{i}$ csomópontra és σ spinvetületre vonatkozó részecskeszám operátor, ennek Fourier transzformáltja $\hat{n}_{\mathbf{k}, \sigma}$, $\hat{c}_{\mathbf{i}, \sigma}^\dagger$ az $\mathbf{i}$ csomóponton σ spinvetülettel rendelkező elektront keltő kanonikus Fermi operátor,

$$\epsilon(\mathbf{k}) = -(W/(2D)) \sum_{\alpha=1}^D \cos(a_\alpha k_\alpha) \quad (16)$$

a diszperzió reláció amelyben $a_\alpha k_\alpha \in [-\pi, \pi]$, a_α a geometriai tér α irányába vett Bravais rácsvektor hossza (hiperköbös típusú rendszert használók), k_α pedig a D alkotóelemű (komponensű) $\mathbf{k}$ vektor α irányba vett komponense. A W mennyiség a sáv szélesség, továbbá U a lokális Coulomb taszítás értéke.

A Gutzwiller hullámfüggvény kifejezése

$$|\Psi_g\rangle = \prod_{\mathbf{i}} [1 - (1 - g)\hat{n}_{\mathbf{i},\uparrow}\hat{n}_{\mathbf{i},\downarrow}] |\Psi_0\rangle = g^{\hat{D}} |\Psi_0\rangle, \quad (17)$$

ahol $|\Psi_0\rangle$ a nemkölsönható (és ezáltal paramágneses) rendszer normalizált alapállapota, $0 \leq g \leq 1$ a Gutzwiller variációs paraméter és $\hat{D} = \sum_{\mathbf{i}} \hat{n}_{\mathbf{i},\uparrow}\hat{n}_{\mathbf{i},\downarrow}$ a dupla betöltés operátora.

A fejezet elején felsorolt program A) része, tetszőleges D dimenzióban (azaz dimenziófüggetlen módon), a szakirodalomból (Metzner és Vollhardt munkássága nyomán) ismert¹²⁵. Az érthetőség kedvéért, ennek rövid bemutatása, az elkövetkező alfejezet tárgya.

2. A kölcsönhatási tag átlagértéke

A kölcsönhatási tag esetében $\hat{D} = \sum_{\mathbf{i}} \hat{D}_{\mathbf{i}}$, $\hat{D}_{\mathbf{i}} = \hat{n}_{\mathbf{i},\uparrow}\hat{n}_{\mathbf{i},\downarrow}$ jelölések bevezetésével $\hat{H}_I = U\hat{D}$ összefüggés áll fenn, és a kiszámítandó várható érték

$$\langle \hat{D} \rangle = \langle \Psi_g | \hat{D} | \Psi_g \rangle = \sum_{\mathbf{i}} \langle \prod_{\mathbf{j}} [1 - (1 - g)\hat{D}_{\mathbf{j}}]^2 \hat{D}_{\mathbf{i}} \rangle_0 \quad (18)$$

ahol felhasználtam hogy $\hat{D}_{\mathbf{i}}$ és $\hat{D}_{\mathbf{j}}$ felcserélhető, továbbá $\langle \dots \rangle_0 \equiv \langle \Psi_0 | \dots | \Psi_0 \rangle$ jelölés van jelen. Mivel $\hat{D}_{\mathbf{i}}^2 = \hat{D}_{\mathbf{i}}$ áll fenn, $[1 - (1 - g)\hat{D}_{\mathbf{j}}]^2 = [1 + (g^2 - 1)\hat{D}_{\mathbf{j}}]$ teljesül. Továbbmenőleg

$$\prod_{\mathbf{j}} [1 + (g^2 - 1)\hat{D}_{\mathbf{j}}] = 1 + \sum_{m=1}^L \frac{(g^2 - 1)^m}{m!} \sum'_{\mathbf{j}_1, \dots, \mathbf{j}_m} \hat{D}_{\mathbf{j}_1} \dots \hat{D}_{\mathbf{j}_m}, \quad (19)$$

ahol az összegzésen feltüntetett felülvonás $\mathbf{j}_n \neq \mathbf{j}_{n'}$ értelemmel bír (a $\mathbf{j}_n$ indexek különbözőek kell legyenek), továbbá L a csomópontok száma. Most (19) a (18)-ba helyettesíthető. Ekkor az $\sum_{\mathbf{i}}$ összeg figyelembevétele szükséges. Ezen összeg mindig két típusú járulékot ad, és pedig $\mathbf{i} \neq \mathbf{j}$ az összes $\mathbf{j}$ -re, és $\mathbf{i} = \mathbf{j}$ egy rögzített $\mathbf{j}$ -re. Az első esetben egyszerűen $\mathbf{i} = \mathbf{j}_{m+1}$ áll elő a jelölésben, míg a második esetben $\hat{D}_{\mathbf{j}}^2 = \hat{D}_{\mathbf{j}}$ érvényesül. A két tag összege adja a végeredményt, mely kifejezése

$$\langle \Psi_g | \hat{D} | \Psi_g \rangle = g^2 \sum_{m=1}^L \frac{(g^2 - 1)^{m-1}}{(m-1)!} \sum'_{\mathbf{j}_1, \dots, \mathbf{j}_m} \langle \hat{D}_{\mathbf{j}_1} \dots \hat{D}_{\mathbf{j}_m} \rangle_0 \quad (20)$$

Most bevezetve a

$$c_m = \frac{1}{L} \frac{1}{(m-1)!} \sum'_{\mathbf{j}_1, \dots, \mathbf{j}_m} \langle \hat{D}_{\mathbf{j}_1} \dots \hat{D}_{\mathbf{j}_m} \rangle_0 \quad (21)$$

jelölést, a (20)-ban lévő átlagérték kifejezése

$$\langle \Psi_g | \hat{D} | \Psi_g \rangle = g^2 L \sum_{m=1}^L (g^2 - 1)^{m-1} c_m \quad (22)$$

formára alakul, amiből látható hogy a további előrehaladás érdekében a c_m kiszámítására kell koncentrálni. A c_m kiszámítása céljából, (21) jobboldalán álló átlagra a Wick tétel alkalmazható⁶³, mely során a $\langle \dots \rangle_0$ átlag elemi kontrakciók szorzatára bontható fel az összes lehetséges kontrakciókra vett felbontásban. A nemzéró elemi kontrakciók kizárólagosan csak

$$\langle \hat{c}_{\mathbf{j}_1, \sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{j}_2, \sigma} \rangle_0 = P_{\mathbf{j}_1, \mathbf{j}_2, \sigma}, \quad \langle \hat{c}_{\mathbf{j}_2, \sigma} \hat{c}_{\mathbf{j}_1, \sigma}^\dagger \rangle_0 = -P_{\mathbf{j}_1, \mathbf{j}_2, \sigma}, \quad (23)$$

típusúak, ahol a második tagban, a $f(\mathbf{j}_1, \mathbf{j}_2) = \delta_{\mathbf{j}_1, \mathbf{j}_2}$ azért hiányzik, mert (21)-ben szereplő összegben kizárólagosan csak különböző csomópontok szerepelnek, aminek következtében mindig $f(\mathbf{j}_1, \mathbf{j}_2) = 0$, így tehát (23) járulékok δ -nélküli kontrakciókat definiálnak.

Az elmondottak következtében a (21)-ben lévő átlag kontrakciókra vett felbontása (lásd Ref.¹²⁵)

$$\langle \hat{D}_{\mathbf{j}_1}, \dots, \hat{D}_{\mathbf{j}_m} \rangle_0 = \{ \hat{D}_{\mathbf{j}_1}, \dots, \hat{D}_{\mathbf{j}_m} \}_0 = \text{Det}[P_{\mathbf{j}_1, \mathbf{j}_2, \uparrow}] \text{Det}[P_{\mathbf{j}_1, \mathbf{j}_2, \downarrow}] \quad (24)$$

eredményt adja, ahol $\{ \dots \}_0$ a Wick tételből adódó δ -nélküli kontrakciók jelölése, továbbá $\text{Det}[P_{\mathbf{j}_1, \mathbf{j}_2, \sigma}]$ egy $m \times m$ determináns amelyben $\mathbf{j}_1$ sor, illetve $\mathbf{j}_2$ oszlop indexként szerepel. A (24)-nek (21)-ben vett alkalmazása eltünteti az $\sum'$ összegről a „jelzett” jelet, hiszen egyező csomópontok esetében a (24)-ben álló determinánsok két sora vagy két oszlopa egyenlő, és a determináns ekkor adódó zéró értéke kiejti a $\mathbf{j}_{i_1} = \mathbf{j}_{i_2}$ tagot. Ennek megfelelően

$$c_m = \frac{1}{L} \frac{1}{(m-1)!} \sum_{\mathbf{j}_1, \dots, \mathbf{j}_m} \{ \hat{D}_{\mathbf{j}_1} \dots \hat{D}_{\mathbf{j}_m} \}_0 \quad (25)$$

ahol mostmár resztrikció a csomópontokra vonatkozólag nincs jelen, továbbá a $\{ \dots \}_0$ δ -nélküli kontrakciók a (24) utolsó egyenlősége szerint számíthatók ki.

A további fejleményeket az generálja, hogy $|\Psi_g\rangle$ nincs egyre normálva, így a kölcsönhatási tag várható értéke nem (22) kifejezéssel, hanem $\langle \hat{D} \rangle = \langle \Psi_g | \hat{D} | \Psi_g \rangle / \langle \Psi_g | \Psi_g \rangle$ aránnyal áll közvetlen kapcsolatban. A $\langle \Psi_g | \Psi_g \rangle$ az előbb bemutatottakhoz hasonlóan számítható ki és a rá kapott eredmény

$$\langle \Psi_g | \Psi_g \rangle = 1 + \sum_{m=1}^L \frac{(g^2 - 1)^m}{m!} \sum_{\mathbf{j}_1, \dots, \mathbf{j}_m} \{ \hat{D}_{\mathbf{j}_1} \dots \hat{D}_{\mathbf{j}_m} \}_0 \quad (26)$$

egyenlőséggel adott. A (22) / (26) osztás a kötött diagram tételnek („linked cluster theorem”) megfelelően⁶³ a nem kötött kontrakció szorzatokat kiejti. Itt megjegyzem, hogy $P_{\mathbf{j}_1, \mathbf{j}_2, \sigma}$ tag lerajzolható egy vonallal mely felé egy σ spinindexet írunk és amely $\mathbf{j}_1$ és $\mathbf{j}_2$ csomópontokat összeköti. Ezt a (24) determináns szorzatából eredő minden tagra meg lehet tenni. Ezáltal minden tagnak egy gráf (diagram) fog megfelelni. Nem kötött diagram egy olyan gráfot jelent, amely legalább két teljesen diszjunkt részből áll. Ennek megfelelően, figyelembe véve hogy a (15) Hamilton operátorban a kölcsönhatási tag $\hat{H}_I = U \hat{D}$, a (22)-ből eredőleg (és $L \rightarrow \infty$ termodinamikai határesetben)

$$\frac{\langle \hat{H}_I \rangle}{U L g^2} = \sum_{m=1}^{\infty} (g^2 - 1)^{m-1} C_m, \quad (27)$$

ahol, (25)-ből adódóan, a C_m ~~koefficiensek kifejezése~~

$$C_m = \frac{1}{L} \frac{1}{(m-1)!} \sum_{\mathbf{j}_1, \dots, \mathbf{j}_m} \{\hat{D}_{\mathbf{j}_1} \dots \hat{D}_{\mathbf{j}_m}\}_0^c. \quad (28)$$

Itt a $\{\dots\}_0^c$ -ben szereplő felső c index („connected”) csak kötött kontrakciósorozat (gráf járulék) figyelembevételét engedélyezi.

A (28)-ban szereplő kötött kontrakciós járulék $\{\hat{D}_{\mathbf{j}_1} \dots \hat{D}_{\mathbf{j}_m}\}_0^c$, a (24) alapján kerül kiszámolásra

$$\{\hat{D}_{\mathbf{j}_1} \dots \hat{D}_{\mathbf{j}_m}\}_0^c = [\text{Det}[P_{\mathbf{j}_1, \mathbf{j}_2, \uparrow}] \text{Det}[P_{\mathbf{j}_1, \mathbf{j}_2, \downarrow}]]_c \quad (29)$$

összefüggés szerint, ahol a jobboldalon szereplő „ c ” index azt jelenti, hogy amiután a két determinánst kiszámoljuk és összeszorozzuk, a nem kötött tagokat el kell hagyni, azaz csupán a kötött járulékokat vesszük figyelembe.

Amint azt a (26) után jeleztem, a járulékot adó tagok gráf formájában lerajzolhatóak, így minden átlagérték, ezáltal a (28)-ban adott C_m koefficiens is diagramok összegeként kezelhető. E célból $P_{\mathbf{j}_1, \mathbf{j}_2, \uparrow}$ például egy folytonos $\mathbf{j}_1$ és $\mathbf{j}_2$ pontokat összekötő, de nem irányított szakasszal ábrázolható, és hasonlóan, $P_{\mathbf{j}_1, \mathbf{j}_2, \downarrow}$ egy szaggatott, $\mathbf{j}_1$ és $\mathbf{j}_2$ pontokat összekötő nem irányított szakasszal jelölhető. Ily módon, a C_m -be adódó diagram járulékok olyan kötött gráfok, amelyeknek m -ed rendben m -csomópontja (vertexe), m -darab folytonos és m -darab szaggatott vonala van úgy, hogy minden vertexbe két folytonos és két szaggatott vonal fut be. A diagramok értékének kiszámítása a $\mathbf{k}$ -térbe vett Fourier transzformáció nyomán történik. Ekkor, mivel (23)-ban adott $P_{\mathbf{j}_1, \mathbf{j}_2, \sigma}$ Fourier transzformáltja $n_{\mathbf{k}, \sigma}^0$, a nemkölsönható rendszer impulzus szerinti eloszlásfüggvénye

$$n_{\mathbf{k}, \sigma}^0 = \Theta(\epsilon_F - \epsilon(\mathbf{k})), \quad (30)$$

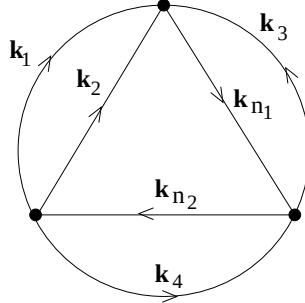
ahol ϵ_F a Fermi energia, $\epsilon(\mathbf{k})$ a (16)-ban adott, és $\Theta(x)$ az $x > 0$ -ra egységet adó továbbá $x \leq 0$ esetben zérót eredményező Heaviside függvény, a diagram minden vonalának egy $n^0(\mathbf{k}) = n_{\mathbf{k}, \sigma}^0$ érték felel majd meg, és a spinfüggés (és ezáltal a szaggatott vonal jelleg is), a paramágneses mivolt miatt eltűnik. A (28)-ban kifejezett C_m koefficiensbe járulékot adó minden diagram kötött, m csomóponttal, m folytonos és m -szaggatott vonallal rendelkezik (ezen utóbbiak a spinfüggés hiánya miatt folytonos vonalakká alakíthatók), és a vonalak mindegyikéhez $n^0(\mathbf{k})$ kifejezés tartozik. Ezáltal minden i -edik vonalhoz egy $\mathbf{k}_i$ impulzus érték kapcsolható, de ezek közül csak $m + 1$ darab független érték, a többi a vertexeken érvényesülő $\mathbf{k}$ -megmaradási törvény alapján meghatározott. Az így kapott kifejezésből $\int d\mathbf{k}_1 \int d\mathbf{k}_2 \dots \int d\mathbf{k}_{m+1}$ adja a G diagram $V(G)$ számértékét, ahol minden $d\mathbf{k}_i$ az első Brillouin zónán fut végig. Végül az előjelet $(-1)^{f(G)}$ állítja be, ahol $f(G)$ a G diagramban szereplő független zárt hurkok számát számolja össze. Ezen Feynman diagramisztikus szabályok mellett

$$C_m = \sum_G (-1)^{f(G)} w(G) V(G) \quad (31)$$

ahol az összeg az összes (29) által m -rendben generált kötött és topologikusan különböző diagramra végigfut, $w(G)$ a diagram súlyfaktora (megmutatja hogy ugyanazon diagram kifejezést adó járulék hányszor fordul elő), és végezetül

$$\begin{aligned}
 C_1 &= \text{diagram of two circles sharing a point}, \\
 C_2 &= \text{diagram of two circles sharing a point with a line segment} - 2 \times \text{diagram of two circles sharing a point}, \\
 C_3 &= 2 \times \text{diagram of two circles sharing a point with a line segment} - 6 \times \text{diagram of two circles sharing a point} + 2 \times \text{diagram of two circles sharing a point with a line segment} + 3 \times \text{diagram of two circles sharing a point},
 \end{aligned}$$

1. Ábra . A C_m diagramisztikus kifejezése $m \leq 3$ -ig.



2. Ábra . Példa egy $m = 3$ esetben a (32)-ben használt $\mathbf{k}$ értékekre. Itt $\mathbf{k}_i$ független értékekből $m + 1 = 4$ darab ($\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3, \mathbf{k}_4$) van, illetve $\mathbf{k}_n$ tagból $m - 1 = 2$ darab van ($\mathbf{k}_{n1}, \mathbf{k}_{n2}$). Továbbá $\mathbf{k}_{n1} = \mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_3$, $\mathbf{k}_{n2} = \mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_4$ összefüggések határozzák meg az α_n^i koefficienseket, az ezekre kapott értékek pedig $a_1^1 = 1, a_1^2 = 1, a_1^3 = 1, a_1^4 = 0$ illetve $a_2^1 = 1, a_2^2 = 1, a_2^3 = 0, a_2^4 = 1$. Ezen diagram a G_{3a} nevet viseli, értéke pedig a zárt hurkok előjelfaktora nélkül $V(G_{3a})$.

$$V(G) = \int d\mathbf{k}_1 \int d\mathbf{k}_2 \dots \int d\mathbf{k}_{m+1} \left[\prod_{i=1}^{m+1} n_{\mathbf{k}_i}^0 \right] \left[\prod_{n=1}^{m-1} n_{\mathbf{k}_n}^0 \right], \quad \mathbf{k}_n = \sum_{i=1}^{m+1} \alpha_n^i \mathbf{k}_i. \quad (32)$$

Itt α_n^i számfaktorokat jelentenek. Ezek úgy alakulnak ki, hogy először, az adott G diagram $2m$ vonalából $m + 1$ -re felírjuk az $m + 1$ darab $\mathbf{k}_i$ független $\mathbf{k}$ -értéket, majd a megmaradt $m - 1$ vonalra $\mathbf{k}_n$, $n = 1, 2, \dots, m - 1$ kerül úgy, hogy minden vertexen a $\mathbf{k}$ -megmaradás követelménye érvényesüljön. A jobb megérthetőség szempontjából az $m \leq 3$ -ig C_m -be járulékot adó diagramokat az 1. Ábra példázza. Továbbmenőleg, a $\mathbf{k}_n$ értékek kialakulásának szemléltetésére egy példát mutatok be $m = 3$ esetre a 2. Ábrán. Ezen utóbbi ábra kapcsán megjegyzem, hogy a $\mathbf{k}$ haladási irányok a görbéken tetszőlegesen választhatók meg (a $\mathbf{k}$ változókkal megadott diagram vonalai a csomópontokon – vertexeken – érvényesülő $\mathbf{k}$ megmaradás egyértelművé tétele miatt irányítottak). Mivel paramágneses fázist jellemzek, a vonalak spinfüggése nincs jelen, így minden vonal hasonló módon jelölhető, és a matematikai járuléka a diagramban a fentebb elmondottak alapján megadható.

Megjegyzem, hogy a $w(G)$ faktorok a (29)-ben szereplő determinánsszorzat elvégzésével automatikusan adódnak, éspedig $w(G) = c_G / [(m - 1)!]$ formában, ahol c_G megmutatja, hogy (29)-ből hányszor jelenik meg ugyanazon G diagram. Ha két diagram hasonló, de legalább egy folytonos vonal szaggatottal van felcserélve, ugyanazon G -hez tartoznak.

3. A kinetikus energia tag átlagértéke

A (15) kinetikus energia tagjának átlagértéke az $\mathbf{r}$ térben a

$$K_{\mathbf{i},\mathbf{j},\sigma} = \langle \hat{c}_{\mathbf{i},\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{j},\sigma} \rangle \quad (33)$$

típusú átlagértékekre vezethető vissza, ahol az átlagérték kiszámítása az (17)-ben adott $|\Psi_g\rangle$ szerint történik.

A (18-32)-ben vett eljárást alkalmazva a (33) összefüggésre, a

$$\bar{K}_{\mathbf{i},\mathbf{j},\sigma} = \langle \Psi_g | \hat{c}_{\mathbf{i},\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{j},\sigma} | \Psi_g \rangle \quad (34)$$

menyiség kifejezése, a $\hat{Q}_{\mathbf{i},\sigma} = 1 - (1 - g)\hat{n}_{\mathbf{i},\sigma}$ jelölés bevezetésével

$$\bar{K}_{\mathbf{i},\mathbf{j},\sigma} = \langle \hat{c}_{\mathbf{i},\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{j},\sigma} \hat{Q}_{\mathbf{i},-\sigma} \hat{Q}_{\mathbf{j},-\sigma} [1 + \sum_{m=1}^{\infty} \frac{(g^2 - 1)^m}{m!} \sum'_{\mathbf{j}_1, \mathbf{j}_2, \dots, \mathbf{j}_m \neq \mathbf{i}, \mathbf{j}} \hat{D}_{\mathbf{j}_1} \hat{D}_{\mathbf{j}_2} \dots \hat{D}_{\mathbf{j}_m}] \rangle_0 \quad (35)$$

formát ölti, ahol $\sum'$ mint előbb, különböző csomópontokon vett összegzést jelöli. A Wick tétel alkalmazása után $\langle \dots \rangle_0$ a $\{\dots\}_0$ δ -nélküli kontrakciókkal helyettesíthető, majd az $\mathbf{i} \neq \mathbf{j}$ és $\mathbf{i} = \mathbf{j}$ járulékok összegeként a (35) kifejezése a következő képpen alakul

$$\begin{aligned} \bar{K}_{\mathbf{i},\mathbf{j},\sigma} &= \{ \hat{c}_{\mathbf{i},\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{j},\sigma} [1 - (1 - g)(\hat{n}_{\mathbf{i},\sigma} + \hat{n}_{\mathbf{j},\sigma}) + (1 - g)^2 \hat{n}_{\mathbf{i},-\sigma}(\hat{n}_{\mathbf{j},-\sigma} + \delta_{\mathbf{i},\mathbf{j}})] \\ &\times [1 + \sum_{m=1}^{\infty} \frac{(g^2 - 1)^m}{m!} \sum_{\mathbf{j}_1, \mathbf{j}_2, \dots, \mathbf{j}_m} \hat{D}_{\mathbf{j}_1} \hat{D}_{\mathbf{j}_2} \dots \hat{D}_{\mathbf{j}_m}] \}_0. \end{aligned} \quad (36)$$

Mindezek után $\langle \Psi_g | \Psi_g \rangle$ értéket kiszámolva majd ezzel (36)-ot osztva és a kötött diagram tételt alkalmazva úgy mint (28) esetében, a (33)-ban kifejezett $K_{\mathbf{i},\mathbf{j},\sigma}$ mennyiségre adódó egyenlőség

$$\begin{aligned} K_{\mathbf{i},\mathbf{j},\sigma} &= \{ \hat{c}_{\mathbf{i},\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{j},\sigma} [1 - (1 - g)(\hat{n}_{\mathbf{i},\sigma} + \hat{n}_{\mathbf{j},\sigma}) + (1 - g)^2 \hat{n}_{\mathbf{i},-\sigma}(\hat{n}_{\mathbf{j},-\sigma} + \delta_{\mathbf{i},\mathbf{j}})] \\ &\times [1 + \sum_{m=1}^{\infty} \frac{(g^2 - 1)^m}{m!} \sum_{\mathbf{j}_1, \mathbf{j}_2, \dots, \mathbf{j}_m} \hat{D}_{\mathbf{j}_1} \hat{D}_{\mathbf{j}_2} \dots \hat{D}_{\mathbf{j}_m}] \}_0^c, \end{aligned} \quad (37)$$

ahol, úgy mint előbb, $\{\dots\}_0^c$ a kötött δ -nélküli kontrakciókat jelöli. Ez után a (15)-ben szereplő kinetikus tag átlagértéke

$$\frac{\langle \hat{H}_{kin} \rangle}{L} = 2 \int d\mathbf{k} \epsilon(\mathbf{k}) n_{\mathbf{k}}, \quad n_{\mathbf{k}} = n_{\mathbf{k},\sigma} = \frac{1}{L} \sum_{\mathbf{i},\mathbf{j}} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{i}-\mathbf{j})} K_{\mathbf{i},\mathbf{j},\sigma}. \quad (38)$$

Itt a kettes faktor a spin szerinti összeg miatt jelenik meg, D -dimenzióban $\int d\mathbf{k} = [1/(2\pi)^D] \prod_{\alpha=1}^D \int dk_\alpha$ és $n_{\mathbf{k},\sigma}$ a kölcsönható rendszer impulzus szerinti eloszlásfüggvénye (a Gutzwiller hullámfüggvénnyel számolva).

Az $n_{\mathbf{k}}$ (37) és (38)-ból való kifejezése céljából a következő mennyiség bevezetése nyomra vezető

$$f_{m,\sigma}(\mathbf{k}) = \frac{1}{L} \frac{1}{(m-2)!} \sum_{\mathbf{j}_1, \mathbf{j}_2, \dots, \mathbf{j}_m} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{j}_1 - \mathbf{j}_2)} \{ [\hat{c}_{\mathbf{j}_1,\sigma}^\dagger \hat{n}_{\mathbf{j}_1,-\sigma} \hat{c}_{\mathbf{j}_2,\sigma} \hat{n}_{\mathbf{j}_2,-\sigma} + \delta_{\mathbf{j}_1, \mathbf{j}_2} \hat{D}_{\mathbf{j}_2}] \hat{D}_{\mathbf{j}_3} \hat{D}_{\mathbf{j}_4} \dots \hat{D}_{\mathbf{j}_m} \}_0^c. \quad (39)$$

Ennek az a magyarázata, hogy felhasználva az

$$\begin{aligned} \sum_{\mathbf{j}_1, \mathbf{j}_2, \dots, \mathbf{j}_m} \{ \hat{n}_{\mathbf{j},\sigma} \hat{D}_{\mathbf{j}_1} \hat{D}_{\mathbf{j}_2} \dots \hat{D}_{\mathbf{j}_m} \}_0^c &= -m \sum_{\mathbf{j}_1, \mathbf{j}_2, \dots, \mathbf{j}_m} \{ \hat{D}_{\mathbf{j}_1} \hat{D}_{\mathbf{j}_2} \dots \hat{D}_{\mathbf{j}_m} \}_0^c, \\ \sum_{\mathbf{i}, \mathbf{j}_1, \mathbf{j}_2, \dots, \mathbf{j}_m} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{i}-\mathbf{j})} \{ \hat{c}_{\mathbf{i},\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{j},\sigma} \hat{D}_{\mathbf{j}_1} \hat{D}_{\mathbf{j}_2} \dots \hat{D}_{\mathbf{j}_m} \}_0^c &= Lm! n_{\mathbf{k},\sigma}^0 f_{m,\sigma}(\mathbf{k}), \quad m \geq 2, \\ \sum_{\mathbf{i}, \mathbf{j}_1, \mathbf{j}_2, \dots, \mathbf{j}_m} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{i}-\mathbf{j})} \{ \hat{c}_{\mathbf{i},\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{j},\sigma} \hat{n}_{\mathbf{i},-\sigma} \hat{D}_{\mathbf{j}_1} \hat{D}_{\mathbf{j}_2} \dots \hat{D}_{\mathbf{j}_m} \}_0^c &= -Lm! n_{\mathbf{k},\sigma}^0 f_{m+1,\sigma}(\mathbf{k}), \end{aligned} \quad (40)$$

egyenlőségeket, $n_{\mathbf{k}}$ kifejezése (39) segítségével tömören megadható

$$n_{\mathbf{k}} = n_{\mathbf{k},\sigma} = [1 - (1 - g)^2 n_{-\sigma}^0] n_{\mathbf{k},\sigma}^0 + \sum_{m=2}^{\infty} \frac{(g^2 - 1)^m}{(1 + g)^2} [1 - (1 - g^2) n_{\mathbf{k},\sigma}^0] f_{m,\sigma}(\mathbf{k}). \quad (41)$$

Látható, hogy a kinetikus energia tag várhatóértéke az $f_{m,\sigma}(\mathbf{k})$ ismeretében számítható ki. Az $f_{m,\sigma}(\mathbf{k})$ függvény (39)-ben adott kifejezésének második ($\delta_{\mathbf{j}_1, \mathbf{j}_2}$ -t tartalmazó) tagja (29) segítségével kifejezhető (C_{m-1} -et ad eredményül), így tehát

$$f_{m,\sigma}(\mathbf{k}) = C_{m-1} + \bar{f}_{m,\sigma}(\mathbf{k}), \quad (42)$$

ahol a $\mathbf{k}$ függő rész

$$\bar{f}_{m,\sigma}(\mathbf{k}) = \frac{1}{L} \frac{1}{(m-2)!} \sum_{\mathbf{j}_1, \mathbf{j}_2, \dots, \mathbf{j}_m} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{j}_1 - \mathbf{j}_2)} \{ \hat{c}_{\mathbf{j}_1, \sigma}^\dagger \hat{n}_{\mathbf{j}_1, -\sigma} \hat{c}_{\mathbf{j}_2, \sigma} \hat{n}_{\mathbf{j}_2, -\sigma} \hat{D}_{\mathbf{j}_3} \hat{D}_{\mathbf{j}_4} \dots \hat{D}_{\mathbf{j}_m} \}_0^c. \quad (43)$$

A (43)-ban szereplő kontrakciók a

$$\{ \hat{c}_{\mathbf{j}_1, \sigma}^\dagger \hat{n}_{\mathbf{j}_1, -\sigma} \hat{c}_{\mathbf{j}_2, \sigma} \hat{n}_{\mathbf{j}_2, -\sigma} \hat{D}_{\mathbf{j}_3} \hat{D}_{\mathbf{j}_4} \dots \hat{D}_{\mathbf{j}_m} \}_0 = \text{Det}[P_{\mathbf{j}_1, \mathbf{j}_2, \sigma; m-1}] \text{Det}[P_{\mathbf{j}_1, \mathbf{j}_2, -\sigma}] \quad (44)$$

determináns szorzattal számíthatók ki, a „c” kötött tagokat pedig úgy kapjuk, hogy (44) nem-kötött járulékait elhagyjuk. A $\text{Det}[P_{\mathbf{j}_1, \mathbf{j}_2, -\sigma}]$ determináns $m \times m$ -es, pont olyan mint ami (29)-ben szerepel. A $\text{Det}[P_{\mathbf{j}_1, \mathbf{j}_2, \sigma; m-1}]$ viszont egy $(m-1) \times (m-1)$ -es determináns, amely úgy keletkezik, hogy felírjuk az $m \times m$ -es $\text{Det}[P_{\mathbf{j}_1, \mathbf{j}_2, \sigma}]$ determinánst és abból a $\mathbf{j}_1$ -es oszlopot, illetve a $\mathbf{j}_2$ -es sort kivesszük. Az átláthatóság kedvéért, a $\mathbf{j}_i$ indexet egyszerűen i -vel jelölve

$$\text{Det}[P_{\mathbf{j}_1, \mathbf{j}_2, \sigma}] = \text{Det} \begin{pmatrix} P_{1,1,\sigma} & P_{1,2,\sigma} & P_{1,3,\sigma} & \dots & P_{1,m,\sigma} \\ P_{2,1,\sigma} & P_{2,2,\sigma} & P_{2,3,\sigma} & \dots & P_{2,m,\sigma} \\ P_{3,1,\sigma} & P_{3,2,\sigma} & P_{3,3,\sigma} & \dots & P_{3,m,\sigma} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ P_{m,1,\sigma} & P_{m,2,\sigma} & P_{m,3,\sigma} & \dots & P_{m,m,\sigma} \end{pmatrix}, \quad (45)$$

$$\text{Det}[P_{\mathbf{j}_1, \mathbf{j}_2, \sigma; m-1}] = \text{Det} \begin{pmatrix} P_{1,2,\sigma} & P_{1,3,\sigma} & P_{1,4,\sigma} & \dots & P_{1,m,\sigma} \\ P_{3,2,\sigma} & P_{3,3,\sigma} & P_{3,4,\sigma} & \dots & P_{3,m,\sigma} \\ P_{4,2,\sigma} & P_{4,3,\sigma} & P_{4,4,\sigma} & \dots & P_{4,m,\sigma} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ P_{m,2,\sigma} & P_{m,3,\sigma} & P_{m,4,\sigma} & \dots & P_{m,m,\sigma} \end{pmatrix}. \quad (46)$$

Az $f_{m,\sigma}(\mathbf{k})$ kifejezéséhez (mindez a teljes $f_{m,\sigma}(\mathbf{k})$ -ra igaz) újból célszerű a diagramisztikus szabályokat a $\mathbf{k}$ térben megadni. E célból felrajzoljuk az összes kötött és topologikusan nem ekvivalens m csomópontot tartalmazó diagramot amelynek $(m-1)$ darab σ spinű (folytonos)

vonala és m darab $-\sigma$ spinű (szaggatott) vonala van. Minden vonalhoz $\mathbf{k}_\alpha$ impulzust csatolunk, a vonalaknak $\Theta(\epsilon_F - \epsilon(\mathbf{k}_\alpha))$ értéket feleltetünk meg, a vertexeken $\mathbf{k}$ megmaradást feltételezünk, majd a belső impulzusok szerint integrálunk. Az így kapott $V_f(G, \mathbf{k})$ értéket $(-1)^{f(G)}$ -vel (itt $f(G)$ a független zárt húrkok száma) és a $w(G)$ súlyfaktorával beszorozzuk, így megkapva az $f_{m,\sigma}(\mathbf{k})$ -ba a G diagram járulékát. A különböző diagramokra összegezve kapjuk $f_{m,\sigma}(\mathbf{k})$ értékét

$$f_{m,\sigma}(\mathbf{k}) = \sum_G (-1)^{f(G)} w(G) V_f(G, \mathbf{k}). \quad (47)$$

A belső impulzusok a diagram belső vonalaihoz rendelt $\mathbf{k}_\alpha$ értékek. Ezekből m darab független van, tehát a (31)-nél alkalmazott jelöléseket használva, a független $\mathbf{k}_i$ belső impulzusok $i = 1, 2, \dots, m$ halmaza alakul ki a diagramon. Ezek szerint végezzük az integrálást $V_f(G, \mathbf{k})$ kiszámításakor. A diagram vonalai belső és külső vertexekbe futnak be. A belső vertexek azok amelyek mindegyikébe két folytonos és két szaggatott vonal fut be. Ezeken kívül két külső vertex is kialakul, amelyeknek az lesz a jellemzője, hogy ezekbe két szaggatott és csak egy folytonos vonal fut be. A külső vertexeken a $\mathbf{k}$ megmaradás csak úgy érvényesül, ha ezen vertexek egyikén a $\mathbf{k}_{i=m+1} = \mathbf{k}$ impulzusérték belép a diagramba, a másik külső vertexen pedig elhagyja a diagramot. Ez a $\mathbf{k}$ „külső momentum” érték adja az $f_{m,\sigma}(\mathbf{k})$ argumentumában a $\mathbf{k}$ függést. Mivel ezen $i = m + 1$ -hez tartozó $\mathbf{k}_i$ a C_m koefficiensben járulékot adó és a (31)-ben bemutatott diagramokban egy vonalon szerepelt, következik, hogy $f_{m,\sigma}(\mathbf{k})$ -ba belépő G diagramokat úgy kapjuk meg, hogy a C_m diagram járulékainak vonalait sorra elvágjuk. Az elvágás azt jelenti, hogy az elvágott vonalhoz rendelünk ugyan $\mathbf{k}$ értéket, de ez „külső impulzusként” szerepel majd, azaz a diagram értékébe ezen vonal nem hoz magával $n_{\mathbf{k}}^0$ járulékot és a $\mathbf{k}$ változó szerint nem integrálunk. Máskülönben a C_m -ben szereplő $V(G)$ [lásd (31)], és $f_{m,\sigma}(\mathbf{k})$ -ban szereplő $V_f(G, \mathbf{k})$ [lásd (47)] kiszámítása azonos.

C. A Gutzwiller hullámfüggvénnyel adott átlagértékek kiszámítása D dimenzióban

1. Bevezetés

Az előző fejezetben adott és Gutzwiller hullámfüggvénnyel számolt diagramjárulékok kifejezése tetszőleges D dimenzióban helytálló. Az konkrét értékek kiszámítása azonban nagyon is dimenziófüggő. $D = 1$ dimenzióban az összes diagramjárulékot $m = \infty$ rendig Metzner és Vollhardt effektíve kiszámította¹²⁵. Ezen lehetőség egyik kulcsfeltétele az volt hogy $D = 1$ -ben az $n_{\mathbf{k}}^0$

$$n_{\mathbf{k}}^0 = \Theta(\epsilon_F - \epsilon(\mathbf{k})) \equiv \Theta(k_F - k) \quad (48)$$

egyszerű skaláris összefüggésre redukálódik ahol k_F a Fermi momentum, továbbá $k = |\mathbf{k}|$ skalár jellegű. Ezen számítás megmutatta, hogy $D = 1$ -ben a Gutzwiller hullámfüggvény fém-szigetelő átmenetet *nem ad ha pontosan számolnak vele* és ezáltal, a (15) rendszer, a (17)-ben adott $|\Psi_g\rangle$ (Gutzwiller) hullámfüggvényével végig fémes jellegű marad. Annakidején az egyik fő probléma az volt, hogy vajon ez a tulajdonság véges magasabb dimenziókban is megmarad-e vagy sem. Igen ám de $D \geq 2$ -ben a diagramok értékét nagyon

nehéz volt számolni a (48) nem-teljesülése miatt, és szükségesnek látszott egy olyan számolási módszer kifejlesztése ami megengedi hogy a $|\Psi_g\rangle$ Gutzwiller hullámfüggvénnyel adott átlagértékek diagramjait tetszőleges $D \geq 2$ dimenzióban pontosan ki lehessen számolni, semmilyen más közelítés felhasználása nélkül. Ezt a módszert én fejlesztettem ki, tettem pontra^{7,8}, és ezt mutatom be az elkövetkező két alfejezetben.

2. A kölcsönhatási tag átlagértékébe tartozó diagramok számítása D dimenzióban

Az elkövetkezőkben, a képletek leírásának leegyszerűsítése céljából bevezetem a következő jelölést

$$\bar{\Theta}(\mathbf{k}) = \Theta(\epsilon_F - \epsilon(\mathbf{k})). \quad (49)$$

Ezzel a jelöléssel a (32)-ben szereplő $V(G)$ kifejezés amit most D dimenzióban számolni akarok a következő formát ölti

$$V(G) = [\prod_{i=1}^{m+1} \int d\mathbf{k}_i \bar{\Theta}(\mathbf{k}_i)] [\prod_{n=1}^{m-1} \bar{\Theta}(\mathbf{k}_n)], \quad \mathbf{k}_n = \sum_{i=1}^{m+1} \alpha_n^i \mathbf{k}_i. \quad (50)$$

A továbbhaladás előtt megemlítem, hogy a C_m koefficiensben megmaradt diagramok habár mind kötöttek, közöttük sok a reducibilis. Reducibilisnek nevezem azt a diagramot amely legalább két, egymáshoz egy vertexben kapcsolódó részre bomlik. Mivel a reducibilis diagramok értéke az őket alkotó irreducibilis diagramok értékének szorzatára bomlik, az irreducibilis diagramok értékeit kell meghatározni.

Most (50)-re koncentrálva megfigyelhető hogy $V(G)$ integrandusában szerepelnek egyszerű argumentumú $\bar{\Theta}(\mathbf{k}_i)$ függvények, ahol $\mathbf{k}_i$ független integrálási változók, továbbá szerepelnek összetett argumentumú $\bar{\Theta}(\mathbf{k}_n)$ függvények, ahol $\mathbf{k}_n$ a független $\mathbf{k}_i$ integrálási változók lineáris kombinációja. Ezen tagokat külön le tudjuk választani egy integrállal és egy egyszerű argumentumú $\bar{\Theta}$ függvénnyel a következő formában

$$T(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \dots, \mathbf{k}_m) = \int d\mathbf{k}_{m+1} \bar{\Theta}(\mathbf{k}_{m+1}) [\prod_{n=1}^{m-1} \bar{\Theta}(\mathbf{k}_n)], \quad V(G) = [\prod_{i=1}^m \int d\mathbf{k}_i \bar{\Theta}(\mathbf{k}_i)] T(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \dots, \mathbf{k}_m). \quad (51)$$

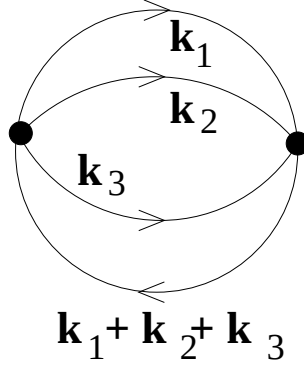
A leválasztás logikája az, hogy a $T(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \dots, \mathbf{k}_m)$ kifejezésével az összetett argumentumú $\bar{\Theta}$ függvényektől megszabadulok és ezáltal (51) második tagjában csupán az egyszerű argumentumú $\bar{\Theta}$ függvények maradnak az integrandusban (a T tag mellett) a $V(G)$ kiszámításánál.

Az irreducibilis diagramoknál meg lehet úgy választani a $\mathbf{k}_i$ változókat (akkár egy lineáris transzformáció felhasználásával), hogy a T -ben szereplő $\mathbf{k}_{m+1}$ független változó minden összetett argumentumú $\bar{\Theta}(\mathbf{k}_n)$ -ben szerepeljen a T kifejezésében, és ezáltal a T tag a következő formában is felírható

$$T_j(\mathbf{k}_{s_1}, \mathbf{k}_{s_2}, \dots, \mathbf{k}_{s_j}) = T_j(\{\mathbf{k}_{s_j}\}) = \int d\mathbf{k} \bar{\Theta}(\mathbf{k}) \prod_{n=1}^j \bar{\Theta}(\mathbf{k} + \mathbf{k}_{s_n}) \quad (52)$$

Itt a j index megmutatja, hogy hány darab összetett argumentumú $\bar{\Theta}$ függvény szerepel T integrandusa alatt. A $\{\mathbf{k}_{s_j}\}$ egy j tagot tartalmazó szet mely elemei sorra azon $\mathbf{k}_{s_i}$ értékek,

amelyek T_j -t kifejező integrál integrandusában, az összetett argumentumú $\bar{\Theta}$ függvények argumentumában, az integrálási változó $\mathbf{k}$ -hoz sorra hozzáadódnak [lásd (52) kifejezést].



3. Ábra . Másodrendű diagramjárulék C_m -ben, a G_{2a} elnevezéssel és $V(G_{2a})$ zárt hurkok előjelfaktorát figyelembe nem vevő értékkel.

Például a 3. Ábrán adott $m = 2$ -nek megfelelő és $V(G_{2a})$ (zárt hurkok előjelfaktorát figyelembe nem vevő) értékkel rendelkező C_m járulék, amely kifejezése

$$\begin{aligned} V(G_{2a}) &= \int d\mathbf{k}_1 \int d\mathbf{k}_2 \int d\mathbf{k}_3 \bar{\Theta}(\mathbf{k}_1) \bar{\Theta}(\mathbf{k}_2) \bar{\Theta}(\mathbf{k}_3) \bar{\Theta}(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_3) \\ &= \int d\mathbf{k}_1 \int d\mathbf{k}_2 \bar{\Theta}(\mathbf{k}_1) \bar{\Theta}(\mathbf{k}_2) T_1(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2), \\ T_1(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2) &= \int d\mathbf{k} \bar{\Theta}(\mathbf{k}) \bar{\Theta}(\mathbf{k} + \mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2). \end{aligned} \quad (53)$$

Hasonlóan, a 2. Ábrán adott diagram $V(G_{3a})$ kifejezése

$$\begin{aligned} V(G_{3a}) &= \int d\mathbf{k}_1 \int d\mathbf{k}_2 \int d\mathbf{k}_3 \int d\mathbf{k}_4 \bar{\Theta}(\mathbf{k}_1) \bar{\Theta}(\mathbf{k}_2) \bar{\Theta}(\mathbf{k}_3) \bar{\Theta}(\mathbf{k}_4) \bar{\Theta}(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_3) \bar{\Theta}(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_4) \\ &= \int d\mathbf{k}_2 \int d\mathbf{k}_3 \int d\mathbf{k}_4 \bar{\Theta}(\mathbf{k}_2) \bar{\Theta}(\mathbf{k}_3) \bar{\Theta}(\mathbf{k}_4) T_2(\mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_3, \mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_4), \\ T_2(\mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_3, \mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_4) &= \int d\mathbf{k} \bar{\Theta}(\mathbf{k}) \bar{\Theta}(\mathbf{k} + \mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_3) \bar{\Theta}(\mathbf{k} + \mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_4). \end{aligned} \quad (54)$$

Az elmondottakból látható, hogy a $V(G)$ diagramok értékének kiszámításához először is a $T_j(\{\mathbf{k}_{s_j}\})$ tagokat kell kifejezni. Ebből a célból a $\Theta(x)$ függvényeknek a következő integrálrepresentációját használom

$$\Theta(x) = \frac{1}{2} + \frac{1}{\pi} \int_0^{+\infty} \frac{\sin(xt)}{t} dt. \quad (55)$$

Ténylegesen (55) értéke 1 ha $x > 0$ és 0 ha $x < 0$, és könnyen ellenőrizhető, hogy az összefüggés egyszerűen $\int_0^\infty dt(\sin t)/t = \pi/2$ következménye.

a) A T_1 tag kifejezése

A $T_1(\mathbf{k}_{s_1})$ tag az (52) szerint a következő képpen értelmezett

$$T_1(\mathbf{k}_{s_1}) = \int d\mathbf{k} \bar{\Theta}(\mathbf{k}) \bar{\Theta}(\mathbf{k} + \mathbf{k}_{s_1}) = \int d\mathbf{k} \Theta(\epsilon_F - \epsilon(\mathbf{k})) \Theta(\epsilon_F - \epsilon(\mathbf{k} + \mathbf{k}_{s_1})) \quad (56)$$

Az $\epsilon(\mathbf{k})$ kifejezésére (16) az induló összefüggés, de a számítások leegyszerűsítése céljából $a_\alpha = 2\pi$ egységekben dolgozva (ekkor a $\mathbf{k}$ -térbeli primitív cella térfogata egységnyi), $k_\alpha \in [-1/2, +1/2]$. Ezáltal a $\bar{k}_\alpha = 2\pi k_\alpha$ változócsereét használva az induló jellemző adatok

$$\epsilon(\mathbf{k}) = -\frac{W}{2D} \sum_{\alpha=1}^D \cos \bar{k}_\alpha, \quad \epsilon_F \in \left[-\frac{W}{2}, +\frac{W}{2}\right],$$

$$\frac{n}{2} = \int d\mathbf{k} \Theta(\epsilon_F - \epsilon(\mathbf{k})), \quad \int d\mathbf{k} = \frac{1}{(2\pi)^D} \prod_{\alpha=1}^D \int_{-\pi}^{+\pi} d\bar{k}_\alpha, \quad (57)$$

továbbá $n_\sigma = N_\sigma/L$ a σ spinvetülettel rendelkező elektron koncentráció (itt L a ráccsomópontok száma), továbbá $n_\sigma = n_{-\sigma} = n/2$, hol $n = (N_\sigma + N_{-\sigma})/L$ a teljes részecskeszám koncentráció. Bevezetem továbbá a $p = -2\epsilon_F/W \in [-1, +1]$ paramétert ($p = 1$ teljesen üres, míg $p = -1$ a teljesen telt sávot jelöli) és ezáltal, (55) értelmében

$$\begin{aligned} \bar{\Theta}(\mathbf{k}) &= \Theta(\epsilon_F - \epsilon(\mathbf{k})) = \Theta\left(\sum_{\alpha=1}^D \cos \bar{k}_\alpha - pD\right) = \frac{1}{2} + \frac{1}{\pi} \int_0^{+\infty} \frac{dx}{x} \sin\left(x \sum_{\alpha=1}^D \cos \bar{k}_\alpha - pDx\right) \\ &= \frac{1}{2} + \frac{1}{\pi} \int_0^{+\infty} \frac{\cos(pDx)}{x} \sin\left(x \sum_{\alpha=1}^D \cos \bar{k}_\alpha\right) dx - \frac{1}{\pi} \int_0^{+\infty} \frac{\sin(pDx)}{x} \cos\left(x \sum_{\alpha=1}^D \cos \bar{k}_\alpha\right) dx. \end{aligned} \quad (58)$$

A kapott (58) összefüggés $\mathbf{k}$ szerinti integrál alá kerül mindig. Hogy e körülmények között látni lehessen hogy hogyan viselkedik a kifejezés, bemutatom először a legegyszerűbb példát mely $n/2$ értékét adja meg (57) alapján

$$\begin{aligned} \frac{n}{2} &= \int d\mathbf{k} \bar{\Theta}(\mathbf{k}) = \frac{1}{2} + \frac{1}{\pi} \int_0^{+\infty} dx \frac{\cos(pDx)}{x} \int d\mathbf{k} \sin\left(x \sum_{\alpha=1}^D \cos \bar{k}_\alpha\right) \\ &\quad - \frac{1}{\pi} \int_0^{+\infty} dx \frac{\sin(pDx)}{x} \int d\mathbf{k} \cos\left(x \sum_{\alpha=1}^D \cos \bar{k}_\alpha\right) \\ &= \frac{1}{2} + \frac{1}{\pi} \left[\int_0^{+\infty} dx \frac{\cos(pDx)}{x} I_c - \int_0^{+\infty} dx \frac{\sin(pDx)}{x} I_s \right], \\ I_c &= \int d\mathbf{k} \sin\left(x \sum_{\alpha=1}^D \cos \bar{k}_\alpha\right), \quad I_s = \int d\mathbf{k} \cos\left(x \sum_{\alpha=1}^D \cos \bar{k}_\alpha\right). \end{aligned} \quad (59)$$

Az I_c illetve I_s járulékok kiszámításakor a szinusz, illetve koszinusz összeg argumentumokat egyszerű argumentumok trigonometriai függvényeinek szorzataira bontjuk (pl. $\sin(\alpha_1 + \alpha_2) = \sin(\alpha_1) \cos(\alpha_2) + \sin(\alpha_2) \cos(\alpha_1)$ mintájára). Mivel $\sin(\sum_i \alpha_i)$ felbontott kifejezésében mindig marad legalább egy darab $\sin(\alpha_i)$ tag, ami α_i szerint páratlan, így szimmetrikus intervallumra integrálva zérót ad, tehát $I_c = 0$ adódik. Hasonlóan, I_s -ben, $\cos(\sum_i \alpha_i)$ felbontásakor, az egyedüli tag mely nem tartalmaz $\sin(\alpha_i)$ járulékot (ez eredményez az integrál alatt nem-zéró értéket), az a $\prod_i \cos(\alpha_i)$ szorzat. Ennek megfelelően

$$\begin{aligned} I_s &= \int d\mathbf{k} \cos\left(x \sum_{\alpha=1}^D \cos \bar{k}_\alpha\right) = \frac{1}{(2\pi)^D} \left[\prod_{\alpha=1}^D \int_{-\pi}^{+\pi} d\bar{k}_\alpha \right] \left[\prod_{\alpha=1}^D \cos(x \cos \bar{k}_\alpha) \right] \\ &= \left[\frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{+\pi} \cos(x \cos t) dt \right]^D = \left[\frac{1}{\pi} \int_0^\pi \cos(x \cos t) dt \right]^D = [J_0(x)]^D \end{aligned} \quad (60)$$

ahol a $J_0(x)$ Bessel függvény (elsőfajú Bessel függvény)

$$J_0(z) = \frac{1}{\pi} \int_0^\pi \cos(z \cos \phi) d\phi \quad (61)$$

integrálrepresentációt használtam (Ref.²⁵¹, 182 oldal, 9.1.18 összefüggés). Ennek megfelelően tehát (59)-ből, tetszőleges D dimenzióban

$$\frac{n}{2} = \frac{1}{2} - \frac{1}{\pi} \int_0^{+\infty} \frac{\sin(pDx)}{x} [J_0(x)]^D dx. \quad (62)$$

Az (56)-ban adott $T_1(\mathbf{k}_{s_1})$ kiszámítása szintén az előbb bemutatott módon történik. Ez esetben a $\bar{\Theta}(\mathbf{k})$ (58)-ban adott kifejezése mellett

$$\begin{aligned} \bar{\Theta}(\mathbf{k} + \mathbf{k}_1) &= \frac{1}{2} + \frac{1}{\pi} \int_0^{+\infty} \frac{\cos(pDx)}{x} \sin[x \sum_{\alpha=1}^D \cos(\bar{k}_\alpha + \bar{k}_{1,\alpha})] dx \\ &\quad - \frac{1}{\pi} \int_0^{+\infty} \frac{\sin(pDx)}{x} \cos[x \sum_{\alpha=1}^D \cos(\bar{k}_\alpha + \bar{k}_{1,\alpha})] dx \end{aligned} \quad (63)$$

is szerepel az integrandusban melyet (58)-al össze kell szorozni, majd $\mathbf{k}$ szerint integrálni. A (63)-ból az $1/2$ az (58)-al szorozva így $1/2(n/2)$ értéket ad, (63)-ból az integrált tartalmazó tagok (58)-nak $1/2$ járulékával szorozva $1/2(n/2) - 1/4$ értéket eredményeznek, és végül négy integrális tag marad még, amelyek együttesen a következő összefüggést eredményezik

$$\begin{aligned} T_1(\mathbf{k}_1) &= \frac{1}{2} \frac{n}{2} + \left(\frac{1}{2} \frac{n}{2} - \frac{1}{4} \right) + \frac{1}{\pi^2} \int_0^\infty dx_1 \frac{\cos(pDx_1)}{x_1} \int_0^\infty dx \frac{\cos(pDx)}{x} T_c(x, x_1, \mathbf{k}_1) \\ &\quad + \frac{1}{\pi^2} \int_0^\infty dx_1 \frac{\sin(pDx_1)}{x_1} \int_0^\infty dx \frac{\sin(pDx)}{x} T_s(x, x_1, \mathbf{k}_1) \\ &\quad - \frac{1}{\pi^2} \int_0^\infty dx_1 \frac{\sin(pDx_1)}{x_1} \int_0^\infty dx \frac{\cos(pDx)}{x} T_{c,1}(x, x_1, \mathbf{k}_1) \\ &\quad - \frac{1}{\pi^2} \int_0^\infty dx_1 \frac{\cos(pDx_1)}{x_1} \int_0^\infty dx \frac{\sin(pDx)}{x} T_{s,1}(x, x_1, \mathbf{k}_1), \end{aligned} \quad (64)$$

ahol a bevezetett jelölések a következő járulékokat jelentik

$$\begin{aligned} T_c(x, x_1, \mathbf{k}_1) &= \int d\mathbf{k} \sin(x_1 \sum_{\alpha=1}^D \cos \bar{k}_\alpha) \sin[x \sum_{\alpha=1}^D \cos(\bar{k}_\alpha + \bar{k}_{1,\alpha})], \\ T_s(x, x_1, \mathbf{k}_1) &= \int d\mathbf{k} \cos(x_1 \sum_{\alpha=1}^D \cos \bar{k}_\alpha) \cos[x \sum_{\alpha=1}^D \cos(\bar{k}_\alpha + \bar{k}_{1,\alpha})], \\ T_{c,1}(x, x_1, \mathbf{k}_1) &= \int d\mathbf{k} \cos(x_1 \sum_{\alpha=1}^D \cos \bar{k}_\alpha) \sin[x \sum_{\alpha=1}^D \cos(\bar{k}_\alpha + \bar{k}_{1,\alpha})], \\ T_{s,1}(x, x_1, \mathbf{k}_1) &= \int d\mathbf{k} \sin(x_1 \sum_{\alpha=1}^D \cos \bar{k}_\alpha) \cos[x \sum_{\alpha=1}^D \cos(\bar{k}_\alpha + \bar{k}_{1,\alpha})]. \end{aligned} \quad (65)$$

A (65) utolsó trigonometriai járulékait felbontva

$$\begin{aligned} \sin[x \sum_{\alpha=1}^D \cos(\bar{k}_\alpha + \bar{k}_{1,\alpha})] &= \sin(x \sum_{\alpha=1}^D \cos \bar{k}_\alpha \cos \bar{k}_{1,\alpha}) \cos(x \sum_{\alpha=1}^D \sin \bar{k}_\alpha \sin \bar{k}_{1,\alpha}) \\ &\quad - \sin(x \sum_{\alpha=1}^D \sin \bar{k}_\alpha \sin \bar{k}_{1,\alpha}) \cos(x \sum_{\alpha=1}^D \cos \bar{k}_\alpha \cos \bar{k}_{1,\alpha}), \end{aligned} \quad (66)$$

$$\begin{aligned} \cos[x \sum_{\alpha=1}^D \cos(\bar{k}_\alpha + \bar{k}_{1,\alpha})] &= \cos(x \sum_{\alpha=1}^D \cos \bar{k}_\alpha \cos \bar{k}_{1,\alpha}) \cos(x \sum_{\alpha=1}^D \sin \bar{k}_\alpha \sin \bar{k}_{1,\alpha}) \\ &\quad + \sin(x \sum_{\alpha=1}^D \cos \bar{k}_\alpha \cos \bar{k}_{1,\alpha}) \sin(x \sum_{\alpha=1}^D \sin \bar{k}_\alpha \sin \bar{k}_{1,\alpha}), \end{aligned} \quad (67)$$

egyenlőségek adódnak. Most megfigyelhető (67) kapcsán, hogy $T_{c,1}$ illetve $T_{s,1}$ kifejezésében mindig páratlan számú szinusz függvény szorzódik össze, és ennek következtében legalább egy α komponensre, vagy $\bar{k}_\alpha \rightarrow -\bar{k}_\alpha$, vagy $\cos \bar{k}_\alpha \rightarrow -\cos \bar{k}_\alpha$ előjelváltásra lesz páratlan az integrandus szimmetrikus intervallumon, tehát ezen integrálértékek zérók (a $\cos \bar{k}_\alpha \rightarrow -\cos \bar{k}_\alpha$ a teljes periodusra vett integrálás miatt használható). Azaz

$$T_{c,1}(x, x_1, \mathbf{k}_1) = 0, \quad T_{s,1}(x, x_1, \mathbf{k}_1) = 0. \quad (68)$$

A T_c illetve T_s esetében azonban mindig páros számú szinusz függvény szorzódik össze, így ezeknek mindig vannak zérótól különböző járulékaik. A T_c esetében a (66) második sora mindig ad valamilyen α komponensre $\sin(x \sin \bar{k}_\alpha \sin \bar{k}_{1,\alpha})$ típusú járulékot amely $\bar{k}_\alpha \rightarrow -\bar{k}_\alpha$ transzformációra páratlan integrandust, azaz zéró integrálértéket eredményez. A T_s esetében hasonló helyzet áll elő a (67) második sorának $\sin(x \sin \bar{k}_\alpha \sin \bar{k}_{1,\alpha})$ típusú tagjai miatt, hol mostmár (67) első sora fog csak járulékot adni. Így

$$\begin{aligned} T_c(x, x_1, \mathbf{k}_1) &= \int d\mathbf{k} \sin(x_1 \sum_{\alpha=1}^D \cos \bar{k}_\alpha) \sin(x \sum_{\alpha=1}^D \cos \bar{k}_\alpha \cos \bar{k}_{1,\alpha}) \cos(x \sum_{\alpha=1}^D \sin \bar{k}_\alpha \sin \bar{k}_{1,\alpha}), \\ T_s(x, x_1, \mathbf{k}_1) &= \int d\mathbf{k} \cos(x_1 \sum_{\alpha=1}^D \cos \bar{k}_\alpha) \cos(x \sum_{\alpha=1}^D \cos \bar{k}_\alpha \cos \bar{k}_{1,\alpha}) \cos(x \sum_{\alpha=1}^D \sin \bar{k}_\alpha \sin \bar{k}_{1,\alpha}). \end{aligned} \quad (69)$$

Most (69) kifejezésekből megfigyelhető, hogy ezek legutolsó (mégpedig $\cos(x \sum_{\alpha=1}^D \sin \bar{k}_\alpha \sin \bar{k}_{1,\alpha})$) tagját kifejtve, ebből csak a $\prod_{\alpha=1}^D \cos(x \sin \bar{k}_\alpha \sin \bar{k}_{1,\alpha})$ komponens ad zérótól különböző járulékot. Ténylegesen, ha az összegzett argumentumú koszinusz felbontásából olyan tagokat is megtartunk amelyekben legalább egy α -ra $\sin(x \sin \bar{k}_\alpha \sin \bar{k}_{1,\alpha})$ is szerepel, akkor $\bar{k}_\alpha \rightarrow -\bar{k}_\alpha$ páratlan integrandust ad szimmetrikus intervallumon integrálva, azaz a tag kiesik. Ennek megfelelően

$$\begin{aligned} T_c(x, x_1, \mathbf{k}_1) &= \int d\mathbf{k} \sin(x_1 \sum_{\alpha=1}^D \cos \bar{k}_\alpha) \sin(x \sum_{\alpha=1}^D \cos \bar{k}_\alpha \cos \bar{k}_{1,\alpha}) [\prod_{\alpha=1}^D \cos(x \sin \bar{k}_\alpha \sin \bar{k}_{1,\alpha})], \\ T_s(x, x_1, \mathbf{k}_1) &= \int d\mathbf{k} \cos(x_1 \sum_{\alpha=1}^D \cos \bar{k}_\alpha) \cos(x \sum_{\alpha=1}^D \cos \bar{k}_\alpha \cos \bar{k}_{1,\alpha}) [\prod_{\alpha=1}^D \cos(x \sin \bar{k}_\alpha \sin \bar{k}_{1,\alpha})]. \end{aligned} \quad (70)$$

Felhasználva (68,70) egyenlőségeket (64)-ben, a $T_1(\mathbf{k}_1)$ -re kapott kifejezés

$$\begin{aligned} T_1(\mathbf{k}_1) &= \frac{n}{2} - \frac{1}{4} + \frac{1}{\pi^2} \int_0^\infty \frac{\sin(pDx)}{x} dx \int_0^\infty \frac{\sin(pDx_1)}{x_1} dx_1 T_s(x, x_1, \mathbf{k}_1) \\ &\quad + \frac{1}{\pi^2} \int_0^\infty \frac{\cos(pDx)}{x} dx \int_0^\infty \frac{\cos(pDx_1)}{x_1} dx_1 T_c(x, x_1, \mathbf{k}_1), \end{aligned} \quad (71)$$

ahol T_s és T_c a (70)-ben adott.

Mindezek után a Bessel függvények tulajdonságait kell (71) további alakításához felhasználni. E célból megfigyelhetők a következők. A kiinduló tulajdonságok²⁵²

$$\int_{-\pi}^{+\pi} \cos(a \sin x) \cos(b \cos x) dx = 2\pi J_0(\sqrt{a^2 + b^2}), \quad \int_{-\pi}^{+\pi} \cos(a \sin x) \sin(b \cos x) dx = 0. \quad (72)$$

Ebből kiindulva megfigyelhető hogy

$$\begin{aligned}
 T_s(x, x_1, \mathbf{k}) \pm T_c(x, x_1, \mathbf{k}) &= \int d\mathbf{k} \cos\left[\sum_{\alpha=1}^D (x_1 \mp x \cos \bar{k}_{1,\alpha}) \cos \bar{k}_\alpha\right] \left[\prod_{\alpha=1}^D \cos(x \sin \bar{k}_\alpha \sin \bar{k}_{1,\alpha})\right] \\
 &= \int d\mathbf{k} \prod_{\alpha=1}^D \{\cos[(x_1 \mp x \cos \bar{k}_{1,\alpha}) \cos \bar{k}_\alpha] \cos[(x \sin \bar{k}_{1,\alpha}) \sin \bar{k}_\alpha]\} = \prod_{\alpha=1}^D \left\{ \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{+\pi} d\bar{k}_\alpha \times \right. \\
 &\quad \left. \cos[(x_1 \mp x \cos \bar{k}_{1,\alpha}) \cos \bar{k}_\alpha] \cos[(x \sin \bar{k}_{1,\alpha}) \sin \bar{k}_\alpha] \right\} = \prod_{\alpha=1}^D J_0(\sqrt{x^2 + x_1^2 \mp 2xx_1 \cos \bar{k}_{1,\alpha}}). \quad (73)
 \end{aligned}$$

A (73)-ban találhatók két összefüggés alapján T_c és T_s kifejezhető

$$\begin{aligned}
 T_s(x, x_1, \mathbf{k}_1) &= \frac{1}{2} \left[\prod_{\alpha=1}^D J_0(\sqrt{x^2 + x_1^2 - 2xx_1 \cos \bar{k}_{1,\alpha}}) + \prod_{\alpha=1}^D J_0(\sqrt{x^2 + x_1^2 + 2xx_1 \cos \bar{k}_{1,\alpha}}) \right], \\
 T_c(x, x_1, \mathbf{k}_1) &= \frac{1}{2} \left[\prod_{\alpha=1}^D J_0(\sqrt{x^2 + x_1^2 - 2xx_1 \cos \bar{k}_{1,\alpha}}) - \prod_{\alpha=1}^D J_0(\sqrt{x^2 + x_1^2 + 2xx_1 \cos \bar{k}_{1,\alpha}}) \right], \quad (74)
 \end{aligned}$$

amely felhasználásával, a T_1 -re kapott összefüggés

$$\begin{aligned}
 T_1(\mathbf{k}_1) &= \frac{1}{2\pi^2} \int_0^\infty \frac{\sin(pDx)}{x} dx \int_0^\infty \frac{\sin(pDx_1)}{x_1} dx_1 \left[\prod_{\alpha=1}^D J_0(\sqrt{x^2 + x_1^2 - 2xx_1 \cos \bar{k}_{1,\alpha}}) \right. \\
 &\quad \left. + \prod_{\alpha=1}^D J_0(\sqrt{x^2 + x_1^2 + 2xx_1 \cos \bar{k}_{1,\alpha}}) \right] + \frac{1}{2\pi^2} \int_0^\infty \frac{\cos(pDx)}{x} dx \int_0^\infty \frac{\cos(pDx_1)}{x_1} dx_1 \\
 &\quad \times \left[\prod_{\alpha=1}^D J_0(\sqrt{x^2 + x_1^2 - 2xx_1 \cos \bar{k}_{1,\alpha}}) - \prod_{\alpha=1}^D J_0(\sqrt{x^2 + x_1^2 + 2xx_1 \cos \bar{k}_{1,\alpha}}) \right] + \frac{n}{2} - \frac{1}{4}. \quad (75)
 \end{aligned}$$

A kapott kifejezés a Gegenbauer-féle összegzési szabály („gráf szabály”) segítségével²⁵² leegyszerűsíthető ($\lambda = \pm 1$)

$$J_0(v_\alpha) = \sum_{n_\alpha=-\infty}^{+\infty} (-\lambda)^{n_\alpha} J_{n_\alpha}(x) J_{n_\alpha}(x_1) \cos(n_\alpha \bar{k}_{1,\alpha}), \quad v_\alpha = [x^2 + x_1^2 + 2\lambda x x_1 \cos \bar{k}_{1,\alpha}]^{\frac{1}{2}}, \quad (76)$$

A (76) bevezetésének az a nagy előnye, hogy az x és x_1 változók járulékait szétválasztja, így potenciális lehetőséget ad az eredmény szorzás formában vett felírására. Továbbmenőleg, megfigyelhető, hogy (76)-ot (75)-be helyettesítve, a $T_1(\mathbf{k}_1)$ -ben található két integrál (két rész) egyszerre nem szerepel az eredményben, hiszen vagy az első, vagy a második tag kiesik, attól függően, hogy az n_α értékeinek az összege páros, vagy páratlan. Ténylegesen, ha

$$N_s = \sum_{n_\alpha}^D n_\alpha \quad (77)$$

akkor

$$\begin{aligned}
 \prod_{\alpha=1}^D J_0(\sqrt{x^2 + x_1^2 - 2xx_1 \cos \bar{k}_{1,\alpha}}) &= \sum_{n_1=-\infty}^{+\infty} \sum_{n_2=-\infty}^{+\infty} \dots \sum_{n_D=-\infty}^{+\infty} \left[\prod_{\alpha=1}^D J_{n_\alpha}(x) J_{n_\alpha}(x_1) \cos(n_\alpha \bar{k}_{1,\alpha}) \right] \\
 \prod_{\alpha=1}^D J_0(\sqrt{x^2 + x_1^2 + 2xx_1 \cos \bar{k}_{1,\alpha}}) &= \sum_{n_1=-\infty}^{+\infty} \sum_{n_2=-\infty}^{+\infty} \dots \sum_{n_D=-\infty}^{+\infty} \left[\prod_{\alpha=1}^D (-1)^{N_s} J_{n_\alpha}(x) J_{n_\alpha}(x_1) \cos(n_\alpha \bar{k}_{1,\alpha}) \right]. \quad (78)
 \end{aligned}$$

Bevezetve a

$$\sum_{n_1=-\infty}^{+\infty} \sum_{n_2=-\infty}^{+\infty} \dots \sum_{n_D=-\infty}^{+\infty} = \prod_{\alpha=1}^D \left(\sum_{n_\alpha=-\infty}^{+\infty} \right) = \sum_{\{n_\alpha\}} \quad (79)$$

matematikai egyszerűsítő jelölést, látható hogy

$$\begin{aligned} & \prod_{\alpha=1}^D J_0(\sqrt{x^2 + x_1^2 - 2xx_1 \cos \bar{k}_{1,\alpha}}) + \prod_{\alpha=1}^D J_0(\sqrt{x^2 + x_1^2 - 2xx_1 \cos \bar{k}_{1,\alpha}}) \\ &= 2 \sum_{\{n_\alpha\}} \left[\prod_{\alpha=1}^D J_{n_\alpha}(x) J_{n_\alpha}(x_1) \cos(n_\alpha \bar{k}_{1,\alpha}) \right], \quad N_s = 2n \end{aligned} \quad (80)$$

és zéró ha $N_s = 2n + 1$ (páratlan), illetve hasonlóan

$$\begin{aligned} & \prod_{\alpha=1}^D J_0(\sqrt{x^2 + x_1^2 - 2xx_1 \cos \bar{k}_{1,\alpha}}) - \prod_{\alpha=1}^D J_0(\sqrt{x^2 + x_1^2 - 2xx_1 \cos \bar{k}_{1,\alpha}}) \\ &= 2 \sum_{\{n_\alpha\}} \left[\prod_{\alpha=1}^D J_{n_\alpha}(x) J_{n_\alpha}(x_1) \cos(n_\alpha \bar{k}_{1,\alpha}) \right], \quad N_s = 2n + 1 \end{aligned} \quad (81)$$

és zéró ha $N_s = 2n$ (páros). Ezen eredmények tükrében

$$\begin{aligned} T_1(\mathbf{k}_1) &= \frac{1}{\pi^2} \int_0^\infty \frac{\sin(pDx)}{x} dx \int_0^\infty \frac{\sin(pDx_1)}{x_1} dx_1 \sum_{\{n_\alpha\}} \left[\prod_{\alpha=1}^D J_{n_\alpha}(x) J_{n_\alpha}(x_1) \cos(n_\alpha \bar{k}_{1,\alpha}) \right] \delta_{N_s, 2m} \\ &+ \frac{1}{\pi^2} \int_0^\infty \frac{\cos(pDx)}{x} dx \int_0^\infty \frac{\cos(pDx_1)}{x_1} dx_1 \sum_{\{n_\alpha\}} \left[\prod_{\alpha=1}^D J_{n_\alpha}(x) J_{n_\alpha}(x_1) \cos(n_\alpha \bar{k}_{1,\alpha}) \right] \delta_{N_s, 2m+1} + \frac{n}{2} - \frac{1}{4}, \end{aligned} \quad (82)$$

ahol $2m$ és $2m + 1$ tetszőleges páros, illetve páratlan számot szimbolizál. Megfigyelhető továbbá, hogy (82) első tagjában az összes $n_\alpha = 0$, $N_s =$ páros járulék, (62) alapján $(1/2 - n/2)^2$ járulékot ad, ami (82)-ben szereplő $(n/2 - 1/4)$ taggal $(n/2)^2$ -et eredményez. Ezáltal a (82)-ben az összes $n_\alpha = 0$ tagot külön lehet választani. Az $n_\alpha = 0$ értéket nem tartalmazó részt $\sum'_{\{n_\alpha\}}$ -val jelölve (megjegyzendő, hogy (82) második tagjára ez automatikusan teljesül), a következő eredmény adódik

$$\begin{aligned} T_1(\mathbf{k}_1) &= \left(\frac{n}{2}\right)^2 + \sum'_{\{n_\alpha\}} \left\{ \left[\frac{1}{\pi} \int_0^\infty \frac{\sin(pDx)}{x} dx \left(\prod_{\alpha=1}^D J_{n_\alpha}(x) \right) \right] \left[\frac{1}{\pi} \int_0^\infty \frac{\sin(pDx')}{x'} dx' \left(\prod_{\alpha=1}^D J_{n_\alpha}(x') \right) \right] \delta_{N_s, 2m} \right. \\ &+ \left. \left[\frac{1}{\pi} \int_0^\infty \frac{\cos(pDx)}{x} dx \left(\prod_{\alpha=1}^D J_{n_\alpha}(x) \right) \right] \left[\frac{1}{\pi} \int_0^\infty \frac{\cos(pDx')}{x'} dx' \left(\prod_{\alpha=1}^D J_{n_\alpha}(x') \right) \right] \delta_{N_s, 2m+1} \right\} \left[\prod_{\alpha=1}^D \cos(n_\alpha \bar{k}_{1,\alpha}) \right]. \end{aligned} \quad (83)$$

b) $\mathbf{A} \ G^D(\{|n_\alpha|\})$ speciális függvény

A $T_1(\mathbf{k}_1)$ további egyszerűsítése céljából bevezetem a következő függvényt

$$\begin{aligned} \mathcal{G}^D(\{n_\alpha\}) &= \frac{1}{\pi} \int_0^\infty \frac{\text{trig}(N_s, pDx)}{x} dx \left[\prod_{\alpha=1}^D J_{n_\alpha}(x) \right] - \frac{1}{2} \delta_{\{n_\alpha\}, \{0\}}, \\ \text{trig}(N_s, X) &= (\sin X) \cos^2 \frac{N_s \pi}{2} + (\cos X) \sin^2 \frac{N_s \pi}{2}, \quad \delta_{\{n_\alpha\}, \{0\}} = \prod_{\alpha=1}^D \delta_{n_\alpha, 0}, \end{aligned} \quad (84)$$

ahol látszik, hogy $\text{trig}(N_s, X) = \sin(X)$, ha N_s páros, illetve $\text{trig}(N_s, X) = \cos(X)$ ha N_s páratlan.

A (84)-ben bevezetett függvény-motivációja az, hogy a $T_1(\mathbf{k}_1)$ (83)-ban adott és $\sum'_{\{n_\alpha\}}$ összeg alatt megjelenő kifejezésében, eltekintve a $[\prod_{\alpha=1}^D \cos(n_\alpha \bar{k}_{1,\alpha})]$ tagtól, a $\mathcal{G}^D(\{n_\alpha\})$ függvénynek a négyzete szerepel. Az is megjegyzésre méltó, hogy $\sum'_{\{n_\alpha\}}$ -ban az összes $n_\alpha = 0$ szituáció nem áll elő, tehát a $\mathcal{G}^D(\{n_\alpha\})$ kifejezésében szereplő $(1/2)\delta_{\{n_\alpha\},\{0\}}$ tag, a $\sum'_{\{n_\alpha\}}$ összeg alatt nem számít. De mivel (62) értelmében $\{0\} = \{n_1 = n_2 = \dots = n_D = 0\}$ zéró szettet jelenti)

$$\mathcal{G}^D(\{0\}) = -\frac{n}{2}, \quad (85)$$

a $T_1(\mathbf{k}_1)$ -nek (83)-ban adott kifejezésében az összeg előtt szereplő $(n/2)^2$ járulék az összeg elhagyott $(n_1 = n_2 = \dots = n_D = 0)$ tagjával kifejezhetővé válik, azaz elhagyva az összeg feletti jelzett jelölést

$$T_1(\mathbf{k}_1) = \sum_{\{n_\alpha\}} \mathcal{G}^D(\{n_\alpha\})^2 \left[\prod_{\alpha=1}^D \cos(n_\alpha \bar{k}_{1,\alpha}) \right]. \quad (86)$$

Azonban, a diagram értékeknek a kifejezése során a (84)-ben adott függvénynek sok hátránya van, egyrészt a lehetséges negatív n_α számértékek miatt. E célból figyelembe veszem hogy²⁵²

$$J_{-n}(x) = (-1)^n J_n(x), \quad n \geq 0, \quad (87)$$

Ennek megfelelően, bevezetve az

$$S(n_\alpha) = \begin{cases} (-1)^{n_\alpha}, & n_\alpha < 0, \\ +1, & n_\alpha \geq 0, \end{cases} \quad (88)$$

függvényt, a $\mathcal{G}^D(\{n_\alpha\})$ függvény (84)-ben adott kifejezése a következő képpen alakul

$$\begin{aligned} \mathcal{G}^D(\{n_\alpha\}) &= \frac{1}{\pi} \int_0^\infty \frac{dx}{x} \left[\sin \bar{x} \cos^2 \frac{N_s \pi}{2} + \cos \bar{x} \sin^2 \frac{N_s \pi}{2} \right] \left[\prod_{\alpha=1}^D J_{n_\alpha}(x) \right] - \frac{1}{2} \delta_{\{n_\alpha\},\{0\}} \\ &= \left[\prod_{\alpha=1}^D S(n_\alpha) \right] \left\{ \frac{1}{\pi} \int_0^\infty \frac{dx}{x} \left[\sin \bar{x} \cos^2 \frac{N_s \pi}{2} + \cos \bar{x} \sin^2 \frac{N_s \pi}{2} \right] \left[\prod_{\alpha=1}^D J_{|n_\alpha|}(x) \right] - \frac{1}{2} \delta_{\{n_\alpha\},\{0\}} \right\} \\ &= \left[\prod_{\alpha=1}^D S(n_\alpha) \right] \mathcal{G}^D(\{|n_\alpha|\}), \quad \bar{x} = pDx. \end{aligned} \quad (89)$$

A megadott kifejezéshez még egy előjelfaktort $f(N_s)$ teszünk hozzá, ahol

$$f(N_s) = \sin \frac{N_s \pi}{2} - \cos \frac{N_s \pi}{2}. \quad (90)$$

Bevezetve továbbá a

$$S(\{n_\alpha\}) = \prod_{\alpha=1}^D S(n_\alpha) \quad (91)$$

függvényt, a $G^D(\{|n_\alpha|\})$ speciálfüggvény definíciója

$$\begin{aligned}
G^D(\{|n_\alpha|\}) &\equiv G^D(|n_1|, |n_2|, \dots, |n_D|) = f(N_s) S(\{|n_\alpha|\}) \mathcal{G}^D(\{|n_\alpha|\}) = f(N_s) \mathcal{G}^D(\{|n_\alpha|\}) \\
&= \frac{1}{2} \delta_{\{|n_\alpha|\}, \{0\}} - \frac{1}{\pi} \int_0^\infty \frac{\sin(pDx)}{x} dx \left(\cos \frac{N_s \pi}{2} \right) \left[\prod_{\alpha=1}^D J_{|n_\alpha|}(x) \right] \\
&\quad + \frac{1}{\pi} \int_0^\infty \frac{\cos(pDx)}{x} dx \left(\sin \frac{N_s \pi}{2} \right) \left[\prod_{\alpha=1}^D J_{|n_\alpha|}(x) \right].
\end{aligned} \tag{92}$$

Mivel $G^D(\{|n_\alpha|\})$ csupán egy előjelfaktorban különbözik $\mathcal{G}^D(\{|n_\alpha|\})$ -tól, (86)-ból következik hogy

$$T_1(\mathbf{k}_1) = \sum_{\{n_\alpha\}} G^D(\{|n_\alpha|\})^2 \left[\prod_{\alpha=1}^D \cos(n_\alpha \bar{k}_{1,\alpha}) \right], \quad \bar{k}_{1,\alpha} = 2\pi k_{1,\alpha}. \tag{93}$$

Az $f(N_s)$ előjeltagnak $G^D(\{|n_\alpha|\})$ -ba való bevitelének az oka az, hogy ily módon, $G^D(\{|n_\alpha|\})$ -ra a következő definíció is érvényesül

$$G^D(\{|n_\alpha|\}) = \int d\mathbf{k} \Theta(\epsilon_F - \epsilon(\mathbf{k})) \left[\prod_{\alpha=1}^D \cos(n_\alpha \bar{k}_\alpha) \right]. \tag{94}$$

Ténylegesen, (58) alkalmazásával és a következő integrál értékekkel²⁵³

$$\begin{aligned}
\int_0^\pi \cos(z \cos x) \cos n x dx &= \pi \cos \frac{n\pi}{2} J_n(z), \\
\int_0^\pi \sin(z \cos x) \cos n x dx &= \pi \sin \frac{n\pi}{2} J_n(z),
\end{aligned} \tag{95}$$

a $\bar{\Theta}(\mathbf{k})$ -ból eredő és (94)-ben megjelenő tagok kiintegrálhatóak. A kapott integrálok

$$\begin{aligned}
&\frac{1}{(2\pi)^D} \left[\prod_{\alpha=1}^D \int_{-\pi}^{+\pi} d\bar{k}_\alpha \right] \cos(x \sum_{\alpha=1}^D \cos \bar{k}_\alpha) \left[\prod_{\alpha=1}^D \cos(n_\alpha \bar{k}_\alpha) \right] = \left[\prod_{\alpha=1}^D \int_0^{+\pi} \frac{d\bar{k}_\alpha}{\pi} \right] \cos(x \sum_{\alpha=1}^D \cos \bar{k}_\alpha) \left[\prod_{\alpha=1}^D \cos(n_\alpha \bar{k}_\alpha) \right] \\
&= \left[\cos\left(\frac{\pi}{2} \sum_{\alpha=1}^D n_\alpha\right) \right] \left[\prod_{\alpha=1}^D J_{n_\alpha}(x) \right] = \left[\cos \frac{N_s \pi}{2} \right] \left[\prod_{\alpha=1}^D J_{n_\alpha}(x) \right],
\end{aligned} \tag{96}$$

$$\begin{aligned}
&\frac{1}{(2\pi)^D} \left[\prod_{\alpha=1}^D \int_{-\pi}^{+\pi} d\bar{k}_\alpha \right] \sin(x \sum_{\alpha=1}^D \cos \bar{k}_\alpha) \left[\prod_{\alpha=1}^D \cos(n_\alpha \bar{k}_\alpha) \right] = \left[\prod_{\alpha=1}^D \int_0^{+\pi} \frac{d\bar{k}_\alpha}{\pi} \right] \sin(x \sum_{\alpha=1}^D \cos \bar{k}_\alpha) \left[\prod_{\alpha=1}^D \cos(n_\alpha \bar{k}_\alpha) \right] \\
&= \left[\sin\left(\frac{\pi}{2} \sum_{\alpha=1}^D n_\alpha\right) \right] \left[\prod_{\alpha=1}^D J_{n_\alpha}(x) \right] = \left[\sin \frac{N_s \pi}{2} \right] \left[\prod_{\alpha=1}^D J_{n_\alpha}(x) \right],
\end{aligned} \tag{97}$$

továbbá

$$\frac{1}{(2\pi)^D} \left[\prod_{\alpha=1}^D \int_{-\pi}^{+\pi} d\bar{k}_\alpha \right] \left[\prod_{\alpha=1}^D \cos(n_\alpha \bar{k}_\alpha) \right] = \delta_{\{n_\alpha\}, \{0\}}. \tag{98}$$

Megjegyzem, hogy (96) esetében úgy járunk el, hogy az összeg argumentumú koszinuszt felbontjuk, az integrálokat (95) alapján elvégezzük, majd az eredményt újból összegzett argumentumú koszinusszá transzformáljuk. Az eljárás hasonló (97) esetében is, csak ott az összeg argumentumú szinuszt bontjuk fel, majd az integrálok elvégzése után az eredményt alakítjuk vissza összegzett argumentumú szinussszá.

A (94)-nek (92) kifejezése, (96-98) alapján azonnal következik.

A (85,92)-ből következik, hogy

$$G^D(\{0\}) = \frac{n}{2}. \quad (99)$$

Amennyiben térbeli korrelációkat teljesen elhanyagolunk, a Gutzwiller hullámfüggvény mellett a Gutzwiller approximációt használjuk. Ez esetben a $G^D(\{|n_\alpha|\})$ függvényekből csupán a (99)-ben adott értéket vesszük figyelembe. Azaz, a Gutzwiller hullámfüggvény által szolgáltatott eredményeket (92,94) adja, míg a Gutzwiller hullámfüggvény mellett alkalmazott Gutzwiller közelítés a $G^D(\{|n_\alpha|\})$ függvényt mindenhol zérónak tekinti, kivéve az origót, ahol (99) által adott érték van jelent. Ebből érzékelhető, hogy a Gutzwiller hullámfüggvény mellett a Gutzwiller approximáció alkalmazása kvalitatív különbözővé teszi az eredményeket.

A (92) alapján tetszőleges D dimenzióban a G^D függvények explicite meghatározhatóak. Pl. $D = 1$ és $D = 2$ esetében

$$G^{D=1}(n_1) = \frac{1}{n_1 \pi} \sin(n_1 \arccos p),$$

$$G^{D=2}(n_1, n_2) = \frac{2}{(n_1 + n_2) \pi^2} \int_0^{\arccos p} dx \cos[(n_1 - n_2)x] \sin[(n_1 + n_2) \arccos(\frac{p}{\cos x})], \quad (100)$$

ahol a p paramétert az n koncentrációval összekötő összefüggés (62)-ben adott. A (100) jelentősége abban rejlik, hogy amint látni fogjuk, rögzített D dimenzióban minden Gutzwiller hullámfüggvényre vonatkozó számolás (semmi más közelítés felhasználása nélkül) a $G^D(\{|n_\alpha|\})$ függvényre redukálódik. Megjegyzem még, hogy bizonyos esetekben, $D = 2$ -ben is G^D explicite megadható. Pl. félig töltött sávra (ekkor $p = 0$, azaz a koncentráció $n = 1$).

$$G^{D=2}(n_1, n_2) = \frac{2}{(n_1^2 - n_2^2) \pi^2} \sin \frac{(n_1 + n_2) \pi}{2} \sin \frac{(n_1 - n_2) \pi}{2}, \quad p = 0. \quad (101)$$

Két dimenzióban a G^D függvény formáját a 4. Ábra példázza. A rajz megszerkeztése félig töltött sávra (és folytonosított n_i változókkal) történt. Ha a sávtöltés változik, a függvény képe kvalitatíve hasonló marad, csak a központi maximum relatív magassága csökken a többi maximumhoz képest p növekedésével. A Gutzwiller hullámfüggvény melletti Gutzwiller közelítés (amint azt (100) előtt hangsúlyoztam) csak a központi maximum értékkel számol.

c) $A T_2$ tag kifejezése

A T_2 tag definíciója

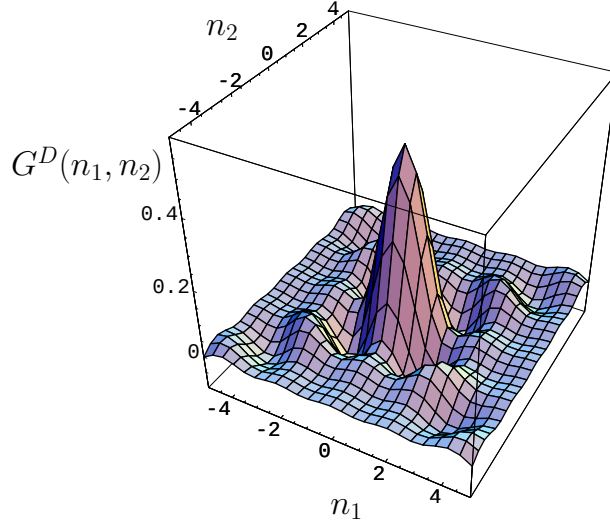
$$T_2(\mathbf{k}_{s_1}, \mathbf{k}_{s_2}) = \int d\mathbf{k} \bar{\Theta}(\mathbf{k}) \bar{\Theta}(\mathbf{k} + \mathbf{k}_{s_1}) \bar{\Theta}(\mathbf{k} + \mathbf{k}_{s_2}). \quad (102)$$

A számítás a (58,63) felhasználásával és a $J_n(x)$ Bessel függvények előbb bemutatott módon való használata révén közvetlenül is elvégezhető, és a kapott eredmény

$$T_2(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) = \left[\sum_{\{|n_{1,\alpha}|\}} G^D(\{|n_{1,\alpha}|\}) \right] \left[\sum_{\{|n_{2,\alpha}|\}} G^D(\{|n_{2,\alpha}|\}) \right] G^D(\{|n_{1,\alpha} + n_{2,\alpha}|\})$$

$$\times \left[\prod_{\alpha=1}^D \cos(n_{1,\alpha} \bar{k}_{1,\alpha} + n_{2,\alpha} \bar{k}_{2,\alpha}) \right]. \quad (103)$$

Azonban, az eddig levezetett eredmények alapján a (103) egyenlőség a $\Theta(x)$ függvények felbontása nélkül is ellenőrizhető. Hogy ezt látni lehessen, koncentráljunk a 2. Ábra G_{3a} -val jelölt diagramjára. A (54) összefüggés szerint ezen diagram értéke T_2 segítségével kifejezhető, de ugyanakkor (53)-ban feltüntetett T_1 -el is megadható



4. Ábra . A $D = 2$ dimenzióban vett $G^D(n_1, n_2)$ függvény félig töltött sáv ($p = 0$) esetében.

$$\begin{aligned}
 V(G_{3a}) &= \int d\mathbf{k}_1 \int d\mathbf{k}_2 \int d\mathbf{k}_3 \int d\mathbf{k}_4 \bar{\Theta}(\mathbf{k}_1) \bar{\Theta}(\mathbf{k}_2) \bar{\Theta}(\mathbf{k}_3) \bar{\Theta}(\mathbf{k}_4) \bar{\Theta}(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_3) \bar{\Theta}(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_4) \\
 &= \int d\mathbf{k}_2 \int d\mathbf{k}_3 \int d\mathbf{k}_4 \bar{\Theta}(\mathbf{k}_2) \bar{\Theta}(\mathbf{k}_3) \bar{\Theta}(\mathbf{k}_4) T_2(\mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_3, \mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_4) \\
 &= \int d\mathbf{k}_1 \int d\mathbf{k}_2 \bar{\Theta}(\mathbf{k}_1) \bar{\Theta}(\mathbf{k}_2) T_1(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2) T_1(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2), \\
 T_2(\mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_3, \mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_4) &= \int d\mathbf{k} \bar{\Theta}(\mathbf{k}) \bar{\Theta}(\mathbf{k} + \mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_3) \bar{\Theta}(\mathbf{k} + \mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_4), \\
 T_1(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2) &= \int d\mathbf{k} \bar{\Theta}(\mathbf{k}) \bar{\Theta}(\mathbf{k} + \mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2). \tag{104}
 \end{aligned}$$

Ez a két felírási mód lehetőséget ad T_2 -nek T_1 szerinti kifejezésére. E célból T_1 -et (93) segítségével fejezem ki, majd a kapott összefüggésben, egyetlen $G^D(\{|n_\alpha|\})$ függvényt (94)-el helyettesítek. Ekkor

$$\begin{aligned}
 T_1(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2) &= \sum_{\{n_{1,\alpha}\}} G^D(\{|n_{1,\alpha}|\})^2 \prod_{\alpha=1}^D \cos[n_{1,\alpha}(\bar{k}_{1,\alpha} + \bar{k}_{2,\alpha})] \\
 &= \int d\mathbf{k} \bar{\Theta}(\mathbf{k}) \sum_{\{n_{1,\alpha}\}} G^D(\{|n_{1,\alpha}|\}) \prod_{\alpha=1}^D \cos[n_{1,\alpha}(\bar{k}_{1,\alpha} + \bar{k}_{2,\alpha})] \cos(n_{1,\alpha} \bar{k}_\alpha). \tag{105}
 \end{aligned}$$

Most (105)-öt (104) harmadik sorába írva, ott négyzetesen fog szerepelni, így integrálási változóját egyszer $\mathbf{k} = \mathbf{k}_3$, egyszer meg $\mathbf{k} = \mathbf{k}_4$ helyettesítéssel használva, a $V(G_{3a})$ kifejezésére a következő összefüggés adódik

$$\begin{aligned}
 V(G_{3a}) &= \int d\mathbf{k}_2 \int d\mathbf{k}_3 \int d\mathbf{k}_4 \bar{\Theta}(\mathbf{k}_2) \bar{\Theta}(\mathbf{k}_3) \bar{\Theta}(\mathbf{k}_4) \sum_{\{n_{1,\alpha}\}} G^D(\{|n_{1,\alpha}|\}) \sum_{\{n_{2,\alpha}\}} G^D(\{|n_{2,\alpha}|\}) \\
 &\quad \times \int d\mathbf{k}_1 \bar{\Theta}(\mathbf{k}_1) \prod_{\alpha=1}^D [\cos[n_{1,\alpha}(\bar{k}_{1,\alpha} + \bar{k}_{2,\alpha})] \cos(n_{1,\alpha} \bar{k}_{3,\alpha}) \cos[n_{2,\alpha}(\bar{k}_{1,\alpha} + \bar{k}_{2,\alpha})] \cos(n_{2,\alpha} \bar{k}_{4,\alpha})]. \tag{106}
 \end{aligned}$$

A (106) és (104) második sorának összehasonlításából a T_2 tag leolvasható

$$T_2(\mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_3, \mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_4) = \left[\sum_{\{n_{1,\alpha}\}} G^D(\{|n_{1,\alpha}|\}) \right] \left[\sum_{\{n_{2,\alpha}\}} G^D(\{|n_{2,\alpha}|\}) \right] \times \\ \int d\mathbf{k}_1 \bar{\Theta}(\mathbf{k}_1) \prod_{\alpha=1}^D [\cos[n_{1,\alpha}(\bar{k}_{1,\alpha} + \bar{k}_{2,\alpha})] \cos(n_{1,\alpha} \bar{k}_{3,\alpha}) \cos[n_{2,\alpha}(\bar{k}_{1,\alpha} + \bar{k}_{2,\alpha})] \cos(n_{2,\alpha} \bar{k}_{4,\alpha})]. \quad (107)$$

Most megfigyelhető viszont, hogy tetszőleges α komponensre, az integrandus $\bar{k}_\alpha$ -ban vett páratlan mivolta miatt

$$\int d\mathbf{k} \bar{\Theta}(\mathbf{k}) \sin(n_\alpha \bar{k}_\alpha) = 0, \quad (108)$$

továbbá, az integrandus az $n_{1,\alpha}$ összegzésre vett páratlan mivolta miatt

$$\left[\sum_{\{n_{1,\alpha}\}} G^D(\{|n_{1,\alpha}|\}) \right] \int d\mathbf{k} \bar{\Theta}(\mathbf{k}) \sin(n_{1,\alpha} \bar{k}_\alpha) \sin(n_{2,\alpha} \bar{k}_\alpha) = 0. \quad (109)$$

Ennek következtében, (107)-ben a koszinusz argumentum összegek mindig egyszerű argumentumú koszinusz tagok szorzatára bonthatók, és viszont. Ennek eredményeként

$$T_2(\mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_3, \mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_4) = \left[\sum_{\{n_{1,\alpha}\}} G^D(\{|n_{1,\alpha}|\}) \right] \left[\sum_{\{n_{2,\alpha}\}} G^D(\{|n_{2,\alpha}|\}) \right] \times \\ \left[\prod_{\alpha=1}^D \cos[n_{1,\alpha}(\bar{k}_{2,\alpha} + \bar{k}_{3,\alpha})] \cos[n_{2,\alpha}(\bar{k}_{2,\alpha} + \bar{k}_{4,\alpha})] \right] \int d\mathbf{k}_1 \bar{\Theta}(\mathbf{k}_1) \left[\prod_{\alpha=1}^D \cos[(n_{1,\alpha} + n_{2,\alpha}) \bar{k}_{1,\alpha}] \right]. \quad (110)$$

Az itt szereplő $d\mathbf{k}_1$ szerinti integrált (94) alapján elvégezve

$$T_2(\mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_3, \mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_4) = \left[\sum_{\{n_{1,\alpha}\}} G^D(\{|n_{1,\alpha}|\}) \right] \left[\sum_{\{n_{2,\alpha}\}} G^D(\{|n_{2,\alpha}|\}) \right] G^D(\{|n_{1,\alpha} + n_{2,\alpha}|\}) \\ \times \left[\prod_{\alpha=1}^D \cos[n_{1,\alpha}(\bar{k}_{2,\alpha} + \bar{k}_{3,\alpha}) + n_{2,\alpha}(\bar{k}_{2,\alpha} + \bar{k}_{4,\alpha})] \right] \quad (111)$$

adódik, amelyből $\mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_3 \rightarrow \mathbf{k}_1$, $\mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_4 \rightarrow \mathbf{k}_2$ átjelöléssel, (103) automatikusan következik.

d) A tetszőleges T_j tag kifejezése

A tetszőleges, a (52)-ben adott $T_{j=m}$ tag esetében, a $T_j(\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_j)$ -t megadó kifejezés identikus módon levezethető. A $V(G_{3a})$ diagram mintájára ebből a célból egy olyan $m+1$ -ed rendű diagrammal dolgozom (legyen a jelölése $V(G_{m+1,a})$), amely abban hasonlít a 2. Ábra diagramjához, hogy mindegyik szomszédos (és $m+1$ darab) csomópontját két-két vonal köti össze. Ezáltal a diagramban $2(m+1)$ vonal található (lásd negyed rendben az 5. Ábra a) rajzát) és a diagram értéke

$$V(G_{m+1,a}) = \int d\mathbf{k}_1 \int d\mathbf{k}_2 \dots \int d\mathbf{k}_{m+2} \bar{\Theta}(\mathbf{k}_1) \bar{\Theta}(\mathbf{k}_2) \dots \bar{\Theta}(\mathbf{k}_{m+2}) \\ \times \bar{\Theta}(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_3) \bar{\Theta}(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_4) \dots \bar{\Theta}(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_{m+2}) \\ = \int d\mathbf{k}_1 \int d\mathbf{k}_2 \bar{\Theta}(\mathbf{k}_1) \bar{\Theta}(\mathbf{k}_2) T_1(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2)^m \\ = \int d\mathbf{k}_1 \dots \int d\mathbf{k}_{m+1} \bar{\Theta}(\mathbf{k}_1) \bar{\Theta}(\mathbf{k}_2) \dots \bar{\Theta}(\mathbf{k}_{m+1}) T_m(\mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_3, \mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_4, \dots, \mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_{m+2}) \quad (112)$$

A T_2 levezetésénél használt módszert identikusan alkalmazva

$$\begin{aligned}
T_m(\mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_3, \dots, \mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_{m+2}) &= [\sum_{\{n_{1,\alpha}\}} G^D(\{|n_{1,\alpha}|\})][\sum_{\{n_{2,\alpha}\}} G^D(\{|n_{2,\alpha}|\})] \dots [\sum_{\{n_{m,\alpha}\}} G^D(\{|n_{m,\alpha}|\})] \\
&\times [\prod_{\alpha=1}^D \cos[n_{1,\alpha}(\bar{k}_{2,\alpha} + \bar{k}_{3,\alpha}) + n_{2,\alpha}(\bar{k}_{2,\alpha} + \bar{k}_{4,\alpha}) + \dots + n_{m,\alpha}(\bar{k}_{2,\alpha} + \bar{k}_{m+2,\alpha})]] \\
&\times [\int d\mathbf{k}_1 \bar{\Theta}(\mathbf{k}_1) \prod_{\alpha=1}^D \cos[(n_{1,\alpha} + n_{2,\alpha} + \dots n_{m,\alpha})\bar{k}_{1,\alpha}]]. \tag{113}
\end{aligned}$$

Mindezek után a megmaradt integrálnak (94) szerinti elvégzése adja tetszőleges $m = j$ -re a T_j függvény formáját

$$T_j(\{k_{s_j}\}) = [\prod_{i=1}^j [\sum_{\{n_{i,\alpha}\}} G^D(\{|n_{i,\alpha}|\})]] G^D(\{[\sum_{i=1}^j n_{i,\alpha}]\}) [\prod_{\alpha=1}^D \cos[\sum_{i=1}^j n_{i,\alpha} \bar{k}_{s_i,\alpha}]]. \tag{114}$$

e) Tetszőleges diagram értékének felírása D -dimenzióban.

Amint azt a (51)-ben már jeleztem, az előbb kifejezett T_j tagok fontossága abban rejlik, hogy segítségükkel minden C_m -hez tartozó diagramérték kiszámítható. A (114)-ben kapott eredmény rendkívülisége abban rejlik, hogy a megmaradt $\mathbf{k}$ függés lényegileg $\prod_{\alpha} \cos(n_{\alpha} \bar{k}_{i,\alpha})$ formájú, tehát a diagramok kifejezésében (lásd (51)-ben) a T_j tagokon túlmenőleg megmaradt integrálok (94) révén újból G^D függvényekhez vezetnek, így minden C_m -hez tartozó diagram tetszőleges D dimenzióban, tisztán G^D ismeretében pontosan kifejezhető.

A diagram értékeket felírva a G^D függvényében, a következő összefüggések erednek:

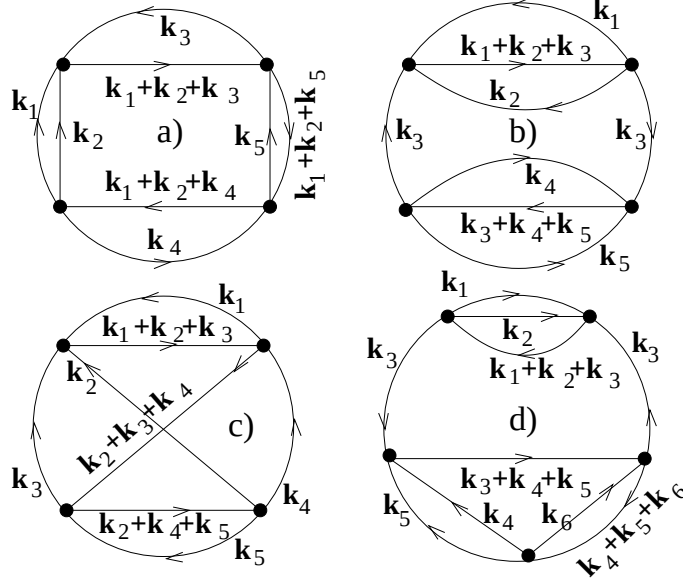
A 2. Ábra és 3. Ábra diagramértékei a T_j tagokkal (54) illetve (53) összefüggésekben megtalálhatók, így ezeknek csak a G^D függvényekkel adott kifejezéseit írom fel:

$$\begin{aligned}
V(G_{2a}) &= \sum_{\{n_{\alpha}\}} G^D(\{|n_{\alpha}|\})^4, \\
V(G_{3a}) &= \sum_{\{n_{1,\alpha}\}} \sum_{\{n_{2,\alpha}\}} G^D(\{|n_{1,\alpha}|\})^2 G^D(\{|n_{2,\alpha}|\})^2 G^D(\{|n_{1,\alpha} + n_{2,\alpha}|\})^2. \tag{115}
\end{aligned}$$

Az 5. Ábra esetében megadott új diagramokra a T_j -vel kifejezett értékeiket is felírom a G^D -vel adott kifejezésekkel együtt:

$$\begin{aligned}
V(G_{4a}) &= [\prod_{i=2}^5 \int d\mathbf{k}_i \bar{\Theta}(\mathbf{k}_i)] T_3(\mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_3, \mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_4, \mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_5) \\
&= \sum_{\{n_{1,\alpha}\}} \sum_{\{n_{2,\alpha}\}} \sum_{\{n_{3,\alpha}\}} G^D(\{|n_{1,\alpha}|\})^2 G^D(\{|n_{2,\alpha}|\})^2 G^D(\{|n_{3,\alpha}|\})^2 G^D(\{|n_{1,\alpha} + n_{2,\alpha} + n_{3,\alpha}|\})^2, \\
V(G_{4b}) &= [\prod_{i=1}^4 \int d\mathbf{k}_i \bar{\Theta}(\mathbf{k}_i)] T_3(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_3, \mathbf{k}_3 + \mathbf{k}_4) = \sum_{\{n_{1,\alpha}\}} \sum_{\{n_{2,\alpha}\}} \sum_{\{n_{3,\alpha}\}} G^D(\{|n_{1,\alpha}|\})^2 G^D(\{|n_{2,\alpha}|\}) \\
&\times G^D(\{|n_{3,\alpha}|\})^2 G^D(\{|n_{1,\alpha} + n_{2,\alpha}|\}) G^D(\{|n_{2,\alpha} + n_{3,\alpha}|\}) G^D(\{|n_{1,\alpha} + n_{2,\alpha} + n_{3,\alpha}|\}) \\
V(G_{4c}) &= [\prod_{i=1}^4 \int d\mathbf{k}_i \bar{\Theta}(\mathbf{k}_i)] T_2(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3 + \mathbf{k}_4) \\
&= \sum_{\{n_{1,\alpha}\}} \sum_{\{n_{2,\alpha}\}} G^D(\{|n_{1,\alpha}|\})^3 G^D(\{|n_{2,\alpha}|\})^3 G^D(\{|n_{1,\alpha} + n_{2,\alpha}|\}). \tag{116}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
V(G_{5e}) &= \int d\mathbf{k}_1 \bar{\Theta}(\mathbf{k}_1) \int d\mathbf{k}_2 \bar{\Theta}(\mathbf{k}_2) \int d\mathbf{k}_4 \bar{\Theta}(\mathbf{k}_4) \int d\mathbf{k}_5 \bar{\Theta}(\mathbf{k}_5) T_2(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_4 + \mathbf{k}_5) T_1(\mathbf{k}_4 + \mathbf{k}_5) \\
&= \sum_{\{n_{1,\alpha}\}} \sum_{\{n_{2,\alpha}\}} \sum_{\{n_{3,\alpha}\}} G^D(\{|n_{1,\alpha}|\})^2 G^D(\{|n_{2,\alpha}|\})^2 G^D(\{|n_{3,\alpha}|\})^3 \\
&\quad \times G^D(\{|n_{1,\alpha} + n_{2,\alpha}|\}) G^D(\{|n_{1,\alpha} + n_{2,\alpha} + n_{3,\alpha}|\}).
\end{aligned} \tag{117}$$



5. Ábra . A C_m -hez tartozó négy másik diagram példázata: a) $m = 4$ -re $V(G_{4a})$; b) $m = 4$ -re $V(G_{4c})$; c) $m = 4$ -re $V(G_{4b})$; d) $m = 5$ -re $V(G_{5e})$.

A kapott eredmények is jól mutatják, hogy a diagram felrajzolása után diagramisztikus szabályok állapíthatók meg amelyek engedélyezik a diagramok értékeinek direkt a G^D speciálfüggvény függvényében vett felírását. Ebből a célból az irreducibilis diagramok kiszámítása a következő képpen történik:

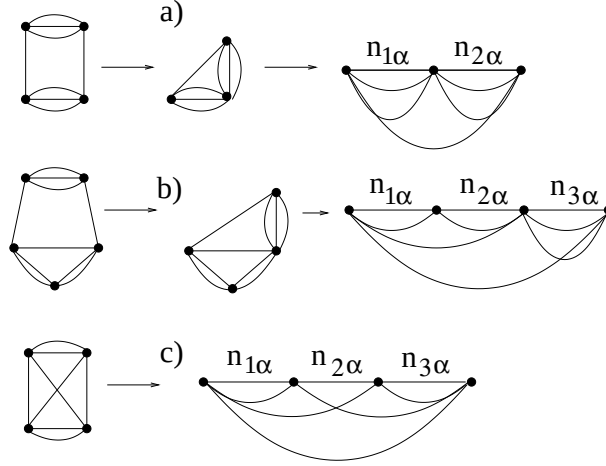
A) Minden diagram szkeleton diagramját meg kell szerkeszteni. E célból az ugyanazon $\mathbf{k}$ értéket hordozó vonalak közül csak egyet hagyok meg (ilyen vonalak kötik be a szelfenergia részeket). Az elhagyott vonal két végső vertexét egybe olvasztom. A lépés azért szükséges, mert két ilyen vonalnak egyetlen $\int d\mathbf{k}$ integrál felel meg, továbbá a $\bar{\Theta}(\mathbf{k})^2 = \bar{\Theta}(\mathbf{k})$ összefüggés miatt csak egy Θ -függvény járulék adódik a diagramértékben (lásd 6. Ábra a) és b) esetek, első lépés).

B) Mindezek után az előző pontban kapott szkeleton diagramok lineáris formában kerülnek felrajzolásra (lásd 6. Ábra utolsó lépése). Ez azt jelenti, hogy az m -ed rendű diagramok összes pontját egy egyenes mentén rajzolom le. A pontok száma $m - N_{el}$, ahol N_{el} jelöli az A) pontban eltávolított vonalak számát.

C) Ezután az indexálás lépése következik. Ez azt jelenti, hogy a B) pontban lerajzolt lineáris szkeleton diagram vízszintes vonalán (ez tartalmazza az $m - N_{el}$ darab egymásutáni vertexet), minden egymásutáni csomópont által meghatározott szakaszhoz egy independens $n_{i,\alpha}$ koefficiens rendelek (lásd 6. Ábra utolsó lépésében kapott diagramokon szereplő indexeket). Összesen $m - 1 - N_{el}$ szakasz van, tehát $i = 1, 2, \dots, m - 1 - N_{el}$ különálló és független $n_{i,\alpha}$ index lesz.

D) Ezután a diagram értékének felírása következik. Ez úgy történik, hogy a C) pontban

minden keletkezett vonalhoz egy $G^D(\{l_\alpha\})$ függvényt rendelék, ahol i) amennyiben a vonal két egymásutáni pontot köt össze $l_\alpha = n_{i,\alpha}$, ahol $n_{i,\alpha}$ az egymásutáni két csomópontot összekötő szakasz indexe. ii) amennyiben a vonal két nem-szomszédos csomópontot (X és Y) köt össze, összeadom a két pont közötti indexeket (ezek halmazát jelöli $I_{X,Y}$) és az így kapott összeg adja az $l_\alpha = \sum_{i \in I_{X,Y}} n_{i,\alpha}$ számértéket a vonalhoz tartozó G^D függvény argumentumában. Ezután az összes és független $n_{i,\alpha}$ szerint, $\sum_{\{n_{i,\alpha}\}}$ formában összegzek.



6. Ábra . A szkeleton diagramok megszerkeztése, a vonal formájú szkeleton diagram megrajzolása, végül az $n_{i,\alpha}$ értékek hozzárendelése.

A procedura könnyen megérthető ha a 6. Ábra linearizált szkeleton diagramjait összehasonlítjuk a (116,117) diagramértékeivel. Ezen összehasonlításban a 6. Ábra a),b),c) eseteinek rendre: 5. Ábra b) és ezáltal $V(G_{4c})$; 5. Ábra d) és ezáltal $V(G_{5e})$; illetve 5. Ábra c) és ezáltal $V(G_{4b})$ diagramértékek felelnek meg.

Megemlítem még, hogy a C_m -ben előforduló egyszerű zárt hurkok („fermionic bouble”, azaz azonos pontból induló és ugyanazon pontba visszatérő egyszerű zárt fermionikus vonal) olyan vonalakat jelentenek, melyekhez tartozik ugyan egy G^D függvény, de a lineáris formára hozott szkeleton diagramban nem tartozik hozzájuk $n_{i,\alpha}$ index. Az összes ilyen egyszerű zárt hurok értéke tehát $G^D(\{0\}) = n/2$.

f) A C_m tagok kifejezése $m = 7$ -ed rendig

Hogy teljesebb legyen a kép a C_m koeficiensokról, az alábbiakban megadom kifejezésüket heted rendig

$$C_1 = \left(\frac{n}{2}\right)^2,$$

$$C_2 = D_2 - 2\left(\frac{n}{2}\right)^3,$$

$$C_3 = D_3 - 6\frac{n}{2}D_2 + 5\left(\frac{n}{2}\right)^4,$$

$$C_4 = D_4 - 8\frac{n}{2}D_3 + 28\left(\frac{n}{2}\right)^2D_2 - 14\left(\frac{n}{2}\right)^5,$$

$$C_5 = D_5 + 5D_2^2 - 10\frac{n}{2}D_4 + 45\left(\frac{n}{2}\right)^2D_3 - 120\left(\frac{n}{2}\right)^3D_2 + 42\left(\frac{n}{2}\right)^6,$$

$$C_6 = D_6 + 12D_2D_3 - 66\frac{n}{2}D_2^2 - 12\frac{n}{2}D_5 + 66\left(\frac{n}{2}\right)^2D_4 - 220\left(\frac{n}{2}\right)^3D_3 + 495\left(\frac{n}{2}\right)^4D_2 - 132\left(\frac{n}{2}\right)^7,$$

$$C_7 = D_7 + 14D_2D_4 + 7D_3^2 - 2C_{14}^2 \frac{n}{2} D_2 D_3 + 546 \left(\frac{n}{2}\right)^2 D_2^2 - 14 \frac{n}{2} D_6 + 91 \left(\frac{n}{2}\right)^2 D_5 - C_{14}^3 \left(\frac{n}{2}\right)^3 D_4 + C_{14}^4 \left(\frac{n}{2}\right)^4 D_3 - C_{14}^5 \left(\frac{n}{2}\right)^5 D_2 + \frac{1}{7} C_{14}^6 \left(\frac{n}{2}\right)^8. \quad (118)$$

Ezen egyenlőségekben C_n^m az n egész érték m helyre vett kombinációinak számát adja, D_m pedig az m rendben vett irreducibilis diagramok összege. Ezeket úgy kapjuk hogy: i) ábrázoljuk C_m diagramisztikus kifejezését úgy ahogy azt az 1. Ábra szemlélteti, ii) a kapott kifejezésből leválasztjuk az irreducibilis diagramokat (azaz azon diagramokat amelyek nem vágathatók fel két diszjunkt részre egyetlen vertex elvágásával), iii) a leválasztás nyomán kapott diagram összeg pontosan D_m -et adja. Pl. az 1. Ábra alapján látható, hogy $D_2 = G_{2a}$, $D_3 = 2G_{3a}$, stb.

Megjegyzem végül, hogy a C_m járulékait $m \leq 8$ nyolcad rendig a Ref.[9]-ben publikáltam.

g) Megjegyzések

A) A $V(G)$ diagramértékekre kapott összegek erősen konvergensek. Például $D = 2$ -ben az $n_{i,\alpha} \in [-N_u, N_u]$ összegzési tartományt véve figyelembe, $V(G_{2a})(N_u = 2)/V(G_{2a})(N_u = \infty) = 0.9994$, továbbá ezen arányértékek rendkívül gyengén függenek a D dimenziótól. Így megérthető, hogy a diagramértékek G^D függvénnyel vett kifejezésének számítógépes kiszámítása nagyon gyors művelet. A memoriaszükséglet pedig csupán a G^D függvények tárolását igényli.

B) A Gutzwiller hullámfüggvény (a szakirodalomban $GW F$) mellett használt Gutzwiller approximáció (a szakirodalomban GA) úgy adódik, hogy az itt bemutatott diagramok kifejezéséből elhagyjuk a $\sum_{\{n_{i,\alpha}\}}$ összegeket, és minden G^D függvényt $G^D(\{0\}) = n/2$ -vel helyettesítünk. Pl. $V(G_{2a}) = G^D(\{0\})^4 = (n/2)^4$, $V(G_{3a}) = G^D(\{0\})^6 = (n/2)^6$, stb. Látható tehát hogy GA kvalitatíve megváltoztatja a diagramjárulékok kifejezését.

C) A $D = 1$ Metzner és Vollhardt¹²⁵ eredmények minden diagramra visszaadódnak. E célból a G^D függvényre $D = 1$ -ben a (100) első sorát, a koncentrációra pedig a (62) összefüggés $D = 1$ változatát kell használni. Megjegyzem, hogy ez utóbbi $p \geq 0$ és $n \leq 1$ esetében

$$\frac{\pi(1-n)}{2} = \arcsin(p), \quad D = 1, n \leq 1, p \geq 0, \quad (119)$$

egyenlőséget eredményezi. Így például $D = 1$ -re

$$V(G_{2a}) = \left(\frac{n}{2}\right)^4 + \frac{2}{\pi^4} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{1}{m^4} \sin^4[m \arccos(p)], \quad (120)$$

mely összefüggés (119) felhasználásával a (Ref.¹²⁵)-ben kapott $V(G_{2a}) = (2/3)(n/2)^3$ eredményt visszaadja.

D) Diagram értékek $D = 2$ -ben is számíthatók pontosan, például $n = 1$ félig töltött sáv esetében, amikor a G^D függvény (101) összefüggés alapján explicít ismert. Például

$$\begin{aligned} V(G_{2a}) &= \frac{1}{16} + \frac{255\xi(8)}{4\pi^8} + \frac{32}{\pi^8} \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{1 - (-1)^{n+m}}{(n^2 - m^2)^4} \\ &= \frac{349}{5040} + \frac{1}{192\pi^2} + \frac{35\xi(3)}{64\pi^6} - \frac{1}{24\pi^4} = 0.07002977300 \end{aligned} \quad (121)$$

A kapott eredmény összehasonlítható ugyanazon diagram GA esetben használt $(n/2)^4 = 0.062$, illetve a $D = 1$ értékkel $(2/3)(n/2)^3 = 0.083333$. Ebből látható, hogy a diagram értékek a dimenzió függvényében csökkennek (a GA $D = \infty$ -ben lesz egzakt). Az eredmény azt is példázza, hogy a GA a pontos $D = 1$ individuális diagramértékeket 33%-nyi relatív hibával, míg a $D = 2$ értékeket 13%-nyi relatív hibával adja vissza (megjegyzem, hogy nagyságrendileg ezen százalékos érték nagyjából minden diagramnál megmarad).

3. A kinetikus energia tag átlagértékébe tartozó diagramértékek számolása D dimenzióban

A $\langle H_{kin} \rangle / L$ értéket (38) alapján számolom ahol $n_{\mathbf{k}}$ a (41)-ben adott. A (41) járuléka az $f_{m,\sigma}(\mathbf{k})$ -ban találhatóak, tehát $f_{m,\sigma}(\mathbf{k})$ ismeretében lehet a kinetikus energia tag várható értékét kifejezni.

a) Az $f_{m,\sigma}(\mathbf{k})$ diagramjárulékok megszerkeztése

Amint azt a (47) összefüggést követő szövegben leírtam, az $f_{m,\sigma}(\mathbf{k})$ járulékok pontosan megkaphatóak a C_m -hez tartozó diagramok vonalainak elvágásával. Ez matematikai formába öntve, individuális C_m -hez tartozó diagramok szintjén a következőket jelenti:

Minden egyes C_m -hez tartozó $V(G_{m,i})$ diagramhoz hozzárendelem a következő kifejezést

$$\mathcal{S}(G_{m,i}) = \frac{1}{2m} [\sum_{\gamma} cut_{\gamma}(G_{m,i})], \quad (122)$$

ahol $cut_{\gamma}(G_{m,i})$ azon diagramot jelöli, amelyet úgy kapunk hogy a $G_{m,i}$ diagram γ vonalát elvágjuk. Ezek szerint $\sum cut(G_{m,i})$ úgy áll elő, hogy vesszük a $G_{m,i}$ diagramot, sorra mindegyik vonalát elvágjuk, a kapott diagramokat összeadjuk, majd a kapott összeget osztjuk $2m$ -el. A végeredményként kapott diagramok átvágott vonalvégeit az ábrákon megtartjuk (ezzel jelezve hogy a belépő és kilépő $\mathbf{k}$ pontok helyei hol találhatóak). Az alkalmazott eljárást négy különböző diagram esetében a 7. Ábra szemlélteti. Ezen eljárás eredményeként az $f_{m,\sigma}(\mathbf{k})$ kifejezését a (122)-nek a C_m -hez tartozó összes diagramra vett alkalmazásaként kapjuk meg, azaz matematikailag

$$f_{m,\sigma}(\mathbf{k}) = -\mathcal{S}(C_m). \quad (123)$$

A negatív előjel megjelenését az okozza hogy egy vonal elvágásával egy fermionikus hurkot szüntetünk meg és így a kifejezés előjelet vált. Ezen túlmenően, C_m -ben a diagramok súlyfaktoraikkal együtt szerepelnek, ezen numerikus koefficiensek pedig a vonal-elvágás művelete után megmaradnak, azaz

$$\begin{aligned} C_m &= \sum_i a_i V(G_{m,i}), \\ \mathcal{S}[\sum_i a_i V(G_{m,i})] &= \sum_i a_i \mathcal{S}(V(G_{m,i})). \end{aligned} \quad (124)$$

Megjegyzem, hogy (124)-ben az a_i koefficiensek a diagramok súlyfaktorait jelölik, amelyek a zárt fermionikus hurkokból eredő előjelet is magukba foglalják.

Az $f_{m,\sigma}(\mathbf{k})$ tagok diagramisztikus formáját a 8. Ábra szemlélteti $m \leq 3$ értékig.

b) Az $f_{m,\sigma}(\mathbf{k})$ diagramjárulékok kiszámolása

A vonalelvágásnak megfelelő matematikai művelet a következőt jelenti: Minden γ vonalhoz $V(G_{m,i})$ -ben egy $(n_{\gamma,\alpha}, \mathbf{k}_\gamma)$ (egész szám és egy momentum érték) számpáros tartozott, magához a vonalhoz pedig $G^D(\{|n_\gamma|\}) = \int d\mathbf{k}_\gamma \bar{\Theta}(\mathbf{k}_\gamma) \prod_\alpha \cos(n_{\gamma,\alpha} \bar{k}_{\gamma,\alpha})$ volt hozzárendelve (lásd (94)). A vonal elvágása (kivétele) a matematikai összefüggésekből kiveszi a $\int d\mathbf{k}_\gamma \bar{\Theta}(\mathbf{k}_\gamma)$ tagot (hiszen $\mathbf{k}_\gamma$ többé nem lesz belső momentum amely szerint integrálni kell), tehát az elvágott vonal $\prod_{\alpha=1}^D \cos(n_{\gamma,\alpha} \bar{k}_{\gamma,\alpha})$ matematikai járulékot visz be az $f_{m,\sigma}(\mathbf{k})$ -ba belépő diagram kifejezésébe. Meg kell itt jegyezni, hogy amennyiben a diagramban két olyan vonal volt amelyhez ugyanazon $\mathbf{k}$ érték volt hozzárendelve, az egyik vonal eltávolításával a megmaradt vonalon lévő $\bar{\Theta}(\mathbf{k})$ tag a diagram kifejezésében marad (pl. 7. Ábra b) eset második tagja).

$$\begin{aligned}
 \text{a)} \quad & \text{Diagram} \rightarrow \frac{1}{4} [\text{Diagram}_1 + \text{Diagram}_2 + \text{Diagram}_3 + \text{Diagram}_4] = \text{Diagram}_5 \\
 \text{b)} \quad & \text{Diagram} \rightarrow \frac{1}{8} [6 \cdot \text{Diagram}_1 + 2 \cdot \text{Diagram}_2] = \frac{3}{4} \text{Diagram}_3 + \frac{1}{4} \text{Diagram}_4 \\
 \text{c)} \quad & \text{Diagram} \rightarrow \frac{1}{8} [4 \cdot \text{Diagram}_1 + 4 \cdot \text{Diagram}_2] = \frac{1}{2} \text{Diagram}_3 + \frac{1}{2} \text{Diagram}_4 \\
 \text{d)} \quad & \text{Diagram} \rightarrow \frac{1}{6} [6 \cdot \text{Diagram}_1] = \text{Diagram}_2
 \end{aligned}$$

7. Ábra . Az $f_{m,\sigma}(\mathbf{k})$ -ba vett diagramjárulékok megszerkeztése a (122) képlet alapján. A bemutatott példákban sorra az a) $V(G_{2a})$ -ból eredő $F_{2a,\sigma}$, b) $V(G_{4c})$ -ből eredő (sorrendben) $F_{4c,1,\sigma}$ és $F_{4c,2,\sigma}$, c) $V(G_{4b})$ -ből eredő (sorrendben) $F_{4b,1,\sigma}$ és $F_{4b,2,\sigma}$, és d) $V(G_{3a})$ -ból eredő $F_{3a,\sigma}$ járulékok megszerkeztése látható.

$$\begin{aligned}
 f_{1\sigma}(\mathbf{k}) &= - \text{Diagram}_1, \\
 f_{2\sigma}(\mathbf{k}) &= (\text{Diagram}_2 - \text{Diagram}_3 + \text{Diagram}_4), \\
 f_{3\sigma}(\mathbf{k}) &= (\text{Diagram}_5 - 2 \text{Diagram}_6 - 2 \text{Diagram}_7 + 2 \text{Diagram}_8 \\
 &\quad + \text{Diagram}_9 + 2 \text{Diagram}_{10} - 2 \text{Diagram}_{11} - \text{Diagram}_{12}),
 \end{aligned}$$

8. Ábra . Az $f_{m,\sigma}(\mathbf{k})$ diagramisztikus kifejezése $m \leq 3$ értékig. Az $f_{m,\sigma}(\mathbf{k})$ -ban található zárójelben C_{m-1} , a zárójelen kívüli járulék pedig $\bar{f}_{m,\sigma}(\mathbf{k})$, lásd (42) összefüggést.

Hangsúlyozom, hogy habár kiveszünk egy $\mathbf{k}_\gamma$ -val jelzett vonalat az eljárás során, a $\mathbf{k}_\gamma$ mint külső impulzus megmarad (a külső vertexeken az impulzusmegmaradás csak ennek figyelembevételével teljesül). Továbbá az n_γ index is a kapott diagram tartozéka marad, hiszen ezt a T_j tagokon keresztül a többi vonal adja a diagram értékének kifejezésébe.

Az eljárás példázata érdekében megadom a 7. Ábra esetében feltüntetett minden tag matematikai kifejezését, amelyekben a járulékok jelölése F betűvel történik

$$\begin{aligned}
F_{2a,\sigma} &= \sum_{\{n_\alpha\}} G^D(\{|n_\alpha|\})^3 \prod_{\alpha=1}^D \cos(n_\alpha \bar{k}_\alpha), \\
F_{4c,1,\sigma} &= \sum_{\{n_{1,\alpha}\}} \sum_{\{n_{2,\alpha}\}} G^D(\{|n_{1,\alpha}|\})^2 G^D(\{|n_{2,\alpha}|\})^3 G^D(\{|n_{1,\alpha} + n_{2,\alpha}|\}) \prod_{\alpha=1}^D \cos(n_{1,\alpha} \bar{k}_\alpha), \\
F_{4c,2,\sigma} &= \sum_{\{n_{1,\alpha}\}} \sum_{\{n_{2,\alpha}\}} G^D(\{|n_{1,\alpha}|\})^3 G^D(\{|n_{2,\alpha}|\})^3 \bar{\Theta}(\mathbf{k}) \prod_{\alpha=1}^D \cos[(n_{1,\alpha} + n_{2,\alpha}) \bar{k}_\alpha], \\
F_{4b,1,\sigma} &= \sum_{\{n_{1,\alpha}\}} \sum_{\{n_{2,\alpha}\}} \sum_{\{n_{3,\alpha}\}} G^D(\{|n_{1,\alpha}|\}) G^D(\{|n_{2,\alpha}|\}) G^D(\{|n_{3,\alpha}|\})^2 G^D(\{|n_{1,\alpha} + n_{2,\alpha}|\}) \\
&\quad \times G^D(\{|n_{2,\alpha} + n_{3,\alpha}|\}) G^D(\{|n_{1,\alpha} + n_{2,\alpha} + n_{3,\alpha}|\}) \prod_{\alpha=1}^D \cos(n_{1,\alpha} \bar{k}_\alpha), \\
F_{4b,2,\sigma} &= \sum_{\{n_{1,\alpha}\}} \sum_{\{n_{2,\alpha}\}} \sum_{\{n_{3,\alpha}\}} G^D(\{|n_{1,\alpha}|\})^2 G^D(\{|n_{2,\alpha}|\}) G^D(\{|n_{3,\alpha}|\})^2 G^D(\{|n_{1,\alpha} + n_{2,\alpha}|\}) \\
&\quad \times G^D(\{|n_{2,\alpha} + n_{3,\alpha}|\}) \prod_{\alpha=1}^D \cos[(n_{1,\alpha} + n_{2,\alpha} + n_{3,\alpha}) \bar{k}_\alpha], \\
F_{3a,\sigma} &= \sum_{\{n_{1,\alpha}\}} \sum_{\{n_{2,\alpha}\}} G^D(\{|n_{1,\alpha}|\}) G^D(\{|n_{2,\alpha}|\})^2 G^D(\{|n_{1,\alpha} + n_{2,\alpha}|\})^2 \prod_{\alpha=1}^D \cos(n_{1,\alpha} \bar{k}_\alpha). \quad (125)
\end{aligned}$$

A (125) járulékok a 8. Ábra szerint szemléltetett (123) kifejezésbe épülnek be és adják az $f_{m,\sigma}(\mathbf{k})$ komponenseket, pl. $f_{1,\sigma}(\mathbf{k}) = -n/2$, $f_{2,\sigma}(\mathbf{k}) = C_1 - F_{2a,\sigma} + (n/2)^2 \bar{\Theta}(\mathbf{k})$, $f_{3,\sigma}(\mathbf{k}) = C_2 - 2F_{3a,\sigma} + 3(n/2)F_{2a,\sigma} + 2(n/2)\bar{\Theta}(\mathbf{k})F_{2a,\sigma} - 3(n/2)^3 \bar{\Theta}(\mathbf{k})$, stb.

c) Az $f_{m,\sigma}(\mathbf{k})$ tagok kiintegrálása

Az $f_{m,\sigma}(\mathbf{k})$ tagok explicit kifejezése már $D = 1$ dimenzióban is nagyon bonyolult. Megfigyelhető azonban, hogy $f_{m,\sigma}(\mathbf{k})$ explicit kifejezéseit megadni nem szükségeszerű hiszen ezen járulékok integrál alatt szerepelnek a kinetikus energia átlagértékében. Így tehát ezen integrálok megadása szükséges $\langle \hat{H}_{kin} \rangle / L$ számolásához. A (38,41) és (125) összevetéséből látszik, hogy a kinetikus energia átlagértékének kifejezéséhez négy integráltípus elvégzése szükséges. E négy integráltípus úgy alakul ki, hogy $\int d\mathbf{k} \epsilon(\mathbf{k})$ alatt (ahol $\epsilon(\mathbf{k})$ a (16) egyenlőségben adott), a következő négy kifejezés szerepelhet: 1, $\bar{\Theta}(\mathbf{k})$, $\prod_{\alpha=1}^D \cos(n_\alpha \bar{k}_\alpha)$, illetve $\bar{\Theta}(\mathbf{k}) \prod_{\alpha=1}^D \cos(n_\alpha \bar{k}_\alpha)$. Mivel e lehetőségek közül az első, $\int d\mathbf{k} \epsilon(\mathbf{k}) = 0$ miatt járulékot nem ad, három integrál marad melyek kifejezése a továbbhaladás követelménye marad. Ezen integrálok a következők:

$$\begin{aligned}
I_1 &= \int d\mathbf{k} \epsilon(\mathbf{k}) \bar{\Theta}(\mathbf{k}) = -\frac{W}{2} G^D(1, 0, 0, 0, \dots, 0) = \frac{1}{2} \bar{\epsilon}_0, \\
I_2 &= \int d\mathbf{k} \epsilon(\mathbf{k}) \prod_{\alpha=1}^D \cos(n_\alpha \bar{k}_\alpha) = -\frac{W}{2} \nabla_n \delta_{\{n_\alpha\}, \{0\}}, \\
I_3 &= \int d\mathbf{k} \epsilon(\mathbf{k}) \bar{\Theta}(\mathbf{k}) \prod_{\alpha=1}^D \cos(n_\alpha \bar{k}_\alpha) = -\frac{W}{2} \nabla_n G^D(\{|n_\alpha|\}), \quad (126)
\end{aligned}$$

ahol egy tetszőleges $F(\{n_\alpha\}) \equiv F(n_1, n_2, \dots, n_D)$ függvényre a következő definíciószerű jelölést alkalmaztam

$$\nabla_n F(\{n_\alpha\}) = \frac{1}{2D} \sum_{\alpha=1}^D [F(\dots, n_\alpha + 1, \dots) + F(\dots, n_\alpha - 1, \dots)], \quad (127)$$

például, $D = 1$ és $D = 2$ -ben

$$\begin{aligned} \nabla_n F(n_1) &= \frac{1}{2} [F(n_1 + 1) + F(n_1 - 1)], \quad D = 1, \\ \nabla_n F(n_1, n_2) &= \frac{1}{4} [F(n_1 + 1, n_2) + F(n_1 - 1, n_2) + F(n_1, n_2 + 1) + F(n_1, n_2 - 1)], \quad D = 2. \end{aligned} \quad (128)$$

A ∇_n operáció megjelenése okának megértése céljából bemutatom a továbbiakban az I_3 kifejezését, figyelembe véve $\epsilon(\mathbf{k})$ -ra a (16) egyenlőséget

$$I_3 = -\frac{W}{2D} \sum_{\alpha=1}^D \int d\mathbf{k} \cos(\bar{k}_\alpha) \prod_{\alpha'=1}^D \cos(n_{\alpha'} \bar{k}_{\alpha'}) \bar{\Theta}(\mathbf{k}). \quad (129)$$

Most $\alpha' = \alpha$ tagra a $\prod_{\alpha'}$ szorzatból $\cos(\bar{k}_\alpha) \cos(n_\alpha \bar{k}_\alpha) = (1/2) \{ \cos[(n_\alpha + 1) \bar{k}_\alpha] + \cos[(n_\alpha - 1) \bar{k}_\alpha] \}$ alkalmazásával a (129) és (94) alapján

$$\begin{aligned} I_3 &= -\frac{W}{2} \frac{1}{2D} [(G^D(|n_1 + 1|, |n_2|, \dots, |n_D|)) + (G^D(|n_1 - 1|, |n_2|, \dots, |n_D|)) \\ &\quad + (G^D(|n_1|, |n_2 + 1|, |n_3|, \dots, |n_D|)) + (G^D(|n_1|, |n_2 - 1|, |n_3|, \dots, |n_D|)) + \dots \\ &\quad + (G^D(|n_1|, |n_2|, \dots, |n_{D-1}|, |n_D + 1|)) + (G^D(|n_1|, |n_2|, \dots, |n_{D-1}|, |n_D - 1|))] \\ &\equiv -\frac{W}{2} \nabla_n G^D(\{|n_\alpha|\}). \end{aligned} \quad (130)$$

Ebből látható, hogy (126) utolsó egyenlősége igaz állítás.

Hasonlóan járok el az I_2 kifejezése esetében is, csak mostmár nem szerepel $\bar{\Theta}(\mathbf{k})$ az integrandusban. Az I_2 integrálba akkor fogunk kapni zérótól különböző járulékot, ha az összeszorozódó koszinusz tagok mindegyike zéró argumentummal rendelkezik. Ennek megfelelően

$$\begin{aligned} I_2 &= -\frac{W}{2D} \sum_{\alpha=1}^D \int d\mathbf{k} \cos(\bar{k}_\alpha) \prod_{\alpha'=1}^D \cos(n_{\alpha'} \bar{k}_{\alpha'}) = -\frac{W}{2} \frac{1}{2D} [(\delta_{n_1+1,0} \delta_{n_2,0} \dots \delta_{n_D,0} + \delta_{n_1-1,0} \delta_{n_2,0} \dots \delta_{n_D,0}) \\ &\quad + (\delta_{n_1,0} \delta_{n_2+1,0} \delta_{n_3,0} \dots \delta_{n_D,0} + \delta_{n_1,0} \delta_{n_2-1,0} \delta_{n_3,0} \dots \delta_{n_D,0}) + \dots + (\delta_{n_1,0} \delta_{n_2,0} \dots \delta_{n_{D-1},0} \delta_{n_D+1,0} \\ &\quad + \delta_{n_1,0} \delta_{n_2,0} \dots \delta_{n_{D-1},0} \delta_{n_D-1,0})] \equiv -\frac{W}{2} \nabla_n \delta_{\{n_\alpha\}, \{0\}}. \end{aligned} \quad (131)$$

Ezáltal (126) második egyenlősége is bizonyított. Mostmár csupán I_1 kifejezésének igazolása szükséges. E célból megfigyelhető [(103) felhasználásával] hogy

$$\begin{aligned} I_1 &= \int d\mathbf{k} \epsilon(\mathbf{k}) \bar{\Theta}(\mathbf{k}) = -\frac{W}{2} \frac{1}{D} [\sum_{\alpha=1}^D \int d\mathbf{k} \cos \bar{k}_\alpha \bar{\Theta}(\mathbf{k})] \\ &= -\frac{W}{2} \frac{1}{D} [\sum_{\alpha=1}^D \int d\mathbf{k} \bar{\Theta}(\mathbf{k}) [\cos(0 \times \bar{k}_1) \cos(0 \times \bar{k}_2) \dots \cos(0 \times \bar{k}_{\alpha-1}) \cos(1 \times \bar{k}_\alpha) \cos(0 \times \bar{k}_{\alpha+1}) \dots \\ &\quad \times \cos(0 \times \bar{k}_D)] = -\frac{W}{2} \frac{1}{D} [G^D(1, 0, 0, \dots, 0) + G^D(0, 1, 0, \dots, 0) + G^D(0, 0, 1, 0, \dots, 0) + \dots \\ &\quad + G^D(0, 0, 0, \dots, 0, 1)] \equiv -\frac{W}{2} G^D(1, 0, 0, \dots, 0), \end{aligned} \quad (132)$$

ahol felhasználtam azt a tényt, hogy $G^D(0,0,1,0,\dots,0)$ ugyanazon értékű, függetlenül az 1-es argumentum helyétől. Ezáltal tehát I_1 kifejezése is bizonyított. Itt megjegyzem, hogy a (126) első sorában használt $\epsilon_0/2$ kifejezés egyszerűen az induló integrálnak a szakirodalomban használatos kifejezését jelenti.

Látható tehát, hogy a kinetikus energia átlagértéke is egyértelműen a G^D függvények segítségével meghatározható.

d) Az $f_{m,\sigma}(\mathbf{k})$ tagok hatodrendig menő kifejezése

Hogy teljességében lehessen látni az $f_{m,\sigma}(\mathbf{k})$ tagok járulékait, a következőkben megadom kifejezésüket $m = 6$ -od rendig menőleg

$$\begin{aligned}
f_{1,\sigma}(\mathbf{k}) &= -\frac{n}{2}, \quad f_{2,\sigma}(\mathbf{k}) = [C_1 - \mathcal{S}(D_2)] + \left(\frac{n}{2}\right)^2 \bar{\Theta}(\mathbf{k}), \\
f_{3,\sigma}(\mathbf{k}) &= [C_2 - \mathcal{S}(D_3)] + (3 + 2\bar{\Theta}(\mathbf{k}))\frac{n}{2}\mathcal{S}(D_2) - 3\left(\frac{n}{2}\right)^3 \bar{\Theta}(\mathbf{k}), \\
f_{4,\sigma}(\mathbf{k}) &= [C_3 - \mathcal{S}(D_4)] + (5 + 2\bar{\Theta}(\mathbf{k}))\frac{n}{2}\mathcal{S}(D_3) - (9 + 11\bar{\Theta}(\mathbf{k}))\left(\frac{n}{2}\right)^2 \mathcal{S}(D_2) \\
&\quad + [9\left(\frac{n}{2}\right)^4 - 2D_2\frac{n}{2}]\bar{\Theta}(\mathbf{k}), \\
f_{5,\sigma}(\mathbf{k}) &= [C_4 - \mathcal{S}(D_5)] + (7 + 2\bar{\Theta}(\mathbf{k}))\frac{n}{2}\mathcal{S}(D_4)(20 + 15\bar{\Theta}(\mathbf{k}))\left(\frac{n}{2}\right)^2 \mathcal{S}(D_3) \\
&\quad + \{[28 + 47\bar{\Theta}(\mathbf{k})]\left(\frac{n}{2}\right)^3 - 2D_2\bar{\Theta}(\mathbf{k})\}\mathcal{S}(D_2) - 2D_2\mathcal{S}(D_2) - 28\left(\frac{n}{2}\right)^5 \bar{\Theta}(\mathbf{k}) \\
&\quad + [17\left(\frac{n}{2}\right)^2 D_2 - 2\frac{n}{2}D_3]\bar{\Theta}(\mathbf{k}), \\
f_{6,\sigma}(\mathbf{k}) &= [C_5 - \mathcal{S}(D_6)] + (9 + 2\bar{\Theta}(\mathbf{k}))\frac{n}{2}\mathcal{S}(D_5) - (35 + 19\bar{\theta}(\mathbf{k}))\left(\frac{n}{2}\right)^2 \mathcal{S}(D_4) \\
&\quad + (75 + 79\bar{\theta}(\mathbf{k}))\left(\frac{n}{2}\right)^3 \mathcal{S}(D_3) - (5 + 2\bar{\Theta}(\mathbf{k}))D_2\mathcal{S}(D_3) + [(30 + 30\bar{\Theta}(\mathbf{k}))\frac{n}{2}D_2 \\
&\quad - (90 + 185\bar{\Theta}(\mathbf{k}))\left(\frac{n}{2}\right)^4 - (3 + 2\bar{\Theta}(\mathbf{k}))D_3]\mathcal{S}(D_2) + [90\left(\frac{n}{2}\right)^6 - 100\left(\frac{n}{2}\right)^3 D_2 \\
&\quad + 21\left(\frac{n}{2}\right)^2 D_3 - 2\frac{n}{2}D_4 + D_2^2]\bar{\theta}(\mathbf{k}). \tag{133}
\end{aligned}$$

Ezen egyenlőségekben D_m jelöli az m -ed rendű irreducibilis járulékok összegét.

e) Megjegyzések

A kapott kifejezések pontosan visszaadják a $D = 1$ -ben kapott eredményeket¹²⁵ az $f_{m,\sigma}(\mathbf{k})$ járulékokra. Pl. ez könnyen ellenőrizhető az $m = 2$ tagon, mely formája $D = 1$ -ben

$$\begin{aligned}
f_{2,\sigma}(\mathbf{k}) &= \left(\frac{n}{2}\right)^2 [1 + \bar{\Theta}(\mathbf{k})] - \sum_{\{n_\alpha\}} G^D(\{|n_\alpha|\})^3 \prod_{\alpha=1}^D \cos(n_\alpha \bar{k}_\alpha) = \left(\frac{n}{2}\right)^2 [1 + \bar{\Theta}(\mathbf{k})] - S, \\
S(D=1) &= \frac{\arccos^3 p}{\pi^3} + \frac{2}{\pi^3} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{\sin^3(m \arccos p)}{m^3} \cos(m\bar{k}). \tag{134}
\end{aligned}$$

Aláhúzom hogy az előbbiekben bemutatott és a Gutzwiller hullámfüggvényre alapuló módszer a X fejezetben kerül alkalmazásra.

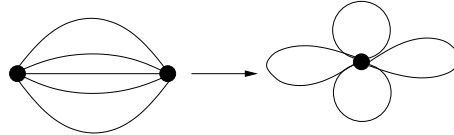
1. Bevezetés

Az előbbi fejezetben bemutatott Gutzwiller hullámfüggvénnyel számolt átlagértékek irreducibilis diagramjai, amint azt Vollhardt csoportja megmutatta¹⁰¹, végtelen dimenzióban olyan formába zsugorodnak, melyben minden vertex összeolvad. Ezáltal a térbeli korrelációk teljesen eltűnnek. Az énáltalam kifejlesztett G^D függvények formalizmusában ez azt jelenti, hogy a vonal formájú szkeleton diagramnak nincsenek szakaszai, azaz $n_{i,\alpha}$ számok hiányoznak, (azaz zérók), így minden vonalnak $G^D(\{0\}) = n/2$ felel meg, és ez pontosan a GA-t (Gutzwiller Approximációt) adja vissza (lásd 9. Ábra). A bemutatott példából az is látszik, hogy $D = \infty$ -ben csak az egyszerű fermionikus hurkok adnak zérótól különböző járulékot. Ebből az észrevételből kiindulva, Gebhard²⁵⁴ megmutatta, hogy $D = \infty$ -ben tetszőleges Gutzwiller projektált egyrészecske típusú hullámfüggvénnyel lehet pontosan várhatóértéket számolni. Ha ezt úgy tesszük meg, hogy a (17) Gutzwiller hullámfüggvényben szereplő $|\Psi_0\rangle$ -t átírjuk egy tetszőleges $|\Phi_0\rangle$ egyrészecske típusú hullámfüggvényre

$$|\Psi_0\rangle = g^{-\sum_{i,\sigma} \mu_{i,\sigma} \hat{n}_{i,\sigma}} |\Phi_0\rangle, \quad (135)$$

formában, ahol $\mu_{i,\sigma}$ lokális kémiai potenciál jellegű paraméterek amelyek mellett a lokális sűrűség

$$n_{i,\sigma} = \frac{\langle \Phi_0 | \hat{n}_{i,\sigma} | \Phi_0 \rangle}{\langle \Phi_0 | \Phi_0 \rangle}, \quad (136)$$



9. Ábra . A diagramviselkedés $D = \infty$ dimenzióban. A példa a G_{2a} diagramra vonatkozik. Amint látható, a diagramok egyszerű fermionikus hurkok („Hartree hurkok”) szorzatára zsugorodnak (az adott példában 4 ilyen hurok jelenik meg).

akkor, a $\mu_{i,\sigma}$ paraméterek megválaszthatóak úgy hogy az egyszerű fermionikus hurkok is zéró járulékot adnak $D = \infty$ -ben, minden diagram kiesik, és a $D = \infty$ várható értékek egyetlen diagram kiszámítása nélkül felírhatóak, pl. kétsávós rendszer esetében²⁵⁴

$$\begin{aligned} \langle \hat{f}_{i,\sigma}^\dagger \hat{f}_{j,\sigma} \rangle &= \sqrt{q_{i,\sigma}} \sqrt{q_{j,\sigma}} \langle \hat{f}_{i,\sigma}^\dagger \hat{f}_{j,\sigma} \rangle_0 + \delta_{i,j} (1 - q_{j,\sigma}) n_{j,\sigma}^{f,0}, \\ \langle \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{f}_{j,\sigma} \rangle &= \sqrt{q_{j,\sigma}} \langle \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{f}_{j,\sigma} \rangle_0, \\ \langle \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,\sigma} \rangle &= \langle \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,\sigma} \rangle_0 \end{aligned} \quad (137)$$

formában. Ezen egyenlőségekben $\langle \dots \rangle$ a $|\Psi_g\rangle$ -vel számolt várható érték egy választott $|\Phi_0\rangle$ -al felépítve, $\langle \dots \rangle_0$ a $|\Phi_0\rangle$ állapotvektorral számított várhatóérték, továbbá $q_{i,\sigma}$ koefficiens értéke

$$q_{i,\sigma} = \frac{1}{[n_{i,\sigma}^{f,0} (1 - n_{i,\sigma}^{f,0})]} [\sqrt{(1 - n_i^{f,0} + d_i^f)(n_{i,\sigma}^{f,0} - d_i^f)} + \sqrt{d_i^f (n_{i,-\sigma}^{f,0} - d_i^f)}]^2, \quad (138)$$

ahol $n_{i,\sigma}^{f,0} = \langle \hat{n}_{i,\sigma}^f \rangle_0$, $n_i^{f,0} = n_{i,\uparrow}^{f,0} + n_{i,\downarrow}^{f,0}$, $d_i^f = \langle \hat{D}_i^f \rangle$, $\hat{D}_i^f = \hat{n}_{i,\uparrow}^f \hat{n}_{i,\downarrow}^f$, f a korrelált (lokális Coulomb tasszítással rendelkező), c a nem-korrelált (Coulomb kölcsönhatás mentes) sáv, továbbá, a Gutzwiller variációs paramétert adó kifejezés

$$g^2 = \frac{d_i^f (1 - n_i^{f,0} + d_i^f)}{[n_{i,\uparrow}^{f,0} - d_i^f][n_{i,\downarrow}^{f,0} - d_i^f]}. \quad (139)$$

2. Periodikus Anderson modellben Gutzwiller projektált spin-sűrűség hullám esetére vett

alkalmazás

a) A variációs hullámfüggvény felírása

Az előbb bemutatott Gebhardt által kidolgozott módszert alkalmaztam a periodikus Anderson modell esetére úgy, hogy $|\Psi_0\rangle$ helyében spin-sűrűség hullám járulékot vettem figyelembe.

Egy egyrészeske állapotokból felépített variációs spin-sűrűség hullámfüggvény, $\epsilon(\mathbf{k}) \leq 0$ esetre értelmezve

$$|\Psi_{SDW}\rangle = \prod_{\mathbf{k},\sigma} \prod_{n=1}^2 [\alpha_{\mathbf{k},n} \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger + \beta_{\mathbf{k},n} \hat{f}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger + \sigma(\gamma_{\mathbf{k},n} \hat{c}_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\sigma}^\dagger + \delta_{\mathbf{k},n} \hat{f}_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\sigma}^\dagger)] |0\rangle \quad (140)$$

formájú, ahol $n = 1, 2$ két lineárisan független és ortogonális lineáris kombinációt jelöl, $\mathbf{Q} = (\pi, \dots, \pi)$ a „nesting” (= eltolva érvényesülő és előjelváltással megvalósuló fedés³⁴) vektor (igazolható ugyanis hogy spin-sűrűség hullám állapot csak „nesting” esetében jön létre, azaz ha $\epsilon(\mathbf{k} + \mathbf{Q}) = -\epsilon(\mathbf{k})$), a $\prod_{\mathbf{k}}$ -n szereplő prim jelzés az $\epsilon(\mathbf{k}) \leq 0$ kondíciót veszi figyelembe (ezen kondíció jelenlétében a nesting feltétel fennállása mellett a kétszeres energiajárulék beszámolás nem fordulhat elő), $|0\rangle$ a minden betöltési szám egyenlő zéró állapotot jelző vákuumállapot (Fock vákuum), $\alpha_{\mathbf{k},n}, \beta_{\mathbf{k},n}, \gamma_{\mathbf{k},n}, \delta_{\mathbf{k},n}$ pedig variációs paraméterek.

A (140) hullámfüggvény kétrészeske szorzat hullámfüggvény formában is felírható egybeolvasztva az $n = 1, 2$ járulékokat

$$|\Psi_0\rangle \equiv |\Psi_{SDW}\rangle = \prod_{\mathbf{k},\sigma} [(\bar{u}_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \hat{f}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger + \bar{z}_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\sigma}^\dagger \hat{f}_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\sigma}^\dagger) + \sigma(\bar{v}_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\sigma}^\dagger \hat{f}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger + \bar{w}_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \hat{f}_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\sigma}^\dagger + \bar{x}_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger + \bar{y}_{\mathbf{k}} \hat{f}_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\sigma}^\dagger \hat{f}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger)] |0\rangle, \quad (141)$$

ahol most $\bar{u}_{\mathbf{k}}, \bar{z}_{\mathbf{k}}, \bar{v}_{\mathbf{k}}, \bar{w}_{\mathbf{k}}, \bar{x}_{\mathbf{k}}, \bar{y}_{\mathbf{k}}$ a variációs paraméterek, és

$$-\bar{u}_{\mathbf{k}} \bar{z}_{\mathbf{k}} + \bar{v}_{\mathbf{k}} \bar{w}_{\mathbf{k}} + \bar{x}_{\mathbf{k}} \bar{y}_{\mathbf{k}} = 0 \quad (142)$$

teljesül. Ténylegesen, (141), a (142) teljesülése mellett, a (140) ban szereplő $n = 1, 2$ szorzat segítségével felírható. Megemlítem, hogy a (140) ezen átírási lehetőségét a Müller-Hartmann csoportja jegyezte meg először¹⁰⁸. Az elkövetkezőkben a $|\Psi_0\rangle = |\Psi_{SDW}\rangle$ -re a (141-142) formát fogom használni.

A (137) összefüggések alkalmazása legelőször is a $|\Phi_0\rangle$ hullámfüggvény formájának tisztázását igényli. A (135)-ből

$$| \Phi_0 \rangle = g^{\sum_{i,\sigma} \mu_{i,\sigma} n_{i,\sigma}} | \Psi_0 \rangle, \quad (143)$$

és ebbe (141) behelyettesítésével könnyen meggyőződhetünk hogy $| \Phi_0 \rangle$ funkcionális formája a (141)-ben adott formával identikus, csak hogy a régi $\bar{u}_{\mathbf{k}}, \dots, \bar{y}_{\mathbf{k}}$ variációs paraméterek helyett, $| \Phi_0 \rangle$ -ban új (renormált) $u_{\mathbf{k}}, z_{\mathbf{k}}, v_{\mathbf{k}}, w_{\mathbf{k}}, x_{\mathbf{k}}, y_{\mathbf{k}}$ variációs paraméterek jelennek meg amelyekre a (142) típusú összefüggés szintén teljesül. Ennek megfelelően a számítások során

$$| \Phi_0 \rangle = \prod_{\mathbf{k},\sigma}' [(u_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \hat{f}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger + z_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\sigma}^\dagger \hat{f}_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\sigma}^\dagger) + \sigma (v_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\sigma}^\dagger \hat{f}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger + w_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \hat{f}_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\sigma}^\dagger + x_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger + y_{\mathbf{k}} \hat{f}_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\sigma}^\dagger \hat{f}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger)] | 0 \rangle, \quad u_{\mathbf{k}} z_{\mathbf{k}} = v_{\mathbf{k}} w_{\mathbf{k}} + x_{\mathbf{k}} y_{\mathbf{k}}. \quad (144)$$

Az alkalmazott variációs hullámfüggvény pedig

$$| \Psi_g \rangle = g^{\hat{D}} | \Psi_{SDW} \rangle. \quad (145)$$

A variációs paraméterek $u_{\mathbf{k}}, z_{\mathbf{k}}, v_{\mathbf{k}}, w_{\mathbf{k}}, x_{\mathbf{k}}, y_{\mathbf{k}}$ minden $\mathbf{k}$ -ra amelyre $\epsilon(\mathbf{k}) \leq 0$ teljesül, és g a Gutzwiller variációs paraméter.

A (145) használata azért volt érdekes mert a periodikus Anderson modellt Gutzwiller hullámfüggvénnyel tárgyalva exponenciálisan csökkenő Hubbard U függést kapunk nagy U esetében az alapállapot energiába¹⁰⁰, ezt viszont Monte Carlo szimulációs eredmények¹⁰⁴ illetve egyszerű perturbációs számítás¹⁰⁷ nem támasztják alá. Ennek kiküszöbölése céljából Strack és Vollhardt¹⁰⁷ egy nem Gutzwiller típusú, antiferromágnesesen rendezett f -elektron variációs hullámfüggvényt javasolt, mely c -elektron részről egy a hibridizációs tagra és a lokális f -elektron energiára alapozott korrelátorral volt kiegészítve. Ezen hullámfüggvény viszont közepes U értékekre nem adott jó eredményeket. Ezért, Brenig és Müller-Hartmann¹⁰⁸ egy kétrészecske szorzat típusú, lényegében (141) formájú hullámfüggvényt használt leírásra, ebből viszont korrelációs hatások hiányoztak. Ezek figyelembevétele legegyszerűbben a Gutzwiller projektorral lehetséges, így jutottam el a (145) variációs hullámfüggvényhez. A módszer a periodikus Anderson modell Hamilton operátorára vett alkalmazási módját Ref.^[10]-ban ismerttettem.

b) A Hamilton operátor

A periodikus Anderson modell induló Hamilton operátora lokalizált f -elektron típus feltételezése és $\mathbf{k}$ -tól független hibridizáció mellett

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{k},\sigma} [\epsilon_{\mathbf{k}} \hat{n}_{\mathbf{k},\sigma}^c + E_f \hat{n}_{\mathbf{k},\sigma}^f + V (\hat{f}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma} + \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \hat{f}_{\mathbf{k},\sigma})] + U \sum_{\mathbf{i}} \hat{n}_{\mathbf{i},\sigma}^f \hat{n}_{\mathbf{i},-\sigma}^f, \quad (146)$$

ahol $\epsilon_{\mathbf{k}} = \epsilon(\mathbf{k})$ a c -elektronok diszperziója, E_f a lokális f -elektron energia, V a hibridizációs mátrixelem, U a lokális Coulomb tasztítás amelyet az f elektronok érzékelnek, továbbá $\hat{n}_{\mathbf{k},\sigma}^b = \hat{b}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k},\sigma}$, $b = c, f$. Az $\epsilon(\mathbf{k}) = -2t \sum_{\alpha=1}^D \cos k_{\alpha}$ a c -elektron diszperzióreláció, ahol D a dimenzió.

A továbbiakban az ugynevezett szimmetrikus esetet fogom vizsgálni mely esetben $E_f = -U/2$, továbbá a részecskeszám koncentráció $n = (N_{\uparrow} + N_{\downarrow})/L = 2$, azaz a kétsávós rendszer

félig töltött. Ennek megfelelően az alapállapot energiája $\langle \dots \rangle = \langle \Psi_g | \dots | \Psi_g \rangle / \langle \Psi_g | \Psi_g \rangle$ átlagolást használva

$$\langle \hat{H} \rangle = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \epsilon(\mathbf{k}) \langle \hat{n}_{\mathbf{k}, \sigma}^c \rangle + V \sum_{\mathbf{k}, \sigma} (\langle \hat{f}_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}, \sigma} \rangle + \langle \hat{c}_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger \hat{f}_{\mathbf{k}, \sigma} \rangle) - \frac{U}{2} \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \langle \hat{n}_{\mathbf{k}, \sigma}^c \rangle + U \sum_{\mathbf{i}} \langle \hat{n}_{\mathbf{i}, \sigma}^f \hat{n}_{\mathbf{i}, -\sigma}^f \rangle. \quad (147)$$

c) Az átlagértékek kiszámítása

Amint az a (137)-ből látszik, a $\langle \dots \rangle$ típusú átlagértékek a $|\Phi_0\rangle$ -al számolt $\langle \dots \rangle_0$ átlagértékekre vezethetők vissza. Ennek megfelelően, (137,147) alapján

$$\langle \hat{H} \rangle = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \epsilon(\mathbf{k}) \langle \hat{n}_{\mathbf{k}, \sigma}^c \rangle_0 + 2V \sqrt{q} \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \langle \hat{f}_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}, \sigma} \rangle_0 - \frac{U}{2} \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \langle \hat{n}_{\mathbf{k}, \sigma}^f \rangle_0 + ULd^f, \quad (148)$$

ahol $d^f = (1/L) \sum_{\mathbf{i}} \langle \hat{n}_{\mathbf{i}, \sigma}^f \hat{n}_{\mathbf{i}, -\sigma}^f \rangle$, $\langle \hat{f}_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}, \sigma} \rangle_0 = \langle \hat{c}_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger \hat{f}_{\mathbf{k}, \sigma} \rangle_0$, továbbá $q_{\mathbf{i}, \sigma} = q$ helytől és spintől független.

A $|\Phi_0\rangle$ állapottal számolt spin-sűrűség hullám rendparaméterek (144) felhasználásával

$$\begin{aligned} \Delta_f &= \frac{1}{L} \sum_{\mathbf{k}}' \langle \hat{f}_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger \hat{f}_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}, \sigma} \rangle_0 = \frac{1}{L} \sum_{\mathbf{k}}' \frac{u_{\mathbf{k}} w_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}} z_{\mathbf{k}}}{N_{\mathbf{k}}}, \\ \Delta_c &= \frac{1}{L} \sum_{\mathbf{k}}' \langle \hat{c}_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}, \sigma} \rangle_0 = \frac{1}{L} \sum_{\mathbf{k}}' \frac{u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} + w_{\mathbf{k}} z_{\mathbf{k}}}{N_{\mathbf{k}}}. \end{aligned} \quad (149)$$

Itt matematikai kifejezésre jut az a tény, hogy ha az f elektronok spin-sűrűség hullámot alkotnak (azaz ha $\Delta_f \neq 0$), akkor, mivel (144) teljesen szimmetrikus a c és f járulékokban, továbbá a két alrendszer c és f nem független egymástól, hasonló rendeződés ($\Delta_c \neq 0$) jelenik meg a vezetési elektronok (c) esetében is. A (149)-ben, az egyre való normalitás miatt

$$N_{\mathbf{k}} = v_{\mathbf{k}}^2 + w_{\mathbf{k}}^2 + u_{\mathbf{k}}^2 + z_{\mathbf{k}}^2 + x_{\mathbf{k}}^2 + y_{\mathbf{k}}^2 = 1 \quad (150)$$

áll fenn minden $\mathbf{k}$ -ra. Szintén (144) felhasználásával látható, hogy

$$\langle \hat{n}_{\mathbf{i}, \sigma}^c \rangle_0 = \frac{1}{2} + 2\Delta_c \sigma \cos(\mathbf{Q}\mathbf{i}), \quad \langle \hat{n}_{\mathbf{i}, \sigma}^f \rangle_0 = \frac{1}{2} + 2\Delta_f \sigma \cos(\mathbf{Q}\mathbf{i}). \quad (151)$$

Ezen összefüggés második egyenlősége következtében, a (148) utolsó előtti tagjában

$$\sum_{\mathbf{k}, \sigma} \langle \hat{n}_{\mathbf{k}, \sigma}^f \rangle_0 = L. \quad (152)$$

Ebből kifolyólag, az alapállapot energiája kifejezése

$$\langle \hat{H} \rangle = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \epsilon(\mathbf{k}) \langle \hat{n}_{\mathbf{k}, \sigma}^c \rangle_0 + 2V \sqrt{q} \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \langle \hat{f}_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}, \sigma} \rangle_0 - \frac{U}{2} L + ULd^f \quad (153)$$

formára alakul. A (144) az $\langle \hat{n}_{\mathbf{k}, \sigma} \rangle_0$ illetve az $\langle \hat{f}_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}, \sigma} \rangle_0$ kiszámítását is megengedi és a kapott eredményből

$$\sum_{\mathbf{k}, \sigma} \epsilon(\mathbf{k}) \langle \hat{n}_{\mathbf{k}, \sigma}^c \rangle_0 = 2 \sum_{\mathbf{k}}' \epsilon(\mathbf{k}) \frac{u_{\mathbf{k}}^2 + w_{\mathbf{k}}^2 - v_{\mathbf{k}}^2 - z_{\mathbf{k}}^2}{N_{\mathbf{k}}}, \quad \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \langle \hat{f}_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}, \sigma} \rangle_0 = 4 \sum_{\mathbf{k}}' \frac{x_{\mathbf{k}}(v_{\mathbf{k}} - w_{\mathbf{k}})}{N_{\mathbf{k}}}, \quad (154)$$

tehát $E = \langle \hat{H} \rangle$ jelöléssel a variációs alapállapot energiája

$$E = 2 \sum_{\mathbf{k}}' \epsilon(\mathbf{k}) \frac{u_{\mathbf{k}}^2 + w_{\mathbf{k}}^2 - v_{\mathbf{k}}^2 - z_{\mathbf{k}}^2}{N_{\mathbf{k}}} + 8V\sqrt{q} \sum_{\mathbf{k}}' \frac{x_{\mathbf{k}}(v_{\mathbf{k}} - w_{\mathbf{k}})}{N_{\mathbf{k}}} + UL(d^f - \frac{1}{2}). \quad (155)$$

Ezen egyenletben szereplő $\sqrt{q}$ tagot a (138) és (151) második egyenleté alapján ki lehet fejezni

$$\sqrt{q} = \frac{\sqrt{d^f}}{\sqrt{\frac{1}{4} - 4\Delta_f^2}} [(\frac{1}{2} - d^f + 2\Delta_f)^{1/2} + (\frac{1}{2} - d^f - 2\Delta_f)^{1/2}]. \quad (156)$$

Megemlítem továbbá, hogy (137) alapján a teljes $|\Psi_g\rangle$ -vel számolt átlagos betöltési számok

$$\langle \hat{n}_{\mathbf{k},\sigma}^c \rangle = \langle \hat{n}_{\mathbf{k},\sigma}^c \rangle_0, \quad \langle \hat{n}_{\mathbf{k},\sigma}^f \rangle = \frac{1}{2}(1 - q) + q \langle \hat{n}_{\mathbf{k},\sigma}^f \rangle_0. \quad (157)$$

d) A variációs paraméterek meghatározása

A következőkben (155) minimizálására koncentrálok. Először is megjegyzem, hogy a tanulmányozott szimmetrikus esetben $x_{\mathbf{k}} = y_{\mathbf{k}}$ összefüggés áll fenn, továbbmenőleg, a (155)-be beépülő (156) révén, a g variációs paraméter helyett a d^f mennyiséget lehet kezelni variációs paraméterként. Ezen túlmenőleg, két megkötés kell teljesüljön a minimizálás során (lásd (144) második egyenletét és (150) egyenletét), és pedig

$$Q_{\mathbf{k}}^{(1)} = 1 - N_{\mathbf{k}} = 0, \quad Q_{\mathbf{k}}^{(2)} = -u_{\mathbf{k}}z_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}}w_{\mathbf{k}} + x_{\mathbf{k}}y_{\mathbf{k}} = -u_{\mathbf{k}}z_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}}w_{\mathbf{k}} + x_{\mathbf{k}}^2 = 0, \quad (158)$$

melyek kezelése céljából két Lagrange multiplikátort vezetek be

$$\Lambda_{\mathbf{k}}^{(1)} = 2\lambda_{\mathbf{k}}, \quad \Lambda_{\mathbf{k}}^{(2)} = 4\bar{\lambda}_{\mathbf{k}}. \quad (159)$$

Ezek segítségével (155) minimizálása

$$\bar{E} = E + \sum_{\mathbf{k}}' (\Lambda_{\mathbf{k}}^{(1)} Q_{\mathbf{k}}^{(1)} + \Lambda_{\mathbf{k}}^{(2)} Q_{\mathbf{k}}^{(2)}) \quad (160)$$

kifejezés $v_{\mathbf{k}}, w_{\mathbf{k}}, u_{\mathbf{k}}, x_{\mathbf{k}}, z_{\mathbf{k}}$ és d^f szerinti minimizálására vezethető vissza. A $\mathbf{k}$ -függő variációs paraméterek szerinti deriváltak egy lineáris egyenletrendszerhez vezetnek amely $\tilde{M}_{\mathbf{k}} \tilde{X}_{\mathbf{k}} = 0$ formába írható fel, ahol $\tilde{X}_{\mathbf{k}}$ vektor alakja $\tilde{X}_{\mathbf{k}} = (v_{\mathbf{k}}, w_{\mathbf{k}}, x_{\mathbf{k}}, u_{\mathbf{k}}, z_{\mathbf{k}})$, és az $\tilde{M}_{\mathbf{k}}$ mátrix a következő kifejezéssel adott

$$\tilde{M}_{\mathbf{k}} = \begin{pmatrix} -(\epsilon(\mathbf{k}) + \lambda_{\mathbf{k}}) & \bar{\lambda}_{\mathbf{k}} & 2\bar{V} & 0 & -2\bar{\Delta} \\ \bar{\lambda}_{\mathbf{k}} & (\epsilon(\mathbf{k}) - \lambda_{\mathbf{k}}) & -2\bar{V} & -2\bar{\Delta} & 0 \\ 2\bar{V} & -2\bar{V} & 2(\bar{\lambda}_{\mathbf{k}} - \lambda_{\mathbf{k}}) & 0 & 0 \\ 0 & -2\bar{\Delta} & 0 & (\epsilon(\mathbf{k}) - \lambda_{\mathbf{k}}) & -\bar{\lambda}_{\mathbf{k}} \\ -2\bar{\Delta} & 0 & 0 & -\bar{\lambda}_{\mathbf{k}} & -(\epsilon(\mathbf{k}) + \lambda_{\mathbf{k}}) \end{pmatrix}. \quad (161)$$

A (161)-ben a következő jelöléseket használtam

$$\bar{\Delta} = \frac{V}{L} \sum_{\mathbf{k}}' \frac{x_{\mathbf{k}}(w_{\mathbf{k}} - v_{\mathbf{k}})}{N_{\mathbf{k}}} \frac{\partial \sqrt{q}}{\partial \Delta_f}, \quad \bar{V} = V \sqrt{q}. \quad (162)$$

Nemtriviális megoldásokat az $\tilde{M}_{\mathbf{k}} \tilde{X}_{\mathbf{k}} = 0$ egyenletrendszerből csak $\text{Det}(\tilde{M}_{\mathbf{k}}) = 0$ esetben kapunk és ebből a következő egyenlet adódik [itt $\tilde{Z} = 16\bar{\Delta}^2(\bar{\Delta}^2 + \bar{V}^2)$]

$$(\bar{\lambda}_{\mathbf{k}} - \lambda_{\mathbf{k}})[(\epsilon(\mathbf{k})^2 + \bar{\lambda}_{\mathbf{k}}^2 - \lambda_{\mathbf{k}}^2)(\epsilon(\mathbf{k})^2 + \bar{\lambda}_{\mathbf{k}}^2 - \lambda_{\mathbf{k}}^2 + 4\bar{V}^2) + 8\bar{\Delta}^2(-\epsilon(\mathbf{k})^2 + \bar{\lambda}_{\mathbf{k}}^2 - \lambda_{\mathbf{k}}^2) + \tilde{Z}] = 0, \quad (163)$$

amely fennállása esetében a $\mathbf{k}$ függő paraméterek értéke

$$\begin{aligned} u_{\mathbf{k}} &= \frac{\{8\bar{\Delta}^2\bar{V}^2 + \bar{\lambda}_{\mathbf{k}}(\bar{\lambda}_{\mathbf{k}} - \lambda_{\mathbf{k}})[\epsilon(\mathbf{k})^2 - \lambda_{\mathbf{k}}^2 + \bar{\lambda}_{\mathbf{k}}^2 + 4(\bar{V}^2 + \bar{\Delta}^2)]\}x_{\mathbf{k}}}{2\bar{\Delta}F_{\mathbf{k}}}, \\ v_{\mathbf{k}} &= \frac{\{2\bar{V}^2(\epsilon(\mathbf{k}) - \lambda_{\mathbf{k}} + \bar{\lambda}_{\mathbf{k}}) + (\bar{\lambda}_{\mathbf{k}} - \lambda_{\mathbf{k}})[4\bar{\Delta}^2 + \bar{\lambda}_{\mathbf{k}}^2 - (\epsilon(\mathbf{k}) - \lambda_{\mathbf{k}})^2]\}x_{\mathbf{k}}}{F_{\mathbf{k}}}, \\ z_{\mathbf{k}} &= \frac{\{-8\bar{\Delta}^2\bar{V}^2 - (\bar{\lambda}_{\mathbf{k}} - \lambda_{\mathbf{k}})[4\bar{\Delta}^2(\epsilon(\mathbf{k}) + \lambda_{\mathbf{k}}) - (\epsilon(\mathbf{k}) - \lambda_{\mathbf{k}})(\epsilon(\mathbf{k})^2 - \lambda_{\mathbf{k}}^2 + \bar{\lambda}_{\mathbf{k}}^2 + 4\bar{V}^2)]\}x_{\mathbf{k}}}{2\bar{\Delta}F_{\mathbf{k}}}, \\ w_{\mathbf{k}} &= \frac{[2\bar{V}^2(\epsilon(\mathbf{k}) - \lambda_{\mathbf{k}} + \bar{\lambda}_{\mathbf{k}}) + 2\bar{\lambda}_{\mathbf{k}}\epsilon(\mathbf{k})(\bar{\lambda}_{\mathbf{k}} - \lambda_{\mathbf{k}})]x_{\mathbf{k}}}{F_{\mathbf{k}}}, \\ x_{\mathbf{k}} &= \frac{C_{\mathbf{k}}}{\sqrt{A_{\mathbf{k}}^2 + B_{\mathbf{k}}^2 + 2C_{\mathbf{k}}^2 + 4\bar{\Delta}^2\bar{V}^2 + \bar{V}^2(\epsilon(\mathbf{k}) - \lambda_{\mathbf{k}})^2}}, \end{aligned} \quad (164)$$

ahol a (164) utolsó egyenletét (158) első egyenlősége adja, továbbá a következő rövidítő jelöléseket vezettem be

$$\begin{aligned} A_{\mathbf{k}} &= \epsilon(\mathbf{k})\bar{V} + (\epsilon(\mathbf{k})^2 + p^2 - \lambda_{\mathbf{k}}\epsilon(\mathbf{k}))\frac{\lambda_{\mathbf{k}}}{\bar{V}}, \\ B_{\mathbf{k}} &= -2\bar{\Delta}\bar{V} + \frac{\lambda_{\mathbf{k}}^2(\bar{V}^2 - p^2) + \epsilon(\mathbf{k})\lambda_{\mathbf{k}}(4\bar{\Delta}^2 + p^2 - \bar{V}^2)}{2\bar{\Delta}\bar{V}}, \\ C_{\mathbf{k}} &= \bar{V}^2 + \epsilon(\mathbf{k})^2 + p^2 - \epsilon_{\mathbf{k}}\lambda_{\mathbf{k}}, \quad p^2 = \sqrt{\bar{V}^4 + 4\bar{\Delta}^2\epsilon(\mathbf{k})^2}, \\ F_{\mathbf{k}} &= \bar{V}[\epsilon(\mathbf{k})^2 + \lambda_{\mathbf{k}}^2 - \bar{\lambda}_{\mathbf{k}}^2 - 4\bar{\Delta}^2 - 2\epsilon(\mathbf{k})(\lambda_{\mathbf{k}} - \bar{\lambda}_{\mathbf{k}})]. \end{aligned} \quad (165)$$

A Lagrange multiplikátorok értékét (163) és a (158) második egyenlősége határozza meg

$$\lambda_{\mathbf{k}} = -(2\bar{V}^2 + 4\bar{\Delta}^2 + \epsilon(\mathbf{k})^2 + 2p^2)^{1/2}, \quad \bar{\lambda}_{\mathbf{k}} = 0. \quad (166)$$

A d^f szerinti minimizálás egy új egyenlőséget eredményez amely gyakorlatilag U értékét kapcsolja össze a többi paraméter értékével

$$U = 8\bar{\Delta}(\frac{\partial \sqrt{q}}{\partial d^f})/(\frac{\partial \sqrt{q}}{\partial \Delta_f}). \quad (167)$$

e) Az alapállapot energiája

A kapott összefüggések tükrében az alapállapot energiája értéke

$$\frac{E}{L} = U(d^f - \frac{1}{2}) + \frac{1}{L} \sum_{\mathbf{k}}' \{2\lambda_{\mathbf{k}} + \frac{8\bar{\Delta}x_{\mathbf{k}}^2}{C_{\mathbf{k}}^2}[2\bar{\Delta}\bar{V}^2(\epsilon(\mathbf{k}) - \lambda_{\mathbf{k}}) + A_{\mathbf{k}}B_{\mathbf{k}}]\}. \quad (168)$$

Amennyiben a Hamilton operátor paramétereinek értékét pl. t egységekben ismertnek tekintjük (azaz U/t , V/t rögzített és az E energiát szintén t értékekben mérjük), a (168) kiszámolása két paramétert igényel, és pedig d^f és Δ_f értékét (q szintén ezen paraméterek függvényében adott, lásd (156) összefüggést). E két mennyiséget numerikusan lehet meghatározni a (149) első egyenlősége illetve (167) közös megoldásából. A megoldás ($V/t, U/t, d^f, \Delta_f, d$) ötösvektor értékek folytonos meghatározását eredményezi, melyek úgy az E alapállapot energiáját, mint a $|\Psi_g\rangle$ alapállapot hullámfüggvény kifejezését meghatározzák. Az ötösvektor utolsó tagja d a dimenzió. A számolás során d a $\sum_{\mathbf{k}}$ elvégzése révén kerül be az eredménybe.

f) Különböző más várhatóértékek számolása

A variációs probléma megoldása nemcsak az alapállapot energiáját adja meg, hanem lehetővé teszi különböző más alapállapot várhatóértékek kifejezését is.

A hibridizációs energia

$$E_{Hib} = \langle V \sum_{\mathbf{k}, \sigma} (\hat{f}_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}, \sigma} + \hat{c}_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger \hat{f}_{\mathbf{k}, \sigma}) \rangle \quad (169)$$

automatikusan meghatározott lesz a minimizálás során, hiszen (155) második tagját képezi. A minimizálás után (169)-re kapott végeredmény

$$\frac{E_{Hib}}{L} = -16\bar{\Delta} \left(\frac{\partial \ln(q)}{\partial \Delta_f} \right)^{-1} \quad (170)$$

formát ölti.

A mágnesezettség alapállapot várhatóértékét $\langle \hat{m}_{\mathbf{i}, z} \rangle = \langle (\hat{n}_{\mathbf{i}, \uparrow} - \hat{n}_{\mathbf{i}, \downarrow}) \rangle$ révén és (151) figyelembevételével

$$\begin{aligned} \langle \hat{m}_{\mathbf{i}, z}^c \rangle &= 4\Delta_c \cos(\mathbf{Q}\mathbf{i}), & \langle \hat{m}_{\mathbf{i}, z}^f \rangle &= 4\Delta_f \cos(\mathbf{Q}\mathbf{i}), \\ \langle \hat{m}_{\mathbf{i}, z}^{tot} \rangle &= (\langle \hat{m}_{\mathbf{i}, z}^c \rangle + \langle \hat{m}_{\mathbf{i}, z}^f \rangle) = 4(\Delta_c + \Delta_f) \cos(\mathbf{Q}\mathbf{i}), \end{aligned} \quad (171)$$

egyenlőségek határozzák meg. Megemlítem még, hogy $\hat{m}_{\mathbf{i}, z}^2 = (\hat{n}_{\mathbf{i}, \uparrow}^f - \hat{n}_{\mathbf{i}, \downarrow}^f)^2$ értelmezés mellett

$$\langle \hat{m}_{\mathbf{i}, z}^2 \rangle = 1 - 2d^f \quad (172)$$

adódik, tehát az f -elektron z -komponens mágnesezettség négyzetének értéke nem helyfüggő és a korrelációs hatásokat (d^f révén) jól tükröző mennyiség.

g) A paramágneses állapot

A paramágneses állapot esetében $\Delta_f = \Delta_c = \bar{\Delta} = 0$ és ezáltal az alapállapot energia kifejezése (168)-ból a következő formát ölti

$$E = -2 \sum_{\mathbf{k}}' \sqrt{\epsilon(\mathbf{k})^2 + 32V^2 d^f (1 - 2d^f)} + UL(d^f - \frac{1}{2}), \quad (173)$$

ahol a d^f értékét megadó összefüggés (167)-ből a következő képpen alakul

$$U = 32V^2(1 - 4d^f) \frac{1}{L} \sum_{\mathbf{k}} \sqrt{\epsilon(\mathbf{k})^2 + 32V^2d^f(1 - 2d^f)}. \quad (174)$$

A hibridizációs energia értéket ez esetben [(170)-ből] a következő egyenlőség adja

$$E_{Hib} = -64V^2d^f(1 - 2d^f) \frac{1}{L} \sum_{\mathbf{k}}' \sqrt{\epsilon(\mathbf{k})^2 + 32V^2d^f(1 - 2d^f)}. \quad (175)$$

Megemlítem, hogy a rajzok készítése során az energia kifejezésének megadását a nemkölcönható rendszer energiájának abszolút értékben vett egységében ($|E_0|$) adtam meg. Az E_0 kifejezése érdekében, (174)-ből megfigyelhető hogy $U = 0$ esetében $d^f = 1/4$, tehát (173)-ból

$$E_0 = -2 \sum_{\mathbf{k}}' \sqrt{\epsilon(\mathbf{k})^2 + 4V^2}. \quad (176)$$

E fejezetben bemutatott variációs módszer a IX. fejezetben kerül alkalmazásra.

V. EGZAKT EREDMÉNYEK LEVEZETÉSÉNÉL ALKALMAZOTT MÓDSZEREK

Az itt bemutatásra kerülő egzakt eredmények levezetésénél alkalmazott módszerek két csoportba oszthatóak, és pedig a geometriai valószínűségekre alapozott eljárások, és a kvantummechanikai sokrészecske (és nem integrálható) rendszerek esetében alkalmazott eljárások. Ezeket az elkövetkezőkben, külön alfejezetekben mutatom be.

A. Geometriai valószínűségekre alapozott egzakt eredmények levezetésében

alkalmazott módszer

1. Bevezetés

A geometriai valószínűségekre alapozott eljárást egy hőmérsékletfüggő klaszternövekedési modell felépítésénél használtam fel. Ennek kiindulópontja két geometriai valószínűség amelyet Chandrasekhar alkalmazott asztrofizikai számításokban¹²⁹. Ezek teljesen rendezetlen rendszerekre vonatkoznak, amelyek úgy állnak elő, hogy egy homogén közegbe, n_c részecskeszámkoncentrációban és rendezetlen módon részecskéket viszünk be. Az ilyen körülmények között értelmezett valószínűségek a következők¹²⁹:

1) Annak a valószínűsége, hogy a rendezetlenül bevitt részecskék közül egy tetszőlegesen kiválasztott részecskének r távolságon belül ne legyenek szomszédai

$$P_0(r) = \exp(-ar^3), \quad a = \frac{4\pi}{3}n_c. \quad (177)$$

2) Annak a valószínűsége, hogy egy tetszőlegesen kiválasztott gömbközéppontú, infinitezimálisan vastag, $r, r + dr$ között elhelyezkedő gömbhéjban egy részecske legyen

$$dP(r) = 3ar^2dr, \quad a = \frac{4\pi}{3}n_c. \quad (178)$$

A (177) és (178) alapján különböző valószínűségeket vezethetünk le. Hogy ez klaszterképződéssel legyen kapcsolatos, valamit feltételezni kell a kötésekről. Ezzel kapcsolatban megjegyzem, hogy rövid hatótávolságú kölcsönhatásokkal rendelkező és kiskoncentrációs rendszereket fogok vizsgálni. Ennek következtében a modelltárgyalás szintjén kikötöm, hogy

a) Két elem (részecske) közötti kötés csak m_M távolság alatt jöhet létre, ahol m_M a maximális kötéstávolság.

Ennek alapján az egykomponensű klaszter előfordulási valószínűsége felírható

$$P_1(m_M) = P_0(m_M) = \exp(-am_M^3) \equiv K = \exp(-\frac{4\pi}{3}n_cm_M^3). \quad (179)$$

Ténylegesen, figyelembe véve (177) összefüggést, P_1 azt a valószínűséget adja, hogy egy részecskének, m_M távolságon belül (tehát azon távolságig amelyen belül a részecskénk kötést képes létrehozni), ne legyenek szomszédai. Ha nem tud kötést létrehozni, egyedül marad, azaz egykomponensű klasztert képez. Ezen gondolatmenet olyan esetben helytálló, ha a részecskék rendezetlen eloszlásúak a háromdimenziós geometriai térben. Ezen túlmenőleg látszik, hogy a használt klaszter fogalom egyszerűen kötéseken keresztüli összekapcsolódásból eredő egyedhalmazt jelenti.

Többkomponensű kluszterek előfordulási valószínűségét megadni klasztertípushoz kötötten lehet könnyebben megtenni, ezért típusra vonatkozó feltételezés is rögzítésre kerül. A típusrögzítés nyilvánvalóan a matematikai könnyítést is meghatározza, ezért egy nagyon egyszerű eset esik majd tanulmányozás alá. Ehhez kapcsolódóan, a kis koncentráció figyelembevételével, a második (szintén modell szinten) felhasznált kikötésem

b) Minden részecske csak a legközelebbi (és ezáltal egyetlen) szomszédját kötheti be a kötések láncolatából álló klaszterbe.

Itt megjegyzem, hogy a valóságban, előfordulhat hogy egy egyednek két legközelebbi szomszédja legyen. Ha az egyedek koncentrációja nagyon kicsi, úgy hogy az átlagos szomszédos részecsketávolság sokkal nagyobb mint a kölcsönhatás hatósugara, akkor elhanyagolhatóan kis valószínűséggel fordul elő olyan eset, hogy egy egyednek két legközelebbi szomszédja legyen, és ráadásul azokkal kölcsönhatni (kötést létrehozni) is tudjon. Ezért ezen lehetőségtől, modell szinten, eltekintek.

Az a),b) pontok következményeként a következő klaszterképződési (kötés hálózat képzési) folyamatot definiálok modell szinten:

Klaszterképződési modell:

Egy egyed E_0 , amelytől kezdődőleg a folyamat fókusz alá esik, rendelkezik egy maximálisan m_M hosszúságú kötéllel, és ezzel, a klaszterképződés elindítása céljából egyetlen másik egyedet köthet magához, mégpediglen azt, amelyik hozzá a legközelebb helyezkedik el (E_1). Legyen ekkor az E_0 -tól E_1 -ig terjedő távolság $m(0, 1)$. Ezután E_1 is kap egy kötelet, mely hossza azonban E_0 által felhasznált $m(0, 1)$ kötélhossznál kisebb (értsd: $m(0, 1)$ -ig terjedhet csak, de ezt a hosszt nem érheti el). Az E_1 egyed, ezzel a kötéllel szintén bekapcsolhat egy új egyedet (E_2) a klaszterbe, úgy hogy beköti őt. Az E_1 újból csak egyetlen egyedet köthet be, mégpedig azt aki a legközelebb áll hozzá. Legyen az E_1 -től E_2 -ig mért távolság

$m(1, 2)$. Mindezek után az E_2 egyed is kap egy kötelet amely $m(1, 2)$ -nél kisebb, és ugyanezen szabályosság szerint ő is beköthet egyetlen (E_3) egyedet, mégpedig azt, aki a legközelebb áll hozzá. Az így kialakult E_2 -től E_3 -ig terjedő távolság $m(2, 3)$. Mindez így folytatódik tovább, mindaddig míg a klaszter M komponensű nem lesz, azaz az utolsó bekapcsolt egyed E_{M-1} . A klaszter akkor szakad meg (fejeződik be), ha E_{M-1} egyed $m(M-2, M-1)$ távolságnál hozzá közelebb álló legközelebbi szomszédot (más egyedet) nem talál.

Az elmondottakból következik, hogy a tanulmányozott klasztertípus egy filiform (vonalaszerű) klasztertípus, amely bond-hosszúságai (kötés husszai), az indító (E_0) egyéntől a klaszter belseje fele haladva nem növekvőek. Az így levezetett és a következő alfejezetben bemutatott valószínűségek a saját eredményeim. A módszer és eljárás rövid bemutatása Ref.[¹⁵]-ben történt.

2. A bevezetett modellhez kapcsolódó valószínűségek levezetése

a) A kétkomponensű klaszter esete

A bevezetett klaszterképződési modellnek elemzem itt a kétkomponensű tagját. Ez a következő valószínűséghez kapcsolódik: Mivel E_0 -nak $m_M > r_1 = m(0, 1)$ távolság alatt nincs szomszédja, ezt (177) értelmében $P_0(r_1)$ fejezi ki. Ezután, E_0 -nak $r_1, r_1 + dr_1$ között van egyetlen darab E_1 szomszédja, ezért a tanulmányozott valószínűségbe (178) nyomán egy újabb tag, mégpedig $dP(r_1)$ járul. Továbbmenőleg, az E_1 -nek nincs szomszédja r_1 távolság alatt, ezért ezt a tényt egy újabb $P_0(r_1)$ tag juttatja kifejezésre (177) alapján. Mivel r_1 az m_M maximális kötéshosszig tetszőleges lehet, következik hogy a keresett valószínűség, a

$$P_2(r_1)dr_1 = [P_0(r_1)dP(r_1)]P_0(r_1) \quad (180)$$

differenciális formából adódóan és $dP(r_1) = P(r_1)dr_1$, $P(r_1) = 3ar_1^2$ értékek figyelembevételével

$$\begin{aligned} P_2(m_M) &= \int_0^{m_M} [P_0(r_1)dP(r_1)]P_0(r_1) = \int_0^{m_M} [3ar_1^2 \exp(-ar_1^3)dr_1] \exp(-ar_1^3) \\ &= 3a \int_0^{m_M} r_1^2 \exp(-2ar_1^3)dr_1 = \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \exp(-2am_M^3) = \frac{1}{2} - \frac{1}{2}K^2, \end{aligned} \quad (181)$$

ahol K a (179) összefüggésben adott.

b) A háromkomponensű klaszter

Hasonlóan, a háromkomponensű klaszter esetében E_0 -nak r_1 távolságig nincs szomszédja ($P_0(r_1)$ járulék), majd van egy darab szomszédja (az E_1) $r_1, r_1 + dr_1$ között ($dP(r_1)$ járulék). Mindezek után E_1 -nek az r_1 alatt elhelyezkedő r_2 távolságon belül nincs szomszédja ($P_0(r_2)$ járulék), majd van egyetlen szomszédja $r_2, r_2 + dr_2$ között, mégpedig E_2 ($dP(r_2)$ járulék). Mindezek után, E_2 -nek nincs más legközelebbi szomszédja r_2 távolság alatt, ami újabb $P_0(r_2)$ járulékot eredményez. Tehát a P_3 -hoz kapcsolódó differenciális forma

$$P_3(r_1, r_2)dr_1dr_2 = [P_0(r_1)dP(r_1)][P_0(r_2)dP(r_2)]P_0(r_2), \quad (182)$$

amelyből integrálás nyomán

$$\begin{aligned}
P_3(m_M) &= \int_0^{m_M} dr_1 \int_0^{r_1} dr_2 P_3(r_1, r_2) = \int_0^{m_M} dr_1 \int_0^{r_1} dr_2 [P_0(r_1)P(r_1)][P_0(r_2)P(r_2)]P_0(r_2) \\
&= \int_0^{m_M} dr_1 \int_0^{r_1} dr_2 [3ar_1^2 \exp(-ar_1^3)][3ar_2^2 \exp(-ar_2^3)] \exp(-ar_2^3) \\
&= \int_0^{m_M} dr_1 [3ar_1^2 \exp(-ar_1^3)] \int_0^{r_1} dr_2 [3ar_2^2 \exp(-ar_2^3)] \exp(-ar_2^3) \\
&= \int_0^{m_M} dr_1 [3ar_1^2 \exp(-ar_1^3)] P_2(r_1) = \frac{1}{3} - \frac{1}{2} \exp(-am_M^3) + \frac{1}{6} \exp(-3am_M) = \frac{1}{3} - \frac{1}{2}K + \frac{1}{6}K^3.
\end{aligned} \tag{183}$$

c) A négykomponensű klaszter

A négykomponensű klaszter esetében már látszik a kialakuló szabályosság. A kapcsolódó differenciális forma

$$P_4(r_1, r_2, r_3) dr_1 dr_2 dr_3 = \left\{ \prod_{\alpha=1}^3 [P_0(r_\alpha) dP(r_\alpha)] \right\} P_0(r_3), \tag{184}$$

majd a valószínűség

$$\begin{aligned}
P_4(m_M) &= \int_0^{m_M} dr_1 \int_0^{r_1} dr_2 \int_0^{r_2} dr_3 P_4(r_1, r_2, r_3) = \int_0^{m_M} dr_1 \int_0^{r_1} dr_2 \int_0^{r_2} dr_3 \left\{ \prod_{\alpha=1}^3 [P_0(r_\alpha)P(r_\alpha)] \right\} P_0(r_3) \\
&= \int_0^{m_M} dr_1 [3ar_1^2 \exp(-ar_1^3)] P_3(r_1) = \frac{1}{8} - \frac{1}{3} \exp(-am_M^3) + \frac{1}{4} \exp(-2am_M^3) - \frac{1}{24} \exp(-4am_M^3) \\
&= \frac{1}{8} - \frac{1}{3}K + \frac{1}{4}K^2 - \frac{1}{24}K^4.
\end{aligned} \tag{185}$$

d) Az M komponensű klaszter esete

A négykomponensű klaszter esetében kapott összefüggések alapján egyszerűen felírhatóak a tetszőleges M -komponensű klaszterre vonatkozó összefüggések.

A kapcsolódó differenciális összefüggés

$$P_M(r_1, r_2, \dots, r_{M-1}) \prod_{\alpha=1}^{M-1} dr_\alpha = \left\{ \prod_{\alpha=1}^{M-1} [P_0(r_\alpha) dP(r_\alpha)] \right\} P_0(r_{M-1}), \tag{186}$$

illetve ehhez csatolt integrálási művelet

$$\int_M = \int_0^{m_M} dr_1 \int_0^{r_1} dr_2 \int_0^{r_2} dr_3 \dots \int_0^{r_{M-2}} dr_{M-1} \tag{187}$$

során a számolt valószínűségeket

$$P_M(m_M) = \int_M P_M(r_1, r_2, \dots, r_{M-1}) \tag{188}$$

adja. Ebből a keresett valószínűség

$$P_M(m_M) = 3a \int_0^{m_M} d\xi \xi^2 \exp(-a\xi^3) P_{M-1}(\xi). \tag{189}$$

A (189) integrálásából adódik $P_M(m_M)$ tetszőleges $M \geq 2$ -re vett kifejezése, amely formája

$$P_M(m_M) = \frac{(-1)^{M+1}}{M!} \exp(-aMm_M^3) + \sum_{j=0}^{M-2} \frac{(-1)^j}{j!} A_{M-2-j} \exp(-jam_M^3), \tag{190}$$

ahol az A_i koeficiensek rekurzív módon a következő összefüggéssel adottak minden $i \geq 0$ értékre

$$A_i = \frac{(-1)^i}{(i+2)!} + (1 - \delta_{i,0}) \sum_{j=1}^i \frac{(-1)^{j+1}}{j!} A_{i-j}. \quad (191)$$

A (191) alapján

$$A_0 = \frac{1}{2}, \quad A_1 = \frac{1}{3}, \quad A_2 = \frac{1}{8}, \quad A_3 = \frac{1}{30}, \quad A_4 = \frac{1}{144}, \dots \quad (192)$$

illetve a tetszőleges $i \geq 0$ esetében vett explicit A_i kifejezés

$$A_i = \frac{(i+1)}{(i+2)!}. \quad (193)$$

A (190) alapján, a (179)-ben bevezetett K paraméter segítségével felírt $P_M(m_M)$ valószínűség tetszőleges $M \geq 1$ -re

$$P_M(m_M) = \frac{(-1)^{M+1}}{M!} K^M + (1 - \delta_{M,1}) \sum_{j=0}^{M-2} \frac{(-1)^j}{j!} A_{M-2-j} K^j. \quad (194)$$

A (190,191) helyességének bizonyítását azzal kezdem, hogy a $P_4(m_M)$ -ig az előbbieken megadott explicit összefüggések alapján (190) ellenőrizhető $M = 4$ -ig, továbbá (191) $i = 2$ -ig. Így az igazolás teljes indukcióval elvégezhető, mégpedig úgy hogy feltételezem, hogy (190) M értékig, és (191) $i = M - 2$ -ig igaz, és (189) alapján ekkor megmutatom hogy (190) igaz marad $M + 1$ -re is, mégpedig úgy, hogy A_{M-1} -et pontosan (191) adja meg, tehát (191) igaz marad $i = M - 1$ esetében is.

Ténylegesen, (189,190)-ből a $P_{M+1}(m_M)$ -re kapott kifejezés

$$\begin{aligned} P_{M+1}(m_M) &= 3a \int_0^{m_M} d\xi \xi^2 \exp(-a\xi^3) \left[\frac{(-1)^{M+1}}{M!} \exp(-aM\xi^3) + \sum_{j=0}^{M-2} \frac{((-1)^j)}{j!} A_{M-2-j} \exp(-ja\xi^3) \right] \\ &= \frac{(-1)^{M+2}}{(M+1)!} [\exp(-a(M+1)m_M^3) - 1] + \sum_{j=0}^{M-2} \frac{(-1)^{j+1}}{(j+1)!} A_{M-2-j} [\exp(-a(j+1)m_M^3) - 1] \end{aligned} \quad (195)$$

De (195)-ből az látszik, hogy $P_{M+1}(m_M)$ pontosan (190) formával rendelkezik az $M + 1$ indexre, akkor és csakis akkor ha

$$-\frac{(-1)^{M+2}}{(M+1)!} + \sum_{j=0}^{M-2} \frac{(-1)^{j+1}}{(j+1)!} A_{M-2-j} [\exp(-a(j+1)m_M^3) - 1] = \sum_{j=0}^{M-1} \frac{(-1)^j}{j!} A_{M-1-j} e^{-jam_M^3} \quad (196)$$

teljesül, ami jobboldalában éppen az új A_{M-1} koeficiens definiálja az $i = M - 1$ indexre. Most (196) első tagjában szereplő összegben a $j' = j + 1$ összegzési index váltócsereét hajtom végre, majd a második tagban szereplő és $j = 0$ -ból adódó A_{M-1} koeficiens kifejezem. A kapott eredmény

$$A_{M-1} = -\frac{(-1)^{M+2}}{(M+1)!} + \sum_{j'=1}^{M-1} \frac{(-1)^{j'}}{j'!} A_{M-1-j'} [\exp(-j'am_M^3) - 1] - \sum_{j=1}^{M-1} \frac{(-1)^j}{j!} A_{M-1-j} e^{-jam_M^3}. \quad (197)$$

A (197) direkt következménye

$$A_{M-1} = \frac{(-1)^{M+3}}{(M+1)!} + \sum_{j'=1}^{M-1} \frac{(-1)^{j'+1}}{j'!} A_{M-1-j'}. \quad (198)$$

Megfigyelhető, hogy (198) pontosan a (191) egyenlőség az $i = M - 1$ indexre felírva. Ténylegesen, figyelembe véve az első tagban hogy $(-1)^{M-1} = (-1)^{(M-1)+4}$, a második tagban meg visszajelölve a mozgó indexet j -re

$$A_{i=M-1} = \frac{(-1)^i}{(i+2)!} + \sum_{j=1}^i \frac{(-1)^{j+1}}{j!} A_{i-j}. \quad (199)$$

Tehát, ezáltal igazoltam, hogy a (190,191) összefüggések tetszőleges M illetve i indexekre teljesülnek.

Az elmondottak után hangsúlyozni szeretném, hogy a $P_M(m_M)$ valószínűségek a következő kimenetel valószínűségei: Ha az origóban van egy részecskénk, mely $n_c = N/V$ részecskeszám koncentrációval rendelkező rendezetlen eloszlású rendszernek a része, és azt nézzük hogy ezen részecskéből kiindulólág a „Klaszterképződési modell”-ben leírt játékszabályok szerint milyen valószínűséggel képződik M komponensű klaszter (m_M maximális kötőhossz mellett), kapjuk a $P_M(m_M)$ értékeket. Az a tény, hogy az origót tetszőleges helyen választhatjuk meg, jogosít fel a $P_M(m_M)$ értékek klaszter előfordulási valószínűségek formájában vett értelmezéséhez.

3. Rigurózus valószínűségi tér jelenléte

A valószínűségi értelmezés kötelező jellemzője az a) tetszőleges $M \geq 1$ és $m_M \geq 0$ értékre vett $P_M(m_M) \geq 0$ pozitív szemidefinit mivolt, és b) a tetszőleges $m_M \geq 0$ értékre vett $\sum_{M=1}^{\infty} P_M(m_M) = 1$ teljességi reláció. A következőkben ezen két pontot igazolom.

a) A pozitív szemidefinit mivolt

A (189) összefüggés alapján

$$P_M(x) = \int_0^x d\xi f(\xi) P_{M-1}(\xi) \quad (200)$$

áll fenn a tetszőleges pozitív $x \geq 0$ független változó mellett, továbbá $f(\xi) = 3a\xi^2 \exp(-a\xi^3) \geq 0$ egy pozitív szemidefinit függvény. Könnyen észrevehető továbbá hogy az első M értékekre $P_M(x)$ pozitív szemidefinit. Pl. $M = 1$ -re (179) szerint $P_1(x) = \exp(-ax^3) \geq 0$, $M = 2$ -re (181) szerint $P_2(x) = [1 - \exp(-2ax^3)]/2 \geq 0$, stb. Ennek alapján teljes indukcióval igazolható hogy a (200)-ban értelmezett $P_M(x)$ nem negatív. Ebből a célból feltételezve hogy ezen állítás $M - 1$ -re igaz, $f(\xi) \geq 0$ és $P_{M-1}(\xi) \geq 0$ alapján (200)-ból automatikusan következik

$$P_M(m_M) \geq 0, \quad (201)$$

tetszőleges $M \geq 1$ és $m_M \geq 0$ értékekre.

b) A teljességi reláció

Most $\sum_{M=1}^{\infty} P_M(m_M) = 1$ összefüggést igazolom. E célból először is megfigyelhető hogy

$$\sum_{i=0}^{\infty} A_i = 1. \quad (202)$$

Ténylegesen (193) alapján

$$\begin{aligned} \sum_{i=0}^{\infty} A_i &= \sum_{i=0}^{\infty} \frac{i+1}{(i+2)!} = \sum_{j=1}^{\infty} \frac{j}{(j+1)!} = \sum_{j=1}^{\infty} \left[\frac{j+1}{(j+1)!} - \frac{1}{(j+1)!} \right] \\ &= \sum_{j=1}^{\infty} \frac{1}{j!} - \sum_{j=1}^{\infty} \frac{1}{(j+1)!} = \sum_{j=1}^{\infty} \frac{1}{j!} - \sum_{j=2}^{\infty} \frac{1}{j!} = 1. \end{aligned} \quad (203)$$

Mindezek után a tetszőleges m_M -re vett P_M kifejezéseket a (194) alapján felírva

$$\begin{aligned} P_1(m_M) &= K, \\ P_2(m_M) &= A_0 + (-1)^{2+1} \frac{1}{2!} K^2, \\ P_3(m_M) &= A_1 + \frac{(-1)^1}{1!} A_0 K + \frac{(-1)^{3+1}}{3!} K^3, \\ P_4(m_M) &= A_2 + \frac{(-1)^1}{1!} A_1 K + \frac{(-1)^2}{2!} A_0 K^2 + \frac{(-1)^{4+1}}{4!} K^4, \\ P_5(m_M) &= A_3 + \frac{(-1)^1}{1!} A_2 K + \frac{(-1)^2}{2!} A_1 K^2 + \frac{(-1)^3}{3!} A_0 K^3 + \frac{(-1)^{5+1}}{5!} K^5, \\ &\dots\dots\dots \end{aligned} \quad (204)$$

majd összegezve a diagonálissal párhuzamos vonalak mentén (rögzített A_i -vel rendelkező tagok összege)

$$\begin{aligned} \sum_{M=1}^{\infty} P_M(m_M) &= \left[\sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^{k+1}}{k!} K^k \right] + A_0 \left[\sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{k!} K^k \right] + A_1 \left[\sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{k!} K^k \right] \\ &\quad + A_2 \left[\sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{k!} K^k \right] + A_3 \left[\sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{k!} K^k \right] + A_4 \left[\sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{k!} K^k \right] + \dots \\ &= \left[\sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^{k+1}}{k!} K^k \right] + \left[\sum_{i=0}^{\infty} A_i \right] \left[\sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{k!} K^k \right]. \end{aligned} \quad (205)$$

A (205) utolsó sorában (202) egyenlőséget felhasználva

$$\begin{aligned} \sum_{M=1}^{\infty} P_M(m_M) &= \left[\sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^{k+1}}{k!} K^k \right] + \left[\sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{k!} K^k \right] \\ &= 1 + \left[\sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^{k+1}}{k!} K^k \right] + \left[\sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^k}{k!} K^k \right] = 1, \end{aligned} \quad (206)$$

adódik, tehát tetszőleges $m_M \geq 0$ érték mellett

$$\sum_{M=1}^{\infty} P_M(m_M) = 1. \quad (207)$$

A (201) és (207) értelmében a $P_M(m_M)$ mennyiségek halmaza tetszőleges $m_M \geq 0$ -ra rigurózus valószínűségi teret épít fel.

Ezen alfejezetben az

$$\bar{M} = \sum_{M=1}^{\infty} MP_M(m_M) \quad (208)$$

átlagos klaszterméretet fogom kiszámolni. A számolás során a (204)-ben adott sorokat szorozom M -el. Az összegzést most úgy végzem, hogy a legkülső diagonális mentén vett összeget

$$S_1 = \sum_{M=1}^{\infty} \frac{(-1)^{M+1}}{M!} MK^M \quad (209)$$

külön kezelem, a megmaradt tagokat pedig K hatványai szerint csoportosítom. Az ennek megfelelően kapott eredmény

$$\begin{aligned} \sum_{M=1}^{\infty} MP_M(m_M) &= S_0 + S_1 + \left[\frac{(-1)^1}{1!}K^1\right]\left[\sum_{i=0}^{\infty}(i+3)A_i\right] + \left[\frac{(-1)^2}{2!}K^2\right]\left[\sum_{i=0}^{\infty}(i+4)A_i\right] \\ &\quad + \left[\frac{(-1)^3}{3!}K^3\right]\left[\sum_{i=0}^{\infty}(i+5)A_i\right] + \left[\frac{(-1)^4}{4!}K^4\right]\left[\sum_{i=0}^{\infty}(i+6)A_i\right] + \dots \\ &= S_0 + S_1 + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^k}{k!} K^k \left[\sum_{i=0}^{\infty}(i+k+2)A_i\right], \end{aligned} \quad (210)$$

ahol a $K^0 = 1$ prefaktorral rendelkező tag kifejezése

$$S_0 = \sum_{M=2}^{\infty} MA_{M-2}. \quad (211)$$

Az S_0 értéke a következő

$$S_0 = \sum_{M=2}^{\infty} MA_{M-2} = \sum_{i=0}^{\infty} (i+2)A_i = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{1}{i!} = e \quad (212)$$

ahol az utolsó előtti egyenlőségnél az A_i -nek (193)-ban adott kifejezését használtam fel. Mindezek után

$$\sum_{i=0}^{\infty} (i+k+2)A_i = k \sum_{i=0}^{\infty} A_i + \sum_{i=0}^{\infty} (i+2)A_i = k + S_0 = k + e, \quad (213)$$

ahol a második egyenlőségnél (202), az utolsó egyenlőségnél pedig (212) került felhasználásra.

Behelyettesítve (210)-be a (209,212,213) eredményeket, az átlagos klaszterméretre a következő egyenlőség adódik

$$\begin{aligned} \bar{M} &= \sum_{M=1}^{\infty} MP_M(m_M) = e - \sum_{M=1}^{\infty} \frac{(-1)^M}{(M-1)!} K^M + \sum_{M=1}^{\infty} \frac{(-1)^M}{M!} (M+e)K^M \\ &= e + e \sum_{M=1}^{\infty} \frac{1}{M!} (-K)^M = e \exp(-K) = \exp(1-K). \end{aligned} \quad (214)$$

Ennek következtében tehát

$$\bar{M} = e^{1-K}. \quad (215)$$

Látható tehát hogy az átlagos klaszterméret minden esetben az $M = 3$ nagyságnál kisebb.

A specifikus határesetek többnyire a $K = \exp(-am_M^3)$, $a = 4\pi n_c/3$ kifejezésben szereplő

$$q = n_c m_M^3 \quad (216)$$

értékeiből erednek. A q értékeinek kiértékelésekor vegyük figyelembe hogy q az n_c (koncentráció) lineáris függvénye. Továbbmenőleg, mivel a kölcsönhatásból eredő kötési energia csökken m_M növekedésével és egy valóságos esetben m_M nagyságát a „destruktív” (ez esetben: kötésfelbontó) szerepet játszó termikus energia adag $k_B T$ szabja meg, általában T növekedésével m_M csökken. Ennek függvényében nagy q , rögzített hőmérséklet (T) esetében nagy koncentrációt, vagy rögzített koncentráció esetében kis hőmérsékletet jelent. Ezzel ellentétben kis q rögzített hőmérséklet esetében kis koncentrációt, rögzített koncentráció esetében pedig nagy hőmérsékletet jelent.

A következő eredmények figyelhetők meg:

a) A $q \rightarrow \infty$, ($K \rightarrow 0$), határeset

E szituációban amint például (204)-ből látható

$$\lim_{K \rightarrow 0} P_M(m_M) = A_{M-2} = \frac{M-1}{M!}. \quad (217)$$

b) A $q \rightarrow 0$, ($K \rightarrow 1$), határeset

Ez esetben, szintén például (204) összefüggés alapján látható hogy

$$\lim_{K \rightarrow 1} P_1(m_M) \rightarrow 1, \quad \lim_{K \rightarrow 1} P_{M>1}(m_M) \rightarrow 0. \quad (218)$$

A felsorolt eseteken kívül még egy határeset jellemezhető, és pedig

c) A tetszőleges K -ra vett $M \rightarrow \infty$ határeset

E határesetben megfigyelhető, hogy

$$\lim_{M \rightarrow \infty} P_M(m_M) = 0, \quad (219)$$

amely szerint a végtelen hosszúságú klaszter előfordulási valószínűsége (végtelen rendszerben) zéró, azaz perkolatív jellegű folyamatok a tanulmányozott rendszerben nem fordulhatnak elő.

Az a), b), esetekkel ellentétben (219) oka közvetlenül nem látható, ezért a c) esetet külön igazolni kell. Ezt a célt szolgálja a következő alfejezet.

6. A $P_M(m_M)$ valószínűségek kondenzált formája

A (194) alapján kifejezem a $P_M(m_M) \pm P_{M+1}(m_M)$ kifejezés értékét, melyre adódó egyenlőség

$$P_M(m_M) \pm P_{M+1}(m_M) = K^M \frac{(-1)^{M+1}}{M!} \left[1 \mp \frac{K}{M+1} \right] \pm A_{M-1} + S_{\pm}(M-2), \quad (220)$$

ahol m egész számra

$$S_{\pm}(m) = \sum_{k=0}^m A_{m-k} \frac{(-1)^k}{k!} K^k \left[1 \mp \frac{K}{k+1}\right] \quad (221)$$

formában van értelmezve. Az A_i -re (193)-ban adott összefüggés alapján (221)-ből a következő egyenlőség adódik

$$S_{\pm}(m) = \sum_{k=0}^m (-K)^k \frac{(m-k+1)(1+k \mp K)}{(m-k+2)!(k+1)!}. \quad (222)$$

Most, (222)-ben felhasználva az $(m-k+1)(k+1 \mp K) = \mp K(m+2) \pm K(1+k) - k(k+1) + (k+1)(M+1)$ összefüggést, a (222) baloldalán levő tört a következő alakot ölti

$$\begin{aligned} \frac{(m-k+1)(1+k \mp K)}{(m-k+2)!(k+1)!} &= \mp K(m+2) \frac{1}{(m-k+2)!(k+1)!} + (m+1 \pm K) \frac{1}{(m-k+2)!k!} \\ &\quad - \frac{1}{(m-k+2)!(k-1)!} \end{aligned} \quad (223)$$

A (223) egyenlőséget (222)-be helyettesítve

$$S_{\pm}(m) = \mp K(m+2)S_1(m) + (m+1 \pm K)S_2(m) - S_3(m), \quad (224)$$

egyenlőség adódik, ahol $i = 1, 2, 3$ értékekre

$$S_i(m) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-K)^k}{(m-k+2)!(k+2-i)!}. \quad (225)$$

A binomiális képlet $\sum_{k=0}^M (-K)^k \{M!/[(M-k)!k!]\}$ segítségével a (225)-ben adott kifejezések kiszámíthatóak, és a kapott eredmény

$$\begin{aligned} S_1(m) &= -\frac{1}{(m+3)!K} [(1-K)^{m+3} - 1 + (-1)^m K^{m+3} - (-1)^m (m+3)K^{m+2}], \\ S_2(m) &= \frac{1}{(m+2)!} [(1-K)^{m+2} + (m+2)(-1)^m K^{m+1} - (-1)^m K^{m+2}], \\ S_3(m) &= -\frac{K}{(m+1)!} [(1-K)^{m+1} - (m+1)(-1)^m K^m + (-1)^m K^{m+1}]. \end{aligned} \quad (226)$$

Ezen kifejezésekkel a (224)-ben szereplő $S_{\pm}(m)$ megadható, majd ez (220)-ba helyettesítve egy kétismeretlenes két egyenletből álló egyenletrendszert eredményez P_M és P_{M+1} -re. Ez adja a keresett végeredményt, mely szerint

$$P_M(m_M) = \frac{(1-K)^{M-1}}{(M-1)!} - \frac{(1-K)^M}{M!}. \quad (227)$$

A (227) eredményből azonnal látható, hogy (219) automatikusan teljesül.

7. A klaszter spin

Tételezzük fel, hogy a klasztert felépítő elemek spinnel rendelkeznek és tegyük fel azt a kérdést hogy az M komponensű klaszter átlagspin értéke $\bar{S}_M$ mekkora. Ezen kérdés megválaszolása különböző féle képpen lehetséges, attól függően, hogy a klasztert alkotó

elemek spinjei rendezetlenek, vagy kölcsönhatóak, a spin viselkedéstípusa a rendszerben milyen, a kölcsönhatás milyensége milyen, stb. A következőkben egy nagyon egyszerű esetet fogok tanulmányozni, mégpedig azt, amikor a spin Ising típusú, továbbá a spinek közötti kölcsönhatás $J(r)$ ismert, és izotrop, azaz $r = |\vec{r}|$ függés van jelen a $J(r)$ csatolásban, továbbá $J(r)$ rövid hatósugarú, erősen lecsengő és csak a legközelebbi szomszédok között hat.

Ez esetben, ha a klaszter M darab Ising spinből (S_i , $i = 0, 1, 2, \dots, M-1$) áll és $S_i = S \text{ sign}(S_i)$, az eredő spin nagyságát egyszerűen

$$S_e = \left| \sum_{i=0}^{M-1} S_i \right| = S \left| 1 + \sum_{i=1}^{M-1} \text{sign}(S_i) \right| \quad (228)$$

adja, ahol, amint (228)-ból látható, a spinelőjelek összege a meghatározó az eredő spin S_e kifejezésében. Látható tehát hogy $\text{sign}(S_i)$ meghatározása szükséges a továbbhaladáshoz.

A következőkben az S_i spinnel rendelkező részecskét nevezzük E_i -nek, továbbá az E_i -nek E_{i-1} -től mért távolsága legyen r_i . A klaszter mentén az individuális spinek iránybeállítása történjen úgy, hogy az első E_0 tag spinjét rögzítjük $+1$ irányba, azaz $S_0 = S$. A második E_1 tag spinjét rögzítse E_0 a $J(r_1)$ csatolás előjelén keresztül, azaz $S_1 = S_0 \text{ sign}(J(r_1)) = S \text{ sign}(J(r_1))$. Ezután az első két (egymástól r_1 távolságra lévő) spin rögzítve lévén, az E_2 (az E_1 -től r_2 távolságra lévő) egyed harmadik spinje az S_1 hatására rögzül $S_2 = S_1 \text{ sign}(J(r_2)) = S \text{ sign}(J(r_1)) \text{ sign}(J(r_2))$, és így tovább. Nyilvánvalóan, az itt bemutatott algoritmus csak rövid hatótávolságú és a távolság függvényében erősen csökkenő spin-spin kölcsönhatás esetében elfogadható. Ennek következtében a (228) egyenlőség a következő képpen alakul

$$S_e = S \left| 1 + \text{sign}(J(r_1)) + \text{sign}(J(r_1))\text{sign}(J(r_2)) + \text{sign}(J(r_1))\text{sign}(J(r_2))\text{sign}(J(r_3)) + \dots + \prod_{i=1}^{M-1} \text{sign}(J(r_i)) \right| = S \left| 1 + \sum_{n=1}^{M-1} \prod_{i=1}^n \text{sign}(J(r_i)) \right| \quad (229)$$

A (229) kifejezésben jól meghatározott inter-elem távolságok ($r_1, r_2, \dots, r_{M-1}$) vannak jelen, míg az M komponensű klaszterben [lásd (186,187,188)], ezek a távolságok változhatnak és jól meghatározott valószínűségekkel állhatnak elő. Ezért (229)-et a valószínűségi térre integrálni kell. Az integrál maga (187)-ben adott, az integrandus valószínűségekkel kapcsolatos része pedig a (177,178) alapján a $P_0(r_i)dP(r_i)$ tagok szorzatából áll, mely azt a valószínűséget rögzíti hogy az E_{i-1} legközelebbi szomszédja E_i , az E_{i-1} -től r_i távolságra legyen. Mivel most a klaszter M komponensszáma rögzített, a klaszterhossz vágást végző utolsó $P_0(r_{M-1})$ tag (186) jobboldalának legvégén nem kerül be a kifejezésbe. Ennek megfelelően, (229) felhasználásával, a tanulmányozott esetben vett átlagspin érték

$$\bar{S}_M = S \int_0^{m_M} dr_1 \left[\prod_{i=2}^{M-1} \int_0^{r_{i-1}} P_e(r_i) dr_i \right] \left| 1 + \sum_{n=1}^{M-1} \prod_{i=1}^n \text{sign}(J(r_i)) \right| \quad (230)$$

ahol

$$P_0(r_i)dP(r_i) = P_e(r_i)dr_i, \quad P_e(r) = 3ar^2 \exp(-ar^3). \quad (231)$$

A számolás további végzése a konkrét $J(r)$ függvény formájának ismeretét igényli. Mivel (230)-ban csak $J(r)$ előjele számít, meg kell keresni az r tengelyen azokat a ξ_α pontokat

amelyek $J(r)$ előjelszakaszait meghatározzák. Így $D_\alpha = (\xi_\alpha, \xi_{\alpha+1})$ tartományon (azaz $r_i \in D_\alpha$), a $\text{sign}(J(r_i)) = J_\alpha = (-1)^{\alpha+1}$ konstans érték. Ennek megfelelően, az D_α szakaszon a dr_i szerinti integrál konstans J_α érték mellett végződik.

Ezen stratégia mellett tehát az r tengely ξ_α pontjait keresem meg először

$$\xi_1 < \xi_2 < \xi_3 < \xi_4 < \xi_5 \dots < \xi_{max} \quad (232)$$

Ezen értékek közül, ha a részecskék tetszőleges közel kerülhetnek egymáshoz $\xi_1 = 0$. Ha viszont például rácson dolgozom és a két részecske közötti távolság számára alsó korlátot (r_0) szab a rácsállandó, akkor $\xi_1 = r_0$, továbbá a (230)-ban szereplő r szerinti integrálok alsó határa ilyenkor zéró helyett r_0 értékre vált. Az alább adott eredmények levezetések az r -szerinti integrálok alsó határát ξ_1 -nek tekintettem. E helyett beírt zéró vagy r_0 érték mindkét esetben a helyes eredményt visszaadja. Ami ξ_5 értéket illeti, megemlíteném hogy az itt leírt klaszterképzési folyamat általában akkor alkalmazható ha n_c kicsi, így az n_c jelenlétében kialakult átlagos legközelebbi szomszédhoz mért távolság, l_e , nagy, és jóval meghaladja a kölcsönhatás l_{int} hatósugarát. Ilyen körülmények között az általában ötödik koordinációs szférának megfelelő ξ_5 távolság l_{int} -hez képest nagy, így (232)-ben ξ_5 feletti értékek a végeredmény szintjén elenyészően kis járulékot adnak. Ezért, az alább bemutatott eredményekben $\xi_{max} = \xi_5$ feletti távolságértékeket nem veszek figyelembe. Hogy ennek realitása látható lehessen megjegyzem például hogy Ref^[255] esetében, ahol tipikus ilyen-szerű rendszert vizsgálnak szigetelő fázisban, $|J(\xi_5)/J(\xi_1)| = 0.018$, azaz ξ_6 pont járulécai elhanyagolhatóak.

Még egy megjegyzés van (232) alkalmazásával kapcsolatban. Az integrálok elvégzésének pillanatában $m_M > \xi_{max}$ értéket érdemes figyelembe venni, azaz ekkor a (232)-ben szereplő integrálok felső korlátja m_M helyett ξ_{max} . Ezek szerint, a (230)-nak megfelelő eredmény

$$\bar{S}_M = f_{M, \xi_{max}}(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_{max}) \quad (233)$$

típusú. Ezen egyenlőség jobboldalán $f_{M, \xi_{max}}$ egy a (230)-ban szereplő integrálás elvégzése után ismert függvény, amely a kötési hossz maximális lehetséges ξ_{max} értéke szerint számolt. A T hőmérsékleti faktor figyelembevételével azonban m_M hőmérséklet függővé válik és a (216)-ban értelmezett q értékről elmondottak alapján [lásd (216) után], csökken T növekedésével. Ez okokból kifolyólag (233)-at T -függés szerint korrigálni kell. Ezt úgy kell megtenni, hogy m_M értékét a ξ_α értékekkel össze kell vetni. Ez azt jelenti hogy $\xi_\alpha < m_M < \xi_{\alpha+1}$ esetén a D_α tartomány $D_\alpha = (\xi_\alpha, m_M)$ hosszúságú, továbbá $m_M < \xi_{\alpha+1}$ miatt a $D_{\alpha+1}$ tartomány nem tartozik többé az integrálási határok közé.

a) Az $\bar{S}_2$ esete

A levezetés példázata érdekében elemzem legelőször az $M = 2$ esetet. A (230)-ból, melyben ξ_5 tekintett az r szerinti integrálok felső korlátjának

$$\begin{aligned} \bar{S}_2 &= S \int_{\xi_1}^{\xi_5} |1 + \text{sign}(J(r_1))| P_e(r_1) dr_1 = S \left[\int_{\xi_1}^{\xi_2} |1 + 1| P_e(r_1) dr_1 + \int_{\xi_3}^{\xi_4} |1 + 1| P_e(r_1) dr_1 \right. \\ &= 2S \left[\int_{\xi_1}^{\xi_2} P_e(r_1) dr_1 + \int_{\xi_3}^{\xi_4} P_e(r_1) dr_1 \right] = 2S [(\exp(-a\xi_1^3) - \exp(-a\xi_2^3)) \\ &\quad + (\exp(-a\xi_3^3) - \exp(-a\xi_4^3))] = 2S [A(\xi_1, \xi_2) + A(\xi_3, \xi_4)], \quad \xi_4 < m_M. \end{aligned} \quad (234)$$

$$A(\xi_i, \xi_{i+1}) = (\exp(-a\xi_i^3) - \exp(-a\xi_{i+1}^3)). \quad (235)$$

Továbbmenőleg, a kifejezésből a (ξ_2, ξ_3) , illetve a (ξ_4, ξ_5) tartomány egyszerűen hiányzik, mivel ez esetben $\text{sign}(J(r_1)) = J_i = -1$ miatt a klaszterspin értéke zéró, így $\bar{S}_2$ -be járulékot nem eredményez. A (235) alapján a T miatt fellépő m_M változást is figyelembe vevő $\bar{S}_2$ kifejezése

$$\begin{aligned} \bar{S}_2 &= 2S[A(\xi_1, \xi_2) + A(\xi_3, \xi_4)], \quad \xi_4 < m_M, \\ \bar{S}_2 &= 2S[A(\xi_1, \xi_2) + A(\xi_3, m_M)], \quad \xi_3 < m_M \leq \xi_4, \\ \bar{S}_2 &= 2SA(\xi_1, \xi_2), \quad \xi_2 < m_M \leq \xi_3 \\ \bar{S}_2 &= 2SA(\xi_1, m_M), \quad \xi_1 < m_M \leq \xi_2 \\ \bar{S}_2 &= 0, \quad m_M \leq \xi_1. \end{aligned} \quad (236)$$

b) Az $\bar{S}_3$ esete

Az induló összefüggésünk ez esetben (ξ_5 felső korláttal)

$$\bar{S}_3 = S \int_{\xi_1}^{\xi_5} P_e(r_1) dr_1 \int_{\xi_1}^{r_1} P_e(r_2) dr_2 [1 + \text{sign}(J(r_1)) + \text{sign}(J(r_1))\text{sign}(J(r_2))] \quad (237)$$

Az integrál végzése az $\bar{S}_2$ -höz hasonlóan történik, csak ez esetben úgy az r_1 mint az r_2 tengelyen nyomon kell követni a (232)-ben adott ξ_α pontokat. Ezt megtéve a következő integrálási tartományok állnak elő:

I) Az R_1 tartomány amelyben $r_1 \in (\xi_1, \xi_2)$ és ezáltal $r_2 < r_1$ -re szintén $r_2 < \xi_2$ érvényesül. Mivel itt minden $\text{sign}(J(r_i))$ pozitív, erre a tartományra kapott érték

$$\bar{S}_3^{R_1} = 3S \int_{\xi_1}^{\xi_2} P_e(r_1) dr_1 \int_{\xi_1}^{r_1} P_e(r_2) dr_2 = 3SB(\xi_1, \xi_2) \quad (238)$$

ahol $Z_\alpha = \exp(-a\xi_\alpha^3)$ definíció mellett

$$B(\xi_1, \xi_2) = Z_1(Z_1 - Z_2) - \frac{1}{2}(Z_1^2 - Z_2^2). \quad (239)$$

II) Az R_2 tartomány amelyben $r_1 \in (\xi_2, \xi_3)$. Ez esetben az r_2 -re vonatkozólag két különálló eshetőség van: $r_2 \in (\xi_1, \xi_2)$ (ekkor $[1 - 1 - 1] = 1$ a szignum faktorokat tartalmazó zárójel), és $r_2 \in (\xi_2, r_1)$ (ekkor a szignum faktor $[1 - 1 + 1] = 1$). Mivel mindkét eset szignum faktora azonos, a kapott $\bar{S}_3^{R_2}$ járulék ekkor

$$\begin{aligned} \bar{S}_3^{R_2} &= S \int_{\xi_2}^{\xi_3} P_e(r_1) dr_1 \left[\int_{\xi_1}^{\xi_2} P_e(r_2) dr_2 + \int_{\xi_2}^{r_1} P_e(r_2) dr_2 \right] \\ &= S[A(\xi_1, \xi_2)A(\xi_2, \xi_3) + B(\xi_2, \xi_3)]. \end{aligned} \quad (240)$$

III) Az R_3 tartomány esetében $r_1 \in (\xi_3, \xi_4)$. Ekkor az r_2 változó három különböző intervallumon mozoghat. Ezek közül kettő esetében, mégpedig $r_2 \in (\xi_1, \xi_2)$, $r_2 \in (\xi_3, r_1)$ a szignum faktor értéke három, míg egy esetben, és pedig $r_2 \in (\xi_2, \xi_3)$ a szignum faktor értéke egy. Ennek következtében az $\bar{S}_3$ -ba kapott járulék

$$\begin{aligned}
\bar{S}_3^{R_3} &= 3S \int_{\xi_3}^{\xi_4} dr_1 P_e(r_1) \int_{\xi_1}^{\xi_2} dr_2 P_e(r_2) + S \int_{\xi_3}^{\xi_4} dr_1 P_e(r_1) \int_{\xi_2}^{\xi_3} dr_2 P_e(r_2) \\
&+ 3S \int_{\xi_3}^{\xi_4} dr_1 P_e(r_1) \int_{\xi_3}^{r_1} dr_2 P_e(r_2) \\
&= S[3A(\xi_1, \xi_2)A(\xi_3, \xi_4) + A(\xi_2, \xi_3)A(\xi_3, \xi_4) + 3B(\xi_3, \xi_4)].
\end{aligned} \tag{241}$$

IV) Az R_4 tartomány esetében $r_1 \in (\xi_4, \xi_5)$. Ekkor az r_2 változó négy különböző intervallumon mozoghat. De mivel ekkor $\text{sign}(J(r_1)) = -1$, következik, hogy minden esetben

$$|1 + \text{sign}(J(r_1)) + \text{sign}(J(r_1))\text{sign}(J(r_2))| = |- \text{sign}(J(r_2))| = 1, \tag{242}$$

tehát minden esetben a szignum faktor ugyanaz. Ennek következtében

$$\bar{S}_3^{R_4} = S \int_{\xi_4}^{\xi_5} dr_1 P_e(r_1) \int_{\xi_1}^{r_1} dr_2 P_e(r_2) = S[A(\xi_4, \xi_5)A(\xi_1, \xi_4) + B(\xi_4, \xi_5)], \tag{243}$$

továbbá, aláhúzom, hogy

$$A(\xi_1, \xi_4) = A(\xi_1, \xi_2) + A(\xi_2, \xi_3) + A(\xi_3, \xi_4). \tag{244}$$

A négy tartományon kapott eredmények összegzése nyomán (238,240,241,243) egyenlőségekből adódó kifejezés $\bar{S}_3$ -ra, mégpedig $m_M \geq \xi_5$ esetben

$$\begin{aligned}
\bar{S}_3 &= S\{3B(\xi_1, \xi_2) + [A(\xi_1, \xi_2)A(\xi_2, \xi_3) + B(\xi_2, \xi_3)] + [3A(\xi_1, \xi_2)A(\xi_3, \xi_4) + A(\xi_2, \xi_3)A(\xi_3, \xi_4) \\
&+ 3B(\xi_3, \xi_4)] + [A(\xi_4, \xi_5)(A(\xi_1, \xi_2) + A(\xi_2, \xi_3) + A(\xi_3, \xi_4)) + B(\xi_4, \xi_5)]\}.
\end{aligned} \tag{245}$$

A (245) alapján, (236)-hoz hasonlóan, a változó nagyságú m_M figyelembevételével megadott $\bar{S}_3$ kifejezés ($m_M < \xi_5$ esetekben):

$$\begin{aligned}
\bar{S}_3 &= S\{3B(\xi_1, \xi_2) + [A(\xi_1, \xi_2)A(\xi_2, \xi_3) + B(\xi_2, \xi_3)] + [3A(\xi_1, \xi_2)A(\xi_3, \xi_4) + A(\xi_2, \xi_3)A(\xi_3, \xi_4) \\
&+ 3B(\xi_3, \xi_4)] + [A(\xi_4, m_M)(A(\xi_1, \xi_2) + A(\xi_2, \xi_3) + A(\xi_3, \xi_4)) + B(\xi_4, m_M)]\}, \quad \xi_4 < m_M < \xi_5, \\
\bar{S}_3 &= S\{3B(\xi_1, \xi_2) + [A(\xi_1, \xi_2)A(\xi_2, \xi_3) + B(\xi_2, \xi_3)] + [3A(\xi_1, \xi_2)A(\xi_3, m_M) \\
&+ A(\xi_2, \xi_3)A(\xi_3, m_M) + 3B(\xi_3, m_M)]\}, \quad \xi_3 < m_M \leq \xi_4, \\
\bar{S}_3 &= S\{3B(\xi_1, \xi_2) + [A(\xi_1, \xi_2)A(\xi_2, m_M) + B(\xi_2, m_M)]\}, \quad \xi_2 < m_M \leq \xi_3, \\
\bar{S}_3 &= 3SB(\xi_1, m_M), \quad \xi_1 < m_M \leq \xi_2, \\
\bar{S}_3 &= 0, \quad m_M \leq \xi_1.
\end{aligned} \tag{246}$$

c) Az $\bar{S}_4$ esete

Az induló kifejezés ez alkalommal

$$\begin{aligned}
\bar{S}_4 &= S \int_{\xi_1}^{\xi_5} dr_1 P_e(r_1) \int_{\xi_1}^{r_1} dr_2 P_e(r_2) \int_{\xi_1}^{r_2} dr_3 P_e(r_3) [|1 + \text{sign}(J(r_1)) \\
&+ \text{sign}(J(r_1))\text{sign}(J(r_2)) + \text{sign}(J(r_1))\text{sign}(J(r_2))\text{sign}(J(r_3))|]
\end{aligned} \tag{247}$$

A (247) kiszámolása az előzőleg bemutatott esetek kiszámítási módjával tökéletesen egyezik. Ez alkalommal is négy R_α tartomány alakítható ki, melyekben megjelenő járulékok rendre a következők ($m_M \geq \xi_5$ esetén):

$$\bar{S}_4^{R_1} = 4S \int_{\xi_1}^{\xi_2} P_e(r_1) dr_1 \int_{\xi_1}^{r_1} P_e(r_2) dr_2 \int_{\xi_1}^{r_2} P_e(r_3) dr_3 = 4SC(\xi_1, \xi_2), \quad (248)$$

$$C(\xi_1, \xi_2) = \frac{1}{2} Z_1^2 (Z_1 - Z_2) - \frac{1}{2} Z_1 (Z_1^2 - Z_2^2) + \frac{1}{6} (Z_1^3 - Z_2^3), \quad (249)$$

továbbá Z_α értelmezése (239) összefüggés felett található.

$$\begin{aligned} \bar{S}_4^{R_2} &= 2S \int_{\xi_2}^{\xi_3} P_e(r_1) dr_1 \left[\int_{\xi_1}^{\xi_2} P_e(r_2) dr_2 \int_{\xi_1}^{r_2} P_e(r_3) dr_3 + \int_{\xi_2}^{r_1} P_e(r_2) dr_2 \int_{\xi_1}^{\xi_2} P_e(r_3) dr_3 \right] \\ &= 2S[A(\xi_2, \xi_3)B(\xi_1, \xi_2) + B(\xi_2, \xi_3)A(\xi_1, \xi_2)] \end{aligned} \quad (250)$$

A harmadik járulék

$$\begin{aligned} \bar{S}_4^{R_3} &= 2S \int_{\xi_3}^{\xi_4} P_e(r_1) dr_1 \left[2 \int_{\xi_1}^{\xi_2} P_e(r_2) dr_2 \int_{\xi_1}^{r_2} P_e(r_3) dr_3 + \int_{\xi_2}^{\xi_3} P_e(r_2) dr_2 \int_{\xi_2}^{r_2} P_e(r_3) dr_3 \right. \\ &\quad \left. + \int_{\xi_3}^{r_1} P_e(r_2) dr_2 \left(2 \int_{\xi_1}^{\xi_2} P_e(r_3) dr_3 + \int_{\xi_2}^{\xi_3} P_e(r_3) dr_3 + 2 \int_{\xi_3}^{r_2} P_e(r_3) dr_3 \right) \right] \\ &= 2S[2A(\xi_3, \xi_4)B(\xi_1, \xi_2) + A(\xi_3, \xi_4)B(\xi_2, \xi_3) + 2B(\xi_3, \xi_4)A(\xi_1, \xi_2) \\ &\quad + B(\xi_3, \xi_4)A(\xi_2, \xi_3) + 2C(\xi_3, \xi_4)] \end{aligned} \quad (251)$$

A negyedik járulék

$$\begin{aligned} \bar{S}_4^{R_4} &= 2S \int_{\xi_4}^{\xi_5} P_e(r_1) dr_1 \left[\int_{\xi_1}^{\xi_2} P_e(r_2) dr_2 \int_{\xi_1}^{r_2} P_e(r_3) dr_3 + \int_{\xi_2}^{\xi_3} P_e(r_2) dr_2 \int_{\xi_1}^{\xi_2} P_e(r_3) dr_3 \right. \\ &\quad \left. + \int_{\xi_3}^{\xi_4} P_e(r_2) dr_2 \left(\int_{\xi_1}^{\xi_2} P_e(r_3) dr_3 + \int_{\xi_3}^{r_2} P_e(r_3) dr_3 \right) + \int_{\xi_4}^{r_1} P_e(r_2) dr_2 \left(\int_{\xi_1}^{\xi_2} P_e(r_3) dr_3 + \int_{\xi_3}^{\xi_4} P_e(r_3) dr_3 \right) \right] \\ &= 2S[A(\xi_4, \xi_5)B(\xi_1, \xi_2) + A(\xi_4, \xi_5)A(\xi_2, \xi_3)A(\xi_1, \xi_2) + A(\xi_4, \xi_5)A(\xi_3, \xi_4)A(\xi_1, \xi_2) \\ &\quad + A(\xi_4, \xi_5)B(\xi_3, \xi_4) + B(\xi_4, \xi_5)A(\xi_1, \xi_2) + B(\xi_4, \xi_5)A(\xi_3, \xi_4)]. \end{aligned} \quad (252)$$

Az m_M hosszváltozás figyelembevétele a járulékokban külön külön a következő:

Az R_1 tartományon

$$\bar{S}_4^{R_1} = 4SC(\xi_1, \xi_2), \quad \xi_2 < m_M; \quad \bar{S}_4^{R_1} = 4SC(\xi_1, m_M), \quad \xi_1 < m_M \leq \xi_2; \quad \bar{S}_4^{R_1} = 0, \quad m_M \leq \xi_1. \quad (253)$$

Az R_2 tartományon

$$\begin{aligned} \bar{S}_4^{R_2} &= 2S[A(\xi_2, \xi_3)B(\xi_1, \xi_2) + B(\xi_2, \xi_3)A(\xi_1, \xi_2)], \quad \xi_3 < m_M \\ \bar{S}_4^{R_2} &= 2S[A(\xi_2, m_M)B(\xi_1, \xi_2) + B(\xi_2, m_M)A(\xi_1, \xi_2)], \quad \xi_2 < m_M \leq \xi_3 \\ \bar{S}_4^{R_2} &= 0, \quad m_M \leq \xi_2 \end{aligned} \quad (254)$$

Az R_3 tartományon

$$\begin{aligned} \bar{S}_4^{R_3} &= 2S[2A(\xi_3, \xi_4)B(\xi_1, \xi_2) + A(\xi_3, \xi_4)B(\xi_2, \xi_3) + 2B(\xi_3, \xi_4)A(\xi_1, \xi_2) \\ &\quad + B(\xi_3, \xi_4)A(\xi_2, \xi_3) + 2C(\xi_3, \xi_4)], \quad \xi_4 < m_M \\ \bar{S}_4^{R_3} &= 2S[2A(\xi_3, m_M)B(\xi_1, \xi_2) + A(\xi_3, m_M)B(\xi_2, \xi_3) + 2B(\xi_3, m_M)A(\xi_1, \xi_2) \\ &\quad + B(\xi_3, m_M)A(\xi_2, \xi_3) + 2C(\xi_3, m_M)], \quad \xi_3 < m_M \leq \xi_4 \\ \bar{S}_4^{R_3} &= 0, \quad m_M \leq \xi_3 \end{aligned} \quad (255)$$

Az R_4 tartományon

$$\begin{aligned}
\bar{S}_4^{R_4} &= 2S[A(\xi_4, \xi_5)B(\xi_1, \xi_2) + A(\xi_4, \xi_5)A(\xi_2, \xi_3)A(\xi_1, \xi_2) + A(\xi_4, \xi_5)A(\xi_3, \xi_4)A(\xi_1, \xi_2) \\
&\quad + A(\xi_4, \xi_5)B(\xi_3, \xi_4) + B(\xi_4, \xi_5)A(\xi_1, \xi_2) + B(\xi_4, \xi_5)A(\xi_3, \xi_4)], \quad \xi_5 < m_M \\
\bar{S}_4^{R_4} &= 2S[A(\xi_4, m_M)B(\xi_1, \xi_2) + A(\xi_4, m_M)A(\xi_2, \xi_3)A(\xi_1, \xi_2) + A(\xi_4, m_M)A(\xi_3, \xi_4)A(\xi_1, \xi_2) \\
&\quad + A(\xi_4, m_M)B(\xi_3, \xi_4) + B(\xi_4, m_M)A(\xi_1, \xi_2) + B(\xi_4, m_M)A(\xi_3, \xi_4)], \quad \xi_4 < m_M \leq \xi_5 \\
\bar{S}_4^{R_4} &= 0, \quad m_M \leq \xi_4
\end{aligned} \tag{256}$$

A teljes $\bar{S}_4$ értéket

$$\bar{S}_4 = \bar{S}_4^{R_1} + \bar{S}_4^{R_2} + \bar{S}_4^{R_3} + \bar{S}_4^{R_4}, \tag{257}$$

kifejezés adja, mely tetszőleges m_M -re (253-256) segítségével fejezhető ki.

d) **Az $\bar{S}_M, M \geq 5$ esete**

A bemutatott gondolatmenettel $\bar{S}_M$ tetszőleges $M \geq 5$ értékre a továbbiakban szintén kiszámítható. De mivel P_5 legnagyobb értéke $(1/30)Max(P_1)$ alatt helyezkedik el tetszőleges K (vagy m_M) értékre, következik, hogy a $\bar{S}_5$ és magasabb rendű járulékok különböző fizikai mennyiségekbe elenyészően kicsi adalékot adnak. Ezért gyakorlatilag $\bar{S}_M, M \geq 5$ kifejezések a bemutatásra kerülő eredményekben nem számítanak, így itt nem lesznek elemezve.

8. A mágneses szuszeptibilitás

Ha a rendszer spinből származó lokalizált mágneses momentumokból áll, melyek spin kvantumszáma S és melyek paramágneses állapotban vannak, a mágneses szuszeptibilitás Curie formájú

$$\chi = \frac{C}{T}, \quad C = \frac{n_c S(S+1)}{3}, \tag{258}$$

ahol a Curie konstans C megadott értéke $k_B = 1, g\mu_B = 1$ egységekben adott és a hőmérséklet Kelvinben kifejezett. Ha a rendszerspin a klaszterspin képezi, χ formája

$$\chi = \frac{n_c}{3T} \sum_{M=1}^{\infty} P_M \bar{S}_M (\bar{S}_M + 1) \tag{259}$$

A Curie konstans (259)-ből

$$C = T\chi = \frac{n_c}{3} \sum_{M=1}^{\infty} P_M \bar{S}_M (\bar{S}_M + 1). \tag{260}$$

Ha ilyen körülmények között a mért Curie konstans T függő, az többnyire klaszteresedés jele, és ez esetben a (260) szerű viselkedéstípus következménye. Ha $T \rightarrow \infty$, a klaszterspin egyetlen spinből áll, és ez esetben a C_∞ Curie konstans

$$C_\infty = \frac{n_c S(S+1)}{3} \tag{261}$$

A (260,261) hányadosa közvetlenül a klaszterizációs folyamatra jellemző járulékokat tartalmaz

$$c = \frac{C}{C_\infty} = \sum_{M=1}^{\infty} P_M \frac{\bar{S}_M(\bar{S}_M + 1)}{S(S + 1)} = \sum_{M=1}^{\infty} P_M B_M \quad (262)$$

ahol

$$B_M = \frac{\bar{S}_M(\bar{S}_M + 1)}{S(S + 1)}. \quad (263)$$

Mágneses szuszceptibilitási mérésekből származó kísérleti adatokkal való összehasonlítás a (262,263) képletek alapján történik, ahol a B_M -be bekerülő $\bar{S}_M$ értékek az előző alfejezetből származnak.

Megjegyzendő továbbá, hogy mivel $\bar{S}_1 = S$, következik, hogy

$$B_{M=1} = 1, \quad (264)$$

tehát egy adott alkalmazásban csupán B_M , $M > 1$ esetekben vett meghatározása szükséges.

9. A hőmérsékletfüggő klaszterképződési folyamat

A klaszterképződési folyamatban a hőmérsékletfüggés, amint azt már (216) összefüggést jellemző szövegben jeleztem, az m_M hőmérsékletfüggése hozza magával. Ennek alapja abban rejlik, hogy az elemek (részecskék) közötti r távolságnak megfelelő $W(r)$ kötési energia értékkel egyenlő $k_B T$ termikus energiaérték a kötést felszakítja. Ennek megfelelően az m_M maximális kötési hossz távolságot a

$$W(m_M) = K_B T \quad (265)$$

egyenlőség határozza meg. Alá szeretném húzni, hogy ezen elképzelés nem újkeletű, számos rendszer jellemzésben alkalmazták már¹³².

a) Egy konkrét alkalmazás

A jobb érthetőség szempontjából szeretnék egy példát is bemutatni a (265) relációra egy konkrét esetben, mégpedig Ref^[255] Eu^{2+} ionokat tartalmazó EuS rendszerben, ahol $S = 7/2$. A kölcsönhatási energia nagysága $W_E(i, j) = |2J_e(i, j)\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j|$ formában van megadva és $r = |\vec{r}_i - \vec{r}_j|$ függvényében erősen csökken, továbbá mért adatok ismertek a $J_e(i, j)$ értékekre. Ilyen esetben modellszerű formában valahogy le kell írni $J(r) = 2J_e(r)$ viselkedését, úgy hogy ez a kísérleti adatoknak megfelelő legyen és ez úton van lehetőség m_M változó T függésének jellemzésére. E célból legyen egyszerűen

$$|J(r)| = J_0 \exp(-\gamma \frac{r}{a}). \quad (266)$$

E kifejezésben legyen J_0 a rendszerben mért legnagyobb érték, amely $J_e = 0.22k_B$, tehát $J_0 = 0.44k_B$. A rendszer maga egy fcc típusú rács, és ebben az n -ik szomszéd

$$r_n = (n/2)^{1/2} a_0, \quad (267)$$

ahol a_0 a konvencionális cella ele.—Legyen így a (266)-ban szereplő a érték $a = a_0$. A γ koefficientst úgy határozom meg, hogy az összefüggés interpoláljon minél jobban a kísérleti $|J_e|$ adatok között. Ezt $\gamma = 3.8$ érték teszi. A kölcsönhatási energiát így

$$W(r) = J_0 S(S+1) \exp(-\gamma \frac{r}{a}) = 6.93 k_B \exp(-\gamma \frac{r}{a}) \quad (268)$$

formában modellálom, ahol $S = 7/2$ lévén és $J_0 = 0.44 k_B$, a $J_0 S(S+1) = 0.44 * 3,5 * 4.5 k_B = 6.93 k_B$ szolgáltatja a számértéket (268) jobboldalának exponenciális tagja előtt. Mindezek után, $W = k_B T$ és $r/a = m_M/a_0$ helyettesítés (268)-ba adja az $m_M = m_M(T)$ hőmérsékletfüggést a (264)-nek megfelelően

$$m_M = \frac{a_0}{3.8} \ln(\frac{6.93}{T}) \quad (269)$$

formában, ahol T Kelvinben adott.

Most képzeljük el, hogy e rendszert $(Eu_x Sr_{1-x})S$ formában vizsgáljuk²⁵⁶. A mérések alapján az Eu ionok ugyanazon fcc ráccsomópontokba, de mostmár rendezetlenül épülnek be, a közöttük ható csatolás meg változatlanul tekinthető (azaz, $J(r)$ kifejezését ugyanannak tekintem mint a rendezett esetben). Mivel $x = 1$ esetén, a tiszta anyagban, négy Eu atom van konvencionális cellánként, tehát $n_c^0 = n_c(x = 1) = 4/a_0^3$. Ha viszont $x \neq 1$, akkor a részecskeszám koncentráció

$$n_c = \frac{4x}{a_0^3}. \quad (270)$$

Ezen eredmények alapján a P_M valószínűségekben szereplő $K = \exp(-am_M^3) = \exp[-n_c V_i]$ tag T -függő kifejezését fel lehet írni. Ezen összefüggésben a V_i az a térfogat amelyben az m_M hatósugarú kölcsönhatás kötések tud létrehozni. Folytonos rendszerben $V_i = V_g = (4\pi/3)m_M^3$, azaz az m_M sugarú gömbtérfogatnak felel meg. Köbös típusú rácsban azonban a rács jelenléte miatt ez nem igaz, az effektív V_i , a V_g értékhez képest $\gamma_0 = 2/(\sqrt{3}\pi)$ értékkel csökken, hiszen ez esetben $V_i = V_k = [8/(3\sqrt{3})]m_M^3$, ahol V_k az m_M fél-főátlóhosszal rendelkező kocka térfogata, és $V_k = \gamma_0 V_g$. Továbbmenőleg, a kísérleti adatok $x = 0.025$ értékre vonatkoznak, így $4\pi/3 = 4.188$, $4x = 0.1$, az n_c és m_M a (270) és (269)-ben adott, továbbá $[(4\pi\gamma_0/3)n_c]/(3.8)^3 = 0.00275/a_0^3$. Ennek megfelelően

$$K = \exp[-n_c \gamma_0 (4\pi/3) m_M^3] = \exp[-0.00275 \ln^3(\frac{6.93}{T})], \quad (271)$$

ahol tehát T Kelvin fokokban adott.

A mágneses szuszceptibilitási mérésekkel való összehasonlítás, amint az az előző alfejezetből az $\tilde{S}_M$ tagok kiszámításánál látszik, a (232)-ben bemutatott ξ_α pontok megadásával történhet. Ezek szintén kifejezhetőek az EuS rendszer kísérletileg ismert adataiból. A mérések alapján ugyanis $J_e(r)$ minden egyes egyedi n növekedés után előjelet vált²⁵⁵. Figyelembe kell továbbá venni, hogy a rácsban a részecskék a rácsállandó miatt tetszőleges közel nem kerülhetnek egymáshoz, tehát $\xi_1 = r_1$, hol r_n a (267)-ben adott. Továbbá r_5 felett $J_e(r)$ elhanyagolhatóan kicsi, ezért $\xi_5 = r_5$. A közbeeső r_n , $n = 2, 3, 4$ pontokban $J_e(r)$ előjele mindig az előző előjelhez képest más, így ξ_α , $\alpha = 2, 3, 4$, az $r_{\alpha-1}$ és r_α közepén

veszem, azaz $\xi_2 = (r_1 + r_2)/2$, $\xi_3 = (r_2 + r_3)/2$, $\xi_4 = (r_3 + r_4)/2$. Ennek megfelelően, a_0 egységekben kifejezve

$$\frac{\xi_1}{a_0} = 0.7071, \quad \frac{\xi_2}{a_0} = 0.8535, \quad \frac{\xi_3}{a_0} = 1.1123, \quad \frac{\xi_4}{a_0} = 1.3194, \quad \frac{\xi_5}{a_0} = 1.7320. \quad (272)$$

A (272)-ben adott ξ_α hosszértékek a (269) tükrében, a hőmérsékleti skála $10 - 500mK$ tartományára eső T értékeket eredményeznek.

10. Fizikai alkalmazhatóság

Nyilvánvalóan, az itt bemutatott modell matematikai jellegű. Fizikai alkalmazhatóság az esetben eredményrevezető ha a rendszerben a részecskék között ható kölcsönhatás erősen lecseng, rövid hatótávolságú l_{int} , továbbá a rendezetlenül és kis koncentrációban elhelyezkedő szomszédos részecskék közötti átlagos távolság l_e jóval meghaladja l_{int} értéket (azaz $l_e \gg l_{int}$. Megjegyzem továbbá, hogy az itt szereplő l_e jelentheti pl. a legközelebbi szomszéd távolságának átlagértékét is). Ez esetben nagy valószínűséggel, egy részecske csak egy darab és a legközelebb elhelyezkedő szomszédjával vett kölcsönhatása alkotja ezen részecske kölcsönhatási járulékának oroszlánrészét, és ezáltal a modell eredményei a kísérleti adatokkal összemérhetőek lesznek.

Hogy ez alkalommal is egy példával éljek, az előző alfejezetben bemutatott $(Eu_xSr_{1-x})S$ esetében a perkolációs küszöb $x = 0.13$ értéknek felel meg²⁵⁶. Az $x = 0.025$ -nek megfelelő koncentrációnál a rendelkezésre álló fcc ráccsomópontok $1/40$ része telik meg. Mivel 10 konvencionális cella pont 40 helyet tartalmaz, az $x = 0.025$ -re vett átlagos részecskék közötti távolság nagyságrendileg $l_e \sim 10a_0$ tartományba esik. Ezzel ellentétben a kölcsönhatás hatósugara (267)-nek és $n = 6$ -nak (hatodik szomszédig terjedőnek) megfelelően $l_{int} \sim a_0$, tehát látható hogy a tanulmányozott példában l_e gyakorlatilag egy nagyságrenddel nagyobb l_{int} távolságnál.

Az e fejezetben leírt specifikus klaszternövekedés jellemzésére alkalmazható módszer a XI. fejezetben kerül alkalmazásra.

B. Kvantummechanikai sokrészecskés rendszerekre vonatkozó egzakt eredmények

levezetésénél alkalmazott módszerek

A kvantummechanikai sokrészecskés rendszerekre vonatkozó pontos eredmények levezetésénél alkalmazott módszer amit használok az elkövetkezőkben, a pozitív szemidefinit operátorok fogalmára alapszik. Megemlítem, hogy az alább leírt módszertan saját fejlesztésű. Megemlítem továbbá, hogy az alkalmazott eljárást a teljes módszertanával együtt, az alábbiakban megadott kisebb részletességgel a Ref.^[2-6,23-25]-ben jelentettem meg.

A módszer bemutatását kiindulópontként a pozitív szemidefinit operátorok alaptulajdonságainak átismétlésével fogom kezdeni.

Pozitív szemidefinit operátor az a $\hat{P}_n$ operátor amely a $\mathcal{H}$ Hilbert tér tetszőleges $|\phi\rangle \in \mathcal{H}$ vektora esetében $\langle\phi|\hat{P}_n|\phi\rangle \geq 0$ tulajdonságot mutat. Ebből aztán következik, hogy $\hat{P}_n$ tetszőleges $p_{n,\alpha}$ sajátértéke, ahol tehát $\hat{P}_n|\phi_{n,\alpha}\rangle = p_{n,\alpha}|\phi_{n,\alpha}\rangle$, nem negatív, azaz $p_{n,\alpha} \geq 0$.

A pozitív szemidefinit operátorok összege szintén pozitív szemidefinit, így tehát a

$$\hat{P} = \sum_n \hat{P}_n \quad (273)$$

operátornak is a $\hat{P}_n$ -hez hasonló tulajdonságai vannak. Ennek következményeként a $\hat{P}$ operátor $|\Psi_g\rangle$ alapállapot hullámfüggvényét levezethetjük úgy, hogy megkeressük azt a legáltalánosabb $|\Psi_g\rangle$ állapotvektort amely kielégíti a $\hat{P}|\Psi_g\rangle = 0$ összefüggést. A módszer alapgondolatának lényegét ez az összefüggés adja. Tudjuk ugyanis hogy egy valóságos és tetszőleges fizikai rendszer Hamilton operátorának spektruma mindig alólól korlátos. De ez az alsó korlát általában ismeretlen, így meghatározása, legalábbis sokrészecskés rendszerek esetében specifikusan, nem könnyű feladat. A nehézségi fok jellemzője, hogy általában, úgy a sajátérték alsó korlátjára, mint az őt megadó hullámvektorra koncentrálni kell az alapállapot jellemzésekor. Azonban, ha operátorunkat pozitív szemidefinit formára hozzuk, jól meghatározott és ismert alsó korlátot teremtünk neki, ezért könnyítünk e módon az alapállapot levezetésén.

Mindennek tükrében, az eljárás a következő stratégiára alapszik. Legelőször is a rendszer $\hat{H}$ Hamilton operátorát egy $\hat{P}$ pozitív szemidefinit operátor segítségével próbáljuk felírni

$$\hat{H} = \hat{P} + C \quad (274)$$

formára, ahol $\hat{P}$ operátor (273) alakú, és C egy skalár. Az induló $\hat{H}$ Hamilton operátort mindig közelítésmentesen kell (274) formára alakítani. Továbbá megjegyezem, hogy a C skalár nem egy struktúra nélküli szám, hanem általában bonyolult kifejezéssel rendelkezik, melybe a $\hat{H}$ csatolási állandói, illetve mozgásállandó értékek (pl. a rögzített részecskeszám kanonikus sokaság esetében, rács-csomópontok vagy cellák száma rács jelenlétében, stb.) mind (és legtöbbször implicit) bekerülhetnek (azaz, C explicit nem ismert (274) felírásakor).

Ha a (274) formára való átalakítás sikerül, akkor a

$$\hat{H}' = \hat{H} - C \quad (275)$$

pozitív szemidefinit operátor. Ekkor, második lépésként megkonstruáljuk azt a legáltalánosabb hullámvektort ($|\Psi_g\rangle$) amely a

$$\hat{H}'|\Psi_g\rangle = 0 \quad (276)$$

összefüggést kielégíti. Ez a hullámvektor lesz az alapállapot hullámfüggvény, továbbá az alapállapot energiája $E_g = C$ összefüggéssel adódik.

A továbbhaladás előtt hangsúlyozom, hogy ez az eljárás nem függ se dimenziótól, se integrabilitástól (azaz attól a tényről hogy a mozgásállandók száma, az Avogadro szám nagyságrendű – ne feledjék: sokrészecskés rendszer esetében vagyunk – szabadságfokok számával egyezzenek). Ezért, a módszer, elvileg, tetszőleges rendszerre alkalmazható.

Az előbb bemutatott alapeljárás kifejtett alapgondolatai sok fontos lényegi aspektust nem tükröznek, ezért az elkövetkezőkben részletesen ismertetem a módszer összes lépését.

A) Bevezetés

Az elmondottak tükrében a tanulmányozott $\hat{H}$ Hamilton operátort

$$\hat{H} = \sum_{n=1}^m \hat{P}_n + C \quad (277)$$

formára kell alakítani egzakt módon. A $\hat{P}_n$ operátorok pozitív szemidefinit operátorok, m az alkalmazott pozitív szemidefinit operátorok száma, C pedig egy skalár. Ezt a transzformációt nagyon sokféle képpen meg lehet valósítani és végeredményben, a (277) egyenlőség jobboldalára kerülő operátorok konkrét formája az induló $\hat{H}$ Hamilton operátor formájának, továbbá (sokszor) a jellemzett fázisdiagram tartománynak illetve részecskekonzentrációnak is a függvénye. Mindennek ellenére, a disszertációban leggyakrabban alkalmazott transzformációk jellemzésre kerülnek az alábbiakban.

A $\hat{P}_n$ operátorok lehetnek például **a)** $\hat{P}_n = \hat{\Omega}_n^\dagger \hat{\Omega}_n$ vagy **b)** $\hat{P}_n = \hat{\Omega}_n \hat{\Omega}_n^\dagger$ típusúak (a felsorolás itt nem tekinthető sem teljes, sem kizáró jellegűnek). Ezen formák általában a kinetikus energia tag, vagy általánosabban az egyrészecske járulékok pozitív szemidefinit formára való átalakításában alkalmazottak, de ez sem törvényszerű, hiszen az alkalmazási lehetőség függ attól, hogy $\hat{\Omega}_n$ szerkezetileg milyen. Az elkövetkezőkben lineáris szerkezetű $\hat{\Omega}_n$ operátorokkal [lásd (278)] előforduló előbb felsorolt **a)** és **b)** eseteket fogom vizsgálni.

B) Az a) eset részletes elemzése

Vegyük az a) esetet, tekintsük a rendszerünket fermionikusnak, és legyen kezdetben $\hat{H} = \hat{H}_0$ (az egyrészecske járulék). Ez esetben, $\hat{\Omega}_n$ szerepét általában egy **i** csomóponton értelmezett blokk operátor játssza ($\hat{\Omega}_{\mathbf{i},\sigma}$), ahol

$$\hat{\Omega}_{\mathbf{i},\sigma} = \sum_{\alpha=1}^{\alpha_M} a_\alpha \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_\alpha,\sigma}. \quad (278)$$

Ezen kifejezésben először is bizonyos $\mathcal{S}$ tartományhoz (doménhez, alrácshoz, általában halmazhoz) tartozó **i** $\in \mathcal{S}$ csomóponton értelmezzünk egy $B_{\mathbf{i}}$ blokkot amely az $(\mathbf{i}+\mathbf{r}_1, \mathbf{i}+\mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{i}+\mathbf{r}_{\alpha_M})$ csomópont halmazból épül fel. Ezen utóbbi halmazban α_M darab csomópont található, továbbá szomszédos $B_{\mathbf{i}}$ blokkoknak lehetnek közös elemeik. Magát a blokkot matematikailag az $(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_{\alpha_M})$ csomópont pozíciók jellemzik, melyek a blokkon belül a csomópontok elhelyezkedését adják meg. Az így értelmezett $B_{\mathbf{i}}$ blokk, mindannak ellenére hogy egy kiterjedt geometriai objektum, mégis egyetlen csomóponttal (**i**) indexálható.

Megjegyzem továbbá, hogy $\hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_n,\sigma}$ operátorok a $B_{\mathbf{i}}$ blokk csomópontjain ható kanonikus Fermi operátorok, továbbá az a_α skalárok a (277) transzformáció során rögzülő numerikus prefaktorok. Azt is megemlítem, hogy többsávós rendszer esetében, (278) kifejezésében több típusú (de ugyanazon csomóponton értelmezett) kanonikus Fermi operátor lineáris kombinációja is szerepelhet.

Az $\hat{\Omega}_{\mathbf{i},\sigma}^\dagger \hat{\Omega}_{\mathbf{i},\sigma}$ szorzat kétoperátor (azaz $\hat{c}_{\mathbf{j}_1,\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{j}_2,\sigma}$) típusú járulékokat eredményez, tehát ilyen típusú operátorok segítségével $\hat{H}$ egyrészecske járulékai pozitív szemidefinit formára alakíthatóak. Ennek megfelelően

$$\overset{\text{dc}}{H_0} = \sum_{\mathbf{i}, \sigma} \Omega_{\mathbf{i}, \sigma}^{\dagger} \Omega_{\mathbf{i}, \sigma} + C \quad (279)$$

valósítja ezen transzformációt meg, ahol $\mathbf{i}$ a $\mathcal{S}$ halmazon fut végig. A (279) alkalmazásakor a jobboldalon szereplő műveleteket elvégzem, majd a kapott kifejezés összes komponensét tagonként egyeztetem a baloldalon szereplő és induló $\hat{H}_0$ -val. Ilyen formában határozódnak meg a (278)-ban szereplő a_α oefficiensek, mégpedig úgy, hogy (279) által kapcsolódnak a $\hat{H}_0$ paramétereikhez [hopping amplitudók ($t_{\mathbf{i}, \mathbf{j}}$), hibridizációs amplitudók ($V_{\mathbf{i}, \mathbf{j}}$), egyrészesecske lokális potenciálok ($\epsilon_{\mathbf{i}}$), stb. értékeihez]. Ezáltal a következő típusú egyenletrendszert kapom

$$\begin{aligned} C &= f_0(t_{\mathbf{i}, \mathbf{j}}, V_{\mathbf{i}, \mathbf{j}}, \epsilon_{\mathbf{i}}), \\ a_1 &= f_1(t_{\mathbf{i}, \mathbf{j}}, V_{\mathbf{i}, \mathbf{j}}, \epsilon_{\mathbf{i}}), \\ a_2 &= f_2(t_{\mathbf{i}, \mathbf{j}}, V_{\mathbf{i}, \mathbf{j}}, \epsilon_{\mathbf{i}}), \\ &\dots\dots\dots \\ a_{\alpha_M} &= f_{\alpha_M}(t_{\mathbf{i}, \mathbf{j}}, V_{\mathbf{i}, \mathbf{j}}, \epsilon_{\mathbf{i}}). \end{aligned} \quad (280)$$

A (280) a „fedési” kondíciókat adja, ugyanis ezen típusú egyenletrendszer megoldása határozza meg pontosan hogy a (277) transzformáció mikor is alkalmazható, milyen (278) operátorokkal, sőt azt is hogy a paramétertér melyik $\mathcal{R}_{\mathcal{H}}$ tartományában. Ezen egyenletrendszer általában egy algebrai egyenletrendszer, mely az a_α komplex ismeretlenekben bilineáris, és általában nem kisszámú egyenletet tartalmazó rendszer (pl. a 3D periodikus Anderson modell termodinamikai határesetben vett példájában, periodikus határfeltételek mellett, 55 nem-lineáris és csatolt egyenletet tartalmaz¹¹). Látható tehát, hogy csupán a fedési egyenletek megoldása is, matematikai szempontból általában izgalmas kihívást eredményez. Aláhúzom, hogy (279) bal oldala sok esetben kölcsönhatási tagokat is tartalmazhat, így (280) jobboldala kölcsönhatási paraméterekkel is bővül²³⁻²⁵ (lásd V.B.1.E. alfejezetet is).

Az $\mathcal{R}_{\mathcal{H}}$ paramétertartomány amelyen az aktuális (277) megvalósul, azáltal határozódik meg, hogy a (280) egyenletrendszernek (általában) csupán bizonyos, tisztán a Hamilton operátor paramétereit érintő kötési feltételek mellett van megoldása, mely $\mathcal{R}_{\mathcal{H}}$ -t egyértelműen megadja. Ezen túlmenőleg, amint majd az alapállapot hullámfüggvény megépítésének leírása során azt látni fogjuk, a (279) típusú felbontás alacsonykoncentrációs (általában félig vett rendszertöltés alatti) tartományban eredményrevezető [lásd a (308) összefüggést követő példa után tett megjegyzéseket].

C) Egy szemléltető példa

Mivel az eljárás a disszertációban nagyon sokszor kerül alkalmazásra, egy példát mutatok be a leírt átalakítások szemléltetésére. Egy négyzetes rácsot fogok elemezni mely Bravais vektorai $\mathbf{a}_x, \mathbf{a}_y$, és az egyszerűség kedvéért feltételezem hogy az $\mathcal{S}$ halmaz a Bravais rács összes csomópontját tartalmazza.

Az $\mathbf{i}$ csomópontban értelmezett $B_{\mathbf{i}}$ blokk egy egyszerű, elementáris plaketten értelmezett blokk, [lásd 10.a) Ábrát], így az (278) összefüggés formája (ahol $\mathbf{r}_1 = 0$)

$$\hat{\Omega}_{\mathbf{i}, \sigma} = a_1 \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_1, \sigma} + a_2 \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_2, \sigma} + a_3 \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_3, \sigma} + a_4 \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_4, \sigma}. \quad (281)$$

A rendszer egyrészcsekés járulékait tartalmazó Hamilton operátor legyen [lásd 10.b) Ábra]

$$\begin{aligned} \hat{H}_0 = \sum_{\mathbf{i}, \sigma} \{ & [t_x \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_2, \sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_1, \sigma} + t_y \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_4, \sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_1, \sigma} + t_1 \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_3, \sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_1, \sigma} \\ & + t_2 \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_4, \sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_2, \sigma} + H.c.] + \epsilon \hat{c}_{\mathbf{i}, \sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{i}, \sigma} \}. \end{aligned} \quad (282)$$

A (281) és (282) összefüggésekben használt csomópont jelölésekre vonatkozólag matematikai szempontból $\mathbf{r}_1 = 0, \mathbf{r}_2 = \mathbf{a}_x, \mathbf{r}_4 = \mathbf{a}_y, \mathbf{r}_3 = \mathbf{a}_x + \mathbf{a}_y$ egyenlőségek állnak fenn.

Most a (279) egyenlőség felírásához az

$$\hat{O} = \sum_{\mathbf{i}} \sum_{\sigma} \hat{\Omega}_{\mathbf{i}, \sigma}^\dagger \hat{\Omega}_{\mathbf{i}, \sigma} \quad (283)$$

kifejezés minden tagját ki kell számítani (mindkét irányban periodikus határfeltételeket veszek figyelembe). Az érthetőség miatt nyomon fogom követni az $\hat{O}$ kifejezéséből azon tagokat, amelyek a 10. Ábra c) pontjában találhatóak, mégpedig

$$\begin{aligned} \hat{O}_1 = \hat{O}_{\mathbf{i}, \sigma} = \hat{\Omega}_{\mathbf{i}, \sigma}^\dagger \hat{\Omega}_{\mathbf{i}, \sigma}, \quad \hat{O}_2 = \hat{O}_{\mathbf{i}+\mathbf{a}_x, \sigma} = \hat{\Omega}_{\mathbf{i}+\mathbf{a}_x, \sigma}^\dagger \hat{\Omega}_{\mathbf{i}+\mathbf{a}_x, \sigma}, \\ \hat{O}_3 = \hat{O}_{\mathbf{i}+\mathbf{a}_x+\mathbf{a}_y, \sigma} = \hat{\Omega}_{\mathbf{i}+\mathbf{a}_x+\mathbf{a}_y, \sigma}^\dagger \hat{\Omega}_{\mathbf{i}+\mathbf{a}_x+\mathbf{a}_y, \sigma}, \quad \hat{O}_4 = \hat{O}_{\mathbf{i}+\mathbf{a}_y, \sigma} = \hat{\Omega}_{\mathbf{i}+\mathbf{a}_y, \sigma}^\dagger \hat{\Omega}_{\mathbf{i}+\mathbf{a}_y, \sigma}. \end{aligned} \quad (284)$$

Megfigyelhető, hogy a $\hat{H}_0$ Hamilton operátor tagban szereplő $t_x \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{a}_x+\mathbf{a}_y+\mathbf{r}_2, \sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{a}_x+\mathbf{a}_y+\mathbf{r}_1, \sigma}$ járulék az $\hat{O}$ operátorban az $\hat{O}_2$ és $\hat{O}_3$ tagokból ered, mégpedig, az $\hat{O}_2$ esetében $a_3^* a_4 \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{a}_x+\mathbf{a}_y+\mathbf{r}_2, \sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{a}_x+\mathbf{a}_y+\mathbf{r}_1, \sigma}$ formában, az $\hat{O}_3$ esetében pedig $a_2^* a_1 \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{a}_x+\mathbf{a}_y+\mathbf{r}_2, \sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{a}_x+\mathbf{a}_y+\mathbf{r}_1, \sigma}$ formában. A (279) jobboldalán ezen két járulék összeadódik, és így az $(\mathbf{i}+\mathbf{a}_y+2\mathbf{a}_x, \mathbf{i}+\mathbf{a}_y+\mathbf{a}_x)$ szakasz mentén

$$t_x = a_3^* a_4 + a_2^* a_1 \quad (285)$$

egyenlőség adódik. Ugyanezt az egyenlőséget kapom ha a 10.c) Ábra t_x hopping amplitúdóját az $\hat{O}_1$ és $\hat{O}_4$ érintkezési vonala mentén $[(\mathbf{i} + \mathbf{a}_x + \mathbf{a}_y, \mathbf{i} + \mathbf{a}_y)]$ szakasz] számolom ki. Továbbmenőleg, szintén (285) összefüggés adódik (a Hermitikus konjugáltból a (285) komplex konjugáltjával együtt) a rendszer bármelyik vízszintes elemi szakaszából, tehát a fedési (280) egyenletek t_x -et adó komponense a (285) egyenlőség.

Hasonló módon a t_y kifejezhető az $\hat{O}_1$ és $\hat{O}_2$ ($t_y \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{a}_x+\mathbf{a}_y, \sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{a}_x, \sigma}$ tag) érintkezési vonala mentén, vagy $\hat{O}_4$ és $\hat{O}_3$ ($t_y \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{a}_x+2\mathbf{a}_y, \sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{a}_x+\mathbf{a}_y, \sigma}$ tag) érintkezési vonala mentén,

$$t_y = a_3^* a_2 + a_4^* a_1. \quad (286)$$

Ugyanez az eredmény adódik bármelyik függőleges elemi szakasz mentén (komplex konjugáltjával együtt), tehát a (280) egyenletek t_y -ra vonatkozó tagja a (286) egyenlet.

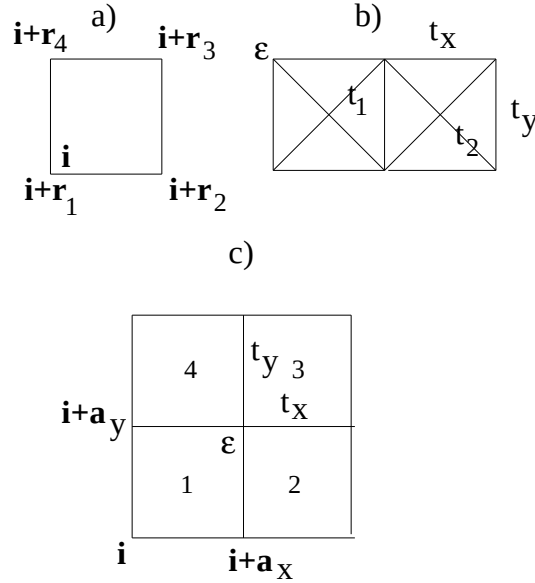
A másodsomszéd hopping tagok mindig csak egy darab $\hat{O}_i$ komponensből adódnak

$$t_1 = a_3^* a_1, \quad t_2 = a_4^* a_2, \quad (287)$$

formában. Bármelyik $\hat{O}_i$ -ből számolva ugyanezt a (287) egyenlőségeket kapom eredményül, tehát a fedési egyenletek t_1 és t_2 tagokat érintő része (ezen egyenlőségek komplex konjugáltjával együtt, amely a (282) $H.c.$ -vel jelzett részében szerepel), a (287) egyenlőség.

Hátra van még az ϵ kifejezése. Amint az a 10. Ábra c) pontjából látszik, a (282)-ben szereplő $\hat{H}_0$ -hoz tartozó $\epsilon \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{a}_x+\mathbf{a}_y,\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{a}_x+\mathbf{a}_y,\sigma}$ típusú járulék minden esetben, összesen 4 darab blokkjárulékból származik. Az itt feltüntetett esetben ez a 4 járulék a (284)-ben felsorolt $\hat{O}_1, \hat{O}_2, \hat{O}_3, \hat{O}_4$ operátorokból származik, hiszen ezen blokk operátoroknak közös pontja az $(\mathbf{i} + \mathbf{a}_x + \mathbf{a}_y)$ csomópont. Ezen négy darab $\hat{O}_\alpha$ tagokból adódó járulék, $\alpha = 1, 2, 3, 4$ növekvő sorrendjében: $|a_3|^2 \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{a}_x+\mathbf{a}_y,\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{a}_x+\mathbf{a}_y,\sigma}$, $|a_4|^2 \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{a}_x+\mathbf{a}_y,\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{a}_x+\mathbf{a}_y,\sigma}$, $|a_1|^2 \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{a}_x+\mathbf{a}_y,\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{a}_x+\mathbf{a}_y,\sigma}$ és $|a_2|^2 \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{a}_x+\mathbf{a}_y,\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{a}_x+\mathbf{a}_y,\sigma}$. Ennek megfelelően, az $(\mathbf{i} + \mathbf{a}_x + \mathbf{a}_y)$ csomópontból eredőleg, az ϵ paramétert megadó összefüggés

$$\epsilon = |a_1|^2 + |a_2|^2 + |a_3|^2 + |a_4|^2. \quad (288)$$



10. Ábra . A (279)-ban adott transzformáció példázata. a) a B_i blokkot példázza (4 csomóponttal, $\mathbf{r}_1 = 0$); b) a Hamilton operátor egyrészece járulékeinak paramétereit mutatja: t_x, t_y az x illetve y irányba mutató elsőszomszéd hopping amplitúdó, t_1, t_2 a jobb illetve a bal irányba mutató másodsomszéd hopping amplitúdó, ϵ a minden csomóponton ható lokális egyrészeceke potenciál; c) Az egymás mellett elhelyezkedő, 1,2,3,4 indexekkel jelölt blokk operátorokat értelmező plakettek.

Bármely csomópont tanulmányozása ugyanezt az eredményt adja, tehát a (280) fedési egyenletek ϵ -t tartalmazó része a (288) összefüggés. Összegezve az elmondottakat, (285-288) alapján, a fedési egyenleteket tartalmazó (280) egyenletrendszer konkrét formája a tanulmányozott esetben

$$\begin{aligned} t_x &= a_3^* a_4 + a_2^* a_1, & t_y &= a_3^* a_2 + a_4^* a_1, \\ t_1 &= a_3^* a_1, & t_2 &= a_4^* a_2, & \epsilon &= |a_1|^2 + |a_2|^2 + |a_3|^2 + |a_4|^2. \end{aligned} \quad (289)$$

Látható, hogy a (289) egyenletrendszer komplex ismeretlenseiben (a_1, a_2, a_3, a_4) csatolt és nemlineáris. A $\hat{H}_0$ paramétereit (ez esetben $t_x, t_y, t_1, t_2, \epsilon$) ismerteknek és (itt) valósaknak tekintem.

A (289) megoldási menete az első négy egyenlőségéből indul, mely $a_3^* = t_1/a_1$, $a_4^* = t_2/a_2$, $t_x = t_1 t_2 / X + X$, $t_y = t_1 Y + 1/Y$ egyenleteket adja, ahol $X = a_2^* a_1$, $Y = a_2/a_1$. Mivel az X, Y változókat másodfokú egyenletek határozzák meg, kifejezhetőek, továbbá $|a_2|^2 = XY$

egyenlőség adódik. Most viszont megfigyelhető hogy a (281) kifejezés a transzformált Hamilton operátorba (283) formában épül be, így $\hat{\Omega}_{i,\sigma}$ egy tetszőleges fázisfaktorról beszorozható az eredmények megváltozása nélkül. Ennek köszönhetőleg, az a_α koefficiensek egyikének fázisa tetszőlegesen megválasztható. Mivel a számolás menete során az a_2 abszolút értéke vált ismerté, a_2 fázisát zéróra rögzítem, tehát a_2 valós és pozitív, azaz $a_2 = +\sqrt{XY}$. Ezen egyenlőség alapján viszont $a_4^* = t_2/a_2$ szintén valósnak adódik és kifejezése ismert lesz. Továbbmenőleg $a_1 = X/a_2$, és $a_3^* = a_2 t_1/X$, tehát a (281)-ben adott $\hat{\Omega}_{i,\sigma}$ kifejezése ezennel levezetett

$$\begin{aligned} a_1 &= \frac{X}{\sqrt{XY}}, & a_2 &= \sqrt{XY}, & a_3 &= \frac{t_1 \sqrt{XY}}{X^*}, & a_4 &= \frac{t_2}{\sqrt{XY}}, \\ t_x &= \frac{t_1 t_2}{X} + X, & t_y &= t_1 Y + \frac{1}{Y}. \end{aligned} \quad (290)$$

A (282) Hamilton operátor ezek szerint (281) blokk operátorok segítségével (amely a_α koefficiensei (290)-ban adóttak) a (283) formára egzaktul átranszformálható, ha a (289) fedési feltételek fennállnak.

Mindezek után lehetőségem van az $\mathcal{R}_\mathcal{H}$ tartomány eredetét is példázni. Az előbbi levezetés során $|a_2|^2 = XY > 0$ kell teljesüljön, ez pedig resztrikciókat jelent a (282)-ben adott Hamiltoni paraméterei részére. Egyrészt az $\mathcal{R}_\mathcal{H}$ eredete ebből ered. Másrészt, a (289) egyenletrendszer megoldása nyomán, ennek utolsó tagja (az ϵ változót tartalmazó egyenlőség), nem volt még felhasználva. Ezért, ebbe, a (290)-ben szereplő a_α numerikus prefaktorok behelyettesítésével egy összefüggést kapunk $\hat{H}_0$ paraméterei között, mely az $\mathcal{R}_\mathcal{H}$ tartomány definíciójának másik forrása. Ez utóbbitól azonban meg lehet szabadulni amennyiben a $\hat{H}_0$ transzformálását

$$\hat{H}_0 = \sum_i \sum_\sigma \hat{\Omega}_{i,\sigma}^\dagger \hat{\Omega}_{i,\sigma} - K \hat{N} \quad (291)$$

formában végzem, ahol $\hat{N} = \sum_i \sum_\sigma \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{i,\sigma}$ az állandónak tekintett részecskeszám operátora, továbbá K egy, a transzformáció által meghatározandó új ismeretlen skalár. Ez esetben a (289) fedési egyenletek utolsó egyenlősége

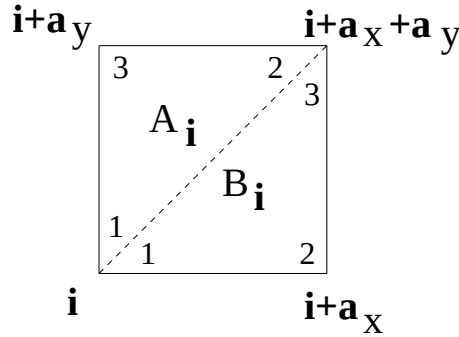
$$\epsilon + K = \sum_{\alpha=1}^4 |a_\alpha|^2 \quad (292)$$

formát ölti, ami ezáltal nem ϵ -ra jelent egy kondíciót, hanem a K értéket határozza meg. Ilyen körülmények között az $\mathcal{R}_\mathcal{H}$ domén, amelyben a (291) transzformáció (átalakítás) igaz, csupán az $XY > 0$ kondíció által lesz meghatározott [(290) második sora alapján ez a hopping amplitudókra jelent megszorítást]. Ezen esetben $\mathcal{R}_\mathcal{H}$ aránylag nagy része a teljes paraméterternek. Egy valódi Hamilton operátor esetében azonban, hol kölcsönhatási tagok is jelen vannak, általában $\mathcal{R}_\mathcal{H}$ sokkal resztriktívabb.

Mostmár a (277)-ben szereplő C skalárról is, (291) alapján, egy egyszerű példát lehet adni. Megfigyelhető ugyanis, hogy (291) esetében $C = -KN$, ahol N a teljes részecskeszám, továbbá (a (292) alapján) $K = \epsilon - \sum_{\alpha=1}^4 |a_\alpha|^2$. Ezen eredményből látható, hogy ténylegesen,

a C skálár implicit, azaz a fedési egyenleteken keresztül függ a transzformált Hamilton operátor paramétereitől (tehát a transzformálás pillanatában explicite nem ismert).

Fontos itt aláhúzni, hogy a (277) átalakítás elvileg nem igényli, hogy a Hamilton operátorban, az eredeti modellben nem szereplő további tagok is bekerüljenek a pozitív szemidefinit forma kialakítása céljából. Például, (291,292) szemlélteti, hogyan lehet a pozitív szemidefinit formára való átalakítást elvégezni, ha a Hamilton operátorban lokális egyrészesecske potenciál (ϵ) nem szerepel (ez esetben $\epsilon = 0$ és (292) a K értékét adja meg). Továbbá, egy csomóponton értelmezett több blokk operátor bevezetésével elérhető hogy másodsomszéd hoppingok ne legyenek jelen a transzformált Hamilton operátorban, stb. Ilyenkor, az induló $\hat{H}$ zéró hopping tagot tartalmazó „bond”-ja mentén (a 11. Ábrán mutatott szaggatott vonal) két különböző blokk operátorból származó járulék kell jelen legyen úgy hogy kiejtse egymást. Szemléltetem mindezt példaként az egyszerű kétdimenziós és négyzetes rácson értelmezett Hubbard modell segítségével, csak elsőszomszéd hoppingok jelenlétében. Ez esetben a Hamilton operátor (282) formájú de úgy, hogy $t_1 = t_2 = 0, \epsilon = 0$. Ilyenkor a 11. Ábra által bemutatott és minden csomóponton értelmezett háromszög formájú $\hat{A}_{\mathbf{i},\sigma}$, $\hat{B}_{\mathbf{i},\sigma}$ blokk operátorok például a pozitív szemidefinit formára való transzformálásra alkalmasak. Ezen operátorok kifejezése



11. Ábra . Példázat a kétdimenziós egyszerű Hubbard modell transzformálására alkalmas $\hat{A}_{\mathbf{i},\sigma}$, $\hat{B}_{\mathbf{i},\sigma}$ háromszög formájú blokk operátorokra. A háromszögeken belüli számok a csomópontok blokkon belüli megszámozását jelentik. A szaggatott vonal egy olyan szakaszt jelöl amely mentén a $\hat{H}$ -ban nincs hopping tag és amely mentén a két értelmezett blokk operátor egymáshoz ér.

$$\hat{A}_{\mathbf{i},\sigma} = a_1 \hat{c}_{\mathbf{i},\sigma} + a_2 \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{a}_x,\sigma} + a_3 \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{a}_y,\sigma}, \quad \hat{B}_{\mathbf{i},\sigma} = b_1 \hat{c}_{\mathbf{i},\sigma} + b_2 \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{a}_x,\sigma} + b_3 \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{a}_x+\mathbf{a}_y,\sigma}, \quad (293)$$

ahol $\mathbf{a}_x, \mathbf{a}_y$ jelöli a Bravais rács primitív vektorait, és továbbra is $\mathcal{S}$ minden ráccsomópontot tartalmaz. Ez esetben a transzformált Hamilton operátor formája

$$\hat{H} = \sum_{\sigma} \sum_{\mathbf{i}} \left[\sum_{\alpha=x,y} t_{\alpha} \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{a}_{\alpha},\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{\mathbf{i},\sigma} + H.c. \right] + \hat{H}_U = \sum_{\sigma} \sum_{\mathbf{i}} [\hat{A}_{\mathbf{i},\sigma}^{\dagger} \hat{A}_{\mathbf{i},\sigma} + \hat{B}_{\mathbf{i},\sigma}^{\dagger} \hat{B}_{\mathbf{i},\sigma}] + \hat{H}_U - K \hat{N}. \quad (294)$$

A transzformáció periodikus határfeltételekkel történt pont úgy ahogy azt az előbbiekben részletesen szemléltettem, és a fedési egyenletek

$$t_x = a_3^* a_1 + b_3^* b_2, \quad t_y = a_2^* a_3 + b_2^* b_1, \quad t_1 = t_2 = a_2^* a_1 + b_2^* b_1 = 0, \quad K = \sum_{\alpha=1}^3 [|a_{\alpha}|^2 + |b_{\alpha}|^2]. \quad (295)$$

Megjegyzem, hogy (295) a $t = t_x = t_y$ esetben is használható, és ezáltal, a kétdimenziós Hubbard model minden variánsának pozitív szemidefinit formára való átalakítását szemléltettem.

Ez a transzformálási mozzanat (275) jellemzésekor elmondottak alapján (elvileg) tetszőleges esetben elvégezhető (lásd az V.B.2.E alfejezet végén tett megjegyzéseket is).

Továbbhaladás előtt néhány további megjegyzést kell tennem a transzformációra használt blokk operátorokról. i) Az adott példában, minden $\mathbf{i} \in \mathcal{S}$ csomóponton értelmezett $\hat{\Omega}_{\mathbf{i},\sigma}$ operátorban ugyanazon a_α koeficiensek, és minden tagban ugyanazon spinindexek szerepeltek. Ez a kikötés sem szükségszerű, lehetséges lokális függést mutató a_α paraméterek bevezetése is, vagy lehetséges olyan $\hat{\Omega}_{\mathbf{i}}$ blokk operátorok használata, melyekben egyszerre minden spinvetület jelen van. ii) A blokk operátoroknak a Fermi operátorok függvényében vett linearitása sem szükségszerű (lásd pl. Ref.[³²³]). Hogy milyen blokk operátorokat használunk azt az szabja meg, hogy milyen Hamilton operátor tagot (vagy tagokat) és milyen paramétertér részen akarunk pozitív szemidefinit formára hozni.

D) A b) eset jellemzése

Ez esetben a (277) transzformáció végrehajtásánál a $\hat{P}_n$ operátorok formája $\hat{P}_n = \hat{\Omega}_n \hat{\Omega}_n^\dagger$. Amint majd az alapállapot hullámvektorokkal foglalkozó fejezetben kiderül, ezen pozitív szemidefinit operátor forma használata a magas részecskekoncentrációs esetekben eredményrevezető (lásd a (314) utáni megjegyzést).

Megjegyzem még, hogy $\hat{H}$ -nak $\sum_{\mathbf{i},\sigma} \hat{\Omega}_{\mathbf{i},\sigma} \hat{\Omega}_{\mathbf{i},\sigma}^\dagger$ formára való átalakításakor, a fedési egyenletek (azaz az $\hat{\Omega}_{\mathbf{i},\sigma}$ paramétereinek $\hat{H}$ paramétereivel való összevetése, [lásd (280), vagy a szemléltető példában megadott (289)], a

$$\sum_{\mathbf{i},\sigma} \hat{\Omega}_{\mathbf{i},\sigma} \hat{\Omega}_{\mathbf{i},\sigma}^\dagger = - \sum_{\mathbf{i},\sigma} \hat{\Omega}_{\mathbf{i},\sigma}^\dagger \hat{\Omega}_{\mathbf{i},\sigma} + \sum_{\mathbf{i},\sigma} b_{\mathbf{i},\sigma} \quad (296)$$

formában történik, ahol a $b_{\mathbf{i},\sigma}$ skalárok a $b_{\mathbf{i},\sigma} = \{\hat{\Omega}_{\mathbf{i},\sigma}, \hat{\Omega}_{\mathbf{i},\sigma}^\dagger\}$ antikommutációs reláció segítségével értelmezettek. A (296) következtében, a (280) fedési egyenletekben a Hamilton operátor paraméterek általában ellentétes előjellel épülnek be, továbbá a $b = \sum_{\mathbf{i},\sigma} b_{\mathbf{i},\sigma}$ skalár a (277)-ben szereplő C paraméter része lesz. Az $\hat{\Omega}_{\mathbf{i},\sigma}$ operátor, a kifejezését illetőleg továbbra is blokk operátor marad [lásd (278), vagy a példázatban adott (281) egyenlőséget]. A fedési egyenletek levezetése, ezen túlmenőleg, ugyanolyan formában történik, mint ahogy azt a (281-292) egyenletek levezetésekor példáztam az a) eset bemutatásakor.

E) Kölcsönhatási tagok transzformálása

Pozitív szemidefinit operátor nemcsak $\hat{\Omega}^\dagger \hat{\Omega}$ vagy $\hat{\Omega} \hat{\Omega}^\dagger$, hanem más formájú is lehet. A Hubbard kölcsönhatási tag transzformálásánál használt operátor példázza ezt a legjobban.

A Hubbard kölcsönhatási tag

$$\hat{H}_U = U \sum_{\mathbf{i}} \hat{n}_{\mathbf{i},\uparrow} \hat{n}_{\mathbf{i},\downarrow} \quad (297)$$

a leggyakrabban előforduló tasszító jellegű lokális Coulomb kölcsönhatás esetében ($U > 0$) egy pozitív szemidefinit operátor, hiszen a részecskeszám $\hat{n}_{\mathbf{i}\sigma} = \hat{c}_{\mathbf{i},\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{i},\sigma}$ operátorának nincs negatív sajátértéke. A Hubbard kölcsönhatás (297) formája azonban zéró dupla betöltés esetében szolgáltatja a legkisebb energiájú állapotát, ami viszont a kis koncentrációs

határesetek kivételével ritkán fordul elő. Ezért H_U -ra (ha nem kiskonzentrációs paraméter tartományon dolgozom), egy más pozitív szemidefinit formát használok, amely

$$\hat{H}_U = U \sum_{\mathbf{i}} \hat{n}_{\mathbf{i},\uparrow} \hat{n}_{\mathbf{i},\downarrow} = U \sum_{\mathbf{i}} \hat{P}_{\mathbf{i}} + U \hat{N} - U N_{\Lambda} \quad (298)$$

alakban kerül alkalmazásra. Ezen kifejezésben N_{Λ} a ráccsomópontok számát jelöli, továbbá

$$\hat{P}_{\mathbf{i}} = \hat{n}_{\mathbf{i},\uparrow} \hat{n}_{\mathbf{i},\downarrow} - (\hat{n}_{\mathbf{i},\uparrow} + \hat{n}_{\mathbf{i},\downarrow}) + 1. \quad (299)$$

A (299)-ben szereplő $\hat{P}_{\mathbf{i}}$ operátor pozitív szemidefinit, legkisebb sajátértéke zéró, ezt pedig akkor veszi fel, ha az $\mathbf{i}$ csomóponton legalább egy elektron található. A (299) használatakor a $\hat{H}_U$ helyébe a transzformált Hamilton operátor kifejezésébe a $\hat{P} = \sum_{\mathbf{i}} \hat{P}_{\mathbf{i}}$ pozitív szemidefinit operátor kerül, míg (298) utolsó két járuléka (állandó részecskeszámot feltételezve), a (277)-ben szereplő C skalár tartozékává alakul.

A pozitív szemidefinit operátorok alkalmazása során a Hubbard operátor (298) formában való használata sokkal előnyösebb a (297) formánál. Mindez azért, mert (298) esetében a dupla betöltések száma egy tetszőleges és nem rögzített szám.

Aláhúzom azt is, hogy nem szükségeszerű a kölcsönható és nemkölcsönható tagok külön-külön vett felbontása, és sok esetben együttes felbontás is lehetséges. Továbbmenőleg, mivel minden valóságos fizikai rendszer spektruma alólról korlátos $-\infty < E_{min}$, következik hogy $\hat{H}' = \hat{H} - E_{min}$ minden $\hat{H}$ esetében pozitív szemidefinit, tehát dimenziótól és integrálhatóságtól függetlenül a pozitív szemidefinit formára való átalakításnak elvi akadályai nincsenek.

F) További megjegyzések

A Hamilton operátor pozitív szemidefinit formára való felbontásáról azt is megjegyzem, hogy ez a művelet, adott $\hat{H}$ esetében nem egyértelmű (azaz több különböző féle képpen is végrehajtható). Minden Hamilton operátort általában nagyon sokféle képpen lehet pozitív szemidefinit operátorokra bontani és minden különböző felbontás a paramétertér különböző $\mathcal{R}_{\mathcal{H}}$ tartományán valósul majd meg. Ezáltal jut kifejezésre az a tény, hogy nemintegrálható rendszerek esetében az alapállapot nem fejezhető ki teljesen általánosan, egyetlen matematikai keret felhasználásával (megjegyzem, hogy integrálható rendszerek esetében a teljes spektrum megadható így). Az alapállapotok kifejezése a paramétertér különböző szeletein lehetséges csak külön-külön egyértelműen. Így a fázisdiagram feltérképezése egy modell esetében csak úgy lehetséges, hogy több különböző pozitív szemidefinit formára bontjuk fel ugyanazt a Hamilton operátort, majd mindegyik felbontás esetében külön-külön megkeressük az alapállapotot (ezek mind különböző fázisdiagram tér tartományokon jelennek majd meg), végül a paramétertér különböző metszetein levezetett eredményeket egymás mellé illesztve alkothatunk képet a lehetséges (alapállapotban) megjelenő fázisokról.

3. Az alapállapotok megkonstruálása

A) Bevezetés

Amiután a tanulmányozott Hamilton-operátor (277)-ben adott pozitív szemidefinit formára való transzformálása megvan, a módszer következő lépése kerül alkalmazásra, mégpedig az alapállapot megkonstruálása. Keressük tehát azon $|\Psi_g(N)\rangle$ rögzített N részecskeszám esetére vett Hilbert tér vektort, amely (275,276)-nak megfelelően

$$\hat{H}'|\Psi_g(N)\rangle = (\hat{H} - C)|\Psi_g(N)\rangle = \left(\sum_{n=1}^m \hat{P}_n\right)|\Psi_g(N)\rangle = 0 \quad (300)$$

összefüggésnek eleget tesz, tehát minden rögzített $n = 1, 2, \dots, m$ -re külön-külön

$$\hat{P}_n|\Psi_g\rangle = 0 \quad (301)$$

teljesül. Ahhoz hogy a (301)-nek eleget tevő hullámvektort levezzessük, általában minden tanulmányozott $\hat{H}$ esetet külön-külön és individuálisan vizsgálni kell. Mindennek ellenére, a tapasztalatom alapján a $|\Psi_g(N)\rangle$ konstrukciója nagymértékben függ a $\hat{H}$ pozitív szemidefinit felbontásában szereplő $\hat{P}_n$ operátoroktól, így az alábbiakban lehetőségem adódik bemutatni a disszertációban leggyakrabban előforduló esetek jellemzését.

B) Ha $\hat{P}_n = \hat{\Omega}_n^\dagger \hat{\Omega}_n$ típusú operátorok vannak jelen $\hat{H}$ -ban

Feltételezem a továbbiakban, hogy $\hat{H}$ a (277) formában adott, továbbá $n = 1, 2, \dots, n_1 < m$ -re a $\hat{P}_n$ kifejezése $\hat{P}_n = \hat{\Omega}_n^\dagger \hat{\Omega}_n$ típusú, illetve $\hat{\Omega}_n \equiv \hat{\Omega}_{\mathbf{i},\sigma}$, $\mathbf{i} \in \mathcal{S}$, továbbá $\hat{\Omega}_{\mathbf{i},\sigma}$ a (278) egyenlőséggel adott és az utóbbiban szereplő $\hat{c}_{\mathbf{j},\sigma}$ operátorok kanonikus Fermi operátorok, azaz $\{\hat{c}_{\mathbf{j},\sigma}^\dagger, \hat{c}_{\mathbf{j}',\sigma'}\} = \delta_{\mathbf{j},\mathbf{j}'}\delta_{\sigma,\sigma'}, \{\hat{c}_{\mathbf{j},\sigma}, \hat{c}_{\mathbf{j}',\sigma'}\} = 0, \{\hat{c}_{\mathbf{j},\sigma}^\dagger, \hat{c}_{\mathbf{j}',\sigma'}^\dagger\} = 0$ teljesülnek.

Ilyen körülmények között az alapállapot konstrukciója azon $\hat{X}_{n'}^\dagger$ lineárisan független operátorok megkeresésével kezdődik, amelyek kielégítik az

$$\{\hat{\Omega}_n, \hat{X}_{n'}^\dagger\} = 0 \quad (302)$$

egyenlőséget minden $n \leq n_1$, illetve n' indexre. Amennyiben az így definiált $\hat{X}_{n'}^\dagger$ operátorokat levezetjük, a keresett alapállapot megkonstruálása a

$$|\Psi_0\rangle = \prod_{n'}^{n'_M} \hat{X}_{n'}^\dagger |0\rangle \quad (303)$$

Hilbert tér vektor megszerkesztésével kezdődik, ahol $|0\rangle$ a Fock vákuum (minden egyrészecske állapot betöltési száma zéró), továbbá n'_M a létező lineárisan független $\hat{X}_{n'}^\dagger$ operátorok maximális száma.

Ténylegesen, ez esetben

$$\begin{aligned} \left[\sum_{n=1}^{n_1} \hat{P}_n\right]|\Psi_0\rangle &= \left[\sum_{n=1}^{n_1} \hat{P}_n\right]\left[\prod_{n'} \hat{X}_{n'}^\dagger\right]|0\rangle = \left[\sum_{n=1}^{n_1} \hat{\Omega}_n^\dagger \hat{\Omega}_n\right]\left[\prod_{n'} \hat{X}_{n'}^\dagger\right]|0\rangle \\ &= (-1)^\phi \left[\sum_{n=1}^{n_1} \hat{\Omega}_n^\dagger\right]\left[\prod_{n'} \hat{X}_{n'}^\dagger\right]\hat{\Omega}_n|0\rangle = 0, \end{aligned} \quad (304)$$

ahol az első két egyenlőség (303) illetve $\hat{P}_n$ formájának behelyettesítéséből, a harmadik egyenlőség (302)-ből, végül az utolsó egyenlőség az $\hat{\Omega}_n$ (278) alapján vett annihilálási mi-voltjából következik. A lényegi része e mozzanatnak a harmadik egyenlőségnél alkalmazott (302) reláció: mivel tetszőleges $\hat{\Omega}_n$ minden $\hat{X}_{n'}^\dagger$ operátorral antikommutál, az $\hat{\Omega}_n$

operátorok betölthetők a vákuumállapot-ele (ezen betolás következményeképpen jelenik meg a $(-1)^\phi$ fázisfaktor, amelyben ϕ értéke attól függ hogy hány $\hat{X}_{n'}^\dagger$ operátorral kellett antikommutáltatni az $\hat{\Omega}_n$ operátort a betolás során). Mindezek után, $\hat{\Omega}_n|0\rangle = 0$ közvetlen következménye $\hat{\Omega}_n$ operátor annihiláló jellegének [lásd (278) egyenlőséget].

Mindezek után, ahhoz hogy $|\Psi_0\rangle$ -ból a $|\Psi_g\rangle$ (az alapállapot) előállítható legyen, figyelembe kell venni a megmaradt $\hat{P}_n$ tagokat az $n_1 < n \leq m$ indexekre. Általában ezek az $n_1 < n \leq m$ indexes tagok azok a pozitív szemidefinit operátorok, amelyek a $\hat{H}$ még megmaradt kölcsönhatási járulékaiból épülnek fel. Ehhez viszont az kell, hogy oly módon változzon meg $|\Psi_0\rangle$ kifejezése $|\Psi_g\rangle$ -ra, hogy az eddig fennálló $\hat{P}_n|\Psi_g\rangle = 0, n \leq n_1$ tulajdonság mellett, most még a $\hat{P}_n|\Psi_g\rangle = 0, n > n_1$ egyenlőségek is teljesüljenek.

Ezen követelményt legtöbbször teljesíteni lehet úgy, hogy a rendelkezésre álló $\{\hat{X}_{n'}^\dagger\}$, $n' = 1, 2, \dots, n'_M$ halmazból kiválasztjuk azon $n'_{\alpha_1}, n'_{\alpha_2}, \dots, n'_{\alpha_M}$ indexekkel rendelkező elemeket, melyek együttesét

$$I_M = (n'_{\alpha_1}, n'_{\alpha_2}, \dots, n'_{\alpha_M}) \quad (305)$$

halmazzal jelölöm és amelyek rendelkeznek még azzal a tulajdonsággal is hogy

$$\hat{P}_n[\prod_{n' \in I_M} \hat{X}_{n'}^\dagger]|0\rangle = 0, \quad n_1 < n \leq m. \quad (306)$$

Ennek megfelelően, az alapállapot hullámfüggvény

$$|\Psi_g(N)\rangle = \prod_{n' \in I_M} \hat{X}_{n'}^\dagger|0\rangle. \quad (307)$$

Ténylegesen, $|\Psi_g\rangle$ alapállapot, hiszen

$$\hat{H}'|\Psi_g(N)\rangle = (\hat{H} - C)|\Psi_g(N)\rangle = [\sum_{n=1}^m \hat{P}_n][\prod_{n' \in I_M} \hat{X}_{n'}^\dagger]|0\rangle = 0, \quad (308)$$

ahol az utolsó egyenlőség (304) és (306) miatt teljesül. Az N részecskeszámot amelyre a (307) alapállapot, az I_M halmazban szereplő elemek száma határozza meg. Legtöbbször $\hat{X}_{n'}^\dagger$ operátor az $\hat{\Omega}_n$ operátorhoz hasonlóan, az induló Hamilton operátorban lévő kanonikus Fermi operátorok lineárkombinációja (de megjegyzem, hogy ez nem szükségszerű hogy így legyen). Ha $\hat{X}_{n'}^\dagger$ az említett lineárkombináció, minden $\hat{X}_{n'}^\dagger$ operátor egy fermiont helyez a rendszerbe. Ilyen körülmények között $|\Psi_g(N)\rangle$ -ben szereplő N részecskeszám az I_M halmazban lévő elemek számával egyezik. Általános esetben, ha minden $\hat{X}_{n'}^\dagger$ operátor külön-külön z fermiont helyez a rendszerbe, akkor a (307)-ben szereplő N részecskeszám számszerűleg z -szer az I_M halmazban szereplő elemek számával lesz egyenlő. Hangsúlyozom, hogy $|\Psi_g(N)\rangle$ csak $\mathcal{R}_H$ -ban alapállapot.

Egy szemléltető példa: A következőkben egy példát adok az I_M halmaz kialakulására vonatkozólag. Legyen az $n \leq n_1$ indexekre (302) alapján meghatározott $\hat{X}_{n'}^\dagger$ operátorok halmaza $\{\hat{X}_{\mathbf{i},\sigma}^\dagger\}$ halmaz, ahol tehát az n' indexet a $(\mathbf{i}, \sigma)$ indexpár képezi, továbbá $\mathbf{i} \in \mathcal{F}$, ahol $\mathcal{F}$ egy adott csomópont halmaz. Megjegyzem továbbá, hogy mindannak ellenére hogy $\hat{X}_{\mathbf{i},\sigma}^\dagger$

egy $\mathbf{i}$ csomóponttal jelölt objektum, általában ezen operátor egy blokkon értelmezett (lásd például $\hat{\Omega}_{\mathbf{i},\sigma}$ esetét a (278) kifejezésben). Továbbá a különböző csomópontokon értelmezett $\hat{X}_{\mathbf{i},\sigma}^\dagger$ operátorok a blokkok kiterjedése miatt összeérnek, azaz van közös pontjuk. Ezen túlmenően, a σ spin index tetszőleges.

Mindezek után hadd tételezzem fel az egyszerűség kedvéért, hogy $\hat{P}_n$, $n > n_1$ operátorból csak egy darab van, és az pontosan a $\hat{H}_U$ Hubbard tag, $U > 0$ tasszító jellegű lokális Coulomb kölcsönhatással (lásd (297) kifejezést). Mivel ilyenkor $\hat{H}_U$ egy pozitív szemidefinit operátor melynek legkisebb sajátértéke, a zéró, a duplán betöltött csomópontok teljes hiányában lép fel, következik, hogy az I_M halmaz elemei úgy alakulnak ki az $\{n' \equiv (\mathbf{i}, \sigma)\}$ halmaz elemeiből, hogy a σ spinindex rögzül minden $\hat{X}_{\mathbf{i},\sigma}^\dagger$ operátoron. Ennek megfelelően, I_M az $I_M = \{(\mathbf{i}, \uparrow)\}$ halmaz lesz. Ténylegesen, ez esetben, a (307) jobboldalán szereplő szorzatban nem kerülhet egy csomópontra két különböző spinvetülettel rendelkező elektron, (ne feledjük: $\hat{c}_{\mathbf{i},\uparrow}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{i},\uparrow}^\dagger = 0$), az alapállapot hullámfüggvényben duplán betöltött csomópont nem fog szerepelni, így $\hat{P}_n |\Psi_g(N)\rangle = 0$, $n \leq n_1$ mellett $\hat{H}_U |\Psi_g(N)\rangle = 0$ szintén teljesülni fog.

Még egy megjegyzésem van az N -re vonatkozóan. A leggyakrabban előforduló esetekben, ha $\hat{X}_{n'}^\dagger$ az induló $\hat{H}$ -ban szereplő kanonikus Fermi operátorokból alkotott lineárkombináció, akkor ezen operátorok száma [azaz az n'_M érték (303)-ben] N_Λ körüli (vagy nagyságrendi) szám [lásd a (298) utáni megjegyzést]. Az I_M halmaz létrejöttkor az alapállapotban felhasználható $\hat{X}^\dagger$ operátorok száma tovább csökken. Ez az oka annak, hogy a $\hat{P}_n = \hat{\Omega}_n^\dagger \hat{\Omega}_n$ típusú pozitív szemidefinit operátorok esetében előálló alapállapot hullámfüggvények (a legtöbb esetben), félig töltött, vagy félig töltött sáv alatti részecskeszám koncentrációra lépnek fel. Azaz, az ilyen típusú operátorok használata a Hamilton operátor pozitív szemidefinit felbontásában legtöbbször nem lesz eredményrevezető nagy koncentrációs fázisdiagram tartományban.

C) Ha $\hat{P}_n = \hat{\Omega}_n \hat{\Omega}_n^\dagger$ típusú operátorok vannak jelen $\hat{H}$ -ban

Feltételezem a továbbiakban, hogy $\hat{H}$ a (277) formában adott, továbbá $n = 1, 2, \dots, n_1 < m$ -re a $\hat{P}_n$ formája $\hat{P}_n = \hat{\Omega}_n \hat{\Omega}_n^\dagger$ típusú, illetve $\hat{\Omega}_n \equiv \hat{\Omega}_{\mathbf{i},\sigma}$, $\mathbf{i} \in \mathcal{S}$, ahol $\hat{\Omega}_{\mathbf{i},\sigma}$ a (278) kifejezéssel adott és az utóbbiban szereplő $\hat{c}_{\mathbf{j},\sigma}$ operátorok kanonikus Fermi operátorok.

Ez esetben az alapállapot hullámfüggvény megkonstruálása más stratégia alapján történik. A kiindulópont ekkor az

$$\hat{\Omega}_n^\dagger \hat{\Omega}_n^\dagger = 0 \quad (309)$$

egyenlőség, mely az $\hat{\Omega}_n$ -ben található kanonikus Fermi operátor lineárkombinációja esetében mindig fennáll. Ilyen szituációban az alapállapot kifejezésének első mozzanata a

$$|\Psi_{00}\rangle = \prod_{n=1}^{M_\Omega} \hat{\Omega}_n^\dagger |0\rangle \quad (310)$$

vektor megépítése, amelyben a produktum az összes M_Ω lineárisan különböző $\hat{\Omega}_n^\dagger$ operátort tartalmazza. Megfigyelhető ugyanis, hogy (309) miatt

$$[\sum_{n=1}^{n_1} \hat{P}_n] |\Psi_{00}\rangle = 0 \quad (311)$$

automatikusan teljesül, tehát a továbbiakban csak arra kell koncentrálni, hogy a (311)-ben szereplő tulajdonságot a $\hat{P}_n$, $n > n_1$ operátorokra is ki tudjuk terjeszteni.

A (277)-ban szereplő $\hat{P}_n$, $n > n_1$ operátorok általában a megmaradt kölcsönhatási tagok járulékait tartalmazzák, és pl. a Hubbard típusú modellek esetében a $\hat{H}_U$ Hubbard kölcsönhatás is ezen járulékok közé tartozik. A problémát ezen a szinten az okozza, hogy a (310) Hilbert tér vektor nagy N érték mellett definiált. Ténylegesen, $n \equiv (\mathbf{i}, \sigma)$ megfeleltetés esetében az $\hat{\Omega}_n$ operátorok száma (M_Ω), az $\mathcal{S}$ -be tartozó ráccsomópontok számának kétszerese, azaz nagyságrendileg legtöbbször majdnem $2N_\Lambda$ érték körül mozog. Így már eleve $|\Psi_{00}\rangle$ általában félig töltött sáv feletti koncentráció tartományba tartozik. Ilyen körülmények között leggyakrabban, a $|\Psi_{00}\rangle$ -ról $|\Psi_g\rangle$ -re vett kiterjesztés, mely megköveteli hogy (311) mellett a

$$[\sum_{n=n_1+1}^m \hat{P}_n]|\Psi_g\rangle = 0 \quad (312)$$

egyenlőség is teljesüljön, úgy érhető el, hogy megkeressük azon $\hat{F}^\dagger$ operátort amelyre a

$$|\Psi_g(N)\rangle = [\prod_{n=1}^{M_\Omega} \hat{\Omega}_n^\dagger] \hat{F}^\dagger |0\rangle \quad (313)$$

definíció mellett (312) is teljesül. Megjegyzem, hogy $\hat{F}^\dagger$ keltő operátorokat tartalmaz, így a (313) konstrukció a (311) tulajdonságot továbbra is megtartja. Ténylegesen, (311) és (312)-nek köszönhetőleg

$$\hat{H}'|\Psi_g(N)\rangle = (\hat{H} - C)|\Psi_g(N)\rangle = [\sum_{n=1}^m \hat{P}_n][\prod_{n=1}^{M_\Omega} \hat{\Omega}_n^\dagger] \hat{F}^\dagger |0\rangle = 0, \quad (314)$$

azaz tényleg $|\Psi_g(N)\rangle$ az alapállapot. Az N részecskeszámot amely mellett az alapállapot jelleg teljesül most is úgy határozom meg, hogy összeszámolom (313) jobboldalán szereplő keltő operátorok által a vákuumállapotba bejuttatott fermionok számát.

Amint azt már (312) felett megjegyeztem, $|\Psi_{00}\rangle$ és ezáltal a belőle megépített $|\Psi_g(N)\rangle$ is nagy (félig töltött sáv feletti) részecskeszám koncentráció mellett értelmezett. Vegyük itt azt is figyelembe, hogy mivel $\hat{F}^\dagger$ plusz részecskéket juttat be az alapállapotba, a $|\Psi_g(N)\rangle$ -hez tartozó részecskeszám nagyobb a $|\Psi_{00}\rangle$ -hoz tartozó részecskeszámnál. Újból hangsúlyozni kell, hogy a levezetett alapállapot csak az $\mathcal{R}_\mathcal{H}$ tartományon érvényes.

Egy szemléltető példa: Bemutatok ez esetben is egy példát az $\hat{F}^\dagger$ operátor kialakítására. Feltételezem ez esetben is, hogy $\hat{P}_n$, $n > n_1$ újból csak egy van, és ez pontosan az $U > 0$ esetben vett Hubbard operátor (297). Mivel nagykoncentrációs tartományon vagyunk, az alapállapotban nem lehet elkerülni a dupla betöltések jelenlétét, így a Hubbard tagot a (298) formában használom. Ekkor viszont, $n_1 + 1 = m$ teljesülése mellett

$$\hat{P}_m = \hat{P} = \sum_{\mathbf{i}} \hat{P}_{\mathbf{i}} \quad (315)$$

ahol $\hat{P}_{\mathbf{i}}$ a (299)-ben adott pozitív szemidefinit operátor, amely a zéró értékű legkisebb sajátértékét akkor veszi fel ha legalább egy elektron van minden csomóponton.

Ilyen körülmények között a (313)-ban szereplő $\hat{F}^\dagger$ operátor megkeresése azon elven alap-
szik, hogy a vákumállapotra ható $[\prod_{n=1}^{M_\Omega} \hat{\Omega}_n^\dagger] \hat{F}^\dagger$ szorzat minden csomópont-
ra legalább egy elektront helyezzen el. Ez, az $\hat{\Omega}_n^\dagger$ operátorok ismerete, továbbá megfelelően megválasztott
részcscszám N mellett általában elérhető egy

$$\hat{F}^\dagger = \prod_{i \in D_M} \hat{c}_{i, \sigma_i}^\dagger \quad (316)$$

produktum formájában, ahol a D_M tartomány egy (a problémától függő) rögzített
ráccsomópont halmaz, mely elemeinek a száma N_{D_M} . Ekkor, figyelembe véve hogy a (313)-
ban minden egyes $\hat{\Omega}_n^\dagger$ egy elektront helyez be a rendszerbe külön-külön, a (313)-ban szereplő
 $|\Psi_g(N)\rangle$ alapállapothoz tartozó részcscszám

$$N = N_{D_M} + M_\Omega. \quad (317)$$

D) Az alacsonyenergiájú gerjesztett állapotok

Az eddig leírtak alapján bemutattam hogy alapállapoti hullámfüggvényeket hogyan lehet
levezetni a formalizmus keretei között. Alá szeretném azonban húzni, hogy ez $|\Psi_g(N)\rangle$ leve-
zetését jelenti rögzített $\mathcal{R}_\mathcal{H}$ tartományon. Ennek azért van jelentősége mert ha ugyana-
zon $\mathcal{R}_\mathcal{H}$ doménen nemcsak $|\Psi_g(N)\rangle$, hanem $|\Psi_g(N+1)\rangle$ levezetése is lehetséges, akkor
ez, legalábbis töltés gerjesztés esetében, az eredeti $|\Psi_g(N)\rangle$ alapállapot első gerjesztett
állapotának tekinthető. Így adódik meg annak a lehetősége, hogy a spektrum legalsó
részében elhelyezkedő gerjesztett állapotok is hozzáférhetővé váljanak a formalizmus keretei
között. Ennek következtében lehet megállapítani, hogy a levezetett állapot vezető vagy
szigetelő e. Ennek érdekében, ha $|\Psi_g(N')\rangle$ hullámvektorhoz $E_g(N')$ energia tartozik, akkor
ki kell számolni a

$$\mu_- = E_g(N) - E_g(N-1), \quad \mu_+ = E_g(N+1) - E_g(N), \quad \delta\mu = \mu_+ - \mu_- \quad (318)$$

részcscszám függő kémiai potenciál értékeket és azok különbségét, $\delta\mu = 0$ vezető jelenlétét,
míg $\delta\mu \neq 0$ szigetelő jelenlétét tükrözve^{118,257}.

4. Az unicitás igazolásának lehetősége

Integrálható rendszerekre pontosan levezetett állapotok esetében is megtörténik, hogy
a rendszer adta lehetőségek teljességét, bizonyos esetekben, nem aknázzák teljes egészében
ki (azaz, az unicitás kikötése a megoldásra nem teljesül). Így például, a Bethe-Ansatz-
al megoldható integrálható rendszerek esetében is megjelenhetnek és ismertek nem-Bethe-
Ansatz formájú megoldások²⁵⁸.

A pozitív szemidefinit operátorok tulajdonságaihoz kapcsolódó pontos alapállapotok
levezetése esetében az unicitás problémájának igazolása rigurózus körülmények között
lehetséges. Az unicitás tanulmányozása matematikai pontossággal itt azt jelenti, hogy
megnézzük teljes e a levezetett $|\Psi_g(N)\rangle$ megoldás. Az alapállapoti megoldás $|\Psi_g(N)\rangle$ akkor
teljes, ha $\mathcal{R}_\mathcal{H}$ -ban nem létezik egy $|\Psi_g(N)\rangle$ -tól lineárisan független $|\Psi'_g(N)\rangle$, ami szintén
teljesíti (úgy mint $|\Psi_g(N)\rangle$) a $\hat{H}'|\Psi'_g(N)\rangle = (\hat{H} - C)|\Psi'_g(N)\rangle = 0$ tulajdonságot.

Az unicitás igazolása a kernel-(mag) fogalmára alapszik, és az igazolás maga a (277) felbontásban szereplő $\hat{P} = \sum_{n=1}^m \hat{P}_n$ operátor kerneljére koncentrál. Egy $\hat{O}$ operátor magja, $\ker(\hat{O})$, egy Hilbert altér, melyhez tartozó $|\phi\rangle \in \ker(\hat{O})$ tetszőleges vektor kielégíti a $\hat{O}|\phi\rangle = 0$ összefüggést. A $|\Psi_g(N)\rangle$ megoldás akkor teljes, ha kifeszíti a $\ker(\hat{P})$ alteret. Ennek igazolása céljából két lépést kell bizonyítani, éspedig: i) $|\Psi_g(N)\rangle$ benne van $\ker(\hat{P})$ -ben, azaz $|\Psi_g(N)\rangle \in \ker(\hat{P})$, és ii) $\ker(\hat{P})$ tetszőleges (az N részecskeszám rögzített értéke mellett és $\mathcal{R}_H$ paramétertartományban értelmezett) vektora, $|\Psi_g(N)\rangle$ függvényében kifejezhető.

Megjegyzem, hogy az ilyen formában értelmezett unicitás fogalom akkor is alkalmazható, ha $|\Psi_g(N)\rangle$ degenerált. Ekkor

$$|\Psi_g(N)\rangle = \sum_{\gamma}^{\gamma_M} a_{\gamma} |\Psi_{g,\gamma}(N)\rangle \quad (319)$$

áll fenn, ahol γ_M a degeneráció foka, a_{γ} numerikus prefaktorok és különböző γ értékekre vett $|\Psi_{g,\gamma}(N)\rangle$ vektorok lineárisan függetlenek. Ekkor az unicitás igazolásának jelentése a következő értelemmel bír: i) $|\Psi_{g,\gamma}(N)\rangle \in \ker(\hat{P})$ minden γ esetében, és ii) $\ker(\hat{P})$ tetszőleges (az N részecskeszám rögzített értéke mellett és $\mathcal{R}_H$ paramétertartományban értelmezett) vektora, a $|\Psi_{g,\gamma}(N)\rangle$ tagok lineáris kombinációja formájában kifejezhető.

Ezen probléma tárgyalásának pillanatában az i) pont már igazolva van, hiszen $|\Psi_g(N)\rangle$ levezetési módja a (275,276) összefüggésekre alapszik, azaz $\hat{H}' = \hat{P}$ egyenlőség miatt a $|\Psi_g(N)\rangle \in \ker(\hat{P})$ automatikusan teljesül. Így az unicitás igazolása esetében a továbbiakban csak az ii) pont igazolása szükséges. Ebből a célból figyelembe veszem, hogy $\hat{P} = \sum_{n=1}^m \hat{P}_n$, ahol minden n -re $\hat{P}_n$ pozitív szemidefinit operátor. A matematikai tárgyalás könnyítése érdekében feltételezem, hogy a $\hat{P}$ -nek $\hat{P}_n$ tagokra való felbontása úgy történt, hogy egy tetszőleges $\hat{P}_n$, a többi $\hat{P}_{n'}$, $n' \neq n$ függvényében nem kifejezhető, ezáltal (273) következtében

$$\ker(\hat{P}) = \ker(\hat{P}_1) \cap \ker(\hat{P}_2) \cap \dots \cap \ker(\hat{P}_m) \quad (320)$$

összefüggés teljesül. A (320) alapján tehát $\ker(\hat{P})$, a $\ker(\hat{P}_n)$ alterek metszetéből áll elő.

A $\ker(\hat{P}_n)$ levezetésében tetszőleges n -re a $\hat{P}_n$ formája számít. Így, külön-külön minden egyes előforduló esetben az elemzést a probléma specifikumának megfelelően kell elvégezni. Példázat véget azonban, az előző fejezetben tárgyalt $\hat{P}_n = \hat{\Omega}_n \hat{\Omega}_n^{\dagger}$ és $\hat{P}_n = \hat{\Omega}_n^{\dagger} \hat{\Omega}_n$, $n \leq n_1$ esetekre vonatkozóan, melyek a (313), illetve a (307) alapállapotokhoz kapcsolódnak, és amelyek típusa a disszertációban a legtöbbször előfordul, a gondolatmenetet bemutatom.

A) A $\hat{P}_n = \hat{\Omega}_n \hat{\Omega}_n^{\dagger}$ esete

Ez esetben a Hamilton operátorunk (277) formájú, $\hat{P}_n = \hat{\Omega}_n \hat{\Omega}_n^{\dagger}$ áll fenn $n \leq n_1$ -re, és az alapállapot hullámvektor (313) alakú. Továbbmenőleg, $\hat{\Omega}_n$ a (278) típusú kanonikus Fermi operátorokból álló lineárkombinációval adott, továbbá különböző n indexhez tartozó $\hat{\Omega}_n$ operátorok lineárisan függetlenek.

Az unicitás bizonyítása a felsorolt feltételek mellett a következő képpen történik:

A $\ker(\hat{P}_n)$ szerkezete

A1) Először is igazolom, hogy $\ker(\hat{P}_n)$ mag a

$$\text{dc } 890.14 \quad |\Phi\rangle = \hat{\Omega}_n^\dagger \hat{W}^\dagger |0\rangle \quad (321)$$

vektorok által van kifeszítve, ahol, a normálhatósági feltétel mellett, $\hat{W}^\dagger$ tetszőleges.

Ténylegesen, $\Omega_n^\dagger \Omega_n^\dagger = 0$ miatt automatikusan teljesül $\hat{P}_n |\Phi\rangle = 0$, tehát $|\Phi\rangle \in \ker(\hat{P}_n)$ igaz állítás, azaz $|\Phi\rangle$ a $\hat{P}_n$ magjában van. Mostmár csak azt kell igazolni, hogy minden $\ker(\hat{P}_n)$ -ben lévő vektor (321) formájú.

E célból legyen egy tetszőleges $|\chi\rangle = \hat{Y}^\dagger |0\rangle \in \ker(\hat{P}_n)$, azaz

$$\hat{P}_n |\chi\rangle = \Omega_n \Omega_n^\dagger \hat{Y}^\dagger |0\rangle = 0 \quad (322)$$

teljesül. Megmutatom, hogy ekkor $|\chi\rangle$ pontosan (321) formájú. Ténylegesen, $\hat{\Omega}_n$ (278) kifejezése miatt

$$\hat{\Omega}_n \hat{\Omega}_n^\dagger + \hat{\Omega}_n^\dagger \hat{\Omega}_n = B = \sum_{\alpha=1}^{\alpha_M} |a_\alpha|^2 > 0 \quad (323)$$

antikommutációs reláció ekkor teljesül. Ennek következtében

$$|\chi\rangle = \hat{Y}^\dagger |0\rangle = \frac{\hat{\Omega}_n \hat{\Omega}_n^\dagger + \hat{\Omega}_n^\dagger \hat{\Omega}_n}{B} \hat{Y}^\dagger |0\rangle = \hat{\Omega}_n^\dagger \left[\frac{\hat{\Omega}_n}{B} \hat{Y}^\dagger \right] |0\rangle = \hat{\Omega}_n^\dagger \hat{W}^\dagger |0\rangle \quad (324)$$

egyenlőség adódik, ahol a második egyenlőségnél az (323), a harmadik egyenlőségnél a (322), az utolsó egyenlőségnél pedig a $\hat{W}^\dagger = \hat{\Omega}_n \hat{Y}^\dagger / B$ egyenlőségeket használtam. Látható tehát hogy a (321) állítás ténylegesen igaz.

A $\ker(\sum_{n=1}^{n_1} \hat{P}_n)$ struktúrája

A2) Mindezek után következik, hogy a $\hat{P}' = \sum_{n=1}^{n_1} \hat{P}_n$ magja, $\ker(\hat{P}')$, kizárólagosan csak

$$|\Phi_{(1,2,\dots,n_1)}\rangle = \left[\prod_{n=1}^{n_1} \hat{\Omega}_n^\dagger \right] \hat{W}^\dagger |0\rangle \quad (325)$$

típusú vektorokat tartalmaz. Ténylegesen (320), az A1) pontban igazolt (321), illetve az $\hat{\Omega}_n$ operátorok lineáris függetlenségének direkt következménye (325).

A $\ker(\hat{H}')$ szerkezete

A3) Most a tanulmányozott körülmények között szemléltetem a (313)-ban adott alapállapotú megoldás unicitását. A $\ker(\hat{P}')$ -et kifeszítő (325) vektorok $\ker(\hat{P})$ -t kifeszítő vektorokká (320) értelmében csak úgy alakíthatók át, hogy $\hat{W}^\dagger$ operátort (325)-ben úgy választjuk meg, hogy (325) ne csak $\ker(\hat{P}')$ magot, hanem a $\ker(\hat{P})$ magot is kifeszítse. Ez azt jelenti, hogy (325), az $m \geq n > n_1$ indexekre vonatkozó $\hat{P}_n$ operátorok magjainak metszetét is kifeszítse, ne csak a $\ker(\hat{P}')$ alteret. Mindez a $\hat{W}^\dagger = \hat{F}^\dagger$ választással történik. Ennek megfelelően, (313) unicitása igazolást kapott.

Nyilvánvalóan, $\hat{F}^\dagger$ és $\hat{\Omega}_n$ kifejezések konkrét formája problémafüggő. De mindennek ellenére, az unicitás igazolása a bemutatottaknak megfelelően történik.

B) A $\hat{P}_n = \hat{\Omega}_n^\dagger \hat{\Omega}_n$ esete

Ez esetben a Hamilton operátor (277) formájú, $\hat{P}_n = \hat{\Omega}_n^\dagger \hat{\Omega}_n$ áll fenn $n \leq n_1$ -re, és az alapállapot hullámvektor (307) alakú. Továbbmenőleg, $\hat{\Omega}_n = \hat{\Omega}_{\mathbf{i},\sigma}$ a (278) típusú kanonikus Fermi operátorokból álló lineárkombinációval adott, továbbá különböző $n = (\mathbf{i}, \sigma)$, $\mathbf{i} \in \mathcal{S}$ indexhez tartozó $\hat{\Omega}_{\mathbf{i},\sigma}$ operátorok lineárisan függetlenek. Az ezen esetben vett $\ker(\hat{P}_n)$ -re vonatkozó bizonyításnál, a jobb érthetőség szempontjából, az $n = (\mathbf{i}, \sigma)$ indexformát explicit felhasználok. Ennek oka a matematikai leírás könnyítése. A gondolatmenet ezen n -index konkretizálás hiányában is végigvihető.

A továbbszaladás előtt a következöket húzom még alá: Mivel N_Λ csomópont van jelen és (egyszerűség kedvéért egysávos rendszertípust feltételezve) az induló és rendelkezésre álló $\hat{c}_{\mathbf{i},\sigma}$ lineárisan független kanonikus Fermi operátorok száma $\sigma = \uparrow, \downarrow$ lehetőségek miatt ($S = 1/2$ részecskéket feltételezve) $2N_\Lambda$. (Megjegyzem, hogy a gondolatmenet tetszőleges számú sáv jelenlétében is hasonlóan végigvihető). Továbbmenőleg, N a részecskeszámot jelöli, és a $\mathbf{i} \in \mathcal{S}$ mellett értelmezett és lineárisan független $\hat{\Omega}_{\mathbf{i},\sigma}$ operátorok száma legyen $2N_\mathcal{S}$, ahol $N_\mathcal{S}/N_\Lambda = c_\Omega < 1$.

A $\ker(\hat{P}_n)$ szerkezete

A $\ker(\hat{P}_{\mathbf{i},\sigma})$, $n = (\mathbf{i}, \sigma)$ esetre koncentrálva N részecskeszám és $\hat{P}_{\mathbf{i},\sigma} = \hat{\Omega}_{\mathbf{i},\sigma}^\dagger \hat{\Omega}_{\mathbf{i},\sigma}$ esetén, ezen mag felépítése a B1)-B5) lépések után derül ki [lásd a (337,338) egyenlőségeket] tiszta formában. Ezen lépéseket írom le az elkövetkezőkben.

B1) Először is megmutatom, hogy minden $\ker(\hat{P}_{\mathbf{i},\sigma})$ -hoz tartozó vektor

$$|V\rangle = \hat{\Omega}_{\mathbf{i},\sigma} \hat{W}_1^\dagger |0\rangle \quad (326)$$

formájú, ahol $\hat{W}_1^\dagger$ a $|V\rangle$ normálhatósági kikötése mellett tetszőleges és $N + 1$ elektront kelt a rendszerben.

Ténylegesen látható, hogy az $\hat{\Omega}_{\mathbf{i},\sigma} \hat{\Omega}_{\mathbf{i},\sigma} = 0$ összefüggés miatt $\hat{P}_{\mathbf{i},\sigma} |V\rangle = 0$, tehát $|V\rangle \in \ker(\hat{P}_{\mathbf{i},\sigma})$ igaz állítás. Mostmár azt kell igazolni, hogy minden vektor $\ker(\hat{P}_{\mathbf{i},\sigma})$ altérből (326) formájú. Ebből a célból legyen egy tetszőleges $|\eta\rangle = \hat{Z}^\dagger |0\rangle \in \ker(\hat{P}_{\mathbf{i},\sigma})$ vektor, azaz

$$\hat{P}_{\mathbf{i},\sigma} |\eta\rangle = \hat{\Omega}_{\mathbf{i},\sigma}^\dagger \hat{\Omega}_{\mathbf{i},\sigma} \hat{Z}^\dagger |0\rangle = 0 \quad (327)$$

teljesül és $\hat{Z}^\dagger$ operátor N darab elektront kelt a rendszerben. Ténylegesen, (323) egyenlőségéből

$$|\eta\rangle = \hat{Z}^\dagger |0\rangle = \frac{\hat{\Omega}_{\mathbf{i},\sigma} \hat{\Omega}_{\mathbf{i},\sigma}^\dagger + \hat{\Omega}_{\mathbf{i},\sigma}^\dagger \hat{\Omega}_{\mathbf{i},\sigma}}{B} \hat{Z}^\dagger |0\rangle = \hat{\Omega}_{\mathbf{i},\sigma} \left[\frac{\hat{\Omega}_{\mathbf{i},\sigma}^\dagger}{B} \hat{Z}^\dagger |0\rangle \right] = \hat{\Omega}_{\mathbf{i},\sigma} \hat{W}_1^\dagger |0\rangle \quad (328)$$

ered. Itt a harmadik egyenlőségnél (327)-et, majd az utolsó lépésben a

$$\hat{W}_1^\dagger = \frac{\hat{\Omega}_{\mathbf{i},\sigma}^\dagger}{B} \hat{Z}^\dagger \quad (329)$$

jelölést használtam. Az eredményből az is látszik, hogy $\hat{W}_1^\dagger$ operátor $N + 1$ elektront kelt a rendszerben. Látható tehát, hogy a B1) pont állítása igaz.

B2) Most az összesen N_Λ darab lineárisan független $\hat{c}_{\mathbf{i},\sigma}$ kanonikus Fermi operátorokból, egy lineáris transzformációval, rögzített spin indexek mellett, új, $\hat{C}_{p,\mathbf{i}_p,\sigma}$ -val jelölt kanonikus Fermi operátorokat alakítok ki (p számozza az új operátorokat, $p = 1, 2, \dots, N_\Lambda$), úgy hogy

$$\text{dc_890_14} \\ \hat{C}_{1,\mathbf{i}_p=1,\sigma} = \frac{1}{\sqrt{B}} \hat{\Omega}_{\mathbf{i},\sigma}, \quad (330)$$

ahol B a (323)-ban adott a rögzített $n = (\mathbf{i}, \sigma)$ indexértékre. Ezen transzformáció nyomán

$$\begin{aligned} \hat{C}_{p,\mathbf{i}_p,\sigma} \hat{C}_{p,\mathbf{i}_p,\sigma} &= 0, \quad \hat{C}_{p,\mathbf{i}_p,\sigma}^\dagger \hat{C}_{p,\mathbf{i}_p,\sigma}^\dagger = 0, \quad \{\hat{C}_{p,\mathbf{i}_p,\sigma}, \hat{C}_{p',\mathbf{i}'_{p'},\sigma'}\} = 0, \quad \{\hat{C}_{p,\mathbf{i}_p,\sigma}^\dagger, \hat{C}_{p',\mathbf{i}'_{p'},\sigma'}^\dagger\} = 0, \\ \{\hat{C}_{1,\mathbf{i}_1,\sigma}, \hat{C}_{1,\mathbf{i}_1,\sigma'}^\dagger\} &= \delta_{\sigma,\sigma'}, \end{aligned} \quad (331)$$

automatikusán teljesül, és csupán $\{\hat{C}_{p,\mathbf{i}_p,\sigma}, \hat{C}_{p',\mathbf{i}'_{p'},\sigma'}^\dagger\} = \delta_{p,p'} \delta_{\sigma,\sigma'} \delta_{\mathbf{i}_p,\mathbf{i}'_{p'}}$ kielégítése szükséges. Az $\hat{\Omega}_{\mathbf{i},\sigma}$ operátor (278)-ban adott lineáris mivolta és (323) fennállása következtében ez a transzformáció, a $\hat{c}_{\mathbf{i},\sigma}$ operátorok felhasználásával mindig megvalósítható.

B3) Most kifejezem a (327)-ben szereplő $\hat{Z}^\dagger$ operátort, amelyről tudjuk hogy N elektront kelt a rendszerben, a B2) pontban bevezetett $\hat{C}_{p,\mathbf{i}_p,\sigma}$ operátorok segítségével. A $\hat{Z}^\dagger$ -re kikötött N részecskeszám keltés miatt, ezen kifejezés legáltalánosabb formája (az induló operátorokkal)

$$\hat{Z}^\dagger = \sum_{\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_N} a_{\gamma_1, \dots, \gamma_N} \hat{C}_{\mathbf{i}_{\gamma_1} + \mathbf{r}_{\gamma_1}, \sigma_{\gamma_1}}^\dagger \hat{C}_{\mathbf{i}_{\gamma_2} + \mathbf{r}_{\gamma_2}, \sigma_{\gamma_2}}^\dagger \dots \hat{C}_{\mathbf{i}_{\gamma_N} + \mathbf{r}_{\gamma_N}, \sigma_{\gamma_N}}^\dagger, \quad (332)$$

amelyben az $a_{\gamma_1, \dots, \gamma_N}$ skalárok numerikus prefaktorok. Mivel a $\hat{c}_{\mathbf{i},\sigma}$ és $\hat{C}_{p,\mathbf{i}_p,\sigma_p}$ operátorokat lineáris transzformáció köti össze, következik, hogy $\hat{Z}^\dagger$ formája a $\hat{C}_{p,\mathbf{i}_p,\sigma_p}$ operátorokkal kifejezve

$$\hat{Z}^\dagger = \sum_{\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_N} b_{\gamma_1, \dots, \gamma_N} \hat{C}_{p_1, \mathbf{i}_{p_1}, \sigma_{p_1}}^\dagger \hat{C}_{p_2, \mathbf{i}_{p_2}, \sigma_{p_2}}^\dagger \dots \hat{C}_{p_N, \mathbf{i}_{p_N}, \sigma_{p_N}}^\dagger, \quad (333)$$

ahol most $b_{\gamma_1, \dots, \gamma_N}$ skalárok új numerikusoefficiensek, továbbá (333) jobboldalán szereplő N operátorszorzatokban tetszőleges $\hat{C}_{p,\mathbf{i}_p,\sigma_p}^\dagger$ operátor előfordulhat.

B4) Most a (326)-ban szereplő $|V\rangle$ tetszőleges $\ker(\hat{P}_{\mathbf{i},\sigma})$ elemet fejezem ki a $\hat{C}_{p,\mathbf{i}_p,\sigma_p}^\dagger$ operátorok segítségével. A $\hat{W}_1^\dagger$ operátor, amely (329)-ben adott, (333) alapján a következő

$$\hat{W}_1^\dagger = \hat{\Omega}_{\mathbf{i},\sigma}^\dagger \sum_{\gamma_1, \dots, \gamma_N} d_{\gamma_1, \dots, \gamma_N} [\prod_{\alpha}^{\prime} \hat{C}_{p_\alpha, \mathbf{i}_{p_\alpha}, \sigma_{p_\alpha}}^\dagger], \quad (334)$$

formát ölti, ahol a $d_{\gamma_1, \dots, \gamma_N} = b_{\gamma_1, \dots, \gamma_N} / B$ összefüggés áll fenn a numerikus prefaktorokra, továbbá a $[\prod_{\alpha}^{\prime} \hat{C}_{p_\alpha, \mathbf{i}_{p_\alpha}, \sigma_{p_\alpha}}^\dagger]$ szorzat továbbra is N tagot tartalmaz, de a produktum felett kiemelt jelzett ($'$) aláhúzza, hogy a szorzatban $\hat{C}_{1,\mathbf{i}_1,\sigma}^\dagger$ nem szerepel. Ennek egyszerűen a (330) egyenlőség az oka, ugyanis a (334)-ben legelöl szereplő $\hat{\Omega}_{\mathbf{i},\sigma}^\dagger$ miatt, továbbá az $\hat{\Omega}_{\mathbf{i},\sigma}^\dagger \hat{\Omega}_{\mathbf{i},\sigma}^\dagger = 0$ egyenlőség implikációjaként, minden $[\prod_{\alpha} \hat{C}_{p_\alpha, \mathbf{i}_{p_\alpha}, \sigma_{p_\alpha}}^\dagger]$ produktum kiesik amelyik $\hat{C}_{1,\mathbf{i}_1,\sigma}^\dagger = (1/\sqrt{B}) \hat{\Omega}_{\mathbf{i},\sigma}^\dagger$ tagot tartalmaz. Így tehát a (326)-ban szereplő $|V\rangle$ formája

$$|V\rangle = \hat{\Omega}_{\mathbf{i},\sigma} \hat{\Omega}_{\mathbf{i},\sigma}^\dagger \sum_{\gamma_1, \dots, \gamma_N} d_{\gamma_1, \dots, \gamma_N} [\prod_{\alpha}^{\prime} \hat{C}_{p_\alpha, \mathbf{i}_{p_\alpha}, \sigma_{p_\alpha}}^\dagger] |0\rangle. \quad (335)$$

B5) Ezen lépésben a (335)-ben szereplő $|V\rangle$ formát (323) segítségével alakítom át. Ennek megfelelően

$$\begin{aligned}
 |V\rangle &= [B - \hat{\Omega}_{\mathbf{i},\sigma}^\dagger \hat{\Omega}_{\mathbf{i},\sigma}] \sum_{\gamma_1, \dots, \gamma_N} d_{\gamma_1, \dots, \gamma_N} [\prod_{\alpha} \hat{C}_{p_\alpha, \mathbf{i}_{p_\alpha}, \sigma_{p_\alpha}}^\dagger] |0\rangle = B \sum_{\gamma_1, \dots, \gamma_N} d_{\gamma_1, \dots, \gamma_N} [\prod_{\alpha} \hat{C}_{p_\alpha, \mathbf{i}_{p_\alpha}, \sigma_{p_\alpha}}^\dagger] |0\rangle \\
 &= \sum_{\gamma_1, \dots, \gamma_N} b_{\gamma_1, \dots, \gamma_N} [\prod_{\alpha} \hat{C}_{p_\alpha, \mathbf{i}_{p_\alpha}, \sigma_{p_\alpha}}^\dagger] |0\rangle.
 \end{aligned} \tag{336}$$

Itt az első sor utolsó egyenlősége annak a következménye, hogy a (330) fennállása mellett értelmezett $\{\hat{C}_{p, \mathbf{i}_p, \sigma_p}\}$ operátor szét kanonikus Fermi operátorokból áll, továbbá $\prod_{\alpha}'$ alatt $\hat{C}_{1, \mathbf{i}, \sigma}^\dagger$ nem szerepel, így $\hat{\Omega}_{\mathbf{i}, \sigma}$ egy egyszerű fázisfaktor megjelenése mellett a vákuumállapot elé tolható, és ekkor, $\hat{\Omega}_{\mathbf{i}, \sigma}$ annihiláló jellege miatt $\hat{\Omega}_{\mathbf{i}, \sigma} |0\rangle = 0$. Továbbmenőleg, (336) utolsó sorának felírásakor figyelembe vettem a $d_{\gamma_1, \dots, \gamma_N}$ koefficiensnek (334) után adott értelmezését.

A (336)-ben kapott eredmény fontos információt szolgáltat $\hat{P}_{\mathbf{i}, \sigma} = \hat{\Omega}_{\mathbf{i}, \sigma}^\dagger \hat{\Omega}_{\mathbf{i}, \sigma}$ esetén $\ker(\hat{P}_{\mathbf{i}, \sigma})$ Hilbert altér szerkezetéről. Mivel a $\{\hat{C}_{p, \mathbf{i}_p, \sigma_p}\}$ operátorok kanonikus Fermi jellegűek és (330) értelmében $\hat{C}_{1, \mathbf{i}_1, \sigma_1} = (1/\sqrt{B}) \hat{\Omega}_{\mathbf{i}, \sigma_1}$, bevezetve az $\hat{X}_q^\dagger = \hat{C}_{p, \mathbf{i}_p, \sigma_p}^\dagger$, $q = (p, \mathbf{i}_p, \sigma_p)$ jelölést, úgy hogy az $\sigma_p \neq \sigma_1$ esetén tetszőleges p -re, míg $\sigma_p = \sigma_1$ esetében $p > 1$ -re legyen csak értelmezve. [Megjegyzem, hogy q indexből általában, mindkét spinvetület figyelembevételével összesen $(2N_\Lambda - 1)$ darab van]. Ilyen esetben tehát, $\ker(\hat{P}_{\mathbf{i}, \sigma})$ minden vektora

$$|V\rangle = \prod_q \hat{X}_q^\dagger |0\rangle \tag{337}$$

formájú, ahol az összes $\hat{X}_q^\dagger$ operátor rendelkezik a következő, antikommutációs relációval megadható tulajdonsággal (a követett példában $n = (\mathbf{i}, \sigma)$)

$$\{\hat{\Omega}_n, \hat{X}_q^\dagger\} = 0. \tag{338}$$

A (338) kifejezésben n rögzített de tetszőleges, és q minden olyan tetszőleges indexet sűrít amelyre (338) fennáll.

A $\ker(\sum_{n=1}^{n_1} \hat{P}_n)$ struktúrája

A (320) összefüggés miatt, $\ker(\hat{P}_n)$ -nek (337,338)-ban adott ismerete mellett, a $\sum_{n=1}^{n_1} \hat{P}_n = \sum_{n=1}^{n_1} \hat{\Omega}_n^\dagger \hat{\Omega}_n$ magja is egyszerűen megadható. Mivel a megadott összeg esetében az eredő mag a magok metszetét jelenti, továbbá az $\hat{\Omega}_n$ operátorok lineárisan függetlenek, a $\ker(\sum_{n=1}^{n_1} \hat{P}_n)$ kernelt kifesztő összes vektor

$$|\Psi_0\rangle = \prod_{n'}^{\hat{n}'_M} \hat{X}_{n'}^\dagger |0\rangle \tag{339}$$

formájú, ahol $\hat{n}'_M$ az $\hat{X}_{n'}^\dagger$ operátorok maximális száma, és ahol minden $n \leq n_1$ és n' indexre

$$\{\hat{\Omega}_n, \hat{X}_{n'}^\dagger\} = 0, \tag{340}$$

egyenlőség kell teljesüljön. Hadd jegyezzem meg, hogy az adott körülmények között, (339,340) az unicitás fennállása mellett igazolja a (302,303) összefüggéseket.

A $\ker(\hat{H}')$, $\hat{H}' = \sum_{n=1}^m \hat{P}_n$ összetétele

A (320) miatt a $\ker(\hat{H}')$, a $\hat{H}' \equiv \sum_{n=1}^m \hat{P}_n$ esetében úgy áll elő, hogy a (339)-ben szereplő vektort úgy alakítjuk, hogy nemcsak $\ker(\sum_{n=1}^{n_1} \hat{P}_n)$ alteret feszítse ki, hanem egyben az $n_1 < n \leq m$ esetben vett $\ker(\hat{P}_n)$ -ben is benne legyen, kifesztve $\ker(\hat{H}')$ -et. Mindezt a $\ker(\hat{P}_n)$ tagok metszete adja, tehát úgy lehet kialakítani, hogy a (339) jobboldalán szereplő szorzatból csak azokat az operátorokat tartjuk meg, melyek az így kapott $|\Psi_0\rangle$ -t a $\ker(\sum_{n=n_1+1}^m \hat{P}_n)$ magba is behelyezik. A (339)-ben szereplő n' indexeknek ez a szelekciója adja a (305)-ben megemlített I_M halmazt, amely alapján a $|\Psi_0\rangle$ -ből kifejllesztett alapállapot a

$$|\Psi_g(N)\rangle = \prod_{n' \in I_M} \hat{X}_{n'}^\dagger |0\rangle. \quad (341)$$

Minden $\ker(\hat{H}')$ -ben lévő vektor ilyen formájú, tehát ezáltal a (307)-ben megadott alapállapot hullámvektor unicitása, a feltételezett körülmények között igazolt.

Aláhúzom, hogy bizonyos N részecskeszámok esetén az I_M halmaz kiválasztása többféle képpen lehetséges és ezáltal az alapállapot degeneráltá válik. A (319) összefüggést is megengedő unicitási fogalom esetében ez nem vezet ellentmondáshoz, és ez esetben a teljes $\ker(\hat{H}')$ -et kifesztő hullámvektor

$$|\Psi_g(N)\rangle = \sum_{\alpha} K_{\alpha} \left[\prod_{n' \in I_{M_{\alpha}}} \hat{X}_{n'}^\dagger \right] |0\rangle, \quad (342)$$

ahol $I_{M_{\alpha}}$ az összes lehetséges indexszelekciós lehetőségeket tartalmazza, és a K_{α} skalárok tetszőleges numerikus koefficiensek. Ilyen esetben a (342) jobboldali összegében szereplő különböző elemek lineárisan függetlenek kell legyenek.

5. A levezetett alapállapot fizikai tulajdonságainak elemzése

Erre a pontra érve, az N -függő $|\Psi_g(N)\rangle$ alapállapot formája már egzakt és explicit formában ismertnek tekinthető, de egyelőre csupán egy bonyolult matematikai kifejezést jelent, és általában a kapott kifejezés semmit sem árul el (ránézésre például) a kapott alapállapot fizikai tulajdonságairól. Ettől a ponttól kezdődik tulajdonképpen a fizikai tulajdonságok feltárása, mely lépés általában külön kihívást jelent. A fizikai tulajdonságok feltárása stratégiailag végeredményben alapállapot várható értékek pontos kiszámítását jelenti. Mivel $|\Psi_g(N)\rangle$ ismert, ez a lépés elvileg mindig megtehető, de általában és effektíve szintén nagyvolumenű és időigényes munkát jelent. Ezen a vonalon is példázni fogok az alábbiakban néhány tulajdonsággal kapcsolatos esetet.

A) Vezető vagy szigetelő jelleg

Ezt az aspektust a (318) kapcsán érintettem már. Amennyiben az állapot kiterjedt (lásd Ref.[²⁵⁷]), $\delta\mu = 0$ [lásd (318)] viselkedés mutatja a vezető mivoltot. Ezzel ellentétben, a $\delta\mu \neq 0$ általában szigetelő mivolta utal, hisz ez az egyenlőtlenség, az alapállapot felett töltésrés jelenlétét jelenti.

A vezető jelleget hosszútávú hopping alapállapot várhatóérték számítással is lehet tesztelni

$$\Gamma(\mathbf{r})_{\mathbf{i}} = \langle \Psi_g | (\hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r},\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{i},\sigma} + H.c.) | \Psi_g \rangle, \quad (343)$$

mely kifejezés

$$\Gamma(\mathbf{r}) = \frac{1}{N_\Lambda} \sum_{\mathbf{i}} \Gamma(\mathbf{r})_{\mathbf{i}} \quad (344)$$

módon csupán $\mathbf{r}$ függővé tehető. A (344) segítségével

$$\Gamma(\mathbf{r}) \sim e^{-\frac{|\mathbf{r}|}{\lambda}} \quad (345)$$

egyrészeske lokalizációs hossz, λ , értelmezhető. Termodinamikai határesetben $\lambda \rightarrow \infty$ jelzi a delokalizáltságot ami általában fémes viselkedést jelent, továbbá $\lambda < \infty$ véges érték lokalizált, szigetelő jellegre utal.

B) Fermi vagy nem-Fermi folyadék jelleg, vezető tulajdonság esetén

Ez esetben az

$$n_{\mathbf{k},\sigma} = \langle \hat{n}_{\mathbf{k},\sigma} \rangle = \langle \Psi_g | \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma} | \Psi_g \rangle \quad (346)$$

kiszámítása szükséges, ahol $\hat{c}_{\mathbf{k},\sigma}$ a $\hat{c}_{\mathbf{i},\sigma}$ Fourier transzformáltja. Ha $n_{\mathbf{k},\sigma}$ $\mathbf{k}$ szerinti függésében tartalmaz szögpontot melyet egy véges függőleges ugrás követ, úgy a rendszer Fermi folyadék, ha viszont teljesen folytonos viselkedést mutat folytonos elsőrendű derivált mellett (azaz szögpont nélkül), a rendszer nem-Fermi folyadék (lásd Ref.^[249], 59 oldal).

C) Ferromágneses tulajdonság vagy paramágneses jelleg

Itineráns rendszer esetében az $\vec{\hat{S}} = \vec{i}\hat{S}_x + \vec{j}\hat{S}_y + \vec{k}\hat{S}_z$ teljes spinoperátorra kell koncentrálni, ahol $\hat{S}_\alpha = \sum_{\mathbf{i}} \hat{S}_\alpha(\mathbf{i})$, $\alpha = x, y, z$, és

$$\hat{S}_z(\mathbf{i}) = \frac{1}{2}(\hat{n}_{\mathbf{i},\uparrow} - \hat{n}_{\mathbf{i},\downarrow}), \quad \hat{S}_+(\mathbf{i}) = (\hat{S}_-(\mathbf{i}))^\dagger = \hat{c}_{\mathbf{i},\uparrow}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{i},\downarrow}, \quad \hat{S}_\pm(\mathbf{i}) = \hat{S}_x(\mathbf{i}) \pm i\hat{S}_y(\mathbf{i}), \quad (347)$$

továbbá $\vec{i}, \vec{j}, \vec{k}$ a Descartes-féle koordinátarendszer egységvektorai. Ekkor

$$R_1 = \langle \Psi_g | \hat{S}^2 | \Psi_g \rangle \quad (348)$$

kiszámítása és $R_1 \neq 0$ (a külső mágneses tér $\vec{H}$ zéró a számítás során) spontán ferromágneses fázis jelenlétét jelenti (hisz ekkor a teljes spin nagyság négyzet várhatóérték zérótól különböző), ellentétes esetben a rendszer paramágneses.

A ferromágneses fázis kimutatása a tengelyvetület átlagértékének kiszámításával is lehetséges (ez alkalommal is $\vec{H} = 0$)

$$R_2 = \langle \Psi_g | \hat{S}_z | \Psi_g \rangle, \quad (349)$$

$R_2 \neq 0$ mutatván a ferromágneses fázis jelenlétét. Ezen utóbbi, (349)-re alapozott eljárás akkor alkalmazott, ha a leírás során még véletlenül sem választható a tengelyvetületeket követő tengely az esetlegesen fellépő spontán mágnesezettség irányára merőlegesen.

A további más fizikai tulajdonságok is, a bemutatottakhoz hasonlóan, a jellemző fizikai mennyiség alapállapotú várható értékének kiszámítása alapján értékelhetőek.

Az e fejezetben bemutatott és a pozitív szemidefinit operátorok tulajdonságain alapuló módszer a (XII, XIII, XIV, XV, XVI, XVII) fejezetekben kerül alkalmazásra.

dc_890_14

SAJÁT MODELL-EREDMÉNYEK: ELSŐ RÉSZ

Közelítések nyomán kapott eredmények

A. Körülmények

A jelen és elkövetkező tízenegy modellkörülmények között levezetett saját eredményeket bemutató fejezetek indító alfejezetei (a *Körülmények*) a rövid bevezető és járulékok (részletes előzmények, alkalmazott módszer, saját publikációk) elhelyezésének bemutatása mellett arra is hivatottak, hogy ismertessék azon gondolatokat amelyek a fejezeteket összekapcsolják. Mivel ilyen jellegű előző fejezet nincs, itt nem tudok összekapcsoló információt felsorakoztatni, csupán indító aspektusokat. Így aláhúzom, hogy spin-sűrűség hullám lesz az indító rendeződési forma, mégpedig anizotróp formában. A leírás ezen a szinten átlagtér jellegű, korrelációs hatások lényegében kismértékben kerülnek előtérbe, így a különlegességet, amely a $\mathbf{k}$ -függő energiarés okozta és energetikailag stabil formában fennálló $\mathbf{k}$ -térbeli anizotrópia, egy specifikus koegzisztencia okozza majd.

Steglich 1979-ben fedezte fel az első nehézfermionos rendszert⁴¹, s kísérleti vonalon, a nehézfermionos rendszereket ma is legjobban jellemző anyagcsalád 1983-1985 periódusban látott napvilágot Ott, Fisk és Stewart munkássága nyomán⁴². Ekkor vált világossá, hogy elvileg nemcsak izotrópikus sűrűség-hullámok létezhetnek. A bemutatott eredmények 1985-1986 eleje periódusában születtek, a kézirat 1986 áprilisában volt publikálásra beküldve. Tudomásom szerint ez az első konkrét levezetés mely anizotrópikus sűrűség-hullámot eredményezett konkrét összetételű anyagokra alkalmazható módon.

A témakörhöz tartozó saját publikációk Ref.^[18,19]-ban található, a modellelemzés és számítás részletes előzményei a II A 1 alfejezetben voltak bemutatva, míg az alkalmazott módszer ismertetése a IV A alfejezetben történt.

B. A modell és eredmények

Az általam használt modell Hamilton operátor egy erős-kötés közelítésben jellemzett egysávos egyszerű köbös rendszert ír le Hubbard kölcsönhatás és elsőszomszéd kétrészecske kölcsönhatások figyelembevétele mellett

$$\begin{aligned} \hat{H} = & -\frac{1}{2} \sum_{i,j,\sigma} t(\hat{a}_{i,\sigma}^\dagger \hat{a}_{j,\sigma} + H.c) + \frac{1}{2} \sum_{i,\sigma} U \hat{a}_{i,\sigma}^\dagger \hat{a}_{i,\sigma} \hat{a}_{i,-\sigma}^\dagger \hat{a}_{i,-\sigma} \\ & + \frac{1}{2} \sum_{i,j,k,l} \sum_{\sigma_i,\sigma_j,\sigma_k,\sigma_l} \bar{V}_{\sigma_i,\sigma_j,\sigma_k,\sigma_l}^{i,j,k,l} \hat{a}_{i,\sigma_i}^\dagger \hat{a}_{j,\sigma_j} \hat{a}_{k,\sigma_k}^\dagger \hat{a}_{l,\sigma_l}. \end{aligned} \quad (350)$$

Ezen összefüggésben $\hat{a}_{i,\sigma}^\dagger$ az i csomóponton ható σ spinű elektron keltő operátora, t a hopping mátrixelem, $\epsilon_{\mathbf{k}} = -t\gamma_{\mathbf{k}}$, $\gamma_{\mathbf{k}} = 2[\cos(ak_x) + \cos(ak_y) + \cos(ak_z)]$ a diszperzió reláció (amelyben a a rácsállandót jelöli), U a Hubbard kölcsönhatás csatolási állandója, továbbá $\bar{V}$ az elsőszomszéd kölcsönhatásokat írja le. Az $i, j, ..$ ráccsomópontokra vett összegek csupán az elsőszomszéd tagokat veszik figyelembe.

A $\bar{V}$ -ben egyrészt az elsőszomszédok közötti spinkonfigurációtól függő kölcsönhatási járulékok vannak jelen

$$V_1^{i,j,k,l}_{\sigma_i, \sigma_j, \sigma_k, \sigma_l} = \frac{\text{dc_890_14}}{V} \delta_{i,j} \bar{\delta}_{k,l} \delta_{\sigma_i, \sigma_j} \bar{\delta}_{\sigma_k, \sigma_l} \delta_{\sigma_i, \sigma_l} - I \delta_{i,k} \delta_{j,l} \delta_{\sigma_i, \sigma_l} \delta_{\sigma_j, \sigma_k} \delta_{\sigma_i, -\sigma_j} - J \delta_{i,j} \delta_{k,l} \delta_{\sigma_i, \sigma_j} \delta_{\sigma_k, \sigma_l} \delta_{\sigma_i, -\sigma_l}, \quad (351)$$

másrészt fononikus eredetű (fononok által mediált inter-elektron járulék) tagok vannak figyelembe véve, melyek Ref.[²⁵⁹]-ben voltak nehézfermionos rendszerekre levezetve

$$V_2^{i,j,k,l}_{\sigma_i, \sigma_j, \sigma_k, \sigma_l} = -\bar{g}_1 \delta_{i,l} \delta_{j,k} \delta_{\sigma_i, \sigma_j} \delta_{\sigma_k, \sigma_l} - \bar{g}_2 \delta_{i,j} \delta_{k,l} \delta_{\sigma_i, \sigma_j} \delta_{\sigma_k, \sigma_l} - \bar{g}_3 (\delta_{i,j} \delta_{i,k} \delta_{\sigma_i, \sigma_j} \delta_{\sigma_k, \sigma_l} \delta_{\sigma_i, -\sigma_l} + \delta_{i,j} \delta_{i,l} \delta_{\sigma_i, \sigma_j} \delta_{\sigma_k, \sigma_l} \delta_{\sigma_i, -\sigma_l}), \quad (352)$$

továbbá $\bar{V} = \bar{V}_1 + \bar{V}_2$. Megjegyzem, hogy ilyenszerű Hamilton operátor alkalmazása nehézfermionos rendszerre a nyolcvanas években standard (rendkívül gyakran alkalmazott) volt²⁶⁰, de általában szupravezető tulajdonságok kialakulásának vizsgálatára használták (amint én is ezelőtt²⁶¹). Azt is meg kell említenem, hogy a konvencionális spin-sűrűség hullámok több éven keresztül tanulmányozásából²⁷ ismertem, hogy milyen kölcsönhatási tagok játszanak szerepet itineráns antiferromágnes tulajdonságok kialakításában.

A nesting-feltétel $\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} = -\epsilon_{\mathbf{k}}$ [lásd (5)] az $[1, 1, 1]$ $\mathbf{k}$ -tér irányba beállított $\mathbf{Q}$ hullámvektorra áll fenn. A sávot félig töltöttnek tekintem.

A kiinduló Hamilton operátort átlagtér közelítésben kezelve, amelynek során a sűrűség hullámokhoz vezető a $\tau^{\pm\sigma} = \langle \hat{a}_{\mathbf{k}, \pm\sigma}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}, \pm\sigma} \rangle$ átlagértékeket tekintettem zérótól különbözőnek, a következő effektív Hamilton operátor adódik (lásd (4,5))

$$\hat{H}_{eff} = \frac{1}{N_\Lambda} \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \epsilon_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}, \sigma} + \frac{1}{2N_\Lambda} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \sigma} \{ \hat{a}_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}, \sigma} [g_1^-(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \tau^{+\sigma}(\mathbf{k}') + g_2^-(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \tau^{-\sigma}(\mathbf{k}')] + H.c. \}, \quad (353)$$

ahol N_Λ a ráccsomópontok száma, továbbá az effektív $\mathbf{k}$ függő csatolási állandók

$$g_1^\pm(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = (\bar{g}_2 - \bar{g}_1 - V)[6 \pm \gamma(\mathbf{k} - \mathbf{k}')], \\ g_2^\pm(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = U + 6(\bar{g}_2 + J) \mp I\gamma(\mathbf{k} + \mathbf{k}') \mp \bar{g}_1\gamma(\mathbf{k} - \mathbf{k}'). \quad (354)$$

Megfigyelhető, hogy az effektív csatolási állandók $\mathbf{k}$ függése, amely végeredményben (358) révén az anizotrópikus (azaz $\mathbf{k}$ függő) spin-sűrűség hullámhoz vezet, a (354) összefüggés.

A normális Green függvény $[G^\sigma(\mathbf{k}, i\omega_n) = \langle \langle \mathbf{a}_{\mathbf{k}, \sigma} | \mathbf{a}_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger \rangle \rangle]$, lásd (1) alatti szöveg], és az anomális Green függvény $(F^\sigma(\mathbf{k}, i\omega_n) = \langle \langle \hat{a}_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}, \sigma} | \hat{a}_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger \rangle \rangle)$ (5) szerint vett definíciója után, a (353) effektív Hamilton operátor (2) Gorkov mozgásegyenletbe való helyettesítése útján adódnak a Green függvény egyenletek, melyek megoldása

$$G^\sigma(\mathbf{k}, i\omega_n) = \frac{(i\omega_n + \epsilon_{\mathbf{k}})}{N_\sigma}, \quad F^\sigma(\mathbf{k}, i\omega_n) = \frac{g_\sigma^*}{N_\sigma}, \\ N_\sigma = (i\omega_n)^2 - \epsilon_{\mathbf{k}}^2 - |g_\sigma(\mathbf{k})|^2, \\ g_\sigma^* = \frac{1}{N_\Lambda} \sum_{\mathbf{k}'} [g_1^+(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \tau^{+\sigma}(\mathbf{k}') + g_2^+(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \tau^{-\sigma}(\mathbf{k}')], \quad (355)$$

továbbá, $g_\sigma^*(\mathbf{k}) = -g_{-\sigma}^*(\mathbf{k})$ egyenlőség teljesül. Megfigyelhető, hogy a

$$\Delta_S(\mathbf{k}) = \left(\frac{1}{2}\right)(g_\sigma^*(\mathbf{k}) - g_{-\sigma}^*(\mathbf{k})) = \frac{1}{2N_\Lambda} \sum_{\mathbf{k}'} [g_1^+(\mathbf{k}, \mathbf{k}') - g_2^+(\mathbf{k}, \mathbf{k}')][\tau^\sigma(\mathbf{k}') - \tau^{-\sigma}(\mathbf{k}')] \\ = \frac{1}{2} \frac{1}{N_\Lambda} \sum_{\mathbf{k}'} g_S(\mathbf{k}, \mathbf{k}') Tr_\sigma[\sigma^z \tau^\sigma(\mathbf{k}')], \quad (356)$$

menyiség, ahol $g_S(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = g_1^+(\mathbf{k}, \mathbf{k}') - g_2^+(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$, és Tr_σ a spintérben vett spurt jelöli, a spin-sűrűség hullám energiarését értelmezi, hiszen $|\Delta_S(\mathbf{k})|^2 = |g_\sigma|^2$ összefüggés értelmében a Green függvények nevezője (amely polusai az egyrészeske gerjesztési spektrumot adják), ekkor $N_\sigma = (i\omega_n)^2 - E(\mathbf{k})^2$, $E(\mathbf{k}) = \sqrt{\epsilon_{\mathbf{k}}^2 + |\Delta_S(\mathbf{k})|^2}$ formába írható. A (356) egyenlőségből, a (7) felhasználásával és a (355) Green függvények ismeretében a spin-sűrűség hullám rendparaméter egyenlete a következő formát ölti

$$\Delta_S(\mathbf{k}) = \beta^{-1} \frac{1}{N_\Lambda} \sum_{\mathbf{k}', n} \frac{g_S(\mathbf{k}, \mathbf{k}')}{2} Tr_\sigma[\sigma^z F^\sigma(\mathbf{k}', i\omega_n)] = \frac{\beta^{-1}}{2N_\Lambda} \sum_{\mathbf{k}', n} \frac{g_S(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \Delta_S(\mathbf{k}')}{(i\omega_n)^2 - E(\mathbf{k}')^2}. \quad (357)$$

Itt az n szerinti összegezés a Matsubara frekvenciák szerinti összegzést jelöli, melyet (8) szerint végzünk el. Bevezetve a $\Delta_S(\mathbf{k}) = \sum_{i=0}^6 S_i(\mathbf{k}) \Delta_i$ felbontást ahol az $S_i(\mathbf{k})$ szimmetriaadaptált ortogonális függvények az O_h csoport irreducibilis ábrázolásai mentén helyezkednek el és formájuk

$$S_0(\mathbf{k}) = 1, S_1(\mathbf{k}) = \gamma_{\mathbf{k}}, S_2(\mathbf{k}) = \sqrt{6}[\cos(ak_x) - \cos(ak_y)], \\ S_3(\mathbf{k}) = \sqrt{2}[\cos(ak_x) + \cos(ak_y) - 2\cos(ak_z)], \\ S_4(\mathbf{k}) = \sin(ak_x), S_5(\mathbf{k}) = \sin(ak_y), S_6(\mathbf{k}) = \sin(ak_z), \quad (358)$$

a (357) egyenlet egy 7 egyenletből álló csatolt egyenletrendszerre bomlik

$$\Delta_i = \frac{1}{N_\Lambda} \sum_{\mathbf{k}} g_i S_i(\mathbf{k}) \frac{\Delta_S(\mathbf{k})}{2E(\mathbf{k})} \tanh \frac{\beta E(\mathbf{k})}{2}, \quad i = 0 - 6. \quad (359)$$

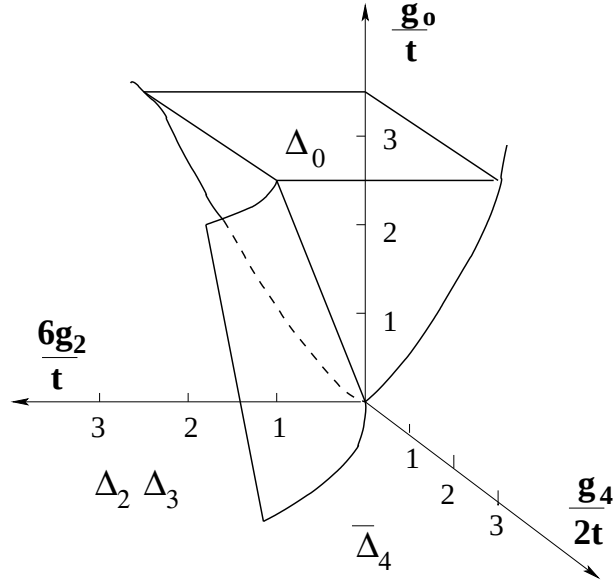
A (359)-ben szereplő csatolási állandókat a $g_0 = U + 6(V + J + \bar{g}_1)$, $g_1 = g_2 = g_3 = (V - I - \bar{g}_2)/6$, $g_4 = g_5 = g_6 = 2(V + I - \bar{g}_2)$ összefüggések adják. Megemlítem, hogy a (359) egyenletekben szereplő Δ_i , $i \geq 1$ komponensek anizotrópikus ($\mathbf{k}$ függő) spin-sűrűség hullámokat jelentenek. Mivel (359) tetszőleges g_i , $i = 0, 1, \dots, 6$ csatolási állandóra a triviális megoldást (minden i -re minden $\Delta_i = 0$) is visszaadja, az anizotrópikus sűrűség-hullámok megjelenési tartományait a (359) mellett, energetikai stabilitásuk (azaz termodinamikai potenciáljuk értéke) is meghatározza. Az a spin-sűrűség hullám fázis jelenik majd meg: amelyet a) (359) nem-triviális megoldásként megenged, ha b) az illető fázisdiagram pontban a (359) által megengedett összes lehetséges megoldás közül (beleértve a triviális megoldást is), az illető fázis termodinamikai potenciálja a legkisebb.

A megjelenő spin-sűrűség hullám fázisok energetikai stabilitását a (9) alapján fejeztem ki

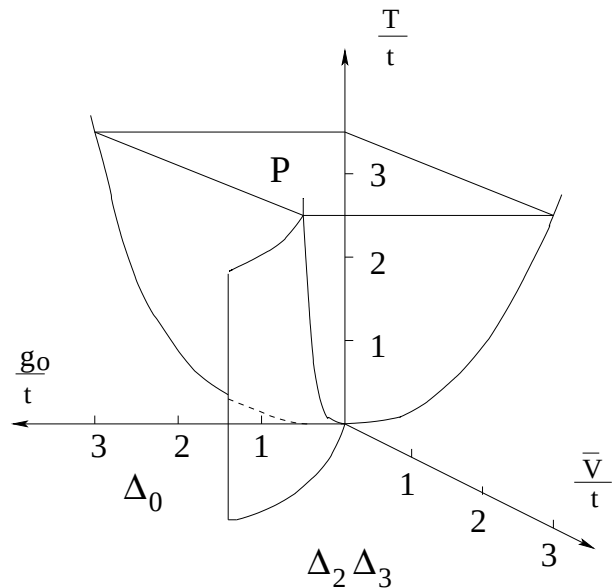
$$\Omega = \Omega_0 + \sum_{i=0}^6 \frac{|\Delta_i|^2}{g_i} - \frac{1}{N_\Lambda} \sum_{\mathbf{k}} \ln \frac{\cosh \frac{\beta E(\mathbf{k})}{2}}{\cosh \frac{\beta \epsilon_{\mathbf{k}}}{2}} \quad (360)$$

ahol Ω_0 a paramágneses fázist jellemzi.

A modell energetikailag is stabil fázisokat tartalmazó $T \rightarrow 0$ fázisdiagramját az 12. Ábra tartalmazza. Amint látható, az izotrópikus ($\Delta_0 \neq 0$) fázison kívül, az anizotrópikus Δ_2, Δ_3 (ez koegzisztencia fázist jelöl, $\Delta_2 \neq 0, \Delta_3 \neq 0$ formában), és a $\bar{\Delta}_4 = (\Delta_4 \sin k_x + \Delta_5 \sin k_y + \Delta_6 \sin k_z)$ fázisok is létezhetnek ($\bar{\Delta}_4 \neq 0$) energetikailag stabil (azaz (360) által stabil) formában.



12. Ábra . A modell $T = 0$ fázisdiagramja. A Δ_0 izotrópikus spin-sűrűség hullám mellett az anizotrópikus (Δ_2, Δ_3) koegzisztencia és a $\bar{\Delta}_4$ spin-sűrűség hullám energetikailag stabil fázisok is fellépnek. Az utóbbiban egyszerre $\Delta_4, \Delta_5, \Delta_6 \neq 0$.



13. Ábra . A modell $T \neq 0$ fázisdiagramja $I/t = 0$ esetben ($\bar{V} = V - \bar{g}_2$). P a paramágneses fázist, Δ_0 az izotrópikus spin-sűrűség hullám fázist, míg Δ_2, Δ_3 az anizotrópikus spin-sűrűség hullám fázist jelöli.

A $T \neq 0$ fázisdiagram $I/t = 0$ -ra vonatkozó metszetét tartalmazza a 13. Ábra. Megjegyzem, hogy $T \neq 0$ hőmérsékleten a $\bar{\Delta}_4$ fázis csak $I/t \neq 0$ esetében létezik energetikailag stabil formában ($I/t > 0$ esetben a 13. Ábra $\bar{V}/t$ tengelyének irányában jelenik meg a paramágneses fázis alatt az origó környékén). Aláhúzom, hogy a 12-13 Ábrák a (359,360)

összefüggések együttes numerikus elemzéséből álltak elő.

A 12-13 Ábrán megjelenő rendezett fázisok kritikus hőmérsékleteire adódó összefüggések

$$\begin{aligned} T_{N,i} &= t \exp\left[-\frac{t}{\alpha_i g_i}\right], \quad \frac{t}{T} \gg 1, \\ T_{N,i} &= \beta_i g_i, \quad \frac{t}{T} \sim 1, \\ T_{N,i} &= \gamma_i g_i, \quad \frac{t}{T} \ll 1, \end{aligned} \quad (361)$$

formát eredményeznek, ahol az $\alpha_i, \beta_i, \gamma_i$ numerikus paraméterek értékei $i = 0$ -ra: $\alpha_0 = 0.14, \beta_0 = 0.19, \gamma_0 = 0.25$; $i = 2, 3$ koegzisztencia fázisra: $\alpha_{2,3} = 1.07, \beta_{2,3} = 1.25, \gamma_{2,3} = 1.5$; végül a $\bar{\Delta}_4$ fázisra vonatkozólag: $\alpha_4 = 1/12, \beta_4 = 0.10, \gamma_4 = 1/8$.

A fizikai mennyiségek $T \rightarrow 0$ határesetben vett hőmérsékletfüggésének levezetése céljából a fajhőt illetve a mágneses szuszceptibilitást számoltam (12), illetve (13,14) mintájára. Ennek alapján a fajhő kifejezésére

$$C(T) = \frac{\beta^2}{2N} \sum_{\mathbf{k}} E(\mathbf{k}) \left[E(\mathbf{k}) + \beta \frac{dE(\mathbf{k})}{d\beta} \right] \cosh^{-2} \frac{\beta E(\mathbf{k})}{2}, \quad (362)$$

illetve a mágneses szuszceptibilitásra

$$\chi(T) = \frac{\mu_B^2}{3} \left\{ \frac{\beta}{2N} \sum_{\mathbf{k}} \cosh^2 \frac{\beta E(\mathbf{k})}{2} + \frac{2}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\partial}{\partial \epsilon_{\mathbf{k}}} \left[\frac{\epsilon_{\mathbf{k}}}{E(\mathbf{k})} \tanh \frac{\beta E(\mathbf{k})}{2} \right] \right\}. \quad (363)$$

összefüggések adódnak. Ezeknek alapján a $T \rightarrow 0$ határesetben $\chi(T)$ egy aditív konstans mellett megjelenő négyzetes hőmérséklet függést mutat minden $i = 0, 1, \dots, 6$ értékre. Ezzel ellentétben, $T \rightarrow 0$ limeszben, a fajhő az izotróp Δ_0 esetében (a matematikailag *BCS* jellegű) exponenciális T függést adja, de Δ_2, Δ_3 , illetve $\bar{\Delta}_4$ fázisokban ezt hatványszerű hőmérséklet függés váltja fel. Az anizotrópikus spin-sűrűség hullámnak ez egy tipikus kísérleti jegye, kísérletileg is tapasztalt tény²⁶². A Δ_2, Δ_3 és $\bar{\Delta}_4$ fázisokban ez egy T^3 szerinti függés. Megmutattam¹⁸ hogy ez a viselkedés azzal kapcsolatos, hogy a $\mathbf{k}$ függő energiárés pontokban metszi a Fermi felületet.

A tetszőleges Bravais rácsra való kiterjesztését a számításoknak a spin-sűrűség hullám esetére a [19]-ben, míg a töltés-sűrűség hullám esetében vett kiterjesztést a [263]-ban tettem meg.

C. Következmények

Az eredmények világosan mutatják, hogy abban az esetben, ha spinállapot-függő elsőszomszéd kölcsönhatások vannak jelen a rendszerben, a sűrűséghullám formában történő rendeződés energetikailag stabil anizotrópikus formában is megvalósulhat (nesting feltétel fennállásakor). Megfigyelhető, hogy az energetikai stabilitás biztosításában a koegzisztencia fontos szerephez jut és ez kerül kiaknázásra (teljesen más rendeződési formára) a következő fejezetben is.

A publikáció óta több mint 25 év telt el, és az eredmények nehézfermionos rendszerek tulajdonságait könyv formában összefoglaló anyagokba is bekerültek²⁶⁴. Ma inkább a magashőmérsékletű szupravezető anyagokhoz közelálló rendszerekben tanulmányozzák inkább

e rendeződési formát. Van szerző-aki megemlékezik arról a tényről, hogy anizotrópikus sűrűség-hullámok levezetését konkrét anyagrendszerekben, elsők között végeztem²⁶⁵, és az elért eredményeket 27 év után is idézték²⁶⁶.

D. További eredmények

A bemutatott formalizmussal $1/T_1$ relaxációs idő mérési eredményeket magyaráztam elméletileg²⁶¹, az anizotrópikus sűrűség-hullámok szimmetriáit részletesen elemeztem²⁶⁷, és más fázisokkal vett koegzisztencia lehetőségeket is tanulmányoztam²⁶⁸.

VII. RÉTEGES FELÉPÍTÉSŰ SZUPRAVEZETŐK KRITIKUS HŐMÉRSÉKLETÉNEK NŐVEKEDÉSE A SÍKOK KÖZÖTTI CSATOLÁS KÖVETKEZTÉBEN

A. Körülmények

Az előző fejezetben egy olyan fázis jellemzését szemléltettem, amely energiarése anizotrópikus a $\mathbf{k}$ függés miatt. Az ott bemutatott fázis történetesen spin-sűrűség hullám volt, és megjegyzem, hogy Ref.[^{18,19}] publikálásakor az anizotrópikus szupravezető már ismert fogalom volt⁴³. De az akkor ismert anizotrópikus szupravezető háromdimenziós rendszerben előálló fázist jelentett és az a lehetőség, hogy síkok kitüntetett szerepet játszhatnak szupravezető fázis megjelentetésében kevésbé volt tanulmányozott.

Érdemes észrevenni, hogy az előző fejezet energetikailag stabil fázisai koegzisztencia termékeiként állnak elő. Az itt bemutatásra kerülő eredményekből kiderül, hogy a koegzisztencia jelenléte szupravezető esetében is érdekes viselkedést eredményezhet.

Bednorz és Müller 1986-ban publikálták⁴⁶ az első magashőmérsékletű szupravezető kerámiára vonatkozó kísérleti adatokat, és ezek síkos felépítése köztudottá vált. Ezen síkos felépítés miatt a szupravezető energiarésben egy újfajta, $\mathbf{k}$ függésen keresztül fellépő anizotrópia állhat elő, mégpedig egy olyan, amely pl. a síkokra merőleges irányt tünteti ki specifikus $\mathbf{k}$ függéssel. Az alábbiakban megmutatom, hogy egy ilyen rendszer esetében, koegzisztencia révén egy olyan szupravezető fázis jöhet létre, mely kritikus hőmérséklete magasabb a koegzisztenciába belépő individuális szupravezető fázisok saját kritikus hőmérsékleténél.

A bemutatott levezetés 1986 vége - 1987 eleje periódusban történt, a kézirat 1987 júliusában volt publikálásra beküldve. Tudomásom szerint ez az első olyan eredmény, amely síkok közötti (inter-layer) kapcsolat jelenlétében a szupravezető kritikus hőmérsékletének növekedését igazolja.

A témakörhöz tartozó saját publikációk Ref.[^{1,17}]-ban találhatóak, a modell elemzés és számítás részletes előzményei a IIA 2 alfejezetben voltak bemutatva, míg az alkalmazott módszer ismertetése a IV A alfejezetben történt meg.

A rendszer Hamilton operátorára a következő kifejezést használtam

$$\begin{aligned}\hat{H} = & s \sum_{j,\sigma} \int d^2\mathbf{r} \hat{\psi}_{j,\sigma}^\dagger(\mathbf{r}) \left(-\frac{\nabla^2}{2m} - \mu\right) \hat{\psi}_{j,\sigma}(\mathbf{r}) + \frac{s}{2} \sum_{j,l,\sigma} \int d^2\mathbf{r} J_{j,l} \hat{\psi}_{j,\sigma}^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\psi}_{l,\sigma}(\mathbf{r}) \\ & + \frac{s}{2} \sum_{j,l} \sum_{\sigma,\sigma'} \int d^2\mathbf{r} \int d^2\mathbf{r}' \hat{\psi}_{j,\sigma}^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\psi}_{l,\sigma'}^\dagger(\mathbf{r}') V_{j,l}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \hat{\psi}_{l,\sigma'}(\mathbf{r}') \hat{\psi}_{j,\sigma}(\mathbf{r}).\end{aligned}\quad (364)$$

A (364) összefüggésben egy párhuzamosan, egymástól s távolságra elhelyezkedő, síkokból felépített rendszert írok le. A $\hat{\psi}_{j,\sigma}^\dagger(\mathbf{r})$ téroperátor a j síkban, σ spinnel rendelkező és $\mathbf{r}$ pozícióban lévő elektront kelti. A síkok közötti egyrészecske csatolást $J_{j',j} = J(\delta_{j',j+1} + \delta_{j',j-1})$ kifejezéssel adott amely szomszédos síkok közötti hopping folyamatokat engedélyez. A kétrészecske csatolást $V_{j',j}(\mathbf{k}) = V_0\delta_{j',j} + V_1/2(\delta_{j',j+1} + \delta_{j',j-1}) = V_{j',j}$ adja, amely V_0 tagján keresztül síkon belüli, míg V_1 tagja révén egymásmelletti síkok közötti kölcsönhatást vesz figyelembe. Megjegyzem, hogy ezen összefüggésekben $\mathbf{r}$ (és Fourier transzformáltja $\mathbf{k}$) kétdimenziós vektorok, továbbá $V_{j',j}(\mathbf{r}) = (2\pi)^{-2} \int d^2\mathbf{k} V_{j',j}(\mathbf{k}) \exp[-i\mathbf{k}\mathbf{r}]$ teljesül. A matematikai egyszerűsítés kedvéért $V_{j',j}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = V_{j',j}\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ formával számolok, így tehát a V_0, V_1 mennyiségek konstansok (igazolható viszont, hogy a végeredmény szintjén ezen feltételezés nem játszik lényeges szerepet).

Megemlítem, hogy a (364) alkalmazása síkos felépítésű rendszerekre nagyon gyakori volt^{54–56}, de p -típusú szupravezető, illetve felső kritikus tér értékelésére próbálták használni.

Az (1)-nek megfelelően a normális Green függvényt $G_{j,j'}^{\sigma,\sigma'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \langle\langle \hat{\psi}_{j,\sigma}(\mathbf{r}) | \hat{\psi}_{j',\sigma'}^\dagger(\mathbf{r}') \rangle\rangle$ definiálja, míg a (6)-nak megfelelően a szupravezetőt jellemző anomális Green függvényt $F_{j,j'}^{\sigma,\sigma'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \langle\langle \hat{\psi}_{j,\sigma}(\mathbf{r}) | \hat{\psi}_{j',\sigma'}(\mathbf{r}') \rangle\rangle$ írja le. Ezeket a Green függvényeket csupán $\mathbf{r} - \mathbf{r}'$ különbségtől függőknek tekintettem (a rendszerben szennyeződések nincsenek jelen) és az így kialakuló (síkban lévő geometriai térváltozó szerinti) Fourier transzformáltjaikat jelöltem $G_{j,j'}^{\sigma,\sigma'}(\mathbf{k})$ illetve $F_{j,j'}^{\sigma,\sigma'}(\mathbf{k})$ -val.

A (4) Hartree-Fock jellegű közelítést alkalmazva, majd $T \neq 0$ hőmérsékleten használva a (2) mozgásegyenletet, a következő egyenletrendszer adódik

$$\begin{aligned}(i\omega_n - \xi_{\mathbf{k}})G_{j,j'}^{\sigma,\sigma'}(\mathbf{k}, i\omega_n) &= \delta_{j,j'}\delta_{\sigma,\sigma'} + \frac{1}{2} \sum_l J_{j,l} G_{l,j'}^{\sigma,\sigma'}(\mathbf{k}, i\omega_n) + \sum_{l,\alpha} \Delta_{j,l}^{\sigma,\alpha}(\mathbf{k}) F_{l,j'}^{+\alpha,\sigma'}(\mathbf{k}, i\omega_n), \\ (i\omega_n + \xi_{\mathbf{k}})F_{j,j'}^{+\sigma,\sigma'}(\mathbf{k}, i\omega_n) &= -\frac{1}{2} \sum_l J_{j,l} F_{l,j'}^{+\sigma,\sigma'}(\mathbf{k}, i\omega_n) + \sum_{l,\alpha} \Delta_{j,l}^{*\sigma,\alpha}(\mathbf{k}) G_{l,j'}^{\alpha,\sigma'}(\mathbf{k}, i\omega_n),\end{aligned}\quad (365)$$

ahol $G_{j,j'}^{\sigma,\sigma'}(\mathbf{k}, i\omega_n)$ és $F_{j,j'}^{+\sigma,\sigma'}(\mathbf{k}, i\omega_n)$ a normális és anomális (Matsubara frekvenciától is függő) Green-függvények, $\xi_{\mathbf{k}} = \mathbf{k}^2/(2m) - \mu$, μ a kémiai potenciál, és ω_n a fermionikus Matsubara frekvencia. Továbbmenőleg, a (365)-ben szereplő $\Delta_{j,l}^{\sigma,\sigma'}(\mathbf{k})$, a $\Delta_{j,l}^{\sigma,\sigma'}(\mathbf{k}) = \Delta_{j,l}^{\sigma,\sigma'} = V_{j,l} \langle \psi_{j,\sigma}(\mathbf{r}) \psi_{l,\sigma'}(\mathbf{r}) \rangle$ összefüggéssel adott.

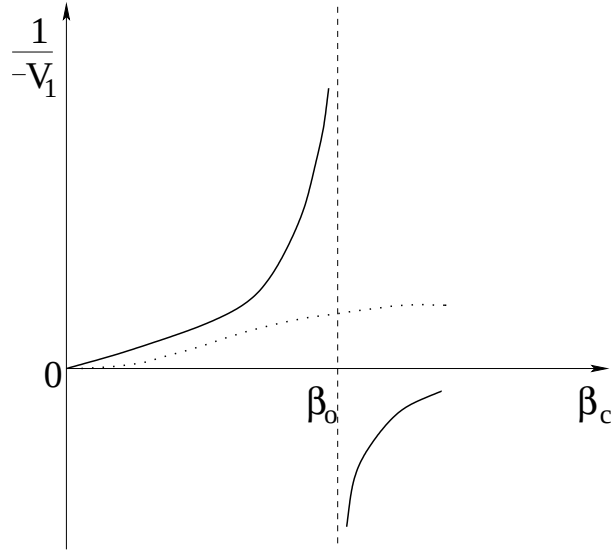
A továbbiakban a (365)-ben a $j - l$ szerinti Fourier transzformálást végrehajtva, ennek Fourier változóját k_z -vel jelölve, a $\Delta_{j,l}^{\sigma,\sigma'}$ -ben lévő átlagot (7) szerint számolva és csupán szinglet spin-állapotú szupravezetőket figyelembe véve, a $\Delta \equiv \Delta(\mathbf{q}, q_z) = \Delta_0 + \Delta_1 \cos(q_z s) + \Delta_2 \sin(q_z s)$ szupravezető energia résre a következő egyenletrendszer adódik

$$\begin{aligned}
\Delta_0 &= -\beta^{-1} \sum_n \int dq V_0 \frac{\Delta(\mathbf{q}, q_z)}{(i\omega_n)^2 - \epsilon_q^2 - |\Delta(\mathbf{q}, q_z)|^2}, \\
\Delta_1 &= -\beta^{-1} \sum_n \int dq V_1 \cos(q_z s) \frac{\Delta(\mathbf{q}, q_z)}{(i\omega_n)^2 - \epsilon_q^2 - |\Delta(\mathbf{q}, q_z)|^2}, \\
\Delta_2 &= -\beta^{-1} \sum_n \int dq V_1 \sin(q_z s) \frac{\Delta(\mathbf{q}, q_z)}{(i\omega_n)^2 - \epsilon_q^2 - |\Delta(\mathbf{q}, q_z)|^2},
\end{aligned} \tag{366}$$

ahol $\epsilon_q = \xi_{\mathbf{q}} + J \cos(q_z s)$, és $\int dq = \int d^2 \mathbf{q} / (2\pi)^2 \int_{-\pi/s}^{\pi/s} dq_z / (2\pi)$.

A bemutatott gondolatmenet nem taglalja, hogy a V_0, V_1 kétrészecske csatolásoknak mi a fizikai eredete. De ha feltételezzük hogy ezek léteznek és atraktív jellegűek, akkor a (366) egyenletrendszer a Matsubara frekvenciák szerinti összegek (8) formában történő elvégzésével, egy síkon belüli (in-layer) T_0 , ($\Delta_0 \neq 0, \Delta_1 = \Delta_2 = 0$); egy síkok közötti (inter-layer) T_1 , ($\Delta_1 \neq 0, \Delta_0 = \Delta_2 = 0$); és egy koegzisztencia T_c , ($\Delta_0 \neq 0, \Delta_1 \neq 0, \Delta_2 = 0$) kritikus hőmérsékleteket ad, amelyek egyenletei

$$\begin{aligned}
1 &= |V_0| \int dq \frac{1}{2\epsilon_q} \tanh \frac{\beta_0 \epsilon_q}{2}, \\
1 &= |V_1| \int dq \frac{\cos^2(q_z s)}{2\epsilon_q} \tanh \frac{\beta_1 \epsilon_q}{2}, \\
[1 - |V_0| \int dq \frac{1}{2\epsilon_q} \tanh \frac{\beta_c \epsilon_q}{2}] [1 - |V_1| \int dq \frac{\cos^2(q_z s)}{2\epsilon_q} \tanh \frac{\beta_c \epsilon_q}{2}] - |V_0| |V_1| I^2(J, \beta_c) &= 0.
\end{aligned} \tag{367}$$



14. Ábra . A koegzisztencia kritikus hőmérséklet inverzének β_c viselkedése az interlayer csatolás V_1 függvényében (folytonos vonal). A $\beta_0 = 1/(k_B T_0)$ az in-layer csatolásból eredő szupravezető kritikus hőmérséklet, míg $\beta_1 = 1/(k_B T_1)$ viselkedését a pontozott vonal adja. Látható, hogy rögzített és vonzó jellegű V_1 -re, $T_c > T_0, T_1$ teljesül.

A (367) egyenlőségekben $\beta_0 = 1/(k_B T_0), \beta_1 = 1/(k_B T_1), \beta_c = 1/(k_B T_c)$, továbbá az $I(J, \beta)$ függvény értelmezése a következő

$$I(J, \beta) = \int dq \frac{\cos(q_z s)}{2\epsilon_q(J)} \tanh \frac{\beta \epsilon_q}{2} \neq 0. \tag{368}$$

A T_c koegzisztencia kritikus hőmérséklet viselkedését a 14. Ábra mutatja. A konkrétan számolt értékek $J \ll \mu$ esetében, és $J \sim 10^{-2}eV$ nagyságrend mellett, $T_0 \sim 10T_1 \sim 10K$, $T_0 \sim T_1 \sim 10K$, $T_0 \sim T_1 = O(10)$ tartományokban a $T_c/T_0 \sim 10$ értéket is eléri.

A kritikus hőmérséklet növekedés matematikai oka könnyen megérthető. Példádom ezt az alábbiakban a $T_c > T_0$ egyenlőtlenséggel. Látható, hogy T_0 értéket a (367) első sora adja. Ennek tudatában, a koegzisztencia T_c -t adó (367) utolsó sorában azt láthatjuk, hogy az utolsó járulékok pozitív, azaz $|V_0||V_1|I^2(J, \beta_c) > 0$ teljesül. Ezért, ahhoz hogy a T_c -t adó (367) utolsó sor igaz legyen,

$$[1 - |V_0| \int dq \frac{1}{2\epsilon_q} \tanh \frac{\beta_c \epsilon_q}{2}] [1 - |V_1| \int dq \frac{\cos^2(q_z s)}{2\epsilon_q} \tanh \frac{\beta_c \epsilon_q}{2}] > 0 \quad (369)$$

egyenlőtlenségnek kell teljesülnie. De általában $|V_1| \ll 1$, így, (369) összefüggésből

$$[1 - |V_0| \int dq \frac{1}{2\epsilon_q} \tanh \frac{\beta_c \epsilon_q}{2}] > 0 \quad (370)$$

ered. A (370) összehasonlítva a (367) első sorával automatikusan $\beta_c < \beta_0$ egyenlőtlenséget eredményez, tehát ténylegesen, $T_c > T_0$. A $T_c > T_1$ igazolása is hasonló gondolatmenet alapján történik.

C. Következmények

A számításaim mutatják, hogy a síkos felépítésű rendszerekben, a síkok közötti kapcsolat következtében a szupravezető energiarés anizotrópikussá válik és ennek következtében, egy koegzisztencia tartományban, a szupravezető rendezettség kritikus hőmérséklete megnő. A szakirodalomban számon tartott hogy e jelenséget az első között jeleztem²⁶⁹. A szakmai oldal még feljegyezte, hogy Inoue et. al.²⁷⁰ cikk, amely 2 hónappal az én eredményem előtt volt publikálásra bküldve, szintén a síkok közötti kapcsolat fontosságát taglalja, de ez tisztán inter-layer járulékokat tartalmaz, amit kísérleti adatok nem erősítettek (és nem erősítenek ma sem) meg. A cikk napjainkban is kap idézeteket^{271,272}.

A magashőmérsékletű szupravezetők esetében viszont megemlítenő, hogy az anyagcsoport további kísérleti tanulmányozása (legalábbis a rézoxid sík tartalmú kerámia típusú rendszereknél) arra a következtetésre vezetett miszerint, a síkok közötti kapcsolat legerősebb járuléka a pár-tuneláció, s ez utóbbit pedig, az én kezdeti, itt elemzett modellem nem vette figyelembe. Más anyagoknál viszont a mechanizmus kísérletileg is alátámasztást nyert²⁷².

D. További eredmények

A problémát réteges felépítésű struktúrába kényszerített rendszer formájában is tanulmányoztam^{273,274}, és szennyeződések hatását is elemeztem^{275,276}. Megmutattam továbbá, hogy a koegzisztencia nyomán nyert kritikus hőmérsékletnövekedés úgy is elérhető, hogy az inter-layer szerepet inter-band szerepkör cseréli fel²⁷⁷, vagy a koegzisztencia maga más típusú rendezettséggel jön létre^{20,278}. Az is aláhúzható, hogy topologikus jellegű rendeződés se veszélyezteti az elért koegzisztencia fázisra vonatkozó eredményeket akkor ha

külső mágneses tér nincs jelen. Mindez azért van így, mert a vortexképződés, amely megbonthatná a síkokon belüli és síkok közötti szupravezető párosodások egymáshoz mért viszonyát, csak egy adott külső mágneses tér érték felett léphet fel.

VIII. SZUPRAVEZETŐ ÉS SPIN-SŰRŰSÉG HULLÁM KOEGZISZTENCIA

A. Körülmények

Az előző két fejezetben koegzisztencia révén kialakuló két érdekes fázist mutattam be amelyek közül az első anizotrópikus spin-sűrűség hullámhoz, a második pedig egy növelt kritikus hőmérsékletű szupravezetőhöz vezetett. Az alábbiakban megmutatom, hogy koegzisztencia nemcsak tisztán spin-sűrűség hullám komponensek, illetve szupravezető fázis komponensek között jöhet létre, hanem előfordulhat az is, hogy közös, spin-sűrűség hullám és szupravezető koegzisztencia is előálljon.

Itineráns antiferromágneses rendezettség és szupravezető fázis közötti koegzisztencia az 1985-1987-es években nehéz-fermionos rendszerekre vetődött fel⁸⁰ Kondo-rács típusú jellemzés esetében, egysávos modellre. A számítások 1987 vége - 1988 első fele periódusban készültek, az eredmények 1988 októberében voltak publikálásra beküldve²¹. Az eredmény lényege abban áll, hogy a spin-sűrűség hullám rendparaméterhez vezető átlagtér közelítés során, ha más rendezettség megjelenésének lehetőségét nem zárjuk ki, automatikusan $(\mathbf{k}, -\sigma; -\mathbf{k} - \mathbf{Q}, \sigma)$ típusú szupravezetőt generáló átlagértékek is megjelennek [itt $\mathbf{Q}$ a fedési (nesting) vektor], melyek a szupravezető fázist itineráns antiferromágnes jelenlétében stabilizálják. Hasonló probléma áll elő Cr ötvözetekre is, csak hogy ez alkalommal a rendszer kétsávós. Ugyanolyan számítástechnikai eljárást alkalmazva kiderül, hogy a stabilizáló faktor jelenléte itt is fontos, de ekkor különböző inter-sáv típusú szupravezetőt generáló átlagértékek játszanak végeredményben stabilizáló szerepet. Erre az esetre vonatkozó eredményeim 1986-ban jelentek meg²⁰.

A témakörhöz tartozó saját publikációk tehát Ref.[^{21,20}]-ban találhatók. Megjegyzem továbbá, hogy a modell elemzés és számítás részletes előzményei a II A 3 alfejezetben voltak bemutatva, míg az alkalmazott módszer ismertetése a IV A alfejezetben történt meg.

B. A modell eredmények

1. Nehéz-fermionos rendszerek esete

A kiinduló Hamilton operátor $\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2$ típusú, hol $\hat{H}_1$ a Hubbard modellt írja le

$$\hat{H}_1 = -\frac{1}{2} \sum_{i,j,\sigma} (t \hat{a}_{i,\sigma}^\dagger \hat{a}_{j,\sigma} + H.c.) - \mu \sum_{i,\sigma} \hat{a}_{i,\sigma}^\dagger \hat{a}_{i,\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{i,\sigma} U \hat{a}_{i,\sigma}^\dagger \hat{a}_{i,\sigma} \hat{a}_{i,-\sigma}^\dagger \hat{a}_{i,-\sigma}. \quad (371)$$

A (371)-ben t a hopping mátrixelem, μ a kémiai potenciál, U a Hubbard kölcsönhatás, és az (i, j) -re vett összegzés csak az elsőszomszéd tagokat érinti. A $\hat{H}_2$ tag spinfüggő elsőszomszéd csatolásokat tartalmaz

$$\hat{H}_2 = -\frac{1}{2} \sum_{\{i_n\}, \sigma, \sigma'} \text{dc_890_14} K(i_1, i_2, i_3, i_4; \sigma, \sigma') \hat{a}_{i_1, \sigma}^\dagger \hat{a}_{i_2, \sigma} \hat{a}_{i_3, \sigma'}^\dagger \hat{a}_{i_4, \sigma'}, \quad (372)$$

melyek segítségével Kondo-rács típusú anyagok jellemezhetőek^{259,279}. A (372) egyenletben előforduló csatolási állandók közül effektíve a $K(i, j, j, i; \sigma, \sigma') = V_1$, $K(i, i, j, j; \sigma, \sigma') = V_2 \delta_{-\sigma, \sigma'} - V_3 \delta_{\sigma, \sigma'}$, $K(i, j, i, j; \sigma, -\sigma) = -V_4$ tagokat használtam.

Megfigyelhető, hogy típusát tekintve, a (371,372) Hamilton operátor a VI. fejezetben használt Hamilton operátor típusával egyezik, továbbá az alkalmazott számítási mód is a VI. fejezetben alkalmazottal identikus. Ennek megfelelően, ha csak spin-sűrűség hullám rendeződést engedek meg, a rendparaméter egyenletek, (359) összefüggéseknek megfelelően

$$\begin{aligned} \Delta_n^a &= g_n^a \frac{1}{N_\Lambda} \sum_{\mathbf{k}} S_n(\mathbf{k}) \Delta_n^a I^a(\mathbf{k}), \\ I^a(\mathbf{k}) &= \frac{1}{2\omega^a} \tanh \frac{\beta\omega^a}{2}, \quad \omega^a = \sqrt{\xi^2 + \Delta^a{}^2}, \\ \Delta^a &= \sum_{n=0}^6 S_n(\mathbf{k}) \Delta_n^a, \end{aligned} \quad (373)$$

ahol Δ^a a spin-sűrűség hullám energiarése, $\xi = -t\gamma_{\mathbf{k}} - \mu$, N_Λ a ráccsomópontok száma, a csatolási állandók

$$\begin{aligned} g_0^a &= U + 6(V_1 + V_2 + V_3), \\ g_n^a &= (V_3 - V_4)(\delta_{n,1} + \delta_{n,2} + \delta_{n,3}) + (V_3 + V_4)(\delta_{n,4} + \delta_{n,5} + \delta_{n,6}), \end{aligned} \quad (374)$$

továbbá (358) összefüggéseknek megfelelően (egyszerű köbös rendszerre amelyben dolgozom)

$$\begin{aligned} S_0(\mathbf{k}) &= 1, \\ S_1(\mathbf{k}) &= 2[\cos(ak_x) + \cos(ak_y) + \cos(ak_z)] = \gamma(\mathbf{k}), \\ S_2(\mathbf{k}) &= \sqrt{6}[\cos(ak_x) - \cos(ak_y)], \\ S_3(\mathbf{k}) &= \sqrt{2}[\cos(ak_x) + \cos(ak_y) - 2\cos(ak_z)], \\ S_4(\mathbf{k}) &= \sin(ak_x), \quad S_5(\mathbf{k}) = \sin(ak_y), \quad S_6(\mathbf{k}) = \sin(ak_z). \end{aligned} \quad (375)$$

Ha most ugyanazon (371,372) Hamilton operátorra csak spin-szinglet, páros módon $\mathbf{k}$ -függő energiaréssal rendelkező szupravezető rendezettséget engedek meg, továbbá a közelítések és a számítás szintjén a VI. fejezetben alkalmazott eljárást identikusan követem, a tisztán szupravezető rendeződésnek megfelelő rendparaméter egyenletek alakja (373) összefüggésekhez hasonlóan

$$\begin{aligned} \Delta_n^s &= g_n^s \frac{1}{N_\Lambda} \sum_{\mathbf{k}} S_n(\mathbf{k}) \Delta_n^s I^s(\mathbf{k}), \\ I^s(\mathbf{k}) &= \frac{1}{2\omega^s} \tanh \frac{\beta\omega^s}{2}, \quad \omega^s = \sqrt{\xi^2 + \Delta^s{}^2}, \\ \Delta^s &= \sum_{n=1}^3 S_n(\mathbf{k}) \Delta_n^s, \end{aligned} \quad (376)$$

ahol Δ^s az így kialakuló szupravezető energiarése, ξ ugyanaz mint (373) esetében, a csatolási állandók

$$g_n^s = \frac{dc}{(V_1 + V_2)(\delta_{n,1} + \delta_{n,2} + \delta_{n,3})}, \quad (377)$$

továbbá, az $S_n(\mathbf{k})$ szimmetriafüggvények definíciója (375) összefüggésekkel egyezik. Megjegyzem, hogy a tiszta szupravezető tárgyalása a Ref.[²⁵⁹]-vel tökéletesen egyezik.

Az alábbiakban megengedem, hogy mindkét (spin-sűrűség hullám és szupravezető) rendeződés elvileg egyszerre is létezzen. Ekkor, $\Delta^s = \sum_n S_n(\mathbf{k})\Delta_n^s$, $\Delta^a = \sum_n S_n(\mathbf{k})\Delta_n^a$ mellett a (373) és (376) rendparaméter egyenletek (ugyanazon átlagtér közelítésben) összecsatolódnak, és a következő formát öltik

$$\begin{aligned} \Delta_n^a &= g_n^a \frac{1}{N_\Lambda} \sum_{\mathbf{k}} S_n(\mathbf{k}) \Delta_n^a I_+^{(a)}(\mathbf{k}), \\ \Delta_n^s &= g_n^s \frac{1}{N_\Lambda} \sum_{\mathbf{k}} S_n(\mathbf{k}) \Delta_n^s I_+^{(s)}(\mathbf{k}), \end{aligned} \quad (378)$$

ahol az $I_\pm$ mag-tagok formája

$$\begin{aligned} I_\pm^s(\mathbf{k}) &= \frac{1}{4\omega_+} \tanh \frac{\beta\omega_+}{2} \pm \frac{1}{4\omega_-} \tanh \frac{\beta\omega_-}{2}, \\ I_\pm^a(\mathbf{k}) &= I_+^s(\mathbf{k}) \pm \frac{\Delta_Q}{(\xi^2 + \Delta^a)^{1/2}} I_-^s(\mathbf{k}), \\ \omega_\pm^2 &= \Delta^s + [(\xi^2 + \Delta^a)^{1/2} \pm \Delta_Q]^2. \end{aligned} \quad (379)$$

Megfigyelhető hogy a koegzisztencia probléma (378) egyenleteibe egy új rendparaméter, Δ_Q , is belép, amely értelmező képlete

$$\Delta_Q = g_Q \frac{1}{N_\Lambda} \sum_{\mathbf{k}} \langle \hat{a}_{\mathbf{k},-\sigma} \hat{a}_{-\mathbf{k}-\mathbf{Q},\sigma} \rangle, \quad g_Q = 6V_4 - U. \quad (380)$$

A (380)-ból a Green függvényeken keresztül levezetett rendparaméter egyenlet alakja

$$\Delta_Q = g_Q \frac{1}{N_\Lambda} \sum_{\mathbf{k}} [\Delta_Q I_+^s(\mathbf{k}) + (\xi^2 + \Delta^a)^{1/2} I_-^s(\mathbf{k})]. \quad (381)$$

A (381)-ben a Q vektor jelentése ugyanaz mint a VI. fejezetben (a 3D egyszerű köbös rendszerben $[1, 1, 1]$ irányba mutató „nesting” vektor). Megjegyzem, hogy a tanulmányozott Hamilton operátor (4) szerinti átlagtér elmélet tárgyalása (380) típusú átlagot automatikusan megjelentet, továbbá spin-sűrűség hullám és szupravezető koegzisztencia esetében, ezen átlagokra (381) zérótól különböző értéket ad.

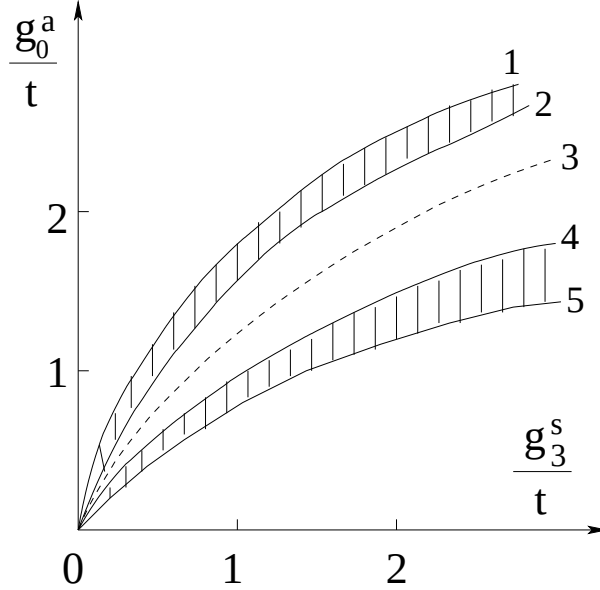
A koegzisztencia probléma tárgyalása így a (378,381) együttes megoldásán alapszik. Ezt elemeztem $T \rightarrow 0$ határesetben. Hogy a kapott megoldás energetikailag is stabil legyen, a belső energia normálfázishoz mért változását is nyomon követtem. Ez utobbi értéket

$$\begin{aligned} \delta E &= \sum_{i=1}^3 \frac{\Delta^s}{g_i^s} + \sum_{i=1}^6 \frac{\Delta^a}{g_i^a} + \frac{\Delta_Q^2}{g_Q} + X, \\ X &= -\frac{1}{N_\Lambda} \sum_{\mathbf{k}} \left\{ \frac{3}{2}(\omega_+ + \omega_-) - \frac{1}{2}[\omega_{1,+} + \omega_{1,-} + \omega_{2,+} + \omega_{2,-} + 2\omega_3] \right\} \end{aligned} \quad (382)$$

adja, ahol $\delta E = E - E_0$, E_0 a $\Delta^s = \Delta^a = \Delta_Q = 0$ fázis energiája, továbbá, az $\omega_{i,\pm}$, $i = 1, 2, 3$, pozitív mennyiségeket az

$$\omega_{1,\pm} = |(\xi^2 + \Delta^a)^{1/2} \pm \Delta_Q|, \quad \omega_{2,\pm} = \sqrt{\Delta^s{}^2 + [\xi \pm \Delta_Q]^2}, \quad \omega_3 = \sqrt{\Delta^s{}^2 + [\xi^2 + \Delta^a]}, \quad (383)$$

egyenlőségek adják (az összefüggéseket (11) $T \rightarrow 0$ határértéke eredményezi). Az együttesen elemzett (378,381,382) egyenletrendszer stabil és „tisztá” (egyedül megjelenő) $\Delta_Q \neq 0, \Delta^s = \Delta^a = 0$ fázist nem eredményez, de energetikailag stabil rendezett $\Delta^s \neq 0, \Delta^a \neq 0$ koegzisztencia fázisok $\Delta_Q \neq 0$ jelenlétében jelentkeznek csupán (lásd a 15. Ábrát).



15. Ábra . A tanulmányozott rendszer $T = 0$ energetikailag stabil fázisdiagramja a $(g_0^s/t, g_3^s/t)$ síkban. A tiszta és stabil $\Delta^s \neq 0, \Delta^a = \Delta_Q = 0$ szupravezető, ($\Delta^a \neq 0, \Delta^s = \Delta_Q = 0$ spin-sűrűség hullám), megoldása a g_3^s/t -tengely és 5-ös görbe, (g_0^a/t -tengely és 1-es görbe) között helyezkedik el. A 3-as görbe jelenti a szupravezető és spin-sűrűség hullám fázisok közötti határvonalat, ha $\Delta^s \neq 0, \Delta^a \neq 0$ koegzisztenciát nem vesznek figyelembe. A 2-es és 4-es görbék között metastabil $\Delta^s \neq 0, \Delta^a \neq 0, \Delta_Q = 0$ koegzisztencia fázis van jelen. A besatírozott területek jelentik a stabil $\Delta^s \neq 0, \Delta^a \neq 0, \Delta_Q \neq 0$ koegzisztencia fázist.

2. Kétsávú rendszerek esete

A Cr ötvözetekhez hasonló kétsávú és spin-sűrűség hullámot engedélyező rendszerek Hamilton operátora volt a kiindulópont²⁸

$$\begin{aligned} \hat{H}_0 &= \sum_{\mathbf{k}, \alpha} \xi_a \hat{a}_{\mathbf{k}, \alpha}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}, \alpha} + \sum_{\mathbf{k}, \alpha} \xi_b \hat{b}_{\mathbf{k}, \alpha}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}, \alpha}, \\ \hat{H}_1 &= \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \sum_{\alpha, \beta, \gamma, \delta} (g_c \delta_{\alpha, \beta} \delta_{\gamma, \delta} + g_s \sigma_{\alpha, \beta} \cdot \sigma_{\gamma, \delta}) (\hat{a}_{\mathbf{k}, \alpha}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}, \beta} \hat{b}_{\mathbf{k}', \gamma}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}', \delta} + H.c.), \end{aligned} \quad (384)$$

Itt $\alpha, \beta, \gamma, \delta$ spin indexek, továbbá $\xi_a = \epsilon + \delta_\mu$, $\xi_b = -\epsilon + \delta_\mu$ a két sáv (a és b) diszperziórelációja, amely $\delta_\mu = 0$ esetben teljes „nesting” feltételt (lásd (5) utáni megjegyzést) biztosít. A $\delta_\mu \neq 0$ jelenléte dopolással érhető el, amely következtében tökéletlen (imperfekt) nesting kondíció áll elő. A $\hat{a}_{\mathbf{k}, \alpha}^\dagger$ illetve $\hat{b}_{\mathbf{k}, \alpha}^\dagger$ az „a”, illetve „b” sáv (kanonikus Fermi) keltő operátorai. A $\hat{H}_1$ -ben szereplő két sáv közötti kétrészecske kölcsönhatás a g_c , illetve g_s csatolási állandóin keresztül a spinszerinti függés lehető legáltalánosabb felbontásban⁶⁴ szerepel (σ a Pauli mátrixot jelöli).

A (384)-ben megjelenő kölcsönhatási tagok csupán sűrűség hullám szerű rendeződést engedélyeznek²⁸, mégpedig g_c töltés, g_s pedig spin sűrűség hullámot. Ahhoz hogy szupravezető fázis is megjelenhessen a rendszerben, egy BCS típusú Hamilton operátor tagot is figyelembe veszünk, amely formája

$$\hat{H}_2 = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\alpha, \beta} \sum_{i, j} \lambda_{i, j} \hat{c}_{i, \alpha, \mathbf{k}}^\dagger \hat{c}_{j, \beta, -\mathbf{k}}^\dagger \hat{c}_{j, \beta, -\mathbf{k}} \hat{c}_{i, \alpha, \mathbf{k}}. \quad (385)$$

Ezen összefüggésben $\lambda_{i, j}$ a csatolási állandó, $i, j = a, b$ a sáv indexek, továbbá $\hat{c}_a^\dagger \equiv \hat{a}^\dagger$ illetve $\hat{c}_b^\dagger \equiv \hat{b}^\dagger$ összefüggések teljesülnek.

A rendszer teljes Hamilton operátora $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1 + \hat{H}_2$. A normális és anomális [lásd (5,6)] Green függvények

$$G_{i, j}^{\alpha, \gamma} = \langle \langle \hat{c}_{i, \mathbf{k}, \alpha} | \hat{c}_{j, \mathbf{k}, \gamma}^\dagger \rangle \rangle, \quad F_{i, j}^{*, \alpha, \gamma} = \langle \langle \hat{c}_{i, \mathbf{k}, \alpha}^\dagger | \hat{c}_{j, -\mathbf{k}, \gamma}^\dagger \rangle \rangle, \quad (386)$$

ahol $G_{i, j}^{\alpha, \gamma}$ az $i = j = a$ illetve $i = j = b$ esetben adja a két sáv normál Green függvényét, illetve $i = a, j = b$, vagy $i = b, j = a$ esetben a sűrűség hullámokhoz vezető anomális Green függvényt (ennek belátása érdekében megjegyzem, hogy $\hat{a}_{\mathbf{k}' \rightarrow \mathbf{k} + \mathbf{Q}, \alpha} = \hat{b}_{\mathbf{k}, \alpha}$ teljesül). Az $F_{i, j}^{\alpha, \gamma}$ a szupravezető fázis anomális Green függvénye amely $i = j = a$, vagy $i = j = b$ esetben sávon belüli szupravezető rendezettséget, illetve $i = a, j = b$, vagy $i = b, j = a$ esetében sávok közötti (intersáv) szupravezető rendezettséget eredményez majd. A Green függvények segítségével (7) alapján nyert rendparaméter egyenletek

$$\begin{aligned} \Delta_c &= \frac{g_c}{2} \beta^{-1} \sum_n \sum_{\alpha, \gamma} \delta_{\alpha, \gamma} \sum_{\mathbf{k}} G_{b, a}^{\alpha, \gamma}(\mathbf{k}, i\omega_n) \\ \Delta_s &= \frac{g_s}{2} \beta^{-1} \sum_n \sum_{\alpha, \gamma} \sigma_{\alpha, \gamma}^z \sum_{\mathbf{k}} G_{b, a}^{\alpha, \gamma}(\mathbf{k}, i\omega_n) \\ \Delta_{i, j} &= \frac{\lambda_{i, j}}{2} \beta^{-1} \sum_n \sum_{\alpha, \gamma} \Pi_{\alpha, \gamma} \sum_{\mathbf{k}} F_{i, j}^{\alpha, \gamma}(\mathbf{k}, i\omega_n), \end{aligned} \quad (387)$$

ahol Δ_c töltés-sűrűség hullám, Δ_s spin-sűrűség hullám, továbbá $\Delta_{i, j}$ szupravezető rendparamétert jelöl. Megjegyzem, hogy mindhárom rendparaméter $\mathbf{k}$ független formában jelenik meg. A (387)-ben az n szerinti összeg a Matsubara frekvencia szerinti összeget jelöli, $\Pi_{\alpha, \gamma} = i\sigma_{\alpha, \gamma}^y$, továbbá a spin-sűrűség hullám spin irányítása határozza meg a z tengely irányítását.

Mindezek után, a (4) átlagtér közelítés, majd a (2) Gorkov mozgásegyenlet a következő Green függvény egyenletrendszer eredményezi

$$\begin{array}{c} \text{dc_890_14} \\ \left(\begin{array}{cccccccc} e_a^- \mathbf{1} & 0 & -\tilde{\Delta} & 0 & -\tilde{\Delta}_{a,a} & -\tilde{\Delta}_{b,a} & 0 & 0 \\ 0 & e_a^- \mathbf{1} & 0 & -\tilde{\Delta} & 0 & 0 & -\tilde{\Delta}_{a,a} & -\tilde{\Delta}_{b,a} \\ -\tilde{\Delta} & 0 & e_b^- \mathbf{1} & 0 & -\tilde{\Delta}_{a,b} & -\tilde{\Delta}_{b,b} & 0 & 0 \\ 0 & -\tilde{\Delta} & 0 & e_b^- \mathbf{1} & 0 & 0 & -\tilde{\Delta}_{a,b} & -\tilde{\Delta}_{b,b} \\ \tilde{\Delta}_{a,a}^* & 0 & \tilde{\Delta}_{a,b}^* & 0 & e_a^+ \mathbf{1} & 0 & \tilde{\Delta} & 0 \\ 0 & \tilde{\Delta}_{a,a}^* & 0 & \tilde{\Delta}_{a,b}^* & 0 & e_a^+ \mathbf{1} & 0 & \tilde{\Delta} \\ \tilde{\Delta}_{b,a}^* & 0 & \tilde{\Delta}_{b,b}^* & 0 & \tilde{\Delta} & 0 & e_b^+ \mathbf{1} & 0 \\ 0 & \tilde{\Delta}_{b,a}^* & 0 & \tilde{\Delta}_{b,b}^* & 0 & \tilde{\Delta} & 0 & e_b^+ \mathbf{1} \end{array} \right) \begin{pmatrix} \tilde{G}_{a,a} \\ \tilde{G}_{a,b} \\ \tilde{G}_{b,a} \\ \tilde{G}_{b,b} \\ \tilde{F}_{a,a}^* \\ \tilde{F}_{a,b}^* \\ \tilde{F}_{b,a}^* \\ \tilde{F}_{b,b}^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{1} \\ 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \end{array} \quad (388)$$

Ezen egyenletben $\tilde{A}$ (ahol A lehetséges értékei $\Delta, \Delta_{i,j}, \Delta_{i,j}^*, G_{i,j}, F_{i,j}^*$), spintérben vett 2×2 mátrixokat jelölnek, továbbá $\tilde{\Delta}_{\sigma,\sigma} = \Delta_c + \sigma \Delta_s$ és $\tilde{\Delta}_{\sigma,-\sigma} = 0$ ahol $\sigma = +1$ és $\sigma = -1$ a $\sigma = \uparrow$ és $\sigma = \downarrow$ értékeknek felelnek meg. Továbbmenőleg, $\mathbf{1}$ a 2×2 egység mátrix és $e_{a,(b)}^\pm = i\omega_n \pm \xi_{a,(b)}$.

A (388) megoldása közben $|\Delta_{a,a}| = |\Delta_{b,b}|$ feltételezést tettem, mivel fizikai ok más típusú megoldás előállítását nem indokolta. Ez esetben két fajta megoldástípust találtam ($\lambda_{a,b} = \lambda_{b,a}, \lambda_{a,a} = \lambda_{b,b} = \lambda$ feltételezéssel dolgoztam), mégpedig i) $\Delta = \Delta_{a,a} = \Delta_{b,b}, \Delta_{a,b} \neq 0$, amelyet az alábbiakban szimmetrikusnak, és ii) $\Delta = \Delta_{a,a} = -\Delta_{b,b}, \Delta_{a,b} = 0$, amelyet az elkövetkezőkben aszimmetrikusnak nevezek. Ilyen körülmények mellett a Green függvényekre adódó megoldások a következők. A $\tilde{G}_{i,j}$ esetében

$$\begin{aligned} G_{aa,(bb)}^{\alpha,\beta} &= K[(\omega + \delta_+)(\omega^2 - \delta_-^2) + 2\eta\Delta\Delta_\sigma\Delta_{a,b} - \Delta^2(\omega + \delta_{+,(+)}) - \Delta_\sigma^2(\omega - \delta_{-,(+)}) \\ &\quad - \eta\Delta_{a,b}^2(\omega + \delta_{-,(+)})], \\ G_{a,b}^{\alpha,\beta} &= G_{b,a}^{\alpha,\beta} = K\{\Delta_\sigma[(\omega + \delta_\mu)^2 - \epsilon^2 - \Delta_\sigma^2 - \eta\Delta_{a,b}^2 - \eta_1\Delta^2] - 2\eta\Delta\Delta_{a,b}(\omega + \delta_\mu)\}. \end{aligned} \quad (389)$$

A jelölések elmagyarázása érdekében a következőket kell elmondanom. $K = 1/[\omega^2 - \omega_+^2(\sigma)][\omega^2 - \omega_-^2(\sigma)]$ továbbá ω az $i\omega_n$ sűrített jelölése. Ezen túlmenőleg (389)-ben csak $\alpha = \beta = \sigma$ eset fordul elő, ahol $\sigma = \pm 1$. A σ függő mennyiségek értékei és a jelölések a következők

$$\begin{aligned} \delta_\sigma &= \delta_\pm = \delta_\mu \pm \epsilon, \quad \Delta_\sigma = \Delta_\pm = \Delta_c \pm \Delta_s, \quad (\delta\tilde{\mu})^2 = \delta_\mu^2 + \eta\Delta_{a,b}^2, \\ \omega_\pm^2(\sigma) &= (E_\sigma \pm \delta\tilde{\mu})^2 + \tilde{\Delta}^2(\sigma), \quad E_\sigma = \sqrt{\epsilon^2 + \tilde{\Delta}_\sigma^2}, \\ \tilde{\Delta}^2(\sigma) &= \eta(\delta\tilde{\mu})^{-2}(\delta_\mu\Delta - \Delta_\sigma\Delta_{a,b})^2 + \Delta^2(1 - \eta)(1 - \frac{\Delta_\sigma^2}{\delta_\mu^2}), \\ \tilde{\Delta}_\sigma^2 &= \eta(\delta\tilde{\mu})^{-2}(\delta_\mu\Delta_\sigma + \Delta\Delta_{a,b})^2 + \Delta_\sigma^2(1 - \eta)(1 + \frac{\Delta^2}{\delta_\mu^2}). \end{aligned} \quad (390)$$

Ezen túlmenőleg η az $+1$, illetve 0 , továbbá η_1 az $+1$, illetve -1 a szimmetrikus, illetve az aszimmetrikus megoldások esetében.

Az $F_{i,j}^{*,\alpha,\beta}$ Green függvényekre kapott megoldások a következők

$$F_{a,a}^{*,\alpha,\beta} = -\sigma K[\Delta(\Delta^2 + \eta_1 \Delta_\sigma^2 - \eta_1 \Delta_{a,b}^2 - \omega_-^2 - \eta_1 \delta_-^2) - 2\eta \Delta_\sigma \Delta_{a,b} \delta_-],$$

$$F_{a,b}^{*,\alpha,\beta} = F_{b,a}^{*,\alpha,\beta} = -\sigma \eta K\{\Delta_{a,b}[\Delta_{a,b}^2 - \Delta^2 + \Delta_\sigma^2 - (\omega + \epsilon)^2 + \delta_\mu^2] - 2\Delta \Delta_\sigma \delta_\mu\}, \quad (391)$$

ahol ezúttal ($\alpha = \downarrow, \beta = \uparrow$) jelenti a $\sigma = +1$ értéket, ($\alpha = \uparrow, \beta = \downarrow$) adja a $\sigma = -1$ értéket, és az $\alpha = \beta$ komponensek értéke zéró. A további jelölések a (389) esetében bemutatott jelölésekkel identikusak [lásd (390) összefüggéseket].

Hangsúlyoznom kell, hogy a dopolás (δ_μ) is szerepet játszik a megoldások milyenségében. A $\delta_\mu = 0$ helyzet a félig töltött rendszernek felel meg amely esetében 2 részecske van jelen ráccsomópontonként. Az ettől való eltérést tükrözi a

$$\delta n = \frac{1}{N_\Lambda} \sum_{\mathbf{k}} [2 - \beta^{-1} \sum_n \sum_\alpha \sum_{i=a,b} G_{i,i}^{\alpha,\alpha}] \quad (392)$$

menyiség amelyet a számítások során az $n = \delta n / 4N(0)$ formájában fogok használni, ahol $N(0)$ a Fermi nivón vett állapotsűrűség.

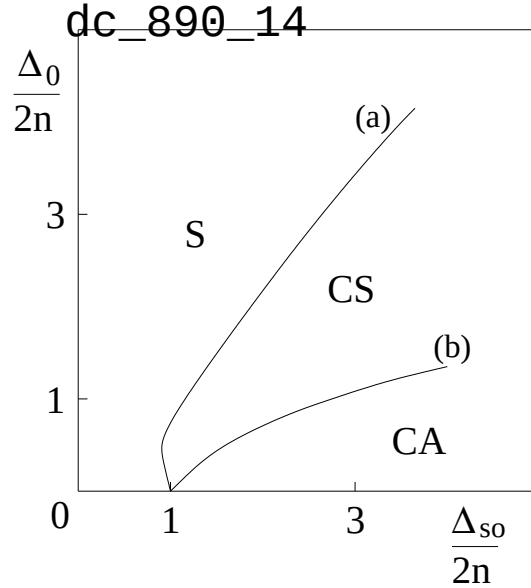
A kalkulatív rendparaméter egyenletek a (389,391) Green függvények (387)-be való helyettesítése nyomán adódnak, ahol a Matsubara frekvencia szerinti összegzést (8) alapján kell végezni, továbbá a megoldások esetében fellépő dopolás nagyságát (392) adja. A Matsubara frekvenciák szerinti összegzés elvégzése után a számolás (az energetikai stabilitás ellenőrzésével együtt – ez (11) $T \rightarrow 0$ limesze alapján volt figyelembe véve $T \rightarrow 0$ esetre), az integrálok $(1/N_\Lambda) \sum_{\mathbf{k}} \rightarrow \int N(\epsilon) d\epsilon \rightarrow N(0) \int_{-\Omega_o}^{+\Omega_o} d\epsilon$ szerinti elvégzésével (ahol Ω_o a vágási energia), numerikusan történt.

A legtöbb kétsávós rendszer nem rendelkezik tökéletes fedési (nesting) feltétellel, ezért az alábbiakban az $n \neq 0$ esetre vett eredményeket mutatom be. Az ez esetben megjelenő koegzisztencia tartományokat a 16. Ábra szemlélteti $T = 0$ hőmérsékleten. Ezen diagram $\Delta_c = 0$ esetben adódik, mindhárom fázis szupravezető, de ezek közül az S tiszta fázis mellett a CS és CA koegzisztencia jellegűek (szupravezető és spin-sűrűség hullám rendparaméterek egyszerre léteznek), továbbá CS esetében szimmetrikus, míg CA esetében aszimmetrikus a szupravezető fázis (lásd a szöveget (389) felett). Megjegyzem, hogy a CS esetben a stabilizáló faktor $\Delta_{a,b}$ (amely $\hat{a}_{\mathbf{k}' \rightarrow \mathbf{k} + \mathbf{Q}, \sigma} \rightarrow \hat{b}_{\mathbf{k}, \sigma}$ miatt pontosan a (380)-ben értelmezett Δ_Q -nak megfelelő mennyiség), illetve a CA esetben a δ_μ jelenléte (azaz a dopolás).

A 16. Ábra tengelyeinek értelmezése céljából megemlítem, hogy

$$\Delta_0 = 2\Omega_o \exp[-1/|\lambda|N(0)], \quad \Delta_{s0} = 2\Omega_o \exp[-1/|g_s|N(0)]. \quad (393)$$

Azt jegyzem még meg, hogy a (387,389-392) egyenletek segítségével a spin-sűrűség hullám - szupravezető koegzisztencia fázis kritikus hőmérsékletére $T_c^2 \sim (n - n_c)$ összefüggést kaptam eredményül (itt n_c egy kritikus koncentrációt jelöl), amely a kísérleti eredményeket jól visszaadja^{77,91,280}.



16. Ábra . A $T = 0$, $\Delta_c = 0$ és $n \neq 0$ esetében kapott fázisdiagram a $(\Delta_0/2n, \Delta_{s0}/2n)$ paraméter térben. Az S,CS,CA fázisok sorban tiszta szupravezető, szimmetrikus esetre fennálló koegzisztencia, illetve aszimmetrikus esetre fennálló koegzisztencia tartományokat jelölnek. Az (a) és (b) görbék a fázisválasztó vonalak.

C. Következmények

A levezetett eredmények mutatják, hogy olyan rendeződés, mely szupravezető és spinsűrűség hullám együttes létezésével jár, Kondo-rácshoz hasonló nehézfermionos rendszerekben $\Delta_Q \neq 0$ esetében léphet fel energetikailag stabil formában. A szakirodalmi adatok szerint, a Δ_Q ilyenszerű szerepének gondolata Fenton csoportjából származik²⁸¹ 1983-ból. A bemutatottak szerint, az elképzelés konkrét esetekben megvalósulhat. A levezetett eredmények két Review of Modern Physics összefoglalóba bekerültek²⁸², és nehézfermionos rendszerekben fellépő szupravezető fázisokat összefoglaló könyvbe is szerepelnek²⁸³. Megemlítem még, hogy majdnem 28 évre a végzett számításoktól, a Δ_Q tanulmányozott koegzisztenciákban vett fontosságát továbbra is idézik, ezúttal a multiorbitális modellekkel leírható rendszerek esetében²⁸⁴. Az eredményeket 2010 után is idézték^{285,286}.

Kétsávós rendszerekre számolt eredmények azt mutatják, hogy ez esetben bizonyos mértékig az intersáv szupravezető párosodás játsza matematikailag a stabilizáló Δ_Q szerepét, de itt a nesting-feltételt teljesítő $\mathbf{k}$ -tartomány csökkentése (azaz δ_μ növekedése) is befolyásolhatja a koegzisztencia fázis stabilizálását. Megemlítem, hogy e vonalon számolt eredményeimet nagyon részletesen letesztelték kísérletileg²⁸⁷. Ez a tesztelés $Cr - Mo - Ru$ ötvözetekre történt és rendkívül jó minőségűnek bizonyult (7.5 oldalon 8-szor idezett eredmények, több képlet eredmény átmásolása mellett). Rev. Mod. Phys. összefoglalóba is bekerültek az adatok²⁸⁸.

Szupravezető és spin-sűrűség hullám koegzisztenciát (többnyire kétsávós) rendszerekben továbbra is tanulmányoztam^{277,278}, de főképp magashőmérsékletű szupravezető családba tartozó anyagok esetében. Ez esetben is megállapítható volt, hogy intersáv csatolások mellett hogy a koegzisztencia kialakulásában szerepet játszanak, hozzájárulnak a szupravezető kritikus hőmérséklet növeléséhez is.

IX. SPIN-SŰRŰSÉG HULLÁM FÁZIS A PERIODIKUS ANDERSON MODELLBEN

A. Körülmények

Eddig két előző fejezetben (VI,VIII) volt szó spin-sűrűség hullámról, mindkét esetben átlagtér elmélet szintjén Green függvény technikával jellemezve. Korrelációs hatások, egy ilyen leírásban kevésbé vannak benne. A valóságban lejátszódó jelenségek azonban (főképp akkor ha rendeződés áll elő) általában erőteljesen korreláltak, és ez még jobban kihangsúlyozódik akkor, amikor a kétrészecske kölcsönhatás csatolási állandóját teljes paraméter tartományán változtatjuk. Így vetődött fel annak a szükségessége, hogy rendezettség megjelenését korrelációs hatások erőteljesebb figyelembevétele mellett tanulmányozzam. Ezt spin-sűrűség hullám viszonylatában teszem meg az alábbiakban, kétsávós rendszerben, egy Gutzwiller projektált variációs hullámfüggvény figyelembevétele mellett. A VIII. fejezet második felében érintve voltak már kétsávós rendszerek, de az alábbiakban egy prototípus kétsávós rendszer, éspedig a periodikus Anderson modell (PAM) kerül bonckés alá.

A kilencvenes évek elején a nehézfermionos rendszerek leírásában kulcs-szerepet játszó PAM jellemzése fontos kihívás volt, és főként a perturbatív leírt nagy és kis kölcsönhatások tartományának valamilyen formában történő összekapcsolása jelentett problémát. 1992-ben Müller-Hartmann csoportja egy $\mathbf{k}$ -függő variációs hullámfüggvényt javasolt¹⁰⁸ mely ezen feladatot eléggé jól ellátta, de kiderült, hogy a részecske-lyuk szimmetrikus esetre ez egy egyrészecske-szorzat típusú hullámfüggvény, amely valódi kétrészecske korrelációs hatásokat egyáltalán nem tartalmaz. Ezen a tényen javítottam azáltal, hogy a $\mathbf{k}$ -függő részre Gutzwiller korrelátort alkalmaztam. Az új variációs hullámfüggvény sokat javított a szimmetrikus PAM azelőtti jellemzésén, és a rendszer fázisdiagramjában spin-sűrűség hullám fázist mutatott ki.

A fejezethez tartozó saját publikáció Ref.[¹⁰]-ben található, és a részletes tárgykört érintő előzmények a II A 4. alfejezetben voltak bemutatva. Az alkalmazott módszerre vonatkozólag megemlítem, hogy a Gutzwiller hullámfüggvénnyel való számolás (általában vett) részleteit a IV B. alfejezet tartalmazza, továbbá a PAM esetében alkalmazott módszer részletes bemutatása a IV D. alfejezetben történt meg.

A PAM modellt lokális hibridizációs tag jelenlétében és direkt f -sáv hiányában a következő Hamilton operátor jellemzi [lásd (146)]

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{k},\sigma} \epsilon_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma} + E_f \sum_{\mathbf{k},\sigma} \hat{f}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \hat{f}_{\mathbf{k},\sigma} + V \sum_{\mathbf{k},\sigma} (\hat{f}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma} + \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \hat{f}_{\mathbf{k},\sigma}) + U \sum_{\mathbf{i}} \hat{n}_{\mathbf{i},\uparrow}^f \hat{n}_{\mathbf{i},\downarrow}^f, \quad (394)$$

ahol a c -sáv diszperziós relációja d -dimenzióban $\epsilon_{\mathbf{k}} = -2t \sum_{i=1}^d \cos k_i$ formában használt, E_f az f -nivó lokális energiája, V a hibridizáció erőssége és U a Hubbard kölcsönhatás nagysága. Az alábbiakban csak a szimmetrikus esetet ($E_f = -U/2$) tanulmányozom, mely a szakirodalomban szimmetrikus PAM néven ismeretes, és amely jellemzője, hogy elektron-lyuk szimmetriát mutat.

Az alkalmazott variációs hullámfüggvény formája [lásd (141,145)]

$$\begin{aligned} |\Psi_g\rangle &= g^{\hat{D}} |\Psi_0\rangle, \\ |\Psi_0\rangle &= \prod'_{\mathbf{k},\sigma} [(\bar{u}_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \hat{f}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger + \bar{z}_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\sigma}^\dagger \hat{f}_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\sigma}^\dagger) + \sigma(\bar{v}_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\sigma}^\dagger \hat{f}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger + \\ &\quad \bar{w}_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \hat{f}_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\sigma}^\dagger + \bar{x}_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger + \bar{y}_{\mathbf{k}} \hat{f}_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\sigma}^\dagger \hat{f}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger)] |0\rangle, \end{aligned} \quad (395)$$

ahol $\hat{D} = \sum_{\mathbf{i}} \hat{n}_{\mathbf{i},\uparrow}^f \hat{n}_{\mathbf{i},\downarrow}^f$, $|0\rangle$ a vákuum állapot, a $\prod'_{\mathbf{k}}$ jelentése szerint a szorzatot csak $\epsilon_{\mathbf{k}} \leq 0$ értékekre kell végezni, a nesting vektor $\mathbf{Q} = (\pi, \dots, \pi)$ (hiperköbös rendszer), és $g, \bar{u}_{\mathbf{k}}, \bar{z}_{\mathbf{k}}, \dots, \bar{y}_{\mathbf{k}}$ variációs paraméterek, melyek g kivételével $\mathbf{k}$ függők. A (395) kialakulásának előzményeit részletesen pontoztam a II A 4. alfejezetben és az alkalmazott módszer bemutatásakor (IV D. alfejezet) a vele való számolási módszert is részletesen ismertettem. Csupán azt húzom itt alá, hogy $|\Psi_0\rangle$ a tanulmányozott esetben vett legáltalánosabb spinsűrűség hullám hullámvektor, amelyre, a korrelációs hatások figyelembevételével végett $|\Psi_g\rangle$ egy Gutzwiller korrelátort alkalmaz.

A következő lépések a variációs módszer standard eljárási útját követik. Ezek közül legelőször az alapállapot energiát (E_g) kell kifejezni, majd minimizálni a variációs paraméterek szerint, megkapva a rendszer (variációs) alapállapot hullámvektorát. Ennek ismeretében aztán különböző mennyiségek alapállapot várható értéke kiszámítható az alapállapot fizikai jellemzése céljából.

Ezen vonalat követve a $\langle \dots \rangle = \langle \Psi_g | \dots | \Psi_g \rangle / \langle \Psi_g | \Psi_g \rangle$ várhatóértékeket $d = \infty$ (itt d a dimenzió) közelítésben számolom ki (lásd IV D. alfejezet) minek következtében E_g és a hozzá kapcsolódó járulékok a következő formát öltik

$$\begin{aligned} E_g &= \langle \hat{H} \rangle = \sum_{\mathbf{k},\sigma} \epsilon_{\mathbf{k}} \langle \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma} \rangle_0 + 2V \sqrt{q} \sum_{\mathbf{k},\sigma} \langle \hat{f}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma} \rangle_0 + UL(d^f - \frac{1}{2}), \\ \langle \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma} \rangle &= \langle \hat{n}_{\mathbf{k},\sigma}^c \rangle_0, \quad \langle \hat{f}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \hat{f}_{\mathbf{k},\sigma} \rangle = \frac{1}{2}(1 - q) + q \langle \hat{n}_{\mathbf{k},\sigma}^f \rangle_0, \\ q &= \frac{4d^f}{(1 - 16\Delta_f^2)} [(0.5 - d^f + 2\Delta_f)^{1/2} + (0.5 - d^f - 2\Delta_f)^{1/2}]^2, \\ d^f &= \langle \hat{D} \rangle, \quad \Delta_f = \frac{1}{L} \sum_{\mathbf{k}} \langle \hat{f}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \hat{f}_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\sigma} \rangle_0, \quad \langle \hat{f}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma} \rangle_0 = 4x_{\mathbf{k}}(v_{\mathbf{k}} - w_{\mathbf{k}}), \end{aligned} \quad (396)$$

ahol $\langle \dots \rangle_0$ számolása egy renormált koeficienssekkel rendelkező $|\Phi_0\rangle$ hullámfüggvény szerint történik [lásd (144)], mely formája (395)-ben lévő $|\Psi_0\rangle$ formájával tökéletesen identikus, és amely variációs paraméterei (a matematikai pontosság végett) $\bar{u}_{\mathbf{k}}, \bar{z}_{\mathbf{k}}, \dots, \bar{y}_{\mathbf{k}}$ helyett, $u_{\mathbf{k}}, z_{\mathbf{k}}, \dots, y_{\mathbf{k}}$ -val vannak jelölve, továbbá L a rács csomópontok száma.

A (396) megértése céljából a következőket szeretném elmondani. Amint azt a IV B. alfejezet tükrözi, egy Gutzwiller projektált hullámfüggvénnyel pontosan dolgozni véges ($d=1,2,3$) dimenzióban nagyon nehéz. Ezért, $d = \infty$ esetben végezve a számításokat (137-139) formában a probléma tárgyalása nagyon leegyszerűsödik, és ezáltal E_g kifejezése (147) bonyolult formáról, (148) matematikailag kezelhető alakra egyszerűsödik. Ennek az a nagy előnye, hogy az eredeti Gutzwiller projektált hullámfüggvénnyel vett számolás (azaz $\langle \dots \rangle$ kifejezése), a Gutzwiller projektor nélkül végzendő számolásra (azaz $\langle \dots \rangle_0$ átlagértékek kiszámolására) vezethető vissza. Mindezek után megemlítem hogy (396) összefüggésekben, az első sor (153), a második sor (157), a harmadik sor (156) egyenlőségekből származik. A (396) negyedik sorának első tagja definíció, a második tag (149) első sora és (150), a harmadik tag pedig (154) második egyenlőségéből származik. Az itt felhasznált minden reláció, a módszer bemutatásakor, a IV D. alfejezetben volt levezetve.

A (396) egyenletekben szereplő mennyiségek fizikai tartalmára vonatkozólag a következőket húzom alá. A Δ_f , a rendszerben létrejövő és f -elektronok által keltett spin-sűrűség hullám (SDW) amplitudóját jelöli. Mivel az f és c elektronok a Hamilton operátor hibridizációs tagja révén csatoltak, az f elektronok spin-sűrűség hullám rendeződése, a c elektronokra is egy hasonló spin-sűrűség hullám rendeződést indukál, melynek az amplitudóját Δ_c jelöli. A Δ_f, Δ_c járulékok $\langle \hat{n}_{\mathbf{j},\sigma}^f \rangle_0, \langle \hat{n}_{\mathbf{j},\sigma}^c \rangle_0$ mennyiségekbe épülnek bele (lásd (396) második sora), ezen utóbbiak pedig (151) révén $\langle \hat{n}_{\mathbf{j},\sigma}^f \rangle_0 = 1/2 + 2\Delta_f \sigma \cos(\mathbf{Q} \cdot \mathbf{j})$, illetve $\langle \hat{n}_{\mathbf{j},\sigma}^c \rangle_0 = 1/2 + 2\Delta_c \sigma \cos(\mathbf{Q} \cdot \mathbf{j})$ formát öltik. Ezen kifejezések végeredményben annak köszönhetőek, hogy $|\Psi_0\rangle$, egy spin-sűrűség hullámot leíró $|\Psi_{SDW}\rangle$ formájában felírható. Megjegyzem továbbá, hogy (396) utolsó sorában $\sum_{\mathbf{k}}$ továbbra is az $\epsilon_{\mathbf{k}} \leq 0$ kikötést teljesítő $\mathbf{k}$ tartományra vett összegzést jelöli.

A Δ_f, Δ_c mennyiségek variációs paraméterektől vett függését (149,150) révén

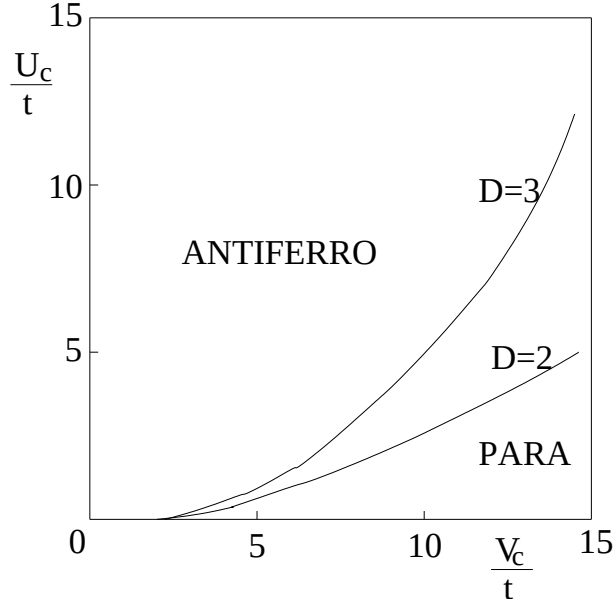
$$\Delta_f = \frac{1}{L} \sum_{\mathbf{k}} (u_{\mathbf{k}} w_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}} z_{\mathbf{k}}), \quad \Delta_c = \frac{1}{L} \sum_{\mathbf{k}} (u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} + w_{\mathbf{k}} z_{\mathbf{k}}), \quad (397)$$

összefüggések adják. Megfigyelhető továbbá, hogy q variációs paraméter az E_g -be helyettesítve, variációs paraméter szerepét a d^f -re ruházza át. Mindezek után a (396)-ban megjelenő E_g a következő variációs paraméterektől függ: $x_{\mathbf{k}}, u_{\mathbf{k}}, v_{\mathbf{k}}, w_{\mathbf{k}}, z_{\mathbf{k}}$ és d^f . A minimalizálás bemutatása a IV D. alfejezetben megtörtént, és a variációs paraméterekre vonatkozó eredményeket (164-167) tartalmazza.

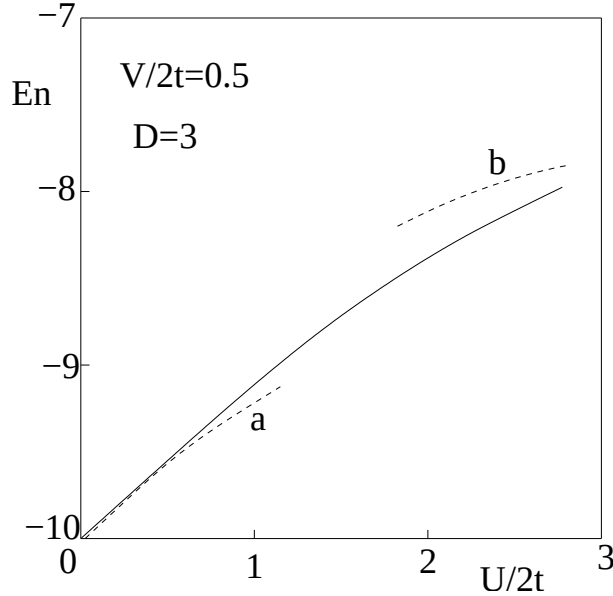
A minimalizálás elvégzése után és a variációs paraméterek kifejezéseinek függvényében, különböző fizikai mennyiségek alapállapotú várható értékei meghatározhatók. Így, az alapállapotú energia a (168), a hibridizációs energia a (170), a lokális mágnesezettség a (171), a Δ_f, Δ_c értékek a (397) alapján kiszámíthatóak. Ezen számítások a $\mathbf{k}$ szerinti összegek elvégzését igénylik, ami úgy történt, hogy az adott d -dimenzióknak megfelelő állapotsűrűséget vettem figyelembe. Így alakultak ki az adott $d = 1, 2, 3$ dimenzióra vett eredmények. Mivel

az átlagértékek kifejezési módja $\tau = \infty$ technikával történt, az eredmények kvalitása d növekedésével növekszik (megjegyzem, hogy ez az eljárás, az akkor még nem létező “dynamical mean-field” egy primitív változata).

Az eredmények szemléltetése végett három ábrát (17-19 Ábrák) mutatok be.



17. Ábra . Gutzwiller korrelált variációs hullámfüggvénnyel kapott fázisdiagram 2 és 3 dimenzióban. Az antiferro fázis a $\Delta_f \neq 0, \Delta_c \neq 0$ állapotot jelöli.

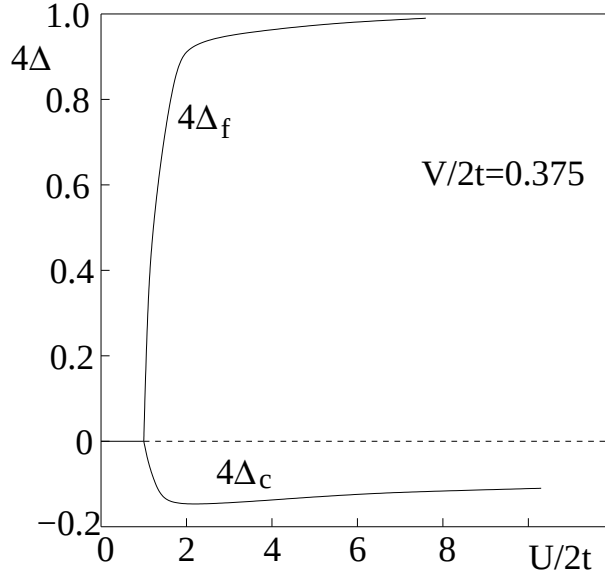


18. Ábra . A normált alapállapot energiája $U/2t$ függvényében (folytonos vonal). Az $En = (E_g + U/2)/|E_0|$, hol E_g az alapállapot energiája, és E_0 az $U = 0$ esetben vett alapállapot energiája. Az (a) és (b) szaggatott vonalak a kis U/t és nagy U/t esetében alkalmazott perturbációszámítás eredményeit jelölik.

A 17. Ábra a fázisdiagramot mutatja két és három dimenzióban. A számolt alapállapot energiája a nagy és kis U/t esetére végzett perturbációszámítási adatokhoz jól illeszkedik (lásd a 18. Ábrát). A 18. Ábrában egy normált energiaérték szerepel a függőleges tengelyen, amely a nemkölsönható rendszer E_0 alapállapot energiáját tartalmazza. Ez utóbbinak a

kifejezése a (176) egyenlőségben megtalálható.

Végül, a 19. Ábrán Δ_f és Δ_c értéke látható. Megfigyelhető, hogy az f és c elektronok lokális mágneses momentumának irányítása ellentétes. Ez az f elektronok momentumának a c elektronok által vett kompenzációs törekvését tükrözi. Látható azonban, hogy ezen folyamat által az f elektronok mágneses momentumának kompenzálása lokálisan csak részben valósul meg az ugyanazon csomóponton ellentétesen beállt vezetési elektronok (c) momentuma révén és a kompenzáció további részét az f elektronok maguk között végzik az anti-ferromágneses rendeződésükön keresztül.



19. Ábra . A c és f elektronok lokális mágneses momentumának amplitúdói $U/2t$ függvényében a rendezett fázisban. A felső görbén $\Delta = \Delta_f$, míg az alsó görbén $\Delta = \Delta_c$ áll fenn. A szaggatott vonal mindkét esetben a $\Delta = 0$ tengelyt jelzi.

C. Következmények

A bemutatott eredmények elsők között szolgáltatottak variációs jellemzést a szimmetrikus esetben vett periodikus Anderson modell teljes paramétertartományára. A számolás akkor történt mikor a dinamikus átlagtér elmélet (DMFT) névlegesen még nem létezett, továbbá a tartalmi elődje, a $d = \infty$ közelítés kialakulófélben volt. Az alkalmazott technikában a véges $d = 1, 2, 3$ dimenziós esetekre vonatkozó eredményeket úgy alakítottam ki, hogy a $\mathbf{k}$ -összegek végzésekor, az adott d dimenzióknak megfelelő állapotsűrűséget vettem figyelembe. E helyett ma, a DMFT keretei között az állapotsűrűséget sáv szerkezeti számításokból veszik át.

A DMFT-hez való közelállás azt mutatja, hogy a korrelációs oldalon, hangsúlyozottabb mértékben t (időszerinti) korrelációk kerülnek itt be a végeredményekbe, és az r szerinti korrelációk jelenléte kevésbé hangsúlyozott (a DMFT esetében a Dayson egyenlet sajátenergia járuléka csak ω függőek²⁸⁹). Ezt az is aláhuzza, hogy a Hamilton operátor Hubbard kölcsönhatási tagja (mely lokális kvantum korrelációkat sűrít) nincs (4) formában közelítve, hanem d^f independens variációs paraméter marad.

Megemlítem még, hogy a fázisdiagram azonos tartományán végzett slave-bozon számítások¹⁶⁹ az elért eredményeket messzemenően alátámasztották. Állítható tehát, hogy a

tanulmányozott paraméterterén, a rendszer alapállapota (pontosan tárgyalva) a spin-sűrűség hullám állapothoz nagyon közelálló.

Aláhúzom, hogy az e fejezetben figyelembe vett korrelációs hatások pozitív jellegűek, azaz megerősítik azt az állapotot amelyet a korrelációk gyengébb minőségi figyelembe vétele mellett sejteni lehetett. Az elkövetkező fejezet szemlélteti majd, hogy ez az észrevétel, más esetekben, távolról sem törvényszerűség.

A levezetett eredmények a PAM-ra vonatkozó könyvszerű bemutatásokba is bekerültek²⁵⁷, és több mint 20 éve a publikálási pillanattól, PAM-ot leíró összefoglalókban^{151,290}, illetve napszintű jellemzésekben^{291,310} továbbra is szerepelnek. Az eredményeket még 2014-ben is idézték²⁹².

D. További eredmények

A periodikus Anderson modellel sokat foglalkoztam később is. A korrelációs hatások fontossága azonban a pontos módszerekkel vett leírásokat hozta később előtérbe^{11,12}.

X. KÉTDIMENZIÓS HUBBARD MODELL GUTZWILLER HULLÁMFÜGGVÉNNYEL JELLEMEZVE

A. Körülmények

Az első három fejezetben használt tisztán átlagtér elméleti leírások után, a IX. fejezetben első alkalommal erősebb korrelációs hatásokat is figyelembe vettem a rendezett fázis jellemzésére. Igaz, ezek inkább időbeli korrelációs hatásokat sűrítettek, és jelenlétük, kvantitatív jellegű hatásai mellett, a korrelációk nélkül levezetett fázis kvalitatív minőségét a fázisdiagram nagy tartományain nem változtatták meg. A következőkben azt szeretném megmutatni, hogy ez az eredmény távolról sem általános érvényű. Ugyanis a korrelációs hatások lényegi figyelembevétele sok esetben teljesen elsöpri azt a fázist (általánosabban: eredményt), amely korrelációs hatások figyelembevétele nélkül született. Ennek bemutatása érdekében egy olyan átalakulást vizsgállok ami eddig nem került itt előtérbe, mégpedig egy fém-szigetelő átmenetet.

A Hubbard modell esetében a Gutzwiller variációs hullámfüggvénnyel vett tárgyalás amely mellett Gutzwiller közelítést (GA) is alkalmaznak (ez utóbbi teljesen eltekint a korrelációs hatásoktól) fém-szigetelő átmenetet eredményez¹¹⁴ egy kritikus U érték (Hubbard csatolási állandó) felett, és évtizedeken keresztül, a Hubbard modellre vonatkozó fém-szigetelő átmenetet ezen eszközökkel tárgyalta többnyire a szakirodalom¹¹⁵.

Metzner és Vollhardt 1988-ban az egydimenziós Hubbard modell $T = 0$ Gutzwiller hullámfüggvénnyel kifejezett várhatóértékeit közelítésmentesen kiszámította^{124,125}. Ezáltal pontos képet lehetett szerezni arról, hogy a Gutzwiller hullámfüggvény, más közelítések felhasználása nélkül, mit is ad tulajdonképpen a Hubbard modellre, legalábbis egy dimenzióban. Az eredmény fém-szigetelő átmenetet nem eredményezett. Mivel a Hubbard

modell egydimenzióban vett egzakt megoldásából¹¹⁸ ismert volt hogy $U > 0$ esetben ténylegesen fém-szigetelő átmenet a rendszerben nincs, továbbá az egydimenziós fizika a magasabb dimenziós viselkedéshez mérten mindig különleges, a Gutzwiller hullámfüggvény megítélése céljából fontos volt a Ref.[¹²⁴]-ban publikált számítás magasabb dimenzióban vett elvégzése is. Ennek megfelelően célkitűzésem az volt, hogy ugyanazt a Ref.[¹²⁴]-ban egydimenzióban elvégzett feladatot, $D = 2$ dimenzióban is vigyem véghez, a lehető legnagyobb pontossággal. Tudomásom szerint, $D = 2$ -ben ez az egyedüli Gutzwiller hullámfüggvénnyel közelítésmentesen ilyen pontossággal végzett számolás. A pontosságot itt úgy kell érteni, hogy különböző járulékok kiszámításakor, a Gutzwiller hullámfüggvénnyel adott várhatóértékek kifejezésére semmilyen közelítés nem volt figyelembe véve. Az eljárás végül is perturbatív jellegű, 8-ad rendig minden járulékot pontosan kiszámítva tartalmaz, és a 9-ed rendtől felfele végtelen rendig menő járulékok együttesen $(n/2)^{17}$ értékéig pontosak, ahol $n \leq 1$ a koncentráció. A végeredmény szerint, a $D = 2$ Hubbard modellre, tisztán a Gutzwiller hullámfüggvény, semmilyen fázisátalakulást nem ad. Ezen túlmenőleg érdekes nem analitikus viselkedések tapasztalhatóak nagy U , $n \sim 1$ esetében.

A témakörhöz tartozó saját publikációk Ref.[⁷⁻⁹]-ben találhatók, a modellelemzés és számítás részletes előzményei a II A 5 alfejezetben voltak bemutatva, míg az alkalmazott módszer ismertetése a IV C alfejezetben található. Aláhúzom, hogy mivel az alkalmazott módszer saját fejlesztésű, bemutatása nagy részletességgel történt meg.

B. A modell és eredmények

A Hubbard modell D dimenzióban [lásd (15,16)]

$$\hat{H} = \hat{H}_{kin} + \hat{H}_I, \quad \hat{H}_{kin} = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \epsilon(\mathbf{k}) \hat{n}_{\mathbf{k}, \sigma}, \quad \hat{H}_I = U \sum_{\mathbf{i}} \hat{n}_{\mathbf{i}, \uparrow} \hat{n}_{\mathbf{i}, \downarrow}, \quad (398)$$

formában adható meg, hol W sáv szélesség mellett $\epsilon(\mathbf{k}) = -(W/2D) \sum_{\alpha=1}^D \cos a_{\alpha} k_{\alpha}$, $a_{\alpha} k_{\alpha} \in [-\pi, +\pi]$, a_{α} a geometriai tér α irányába vett Bravais rácsvektor hossza és U a Hubbard kölcsönhatás. A Gutzwiller hullámfüggvény (amellyel az átlagértékeket tetszőleges D dimenzióban semmilyen más közelítés felhasználása nélkül számolni szeretném, lásd (17))

$$|\Psi_G\rangle = \prod_{\mathbf{i}} [1 - (1 - g) \hat{n}_{\mathbf{i}, \uparrow} \hat{n}_{\mathbf{i}, \downarrow}] |\Psi_0\rangle, \quad (399)$$

ahol $0 \leq g \leq 1$ a Gutzwiller variációs paraméter, és $|\Psi_0\rangle$ a nemkölcsönható (tehát paramágneses) rendszer normalizált alapállapota. A (399) segítségével megadott és $\hat{H}$ -ra vonatkozó várhatóértékek kifejezését a következőkben ismertetem.

1. A kölcsönhatási tag

A kölcsönhatási tag esetében [lásd (27)]

$$\frac{\langle \hat{H}_I \rangle}{ULg^2} = \sum_{m=1}^{\infty} (g^2 - 1)^{m-1} C_m, \quad (400)$$

ahol $\langle \dots \rangle = \langle \Psi_G | \dots | \Psi_G \rangle / \langle \Psi_G | \Psi_G \rangle$, $\mathcal{T}$ a rácscsomópontjainak a száma, továbbá C_m sűríti az m rendben járulékokat adó diagramokat. Ezek részletes bemutatása a IV B. alfejezetben megtörtént, C_m formális kifejezése (31) egyenlőségben megtalálható, és aláhúzom, hogy (27,31) Vollhardt csoportjának eredménye^{124,125}.

A C_m koeficiensok közelítésmentes kiszámolását azonban a Vollhardt csoportja csak $D = 1$ egy dimenzióban tudta megtenni. A tetszőleges D dimenzióban vett kiszámítási technikát én tettem pontra és ezt IV C.2 alfejezetben részletesen bemutattam. A C_m tagok a (118) összefüggésekben találhatók, amelyek összevont képlete

$$C_m = \sum_{\{e_i\}} (-1)^{e_i} \frac{(2m)!}{(2m+1 - \sum_{i=1}^m e_i)! \prod_{i=1}^m (e_i)!} \prod_{i=1}^m (D_i^{e_i}) \quad (401)$$

formában adható meg. Ezen kifejezésben $\{e_i\}$ egy egész pozitív, m -darab számból álló halmazt jelent, mely elemeinek teljesítenie kell a $\sum_{i=1}^m (i+1)e_i = m+1 + e_1$ összefüggést. Az összegzés (401)-ben, rögzített m mellett létező összes ilyen halmazra történik. A D_i jelenti az i -ed rendű irreducibilis diagram járulékok numerikus előtaggal vett összegét (lásd (118) és az utána következő szöveget). Ennek megfelelően D_i -re a következő formális összefüggés írható fel: $D_i = \sum_{j=1}^{M_i} a_j V_{G_j}^{(i)}$, ahol M_i jelenti az i -rendben vett topologikusan független (irreducibilis) diagramok számát, a_j egy numerikus előtag, G_j pedig azt az i -ed rendű (irreducibilis) diagramot jelöli, amely számértéke $V_{G_j}^{(i)}$. Megjegyzem, hogy $D_1 = n/2$, hol $n \in [0, 1]$ az elektronkoncentráció, továbbá, $i = 2, 3, 4, 5$ -re járulékokat adó G_j diagramok (gráfok) és a_j koefficiensek a mellékelt rajzon megtalálhatók (20. Ábra). Az $i = 8$ -ad rendig menő járulékokat Ref^[9]-ben publikáltam. Itt megemlítem csupán, hogy 17, 44, és 179 diagram jelenik meg sorra $i = 6, 7$ és 8-ad rendben a D_i járulékokon belül. A G_j gráfok m -ed rendben m darab csomóponttal rendelkeznek, csak egyfajta (nem irányított) vonalat tartalmaznak (az $\mathbf{r}$ térben vett felrajzolás esetén – lásd IV C. alfejezetet) és minden csomópontjukon 4 vonal találkozik. Külső vonalak nincsenek jelen. A leírt diagramok tulajdonképpen a ϕ^4 elmélet sorfejtési diagramjainak felelnek meg⁹.

A D_i járulékokban szereplő konkrét diagramok effektív kiszámítása tetszőleges D dimenzióban egy, speciálisan erre a célra kifejlesztett G^D függvénnyel történik. Ez értelmezés szerint, tetszőleges D dimenzióban [lásd (94)]

$$G^D(\{|n_\alpha|\}) = \int dk \Theta(\epsilon_F - \epsilon(\mathbf{k})) \prod_{\alpha=1}^D \cos(n_\alpha k_\alpha), \quad (402)$$

ahol $\int dk = (1/(2\pi)^D) \prod_{\alpha=1}^D \int_{-\pi}^{\pi} dk_\alpha$. A (402)-ben szereplő n_α tagok tetszőleges előjellel rendelkező, vagy zéro egész számok. A G^D , $D = 2$ dimenzióban vett konkrét kifejezése [lásd (100) egyenlőséget]

$$G^{D=2}(n_1, n_2) = \frac{2}{\pi^2(n_1 + n_2)} \int_0^{\arccos(p)} \cos[(n_1 - n_2)x] \sin[(n_1 + n_2) \arccos \frac{p}{\cos x}] dx, \quad (403)$$

ahol $\arcsin(p) = \pi(1 - n)/2$ (itt n a koncentráció). A G^D függvény $D = 2$ -ben vett viselkedését a 4. Ábra szemlélteti. A dimenzió növekedésével a függvény kvalitatív formája megmarad, de központi maximuma megnő.

dc_890_14

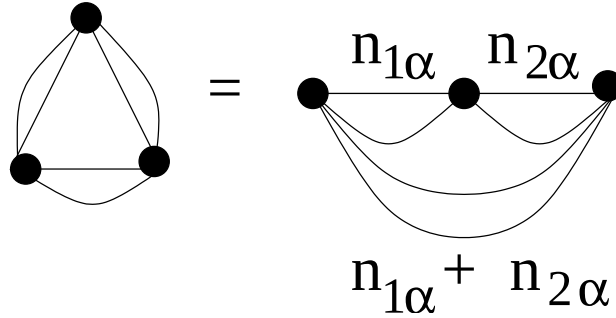
$$D_2 = \text{diagram} ; \quad D_3 = 2 \text{diagram} ;$$

$$D_4 = 3 \text{diagram} + 2 \text{diagram} - 4 \text{diagram} ;$$

$$D_5 = 2 \text{diagram} + 2 \text{diagram} - 10 \text{diagram} ;$$

$$+ 20 \text{diagram} - 20 \text{diagram} ;$$

20. Ábra . A (401) összefüggésben szereplő D_i diagramok $i = 2, \dots, 5$ ötöd rendig.



21. Ábra . A vízszintesen rajzolt diagramforma és a vonalak indexálása. (példázat $i = 3$ esetre).

Mindezek után a G_j diagramok $V_{G_j}^{(i)}$ értékének kiszámítására vonatkozólag a (117) képlet után elmondottak alapján a következőket foglalom össze röviden: A G_j diagramot (gráfot) vízszintes formában kell először lerajzolni, azaz szomszédos csomópontjait egymás mellé egy vízszintes szakaszra kell helyezni. Ennek példázata található a 21. Ábrában (a módszer bemutatása során, a 6. Ábrán több más példa is fellelhető). Ezután, (i) Első lépésben minden vonal egy $n_{k,\alpha}$ „indexet” kap, ahol k egy egész szám. Ez a művelet abból indul ki, hogy i -rend esetében, a vízszintes szakaszon $M_{i,j} \leq i - 1$ darab szomszédos csomópontokat összekötő diagramvonal fog egymás mellett elhelyezkedni. Ezen diagramvonalakat sorra $n_{1,\alpha}, n_{2,\alpha}, \dots, n_{M_{i,j},\alpha}$ számokkal indexelem (jelölöm) (lásd az 21. Ábrát). A vízszintes szakasz alatti vonalakat azon $n_{k,\alpha}$ számok összege indexeli, amelyeket a szóban forgó vonal összefog. Ugyanazon csomópontokat összekötő vonalak ugyanazt a jelölést (indexelést) kapják. (ii) Második lépésben minden vonalhoz a $G^D(\{|n_{\ell,\alpha}|\})$ mennyiséget rendelem hozzá, ahol $n_{\ell,\alpha}$ a vonal indexe. (iii) Harmadik lépésben a vonalokhoz rendelt mennyiségeket össze kell szorozni és $n_{1,\alpha}, n_{2,\alpha}, \dots, n_{M_{i,j},\alpha}$ szerint összegezni $\sum_{\{n_{i,\alpha}\}} = \prod_{\alpha=1}^D (\sum_{n_{i,\alpha}=-\infty}^{+\infty})$ formában. Például, a 21. Ábrában megadott ($i = 3, j = 1$) diagram értéke [lásd (115) egyenlőséget második sorát]

$$V(G_{3a}) = V_{G_1}^{(3)} = \sum_{\{n_{1,\alpha}\}} \sum_{\{n_{2,\alpha}\}} [G^D(\{|n_{1,\alpha}|\})]^2 [G^D(\{|n_{2,\alpha}|\})]^2 [G^D(\{|n_{1,\alpha} + n_{2,\alpha}|\})]^2. \quad (404)$$

Több más diagramnak a G^D függvényekkel kifejezett formája a (115,116) összefüggésekben megtalálható. A módszertani ismertetés alapján (IV C.2 alfejezet) látható, hogy minden járulékot adó diagram a G^D függvények és T_j komponensek [lásd (114)] segítségével felítható, és ez utóbbiak szintén G^D függvényekkel megadhatóak [lásd (114)]. Ez vezet oda, hogy minden diagram D dimenzióban a G^D függvényekkel kifejezhető.

Az effektív számolást úgy kell végezni, hogy először a $G^D(\{|n_\alpha|\})$ értékeket kell kiszámolni és numerikusan tárolni, majd ezután a diagramok értékét adó összefüggések kerülnek kifejezésre. Így, a végső, diagramértéket kifejező eljárás (utolsó lépésben) numerikus, de aránylag gyorsan konvergens. Minden diagram értéket nyolcad rendig 16 tizedesnyi pontossággal fejeztem ki (különböző n koncentráció értékek mellett).

2. A kinetikus energia tag

A kinetikus energia tag esetében a (38,41) egyenlőségek alapján a $\hat{H}_{kin}$ átlagértékére a következő kifejezés adódik

$$\frac{\langle \hat{H}_{kin} \rangle}{L} = [1 - (1 - g)^2 \frac{n}{2}] \bar{\epsilon}_0 + \frac{1}{(1 + g)^2} \sum_{i=2}^{\infty} (g^2 - 1)^i [A_i - (1 - g^2) B_i], \quad (405)$$

ahol $A_i = 2 \int d\mathbf{k} f_{i,\sigma}(\mathbf{k}) \epsilon(\mathbf{k})$, $B_i = 2 \int d\mathbf{k} f_{i,\sigma}(\mathbf{k}) \epsilon(\mathbf{k}) n_{\mathbf{k},\sigma}^0$, $\bar{\epsilon}_0 = 2 \int d\mathbf{k} \epsilon(\mathbf{k}) n_{\mathbf{k},\sigma}^0$, és $\int d\mathbf{k} = [1/(2\pi)^D] \prod_{\alpha=1}^D \int_{-\pi}^{\pi} dk_\alpha$. Itt $n_{\mathbf{k},\sigma}^0$ a D dimenziós nemkölcsonható rendszer impulzus szerinti eloszlásfüggvénye, továbbá, az $f_{i,\sigma}(\mathbf{k})$ jelöli az összes i rendben vett (i csomópontot tartalmazó) és külső vonallal rendelkező diagramok járulékát [lásd (47)]. Az $f_{i,\sigma}(\mathbf{k})$ kifejezése a Vollhardték csoportjának eredményeiből ered^{124,125}, és levezetésük a IV B. alfejezetben ismertetésre került. De Vollhardték csoportja, az $f_{i,\sigma}(\mathbf{k})$ tagokat csak $D = 1$ dimenzióban tudta kiszámolni. Ezen diagramok járulékeinak tetszőleges D dimenzióban vett és közelítésmentes kiszámítására én dolgoztam ki módszert amelyet részletesen a IV C.3 alfejezetben ismertettem, és amely szintén a G^D függvényekre vezethető vissza.

A módszertani ismertetés alapján [lásd IV C.3 alfejezet] az $f_{i,\sigma}(\mathbf{k})$ -ba járulékokat adó diagramokat a $V_{G_j}^i$ diagramokból kapom úgy hogy egy tetszőleges vonalat G_j -ből elvágok, ezt minden vonalra megteszem, és az eredményt összegzem [lásd (122,123) összefüggéseket, a 7. Ábrában adott példákat és a rájuk vonatkozó magyarázó szöveget]. A diagram értékének felírása során úgy járok el mint $V_{G_j}^i$ esetében, de azzal a megkötéssel, hogy a külső vonalhoz a $\prod_{\alpha=1}^D \cos(n_\alpha k_\alpha)$ értéket rendelem, és a külső vonal változója szerint nem integrálok. Továbbmenőleg, az $f_{i,\sigma}(\mathbf{k})$ járulékok (405)-ben integrál alatt szerepelnek. Ezen integrálok eredményeit szintén a $G^D(\{|n_\alpha|\})$ függvényekkel fejezem ki a következő összefüggésekkel [lásd (126-128)]

$$\begin{aligned} \int d\mathbf{k} \epsilon(\mathbf{k}) \prod_{\alpha=1}^D \cos(n_\alpha k_\alpha) &= -\frac{W}{2} \nabla_n \delta_{\{n_\alpha\}, \{0\}}, \\ \int d\mathbf{k} \epsilon(\mathbf{k}) n_{\mathbf{k},\sigma}^0 \prod_{\alpha=1}^D \cos(n_\alpha k_\alpha) &= -\frac{W}{2} \nabla_n G^D(\{|n_\alpha|\}), \\ \nabla_n F(\{n_\alpha\}) &= \frac{1}{2D} \sum_{\alpha=1}^D [F(n_1, n_2, \dots, n_{\alpha-1}, n_\alpha + 1, n_{\alpha+1}, \dots, n_D)] \end{aligned}$$

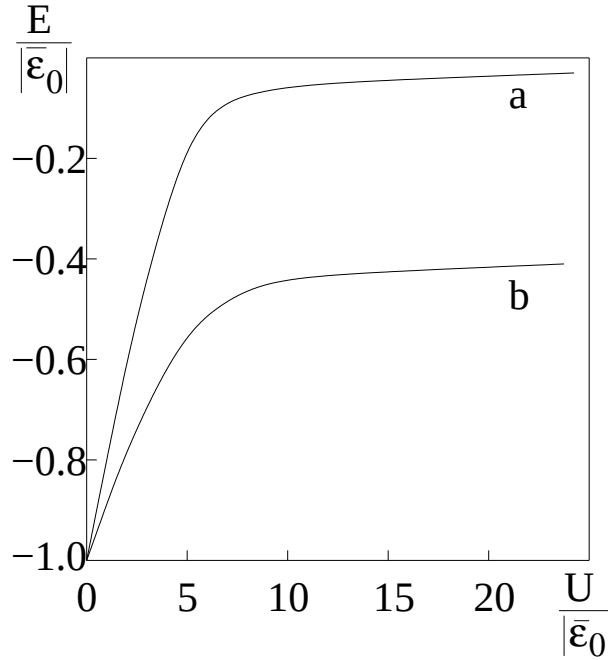
$$+F(n_1, n_2, \dots, n_{\alpha-1}, n_{\alpha} - 1, n_{\alpha+1}, \dots, n_D)]. \quad (406)$$

A (406)-ban F egy tetszőleges függvény, és $\delta_{\{n_{\alpha}\}, \{0\}} = \prod_{\alpha=1}^D \delta_{n_{\alpha}, 0}$.

Ez esetben is a diagramjárulékok ugyanolyan pontossággal mint a kölcsönhatási tag esetében voltak kiszámítva.

3. Az alapállapot energiája

Az alapállapot energiára kapott eredményeket a mellékelt rajz szemlélteti (22. Ábra). A Brinkman-Rice tranzícióhoz¹¹⁴ zéró alapállapot energiája kell, de amint azt a 22. Ábra mutatja $E = 0$ nem áll elő egyetlen U esetében sem, így fém-szigetelő átmenet nem lép fel. Az $n_{\mathbf{k}, \sigma}$ -ra kapott kifejezések Fermi folyadék jellegűek, Brinkman-Rice tranzíciónak így nincs nyoma. Az elhanyagolt diagramok vezető járuléka $(n/2)^{18}$, tehát az eredmény végtelen rendig menőleg e nagyságrendig pontos.



22. Ábra . A $D = 2$ esetben számolt alapállapot energiája a) $n/2=0.5$, b) $n/2=0.445$ esetében. Az $\bar{\epsilon}_0$ a (405) alatt értelmezett.

Ezen állítás megértése céljából aláhúzom, hogy D_i tag $n/2$ -ben kifejezett vezető járuléka $(n/2)^{2i}$ formájú. Az itt bemutatott számolás esetében, D_9 az első elhanyagolt tag, ennek pedig a nagyságrendje $(n/2)^{18}$. Mostmár, megfigyelhető, hogy (401) egyenlőségben megjelenő C_m -ben, tetszőleges m rendben minden D_i , $i \leq m$ szerepel. Így, megtehető az, hogy $m > 8$ esetében is kifejezem C_m -et (és diagram vonalai elvágásával a kinetikus energia járulékot) úgy, hogy ezen összefüggésben csak $D_i, i \leq 8$ szerepeljen. Az első elhanyagolt járulék (D_9) vezető tagja $(n/2)^{18}$ nagyságrendű, tehát az ilyen formában kiszámított eredmény $O[(n/2)^{17}]$ -ig menőleg pontos.

A bemutatott eredményeken túlmenőleg, a (400,405) tanulmányozása azt mutatta, hogy félig töltött sáv esetében $g \rightarrow 0$ (azaz $U \rightarrow \infty$) határesetben nemanalitikus viselkedések lépnek fel. Így például a $\langle \hat{H}_I \rangle$ sorfejtési koefficiensei $n = 1, g \rightarrow 0$ esetben $1/g$ hatványai szerint viselkednek, míg $g = 0, n \rightarrow 1$ határesetben $1/(1 - n)$ hatványai szerint jellemezhetőek. Továbbmenőleg, a dupla betöltés várható értéke $g \rightarrow 0$ határesetben $[\ln(1/g)]^\alpha$ típusú viselkedést mutat, ahol α nagyságrendje egység körüli. Kimutatható továbbá, hogy nagy U -ra a dupla betöltés várható értékének változása $n \sim 0.7$ alatt kevésbé dimenziófüggő, és hasonló állítható a kinetikus energia várhatóértékére $n \sim 0.5$ alatt. Az alapállapot energiája $\langle \hat{H}_{kin} \rangle$ átlagértékkel együtt nagy U -ra g -vel lineárisan változik, és megfigyelhető, hogy a $D > 2$ eredmények $D = 2$ -től vett különbsége főként a kölcsönhatási tagból adódik. A nemanalitikus viselkedéseket, a Gutzwiller hullámfüggvény mellett alkalmazott Gutzwiller approximációban (térbeli korrelációk elhagyása) elhanyagolt tagok eredményezik.

Hangsúlyozni szeretném, hogy a legfontosabb elért eredmény az a tény, hogy a Gutzwiller hullámfüggvénnyel, Gutzwiller közelítés nélkül nem adódik fém-szigetelő átmenet. Látható tehát, hogy a korreláció figyelembevétele (itt legalábbis) teljesen kiradírozza a korreláció nélkül számolt eredményt.

Megemlítem, hogy Monte Carlo szimulációt az itt bemutatott alapállapot energiára több mint 10 évvel az eredmények publikálása után végeztek, és ezen szimulációs eredmények²⁹³ nagyon jól alátámasztják az e fejezetben ismertetett eredményeket és következtetéseket. Az eredményeim könyvszerű összefoglalókba is bekerültek²⁹⁴, és ma a Gutzwiller hullámfüggvénnyel végzett közelítések továbbfejlesztésének kiindulópontjai^{295,296}.

dc_890_14

SAJÁT MODELL-EREDMÉNYEK: MÁSODIK RÉSZ

Közelítésmentes eredmények.

dc. 890. 14
XI. EGZAKT LEÍRÁS FONALSZERŰ KLASZTEREK HŐMÉRSÉKLETFÜGGŐ
NÖVEKEDÉSÉRE.

A. Körülmények

Az előző öt fejezetben közelítésekkel levezetett eredményeket mutattam be, a leírás szintjén fokozatosan figyelembe véve a korrelációs hatásokat. Ez utóbbiak, a hatásuk erősségének növekvő sorrendjében voltak bevezetve, a IX. fejezet esetében inkább időszerű korrelációk formájában voltak jelen, míg a X. fejezetben már hangsúlyozott térbeli korrelációk formájában szerepeltek. Közben, különböző rendeződési formák megjelenésének lehetőségét is bemutattam, és arra is hangsúly került (lásd X. fejezet), hogy bizonyos leírási forma képes e számot adni adott rendeződés előállásáról vagy sem. Látható volt hogy a korrelációs hatások, amennyiben a rendszerben ténylegesen relevánsan jelen vannak, nem elhanyagolhatóak a leírás szintjén sem. Minél élethűbb figyelembevételük a megoldási pontosság mind magasabb és magasabb szintjét követeli meg, és ha ehhez hozzáteszem, hogy a kilencvenes évek elejétől az erősen korrelált rendszerek kerültek érdeklődésem központjába, megérthető hogy miért tolódtam el az egzakt eredmények területére.

Az elkövetkező fejezetekben, ezen területen levezetett saját eredményeimből mutatok be. Bevezetőként az itt használt egzaktság fogalmáról szeretnék néhány aspektust aláhúzni. Először is, a természetben lezajló valóságos folyamatok általában (ha semmit sem hanyagolunk el) végtelen sok paramétertől függő és végtelen sok paramétert tartalmazó folyamatok. Mivel ezen a szinten jellemezni nagyon nehezen tudunk (vagy tudnánk egyáltalán), a leírás végett modell-szinten jellemzünk, ami lényege az hogy eltekintünk a gyengébbnek ítélt befolyásoktól (ezáltal véges számú paramétertől tesszük függővé a problémát), továbbá rögzítjük a folyamat lezajlásának lényegi játékszabályait (törvényszerűségeit). Az itt használt egzaktság fogalom, az ilyen modellkörülmények között vett egzaktságot jelenti, mégpedig olyan modellek esetében amelyek sokrészeszkés (Avogadro számhoz mérhető részecskeszámot tartalmazó) rendszerek jellemzését hivatottak megtenni, olyan rendszerekét, amelyekre a mozgásállandók száma a szabadságfokok számától teljesen független, és általában nagyságrendekkel kisebb annál (a szakirodalomban használt kifejezést alkalmazva: nem integrálható rendszerekre^{133,134} vonatkozó pontos eredményekről lesz szó). Azt is meg szeretném említeni hogy miért vonzott e témakör: a szakirodalomban szereplő egzakt eredmények elnyomó többsége integrálható rendszerekre vonatkozik¹³³, mindannak ellenére, hogy a természetben zajló valóságos folyamatokat leírni hivatott modell-rendszerek elnyomó többsége nem integrálható rendszer.

Az eredmények bemutatását ebben a fejezetben egy olyan esettel fogom kezdeni amely egy specifikus klaszter képződési folyamatra vonatkozik, és amely modell szintű rögzítése (modellezése) és modell szinten vett megoldási módszertana is egyéni produktum. Tudomásom szerint az egyedüli T -függő klaszterizációs probléma egzakt megoldás az itt bemutatott eredmény. A rendezetlen rendszerek tanulmányozása vezetett a témakörhöz és a megoldás módszertanát egyszerű geometriai valószínűségek alkalmazása teremtette meg.

Végeredményben az alább bemutatásra kerülő klaszterizáció egy tág értelemben vett rendeződés, amelyszerű folyamat a disszertáció során most először kerül bonckés alá. Amint majd látszani fog, a korrelációs hatások itt csak rövid hatótávolságúak, a leírás lényegében csak kiskoncentrációs határesetre vonatkozik, rövid hatótávolságú kölcsönhatások esetében.

A probléma megfogalmazása és az eredmény levezetése több évi munkát igényelt. A matematikai eredmény 1992-ben már megvolt, de kísérleti adatokkal való összevetés ekkor még hiányzott. 1993 folyamán lett világos, hogy az eredmények csillagászati mérések, Monte Carlo szimulációk és szilárdtestfizikai rendszerek mágneses szuszceptibilitási adatait is elfogadhatóan reprodukálják. A publikálásra való beküldés 1993 decemberében történt.

A témakörhöz tartozó saját publikáció a Ref.^[15]-ban található, a részletes előzmények a II B 1. alfejezetben voltak ismertetve, továbbá az alkalmazott módszer, mivel saját fejlesztésű, nagy részletességgel a V A. alfejezetben volt bemutatva.

B. Modell és eredmények

1. A probléma modellszerű megfogalmazása

A következőkben, a probléma modellszerű megfogalmazását általánosan teszem meg, függetlenül a filiform (fonalszerű) klaszternövekedéstől. Ehhez először az M komponensű klaszter fogalmát és előfordulási valószínűségét kell jellemezni. Az M komponensű C_M klaszter a modell szintjén nem más mint $E_i, i = 0, 1, 2, \dots, M$ elemek (részecskék) sokasága amelyek az s_i térbeli pozíciókban helyezkednek el úgy, hogy valamilyen H tulajdonság (pl. egy kölcsönhatás okozta összekapcsolási forma) a $h = (s_1, s_2, \dots, s_M) = \{s_i\}$ halmazt összetartozóvá (kötötté) teszi egy η külső ellenző kényszer hatása mellett. Az η egy destruktív faktor (pl. rögzített T hőmérsékleten egy $k_B T$ termikus energiaadag), amely a klaszterképződést gátolja. A H hatása mellett rögzített M -re kialakuló klaszterek halmazát $H(C_M)$ jelöli. Ezen halmazba tartozó klasztereket különböző $h = \{s_i\}$ pozíciók jellemeznek, és $H(C_M)$ különböző elemeit pontosan a különböző h pozíciók különböztetik meg egymástól.

A klaszterek előfordulási valószínűségét csak η figyelembevételével lehet megadni. Ennek megfelelően, ha η rögzített, $p(h, \eta)$ valószínűséggel forduljon elő $H(C_M)$ adott h -val rendelkező komponense. Ezen valószínűségek h szerint vett összegzése

$$P_M = p(C_M, \eta) = \sum_{h \in H(C_M)} p(h, \eta) \quad (407)$$

adja az M komponensű klaszterek adott körülmények között [e.g. rögzített (H, η)] vett előfordulási valószínűségét.

Az ilyenmódon felvázolt klaszterizációs probléma megoldása azt jelenti, hogy rögzített (H, η) mellett meg kell a

$$\sum_M P_M = 1 \quad (408)$$

tulajdonsággal rendelkező $P_M \geq 0$ előfordulási valószínűségeket határozni.

A vizsgált klaszterképződési modell egy konkrétan definiált (H, η) mellett értelmezett, amely szemléletes bemutatása a V A.1 alfejezet végén található. Matematikai szinten a modell H és η paramétere a következő képpen jellemezhető.

A H kondíció rögzítése céljából jelölje $m(i, j)$ a klaszter i és j rendezetlenül elhelyezkedő elemei közti távolságot, tételezzük fel hogy C_M fonalszerű klasztereket jelöl (azaz egy elem csak egy, a legközelebbi szomszédját kötheti be a klaszter belsejébe) továbbá

$$m_M \geq m(i-1, i) \geq m(i, i+1), \quad (409)$$

ahol m_M a lehető legnagyobb kötéstávolság.

Az η hivatása tulajdonképpen az m_M fizikai alapokon vett rögzítése (lásd IV B.9 alfejezetet). Ezt az η szerepkört itt egy kötés-elszakító $E_c = k_B T$ termikus energia játsza. Ennek alapján, ha $m(i, j)$ mentén az i és j elemek közötti kötési energia (abszolút értéke) $W[m(i, j)]$, akkor a

$$W[m(i, j)] \leq E_c \quad (410)$$

összefüggés jelenti azt, hogy ez esetben az $m(i, j)$ kötés elszakított (azaz nem létező). A W kötési energiát a távolság függvényében csökkenőnek tekintem, így (410)-ből származó $W[m_M] = E_c$ egyenlőség egy maximális $m_M = \text{Max}[m(i, j)]$ kötési távolságot határoz meg, mely a választott η révén (410)-nek megfelelően hőmérséklet függő (azaz $m_M = m_M(T)$).

A felvázolt körülmények között a (407,408) klaszterizációs probléma egzaktul megoldható¹⁵. Fizikailag a kiinduló feltételek akkor következnek be (lásd IV B.10 alfejezet), ha kiskonzentrációs rendezetlen rendszerben a legközelebbi elemek közötti átlagtávolság (l_e), a rövid hatótávolságú kölcsönhatás hatótávolsága (l_{int}) értéknél jóval nagyobb ($l_e \gg l_{int}$), így feltételezhető, hogy minden elem csak a legközelebbi szomszédját érzékeli mérvadóan, azaz fonalszerű klaszterképződmény dominál. Ezen túlmenőleg, a klaszterfonalon belül, a legközelebbi szomszédhoz mért távolságok monotonikusan csökkennek, azaz (409) teljesül.

3. A megoldás

A megoldás lehetőségét – amint a módszer leírásakor említettem – a Chandrasekhar által publikált geometriai valószínűségek adják¹²⁹. Ennek megfelelően, annak a valószínűsége hogy egy elem ne rendelkezzen szomszédal r távolságon belül az [lásd (177,178)]

$$P_0(r) = \exp(-\alpha), \quad \alpha = \frac{4\pi}{3} n_c r^3, \quad n_c = \frac{N}{V}, \quad (411)$$

összefüggésekkel adott. Továbbá, annak a valószínűsége, hogy $(r, r + dr)$ tartományban legyen egy elem

$$dP(r) = \frac{3\alpha}{r} dr. \quad (412)$$

Igy tehát, rögzített M -re [lásd (186)]

$$p(h, \eta) = P_0[m(M-2, M-1)] \prod_{i=1}^{M-1} \{P_0[m(i-1, i)] dP[m(i-1, i)]\} \quad (413)$$

adódik. Felhasználva [lásd (187)] a következő jelölést

$$\begin{aligned} \sum_{H(C_M)} &\rightarrow \int_{H(C_M)} = \int_0^{m_M} dm(0, 1) \int_0^{m(0,1)} dm(1, 2) \dots \int_0^{m(i-2, i-1)} dm(i-1, i) \dots \\ &\dots \int_0^{m(M-3, M-2)} dm(M-2, M-1), \end{aligned} \quad (414)$$

az előfordulási valószínűségekre a következő összefüggéseket kapjuk [lásd (190,191,194)]

$$\begin{aligned} P_M &= \frac{(-1)^{M+1}}{M!} K^M + (1 - \delta_{M,1}) \sum_{j=0}^{M-2} \frac{(-1)^j}{j!} A_{M-2-j} K^j, \quad M \geq 1, \\ A_i &= \frac{(-1)^i}{(i+2)!} + (1 - \delta_{i,0}) \sum_{j=1}^i \frac{(-1)^j}{j!} A_{i-j}, \quad i \geq 0, \end{aligned} \quad (415)$$

ahol $K = \exp(-\alpha')$ [lásd (179)], $\alpha' = \alpha(r = m_M)$. Megjegyzem, hogy a számítás során az elemeket pontszerűnek tekintettem. Az A_i koefficiensek explicit kifejezése a (193), míg a P_M valószínűségek explicit kifejezése a (227) egyenlőségekben levezetve megtalálható. Az eredmények szintjén (408) igazolhatóan teljesül. Ennek bizonyítása a V A.3 alfejezetben található, ahol megmutatom hogy $P_M \geq 0$ [lásd (201)], illetve $\sum_{M=1}^{\infty} P_M = 1$ [lásd (207)].

A hőmérséklet szerinti függés m_M értékén keresztül jelenik meg, és W közvetlen explicit formájának ismerete nélkül megállapítható (lásd a V A.5 és V A.9 alfejezeteket), hogy $m_M \rightarrow 0$ és $m_M \rightarrow \infty$ felelnek meg $T \rightarrow \infty$ és $T \rightarrow 0$ hőmérsékleti határoknak (W a távolság függvényében csökkenő függvény), továbbá, perkolatív jellegű folyamatok a rendszerben nem játszódhatnak le, lásd (217-219) egyenlőségeket.

A P_M ismeretében további mérhető átlagértékek számíthatók ki. Ezek közül a legegyszerűbb az átlagos klaszterméret, amely V A.4 alfejezet (215) eredménye szerint

$$\bar{M} = \sum_{M=1}^{\infty} M P_M = \exp(1 - K). \quad (416)$$

Ezen túlmenően, bonyolultabb mennyiségek is kifejezhetőek, mint például a nemkölcönható mágneses klaszterek szuszceptibilitása [lásd (259)]

$$\chi = \frac{n_c}{3T} \sum_{M=1}^{\infty} P_M \bar{S}_M (\bar{S}_M + 1), \quad (417)$$

ahol $\bar{S}_M$ az M komponensű klaszter átlagos spinértéke. Az $\bar{S}_M$ a spinek közötti csatolás $J(r)$ ismeretében adható meg. Például Ising típusú S spinek esetében [lásd V A.7 alfejezet, (230) összefüggés]

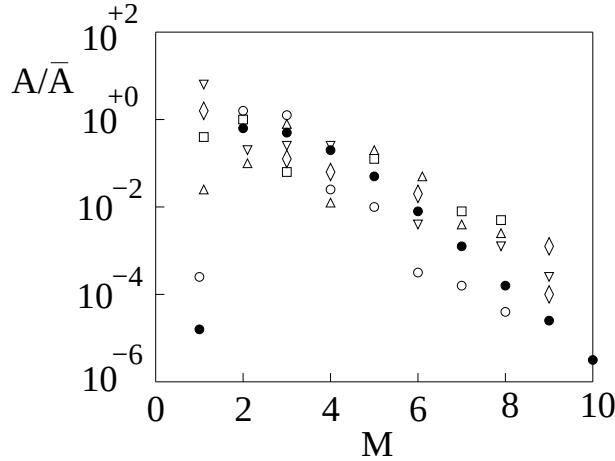
$$\bar{S}_M = S \int_0^{m_M} dr_1 \{1 + \sum_{n=1}^m [\prod_{i=1}^n \operatorname{sgn} J(r_i)]\} \prod_{i=2}^m [\int_0^{r_{i-1}} dr_1 P_1(r_i)], \quad (418)$$

ahol $P_1 = (3\alpha/r) \exp(-\alpha)$, és megemlítem, hogy $\bar{S}_M$ -re vonatkozólag részletes példákat ismertettem V A.7 alfejezetben. A (417) alapján a Curie konstans is kifejezhető

$$C = \frac{3T\chi}{n_c} \quad (419)$$

formában, mely részletes bemutatása és elemzése a V A.8 alfejezetben történt meg.

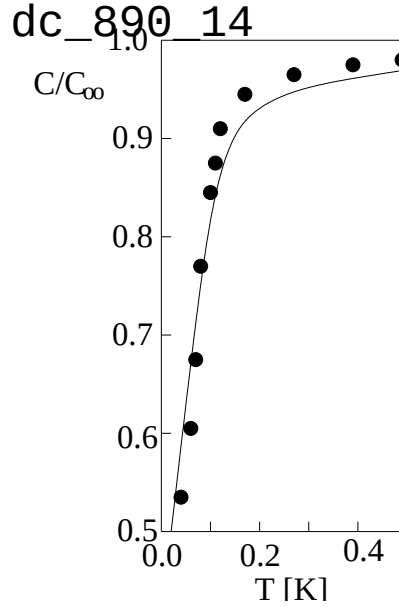
A kísérleti adatokkal vett egyezés különböző területeken igen szembeötlő. 11 különböző csillagászati fonalszerű szénklaszter mérés különböző csillagkörnyezetekből (és alacsony hőmérsékleten) $P_3/P_5 = 11$ értéket eredményez²⁹⁷, míg az itt bemutatott számolás $P_3/P_5 = 10$ -et ad $T \rightarrow 0$ határesetben. Monte Carlo szimulációk és mérési eredmények^{297–299} az itt tárgyalthoz hasonló környezetből származó fonalszerű klaszterekre $\bar{M} = 2 - 3$ értéket adnak alacsony hőmérsékleten, míg (416) $T \rightarrow 0$ határesetben $\bar{M} = e = 2.718$ -at eredményez. Szintén alacsony hőmérsékleten mért fonalszerű szén klaszter normalizált abundenciák (az $A/\bar{A}$ kísérleti adatok jelintenzitás arányokból voltak megadva; a kísérleti adatok: fehér körök²⁹⁸; négyzet és rombusz²⁹⁹; háromszög fel³⁰⁰; háromszög le³⁰¹) az elméletileg számolt értékekkel (P_M/P_{ave} , ahol P_{ave} az $M \leq 9$ -re fennálló két legnagyobb járulék összege $P_{ave} = P_2 + P_3$, a rajzon telt körök) jól egyeznek, lásd 23. Ábra.



23. Ábra . Normalizált fonalszerű szén klaszter abundenciák különböző M klaszterméretekre. A kísérleti adatok fehér körök²⁹⁸; négyzet és rombusz²⁹⁹; háromszög fel³⁰⁰; háromszög le³⁰¹ publikációkból származnak. Az elméleti adatokat a fekete körök P_M/P_{ave} értékből eredményezik.

Megjegyzem, hogy ez esetben lényeges eltérések a kísérleti adatoktól $M > 9$ -tól kezdődnek, pont attól a ponttól amelytől a kísérleti adatokban nem-fonalszerű klaszterképződmények jelennek meg³⁰².

Érdekes kísérleti adattal vett összehasonlítást mutatok be a 24. Ábra esetében is. Az $(Eu_xSr_{1-x})S$ vegyület $x = 0.025$ értékre vett normalizált Curie konstansának hőmérsékletfüggése található itt gyakorlatilag fit-paraméterek nélkül reprodukálva. A mágneses szuszeptibilitás mérések rég sejtetik hogy ezen anyagban fonalszerű klaszterképződmények fejlődnek ki^{303,304}. A kísérleti pontok Ref.[³⁰⁴]-ból származnak, az elméleti eredményeknek megfelelő görbe pedig (417-419) összefüggésekből ered (a részletes bemutatását az elméleti jellemzésnek a VA.9.a alfejezetben található). A $signJ(r)$ a [³⁰³]-ból származik és alapján $K = \exp[-0.00275 \ln^3(6.93/T)]$ ered [lásd (271)], amely a hőmérsékletfüggést adja a P_M tagokon keresztül. C_∞ a $T \rightarrow \infty$ esetnek megfelelő Curie konstanst jelöli. Amint látható, az egyezés nagyon jó minőségű.



24. Ábra . Normalizált Curie konstans hőmérsékletfüggése $(Eu_xSr_{1-x})S$, $x = 0.025$ esetében. A kísérleti adatok mint pontok a Ref.[³⁰⁴] referenciából származnak, a folytonos görbe pedig az elméleti eredmény.

D. További eredmények

A későbbiekben részletesen tárgyaltam a mágneses szuszceptibilitás viselkedést különböző esetekben³⁰⁵, és kiterjesztettem a számolást olyan szituációra is amikor véges méretű elemek alkotják a kialakuló fonalszerű klasztereket³⁰⁶.

XII. EGZAKT ALAPÁLLAPOTOK A HÁROM DIMENZIÓS PERIODIKUS ANDERSON MODELLRE.

A. Körülmények

Az előző XI. fejezetben tárgyalt klaszterképződés leírásához saját modellformálás volt szükséges, amely keretei között a pontosság elérhető volt. A kis kölcsönhatási hatótávolság és kis koncentráció miatt csak rövid távolságú térbeli korrelációk érvényesültek a rendszerben. Mindannak ellenére hogy hosszútávú térbeli rendezettség nem jött létre, a teljesen rendezetlen magashőmérsékletű fázis egy egyszerű formában átrendeződött, továbbá a vizsgált rendszer habár rendezetlen volt, végeredményben klasszikusan viselkedett.

Az elkövetkező fejezetekben ettől eltérően, olyan eseteket mutatok be ahol a modellformálást lényegében a szakirodalom már régen megtette, így a modellkialakítás útján a matematikai leírás gördülékenyebbé tételére nincs már lehetőség. Ezen túlmenően az elemzésre kerülő sokrészecskés rendszerek kvantummechanikai viselkedésűek és bennük a korrelációs hatások teljes énjükben érvényesülnek majd. Habár kutatói tevékenységem során ilyen körülmények között több más módszert is használtam³⁰⁷, a jelen XII és az elkövetkező

öt (XIII - XVII) fejezetben ugyanazon, a pozitív szemidefinit operátorok tulajdonságaira alapuló módszer kerül alkalmazásra. A módszer saját fejlesztésű, és mivel felhasználására itt kerül sor először, aláhúdom, hogy a módszer kifejlődéséhez kapcsolódó részletes előzmények ismertetése a II B 2.a alfejezetben történt meg. Magának a módszernek az ismertetése, mivel saját munkám eredménye, nagy részletességgel és több pedagógikus példa bemutatásával történt meg a V B alfejezetben.

Az e fejezetben tanulmányozott modell a periodikus Anderson modell (PAM) lesz, mégpedig $D = 3$ három dimenzióban. Maga a modell szóba került már a IX fejezetben, mégpedig közelítő variációs módszerrel tárgyalva. Az esetben félig töltött rendszer volt a vizsgált paraméterter egyik jellemzője, itt azonban félig töltött rendszertől távol elhelyezkedő paraméter tartományokat fogok vizsgálni. Az eredmények szintjén látni lehet majd többek között azt, hogy amit a Gutzwiller hullámfüggvény képtelen volt megtenni a X. fejezetben, mégpedig fémesről szigetelő fázisra való átváltást leírni, azt egy egzakt jellemzés könnyedén megteszi. Azt is látni lehet majd, hogy egy pontos eredmény olyan viselkedésformákat is feltár erős korrelációs hatások jelenlétében, amelyekről közelítések útján, meggyőzően, nagyon nehéz számot adni.

A PAM-ra vonatkozólag megemlítem még, hogy a kétsávós erősen korrelált rendszereket leíró egyik típusmodell. Mivel a PAM Bethe-ansatz segítségével nem kezelhető (nem integrálható modelltípus), egzakt megoldást rá vonatkozólag, a teljes fázisdiagramra még egy dimenzióban sem ismerünk. Az első egzakt 3D megoldásokat az alapállapotra vonatkozólag (véges és nemzéró Hubbard U kölcsönhatás esetén és véges koncentráción) az alábbiakban ismertetésre kerülő fejezet tartalmazza. A számítások 2001-ben, egy 4 hónapos Augsburgi látogatás idején kezdődtek el, a publikálásra való beküldés a rövid (levél) változatra 2003 legelején történt, majd a hosszú cikk 2005-ben került nyomtatásba.

Az e témakörhöz tartozó saját publikációk a Ref.^[11,12]-ben találhatóak, a modell elemzés részletes előzményei a II B 2.b alfejezetben voltak bemutatva, míg az alkalmazott módszer részletes ismertetése a V B alfejezetben történt meg.

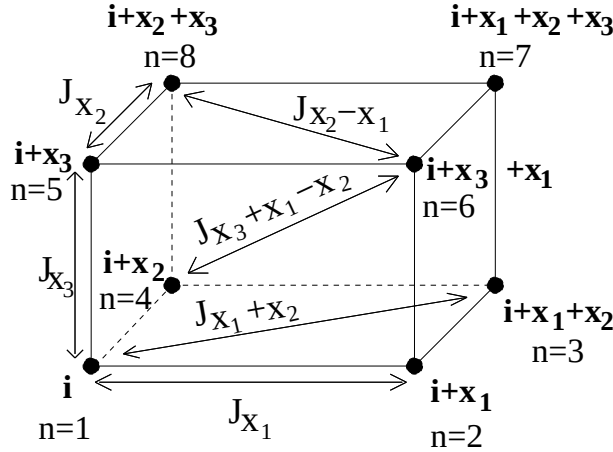
B. A modell és eredmények

Legyen egy tetszőleges 3D Bravais rács mely I elemi celláját $\{\mathbf{x}_\tau\}$, $\tau = 1, 2, 3$ primitív vektorok jellemzik. Ezen a rendszeren értelmezett PAM Hamilton operátora amit ez alkalommal használok $\hat{H} = \hat{H}_0 + U\hat{D}^f$, ahol $\hat{D}^f = \sum_{\mathbf{i}} \hat{n}_{\mathbf{i}\uparrow}^f \hat{n}_{\mathbf{i}\downarrow}^f$ az f elektronok között ható lokális Coulomb tasztítást írja le ($U > 0$) és az egy-részecske $\hat{H}_0$ járulék formája

$$\begin{aligned} \hat{H}_0 = \sum_{\mathbf{i}, \sigma} \left\{ \sum_{\mathbf{r}} \left[t_{\mathbf{r}}^d \hat{d}_{\mathbf{i}\sigma}^\dagger \hat{d}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}, \sigma} + t_{\mathbf{r}}^f \hat{f}_{\mathbf{i}\sigma}^\dagger \hat{f}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}, \sigma} + V_{\mathbf{r}} (\hat{d}_{\mathbf{i}\sigma}^\dagger \hat{f}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}, \sigma} \right. \right. \\ \left. \left. + \hat{f}_{\mathbf{i}\sigma}^\dagger \hat{d}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}, \sigma} \right) + H.c. \right] + V_0 (\hat{d}_{\mathbf{i}\sigma}^\dagger \hat{f}_{\mathbf{i}\sigma} + H.c.) + E_f \hat{n}_{\mathbf{i}\sigma}^f \right\}. \end{aligned} \quad (420)$$

A $\hat{H}_0$ kifejezésében $t_{\mathbf{r}}^b$, $b = d, f$ a hopping mátrixelemek nagyságát, $V_{\mathbf{r}}$ és V_0 a nem-lokális és lokális hibridizáció erősségét, és E_f a lokális f -elektron energiát jellemzik. Megemlítem, hogy (394)-hez képest (420) abban különbözik, hogy az utóbbi esetében közvetlen hopping meg van engedve az f elektronok részére is, E_f értéke nem rögzített, továbbá a hibridizációs

tagnak van egy lokális és egy elsőszomszédjáruléka is. Az elemzés során $\mathbf{r} \neq 0$ az I cella terjedelmében vesz fel értékeket (lásd a 25. Ábrát).



25. Ábra . A tanulmányozott rács elemi cellája (I) egy ortorhombikus esetben felrajzolva, egy tetszőleges $\mathbf{i}$ csomóponton. Itt $\mathbf{x}_\tau$ a primitív vektorokat jelöli, és n a cella csúcsinak $\mathbf{i}$ -től független jelölését mutatja. A nyílak hopping és hibridizációs ($J = t, V$) tagokat szemléltetnek, melyek I -ben jelen vannak.

Hogy elkerülhető legyen a $H.c.$ Hermitikus konjugálás jelenléte miatt bizonyos járulékok megduplázása, a lehetséges $\mathbf{r}$ értékek megadása a következő képpen történik: Ha I_i , az $\mathbf{i}$ csomóponton értelmezett elemi cella, akkor ennek $\mathbf{r}_{I_i} = \mathbf{i} + \mathbf{r}_{\alpha\beta\gamma}$ csomópontjait, az $\mathbf{r}_{\alpha\beta\gamma} = \alpha\mathbf{x}_1 + \beta\mathbf{x}_2 + \gamma\mathbf{x}_3$; $\alpha, \beta, \gamma = 0, 1$, és $n(\alpha, \beta, \gamma) = 1 + \alpha + 3\beta + 4\gamma - 2\alpha\beta$ bevezetésével, $n = 1, 2, \dots, 8$ formájában, $\mathbf{i}$ -től független módon számozhatom meg (lásd a 25. Ábrát). Ekkor $\mathbf{r} = \mathbf{r}_{\alpha'\beta'\gamma'} - \mathbf{r}_{\alpha\beta\gamma}$, $n(\alpha', \beta', \gamma') > n(\alpha, \beta, \gamma)$, formájában van értelmezve és összesen 13 különböző értéket vehet fel [$\mathbf{x}_\tau$ ($\tau = 1, 2, 3$), $\mathbf{x}_{\tau'} - \mathbf{x}_\tau$ ($\tau' > \tau$), $\mathbf{x}_3 \pm \mathbf{x}_2 \pm \mathbf{x}_1$].

Az alapállapotra vett egzakt megoldások levezetésének lehetőségét az

$$\begin{aligned} \hat{A}_{I\sigma}^\dagger &= \sum_{b=d,f} \sum_{\alpha,\beta,\gamma=0}^1 a_{n(\alpha,\beta,\gamma),b}^* \hat{b}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_{\alpha\beta\gamma},\sigma}^\dagger = \\ &= \sum_{b=d,f} (a_{1,b}^* \hat{b}_{\mathbf{i},\sigma}^\dagger + a_{2,b}^* \hat{b}_{\mathbf{i}+\mathbf{x}_1,\sigma}^\dagger + \dots + a_{8,b}^* \hat{b}_{\mathbf{i}+\mathbf{x}_2+\mathbf{x}_3,\sigma}^\dagger), \end{aligned} \quad (421)$$

cella-operátorok bevezetése adja, hol $a_{n,b}^* \neq 0$ a későbbiekben meghatározandó numerikus koeficienssek. A (421) tulajdonképpen a (278) blokk operátor amely az I_i cellán van értelmezve. Habár $\{\hat{A}_{I\sigma}^\dagger, \hat{A}_{I'\sigma'}^\dagger\} = \{\hat{A}_{I\sigma}, \hat{A}_{I'\sigma'}\} = 0$ és $\{\hat{A}_{I\sigma}, \hat{A}_{I\sigma}^\dagger\} = K_d + K_f$, ahol $K_b = \sum_{n=1}^8 |a_{n,b}|^2$, $n \equiv n(\alpha, \beta, \gamma)$, az $\hat{A}_{I\sigma}$ blokk operátorok nem teljesítenek kanonikus antikommutációs relációkat, mert például, $I \neq I'$ esetében, $\{\hat{A}_{I\sigma}, \hat{A}_{I'\sigma'}^\dagger\} \neq 0$. Továbbmenőleg, a rendszer transzlációs szimmetriája miatt, úgy mint (278) esetében, az $a_{n,b}^*$ koeficienssek minden elemi cellában azonosak.

Az előbbieken bevezetett blokk operátorok segítségével, periodikus határfeltételek feltételezése mellett, $\hat{H}$ -t a (296) és (298) felhasználásával, a következő formában írunk fel

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{i},\sigma} \hat{A}_{I\sigma} \hat{A}_{I\sigma}^\dagger + U \sum_{\mathbf{i}} \hat{P}_{\mathbf{i}} + E_g, \quad (422)$$

ahol (299)-nek megfelelően $\hat{P}_{\mathbf{i}} = \hat{n}_{\mathbf{i}\uparrow}^f \hat{n}_{\mathbf{i}\downarrow}^f - \hat{n}_{\mathbf{i}\uparrow}^f - \hat{n}_{\mathbf{i}\downarrow}^f + 1$, $E_g = K_d N + U N_\Lambda - 2 N_\Lambda (2K_d - E_f)$, és N , N_Λ a rendszerben szereplő elektronok számát, illetve ráccsomópontok számát jelöli.

Hogy (422) visszaadja a kiinduló Hamilton operátort, az $a_{n,b}^*$ tagoknak az értéke nem lehet tetszőleges, hiszen úgy ahogy azt (280) bemutatásakor ismerttettem, ezek megfelelően vissza kell adják a kiinduló Hamilton operátor $t_{\mathbf{r}}^d$, $t_{\mathbf{r}}^f$, $V_{\mathbf{r}}$, $V_{\mathbf{r}}^*$, V_0 , V_0^* , E_f , U , mikroszkopikus paramétereit minden $\mathbf{r} \in I_{\mathbf{i}}$ esetére. Hogy ez megtörténjen, az $a_{n,b}$ ismeretlenek egy 55 tagból álló nemlineáris komplex-algebrai egyenletrendszer megoldásait kell képezzék [ez a (280) egyenletrendszer most], mely sűrített formája $b, b' = d, f$ jelölések bevezetésével a következő

$$\sum_{\beta_1, \beta_2, \beta_3 = -1}^1 \left(\prod_{i=1}^3 D_{\beta_i, \alpha_i} \right) a_{n^+, b}^* a_{n^-, b'} = T_{\bar{\mathbf{r}}, \nu}^{b, b'}. \quad (423)$$

A megadott egyenletben $D_{\beta, \alpha} = (1 - \delta_{\beta, -1})\delta_{\alpha, 0} + \delta_{\alpha, \beta}(1 - \delta_{\alpha, 0})$, $n^{\pm} = n[g^{\pm}(\beta_1, \alpha_1), g^{\pm}(\beta_2, \alpha_2), g^{\pm}(\beta_3, \alpha_3)]$, és $g^{\pm}(\beta, \alpha) = \beta\delta_{\alpha, 0} + (1 \mp \alpha)(1 - \delta_{\alpha, 0})/2$. A kiinduló Hamilton operátor mikroszkopikus paraméterei a $T_{\bar{\mathbf{r}}, \nu}^{b, b'} = -(1 - \delta_{\nu, 0})[\delta_{b, b'}t_{\bar{\mathbf{r}}}^b + (1 - \delta_{b, b'})V_{\bar{\mathbf{r}}}] - \delta_{\nu, 0}[\delta_{b, b'}(\delta_{b, f}(E_f + U - K_d) - \delta_{b, d}K_d) + (1 - \delta_{b, b'})\delta_{b, d}V_0]$ kifejezésben találhatók, ahol $\bar{\mathbf{r}} = \sum_{i=1}^3 \alpha_i \mathbf{x}_i$ az I cellában vett vektor, vagy $\bar{\mathbf{r}} = 0$, és $\nu = \sum_{i=1}^3 |\alpha_i|^2$.

1. Alapállapotok 3/4 rendszertöltésen

Eltekintve az E_g konstanstól, a (422) relációban szereplő $\hat{H}$ egy pozitív szemidefinit operátor. Ennek megfelelően, úgy ahogy azt a (309-314) alapállapot hullámfüggvény konstrukció bemutatásánál részletesen elemeztem, egy $|\Psi_g\rangle$ állapot amely a $\hat{P}_{\mathbf{i}}|\Psi_g\rangle = 0$ és $\hat{A}_{I, \sigma}^{\dagger}|\Psi_g\rangle = 0$ kondícióknak eleget tesz minden $\mathbf{i}$ -re, a rendszer egzakt alapállapotát képezi, mely energiája E_g . Megjegyzem [lásd (299)], hogy a $\hat{P}_{\mathbf{i}}$ operátor, a legkisebb (zéróval egyenlő) sajátértékét akkor veszi fel, ha minden $\mathbf{i}$ csomóponton legalább egy f elektron található. Így, [lásd (313) $\hat{F}^{\dagger}$ operátorát] a $|\Psi_g\rangle$ -be belép $\hat{F}^{\dagger} = \prod_{\mathbf{i}=1}^{N_{\Lambda}} \hat{F}_{\mathbf{i}}^{\dagger}$ operátor, amelyben az $\hat{F}_{\mathbf{i}}^{\dagger} = \mu_{\mathbf{i}\uparrow}\hat{f}_{\mathbf{i}\uparrow}^{\dagger} + \mu_{\mathbf{i}\downarrow}\hat{f}_{\mathbf{i}\downarrow}^{\dagger}$ lokális tag tetszőleges $\mu_{\mathbf{i}\sigma}$ koefficiensekkel értelmezett, kelt egy f elektront minden $\mathbf{i}$ rácsponton, tehát eleget tesz az első megkövetelt kondíciónak ($\hat{P}_{\mathbf{i}}|\Psi_g\rangle = 0$). Továbbmenőleg, [lásd (310)], a $|\Psi_g\rangle$ -be belép a $\prod_{\mathbf{i}=1}^{N_{\Lambda}} (\hat{A}_{I\uparrow}^{\dagger}\hat{A}_{I\downarrow}^{\dagger})$ járuléka is a $\hat{A}_{I, \sigma}^{\dagger}\hat{A}_{I, \sigma}^{\dagger} = 0$ összefüggés miatt [lásd (309)], így $|\Psi_g\rangle$ a második kondíciót is teljesíti ($\hat{A}_{I, \sigma}^{\dagger}|\Psi_g\rangle = 0$). Következésképpen, (313) mintájára a (nem-normalizált)

$$|\Psi_g\rangle = \prod_{\mathbf{i}=1}^{N_{\Lambda}} [\hat{A}_{I\uparrow}^{\dagger}\hat{A}_{I\downarrow}^{\dagger}\hat{F}_{\mathbf{i}}^{\dagger}] |0\rangle \quad (424)$$

állapotvektor a rendszer alapállapotát képezi. Habár $|\Psi_g\rangle$ a $\mathbf{i}$ csomópontokra vett produktum formájában van kifejezve, az alapállapot mégis nemlokális, hiszen az $\hat{A}_{I, \sigma}^{\dagger}$ operátorok egy blokkon vannak értelmezve és az egymást fedő cellafelületeken is kelhetnek részecskéket. Ennek megfelelően, $|\Psi_g\rangle$ fizikai viselkedése attól is függ, hogy az $\hat{A}_{I, \sigma}^{\dagger}$ -ba beépülő koefficiensek a (423) egyenletből milyeneknek adódnak.

A kimutatott alapállapot $N = 3N_{\Lambda}$ elektront ír le, tehát 3/4 rendszertöltést jellemez (maximálisan $4N_{\Lambda}$ elektron vihető be a rendszerbe). A $\mu_{\mathbf{i}, \sigma}$ koefficiensek tetszőleges mivolta miatt az alapállapot spin-degenerált. A mágnesezettségben $\mu_{\mathbf{i}, \sigma}$ koefficiensekre átlagolva zérót kapunk eredményül, így a rendszer globálisan paramágnesként viselkedik. Az

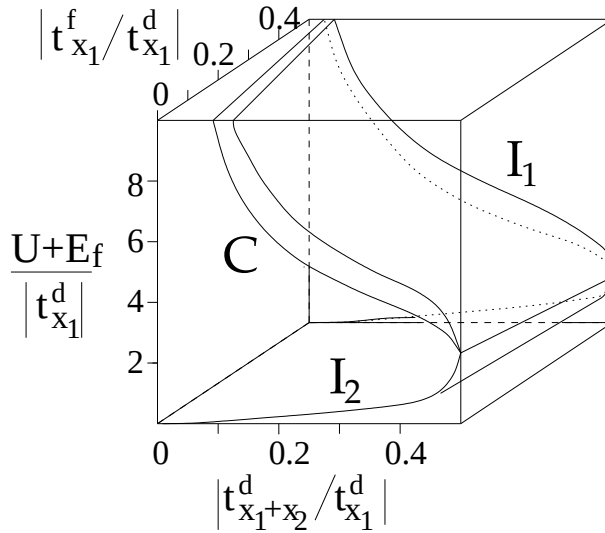
alapállapotot csak (424) formában lehet felírni, tehát $|\Psi_g\rangle$ az összes lehetséges degenerációt magába foglalja, azaz (424) az unicitás követelményének eleget tesz [lásd VB.4.A. alfejezetet].

Az $U = 0$ nemkölcönható esetben (424) nem az alapállapot, hiszen $|\Psi_g\rangle$ -ben, az $\hat{F}_i^\dagger$ operátorok jelenlétét éppen $U \neq 0$ érték kényszerítette ki. Megjegyzendő továbbá, hogy egy konkrét $U = U_1 \neq 0$ -hoz tartozó $|\Psi_g\rangle$ megoldás bonyolult módon kapcsolódik egy másik $U = U_2 > 0, U_2 \neq U_1$ megoldáshoz, mert U megváltoztatása, a (423) egyenletrendszeren keresztül, a $\hat{H}_0$ paraméterek megváltoztatását is igényli. A nemkölcönható esetből kiindulva, kis paraméter a $|\Psi_g\rangle$ megoldások eléréséhez nem található.

A $|\Psi_g\rangle$ fizikai tulajdonságai azon $a_{n,b}$ koefficiensektől függenek, amelyek a $\hat{H}$ mikroszkopikus paramétereinek rögzítése mellett, (423) egyenletrendszer megoldásaiként adódnak. Nekem eddig két megoldástípust sikerült kimutatni.

Az első esetben, ha $a_{n,d}^*/a_{n,f}^* = p_n = p = p^*$, a (424) alapállapot lokalizált hullámfüggvénnyé alakul, amely formája

$$|\Psi_{loc}\rangle = \prod_i [\sum_\sigma \mu_{i\sigma} p (p \hat{d}_{i\downarrow}^\dagger \hat{d}_{i\uparrow}^\dagger \hat{f}_{i\sigma}^\dagger + \hat{f}_{i\uparrow}^\dagger \hat{f}_{i\downarrow}^\dagger \hat{d}_{i\sigma}^\dagger)] |0\rangle. \quad (425)$$



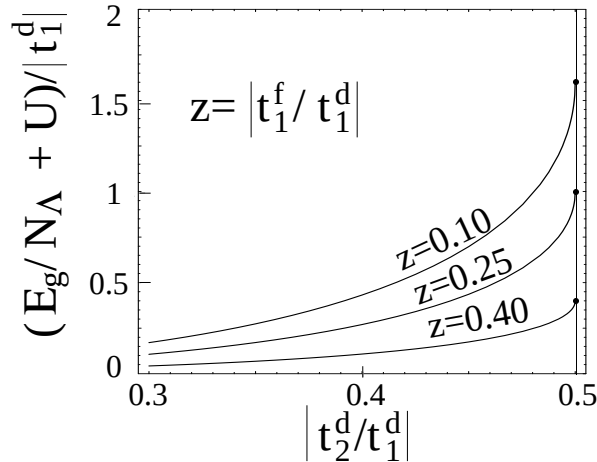
26. Ábra . Felületek a paramétertérben melyeken a kimutatott szigetelő (I_1 a $|V_1/V_0| < 1/2$ esetben, I_2 a $|V_1/V_0| > 1/2$ esetben), illetve vezető (C) alapállapotok léteznek.

A (425) indoklása abban áll, hogy ez esetben az $\hat{A}_{i,\sigma}^\dagger$ operátor az I_i cella minden $\mathbf{j}$ csomópontjában $\hat{Z}_{i,\sigma}^\dagger = (p \hat{d}_{j,\sigma}^\dagger + \hat{f}_{j,\sigma}^\dagger)$ formában hat, és ennek következtében, a minden ráccsomópontra vett $\prod_{i,\sigma} \hat{A}_{i,\sigma}^\dagger$ szorzat, $\hat{Z}_{i,\sigma}^\dagger \hat{Z}_{i,\sigma}^\dagger = 0$ miatt, $\prod_{i,\sigma} \hat{Z}_{i,\sigma}^\dagger$ típusú szorzattá alakul. Ez a megoldás a 26.Ábra I_1, I_2 felületein jelenik meg. Ezen állapotban minden csomóponton szigorúan 3 elektron tartozkodik, ezáltal a rendszerben hosszútávú térbeli sűrűség-sűrűség korrelációk vannak jelen. Igazolható hogy $\langle \hat{b}_{i,\sigma}^\dagger \hat{b}_{j,\sigma'}^\dagger \rangle = 0$ minden $b, b' = d, f$, minden σ, σ' és minden $\mathbf{i} \neq \mathbf{j}$ értékre, továbbá $Re\sigma(0) = 0$, hol $\sigma(\omega)$ az elektromos vezetőképesség. Ennek megfelelően, az állapot lokalizált és szigetelő. Ezen megoldás érdekessége, hogy $y = |t_2^d/t_1^d| = y_c = 1/2$ paraméterérték mellett, $y > y_c$ -re kilépünk a szigetelő fázisból (lásd 27. Ábra). Ezen pontban, az alapállapot energiája véges, de végtelen deriválttal rendelkezik. Mivel a hopping mátrix elemek a nyomás függvényei, következik, hogy a szigetelő állapotból

való kilépés pillanatában, az alapállapot-energia nyomás szerinti deriváltja végtelenné alakul, tehát a kompresszibilitás anomáliával rendelkezik. Ilyen jelenséggel nehézfermionos rendszerekben kísérletileg is találkozunk³⁰⁸.

A második esetben, $p_n^* = -p_n$, $|p_n| = p$ fennállásakor, a megoldás itineráns, és a 26. Ábra C-vel jelölt felületén sikerült kimutatni. Ez esetben az elektronok száma a csomópontokon 0 és 4 között változhat, így a lokalizált jelleg megszűnik, a hopping tagok és nemlokális hibridizációs járulékok alapállapotra számított várható értékei zérótól különbözőek lesznek. Ez esetben, az alapállapot megoldást $N = 3N_\Lambda + N'$, $N' < N_\Lambda$ esetre felírva, és $\mu^+ = E_g(N+1) - E_g(N)$, $\mu^- = E_g(N) - E_g(N-1)$ részecskeszám függő kémiai potenciál értékeket kiszámítva, $\mu^+ - \mu^- = 0$ adódik minden $4N_\Lambda > N > 3N_\Lambda$ értékre, amiből következik, hogy a rendszer vezető¹¹⁸ (lásd (318)). A megoldás további érdekessége abban rejlik, hogy az alapállapotban, egy konstans erejéig, a Hamilton operátor a

$$\hat{H}_g = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \left[(K_d - R_{\mathbf{k}}^{-1}) \hat{C}_{1, \mathbf{k}\sigma}^\dagger \hat{C}_{1, \mathbf{k}\sigma} + K_d \hat{C}_{2, \mathbf{k}\sigma}^\dagger \hat{C}_{2, \mathbf{k}\sigma} \right] \quad (426)$$



27. Ábra . A lokalizált állapot alapállapot energiája $(E_g/N_\Lambda + U)/|t_1^d|$ formában kifejezve $|t_2^d/t_1^d|$ függvényében, különböző $z = |t_1^f/t_1^d|$ értékekre; A mutatott esetben $|V_1/V_0| > 1/2$ áll fenn.

formára redukálódik ahol $\hat{C}_{1, \mathbf{k}\sigma} = R_{\mathbf{k}}^{1/2} \hat{A}_{\mathbf{k}\sigma}$, $R_{\mathbf{k}}^{-1} = \sum_b |a_{kb}|^2$, $\{\hat{C}_{1, \mathbf{k}\sigma}, \hat{C}_{2, \mathbf{k}\sigma}^\dagger\} = 0$, $\hat{b}_{\mathbf{k}, \sigma}$ a $\hat{b}_{i, \sigma}$ Fourier transzformáltja, $\hat{A}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger = \sum_{b=d, f} a_{\mathbf{k}, b}^* \hat{b}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger$ az $\hat{A}_{i, \sigma}^\dagger$ Fourier transzformáltja, továbbá $\gamma = 1, 2$ -re $\{\hat{C}_{\gamma, \mathbf{k}\sigma}, \hat{C}_{\gamma, \mathbf{k}'\sigma'}^\dagger\} = \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \delta_{\sigma, \sigma'}$. A (426) indoklása az, hogy (422) második tagja alapállapotban nem ad járulékot, tehát kiesik. A (422) első tagja pedig a (296) típusú átalakítás után Fourier transzformálva, majd diagonalizálva, egy összegzési konstans erejéig (426) Hamilton operátort eredményezi. A $\hat{H}_g$ -ből következik, hogy alapállapotban, a rendszert két olyan sáv jellemzi, mely közül az alsó ($\gamma = 1$ index) diszperzióval rendelkező, a felső pedig ($\gamma = 2$ index) teljesen lapos. 3/4 sávöltésnél, az alsó sáv teljesen töltött, míg a felső sáv csak félig van feltöltve. 3/4 sávöltés felett, az alsó sáv továbbra is teljesen feltöltve marad, míg a felső lapos sáv, félig töltés felett, de parciálisan töltött állapotban található. Megjegyzendő, hogy ritkaföldfémeket tartalmazó rendszerekben az E_F Fermi energia körül kísérletileg észlelt lapos sáv viselkedés nem ritka jelenség³⁰⁹.

A tanulmányozott állapotban a d, f elektronok $n_{\mathbf{k}}$ impulzus szerinti eloszlása $\mathbf{k}$

szerint semmi rendellenességet (ugrást, szögponotot, stb.) nem mutat. Megjegyzem, hogy az alapállapot hullámvektor explicit formájának ismeretében minden alapállapot várhatóérték, így $n_{\mathbf{k}}^b = \langle \hat{b}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k},\sigma} \rangle$ is, ahol $b = d, f$, kiszámítható. Ezáltal a Fermi momentum $\mathbf{k}_F$, illetve a $\mathbf{k}$ térben értelmezett Fermi felület fogalma nem definiálható, így a rendszer nem-Fermi folyadék. Ennek ellenére a Fermi energia $E_F = K_d$ értelmezhető. A Fermi felület fogalom hiánya miatt a Luttinger tétel (miszerint a kölcsönhatás a Fermi felület által bezárt térfogaton nem változtat) alkalmazhatatlan. A viselkedés a (426)-ban megjelenő felső lapos sáv következménye, melyről hangsúlyozni kell, hogy nem konvencionális sávszerkezeti (egyrészecske) eredmény, hiszen jelenléte, (423) összefüggésen keresztül, jólmeghatározott $U > 0$ értéket követel (lásd (423) fedési egyenletek jobboldalát amelyben U is szerepel). Megemlítem továbbá, hogy globálisan az állapot nem mágneses.

A bemutatott vezető állapotot legelőször komplex hybridizációs mátrixelem jelenlétében vezettem le¹¹, olyan körülmények között, hogy az f elektronok direkt hopping járulékkal szerepeltek $\hat{H}$ -ban. Megmutattam viszont, hogy az itt bemutatott vezető állapot megjelenéséhez mindez nem szükségszerű^{2,12}.

2. Alapállapotok 1/4 rendszertöltésen

Az előbb bemutatott 3/4 rendszertöltés esetében létező alapállapotok mellett, 1/4 rendszertöltés és alatta elhelyezkedő koncentrációs tartományban is sikerült alapállapotokat levezetnem. E célból az induló (420) szerint felírt Hamilton operátort (422)-től különböző pozitív szemidefinit alakra, mégpedig (279) nyomán a¹²

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{i},\sigma} \hat{A}_{\mathbf{i},\sigma}^\dagger \hat{A}_{\mathbf{i},\sigma} + U \sum_{\mathbf{i}} \hat{n}_{\mathbf{i},\uparrow} \hat{n}_{\mathbf{i},\downarrow} + E'_g \quad (427)$$

formára hoztam, ahol $\hat{A}_{\mathbf{i},\sigma}^\dagger$ továbbra is (421) egyenlőségben van értelmezve. Ez esetben (280)-nak megfelelő fedési egyenletek formája (423) egyenletekkel egyezik, azzal a különbséggel, hogy $T_{\mathbf{r},\nu}^{b,b'}$ kifejezésben $U = 0$ kerül és a hopping és hibridizációs járulékok előjelet váltanak. Továbbmenőleg, $E'_g = NK_d$, ahol N az elektronok száma, K_d meg (421) alatt értelmezett. Aláhúzom, hogy a pozitív szemidefinit formára való átalakítás példázata részletesen ismertetve volt (281-290) bemutatásakor a módszertani ismertetőben.

Az alapállapot hullámfüggvények levezetése (302-308) folyamán részletezett eljárás alapján történt. Abban az esetben ha az $\hat{A}_{\mathbf{i},\sigma}^\dagger$ blokk operátor koefficiensei olyanok hogy $a_{n,d}/a_{n,f} = p_n$ arány n függő, az alapállapot hullámvektor $N = N_\Lambda$ esetében (ez felel meg 1/4 rendszertöltésnek) [lásd (307)]

$$|\Psi_g(N_\Lambda)\rangle = \prod_{\mathbf{i}=1}^{N_\Lambda} \hat{Q}_{\mathbf{i},\sigma}^\dagger |0\rangle, \quad (428)$$

ahol [lásd (302)] $\{\hat{A}_{\mathbf{i},\sigma'}, \hat{Q}_{\mathbf{i},\sigma}^\dagger\} = 0$ kell teljesüljön az indexek tetszőleges értékére. A (428)-ban σ rögzített [(305) halmaz kiválasztásának σ rögzítése felel itt meg], tehát az alapállapot teljesen telített ferromágnes. Megemlítem, hogy a $\hat{Q}_{\mathbf{i},\sigma}^\dagger$ -ra kért antikommutációs reláció úgy teljesül hogy $\hat{Q}_{\mathbf{i},\sigma}^\dagger = \hat{Q}_{\mathbf{i},\sigma}^\dagger = \sum_{b=d,f} \sum_n q_{n,b}^* \hat{b}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_n,\sigma}^\dagger$ az $\hat{A}_{\mathbf{i},\sigma}^\dagger$ mintájára (ugyanazon blokkon és indexekkel) értelmezett, továbbá koefficiensei

$$\begin{aligned}
 q_{1,d}^* &= wa_{7,f}, q_{2,d}^* = wa_{8,f}, q_{3,d}^* = wa_{5,f}, q_{4,d}^* = wa_{6,f}, q_{5,d}^* = wa_{3,f}, q_{6,d}^* = wa_{4,f}, q_{7,d}^* = wa_{1,f}, \\
 q_{8,d}^* &= wa_{2,f}, q_{1,f}^* = -wa_{7,d}, q_{2,f}^* = -wa_{8,d}, q_{3,f}^* = -wa_{5,d}, q_{4,f}^* = -wa_{6,d}, q_{5,f}^* = -wa_{3,d}, \\
 q_{6,f}^* &= -wa_{4,d}, q_{7,f}^* = -wa_{1,d}, q_{8,f}^* = -wa_{2,d},
 \end{aligned} \tag{429}$$

ahol w tetszőleges nemzéró konstans. Egynegyed rendszertöltés alatt ($N < N_\Lambda$) az alapállapot (428) helyett

$$|\Psi_g(N)\rangle = \prod_{i \in \mathcal{D}_N} \hat{Q}_{i,\sigma_i}^\dagger |0\rangle \tag{430}$$

formát ölti, ahol $\mathcal{D}_N$ egy tetszőleges, N csomópontot tartalmazó halmaz. Ez esetben a $\hat{Q}_{i,\sigma_i}^\dagger$ operátorok σ_i spin indexei tetszőlegeselek, de azzal a megszorítással, hogy két $\hat{Q}_{i,\sigma_i}^\dagger$ és $\hat{Q}_{j,\sigma_j}^\dagger$ operátor ha összeér (azaz legalább egy közös ráccsomópontja van), akkor $\sigma_i = \sigma_j$ teljesül. Ennek következtében, 1/4 rendszertöltés alatt az alapállapot rendezetlen (nagyságú és spin irányú) ferromágneses klaszterekből áll melyek mágnesezettsége (a klaszterek között) nem korrelált. Így az alapállapot nagyfokú geometriai jellegű degeneráltságot mutat, de globálisan nem mágneses.

Megjegyzem még hogy $a_{n,d}/a_{n,f} = p_n = p = p^*$ esetében a (427) pozitív szemidefinit formához tartozó és $N \leq N_\Lambda$ koncentráció mellett (428,430) alatt megadott alapállapotú hullámvektorok úgy módosulnak, hogy bennük $\hat{Q}_{i,\sigma_i}^\dagger$ helyett $\hat{Q}'_i = [\hat{f}_{i,\uparrow}^\dagger - (1/p)\hat{d}_{i,\uparrow}^\dagger] + \mu_i[\hat{f}_{i,\downarrow}^\dagger - (1/p)\hat{d}_{i,\downarrow}^\dagger]$ jelenik meg (ahol μ_i tetszőleges), de (428,430) szerkezete nem változik (azaz ekkor $|\Psi_g(N)\rangle = \prod_{i=1}^N \hat{Q}'_i |0\rangle$ áll fenn). Ekkor $N = N_\Lambda$ esetében a $\prod_i$ az összes ráccsomópontokra kiterjed, míg $N < N_\Lambda$ esetében $\prod_i$ tetszőleges N csomópontot tartalmazó $\mathcal{D}_N$ halmazokra folyik. Ekkor $N = N_\Lambda$ esetre kapott alapállapot lokalizált és nem mágneses, és $N < N_\Lambda$ mellett kialakuló rendezetlen klaszterek lokalizált és nem mágneses tulajdonságot mutatnak. Megjegyzem, hogy $\hat{Q} \rightarrow \hat{Q}'$ átmenet a megoldásokban ugyanazon okra vezethető vissza mint (424) $\rightarrow$ (425), hiszen $\hat{Q} \rightarrow \hat{Q}'$ is annak a következménye, hogy az $\hat{A}_{I,\sigma}^\dagger$ operátorok $p_n = p$ esetében a (425) alatt bemutatott $\hat{Z}_{i,\sigma}^\dagger$ operátorokra redukálódnak.

Még azt jegyzem meg, hogy a (427) pozitív szemidefinit formára levezetett $p_n \neq p$ és $p_n = p$ megoldásokhoz tartozó fázisdiagram tartományok a (422) pozitív szemidefinit formához tartozó $p_n \neq p$ és $p_n = p$ megoldásokhoz kapcsolódó fázisdiagram tartományokból $t_{\mathbf{r}}^b \rightarrow -t_{\mathbf{r}}^b$, $V_{\mathbf{r}} \rightarrow -V_{\mathbf{r}}$ és $U \rightarrow 0$ változócserekkal megkaphatók (az $N \leq N_\Lambda$ esetre levezetett megoldások tetszőleges $U > 0$ esetében fennállnak).

Megemlítem továbbá, hogy a (427) pozitív szemidefinit formájú Hamilton operátor alapállapotú hullámfüggvényeinek (428,430) formában való felírásának jogosultságát és unicitását a V.B.4.B. alfejezetben elemeztem és mutattam be részletesen.

C. Következmények

A háromdimenziós PAM esetére véges koncentráció és véges $U > 0$ fennállása mellett az első levezetett pontos eredményeket ismertettem e fejezetben. 3/4 rendszertöltésre egy szigetelő és egy vezető fázis adódott, az utóbbi nem-Fermi folyadék formában, a szigetelő fázisból pedig a kilépés kompresszibilitási anomáliával jár. 1/4 rendszertöltésen ferromágneses rendeződést sikerült kimutatni, ez alatt pedig klaszterképződés észlelhető. Érdekes megjegyezni,

hogy úgy mint XI. fejezetben, a klaszterképződés kiskonzentrációs határesetben áll elő, rendezetlen klaszterekhez vezet, amelyek azonban nem fonalszerű formájúak. Az előző fejezetekhez viszonyított összehasonlítások azt is aláhúzzák, hogy lokalizált fázis jellemzése, ami lehetetlen volt a X. fejezetben, most problémamentesen megoldható.

Megemlíteném, hogy a legújabb összefoglaló a periodikus Anderson modellre¹⁵¹ külön paragrafust szentel az itt bemutatott eredményeknek. A ferromágnesességre vonatkozó alapállapotok pedig az egyik legismeretebb ferromágnesességet bemutató könyv (szerző D. C. Mattis) legújabb kiadásába bekerültek¹⁷⁹. Az eredményeket 2014-ben is többször idézték^{310,311}.

D. További fejlemények

A periodikus Anderson modellre vonatkozólag, véges és nemzéró $U > 0$ esetében $1D^{147,148}$ és $2D^{3,149}$ esetében is számoltam alapállapotú hullámfüggvényeket. A fázisdiagram különböző tartományainak elérhetőségét Ref.[3]-ban vizsgáltam. A félig töltött rendszer esetére is sikerült eljárást kidolgozni (e tartományban a korrelációs hatások rendkívül erősek) és ezt $U = \infty$ mellett⁴, majd véges U esetére is⁶ alkalmaztam.

XIII. LOKALIZÁCIÓ-DELOKALIZÁCIÓ ÁTALAKULÁS RENDEZETLEN ÉS KÖLCSÖNHATÓ KÉTDIMENZIÓS RENDSZEREKBEN.

A. Körülmények

Az előző XII. fejezetben először mutattam be kvantummechanikai rendszerben végbemenő rendeződési formákat melyek levezetése egzakt módon történt. Ezek között klaszterképződés is előfordult (1/4 rendszertöltés alatt), úgy ferromágneses és nem mágneses rendezetlen klaszterek formájában, de a XI. fejezethez képest itt az induló rendszer (a Hamilton operátor paramétereinek szempontjából nézve) rendezett volt, klasszikus viselkedés helyett kvantummechanikai viselkedés volt jelen, de amúgy, mindkét esetben kiskonzentrációs tartományon történt a jellemzés. A modell a IX. fejezetben is tanulmányozott PAM modell volt, de a XII. fejezetben nem félig töltött, hanem távol a félig töltött rendszertöltés esetétől, továbbá az eredmények szemléltették, hogy a fémes jelleg megváltozását, amelyet a X. fejezetben a Gutzwiller hullámfüggvény képtelen volt leírni, egy egzakt tárgyalás könnyedén megteszi. Ezen túlmenően, a XII. fejezetben bemutatott eredmények újfajta (a diszszertációban először említett) rendeződési formákat is kimutattak (mégpedig közelítésmentes módon), mint például a 3D esetben fellépő vezető nem-Fermi folyadék (tudomásom szerint 3D-ben és nem-Fermi folyadékra vonatkozólag amelyet Landau-féle rendparaméter nem jellemez, ez az egyedüli egzakt eredmény), illetve ferromágneses állapot.

A XI. és XII. előző két fejezetben tanulmányozott két modell között, amellettt hogy az első klasszikus a második meg kvantumos jellegű, a lényegbevágó különbség az, hogy az első rendezetlen a második pedig ezzel ellentétben rendezett. Felmerül tehát az a kérdés, hogy

vajon a XII. fejezetben a kvantummechanikailag viselkedő, de amugy rendezett rendszer esetében alkalmazott módszer, használható e rendezetlen, de kvantumos esetben ? Képes e ilyen körülmények között is rendeződési formákat kimutatni ? Ezen kérdések megválaszolása motiválja azt a tényt, miszerint a jelen fejezetben, rendezetlen, de kvantumos esetre alkalmazom a XII. fejezetben már bemutatott pontos eljárást. Az alkalmazásra 2D-ben kerül sor, mégpedig azért mert a fém-szigetelő átmenet szempontjából, a rendezetlen rendszerek esete, két dimenzióban a legvitatottabb.

Rendezetlen rendszerekre vonatkozólag skálatörvények útján 1979-ben egy érdekes eredmény született¹⁸² amelyet ma „a nem-kölcsönható skálatörvény” formában emlegetnek e területen. Ennek megfelelően, fém-szigetelő átmenet rendezeten rendszerekben és két dimenzióban nem lehetséges. A kilencvenes évek közepén, kísérleti adatok alapján világossá vált hogy az állítás teljes általánosságában nem igaz¹⁸³. Feltételezés szerint a tapasztalt átalakulás a rendezetlen rendszerekben jelenlévő kölcsönhatás következménye¹⁸⁴, de ennek mikéntje máig sem teljesen tisztázott aspektus. Az alább bemutatásra kerülő eredmények egzakt szinten mutatnak fém-szigetelő átmenetet rendezetlenség, kölcsönhatás és két dimenzió jelenlétében. Az eredmények 2003 elején voltak publikálásra beküldve.

A tárgykörre vonatkozó saját publikáció Ref.[5]-ben található, a részletes előzmények II B 3 alfejezetben voltak bemutatva, az alkalmazott módszer pedig teljes részletességében V B alfejezetben volt ismertetve.

B. Modell és a Hamilton operátor

Egy kétdimenziós Bravais rácsot veszek alapul mely primitív vektorai ($\mathbf{x}, \mathbf{y}$). Ezen rács minden egyes csomópontján két elektron $p = d, f$ lehetséges. Habár a rács Bravais típusú, a benne lezajló folyamatokat jellemző Hamilton operátort rendezetlennek tételezem fel (azaz az egyrészecske és kölcsönhatási tagok csatolási állandói rendezetlenek). Maga a Hamilton operátor formája $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_{int}$, ahol

$$\begin{aligned}\hat{H}_0 &= \sum_{p,p'=d,f} \sum_{\mathbf{i},\sigma} [t_{\mathbf{i},\mathbf{i},0,\sigma}^{p,p'} \hat{p}_{\mathbf{i},\sigma}^\dagger \hat{p}_{\mathbf{i},\sigma} + \sum_{\mathbf{r} \neq 0} (t_{\mathbf{i},\mathbf{i}+\mathbf{r},\mathbf{r},\sigma}^{p,p'} \hat{p}_{\mathbf{i},\sigma}^\dagger \hat{p}_{\mathbf{i}+\mathbf{r},\sigma} + H.c.)], \\ \hat{H}_{int} &= \sum_{p=d,f} \sum_{\mathbf{i}} U_{\mathbf{i}}^p \hat{n}_{\mathbf{i},\uparrow}^p \hat{n}_{\mathbf{i},\downarrow}^p.\end{aligned}\tag{431}$$

Itt $t_{\mathbf{i},\mathbf{j}-\mathbf{i},\sigma}^{p,p'}$ egy (általánosított) hopping tag, mely egy σ spinnel rendelkező elektron ugrását írja le a $\mathbf{j}$ csomóponti p' állapotból az $\mathbf{i}$ csomóponti p állapotba, miközben az ugrás a $\mathbf{j} - \mathbf{i}$ szakasz mentén történik. Megjegyzem, hogy $t_{\mathbf{i},\mathbf{j}-\mathbf{i},\sigma}^{p,p'}$ a $p = p'$ esetében egy standard hopping mátrixelem, mely a $p = d, f$ és σ spinű elektron $\mathbf{j}$ csomóponttól $\mathbf{i}$ csomópontra vett ugrását jellemzi. Ha $p \neq p'$ akkor $t_{\mathbf{i},\mathbf{j},\sigma}^{p,p'}$ hibridizációs mátrixelem. Hasonlóan $t_{\mathbf{i},\mathbf{i},0,\sigma}^{p,p'}$ (amely lokális, csomóponti, de szintén egyrészecske járulék), $p = p'$ esetében csomóponti egyrészecske potenciált jelöl („on-site potential”), míg $p \neq p'$ esetben lokális hibridizációt. Ami a kölcsönhatási tagokat illeti, $U_{\mathbf{i}}^p$ az $\mathbf{i}$ csomóponton vett és $p = d, f$ elektronra vonatkozó lokális Coulomb tasztítást jelöli ($U_{\mathbf{i}}^p > 0$). Az $\mathbf{r}$ vektor az elemi cella oldalélei vagy átlói mentén mozoghat, azaz 4 értéket vehet fel, éspedig: $\mathbf{r} = \mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{y} + \mathbf{x}, \mathbf{y} - \mathbf{x}$ (tehát elsőszomszéd

és másodsomszéd hopping és hibridizáció van jelen) . A rácsban lévő csomópontok számát N_Λ jelöli, míg N az elektronok száma.

A kiinduló Hamilton operátor nagyon általános. Minden valódi anyag vagy rendszer többsávós, és leírás közben mindig néhány sávba projektálunk³¹². Így, $p = d, f$ kétsávós jellemzés nem jelent komoly megszorítást az eredmények valódi rendszerekre vett alkalmazhatósága szempontjából. Végeredményben, a modell szempontjából elemezve a (431) kiinduló Hamilton operátort, megállapítható hogy ez, egy kétsávós és két dimenziós rendezetlen Hubbard modell Hamilton operátora.

Annak ellenére hogy az induló $\hat{H}$ általánossági foka nagy, vannak jelen bizonyos specifikus feltételek amelyek mellett eredményeket sikerült levezetnem. Ezen feltételeket tekintem át az alábbiakban. Feltételezem, hogy a lokális egyrészecske potenciálok taszító jellegűek minden csomóponton

$$t_{\mathbf{i},\mathbf{i},0,\sigma}^{p,p} > 0, \quad (432)$$

továbbá, a két típusú elektron mobilitásának aránya minden csomóponton ugyanaz

$$t_{\mathbf{i},\mathbf{i}+\mathbf{r},\mathbf{r},\sigma}^{p,p'} = w^{\delta_{p,f}+\delta_{p',f}} t_{\mathbf{i},\mathbf{i}+\mathbf{r},\mathbf{r},\sigma}^{d,d}. \quad (433)$$

Az első összefüggés (432) lényegében a befogó centrumok („trapping centers”) hiányát jelöli, míg a második feltétel, (433) gyakran teljesül valós anyagokban³¹³.

A rendszerünk, a kölcsönható jellege mellett, rendezetlen is. A rendezetlenség abban nyilvánul meg, hogy egyrészt $U_{\mathbf{i}}^p > 0$ teljesen független $2N_\Lambda$ rendezetlen paramétert jelöl, továbbá $t_{\mathbf{i},\mathbf{i}+\mathbf{r},\mathbf{r},\sigma}^{p,p'}$ paraméterek közül szintén $2N_\Lambda$ független és rendezetlen, [lásd (437) utáni II) megjegyzést], tehát $4N_\Lambda$ teljesen független és rendezetlen paraméter szerepel a Hamilton operátorban.

C. Pozitív szemidefinit formára vett transzformálás

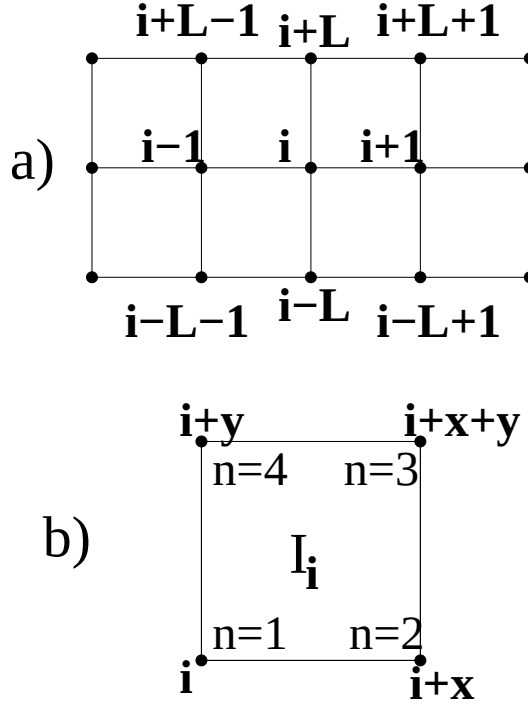
A pozitív szemidefinit formára vett átalakítás (278,279) összefüggések útját követi. Ennek megfelelően, a (278) blokk operátorok bevezetése végett: a) A rendszer minden $\mathbf{i}$ csomópontjára helyezett elemi cellájára (lásd 28.b. Ábra) egy plaquett operátort ($\hat{A}_{\mathbf{i},\sigma}$) értelmezek

$$\hat{A}_{\mathbf{i},\sigma} = \sum_{n=1}^4 (a_{n,d} \hat{d}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_n,\sigma} + a_{n,f} \hat{f}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_n,\sigma}) \quad (434)$$

formában, ahol $a_{n,p}$ numerikus paramétereket jelölnek. E összefüggésben, miközben n (az index amely blokkon belül számozza meg a csomópontokat) változik 1-től 4-ig, $\mathbf{r}_n$ sorban $0, \mathbf{x}, \mathbf{x} + \mathbf{y}, \mathbf{y}$ értékeket vesz fel (lásd 28.b. Ábrát melyben a $\mathbf{i}$ csomóponton értelmezett $I_{\mathbf{i}}$ elemi cella csomópontjai és ezekhez rendelt n értékek láthatók. Megjegyzem hogy $I_{\mathbf{i}}$ csomópontjain értelmezett a (434) összefüggésben szereplő $\hat{A}_{\mathbf{i},\sigma}$ operátor). b) Amint $N_\Lambda = L \times L$ feltételezéssel megszámozom a csomópontokat a 28.a. Ábrának megfelelő módon (a 28.a. Ábra a tetszőleges $\mathbf{i}$ csomópont körüli csomópont számozást mutatja be), a hopping mátrixelemekre a (280) fedési egyenletrendszernek megfelelően a következő összefüggéseket

kapom (ez matematikailag végül is azt jelenti, hogy a hopping tagokat a következő képpen reprezentálom)

$$\begin{aligned}
 t_{i,i+1,x,\sigma}^{d,d} &= a_{1,d}^* a_{2,d} \epsilon_{i,\sigma} + a_{4,d}^* a_{3,d} \epsilon_{i-L,\sigma}, \\
 t_{i,i+L,y,\sigma}^{d,d} &= a_{1,d}^* a_{4,d} \epsilon_{i,\sigma} + a_{2,d}^* a_{3,d} \epsilon_{i-1,\sigma}, \\
 t_{i,i+1+L,x+y,\sigma}^{d,d} &= a_{1,d}^* a_{3,d} \epsilon_{i,\sigma}, \\
 t_{i+1,i+L,y-x,\sigma}^{d,d} &= a_{2,d}^* a_{4,d} \epsilon_{i,\sigma}, \\
 t_{i,i,0,\sigma}^{d,d} &= |a_{1,d}|^2 \epsilon_{i,\sigma} + |a_{2,d}|^2 \epsilon_{i-1,\sigma} + |a_{3,d}|^2 \epsilon_{i-1-L,\sigma} + |a_{4,d}|^2 \epsilon_{i-L,\sigma}.
 \end{aligned} \tag{435}$$



28. Ábra . (a) A csomópontok számozása az i csomópont körül, és (b) az i csomópontra épített I_i elemi cella és a sarkainak jelölése.

Ezen egyenletrendszerre (433)-miatt feltételezem, hogy $a_{n,f} = w a_{n,d}$. (Hadd húzzam alá, hogy a bemutatott feltételezések mellett (435) gyakorlatilag a példaként bemutatott (289)-ből származtatható). Mindezen átalakítások következtében, a (431) Hamilton operátor, periodikus határfeltételek figyelembevétele mellett, a következő [(279)-nak megfelelő] formát ölti

$$\hat{H} = \sum_{i,\sigma} \epsilon_{i,\sigma} \hat{A}_{i,\sigma}^\dagger \hat{A}_{i,\sigma} + \sum_{p=d,f} U_i^p \hat{n}_{i,\uparrow}^p \hat{n}_{i,\downarrow}^p. \tag{436}$$

Itt hangsúlyoznom kell hogy a (432) összefüggés miatt, a (435) egyenletrendszer tetszőleges i -re vett utolsó sora csak abban az esetben lesz igaz, ha minden i -re

$$\epsilon_{i,\sigma} > 0 \tag{437}$$

összefüggés teljesül. Ennek megfelelően, a (436)-ban kapott $\hat{H}$ pozitív szemidefinit alakot ölt (és mindez csak akkor lesz igaz, ha (432) teljesül). Ez adja meg annak a lehetőségét, hogy az alapállapot hullámfüggvények explicit formáját felírhatni lehessen.

Továbbmenetel előtt két megjegyzést teszünk még:

I.) Az érthetőség szempontjából hangsúlyozni kell, hogy (435) egyenlettől kezdődőleg a csomópontokat már nem szükséges vektoriális ($\mathbf{i}$) jelöléssel illetni, hanem elegendő a számozási (i) jelölés használata. Ténylegesen, (436) összefüggésben „2-csomópont tag” (azaz csomópont közötti tagok) már nincsenek jelen, így ez a matematikai egyszerűsítés eszközölhető. Ez esetben a $t_{\mathbf{i},\mathbf{j}-\mathbf{i},\sigma}^{p,p'}$ also harmadik indexe ($\mathbf{j} - \mathbf{i}$), szintén átjelölhető, és pedig $x, y, y + x, y - x$ formában, mégpedig annak megfelelően, hogy $\mathbf{j} - \mathbf{i}$ értéke, sorjában, $\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{y} + \mathbf{x}, \mathbf{y} - \mathbf{x}$ vektorokat eredményezi.

II.) A hopping tagok közötti (435) összefüggések fennállása miatt szükséges a $\hat{H}_0$ -ban fellépő rendezetlenségről beszélni. Mivel (435)-ben (a spint is figyelembe véve), $2N_\Lambda$ darab független és (437) megszorításon túlmenően tetszőleges és rendezetlen $\epsilon_{i,\sigma}$ van, állítható, hogy $\hat{H}_0$ összesen $2N_\Lambda$ rendezetlen és független paramétert tartalmaz. Ezek átvitele a hopping tagokba azonban többféle képpen lehetséges. a) Feltételezhetjük hogy (435) utolsó egyenleteit lineáris egyenletrendszerként kezelve, adott $\{\epsilon_{i,\sigma}\}$ értékek, $\{t_{i,i,0,\sigma}^{d,d}\}$ értékeket határoznak meg, a rendezetlenség ezekre ruházódik át, azaz a rendezetlenség ekkor $\hat{H}_0$ -ban diagonális. Ez az eset felfogható úgy, mintha a csomópontokba, rendezetlenül különböző atomokat helyeznénk el, ezek adnák rendezetlenül a $\{t_{i,i,0,\sigma}^{d,d}\}$ értékeket. Az atomok behelyezése után már a hopping tagok determináltak, ezt fejeznék ki ekkor (435) első négy sora. b) Alternative, a (435) harmadik és negyedik sorának alapján a $\hat{H}_0$ -beli rendezetlenség a plaquette-diagonális hopping tagokra is átruházható. Ez annak a fizikai esetnek felelne meg, amikor a cellák közepébe, rendezetlen módon, különböző atomokat helyeznénk be és ezt tekintenénk a rendezetlenség közvetlen fizikai forrásának. Ekkor, az egyrészecske tagban, eredetét tekintve, a rendezetlenség nem-diagonálisnak fogható fel. A cellaközépbe való atom-behelyezés után, a többi hopping tag determinált lenne már, ezt írnák le a (435) megmaradó egyenletei (ezúttal a megmaradó három egyenlet az elsőszomszéd hoppingokat, illetve az „on-site” tagokat határozná meg a diagonális hoppingok függvényében).

D. Az egzakt alapállapot hullámfüggvények

Mivel a transzformált (436) Hamilton operátor (279) típusú, az alapállapot hullámfüggvény megkeresése (302) stratégiájának megfelelő. Az $a_{n,f} = w a_{n,d}$ összefüggés miatt (lásd (435) utáni mondat) az $\hat{A}_{\mathbf{i},\sigma}$ operátorok formája

$$\begin{aligned}\hat{A}_{\mathbf{i},\sigma} &= \sum_{n=1}^4 a_{n,d}(\hat{d}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_n,\sigma} + w \hat{f}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_n,\sigma}) = \sum_{n=1}^4 a_{n,d} \hat{O}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_n,\sigma}, \\ \hat{O}_{\mathbf{j},\sigma} &= (\hat{d}_{\mathbf{j},\sigma} + w \hat{f}_{\mathbf{j},\sigma}),\end{aligned}\tag{438}$$

kifejezésre alakul. Ekkor,

$$\hat{O}_{\mathbf{j},\sigma}^\dagger = \hat{d}_{\mathbf{j},\sigma}^\dagger - \frac{1}{w} \hat{f}_{\mathbf{j},\sigma}^\dagger\tag{439}$$

rendelkezik a

$$\{\hat{O}_{\mathbf{j},\sigma}, \hat{O}_{\mathbf{j}',\sigma'}^\dagger\} = 0\tag{440}$$

tulajdonsággal minden $\mathbf{j}, \mathbf{j}'$ és minden σ, σ' esetében [lásd (302)]. Bevezetve ekkor (303) alapján a

$$|\Psi\rangle = \prod_{\mathbf{j}} [\hat{O}_{\mathbf{j},\sigma}^\dagger + v_{\mathbf{j}} \hat{O}_{\mathbf{j},-\sigma}^\dagger] |0\rangle \quad (441)$$

hullámfüggvényt, ahol $v_{\mathbf{j}}$ tetszőleges konstansok, és $|0\rangle$ az elektronok nélküli (Fock) vákuum, $\hat{A}_{\mathbf{i},\sigma}|\Psi\rangle = 0$ miatt

$$\sum_{\mathbf{i},\sigma} \epsilon_{\mathbf{i},\sigma} \hat{A}_{\mathbf{i},\sigma}^\dagger \hat{A}_{\mathbf{i},\sigma} |\Psi\rangle = 0 \quad (442)$$

összefüggés automatikusan teljesül. Továbbmenőleg, mivel $|\Psi\rangle$ a d és f elektronokat különböző spinnel különböző csomópontokra helyezi, dupla betöltést nem kelt, így (305-307) relációk a Hubbard tagok miatt plusz megszorításokat nem visznek be, ezért tehát

$$\sum_{p=d,f} \sum_{\mathbf{i}} U_{\mathbf{i}}^p \hat{n}_{\mathbf{i},\uparrow}^p \hat{n}_{\mathbf{i},\downarrow}^p |\Psi\rangle = 0 \quad (443)$$

szintén teljesül, tehát (436)-ban adott $\hat{H}$ esetében $\hat{H}|\Psi\rangle = 0$, tehát $|\Psi\rangle$ az alapállapot.

Ennek megfelelően, $N = N_\Lambda$ (1/4 rendszertöltés), az alapállapot hullámfüggvény [lásd (307,308) összefüggéseket olyan esetre amikor a (305)-ben található I_M halmaz a (303) minden indexét tartalmazza]

$$|\Psi_g(N = N_\Lambda)\rangle = \prod_{\mathbf{j}=1}^{N_\Lambda} [\hat{O}_{\mathbf{j},\sigma}^\dagger + v_{\mathbf{j}} \hat{O}_{\mathbf{j},-\sigma}^\dagger] |0\rangle. \quad (444)$$

A (444) összefüggés jobboldalán minden $\hat{W}_{\mathbf{i}}^\dagger = [\hat{O}_{\mathbf{i},\sigma}^\dagger + v_{\mathbf{i}} \hat{O}_{\mathbf{i},-\sigma}^\dagger]$ operátor egy darab, tetszőleges spinvetülettel rendelkező elektront helyez el a tetszőleges $\mathbf{i}$ csomóponton. Minden más $\hat{W}_{\mathbf{i}',\mathbf{i}'}^\dagger \neq \mathbf{i}$ operátor ezt a műveletet más ($\mathbf{i}' \neq \mathbf{i}$) csomópontokra végzi el. Továbbá, a $|\Psi_g(N = N_\Lambda)\rangle$ -ban jelenlevő $\hat{W}_{\mathbf{i}}^\dagger$ operátorok száma egyezik az N_Λ csomópontok számával. Ennek következtében, a (444) állapotban, minden csomóponton egy elektron van tetszőleges spinvetülettel, üres csomópont vagy duplán betöltött csomópont nincs, így az elektronok alapállapotban nem mozoghatnak, tehát (444) állapot lokalizált és nem mágneses. Ezen túlmenőleg, (444) makroszkopikusan degenerált, mert a (444)-ben elvégzett szorzat által eredményezett összeg minden tagja egymásra ortogonális (és jó alapállapot) megoldást jelent külön-külön.

Abban az esetben ha $N < N_\Lambda$ (1/4 rendszertöltés alatt van a koncentráció), a $\mathbf{j}$ index (444)-ben kisebb halmazt fut át mint a rács teljes csomópontjainak száma, ezt tetszőlegesen megteheti, tehát az alapállapot hullámfüggvény ekkor

$$|\Psi_g(N < N_\Lambda)\rangle = \sum_{R_N} \{ \alpha_{R_N} \prod_{\mathbf{j} \in R_N} [\hat{O}_{\mathbf{j},\sigma}^\dagger + v_{\mathbf{j}} \hat{O}_{\mathbf{j},-\sigma}^\dagger] \} |0\rangle. \quad (445)$$

Ezen összefüggésben $\sum_{R_N}$ minden különböző R_N rács tartományt végigfut amely $N < N_\Lambda$ számú csomópontot tartalmaz, továbbás α_{R_N} tetszőleges numerikus paraméterek. Mivel ez esetben tetszőleges helyzetű üres csomópontok vannak jelen az alapállapot hullámfüggvényben, a rendszer itineránsá válik.

Fontos hangsúlyoznom, hogy a (444,445)-ben levezetett alapállapotú hullámfüggvények csak $U_i^p > 0$ esetben állnak fenn. Ha például egy bizonyos $\mathbf{i} = \mathbf{j}$ csomópontra $U_j^p = 0$, az alapállapotú hullámfüggvényben $\hat{O}_{\mathbf{j},\sigma}^\dagger \hat{O}_{\mathbf{j},-\sigma}^\dagger$ négyzetes operátor struktúrák jelenhetnek meg, $|\Psi_g\rangle$ felépítése teljesen megváltozik, azaz az alapállapotú hullámfüggvény kvalitatíve más lesz. Ez világosan mutatja, hogy a kölcsönhatás figyelembevétele nélkül levezetett alapállapotok kölcsönhatás jelenlétében elvesztik alapállapot jellegüket. Ennek alkalmazásaként (mivel az állítás infinitezimálisan kicsi kölcsönhatási értékekre is igaz), az elmondottak tükrében például megemlítem, hogy independens elektron approximációban (azaz elektron-elektron kölcsönhatás nélkül) rendezetlen rendszerekben levezetett alapállapotokról semmi sem garantálja hogy a valós (azaz kölcsönható) rendezetlen anyagokban ezek fennálljanak.

E. Fizikai tulajdonságok

Az előző alfejezetben, (444) és (445) bemutatásakor fizikai jellemzőket is említettem. Ezeket szeretném most kidomborítani és kibővíteni alapállapotú átlagértékek segítségével.

A fizikai tulajdonságokat illetően, $N = N_\Lambda$ esetében, a kvantummechanikai alapállapotra vett átlagolást $\langle \dots \rangle = \langle \Psi_g(N_\Lambda) | \dots | \Psi_g(N_\Lambda) \rangle / \langle \Psi_g(N_\Lambda) | \Psi_g(N_\Lambda) \rangle$ szerint végzem, ahol $|\Psi_g(N_\Lambda)\rangle$ a (444)-ben adott. Az így kapott $\langle \dots \rangle$ kvantummechanikai átlag a $\{v_i\}$ szettől függ. A v_i paraméterek az egyedüli rendezetlen paraméterek az alapállapotú hullámfüggvényben, tehát a rendezetlenségre vett konfigurációs átlagolást $\langle \dots \rangle_c = \int P(\{v_i\}) \dots \prod_i dv_i$ formában kell végezni, ahol $P(\{v_i\})$ a rendezetlen változók eloszlását jelöli és $\int P(\{v_i\}) \prod_i dv_i = 1$ kötelezőleg előírt (lefedési) tulajdonsággal rendelkezik. Az elkövetkezőkben, a $P(\{v_i\})$ eloszlást a fedési kondíció fennállása mellett tetszőlegesnek tekintem. Azt is hangsúlyozom, hogy a (444) levezetése során semmi fizikai indok arra vonatkozólag, hogy $\{v_i\}$ inhomogén, anizotrop, vagy bizonyos pontokban kirívó viselkedésű legyen, nem létezik.

A felsorakoztatott körülmények között $N = N_\Lambda$ esetében a következő átlagértékek állnak fenn

$$\begin{aligned} \langle \hat{p}_{\mathbf{i},\sigma}^\dagger \hat{p}_{\mathbf{j},\sigma'}' \rangle &= 0, \quad \langle \hat{n}_{\mathbf{i}} \hat{n}_{\mathbf{j}} \rangle = 1, \quad \langle \hat{S}_{\mathbf{i}}^z \hat{S}_{\mathbf{j}}^z \rangle = \frac{q_i q_j}{4}, \\ \langle \langle \hat{p}_{\mathbf{i},\sigma}^\dagger \hat{p}_{\mathbf{j},\sigma'}' \rangle \rangle_c &= 0, \quad \langle \langle \hat{n}_{\mathbf{i}} \hat{n}_{\mathbf{j}} \rangle \rangle_c = 1, \quad \langle \langle \hat{S}_{\mathbf{i}}^z \hat{S}_{\mathbf{j}}^z \rangle \rangle_c = 0, \end{aligned} \quad (446)$$

ahol $p = d, f$, az $\mathbf{i}, \mathbf{j}$, és σ, σ' tetszőlegesek, $\hat{n}_{\mathbf{i}} = \sum_{\sigma,p} \hat{n}_{\mathbf{i},\sigma}^p$, $\hat{S}_{\mathbf{i}}^z = (1/2) \sum_p (\hat{n}_{\mathbf{i},\uparrow}^p - \hat{n}_{\mathbf{i},\downarrow}^p)$, és $q_i = (1 - |v_i|^2)/(1 + |v_i|^2)$. Az eredmények nyilvánvalóak. Pl. (446) első sorának első egyenlősége abból következik hogy $|\Psi_1(p, p')\rangle = \hat{p}_{\mathbf{i},\sigma}^\dagger \hat{p}_{\mathbf{j},\sigma'}' |\Psi_g(N_\Lambda)\rangle$ egy üres csomópontot tartalmaz, azaz ortogonális $|\Psi_g(N_\Lambda)\rangle$ -ra, tehát $\langle \Psi_1(p, p') | \Psi_g(N_\Lambda) \rangle = 0$. Vagy, (446) második sorának utolsó egyenlősége abból ered hogy q_i változó tetszőleges értékeket vehet fel $(-1, +1)$ között, továbbá q_i esetleges nem-sima matematikai viselkedését előidéző fizikai indok nem létezik.

Ebből látszik, hogy az $1/4$ sávtöltés alapállapota egy teljesen lokalizált, paramágneses, és hosszútávú sűrűség-sűrűség korrelációkkal rendelkező, egyben szigetelő fázis. A szigetelő mivolt matematikailag abból ered, hogy $\int_0^\infty \text{Re} \sigma_{\tau,\tau}(\omega) d\omega = 0$ hiszen értéke $\langle \hat{p}_{\mathbf{i},\sigma}^\dagger \hat{p}_{\mathbf{j},\sigma'}' \rangle$ átlagokhoz köthető (lásd Ref.[12]), $\text{Re} \sigma_{\tau,\tau}(\omega)$ nem negatív mivel a diszipatív folyamatokhoz kötött, tehát $\text{Re} \sigma_{\tau,\tau}(0) = 0$, azaz a rendszer szigetelő.

Az $N < N_\Lambda$ esetben az alapállapotú hullámfüggvény $|\Psi_g(N)\rangle = \sum_{R_N} \alpha_{R_N} |\Psi(R_N)\rangle$ formára írható, ahol $|\Psi(R_N)\rangle = \sqrt{D(R_N)} \prod_{j \in R_N} (\hat{O}_{j,\sigma}^\dagger + v_j \hat{O}_{j,-\sigma}^\dagger) |0\rangle$ ortonormált bázisfüggvényeket jelöl és $D(R_N) = (1 + |w|^{-2})^N \prod_{j \in R_N} (1 + |v_j|^2)$. Ha most D_{N-1} -el jelöljük a rács egy tetszőleges tartományát amely $N - 1$ csomópontot tartalmaz, továbbá $R_N = D_{N-1} + \mathbf{i}$, $R'_N = D_{N-1} + \mathbf{j}$, ahol $\mathbf{i}, \mathbf{j}$ két tetszőleges, D_{N-1} -ben nem szereplő rácscsomópont, akkor például

$$\begin{aligned} \langle \Psi(R_N) | \hat{p}_{\mathbf{i},\sigma}^\dagger \hat{p}_{\mathbf{j},\sigma} | \Psi(R'_N) \rangle &= \frac{(1 + |w|^{-2})^{-1}}{\sqrt{(1 + |v_{\mathbf{i}}|^2)(1 + |v_{\mathbf{j}}|^2)}}, \\ \langle \langle \Psi(R_N) | \hat{p}_{\mathbf{i},\sigma}^\dagger \hat{p}_{\mathbf{j},\sigma} | \Psi(R'_N) \rangle \rangle_c &= \frac{K_0}{1 + |w|^{-2}}, \end{aligned} \quad (447)$$

ahol $K_0 = \int P(\{v_i\}) [(1 + |v_i|^2)(1 + |v_j|^2)]^{-1/2} \prod_i dv_i > 0$. Ebből következik, hogy az alapállapotú hullámfüggvény kiterjedt állapotot jelöl (minden elektron, minden csomóponttól bárhova eljuthat). Ezen túlmenően $\mu^+ - \mu^- = 0$ áll fenn, ahol $\mu^+ = E_g(N + 1) - E_g(N)$, $\mu^- = E_g(N) - E_g(N - 1)$. Ennek megfelelően, az állapot vezető¹¹⁸ (lásd (318)).

Tehát, a levezetett megoldás koncentráció függvényében fellépő fém-szigetelő átmenetet mutat. Az átalakulás fellépését Griffiths fázis megjelenése akadályozhatná még meg, (azaz, az átlaghoz képest rendkívüli nagy klaszterek dominanciája) amelyről megmutattam, hogy fellépése nem valószínű⁵. Ennek az az oka, hogy a hullámfüggvényben szereplő v_i rendezetlen változók nem-sima matematikai viselkedését esetlegesen előidéző fizikai ok nem létezik.

Aláhúzom még, hogy a (445)-be adódó járulékok rendezetlen és nem mágneses klaszterekként is értelmezhetőek, melyek rendelkeznek azzal a tulajdonsággal, hogy minden pontjukban egyetlen, tetszőleges spinvetülettel rendelkező elektront tartalmaznak.

F. További eredmények, következmények

Rendezetlen rendszerekkel sokat foglalkoztam. A belső tér eloszlás^{314,315} és redézett fázisokra vett hatás^{275,276} volt e területen az a témakör amelyet különböző eljárásokkal tanulmányoztam még az elemzett időintervallumban. Ezen út eredményei mutatták, hogy a tradicionális perturbatív kezelése a rendezetlenségnek bizonyos körülmények között merev korlátaival akadályozza a fejlődést a területen. Gyakorlatilag ez vezetett el az előbbiekben részletesen bemutatott eredményekhez.

Hangsúlyoznom kell azonban, hogy a levezetett eredmények a fém-szigetelő átmenet (a tanulmányozott rendszerek esetében vett) előfordulása szempontjából fontosak, tehát az lényeges bennük, hogy ezen átmenet előfordulásának elvi lehetőségét mutatják. Azaz, két dimenzióban, rendezetlenség és kölcsönhatás jelenlétében igenis lehetséges fém-szigetelő átmenet. Ennek az eredménynek a ténye a szakirodalom szintjén is visszatükröződik már^{316–318}. De az átmenet koncentráció függő milyensége nem általánosítható minden esetre. Mindez azért, mert a feltételezett „mindenhol repulzív egy-részecske lokális potenciál” (e.g. (432)), ha rendezetlen is, erős megszorítást jelent, ezáltal kísérletileg aránylag nehezen megvalósítható.

dc 890.14
XIV. SAKKTÁBLA ÉS STRIPE MEGOLDÁSOK MINT EGZAKT
ALAPÁLLAPOTOK KÉT DIMENZIÓBAN.

A. Körülmények

A XIII. fejezetben megmutattam, hogy rendezetlen rendszerek esetében is alkalmazható a pozitív szemidefinit operátorok tulajdonságaira alapuló eljárás amellyel kvantummechanikai rendszerek alapállapotára vonatkozólag lehet pontos eredményeket levezetni. Az eredmények megmutatták, hogy fém-szigetelő átmenet nemcsak rendezett kvantummechanikai modell esetében tárgyalható e módszer segítségével (úgy ahogy ezt a XII. fejezet esetében megmutattam), hanem rendezetlen esetben is. Ezen túlmenőleg azt is láttuk, hogy kiskoncentrációs határesetben a rendezetlen rendszerek alapállapotú hullámvektorába belépő járulékok klaszterszerű képződményekként is értelmezhetők, nagyjából ugyanazon koncentrációs tartományon amelyben a XII. fejezetben klaszterszerű képződmények felléptek a rendezett esetben is.

A rendezett fázisok (állapotok) és a teljesen rendezetlen klaszterszerű képződmények közötti különbség általában nagyon nagy. A kettő közötti teret (rést) általában más rendeződési formák töltik ki, amelyek sok esetben egy önrendeződési tendenciát is magukkal hordoznak. Bizonyos szempontból, a fonalszerű klaszterképződés amelyről a XI. fejezetben volt szó, ilyen aspektusokban is különbözik a teljesen rendezetlen klaszterképződéstől, amelyet a XII. vagy XIII. fejezetek kiskoncentrációs tartományai eredményeztek. A fonalszerű képződés oka a XI. fejezetben a legközelebbi szomszédal vett kölcsönhatás kiemelése volt, ez tette a klasztert görbementivé, azaz lényegében egydimenzióssá, amúgy egy olyan folyamatban, amely háromdimenziós térben zajlott. Meg kell jegyeznem, hogy legalábbis végeredményeiben (de más kölcsönhatási feltételek mellett kialakuló) hasonló rendeződési forma nem is olyan ritka. Kétdimenziós kvantumos esetben vett variánsai a „csikozott” (stripe) állapothoz kapcsolódnak melyeket nematikus (fonalas) rendeződésnek (néha metafázisnak) is nevez a folyadékkristályos fázisokhoz közelálló szakirodalom. Az alábbiakban megmutatom, hogy a kvantummechanikai rendszerek közelítésmentes tárgyalására kidolgozott módszer ez esetben is alkalmazható, és betekintést nyújt olyan nematikus rendeződések kialakulásának okaira, amelyek amúgy teljesen izotropikus rendszerekben jönnek létre.

A stripe fogalmát a magashőmérsékletű szupravezetők emelték az érdeklődés központjába^{202,203}, mindannak ellenére, hogy sokkal szélesebb skálán jelennek meg (mangán vegyületek, nikkel ötvözetek, ritkaföldfémes anyagok, mágneses anyagok stb. esetében is ismertek fonalszerű rendeződések), és létezésük jóval a „high- T_c ” (magashőmérsékletű szupravezetők) előtt ismert volt²⁰⁶. A 2000-es évek elején világossá vált, hogy több esetben, aránylag hasonló körülmények között hol rendezetlen klaszter, hol stripe állapotok jelennek meg^{209,210}, nem lévén világos, hogy mi dönt tulajdonképpen az ilyen esetben megvalósuló állapot milyensége felől. E témakör kérdéseire szolgáltat válaszokat az itt bemutatásra kerülő eredmény anyag. A publikálásra való beküldés 2005 áprilisában történt.

Az anyaghoz tartozó saját publikáció Ref.[16]-ban található, a részletes előzmények II B 4 alfejezetben voltak ismertetve, végül, az alkalmazott módszer részletes bemutatása a V B alfejezetben történt.

B. A modell és a Hamilton operátor átalakítása

A tanulmányozott rendszert egy kétdimenziós Bravais rácson értelmezem amely $\mathbf{i}$ csomópontához kötött elemi cellája $\mathcal{I}_i$, primitív vektorai pedig $(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)$. Ezen a rácson egy olyan Hamilton operátort használok amely kétsávós rendszert jellemez $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{U}$ formában, ahol az ugyanazon csomóponton létező két különböző elektron állapotot d és f -el jelölöm,

$$\begin{aligned} \hat{H}_0 = \sum_{\mathbf{i}, \sigma} \{ \sum_{\mathbf{r}} [\sum_{p=d,f} t_{\mathbf{r}}^p \hat{p}_{\mathbf{i}, \sigma}^\dagger \hat{p}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}, \sigma} + V_{\mathbf{r}} (\hat{d}_{\mathbf{i}, \sigma}^\dagger \hat{f}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}, \sigma} + \hat{f}_{\mathbf{i}, \sigma}^\dagger \hat{d}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}, \sigma}) + H.c.] \\ + V_0 (\hat{d}_{\mathbf{i}, \sigma}^\dagger \hat{f}_{\mathbf{i}, \sigma} + H.c.) + E_f \hat{n}_{\mathbf{i}, \sigma}^f \}, \end{aligned} \quad (448)$$

továbbá

$$\hat{U} = U \sum_{\mathbf{i}} \hat{n}_{\mathbf{i}, \uparrow}^f \hat{n}_{\mathbf{i}, \downarrow}^f. \quad (449)$$

A megadott összefüggésekben $t_{\mathbf{r}}^p$, $V_{\mathbf{r}}$, V_0 és E_f a hopping amplitudót a $p = d, f$ elektronok részére, a nem-lokális és lokális hibridizáció erősségét, illetve az f elektronok lokális energiáját jelöli. Az $\mathbf{r}$ vektor $\mathcal{I}$ -ben mozoghat (cellán belüli pozíciót jelöl), azaz $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_2 \pm \mathbf{x}_1$ értékeket vehet fel. A lokális Coulomb taszítás véges és nem-zéró, tehát $0 < U < \infty$ áll fenn (aláhúzom, hogy U csak az f korrelálnak tekintett elektronokra hat). A $\mathbf{i}$ csomópontához rendelt $\mathcal{I}_i$ elemi cella csomópontjai $\mathbf{i}$ -től független módon jelölhetőek $\mathbf{i} + \mathbf{r}_{\alpha, \beta}$ formában, ahol $\mathbf{r}_{\alpha, \beta} = \alpha \mathbf{x}_1 + \beta \mathbf{x}_2$, $\alpha, \beta = 0, 1$, és $n(\alpha, \beta) = 1 + \alpha + 3\beta - 2\alpha\beta$ számozza $\mathcal{I}_i$ sarkait a bal alsó csomóponttól kezdődőleg, pozitív trigonometriai irányban. Ennek megfelelően, $\mathcal{I}_i$ egy négyszög, mely pontjait (a cellán belül) $n(\alpha, \beta)$ jelöli, amely növekvő 1,2,3,4 értékeire, sorrendben, $\mathbf{r}_{\alpha, \beta}$ a $0, \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_1 + \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_2$ értékeket veszi fel. Megjegyzem továbbá, hogy $\hat{N}$ és $\hat{N}_\Lambda$ fogja az elektronok, illetve a ráccsomópontok számát jelölni.

Továbbmenetel előtt a kétsávós modell használatával kapcsolatosan egy megjegyzést szeretnék tenni. Ezen modellhasználat nem leszűkíti, hanem kitágítja az eredmények alkalmazhatósági lehetőségét, egyszerűen azért mert jobban közelíti az alkalmazott modellt valóságos anyagokhoz. Ténylegesen, a valóságos rendszerek többsávós rendszerek. Ezek elméleti tárgyalásakor a többsávós rendszert projektáljuk egynéhány sávós rendszerbe³¹². E szempontból tehát a kétsávós modell alkalmazása csupán azt jelenti, hogy az előbb említett projekciót, a matematikai egyszerűség kedvéért, kétsávós szinten állítjuk meg [lásd a (432) összefüggés előtti megjegyzést is]. Matematikai szempontból a (448,449) Hamilton operátor lényegében periodikus Anderson jellegű, ugyanolyan típusú mint XII Hamilton operátorának 2D változata [lásd (420) kifejezését].

Az elkövetkezőkben a Hamilton operátor pozitív szemidefinit formára való átalakítását valósítom meg. E célból (278) alapján bevezetve az

$$\hat{A}_{\mathbf{i},\sigma}^\dagger = \sum_{\alpha,\beta=0,1} \sum_{p=d,f} a_{n(\alpha,\beta),p}^* \hat{p}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_{\alpha,\beta},\sigma}^\dagger \quad (450)$$

elemi cellán értelmezett blokk operátort és (279) stratégia felhasználásával értelmezve a $\hat{P} = \sum_{\mathbf{i},\sigma} \hat{A}_{\mathbf{i},\sigma}^\dagger \hat{A}_{\mathbf{i},\sigma}$ összeget, a Hamilton operátor

$$\hat{H} = \hat{P} + \hat{U} + E_g \quad (451)$$

formára bomlik periodikus határfeltételek esetén, ahol a konstans $E_g = -KN$. A (280) fedési egyenletek formája ez esetben a

$$\sum_{j=1}^{l_M} a_{m_j,p} a_{n_j,p'} = T_{\nu,\mathbf{r}}^{p,p'}(t_{\mathbf{r}}^p, t_{\mathbf{r}}^{p'}, V_{\mathbf{r}}, E_f) \quad (452)$$

összefüggés, ahol $\mathbf{r} = \alpha_1 \mathbf{x}_1 + \alpha_2 \mathbf{x}_2$ a (448)-ban megengedett vektor, $n = n(\alpha, \beta)$, $K = \sum_{n=1}^4 |a_{n,d}|^2$, $\nu = (|\alpha_1|^2 + |\alpha_2|^2)$, $l_M = (8 - 5\nu + \nu^2)/2$, illetve

$$\begin{aligned} T_{\nu,\mathbf{r}}^{p,p'} &= (1 - \delta_{\nu,0})[\delta_{p,p'} t_{\mathbf{r}}^p + (1 - \delta_{p,p'}) V_{\mathbf{r}}] \\ &\quad + \delta_{\nu,0} \{ \delta_{p,p'} [\delta_{p,d} K + \delta_{p,f} (E_f + K)] + (1 - \delta_{p,p'}) V_0 \}, \\ n_j &= j \delta_{\nu,0} + (j + |\alpha_1 - \alpha_2|) \delta_{\nu,2} + [\delta_{j,2} + (4|\alpha_1| + 2|\alpha_2|) \delta_{j,1}] \delta_{\nu,1}, \\ m_j &= n_j + 2\delta_{\nu,2} + \delta_{\nu,1} [7 - 4j + (6j - 10)|\alpha_1| + (6j - 8)|\alpha_2|]. \end{aligned} \quad (453)$$

Megfigyelhető, hogy (451)-ben szereplő $\hat{H}$, a bonyolult struktúrával rendelkező E_g skalár kivételével, egy pozitív szemidefinit operátor. A (448,449) kiinduló $\hat{H}$ akkor írható fel (451) formában, ha a (452), 19 egyenletből álló komplex, csatolt, nem-lineáris egyenletrendszer, $a_{n,p}$ paraméterek számára megoldást ad [lásd (280)]. Megjegyzem, hogy ezen pozitív szemidefinit formára való átalakítás példázatát szintén két dimenzióban (de egy egyszerűbb egysávos esetre) részletesen jellemeztem (278-292) összefüggésekkel tett elemzés során.

C. Alapállapotok megoldások

A felvázolt probléma esetében két megoldástípust találtam, melyet a következőkben $R = I$, illetve $R = II$ index jelöl majd. Az I. esetben $a_{n,d}^*/a_{n,f}^* = q_n = q = \text{valós}$, összefüggés áll fenn minden n -re, és ez esetben megmutatható, hogy $\hat{A}_{\mathbf{i},\sigma}$ kifejezése $\hat{A}_{\mathbf{i},\sigma} = \sum_{n=1}^4 a_{n,d} \hat{A}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_n,\sigma}$ formát ölti, ahol $\hat{A}_{\mathbf{i},\sigma} = \hat{d}_{\mathbf{i},\sigma} + \hat{f}_{\mathbf{i},\sigma}$ áll fenn minden $\mathbf{i}$ -re. A II. esetben $q_n \neq q = \text{valós}$, és ekkor $\hat{A}_{\mathbf{i},\sigma}$ redukciója az $\hat{A}_{\mathbf{i},\sigma}$ operátorokra nem lehetséges. Megjegyzem, hogy ezen kettősség a megoldások szintjén jelen volt (és ugyanazon okokra vezethető vissza) mint a XII. fejezet 3D esetében [ott pl. $p_n \neq p$, $p_n = p$ formában jelentkezett a (424) alapállapotok hullámfüggvényre vonatkozólag].

A következőkben, az érthetőség szempontjából, a levezetett alapállapotokat a csökkenő koncentráció függvényében fokozatosan mutatom be: 1) (1-es alfejezet) Legelőször, az $N = N_\Lambda$ egynegyed töltésen fellépő homogén alapállapotok kerülnek bemutatásra. 2) (2-es alfejezet) Ez után megmutatom, hogy csökkentve a koncentrációt, degenerált stripe, sakktábla és „droplet” (klaszter, pötty) alapállapotok jelennek meg. 3) (3-as alfejezet) Ezt követően megmutatom majd, hogy $\hat{H}$ -ba bevezethetők olyan kiterjesztési tagok, amelyek megszüntetik az alapállapot degeneráltságát, és tiszta (nem degenerált) stripe, vagy sakktábla alapállapotokat eredményeznek.

A transzformált Hamilton operátor (451) formája miatt az alapállapot hullámfüggvény levezetési módja a (302-308) összefüggésekben bemutatottak szerint történik. A (302)-nek megfelelően egy $\hat{B}_{\mathbf{i},\sigma}$ komplementáris operátort vezetnek be [mely a (302)-ben szereplő $\hat{X}$ operátor szerepét játssza] és amely tehát

$$\{\hat{A}_{\mathbf{i},\sigma}, \hat{B}_{\mathbf{i}',\sigma'}^\dagger\} = 0 \quad (454)$$

tulajdonsággal rendelkezik tetszőleges $\mathbf{i}, \mathbf{i}', \sigma, \sigma'$ -re. Az $R = II$ esetben ennek formája $\hat{B}_{\mathbf{i},\sigma} = \sum_{\alpha,\beta=0,1} \sum_{p=d,f} b_{n,p} \hat{p}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_n,\sigma}$. Értelmezve $n'(\alpha, \beta) = 3 + \alpha + \beta - 2\alpha\beta$ indexet és $w = b_{1,d}/a_{3,f}^*$ mennyiséget, ez esetben $b_{n,f} = -wa_{n',d}^*$, $b_{n,d} = +wa_{n',f}^*$ összefüggés adódik. Az $R = I$ esetben $\hat{B}_{\mathbf{i},\sigma} = \sum_{n=1}^4 b_{n,d} \hat{\mathcal{B}}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_n,\sigma}$ áll fenn, ahol $\hat{\mathcal{B}}_{\mathbf{i},\sigma} = \hat{d}_{\mathbf{i},\sigma} - \hat{f}_{\mathbf{i},\sigma}$, illetve $\{\hat{\mathcal{A}}_{\mathbf{i},\sigma}, \hat{\mathcal{B}}_{\mathbf{i}',\sigma'}^\dagger\} = 0$ ered minden $\mathbf{i}, \mathbf{i}', \sigma, \sigma'$ értékre [amelyre (454) redukálódik ez esetben].

A két megoldás típus egyszerre felírható ha definiálok a

$$\hat{D}_{\mathbf{i},\sigma}^\dagger(R) = \delta_{R,I} \hat{\mathcal{C}}_{\mathbf{i},\sigma}^\dagger + \delta_{R,II} \hat{B}_{\mathbf{i},\sigma}^\dagger \quad (455)$$

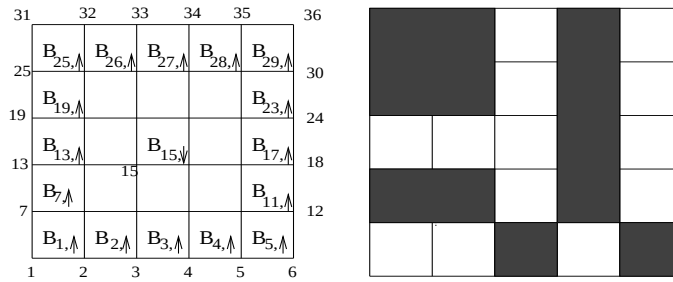
operátort, ahol $\hat{\mathcal{C}}_{\mathbf{i},\sigma} = \hat{\mathcal{B}}_{\mathbf{i},\sigma} + v_{\mathbf{i}} \hat{\mathcal{B}}_{\mathbf{i},-\sigma}$ és $v_{\mathbf{i}}$ tetszőleges koefficiensek. Ezzel a jelöléssel az $1/4$ rendszertöltésen vett egzakt alapállapot

$$|\Psi_{g,R,1/4}\rangle = \prod_{\mathbf{i}=1}^{N_A} \hat{D}_{\mathbf{i},\sigma}^\dagger(R) |0\rangle, \quad R = I, II, \quad (456)$$

formában adható meg. Ez azért van így (lásd (451)-et), mert (454) miatt $\hat{P}|\Psi_{g,R,1/4}\rangle = 0$ mindig teljesül, továbbá $\hat{U}|\Psi_{g,R,1/4}\rangle = 0$ mert $R = I$ -re a különböző spinű $p = d, f$ elektronok (a $\hat{\mathcal{C}}_{\mathbf{i},\sigma}^\dagger$ operátorok hatására) különböző csomópontokra kerülnek és $R = II$ -re a hullámfüggvényben szereplő $\hat{B}_{\mathbf{i},\sigma}^\dagger$ operátorok spin indexe rögzített. A (456) alapállapot mivolta tetszőleges $U > 0$ -ra fennáll és az alapállapot energiája E_g . Megfigyelhető, hogy $R = I$ -re az alapállapot degenerált, paramágneses és lokalizált, míg $R = II$ -re nem-degenerált, itineráns és telített ferromágnes.

2. Alapállapotok egynegyed feltöltés alatt

a) Rendezetlen klaszter (droplet) megoldások



a)

b)

29. Ábra . (a) Izolált plakett ellentétes spinű az $i = 15$ csomóponton; (b) droplet megoldás amelyben a $B_{\mathbf{i},\sigma}$ blokkok melyek $\hat{B}_{\mathbf{i},\sigma}^\dagger$ operátort adnak az alapállapot $R = II$ hullámfüggvénybe fekete elemi cellákkal vannak jelölve.

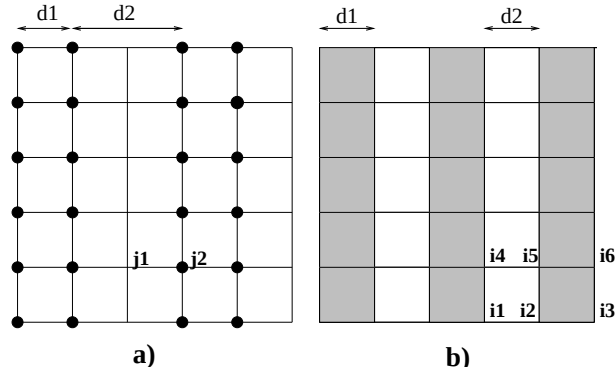
Egynegyed rendszertöltés alatt ($N < N_A$), $R = I$ -re

$$|\Psi_{g,I,<1/4}\rangle = \prod_i^N \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger |0\rangle \quad (457)$$

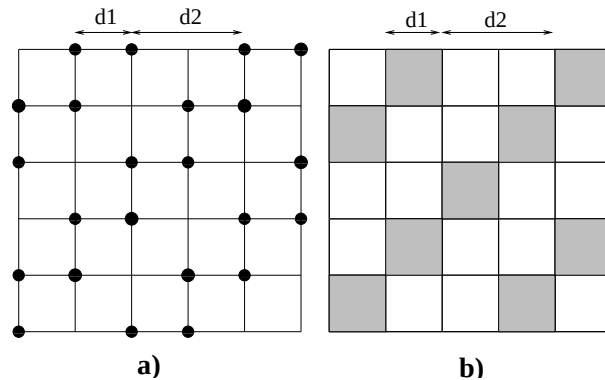
lesz az alapállapot formája, ahol $\mathbf{i}$ tetszőlegesen választható és N csomópontot tartalmazó halmazon fut végig. Az alapállapot ekkor egy itineráns paramágnes.

Az $R = II$ esetben a megoldás úgy áll elő hogy: i) Az egymást érintő $\hat{B}_{i,\sigma}^\dagger$ operátorok spinje azonos (pl. $B_{19,\sigma}$ és $B_{25,\sigma}$ a 29a. Ábrában); ii) Különálló (más blokkal nem érintkező) operátorok spinje azonban tetszőleges lehet (pl. a $B_{15,\sigma}$ a 29a. Ábrában). Az érintkező $\hat{B}_{i,\sigma}^\dagger$ operátorok tetszőleges formájú Bl_j blokkokat építenek fel, melyekben N_{Bl_j} számú részecske van, $\sum_j N_{Bl_j} = N$, N_{Bl_j} ezen túlmenőleg tetszőleges. A blokkon belül a spin rögzített de tetszőleges, azonban különböző blokkoknak nincs közös érintkezési pontjuk és ezekben a spinindexek különbözőek. Egy példát a 29b. Ábra mutat (a fekete plakettek jelentik itt a kialakult blokkokat: egymashoz érő fekete plaketteken belül a spin azonos, és különálló fekete tartományok – pl. a bal felső sarokban lévő tartomány, és jobb alsó sarokig húzódó tartomány – spinjei között összefüggés nincs). Az alapállapot hullámfüggvény formája pedig

$$|\Psi_{g,II,<1/4}\rangle = \prod_{j=1}^{N_{Bl}} \prod_{i=1}^{N_{Bl_j}} \hat{B}_{i,\sigma_j}^\dagger |0\rangle. \quad (458)$$

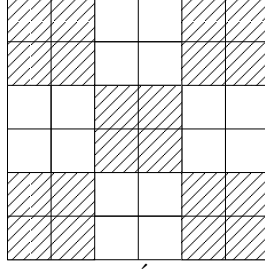


30. Ábra . Vertikális stripe példa $R = I$ (a) és $R = II$ (b) esetben. Az (a), [(b)] rajzokban a pontok (sötét plakettek), rács-csomópontokat, (elemi cellákat) jelölnék amelyeken $\hat{C}_{i,\sigma}^\dagger$ (avagy $\hat{B}_{i,\sigma}^\dagger$) operátorok hatnak. A d_1 , (d_2) mennyiségek stripevonal (inter-stripe vonal) vastagságot jelölnék x irányba és $|\mathbf{x}_1|$ egységekben.



31. Ábra . Diagonális stripe példák $R = I$ (a) és $R = II$ (b) esetben. A jelölések a 30. Ábra jelöléseinek megfelelőek.

$$\text{dc}_{-890-14} \\ \overleftrightarrow{d_1 - d_2}$$



32. Ábra . Sakktábla állapot mely a 31b. Ábrán lévő diagonális stripe állapottal identikus $d_1 = d_2$ esetén.

Az alapállapot itineráns, telített ferromágnes $N \leq N_\Lambda - 8$ -ra, ez alatt $N_p^c = N_\Lambda - 2L$ -ig, hol $N_\Lambda = L \times L$, telítetlen ferromágnes, $N < N_p^c$ esetében pedig globálisan nem mágneses.

b) Degenerált periodikus csík (stripe) és sakktábla megoldások

Az előző a) pontban bemutatott megoldások végeredményben rendezetlen klaszter típusúak. De pontosan a rendezetlen alakjuk miatt, ezek között olyan klaszterek is előfordulnak amelyek fonalas (csíkos) szerkezetűek. Megfigyelhető tehát, hogy $N < N_p^c$ esetében stripe megoldások is jelen vannak a degenerált alapállapotban, úgy (457)-ben, mint (458)-ben. Ezek lehetnek vertikális (30. Ábra), vagy diagonális (31. Ábra) stripok. Például, az alapállapoti hullámfüggvény amely N_{St} függőleges stripe vonalat tartalmaz

$$|\Psi_{g,R,I_{St},j}\rangle = \prod_{j=1}^{N_{St}} \left(\prod_{i \in I_{St,j}} \hat{D}_{i,\sigma_j}^\dagger \right) |0\rangle, \quad (459)$$

ahol $I_{St,j}$ az $R = I$, ($R = II$) esetben a j -edik stripe vonal, (j -edik plakett stripe oszlop), továbbá $I_{St} = \sum_j I_{St,j}$, és a $\hat{D}_{i,\sigma}^\dagger$ operátor a (455) összefüggésben értelmezett. Fontos kiemelni, hogy amennyiben d_1 , (d_2) jelöli a stripe vonal vastagságát, (inter-stripe vonal vastagságát), a diagonális stripe $d_1 = d_2$ -re sakktáblává alakul (lásd 32. Ábra). Ennek megfelelően, a sakktábla egy speciális diagonális stripe, leírása tehát a stripe leírással együtt megtehető.

Megjegyzem, hogy fizikai szempontból az $R = I$ esetben a stripe vonalak paramágnesesek és lokalizáltak, míg $R = II$ -re ferromágnesesek és itineránsak.

c) Fizikai Aspektusok

A könnyebb érthetőség szempontjából összefoglalom az 1. és 2. alfejezetben eddig bemutatott eredményeket és közben motivációs aspektusokat is kidomborítok. A pozitív szemidefinites formára alakított Hamilton operátor (451), tehát a (454) összefüggés adja a $\hat{B}_{i,\sigma}^\dagger$ operátorokat amelyek az alapállapoti hullámfüggvényt felépítik. A megoldások csak akkor léteznek, ha a fedési (452) egyenleteknek megoldásuk van. Ez utóbbi (452) egyenletrendszernek két típusú megoldását sikerült megtalálnom, amelyeket $R = I, II$ -el jelöltem (ezek különböző paraméter tér tartományon jelennek meg).

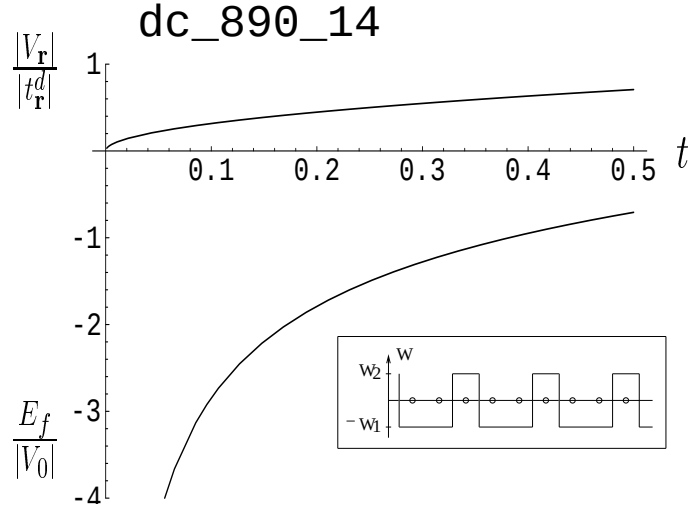
Egynegyed feltöltésen a (456) alapállapotban annyi operátor szerepel ahány csomópont. Az $R = I$ -re ezek az operátorok individuális csomópontokon, míg $R = II$ -re elemi cellákon hatnak. Következésképpen $R = I$ -re minden csomóponton egy elektron lesz és dupla betöltés nem létezik (minden csomópontra külön-külön $\hat{C}_{i,\sigma}^\dagger$ hat), tehát a rendszer alapállapotban lokalizált. Minden csomóponton tetszőleges a spin index [(305) semmi megszorítást a Hubbard tag miatt nem tartalmaz], ezért az állapot degenerált, de globálisan nem mágneses. Ha viszont $R = II$, (455) szerint $\hat{B}_{i,\sigma}^\dagger$ cellán ható operátorok helyezik az elektronokat a rendszerbe. Igaz, most is annyi elektron lesz behelyezve ahány csomópont létezik, de mivel $\hat{B}_{i,\sigma}^\dagger$ különböző tagjainak koefficiensei különbözőek, létezhet olyan csomópont amely duplán betöltött (egy d és egy f elektronnal), így aztán létezhet üres csomópont is, azaz a rendszer nem lokalizált, hanem itineráns lesz. Továbbmenőleg, a (305-307) kondíciók a Hubbard tag miatt az egymáshoz érő $\hat{B}_{i,\sigma}^\dagger$ operátorok spinindexeit ugyanazon értékre rögzítik a dupla betöltés elkerülése miatt. De mivel annyi $\hat{B}_{i,\sigma}^\dagger$ operátor van (456)-ban ahány csomópont, minden $\hat{B}_{i,\sigma}^\dagger$ operátor összeér, ezért telített ferromágneses állapot adódik eredményül.

Egynegyed feltöltés alatt a (457) vagy ezzel ekvivalens kifejezésben amelyben $\hat{C}_{i,\sigma}^\dagger$ helyett $\hat{B}_{i,\sigma}^\dagger$ áll (attól függően hogy az $R = I$ vagy az $R = II$ esetben vagyunk), kevesebb az operátor a hullámfüggvényben mint a csomópont. Az operátorok viszont bárhova elhelyezhetők, ezért nagyfokú (geometriai) degeneráció lép fel. Ha a rendezetlenül elhelyezett operátorok járulékát nézzük, az a „droplet” (rendezetlen klaszter) állapot. De az elhelyezésmód (hamár tetszőleges) olyan is lehet, hogy az operátorok vonalak mentén legyenek felsorakoztatva: ez a stripe megoldás. Ezért van az, hogy a rendezetlen klaszter, illetve a stripe megoldások ugyanazon elfajult állapot komponenseiként jelentkeznek. Ugyanazon okok miatt mint amelyek a nem nematikus esetben (azaz egynegyed feltöltésen) voltak ismertetve, most az $R = I$ esetben a stripe vonalak lesznek lokalizáltak és nem-mágnesesek, míg az $R = II$ esetben a stripe vonalak lesznek telített ferromágnesesek és itineránsak. Ez utóbbi esetben azonban a stripe vonalak között (kivéve azt a szituációt amikor egymáshoz érő diagonális stripe vonalakról van szó) nincs korreláció, tehát a rendszer globálisan nem mágneses.

3. Nem degenerált stripe és sakktábla alapállapotú megoldások

Az $N < N_p^c$ esetben a droplet (rendezetlen klaszter) és stripe (periodikus csík) megoldások koegzisztálnak a degenerált alapállapotban. Megfigyelhető viszont, hogy a droplet megoldások eltávolíthatóak az alapállapotból különféle stabilizáló tagok $\hat{H}$ -ba való bevezetésével. Ilyen formában teljesen tiszta, nem degenerált stripe (vagy sakktábla) alapállapotok jöhetnek létre. A stabilizáló (vagy: kiterjesztési) tagok disztorziós vonalak, periodikus töltés eloszlás, dimerizáció, sűrűséghullámok stb. lehetnek.

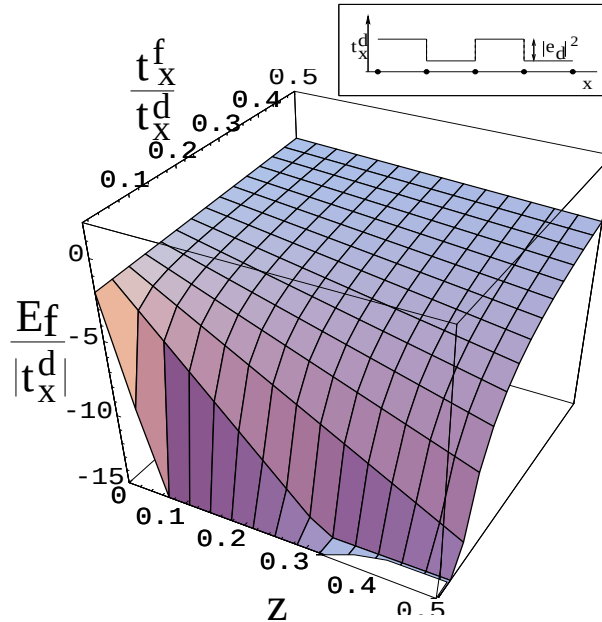
Az elmondottak alátámasztására két példát mutatok be a 33. és a 34. Ábrákon. Az első esetben (33. Ábra) egy periodikus, $\hat{H}_A = -|W_1| \sum_{i \in I_{St}} \hat{n}_i + |W_2| \sum_{i \in I_{St}} \hat{n}_i$ Hamilton operátor taggal leírt töltéseloszlás stabilizálja a 30.a Ábrában látható vertikális stripot. Az ábra mutatja, hogy $t = t_{x\tau}^f/t_{x\tau}^d$ arány függvényében $|V_{x\tau}/t_{x\tau}^d|$, illetve $E_f/|V_0|$ mennyi kell legyen, hogy ez megtörténjen.



33. Ábra . Paramétertartomány mely az $R = I$ vertikális stripot (30a. Ábra) nemdegenerált alapállapotú hullámfüggvényé teszi a belrajzban mutatott és $\hat{H}_A$ -val leírt periodikus töltéeloszlás esetében. Itt $t = t_{\mathbf{x}_\tau}^f/t_{\mathbf{x}_\tau}^d$, továbbá $(t_x^d)^2, (t_y^d)^2 \geq 4t_{y+x}^d t_{y-x}^d$ egyenlőtlenségnek kell teljesülnie.

A 34. Ábra egy paramétertér felületet mutat be amely felett, a belrajzban feltüntetett dimerizáció jelenlétében a 30b. Ábra $R = II$ esetben vett stripeja stabilizálódik (azaz nem degenerált alapállapotú alakul). Itt $z = (|t_y^f| - |t_x^f|)/|t_x^d|$ anizotrópia faktor, továbbá $t = t_{\mathbf{x}_\tau}^f/t_{\mathbf{x}_\tau}^d$ jelölés mellett $V_x = V_0 = 0$, a többi $\mathbf{r}$ esetén pedig $|V_{\mathbf{r}}|/|t_{\mathbf{r}}^f| = \sqrt{|t|}$ kell fennálljon hogy a stabilizálás megtörténjen.

A sakktábla esetben például $d_1 = d_2 = 2$ (32. Ábra) fennállásakor, egy olyan $\hat{H}'_A = -|W_1| \sum_{\mathbf{i} \in I_{St}} \hat{n}_{\mathbf{i}}$ végezheti a stabilizáló hatást mely I_{St} halmaza minden második diagonális mentén csupán második szomszéd csomópontokat tartalmaz.



34. Ábra . A bemutatott felület feletti tartomány stabilizálja az $R = II$ 30b. Ábrán feltüntetett stripot a belrajzban mutatott t_x^d dimerizáció esetében. Itt $z = (|t_y^f| - |t_x^f|)/|t_x^d|$.

A bemutatott esetekben (pl. a 33.-34. Ábrák esetében) azért stabilizálódik a stripe megoldás nem degenerált formában, mert a bevezetett kiterjesztési tagok a más formájú

rendezetlen klaszter megoldásokat sajátvektorként sem tartalmazzák, míg a stabilizált stripe szerkezet az új Hamilton operátor tagoknak is legkisebb energiájú sajátvektorát képezik.

Megjegyzem, hogy a Hubbard taszító kölcsönhatást mindkét sávban feltételezve az eredmények kvalitatíve nem változnak.

D. Következmények

Az itt leírt stripe kialakulási lehetőségek kevésbé függenek a fázisdiagram bizonyos tartományai, illetve az $1/4$ sávtöltésnél megjelenő homogén fázis tulajdonságaitól (a stripe milyensége függ mindezekről, nem a kialakulásának feltételei). Ez azzal indokolható, hogy egy Hamilton operátor pozitív szemidefinit formára való felbontása többféle képpen lehetséges¹², plakettek helyett pl. rombuszok is alkalmazhatóak $\hat{A}_{i,\sigma}$ kialakításában, a felbontás $\hat{A}_i = \sum_{\sigma} \hat{A}_{i,\sigma}$ szerint is történhet (lásd^{2,3}), stb. Ezen utak mind más és más (452) egyenletrendszer határoznak meg, tehát a megoldást a fázisdiagram más és más részeibe helyezik el.

Továbbmenőleg, a homogén megoldás fizikai tulajdonságától vett relatív függetlenséget az okozza, hogy a $\hat{B}_{i,\sigma}$ operátorok (melyek az inhomogén alapállapot hullámfüggvényben szerepelnek) tetszőleges $\hat{A}_{i,\sigma}$ operátor esetében megszerkeszthetők (lásd a módszertani bemutatást tartalmazó VB alfejezetet is).

Ilyen körülmények között, a levezetett eredmények a stripe kialakulásról a következő képet nyújtják: Az $1/4$ sávtöltésen kialakuló homogén fázis, a koncentráció csökkentése nyomán rendezetlen klaszterekből álló állapotra szakad. A koncentráció további csökkentésével a rendezetlen klaszterszerű állapot stripe megoldásokat is jelentet, de ezek degenerált formában a droplet megoldásokkal együtt léteznek az alapállapotban. Az elfajulás azonban megszüntethető úgynevezett stabilizáló tagokkal mint pl. a disztorziós vonalak, dimerizáció, periodikus töltés eloszlás, vagy sűrűség hullámok. Ezek segítségével a rendezetlen klaszter állapotok eltávolíthatók és ezáltal tiszta nem degenerált stripe alapállapotok adódnak eredményül az alapállapotban.

Fontos még hangsúlyozni, hogy a sakktábla megoldások egy specifikus diagonális stripe megoldásnak foghatóak fel, így leírásuk egyszerűen a stripe állapot leírásával egyidejűleg megtehető.

Megemlítem, hogy az e fejezetben leírt rendezetlen klaszterszerű képződményekből vett stripe kifejlődést kísérletileg is tapasztalták³¹⁹.

dc 890.14
XV. NÉGYSZÖGES CELLÁJÚ HUBBARD LÁNCOK EGZAKT
ALAPÁLLAPOTAI.

A. Körülmények

Az előző XIV. fejezetben megmutattam hogy hogyan jelenhetnek meg nematikus (fonalszerű) alakban olyan rendeződési formák amelyek a XII. fejezetben teljes térkitöltő formában jelentkeztek, mint pl. ferromágnesesség, szigetelő vagy vezető fázisok. Továbbmenőleg, szintén kiskoncentrációs paraméter tér tartományon klaszterképződés is előfordult, úgy mint a XI-XIII fejezetek esetében. Látható volt ugyanakkor, hogy ez alkalommal, az amúgy rendezetlen klaszterek fonalszerű stabilizálását nem a klaszterbe való új tag bekapcsolásának egyedüli lehetősége (az egyetlen legközelebbi szomszéd bekötése) adta, úgy mint ahogy az a XI. fejezetben történt, hanem disztorziós vonalak, dimerizáció, periodikus töltéseloszlás, vagy sűrűség hullámok.

Meg kell említenem, hogy van még egy módja annak, hogy nagyjából egy fonál mentén alakuljon ki egy rendeződés, mégpedig úgy, hogy geometriai korlátokat szabunk a részecskék mozgásának, kváziegydimenziós rendszerbe (láncba) kényszerítve a töltéshordozókat. Igaz, ilyen esetben a fonalszerűség egyszerűen kényszerfeltétel lesz, de a korrelációs hatások specifikusan felerősödnek. Ez vezetett a négyszöges cellájú Hubbard láncok tanulmányozásához, ami ugyanazon módszerrel történt mint amit a XII-XIV fejezetekben is alkalmaztam.

Van még azonban egy aspektus amit a tanulmányozott Hubbard láncok esetében, mégpedig a módszerrel kapcsolatban meg kell említenem. A kétsávós modellek a jellemzésbe a VIII.B.2. alfejezetétől léptek be a leírásba és a X,XI fejezetek kivételével központi szerepet játszottak a jellemzésben ezidáig. A kezdeti használat (pl. a VIII.B.2. alfejezetben) a specifikus kétsávós rendszerjellemezés által volt indokolt, de a későbbiekben, a IX fejezet után, mint többsávós reális rendszerek kétsávós projekcióinak típusmodelleként szolgált. Ennek aztán az lett a következménye, hogy a kvantummechanikai rendszerekre kidolgozott egzakt eredményeket szolgáltató módszer eddig a XII-XIV fejezeteken keresztül kizárólagosan csak kétsávós modellekre volt alkalmazva. Ezek mind olyan modellek voltak amelyekben minden egyes i csomóponton, két különböző fermion (d és f) volt kreálható, és ez a tény az egzakt alapállapot hullámfüggvények felírásában végeredményben fontos szerepet játszott. Ennek kapcsán merül fel az a kérdés, hogy vajon a módszer akkor is megfelelően működik, ha egy csomóponton, csak egy fermion típus létezhet (azaz a modell, ebből a szempontból tisztán Hubbard típusú)? Ezen kérdés megválaszolása is indokolta e fejezetben bemutatásra kerülő eredmények levezetését. Egy másik indok, a molekuláris nanotechnológiai potenciális alkalmazási lehetőségek sokasága volt.

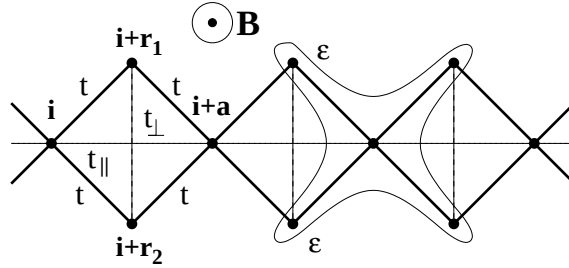
A kétezres évek elejétől erőteljesen előtérbe került a nanotechnológia molekuláris rendszerekre alapozott válfaja. Az elméleti jellemzések új lehetőségei mellett közvetlen és kecsgető alkalmazási lehetőségek is hajtották e irányvonalat, melyek közül a spintronics játszott vezető szerepet. A birtokomban lévő egzakt alapállapotok származtatására alkalmazható módszert ilyen rendszerekre 2005-től kezdődőleg kezdtem módszeresen alkalmazni,

az első kézirat beküldése 2007 márciusában történt (majd 2008-ban került publikálásra a hosszú, részletes változat). A rendszer kiválasztását a tulajdonságainak külső terekkel való modoszíthatóságának könnyedsége adta, és tudomásom szerint korrelált félfém (half metal) viselkedést közelítésmentes körülmények között itt vezettek le először.

Összegezve a csatolódo információkat, a saját e részhez kapcsolódo publikált tudományos eredmények a Ref.^[13,14]-ben jelentek meg, a részletes előzmények a II B 5 alfejezetben, míg a részletesen leírt alkalmazott módszer a V B alfejezetben kerültek ismertetésre.

B. A modell és a Hamilton operátor

A tanulmányozott négyszöges cellájú Hubbard lánc rajza a 35. Ábrán látható



35. Ábra . A Hubbard négyszöglánc. A bekerített rész egy lokalizált (Wannier) sajátfüggvényt jelöl mely $t_{\perp} = t_{\parallel} = 0$ és $\delta = \pi/2$ esetében áll elő (lásd a (467) utáni szöveget). A $\mathbf{B}$ külső mágneses tér a lap síkjára merőleges.

A rendszer csomópontjait $\mathbf{i} + \mathbf{r}_s$ adja. Itt az $\mathbf{i}$ csomópont egyértelműen a cellát is indexeli, továbbá $\mathbf{r}_s$ a cellán belüli három rácspontot jelöli, hol $s = 1, 2, 3$ egyben alrács index is, továbbá $\mathbf{r}_3 = 0$ teljesül. A lánc Bravais rácsvektora $\mathbf{a}$, továbbá az elemzés során periodikus határfeltételeket vettem figyelembe. Ha N az elektronok száma és N_c a cellák száma, az elektronsűrűséget $n = N/(3N_c)$ jellemzi. A kinetikus tag a $t, t_{\perp}, t_{\parallel}$ járulékokat tartalmazza (lásd a 35. Ábrát), hol t a legközelebbi szomszédra vett hoppingot írja le, $t_{\perp}, t_{\parallel}$ pedig az $\mathbf{a}$ -ra merőleges, és $\mathbf{a}$ -val párhuzamos másodsomszéd hoppingot adja. A lánc síkjára merőlegesen $\mathbf{B}$ külső mágneses tér hat, mely az elsőszomszéd hopping tagokba $\exp(i\delta/2)$ Peierls fázisfaktort visz be. Itt $\delta = 2\pi\Phi/\Phi_0$, ahol Φ a $\mathbf{B}$ által létrehozott és az elemi cellán merőlegesen áthaladó fluxus, $\Phi_0 = hc/e$ pedig a fluxus kvantum. A vektorpotenciált $\mathbf{A} \parallel \mathbf{a}$ helyzetben választva, a mágneses tér függő hopping amplitudók értékét $t_{\mathbf{j},\mathbf{j}'}(\mathbf{B}) = t_{\mathbf{j},\mathbf{j}'}(0) \exp[i(2\pi/\Phi_0) \int_{\mathbf{j}}^{\mathbf{j}'} \mathbf{A} \cdot d\mathbf{l}]$ adja, és ezáltal $t_{\perp}$ és $t_{\parallel}$ változatlan marad (azaz, hozzájuk csatolódo fázisfaktor értéke zéró). A lokális egy-részecske pontenciálokat ϵ jelöli (az $s = 1, 2$ alrácsban vannak figyelembevéve csak. Az eredményekben ebből mindig kivonódo az $s = 3$ alrácsban ható potenciál járuléka, így az energiaskála origója eltolásával ez utóbbi mindig zéróvá tehető). $U > 0$ a Hubbard kölcsönhatást jelöli.

Ilyen körülmények között, a Hamilton operátor nemkölcsonható $\hat{H}_0$ tagja a következó formát ölti

$$\begin{aligned} \hat{H}_0 = \sum_{\sigma} \sum_{\mathbf{i}=1}^{N_c} \{ & [t e^{i\frac{\delta}{2}} (\hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_2,\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{\mathbf{i},\sigma} + \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{a},\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_2,\sigma} + \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_1,\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{a},\sigma} + \hat{c}_{\mathbf{i},\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_1,\sigma}) \\ & + t_{\perp} \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_2,\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_1,\sigma} + t_{\parallel} \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{a},\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{\mathbf{i},\sigma} + H.c.] + \epsilon \sum_{s=1,2} \hat{n}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_s,\sigma} \}. \end{aligned} \quad (460)$$

A rendszer Hamilton operátorát (a H_0 tag $\mathbf{k}$ térbe vett transzformálása után)

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \sum_{s, s'=1}^3 M_{s, s'}(\mathbf{k}) \hat{c}_{s, \mathbf{k}, \sigma}^\dagger \hat{c}_{s', \mathbf{k}, \sigma} + \hat{H}_U, \quad \hat{H}_U = U \sum_{\mathbf{i}} \sum_{s=1, 2, 3} \hat{n}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_s, \uparrow} \hat{n}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_s, \downarrow}, \quad (461)$$

összefüggés adja, hol $M_{s, s'}(\mathbf{k})$ egy szimmetrikus mátrix és

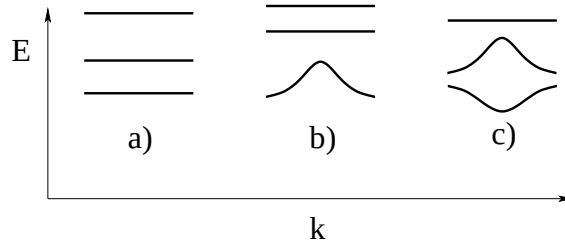
$$M_{1,1} = M_{2,2} = \epsilon, \quad M_{3,3} = 2t_{\parallel} \cos ak, \quad M_{1,2} = t_{\perp}, \quad M_{(s=1,2),3} = 2t \cos[(ak + (-1)^s \delta)/2]. \quad (462)$$

A (460,461)-ben $\hat{c}_{\mathbf{j}, \sigma}^\dagger$ egy σ spinű elektront kelt a $\mathbf{j}$ csomóponton, továbbá $\hat{c}_{s, \mathbf{k}, \sigma}$ az s alrácban ható fermionikus operátor Fourier transzformáltja. A továbbiakban az energiaértékeket $2t$ egységekben adom meg.

A (461) kinetikus tagjának ($\hat{H}_0$) diagonalizálása egy köbös sajátérték egyenlethez vezet mely az $E_\nu(\mathbf{k})$ ($\nu = 1, 2, 3$) sávdiszperziókat adja. Ezen egyenlet alakja

$$(E - \epsilon)^3 + (E - \epsilon)^2(\epsilon - 2t_{\parallel} \cos ak) - (E - \epsilon)P_1 = P_0, \quad (463)$$

ahol $P_1 = (1 + t_{\perp}^2) + \cos \delta \cos ak$ és $P_0 = t_{\perp}[\cos \delta + \cos ak + t_{\perp}(\epsilon - 2t_{\parallel} \cos ak)]$.



36. Ábra . A nemkölsönható rendszer sávszerkezete: (a) $t_{\perp} = t_{\parallel} = 0$, $\delta = \pi/2$. (b) $\epsilon = -t_{\perp} + t_{\perp}^{-1}/2$, $\delta = \pi$; a felső két lapos sáv degenerált $t_{\perp} t_{\parallel} = 1/4$ esetben. (c) $t_{\parallel} = 0$, $\epsilon t_{\perp} \cos \delta = t_{\perp}^2 - \cos^2 \delta$.

A bemenő (azaz $\hat{H}_0$) paraméterek függvényében (lásd a 36. Ábrát) különböző szabad elektron sávokat találhatunk (463)-ból, továbbá akkár mindhárom sáv is laposnak adódhat. Megjegyzem viszont, hogy a kölcsönhatás bekapcsolásakor (legalábbis legtöbbször egzakt tárgyalás esetén) a nemkölsönható sávszerkezet a rendszer pontos viselkedése jellemzésének szempontjából (önmagában) értelmét veszti.

C. A levezetett egzakt alapállapotok

A különböző paraméterértékekre kapott alapállapotok, amelyeket levezettem, a következők:

1. Az $n \leq 1/3$, $t_{\perp} = t_{\parallel} = 0$, $\delta = \pi/2$ eset

E szituációban a (463) egyenlet három szabad elektron lapos sávot ad [36. Ábra, a) pont] $E_2 = \epsilon$, $E_{2\pm 1} = (\epsilon \mp \sqrt{\epsilon^2 + 4})/2$ energiaértékekre. A pozitív szemidefinit formára való átalakítás végett a módszertani eljárásoknál leírt (279) formát alkalmazom. Bevezetve a

$$\hat{C}_{2\pm 1, \mathbf{i}, \sigma} = \frac{1}{\sqrt{2}} [F_{\pm} \hat{Q}_{\mathbf{i}\sigma}^{(+)} \mp 2F_{\mp} \hat{c}_{\mathbf{i}, \sigma}], \quad \hat{C}_{2, \mathbf{i}, \sigma} = \frac{\hat{Q}_{\mathbf{i}\sigma}^{(-)}}{2}, \quad (464)$$

kanonikus Fermi operátorokat, ahol $F_{\pm}^2 = 1 \mp \epsilon/\sqrt{\epsilon^2 + 4}$, $\hat{Q}_{\mathbf{i}\sigma}^{(\pm)} = \hat{Q}_{\mathbf{i}\sigma}^{(1)}(\mp\delta) \pm \hat{Q}_{\mathbf{i}\sigma}^{(2)}(\pm\delta)$ és $\hat{Q}_{\mathbf{i}}^{(l=1,2)}(\delta) = e^{-i\delta/2} \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_l, \sigma} + e^{+i\delta/2} \hat{c}_{\mathbf{i}-\mathbf{a}+\mathbf{r}_l, \sigma}$, $\hat{H}$ formája a következő alakot ölti

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{i}, \sigma} \sum_{\nu=1}^3 E_{\nu} \hat{C}_{\nu, \mathbf{i}, \sigma}^{\dagger} \hat{C}_{\nu, \mathbf{i}, \sigma} + \hat{H}_U, \quad (465)$$

ahol (464) felel meg a (278) relációnak és rögzíti a használt blokk operátor formákat [lásd a (278) összefüggést. De ezen partikuláris esetben, a $\hat{C}_{\nu, \mathbf{i}, \sigma}$ operátorok egyben kanonikus Fermi operátorok is]. Amiatt hogy $\hat{C}_{\nu, \mathbf{i}, \sigma}^{\dagger} \hat{C}_{\nu, \mathbf{i}, \sigma}$ és $\hat{H}_U$ pozitív szemidefinit operátorok, a rendszer alapállapota $N \leq N_c$ és $U > 0$ esetében

$$|\Psi_g^I(N)\rangle = \prod_{\mathbf{i}=1}^N \hat{C}_{3, \mathbf{i}, \sigma_{\mathbf{i}}}^{\dagger} |0\rangle; \quad (466)$$

formában írható, ahol $|0\rangle$ a vákuum állapotot jelöli. Az alapállapoti energia értéke $E_g^I = E_3 N$.

Itt meg kell említenem, hogy az alapállapoti hullámfüggvény (466) meghatározása a (302)-ben bemutatott stratégia alapján történt a $\sum_{\mathbf{i}, \sigma} \sum_{\nu=1}^3 \hat{C}_{\nu, \mathbf{i}, \sigma}^{\dagger} \hat{C}_{\nu, \mathbf{i}, \sigma} = \hat{N}$ összefüggés felhasználásával, ahol $\hat{N}$ a teljes részecskeszám operátora. Ekkor figyelembe véve hogy E_3 egy $\mathbf{k}$ -tól független konstans, a (465)-ben szereplő $\hat{H}$ a

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{i}, \sigma} \sum_{\nu=1,2} (E_{\nu} - E_3) \hat{C}_{\nu, \mathbf{i}, \sigma}^{\dagger} \hat{C}_{\nu, \mathbf{i}, \sigma} + \hat{H}_U + E_3 N, \quad (467)$$

formára hozható, továbbá, mivel $E_3 < E_2, E_1$, következik, hogy $(E_1 - E_3), (E_2 - E_3) > 0$. Ekkor, a (302)-ben szereplő $\hat{\Omega}_n$ szerepét $\hat{C}_{\nu=1, \mathbf{i}, \sigma}$ és $\hat{C}_{\nu=2, \mathbf{i}, \sigma}$ játssza, tehát, a $\hat{C}_{\nu, \mathbf{i}, \sigma}$ operátorok kanonikus Fermi jellege miatt a (302)-ben szereplő $\hat{X}_n^{\dagger}$ operátornak $\hat{C}_{\nu=3, \mathbf{i}, \sigma}$ adódik. Mivel a Hamilton operátorban még megmaradt pozitív szemidefinit operátor, a $\hat{H}_U$, amely a legkisebb sajátértékét akkor adja ha nincs dupla betöltés, a (305,306) összefüggések két különböző csomóponton értelmezett $\hat{C}_{\nu=3, \mathbf{i}, \sigma}$ és $\hat{C}_{\nu=3, \mathbf{i}', \sigma'}$ spinindexeit ugyanazon értékre rögzítik (azaz $\sigma = \sigma'$) ha $\hat{C}_{\nu=3, \mathbf{i}, \sigma}$ és $\hat{C}_{\nu=3, \mathbf{i}', \sigma'}$ legalább egy csomópontban fedik egymást. Így, (307) alapján adódik a (466) alapállapot. Megemlítem továbbá, hogy a (280) fedési egyenletek adják az alfejezet címében feltüntetett kondíciókat.

A $\hat{C}_{\nu, \mathbf{i}, \sigma}^{\dagger}$ operátorok lokalizált (Wannier) állapotokat keltenek (melyek $\nu = 3$ -ra a 35. Ábrában vannak példázva). Az $n = 1/3$ esetben (466) teljesen telített ferromágneses állapotot ad (Mielke-Tasaki típusú ferromágnes^{222,223,320}). Ha $n < 1/3$, csupán azon Wannier állapotoknak lesz azonos spinje melyek térben átfedődnek. Ezáltal, ez esetben degenerált, globálisan nem mágneses alapállapot adódik, mely ferromágneses klaszterekből áll, de a klaszterek spin irányítása teljesen rendezetlen. Az alapállapotok lokalizáltak. Érdeemes aláhúzni, hogy a bemutatott esetek $\delta = \pi/2$ fluxust előidéző külső mágneses tér jelenlétében állnak elő. Ha $\delta = 0$, a rendszer diszperziós, parciálisan töltött sávval rendelkező vezető, így itt egy külső mágneses tér által előidézett fém-szigetelő átmenetet mutattam ki.

2. Az $n \geq 4/3, t_{\perp}, t_{\parallel} > 0, \delta = \pi, \epsilon = 1/(2t_{\perp}) - t_{\perp}$ eset

Az itt tanulmányozott szituációban a nemkölsönható rendszer sávszerkezete a 36.b Ábrán látható. Ennek egy speciális esetét mutatom itt be, mikor $t_{\perp}t_{\parallel} = 1/4$ áll fenn és a két lapos felső sáv degeneráltá alakul és ezáltal a nemkölsönható rendszer sávszerkezetét $E_1 = E_2 = \epsilon + t_{\perp}$, $E_3 = \epsilon - t_{\perp} - (1 - \cos ak)/(2t_{\perp})$ adja, továbbá az alsó diszperziós sáv kanonikus Fermi operátora ($R_k = \sqrt{1 + (1 - \cos ak)/(4t_{\perp}^2)}$ jelöléssel)

$$\hat{C}_{\mathbf{k},\sigma} = \frac{\hat{c}_{2,\mathbf{k},\sigma} - \hat{c}_{1,\mathbf{k},\sigma}}{\sqrt{2}R_{\mathbf{k}}} + \frac{\sqrt{1 - \cos ak}}{2t_{\perp}R_{\mathbf{k}}} \hat{c}_{3,\mathbf{k},\sigma}. \quad (468)$$

Bevezetve az

$$\hat{A}_{\mathbf{i},\sigma} = \sqrt{t_{\parallel}} [\hat{c}_{\mathbf{i},\sigma} - \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{a},\sigma} - 2t_{\perp} e^{i\frac{\delta}{2}} (\hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_1,\sigma} - \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_2,\sigma})] \quad (469)$$

operátorokat, a Hamilton operátor

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{i},\sigma} \hat{A}_{\mathbf{i},\sigma} \hat{A}_{\mathbf{i},\sigma}^{\dagger} + U\hat{P} + E_g^{II} \quad (470)$$

alakot ölti, hol $E_g^{II} = (\epsilon + U + t_{\perp})N - N_c[3U + 4t_{\perp} + 1/t_{\perp}]$ az alapállapot energiája.

Ez esetben tehát a Hamilton operátor pozitív szemidefinit formára való transzformálása a (296) szerint történt, ahol a (278)-ban definiált blokk operátorok szerepét az $\hat{A}_{\mathbf{i},\sigma}$ operátor játssza. Megjegyzem továbbá, hogy (470)-ben szereplő és U -val arányos kölcsönhatási tag a (298,299) összefüggések receptszerű alkalmazása nyomán került be a transzformált Hamilton operátorba. Ennek megfelelően, a $\hat{P} = \sum_{\mathbf{j}=1}^{3N_c} (\hat{n}_{\mathbf{j},\uparrow}\hat{n}_{\mathbf{j},\downarrow} - \hat{n}_{\mathbf{j},\uparrow} - \hat{n}_{\mathbf{j},\downarrow} + 1)$ operátor pozitív szemidefinit és zéró legkisebb sajátértékét akkor veszi fel ha minden csomóponton legalább egy elektron található. Továbbmenőleg, a fedési (280) egyenletek adják az alfejezet címsorában megjelölt kondíciókat.

Az alapállapot $N = 4N_c$ ($n = 4/3$) esetében

$$|\Psi_g^{II}(4N_c)\rangle = c [\prod_{\mathbf{i}} \hat{A}_{\mathbf{i},-\sigma}^{\dagger} \hat{A}_{\mathbf{i},\sigma}^{\dagger}] \hat{F}_{\sigma}^{\dagger} |0\rangle \quad (471.a)$$

$$= \prod_{\mathbf{k}} [\hat{C}_{\mathbf{k},-\sigma}^{\dagger} \prod_{s=1}^3 \hat{c}_{s,\mathbf{k},\sigma}^{\dagger}] |0\rangle \quad (471.b)$$

hullámvektornak adódik, ahol $\hat{F}_{\sigma}^{\dagger}$ minden elemi cellában 2 darab σ spinű elektront kelt.

Az alapállapot megkonstruálása ezúttal a (309) tulajdonságból kiindul, (310) összefüggést érintő, majd (313) végeredményt eredményező eljárás alapján történt. Az $\hat{F}_{\sigma}^{\dagger}$ összetétele és struktúrája a (313) bemutatásakor magyarázottaknak megfelelően alakult ki. Ezen operátor szerepe az, hogy a (470)-ben szereplő $\hat{P}$ követelményeinek is megfelelően alakítsa ki az alapállapot hullámfüggvény formáját (azaz, (320)-nak megfelelően, $\ker(\hat{P})$ -t is kifestse az alapállapot hullámfüggvény). A (471.b) egyszerűen az egyenlőség első sorának Fourier transzformáltjából adódik.

Mivel az $\hat{F}_{\sigma}^{\dagger}$ minden elemi cellába helyezett két darab σ spinű elektrons mellett a $\prod_{\mathbf{i}} \hat{A}_{\mathbf{i},\sigma}^{\dagger}$ is minden elemi cellában még egy σ spinű elektront kelt, továbbá 3 csomópont

van egy elemi cellában, következésképpen minden rácsponton lesz egy σ spinű elektron a rendszerben, tehát ezek mozdulatlanoknak (lokalizáltaknak) adódnak. A $-\sigma$ spinű elektronok ezzel szemben kiterjedt állapotokban találhatók, de termodinamikai határesetben lokalizáltak. Ténylegesen, a (343) összefüggést követve, az alapállapotú átlagértékben számolt $\Gamma_{\mathbf{r},-\sigma} = \langle \hat{c}_{\mathbf{j},-\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{j}+\mathbf{r},-\sigma} + H.c. \rangle$ kifejezésre (pl. $\mathbf{j} = \mathbf{i} + \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_e$), $r/a = m$, $N_c \rightarrow \infty$ esetre $\Gamma_{m,-\sigma} = [(-1)^m \exp(-m/\xi_{-\sigma})]/\sqrt{1 + 1/t_\perp}$ áll elő, így az egy-részecske lokalizációs hossz

$$\xi_{-\sigma} = -\{\ln[1 + (2t_\perp)^2 - (2t_\perp)\sqrt{(2t_\perp)^2 + 2}]\}^{-1} \quad (472)$$

véges, de majdnem lineárisan nő $1/t_\perp$ függvényében.

Ha $N = 4N_c + \Delta N$, az alapállapot

$$|\Psi_g^{II}\rangle = \prod_{\alpha=1}^{\Delta N} \hat{c}_{n_\alpha, \mathbf{k}_\alpha, -\sigma}^\dagger |\Psi_g^{II}(4N_c)\rangle, \quad (473)$$

lesz, ahol n_α az $s = 1, 2, 3$ értékeket veheti fel. Mivel $1 < \Delta N < N_c$ esetében $\delta\mu(N) = 0$, hol $\delta\mu(N) = E_g^{II}(N+1) - 2E_g^{II}(N) + E_g^{II}(N-1)$, következik hogy a rendszer vezető (lásd a (318) összefüggést és a hozzá fűzött magyarázatot).

A (473) levezetéséhez a következő megjegyzéseket fűzöm hozzá: $|\Psi_g^{II}(4N_c)\rangle$ a (470) Hamilton operátor első két tagjára zéró sajátértéket ad, és a fermionikus keltő operátorok egymás közötti antikommutatívitása miatt ez a tulajdonság akkor is megmarad, ha tetszőleges fermionikus keltő operátorral kibővített állapotot alkotok $|\Psi_g^{II}(4N_c)\rangle$ -ből. Így kerül be tetszőleges $\hat{c}_{n_\alpha, \mathbf{k}_\alpha, -\sigma}^\dagger$ operátor (473) alapállapotba, mégpedig annyi, hogy számuk pont ΔN -et adja ki. Az így behelyezett keltő operátorok spin indexe azért kell $-\sigma$ legyen, mert $|\Psi_g^{II}(4N_c)\rangle$ -ban, a rendszerben létező összes σ spinnel rendelkező állapot már fel van töltve, tehát több σ spinű elektront nem vihetünk már be a rendszerbe.

A bemutatott (473) alapállapot $\Delta N = N_c$ ($n = 5/3$)-ig marad meg, azaz a vezető tulajdonság $4/3 < n < 5/3$ -re létezik. Ezen állapotban csupán ΔN számú $-\sigma$ spinű elektron vezet, tehát az állapot korrelált félfém (half metal), mely elvileg spintronicsban alkalmazható. Tudomásom szerint ilyen állapotra vonatkozólag, ez az első egzakt eredmény. Megjegyzem, hogy a tanulmányozott tartományon $U = 0$ -ra a rendszer lokalizált, $U > 0$ -ra vezet, tehát ez esetben a Hubbard U jelenléte delokalizációt okoz, ami új és szokatlan jelenség.

Hasonló állapotok $t_\parallel t_\perp < 1/4$ esetben is kimutathatóak, amikor a felső két lapos nemkölsönható sáv nem degenerált.

3. A $\delta \in (-\pi/2, +\pi/2)$ külső mágneses tér függő alapállapotok

Az eddig bemutatott alapállapotok rögzített külső mágneses tér esetében álltak elő. Bizonyítottam, hogy pontos alapállapotokat változtatható $\mathbf{B}$ jelenlétében is lehet levezetni. Ezt példázom az alábbiakban az $n \geq 5/3$ esetre. A $\hat{H}$ paraméterek $t_\parallel = 0$, $t_\perp < 0$, $b \equiv -\cos \delta/t_\perp$, $\epsilon = b - b^{-1}$ értékekre vannak beállítva (azaz, az ezen esetben kapott (280) fedési egyenletek ezt a paramétertartományt eredményezik). Ekkor a nemkölsönható sávszerkezet

a 36c. Ábrának felel meg. A felső Tapos sáv $E_1 = \epsilon + 1/b$, a két alsó diszperziós sáv pedig $E_{2,3} = \epsilon - b/2 \pm (b^2/4 + t_\perp^2 + \cos \delta \cos ak)^{1/2}$ energiaértékekkel adódik.

Bevezetve a következő operátorokat

$$\hat{A}_{\pm, \mathbf{i}, \sigma} = \frac{1}{\sqrt{2b}} \begin{cases} b\hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{a}, \sigma} - \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_2, \sigma} e^{i\frac{\delta}{2}} - \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_1, \sigma} e^{-i\frac{\delta}{2}} \\ b\hat{c}_{\mathbf{i}, \sigma} - \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_2, \sigma} e^{-i\frac{\delta}{2}} - \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_1, \sigma} e^{i\frac{\delta}{2}} \end{cases} \quad (474)$$

és az alapállapot energiára a $E_g^{III} = (U + b)N - N_c(3U + 4/b + 2b)$ jelölést használva, a $\hat{H}$ ekkor

$$\hat{H} = \sum_{\alpha=\pm} \sum_{\mathbf{i}, \sigma} \hat{A}_{\alpha, \mathbf{i}, \sigma} \hat{A}_{\alpha, \mathbf{i}, \sigma}^\dagger + U\hat{P} + E_g^{III} \quad (475)$$

formára transzformálható. Látható tehát hogy újból a (296)-hoz kapcsolódó stratégiát alkalmaztam a Hamilton operátor pozitív szemidefinit formára vett átalakítására, amelyben (278) szerepét (474) játssza, továbbá a kölcsönhatási tag átalakítása újból (298,299) szerint történt. Az így kapott (475) transzformált Hamilton operátor forma azért érdekes, mert (most nem számszerűleg rögzített) δ révén explicite benne marad a külső (és változtatható) mágneses tér. Ebben, ez az eset eltér az előbbieken bemutatottaktól, hisz eddig minden levezetett és a 36 Ábra nemkölcsönható sávszerkezetéhez kapcsolható alapállapot hullámfüggvényhez rendelt δ érték rögzített volt.

Ha $N = 5N_c$, az alapállapot

$$|\Psi_g^{III}(5N_c, \delta)\rangle = \hat{G}^\dagger \hat{E}^\dagger(\delta)|0\rangle \quad (476)$$

kifejezéssel adható meg, ahol $\hat{G}^\dagger = \hat{G}_\uparrow^\dagger \hat{G}_\downarrow^\dagger$, és $\hat{G}_\sigma^\dagger = \prod_{\alpha=\pm} \prod_{\mathbf{i}} \hat{A}_{\alpha, \mathbf{i}, \sigma}^\dagger$. Továbbá $\hat{E}^\dagger(0) = \prod_{\mathbf{i}} (\alpha_{\mathbf{i}} \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_1, \sigma_{\mathbf{i},1}}^\dagger + \beta_{\mathbf{i}} \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_2, \sigma_{\mathbf{i},2}}^\dagger)$ ahol tetszőleges $\alpha_{\mathbf{i}}, \beta_{\mathbf{i}}$ koeficiensek és tetszőleges $\sigma_{\mathbf{i},1}, \sigma_{\mathbf{i},2}$ spin indexek szerepelnek. A $\delta \neq 0$ esetben $\hat{E}^\dagger(\delta \neq 0) = \prod_{\mathbf{i}} \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_3, \sigma}^\dagger$ teljesül, ahol σ rögzített. Megemlítem, hogy (476) felírásában ugyanazon stratégia került alkalmazásra mint az amit (471.b) esetében ismertettem és amely újból (309-314) összefüggéseken alapszik. Ez esetben a $\hat{G}^\dagger$ játssza az $\hat{A}^\dagger$ operátorok szorzatának szerepét, továbbá a (313)-ban szereplő $\hat{F}^\dagger$ operátor szerepét most a $\hat{E}^\dagger(\delta)$ operátor helyettesíti.

Zéró külső mágneses tér esetében ($\delta = 0$) az alapállapot degenerált, globálisan nem-mágneses állapot, mely

$$|\Psi_g^{III}(5N_c, 0)\rangle = [\prod_{\mathbf{i}, \sigma} \hat{c}_{\mathbf{i}, \sigma}^\dagger (\hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_1, \sigma}^\dagger + \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_2, \sigma}^\dagger)] \hat{E}^\dagger(0)|0\rangle. \quad (477)$$

alakra hozható. A $\delta \neq 0$ esetre ferromágneses alapállapotot kapunk, melyben a σ spinű elektronok lokalizáltak, a $-\sigma$ spinű elektronok mobilisak, de termodinamikai határesetben a rendszer lokalizált.

Ha $N = 5N_c + \Delta N$ (azaz $5/3 < n < 2$), $\delta = 0$ esetben az alapállapot formája

$$|\Psi_g^{III}(N, \delta = 0)\rangle = [\prod_{\mathbf{i}=1}^{\Delta N} (\alpha'_{\mathbf{i}} \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_1, \sigma_{\mathbf{i},1}}^\dagger + \beta'_{\mathbf{i}} \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_2, \sigma_{\mathbf{i},2}}^\dagger)] |\Psi_g^{III}(5N_c, 0)\rangle \quad (478)$$

lesz, ahol a α'_i , β'_i koeficiensek és $\sigma_{i,1}$, $\sigma_{i,2}$ spin indexek tetszőlegesen. Ez az állapot továbbra is nem-mágneses és lokalizált. Az érdekessége az, hogy a lokalizált mivolt egy véges koncentráció tartományon megmarad.

Ugyancsak $N = 5N_c + \Delta N$ esetben, de $\delta \neq 0$ -ra az alapállapot

$$|\Psi_g^{III}(N > 5N_c, \delta)\rangle = \prod_{\alpha=1}^{\Delta N} \hat{c}_{n_\alpha, \mathbf{k}_\alpha, -\sigma}^\dagger |\Psi_g^{III}(5N_c, \delta)\rangle. \quad (479)$$

formát ölti. Mivel (318)-at követve $\Delta N > 1$ -re $\delta\mu(5N_c + \Delta N) = 0$, következik hogy $|\Psi_g^{III}(N > 5N_c, \delta)\rangle$ vezető. E mellett egyben telítetlen ferromágnes állapotot jelöl, melyben csak a $-\sigma$ spinű elektronok mozoghatnak. A fémes állapot mágnesezettsége az elektron sűrűség növekedésével lineárisan csökken. A bemutatott állapotok között δ zéró körüli változtatásával lehet mozogni, mi gyakorlati alkalmazások szempontjából nagyon kedvezőtlen.

Megemlítem, hogy (479) felírása ugyanazon eljárás és indokok alapján történt mint amelyeket (473) felírásakor részletesen bemutattam [lásd a (473) összefüggést követő szöveget]. A (478)-ban adott alapállapot levezetése ehhez képest kissé különbözik. Ekkor ugyanis igaz, hogy $\delta = 0$ -ra $|\Psi_g^{III}(5N_c, 0)\rangle$ már eleve zéró sajátértéket ad (475) Hamilton operátor első két tagjára, és ez a tulajdonság arra a hullámfüggvényre is fennmarad amelyet fermionikus keltő operátorok hozzáadásával $|\Psi_g^{III}(5N_c, 0)\rangle$ -ból kapunk. Az újdonság viszont az, hogy a keltő operátorok amelyekkel $|\Psi_g^{III}(5N_c, 0)\rangle$ bővíthető, különálló cellákban helyezkedhetnek csak el a $\mathbf{i} + \mathbf{r}_1$ illetve a $\mathbf{i} + \mathbf{r}_2$ pontokban (tehát merőlegesen a lánc vonalára), továbbá az elektronok nem ugorhatnak a cellákat összekötő $\mathbf{i}$ rácspontokra (azaz rögzített cellában lokalizáltak: ennek oka az, hogy $\hat{G}^\dagger$ miatt ez esetben minden említett cella összekötő $\mathbf{i}$ ponton dupla betöltés található). Ezért, a (478) alapállapot lokalizált állapotot jelöl.

D. Következmények

Egy olyan nem-integrálható rendszerre mint a bemutatott négyszögű Hubbard lánc közelítésmentes eredményekkel mutattam meg, hogy rendkívül gazdag jelenségcsoportot takar. A lehetséges fázisok széles skálát fednek: fém, szigetelő, paramágnes, telített és telítetlen ferromágnes, csupán egy rögzített spinvetülettel rendelkező részecskék mobilis mivolta (korrelált félfém). Mindez kombinálva a külső terekkel vett változtathatóság lehetőségével komoly alkalmazhatósági kapukat nyit, új területeken is, mint pl. a spintronics.

A pontos elméleti leírás vonalán megfigyelhető, hogy az alkalmazott módszer használhatósága nem csorbul a megkötésekhez kötött geometria miatt, továbbá az alkalmazhatóság akkor is fennáll, ha egy csomóponton csak egyetlen egy típusú fermionikus részecske létezhet. Az eredményekből gazdagon vett át a szakirodalom³²¹.

E. További eredmények

Háromszögű¹⁴ és hatszögű³²² cellával rendelkező periodikus láncokat is vizsgáltam a bemutatott módszerrel. Ez esetben ferromágneses fázisok létezését mutattam ki. Szintén ferromágneses alapállapotot mutattam ki egydimenziós, kiterjesztett Hubbard modellel jellemzett (nemintegrálható) lánc esetében is³²³.

A. Körülmények

A XV. fejezethez hasonlóan Hubbard modellel leírt vezető láncok kerülnek itt bonckés alá. De ez esetben pentagon cellájú láncokat tanulmányozok, amelyek típusa a vezető polimérek mondhatni leggyakrabban előforduló típusával egyezik. A korrelációs hatások nyomkövetésében is más lesz a végső célkitűzés mint az a XV. fejezetben volt, éspedig egy konkrét esetben pontos képet szeretnék bemutatni arra vonatkozólag, hogy a kölcsönhatás, a sávszerkezetet hogyan változtatja meg, és mindez miért történik. A témakörrel 2005-től kezdődőleg kezdtem módszeresen foglalkozni, az első kézirat beküldése és publikálása 2010-ben történt (majd 2013-ban, illetve 2014-ben került publikálásra a hosszú, részletes, illetve a kiterjesztett változat). A rendszer kiválasztását a pentagon cellájú vezető polimérek aránylag könnyű előállíthatósága, illetve elterjedő félben lévő alkalmazhatósága különböző területeken²³ adta. Tudomásom szerint, nem-integrálható rendszerek esetében, első ízben került publikálásra olyan eredmény, amely a kölcsönhatások hatását a sávszerkezetre közelítésmentesen mutatta.

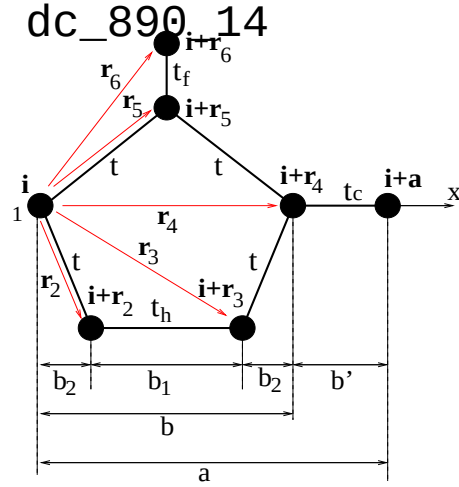
Összegezve a csatolódó információkat, a saját e részhez kapcsolódó publikált tudományos eredmények a Ref.[^{22–24}]-ben jelentek meg, a részletes előzmények a II B 6 alfejezetben, míg a részletesen leírt alkalmazott módszer a V B alfejezetben kerültek ismertetésre.

B. A modell és a Hamilton operátor

A tanulmányozott pentagon lánc elemi cellája a 37-es Ábrán található. E specifikus esetben maga a cella egy $m_p = 5$ atomot tartalmazó zárt poligon, melyhez $m_e = 1$ külső atom kapcsolódik, tehát az összatomszám (és ezáltal az alrácsok száma) a lánc periodikusan ismétlődő egységében $m = 6$. A $\mathbf{i}$ rács csomópontához tartozó cella atomjait $\mathbf{i} + \mathbf{r}_n$ vektorral jelölve, a $\mathbf{i} + \mathbf{r}_n$ és $\mathbf{i} + \mathbf{r}_{n'}$ atomokat összekötő hopping tagokat $t_{n,n'}$ formában indexelve, és bevezetve a $t_c = t_{4,7}, t_h = t_{3,2}, t_f = t_{5,6}, t = t_{1,5} = t_{4,5} = t_{2,1} = t_{3,4}$ jelöléseket, a rendszer Hamilton operátora $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_U$ formát ölti, ahol

$$\begin{aligned} \hat{H}_0 = \sum_{\sigma} \sum_{\mathbf{i}} \{ [t_f \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_6,\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_5,\sigma} + t_c \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_4,\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{a},\sigma} + t_h \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_2,\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_3,\sigma} + \\ t(\hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_5,\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{\mathbf{i},\sigma} + \hat{c}_{\mathbf{i},\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_2,\sigma} + \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_3,\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_4,\sigma} + \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_4,\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_5,\sigma}) + H.c.] + \sum_{n=1}^6 \epsilon_n \hat{n}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_n,\sigma} \}, \\ \hat{H}_U = \sum_{\mathbf{i}} \sum_{n=1}^6 U_n \hat{n}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_n,\uparrow} \hat{n}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_n,\downarrow}. \end{aligned} \quad (480)$$

A továbbiakban, $\sum_{\mathbf{i}}, \prod_{\mathbf{i}}$ (vagy $\sum_{\mathbf{k}}, \prod_{\mathbf{k}}$ a Fourier transzformált $\mathbf{k}$ térben) N_c cellára vett összeget, illetve produktumot jelent. Periodikus határfeltételeket használok amint látható olyan esetben, amikor a csomópontszám $N_{\Lambda} = mN_c$, az elektronok száma $N \leq 2N_{\Lambda} = N_{Max}$, és a betöltés $\rho = N/N_{\Lambda} \leq 2$ által kontrolált mennyiség.



37. Ábra . Az $m = 6$ atomot tartalmazó és $\mathbf{i}$ rácscsomóponton értelmezett pentagon cella. Az $\mathbf{r}_1 = 0$ összefüggés matematikai konvencióként használt.

A (480) $\mathbf{k}$ térbe vett transzformálásával, illetve $\hat{H}_0$ diagonalizálásával kapott és $m = 6$ sávot tartalmazó sáv szerkezetet ($E_{\mathbf{k}} = \epsilon$) a következő egyenlet adja

$$\begin{aligned}
 & 2t_c t^2 \left\{ (\epsilon_6 - \epsilon) [(\epsilon_2 - \epsilon)^2 - t_h^2] - t_h [(\epsilon_6 - \epsilon)(\epsilon_5 - \epsilon) - t_f^2] \right\} \cos ak \\
 & + [(\epsilon_6 - \epsilon)(\epsilon_5 - \epsilon) - t_f^2] \left\{ [(\epsilon_2 - \epsilon)(\epsilon_1 - \epsilon) - t^2]^2 - (\epsilon_1 - \epsilon)^2 t_h^2 - (\epsilon_2 - \epsilon)^2 t_c^2 + t_h^2 t_c^2 \right\} \\
 & + 2(\epsilon_6 - \epsilon) t^2 \left\{ (\epsilon_1 - \epsilon) [t_h^2 - (\epsilon_2 - \epsilon)^2] + t^2 (\epsilon_2 - \epsilon + t_h) \right\} = 0.
 \end{aligned} \tag{481}$$

Itt a $\hat{H}_0$ paramétereket úgy rögzítem, hogy lapos sáv (481)-ből ne adódjon megoldásként. Fontos azt is megjegyezni, hogy az előző fejezetekhez képest, (480)-ban a cella nem-ekvivalens pontjaihoz tartozó U_n lokális Coulomb taszítások egymástól különbözőnek tekintettek. Ennek magyarázata az, hogy az U_n értékek úgy az $\mathbf{r}_n$ pozícióban lévő atomok milyensége, mint azok környezetének függvényei, mely tényről itt nem tekintek el.

A megcélzott koncentráció tartomány, az elkövetkezőkben, távol a félig töltött rendszertől, az erősen dopolt tartományban lesz.

C. A levezetett egzakt alapállapotok

1. A pozitív szemidefinit formára való átalakítás

A $\hat{H}$ pozitív szemidefinit formára vett alakítása a következő kifejezéseket eredményezi

$$\hat{H} = \hat{H}_G + \hat{H}_P + C_g, \tag{482}$$

ahol $C_g = q_U N - N_c(2K + \sum_{n=1}^6 U_n)$ egy skálár, továbbá $\hat{H}_P = \sum_{n=1}^6 U_n \hat{P}_n$, $\hat{P}_n = \sum_{\mathbf{i}} \hat{P}_{\mathbf{i},n}$, továbbá $\hat{P}_{\mathbf{i},n} = \hat{n}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_n,\uparrow} \hat{n}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_n,\downarrow} - (\hat{n}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_n,\uparrow} + \hat{n}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_n,\downarrow}) + 1$, $n = 1, \dots, 6$, az V.B.2.E. fejezetben bevezetett, és a kölcsönhatási tagok tárgyalására használt operátorok. A $\hat{H}_G$ tagot illetően, $\hat{H}_G = \sum_{\sigma} \sum_{\mathbf{i}} \sum_{\alpha=1}^5 \hat{G}_{\alpha,\mathbf{i},\sigma} \hat{G}_{\alpha,\mathbf{i},\sigma}^\dagger$ összefüggés áll fenn, és ezen tagok az V.B.2.A. fejezet b) pontjában tárgyalt $\hat{P}_n = \hat{\Omega}_n \hat{\Omega}_n^\dagger$ operátorok receptjére előállított tagok. A (482) átalakításra, az eljárás részletes leírása az V.B.2 fejezetben található. A minden cellára bevezetett öt lineáris blokk operátor formája

$$\begin{aligned}
 \hat{G}_{1,i,\sigma} &= a_{1,1}\hat{c}_{i+r_1,\sigma} + a_{1,2}\hat{c}_{i+r_2,\sigma} + a_{1,5}\hat{c}_{i+r_5,\sigma}, & \hat{G}_{2,i,\sigma} &= a_{2,2}\hat{c}_{i+r_2,\sigma} + a_{2,3}\hat{c}_{i+r_3,\sigma} + a_{2,5}\hat{c}_{i+r_5,\sigma}, \\
 \hat{G}_{3,i,\sigma} &= a_{3,3}\hat{c}_{i+r_3,\sigma} + a_{3,4}\hat{c}_{i+r_4,\sigma} + a_{3,5}\hat{c}_{i+r_5,\sigma}, & \hat{G}_{4,i,\sigma} &= a_{4,5}\hat{c}_{i+r_5,\sigma} + a_{4,6}\hat{c}_{i+r_6,\sigma}, \\
 \hat{G}_{5,i,\sigma} &= a_{5,4}\hat{c}_{i+r_4,\sigma} + a_{5,7}\hat{c}_{i+a,\sigma},
 \end{aligned} \tag{483}$$

ahol az $a_{n,n'}$ tagok numerikus koefficiensek és $\mathbf{r}_7 = \mathbf{a}$ egyenlőség áll fenn. A fedési egyenletek amelyek (482) fennállását biztosítják, a következő összefüggéseket jelentik

$$\begin{aligned}
 -t_f &= a_{4,6}^* a_{4,5}, & -t_h &= a_{2,2}^* a_{2,3}, & -t_c &= a_{5,4}^* a_{5,7}, \\
 -t &= a_{1,5}^* a_{1,1} = a_{1,1}^* a_{1,2} = a_{3,3}^* a_{3,4} = a_{3,4}^* a_{3,5}, & 0 &= a_{2,5}^* a_{2,3} + a_{3,5}^* a_{3,3} = a_{2,5}^* a_{2,2} + a_{1,5}^* a_{1,2}, \\
 q_U - (U_6 + \epsilon_6) &= |a_{4,6}|^2, & q_U - (U_5 + \epsilon_5) &= |a_{4,5}|^2 + |a_{1,5}|^2 + |a_{3,5}|^2 + |a_{2,5}|^2, \\
 q_U - (U_2 + \epsilon_2) &= |a_{1,2}|^2 + |a_{2,2}|^2 = |a_{2,3}|^2 + |a_{3,3}|^2, \\
 q_U - (U_1 + \epsilon_1) &= |a_{1,1}|^2 + |a_{5,7}|^2 = |a_{3,4}|^2 + |a_{5,4}|^2,
 \end{aligned} \tag{484}$$

továbbá $K = \sum_{\alpha=1}^5 z_{\alpha}$, $z_{\alpha} = \{\hat{G}_{\alpha,i,\sigma}, \hat{G}_{\alpha,i,\sigma}^{\dagger}\} \neq 0$ egyenlőség teljesül. Mindezekon túlmenően, a cellában elfoglalt hasonló szimmetriájú pozíció miatt $U_1 = U_4$, $U_2 = U_3$, $\epsilon_1 = \epsilon_4$ és $\epsilon_2 = \epsilon_3$ egyenlőségek állnak fenn. Amint látható, a (482)-ben szereplő q_U , a (484) által meghatározott.

A fedési egyenletek megoldásai a következő összefüggéseket eredményezik

$$\begin{aligned}
 a_{1,2} &= a_{1,5} = \sqrt{Q_1} e^{i\phi_1}, & a_{1,1} &= -\frac{t}{\sqrt{Q_1}} e^{i\phi_1}, & a_{2,2} &= a_{2,3} = -\sqrt{|t_h|} e^{i\phi_2}, & a_{2,5} &= \frac{Q_1}{\sqrt{|t_h|}} e^{i\phi_2}, \\
 a_{3,3} &= a_{3,5} = \sqrt{Q_1} e^{i\phi_3}, & a_{3,4} &= -\frac{t}{\sqrt{Q_1}} e^{i\phi_3}, & a_{4,6} &= Q_3 e^{i\phi_4}, & a_{4,5} &= -\frac{t_f}{Q_3}, \\
 a_{5,7} &= \sqrt{|t_c|} e^{i\phi_5}, & a_{5,4} &= -\text{sign}(t_c) \sqrt{|t_c|} e^{i\phi_5},
 \end{aligned} \tag{485}$$

ahol ϕ_{α} , $\alpha = 1, \dots, 5$ tetszőleges fázisok, tehát zéróra állíthatók. A bevezetett jelölések $Q_1 = q_U - U_2 - \epsilon_2 - |t_h|$, $Q_2 = q_U - U_1 - \epsilon_1 - |t_c|$, $Q_3 = |a_{4,6}| = \sqrt{q_U - U_6 - \epsilon_6}$, továbbá $Q_1, Q_2, Q_3 > 0$ kell fennálljon. Mivel $t_h = -|a_{1,1}|^2 |a_{2,2}|^2 / |a_{3,4}|^2$ adódik, megoldások csak $t_h < 0$ esetben állnak elő. Továbbá

$$\begin{aligned}
 q_U &= \frac{1}{2} \{ (U_1 + \epsilon_1 + |t_c|) + (U_2 + \epsilon_2 + |t_h|) + \sqrt{[(U_2 + \epsilon_2 + |t_h|) - (U_1 + \epsilon_1 + |t_c|)]^2 + 4t^2} \}, \\
 Q_3 &= |t_f| \sqrt{|t_h|} / \sqrt{[|t_h|(q_U - U_5 - \epsilon_5) - (q_U - U_2 - \epsilon_2)^2 + t_h^2]},
 \end{aligned} \tag{486}$$

illetve $K = 2(|t_h| + |t_c|) + 4Q_1 + Q_3^2 + \frac{Q_1^2}{|t_h|} + \frac{2t^2}{Q_1} + \frac{t_f^2}{Q_3^2}$ teljesül.

A megoldás előállítását biztosító összes kondíció

$$\begin{aligned}
 t_h &< 0, & Z &= q_U - Q_3^2 > \epsilon_6, & W &= q_U - \frac{(q_U - U_2 - \epsilon_2)^2 - t_h^2}{|t_h|} > \epsilon_5, \\
 W - \epsilon_5 &> U_5 > 0, & U_6 &= Z - \epsilon_6,
 \end{aligned} \tag{487}$$

formára hozható. Megjegyzem, hogy (487) egy véges paramétertartományt határoz meg, amelyen belül a bemutatott megoldás érvényes.

Az alapállapot levezetése az V.B.3.C fejezetben részletesen leírt eljárással történt. A (482)-hez tartozó alapállapot kifejezése $N = 2N_\Lambda - N_c = 11N_c = N^*$ elektronszám esetében (ez félig töltött legfelső sávot jelent, azaz $\rho = 2 - N_c/N_\Lambda$), lásd (313,316),

$$|\Psi_g(N^*)\rangle = [\prod_\sigma \hat{G}_\sigma^\dagger] \hat{F}^\dagger |0\rangle, \quad (488)$$

ahol $\hat{G}_\sigma^\dagger = \prod_i \prod_{\alpha=1}^5 \hat{G}_{\alpha,i,\sigma}^\dagger$, az $\hat{F}^\dagger = \prod_i \hat{c}_{i+r_{n_i},\sigma}^\dagger$ operátor minden cellába egy rögzített σ spinvetülettel rendelkező elektront visz be, és $|0\rangle$ a zéró betöltési számokkal rendelkező Fock vákum. A (488)-hoz tartozó alapállapot energiája $E_g = C_g$, ahol C_g a (482) alatt adott. Az alapállapot mivolt abból következik hogy i) $\hat{G}_{\alpha,i,\sigma}^\dagger \hat{G}_{\alpha,i,\sigma}^\dagger = 0$ miatt $\hat{H}_G |\Psi_g(N^*)\rangle = 0$, továbbá, ii) mivel (488)-ben minden csomóponton legalább egy elektron található és így $\hat{P}_{i,n} |\Psi_g(N^*)\rangle = 0$, következik hogy $\hat{H}_P |\Psi_g(N^*)\rangle = 0$. Az unicitás igazolása nagyon terjedelmes, de Ref.^[23]-ben megtalálható.

Úgy mint (479) esetében, a (488) is kiterjeszthető $N = N^* + \Delta N$, $\Delta N < N_c$ koncentrációtartományra

$$|\Psi_g(N = N^* + \Delta N)\rangle = \prod_{\alpha=1}^{\Delta N} \hat{c}_{n_\alpha, \mathbf{k}_\alpha, -\sigma}^\dagger |\Psi_g(N^*)\rangle, \quad (489)$$

ahol σ ugyanaz a rögzített érték mint ami $|\Psi_g(N^*)\rangle$ -ben szerepel, $n_\alpha = 1, 2, \dots, 6$ tetszőleges, és $\mathbf{k}_\alpha$ is tetszőleges de ugyanazon érték kétszer a külső produktumban nem fordulhat elő.

A (488) spinvetületeinek összege $+N_c$, tehát ez az állapot ferromágneses, és megállapítható hogy termodinamikai határesetben lokalizált. A ferromágneses tulajdonság (489) esetében is megmarad, de $\delta\mu = 0$ miatt, ezen állapot vezető.

D. Effektív felső lapos sáv

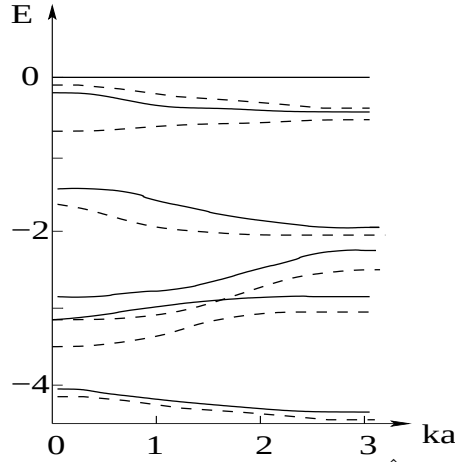
A transzformált (482)-ben szereplő Hamilton operátor első tagja a $\hat{G}_{\alpha,i,\sigma} \hat{G}_{\alpha,i,\sigma}^\dagger = z_\alpha - \hat{G}_{\alpha,i,\sigma}^\dagger \hat{G}_{\alpha,i,\sigma}$ transzformációval

$$\hat{H}_G = \hat{H}_{kin} + C_1 \quad (490)$$

formára hozható, ahol $\hat{H}_{kin} = -\sum_\sigma \sum_i \sum_{\alpha=1}^5 \hat{G}_{\alpha,i,\sigma}^\dagger \hat{G}_{\alpha,i,\sigma}$ egy operátor és $C_1 = 2N_c \sum_{\alpha=1}^5 z_\alpha$ egy skalár. Ezáltal, a (482)-ben szereplő Hamilton operátor egyedüli egyrészecskes járuléka $\hat{H}_{kin}$ lesz, és ezáltal ez a tag egy effektív kinetikus tagként értelmezhető. Az effektív jelző itt arra utal, hogy amint azt (485,486) mutatja, a blokk operátor koefficienseken keresztül $\hat{H}_{kin}$ részletes információval rendelkezik a kölcsönhatásról. A kinetikus jelleg miatt viszont $\hat{H}_{kin}$ -hez, a $\mathbf{k}$ térben vett diagonalizálás nyomán sávszerkezet rendelhető. De ez a sávszerkezet teljesen más lesz mint az (480)-ben szereplő és U_n tagokat nem tartalmazó $\hat{H}_0$ sávszerkezete, és ezért, a kölcsönhatás által kreált effektív sávszerkezetként értelmezhető. A (484) fedési egyenletek struktúrája azt mutatja, hogy $\hat{H}_{kin}$ sávszerkezete úgy alakul ki $\hat{H}_0$ sávszerkezetéből, hogy közben a lokális egy-részecske potenciálok

$$\epsilon_n^R = \epsilon_n + U_n - q_U, \quad (491)$$

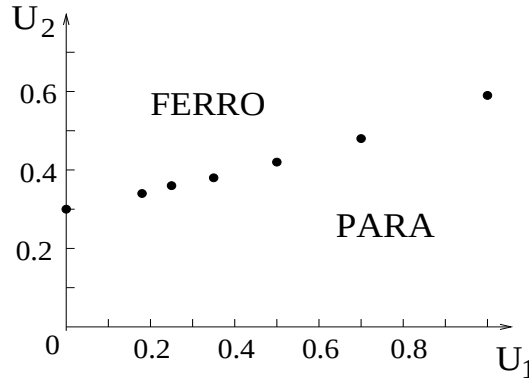
formában renormálódnak, ahol, amint azt (486) mutatja, q_U az U_n kölcsönhatási erősségek nemlineáris függvénye. Egy ábrázolt példa a 38. Ábrában található.



38. Ábra . A $\hat{H}_0$ sáv szerkezet (szaggatott vonal) és $\hat{H}_{kin}$ effektív sáv szerkezet (folytonos vonal) példázata $t_c/t = 0.5, t_h/t = -1.1, t_f/t = 1.2, \epsilon_5/t = \epsilon_6/t = -2.1, \epsilon_2/t = \epsilon_3/t = -2.0, \epsilon_1/t = \epsilon_4/t = -2.5, U_6/t = U_5/t = 0.029, U_2/t = U_3/t = 0.35, U_1/t = U_4/t = 0.18$ esetben. A feltüntetett energia t egységekben van megadva. A spektrum ka változóban páros, ezért csak a $ka > 0$ tartomány van ábrázolva.

Az effektív lapos sáv pont akkor jelenik meg, amikor a (488,489) megoldások léteznek. Erről úgy győződhetünk meg, hogy (491) felhasználásával, q_U -nak (486)-ben adott kifejezésével, illetve az (487) kondíciókkal (481)-be lépünk. Ezt megtéve, (481) numerikus megoldása nyomán felső effektív lapos sáv jelenik meg a spektrumban, úgy ahogy ezt a 38. Ábra mutatja.

Azt is megjegyzem, ha viszont U_n homogénné válik, azaz $U = U_n$ teljesül minden n -re, az (485) megoldásokból U eltűnik, az effektív kölcsönhatás keltette sáv megszűnik létezni, és a bemutatott alapállapotú megoldások nem érvényesek többé (hiszen a kirótt kondíciók teljesülése csupán $\hat{H}_0$ paraméterekkel, $\hat{H}_0$ lapos sávot eredményeznének, ezek meg a tanulmányozott paraméterteréből induláskor ki voltak zárva).



39. Ábra . A fázisdiagram ferromágneses és paramágneses tartományai a 37. Ábrában bemutatott rendszerre, a $\hat{H}_0$, a 38. Ábrában használt rögzített paramétereire, miközben csupán az U_n értékek változnak. Az U_n értékek t egységben adóttak.

Meg kell említenem azt is, hogy a (487) kondíciók arra vezetnek, hogy a ferromágneses

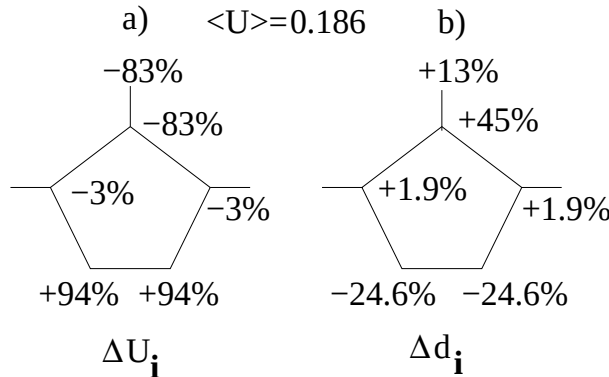
fázis fellépésekor a kölcsönhatási értékekben véges, nemzéró küszöbértékek vannak jelen, lásd a 39. Ábrát. Ez a tény is aláhúzza, hogy az itt létrejövő ferromágnesesség nem a standard (Mielke-Tasaki féle³²⁰) lapossáv ferromágnesesség, hiszen amellettt hogy itt a $\hat{H}_0$ sávjai diszperzivek, kölcsönhatási küszöb átlépése szükséges a rendezett fázis megjelenéséhez.

A bemutatott eredményekre építve és tökéletesen hasonló eljárással azt is igazoltam, hogy a kölcsönhatás keltette lapos sáv megjelenése nem kizárólagosan a pentagon lánc tulajdonsága, hanem sokkal általánosabb láncstruktúrák esetében is előfordul²⁴.

E. A fizikai okok vizsgálata

A viselkedés fizikai okait keresve, a legkisebb egységen amely ferromágnesességet ad (két cellás rendszer periodikus határfeltételekkel) könnyen kiszámíthatóak voltak azon energiaváltozások, amelyek a ferromágnesesség megjelenésekor fellépnek. Ehhez használtam i) a rendszer nem-kölcsönható (és ezáltal paramágneses) alapállapot hullámfüggvényét mint próbafüggvényt ($|\Psi_0\rangle$) és, ii) az (488)-ben adott egzakt alapállapotot ($|\Psi_g\rangle$). Ezekkel kiszámított $\hat{H}_0$ és $\hat{H}_U$ átlagértékek a kinetikus energia átlagértékeket adják [i) esetben $E_{kin,0}$, ii) esetben E_{kin}], illetve a kölcsönhatási energia átlagértékeket [i) esetben $E_{int,0}$, ii) esetben E_{int}], továbbá ezek összegét, ami az alapállapot energiája [i) esetben $E_{g,0}$, ii) esetben E_g].

Ilyen körülmények között kiderül, hogy pl. a 38. Ábrában használt paraméterekre, akkor amikor a ferromágneses fázis megjelenik, a $\delta E_{int} = (E_{int} - E_{int,0})/E_{int,0}$ kölcsönhatási energia változás -70% , míg a $\delta E_{kin} = (E_{kin} - E_{kin,0})/E_{kin,0}$ kinetikus energia változás $+2.6\%$, miközben az alapállapot energiája csökkenés $\delta E_g = (E_g - E_{g,0})/E_{g,0}$ mennyiségben -3% . Az induló paramétereket megváltoztatva, de a ferromágneses tartományban maradván, ez a kép kvalitatíve nem változik. Azaz, a rendezett fázis megjelenése gyakorlatilag a kölcsönhatási energia nagyságrendileg 70% -os csökkenése által vezérelt, miközben a kinetikus energia gyakorlatilag "befagyasztott", azaz majdnem változatlan. Ez az E_{kin} befagyás a lapos sáv megjelenésének okozója, de kérdés marad az, hogy E_{int} drasztikus csökkenését mi okozza. E kérdésre a választ a különböző U_n értékek adják. Ennek megértése céljából a 39. Ábrát mutatom be.



40. Ábra . a) Az $U = U_i = \langle U \rangle = 0.186$ értékhez képest létrehozott lokális Coulomb tasztítás változtatások $\Delta U_i = U_i - \langle U \rangle$ értékei, és b) az ezek által előidézett Δd_i változások a lokális dupla betöltésben, ahol $d_i = \langle \hat{n}_{i,\uparrow} n_{i,\downarrow} \rangle$. A $\hat{H}_0$ paraméterek a 38. Ábra paraméterei, és (488) az egzakt alapállapot mely a megváltoztatott U_i értékeket kezeli.

Megfigyelhető, hogy a különböző U_n értékek a cellán belül egy új szabadsági fokot adnak a rendszer kölcsönhatási energiájának drasztikus csökkentéséhez. Mindez a dupla betöltés erős átszervezésén keresztül történik. Ennek megfelelően, ahol a lokális U_n értékek erősen megnőnek (39.a Ábra alsó két csomópontja), ott a dupla betöltés erősen lecsökken (39.b Ábra alsó két csomópontja), és ezzel ellentétben, ahol U_n erősen lecsökken (39.a Ábra felső két csomópontja), ott a dupla betöltés erősen megnő (39.b Ábra felső két csomópontja). Ahol pedig a lokális Coulomb kölcsönhatás az átlagos és homogén U értékhez képest keveset változik (39.a Ábra középső két csomópontja) ott a dupla betöltés megváltozása is kicsi (39.b Ábra középső két csomópontja). A Δd_i változások számszerűleg azért kisebbek a ΔU_i változásoknál, mert Δd_i -re egy plusz megszorítás is kell teljesüljön, mégpedig a teljes részecskeszám megmaradás.

Tehát, a drasztikus dupla betöltés átrendeződési lehetőség (amely homogén $U_n = U$ esetben nem létezik) okozza E_{int} nagymértékű csökkenését. Mindezek mellett, az E_{kin} befagyasztása azért kell, mert így maximálisan ki lehet használni az alapállapot energiájának csökkentésére a kölcsönhatási energia nagymértékű csökkenését.

F. Következmények

A levezetett eredmények azt mutatják, hogy a tanulmányozott esetben a ferromágneses fázis úgy lép fel, hogy egy amúgy teljesen diszperzív sávokkal rendelkező rendszerben, a kölcsönhatások egy effektív lapos sávot hoznak létre. Az eredmény egyrészt azért érdekes, mert a kölcsönhatás közelítésmentes hatását mutatja a sávszerkezetre egy nem-integrálható modell esetében. Ilyenszerű egzakt eredmény integrálható rendszerek esetében már létezik¹¹⁸, de nem-integrálható rendszerekre vonatkozólag, tudomásom szerint egyedülálló. Az eredmény másik erőssége az, hogy rámutat arra, hogy különböző U értékek különböző típusú csomópontokon, a dupla betöltés átrendeződési lehetőségén keresztül, nagymértékben csökkenthetik a kölcsönhatási energia értékét. Ezen mechanizmus, a tanulmányozott esetben ferromágneses fázist kelt, de ez nagymértékben különbözik az ismert laposáv³²⁰ ferromágnesességtől: i) az itt lévő lapos sáv effektív, azaz a kölcsönhatás által keltett, miközben $\hat{H}_0$ sávjai diszperzivek, és ii) $U_n \neq U$ minden n -re szituáció áll fenn, miközben alsó nemzéró kölcsönhatási küszöbök átlépése szükséges a rendezett fázis megjelenéséhez.

G. További eredmények

A pentagon láncokra alacsonydimenziós koncentrációtartományban is mutattam ki ferromágnesességet³²⁴, továbbá az itt alkalmazott eljárást a ferromágneses fázis kimutatására $D > 1$ esetekben is alkalmaztam³²⁵. Ezen fejezetben bemutatott eredmények több csoport tevékenységét intenzíven befolyásolták³²⁶.

dc 890 14
XVII. SÁVSZIGETELŐRE HATÓ HUBBARD KÖLCSÖNHATÁS OKOZTA
DELOKALIZÁLT ÁLLAPOT.

A. Körülmények

Az előző XV. és XVI. fejezetekben olyan rendeződési formák bemutatására került sor amelyek egy láncba beszűkített geometriában voltak levezetve, olyan körülmények között, hogy egy csomóponton, a IX, XII, XIII és XIV fejezetekkel ellentétben, csak egyetlen típusú (de tetszőleges spinvetülettel rendelkező) fermion jelenhetett csak meg. A levezetett állapotok között voltak olyanok amelyek a XV. fejezet előtti, nem beszűkített geometriai feltételek között is megjelentek, mint például a XI.-XIV. fejezetek esetében (kiskoncentrációs határesetben jelentkező) rendezetlen klaszterszerű képződmények, kiskoncentrációs határesetben fellépő ferromágneses állapot (hasonló rendezettség a XII. és XIV. fejezetek esetében is jelen volt), vagy (nem sávszigetelő jellegű) szigetelő lokalizált állapot (amelyhez hasonló XII-XIV fejezetek esetében is jelentkezett). Ezek mellett azonban olyan rendeződési formák is jelen voltak amelyek a XV. fejezet előtt nem jelentkeztek, és amelyek kialakulásában (legalábbis a bemutatott esetekben), kétségtelenül szerepet játszottak azon korrelációs hatások amelyeket a specifikus geometria okozott. Ezek közé tartozik a XV. fejezetben levezetett folytonos koncentrációtartományon megmaradó szigetelő fázis, illetve a korrelált félfém (half metal), amely kölcsönhatás jelenlétében egy bizonyos spinvetületű részecskéket csomópontra lokalizált, míg ellentétes spinvetületű részecskéket vezető állapotban tartalmaz.

Látható tehát hogy a korrelációs hatások fokozásának irányába haladva, és ezeket a leírás szintjén teljes értékükkel figyelembe is véve, mind különösebb és különösebb rendeződési formákat találunk. Az elmondottak ellenére azonban alá kell húznom, hogy eddig, a sokrészecskés kvantummechanikai rendszerekre vonatkozó összes eredmény (lásd XII-XVI fejezetek) mindegyike, félig töltött rendszertöltéstől távoli koncentrációtartományra vonatkozott (a XVI fejezetben is félig töltött rendszertöltést jóval meghaladó koncentrációtartomány volt jelen). Tudvalevő viszont, hogy a korrelációs hatások, legerőteljesebben, félig töltött rendszerre jelentkeznek. Így, az utolsó saját modelleredményekre vonatkozó fejezetben azt szeretném bemutatni, hogy egy kétdimenziós kvantummechanikai esetben, pontosan félig vett rendszertöltésen, olyankor amikor a korrelációs hatások a legerőteljesebbek, hogyan néz ki egy közelítésmentesen leírt és véges kölcsönhatás jelenlétében létező állapot. Egy specifikus esetet írok le, mégpedig azt a szituációt amikor a U Hubbard kölcsönhatás hiányában (két dimenzióban) a rendszer lokalizált (és egyben sáv szigetelő), míg $U > 0$ bekapcsolása nyomán delokalizált állapotba megy át.

Az ezredforduló után világossá vált, hogy két dimenzióban, kétsávós félig töltött és sávszigetelőként viselkedő, amúgy makroszkópicusan elfajult rendszer esetében, a lokális Coulomb taszító jellegű kölcsönhatás szigetelő-fém átalakulást idézhet elő, azaz delokalizációt okozhat^{243–245}. Ez ellentétben áll az előző évtizedek tapasztalataival, miszerint a lokális Coulomb taszítás (Hubbard kölcsönhatás) fém-szigetelő átmenetet okoz²⁴⁶, itt pedig

pont a fordított jelenséget tapasztalják.

Lényegében e tények motiválták a munkámat amelyek az alább bemutatásra kerülő eredményekhez vezettek. Arra voltam kíváncsi, hogy fizikailag, hogyan képes a Hubbard kölcsönhatás delokalizációt okozni. Egy prototípus kétsávós modellt használtam kiindulópontként (periodikus Anderson típusú modell) amit a tapasztalt jelenség paramétereire állítottam be (2D, félig töltött rendszer, nemkölcsönható esetben sávszigetelő és makroszkópikus degeneráció), majd a Hubbard U hatását elemeztem az alapállapot hullámfüggvényre. A számításokban az is motivált, hogy ez eredmény előtt nem sikerült eddig egzakt alapállapotokat levezetnem félig töltött rendszerre, így pl. a periodikus Anderson modell félig töltött esetére. Amint már említettem, ez a plusz nehézségi fok a félig töltött rendszer nagyon erős korrelációs hatásai miatt van jelen.

Az itt bemutatásra kerülő alapállapot levezetése 2003-2008 periódusban történt és 2008-ban volt publikálva⁶. Az eredmény igazolja (2D-ben és egzakt szinten), hogy az adott körülmények között ténylegesen, a Hubbard taszítás delokalizál. Az eredmény mutatja, hogy a probléma megoldásának (matematikai) nehézségét az alapállapot hullámfüggvénybe belépő kiterjedt (az egész rendszerre kiterjedő) operátorok adják. Első alkalom volt hogy ezen operátorokkal dolgoztam és tulajdonságaikról tapasztalatot gyűjthettem. Tudomásom szerint, a levezetett egzakt alapállapot ma is egyedüli ilyenyszerű eredmény 2D-ben, kétsávós és félig töltött rendszerre, véges kölcsönhatás jelenlétében.

Az anyaghoz kapcsolódó saját tudományos publikáció Ref.[⁶]-ban található, a részletes előzmények II B 7 alfejezetben, míg a részletesen leírt alkalmazott módszer a V B alfejezetben található meg.

B. A modell és a Hamilton operátor

1. Az alkalmazott stratégia

A Hubbard kölcsönhatás delokalizációs hatását úgy elemzem, hogy a lokalizációs hossza (λ) koncentrálok. A kiindulópontot a hosszútávú hopping alapállapot várható értéke adja [lásd (343,344,345)] amit itt

$$\Gamma(\mathbf{r}) = \frac{1}{N_\Lambda} \sum_{\mathbf{i}=1}^{N_\Lambda} \Gamma_{\mathbf{i}}(\mathbf{r}), \quad \Gamma_{\mathbf{i}}(\mathbf{r}) = (1/2) \sum_{\sigma} \langle \hat{b}_{\mathbf{i},\sigma}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{i}+\mathbf{r},\sigma} + H.c \rangle, \quad (492)$$

formában használom. Az adott összefüggésben N_Λ a rács csomópontjainak számát jelöli, $\hat{b}_{\mathbf{i},\sigma}^\dagger$ a σ spinű elektronok kanonikus Fermi keltő operátora az $\mathbf{i}$ csomóponton, $b = d, f$ ahol d és f jelenti a két elektron típust amely ugyanazon csomóponton létezhet (f a korrelált, míg d a szabad sávot jellemzi). Megjegyzem, hogy a rendszer homogén, tehát $\Gamma(\mathbf{r}) = \Gamma_{\mathbf{i}}(\mathbf{r})$ összefüggés áll fenn. A lokalizációs hosszt (λ) a $\Gamma(\mathbf{r}) \sim \exp(-|\mathbf{r}|/\lambda)$ összefüggésből számolom (lásd (343-345)). Az elkövetkezőkben azt fogom megnézni, hogy az adott körülmények között vett $U > 0$ bevezetésével $\Gamma(\mathbf{r})$ és λ megnövekedik e vagy sem. Ha növekednek, ez azt jelenti, hogy U (a tanulmányozott keretek között) delokalizáló hatású.

Egy kétdimenziós $N_\Lambda = L \times L$ Bravais rácsot veszek figyelembe amely primitív vektorai $(\mathbf{x}, \mathbf{y})$. Az e rácson értelmezett Hamilton operátor $\hat{H} = \hat{H}_0 + U\hat{U}_f$ egy prototípus kétsávos modell lesz mely lényegében periodikus Anderson típusú. A Hubbard tag $\hat{U}_f = \sum_{\mathbf{i}} \hat{n}_{\mathbf{i},\uparrow}^f \hat{n}_{\mathbf{i},\downarrow}^f$, $U \geq 0$ és tetszőleges, továbbá

$$\begin{aligned} \hat{H}_0 = \sum_{\mathbf{i},\sigma} \left\{ \left(\sum_{\mathbf{r}_d} t_{\mathbf{r}_d} \hat{d}_{\mathbf{i},\sigma}^\dagger \hat{d}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_d,\sigma} + V_0 \hat{d}_{\mathbf{i},\sigma}^\dagger \hat{f}_{\mathbf{i},\sigma} + \right. \right. \\ \left. \sum_{\mathbf{r}=\mathbf{x},\mathbf{y}} \sum_{b,b'=d,f; b \neq b'} V_{\mathbf{r}}^{b,b'} \hat{b}_{\mathbf{i},\sigma}^\dagger \hat{b}'_{\mathbf{i}+\mathbf{r},\sigma} + H.c. \right) + E_f \hat{f}_{\mathbf{i},\sigma}^\dagger \hat{f}_{\mathbf{i},\sigma} \right\}. \end{aligned} \quad (493)$$

A (493) összefüggésben, abból a tényből kiindulva hogy a használt modell minél közelebb legyen valós rendszerekhez, a $t_{\mathbf{r}_d}$ hopping mátrix elem az $\mathbf{r}_d$ indexen keresztül első- és másodsomszéd tagokat foglal magába (de csak d elektronok rendelkeznek direkt hopping taggal). V_0 és $V_{\mathbf{r}}^{b,b'}$, $b, b' = d, f$, a rögzített csomóponton vett és legközelebbi szomszéd hibridizációs mátrixelem nagyságát jelöli, továbbá E_f a csomóponti f -elektron energia. A számolás során periódikus határfeltételeket veszek figyelembe, továbbá a rendszer félig töltött, azaz $\bar{n} = N/N_{max} = 1/2$, $N = 2N_\Lambda$, $N_{max} = 4N_\Lambda$, ahol N az elektronok, míg N_{max} a rendszerbe bevihető maximális elektronok száma.

3. Az $U = 0$ nemkölcsonható eset

Az $U = 0$ nemkölcsonható esetet úgy állítom be, hogy a delokalizációs hatás érzékelésekor észlelt körülmények teljesüljenek^{243–245}, éspedig a) a rendszer legyen sávszigetelő állapotban, és b) a rendszer legyen makroszkópiusan degenerált.

Az a) feltételt úgy érem el, hogy legyen két olyan diagonalizált sáv jelen melyeket minden $\mathbf{k}$ értékre tiltott energiarés $\Delta(\mathbf{k}) \neq 0$ válasszon el. Mivel a rendszer félig töltött, következik hogy az alsó sáv teljesen teli, míg a felső sáv teljesen üres lesz. Ennek következtében, $\Delta \neq 0$ miatt a rendszer sávszigetelő. A b) feltételt úgy érem el, hogy a $\hat{H}_0$ paramétereit úgy állítom be, hogy az alsó sáv lapos, azaz makroszkópiusan degenerált legyen („lapos sáv” mint eddig, azt jelenti, hogy minden $\mathbf{k}$ -ra ugyanaz az egyrészecske energia, azaz a spin miatt, a rendszer $2N_\Lambda$ -szor elfajult).

Ha a rendszer szimmetrikus x és y felcserélésére (ez a legegyszerűbb eset amit elemezni lehet), azaz $t_1 = t_x = t_y$, $t_2/2 = t_{2x} = t_{2y} = t_{y \pm x}/2$, $V_1 = V_x^{b,b'} = V_y^{b,b'}$, akkor annak a feltétele hogy az alsó diagonalizált sáv lapos legyen

$$V_1 t_1 = V_0 t_2, \quad E_f = 2 \frac{V_1^2}{t_2} - \frac{V_0^2 t_2}{2V_1^2} - 2t_2, \quad t_2 > 0, \quad (494)$$

formában fogalmazható meg. Ténylegesen, (494) fennállásakor, a (493)-ben adott $\hat{H}_0$, $\mathbf{k}$ -térben vett diagonalizációja

$$\hat{H}_0 = \sum_{\sigma} \sum_{\mathbf{k}} [E_{1,\mathbf{k}} \hat{C}_{1,\mathbf{k},\sigma}^\dagger \hat{C}_{1,\mathbf{k},\sigma} + E_{2,\mathbf{k}} \hat{C}_{2,\mathbf{k},\sigma}^\dagger \hat{C}_{2,\mathbf{k},\sigma}], \quad (495)$$

összefüggéshez vezet, ahol $\hat{C}_{\nu,\mathbf{k},\sigma}^\dagger$ a ν -edik diagonalizált sávban σ spinnel tartozkodó elektron kanonikus Fermi keltő operátora, ($\nu = 1, 2$). A (494) esetében ténylegesen a két diagonalizált sáv energiája $E_{1,\mathbf{k}} = -(t_2/2)[(V_0^2/V_1^2) + 4] < E_{2,\mathbf{k}} = E_{1,\mathbf{k}} + 2t_2[(V_1/t_2)^2 + (C_{\mathbf{k}} + V_0/(2V_1))^2]$, $C_{\mathbf{k}} = \cos(\mathbf{x}\mathbf{k}) + \cos(\mathbf{y}\mathbf{k})$. Amint látható, az alsó sáv lapos ($E_{1,\mathbf{k}} \equiv E_1$). Továbbmenőleg, az alsó lapos sáv mindig tiltott energiárés alatt van, a gap értéke pedig $\Delta = \min[\Delta(\mathbf{k})] = 2t_2[(V_0/t_1)^2 + (|V_0/2V_1| - 2)^2] \neq 0$. Következésképpen, az a), b) feltételek teljesülnek az $U = 0$ esetben.

A (495)-ben szereplő kanonikus Fermi operátorok alakja

$$\begin{aligned}\hat{C}_{1,\mathbf{k},\sigma}^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{2}}[\sqrt{1+F_{\mathbf{k}}} \hat{d}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger - \text{sign}(\alpha_{\mathbf{k}})\sqrt{1-F_{\mathbf{k}}} \hat{f}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger], \\ \hat{C}_{2,\mathbf{k},\sigma}^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{2}}[\sqrt{1-F_{\mathbf{k}}} \hat{d}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger + \text{sign}(\alpha_{\mathbf{k}})\sqrt{1+F_{\mathbf{k}}} \hat{f}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger],\end{aligned}\quad (496)$$

ahol $\alpha_{\mathbf{k}} = V_0 + 2V_1C_{\mathbf{k}}$, $\beta_{\mathbf{k}} = V_1^2/t_2 - t_1^2/(4t_2) - t_1C_{\mathbf{k}} - t_2C_{\mathbf{k}}^2$, és $F_{\mathbf{k}} = [1 + (\alpha_{\mathbf{k}}/\beta_{\mathbf{k}})^2]^{-0.5}$.

A félig töltött rendszer $U = 0$ esetben vett alapállapot hullámfüggvénye tehát

$$|\Psi_g^0\rangle = \prod_{\sigma} \prod_{\mathbf{k}=1}^{N_{\Lambda}} \hat{C}_{1,\mathbf{k},\sigma}^\dagger |0\rangle, \quad (497)$$

ezen szerint egy paramágneses sávszigetelőt ad. A (497)-nek megfelelő alapállapot energiája $E_g^0(2L^2) = -t_2L^2[(V_0^2/V_1^2) + 4]$.

Mindezek után ha $\langle \dots \rangle_0$ -val jelölöm a (497) segítségével számolt alapállapot várható értéket, akkor minden $\mathbf{i}$ csomóponttra $d_{\mathbf{i}}^f = \langle \hat{n}_{\mathbf{i},\uparrow}^f \hat{n}_{\mathbf{i},\downarrow}^f \rangle_0 \neq 0$. Továbbá a (492)-ben adott $\Gamma(\mathbf{r})$, (497) segítségével számolva $\Gamma(\mathbf{r}) \sim \exp(-|\mathbf{r}|/\lambda_0)$ függést ad, ahol az egyrészcseke lokalizációs hossz λ_0 (a primitív vektorok nagyságának egységében) egységnyi nagyságrendű. Például, ha $\mathbf{r} \parallel \mathbf{x}$ és a $\hat{H}_0$ paraméterei a 48. Ábrában rögzített értékek, akkor $\lambda_0/|\mathbf{x}| = 0.5$

Ezen eredmény alapján világosan látszik, hogy (497) egy lokalizált és paramágnes sávszigetelőt jelöl.

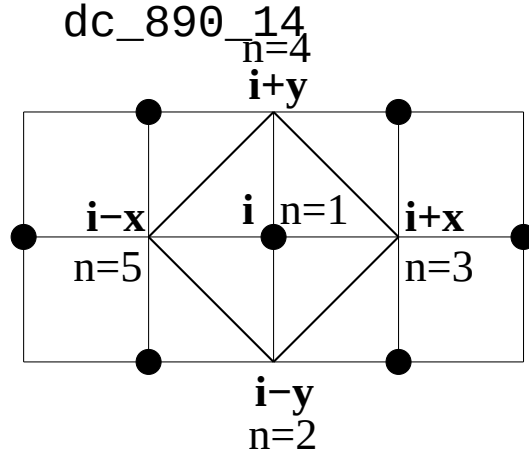
C. A Hamilton operátor pozitív szemidefinit formára vett transzformálása

1. Pozitív szemidefinit formára való átalakítás

Az egzakt kölcsönható alapállapot meghatározása céljából pozitív szemidefinit formára alakítom a $\hat{H} = \hat{H}_0 + U\hat{U}_f$ Hamilton operátort. A kialakított forma (277) alkalmazása (278)-nak megfelelő blokk operátorral és (279) végformát eredményező pozitív szemidefinit formával. A kapott végeredmény kifejezése (tetszőleges N esetében)

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \hat{H}_0 + U\hat{U}_f = \hat{G} + U\hat{U}_f + E_g(N), \\ \hat{G} &= \sum_{v=1,2} \sum_{e=\pm 1} \sum_{\mathbf{i} \in S_v} \hat{A}_{\mathbf{i},v,e}^\dagger \hat{A}_{\mathbf{i},v,e}, \quad E_g(N) = -K_d N,\end{aligned}\quad (498)$$

ahol a (278)-nak megfelelő blokk operátorok a $\hat{A}_{\mathbf{i},v,e}$ formában vannak értelmezve a 41. Ábrában adott és 5 csomópontból álló blokkon, továbbá analitikus kifejezésük



41. Ábra . Az $\mathbf{i}$ csomóponthoz kapcsolt és öt rácspontból álló blokk amelyen az $\hat{A}_{\mathbf{i},v,e}$ operátor értelmezve van. A szóban forgó öt csomópont $\mathbf{i}, \mathbf{i}-\mathbf{y}, \mathbf{i}+\mathbf{x}, \mathbf{i}+\mathbf{y}, \mathbf{i}-\mathbf{x}$. Az itt feltüntetett sorrendben van ezen 5 rácspont az n indexel megszámozva a blokkon belül $n = 1$ -től $n = 5$ -ig. Megjegyzem, hogy a rendszer két alrácstra (S_v) van felosztva amelyeket a $v = 1, 2$ index jelöl meg. A rajzon azon alrács rácspontjai amelyek közé a $\mathbf{i}$ csomópont tartozik, vastagított körökkel vannak megjelölve. $\mathbf{x}, \mathbf{y}$ a Bravais primitív vektorokat jelölik.

$$\hat{A}_{\mathbf{i},v,e} = a_{1,f} \hat{F}_{\mathbf{i},\lambda_v,e} + \sum_{n=1}^5 a_{n,d} \hat{D}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_n,\lambda_v,e}. \quad (499)$$

A (499)-ben szereplő e -index $e = \pm$ értékeket veheti fel, továbbá a $\hat{B} = \hat{D}, \hat{F}$ operátorok kifejezése

$$\hat{B}_{\mathbf{j},\lambda_v,+1} = \frac{|\lambda_v|}{\sqrt{1+|\lambda_v|^2}} (\hat{b}_{\mathbf{j},\uparrow} + \frac{1}{\lambda_v} \hat{b}_{\mathbf{j},\downarrow}), \quad \hat{B}_{\mathbf{j},\lambda_v,-1} = \frac{|\lambda_v|}{\sqrt{1+|\lambda_v|^2}} (\frac{1}{\lambda_v^*} \hat{b}_{\mathbf{j},\uparrow} - \hat{b}_{\mathbf{j},\downarrow}), \quad (500)$$

ahol a $B = D$ (F) esetében $b = d$ (f), továbbá λ_v egy tetszőleges komplex szám. Megjegyzem, hogy a (499)-ben szereplő $\mathbf{i} + \mathbf{r}_n$, $n = 1, 2, \dots, 5$, az $\mathbf{i}$ -re értelmezett blokk öt csomópontján mozog végig, és az n index növekvő értékeire, sorrendben, az $\mathbf{r}_n$ vektor értéke $0, -\mathbf{y}, \mathbf{x}, \mathbf{y}, -\mathbf{x}$ [lásd a 41. Ábrát].

A jobb érthetőség érdekében megjegyzem, hogy (498)-ban a $\hat{G}$ és $U\hat{U}_f$ objektumok ($U > 0$) pozitív szemidefinit operátorok, továbbá $E_g(N)$ felel meg az (274) összefüggésbeli C skalárnak, amelyről kiderül, hogy az alapállapot energiát jelenti [lásd (276) utáni $E_g = C$ megjegyzést is]. Továbbmenőleg, ahhoz hogy a (498) kifejezést megkapjuk, felosztjuk a rácsot két $v = 1, 2$ alrácusra, egy rögzített v alrács csomópontjainak halmazát S_v -vel jelöljük, majd minden csomóponton értelmezzük a (499)-ben adott operátort. A (493)-ben adott $\hat{H}$ akkor veszi fel a (498) pozitív szemidefinit formát ha a következő fedési összefüggések [lásd (280)] teljesülnek

$$\begin{aligned} t_{\mathbf{x}} &= a_{1,d}^* a_{3,d} + a_{5,d}^* a_{1,d}, & t_{\mathbf{y}} &= a_{1,d}^* a_{4,d} + a_{2,d}^* a_{1,d}, \\ t_{\mathbf{y} \pm \mathbf{x}} &= a_{2,d}^* a_{4 \mp 1,d} + a_{4 \pm 1,d}^* a_{4,d}, & V_0 &= a_{1,d}^* a_{1,f}, \\ t_{2\mathbf{x}} &= a_{5,d}^* a_{3,d}, & t_{2\mathbf{y}} &= a_{2,d}^* a_{4,d}, & V_{\mathbf{x}}^{df} &= a_{5,d}^* a_{1,f}, \\ V_{\mathbf{y}}^{df} &= a_{2,d}^* a_{1,f}, & V_{\mathbf{x}}^{fd} &= a_{1,f}^* a_{3,d}, & V_{\mathbf{y}}^{fd} &= a_{1,f}^* a_{4,d}, \\ E_f &= |a_{1,f}|^2 - K_d, & K_d &= \sum_{n=1}^5 |a_{n,d}|^2. \end{aligned} \quad (501)$$

A (501) egyenletrendszer megoldásából kapjuk meg az $\hat{A}_{i,v,e}$ operátorok $a_{1,f}$, $a_{n,d}$ koefficiensait. Abban az esetben ha a $\hat{H}_0$ paraméterek x és y felcserélésére szimmetrikusak [lásd a (494) előtti megjegyzést], a (501) megoldása $a_{n \geq 2,d} = a_{2,d}$ megjegyzéssel

$$a_{1,f} = V_1 \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{t_2}} e^{i\phi}, \quad a_{1,d} = \frac{V_0}{V_1} \frac{\sqrt{t_2}}{\sqrt{2}} e^{i\phi}, \quad a_{2,d} = \frac{\sqrt{t_2}}{\sqrt{2}} e^{i\phi}, \quad (502)$$

ahol ϕ egy tetszőleges fázis. Fontos megjegyezni, hogy a (502) megoldás akkor és csak akkor létezik, ha (494) teljesül.

Aláhúzom még, hogy a (501) egyenletrendszer úgy adódik, hogy a (498)-ba behelyettesítem a (499) operátorokat, elvégzem a kijelölt műveleteket, majd az eredményt egyenlővé teszem a (493) összefüggésben felírt induló $\hat{H}$ Hamilton operátorral.

2. A $\hat{D}$, $\hat{F}$ operátorok fizikai jelentése

A $\hat{B}_{j,\lambda_v,e}$, $B = D, F$ fizikai tartalmának kiderítése céljából, az egyszerűség kedvéért $b = d$, ($B = D$) esetre szemléltetek és bevezetem a

$$|D_{i,\lambda,e}\rangle = \hat{D}_{i,\lambda,e}^\dagger |0\rangle, \quad \langle D_{i,\lambda,e} | D_{i,\lambda,e} \rangle = 1, \quad (503)$$

állapotot, továbbá a (347) fermionikus spin-reprezentációt használom (itt a d elektronokra). Ekkor megfigyelhető, hogy

$$\hat{S}_{d,i}^2 |D_{i,\lambda,e}\rangle = \frac{3}{4} |D_{i,\lambda,e}\rangle, \quad (\hat{n}_{i,\uparrow}^d + \hat{n}_{i,\downarrow}^d) |D_{i,\lambda,e}\rangle = |D_{i,\lambda,e}\rangle. \quad (504)$$

Mivel $B = F$ esetre is $d \rightarrow f$ felcseréléssel hasonló tulajdonság áll fenn, következik, hogy $\hat{B}_{i,\lambda,e}^\dagger$ mindig egy spin-1/2 fermiont kelt a i csomóponton. E fermion spinje egy λ által meghatározott tengely mentén helyezkedik el az $e = +$, vagy $e = -$ (fel vagy le) irányba. Ténylegesen, tetszőleges $\alpha = x, y, z$ -re

$$\begin{aligned} \langle D_{i,\lambda,-1} | \hat{S}_{d,i}^\alpha | D_{i,\lambda,-1} \rangle &= -\langle D_{i,\lambda,1} | \hat{S}_{d,i}^\alpha | D_{i,\lambda,1} \rangle, \\ \langle D_{i,\lambda,1} | \hat{S}_{d,i}^\alpha | D_{i,\lambda,1} \rangle &= \frac{1}{1 + |\lambda|^2} [\delta_{x,\alpha} \text{Re}(\lambda) + \delta_{y,\alpha} \text{Im}(\lambda) + \delta_{z,\alpha} \frac{|\lambda|^2 - 1}{2}]. \end{aligned} \quad (505)$$

A (505) alapján megfigyelhető, hogy $\lambda = 1$ az x irányt, $\lambda = i$ az y irányt, míg $\lambda \rightarrow \infty$ a z irányt jelöli. Továbbmenőleg, megfigyelhető hogy pl. $B = D$ -re $\hat{D}_{i,\lambda,1}^\dagger \hat{D}_{i,\lambda,-1}^\dagger = \hat{d}_{i,\downarrow}^\dagger \hat{d}_{i,\uparrow}^\dagger$ teljesül tetszőleges λ értékre.

Megjegyzem még, hogy a transzformált (498) Hamilton operátorban a $v = 1, 2$ esetekre előálló λ_1, λ_2 paraméterek tetszőlegesek, de rögzítettek.

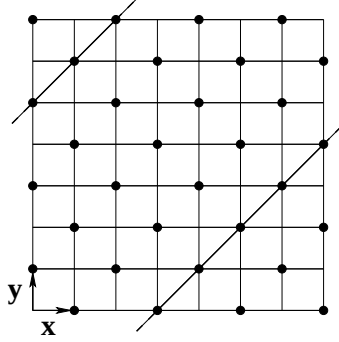
D. Az egzakt kölcsönható alapállapot

1. Az alapállapot hullámfüggvény operátorai

A (498)-ben adott Hamilton operátor alapállapot hullámvektorának megállapítása (302,307) segítségével történik. A (302)-ben szereplő $\hat{\Omega}$ operátorok szerepét itt a $\hat{A}_{i,v,e}$

operátor játsza, továbbá $\hat{X}^\dagger$ operátor szerepét a $\hat{W}_{v,\mathbf{i},\tau,\lambda_v,e_v}^\dagger$ operátor amelyet „tört-vonal” operátornak nevezhetünk el. Az alapösszefüggés mely alapján $\hat{W}_{v,\mathbf{i},\tau,\lambda_v,e_v}^\dagger$ megállapításra kerül [lásd (302)]

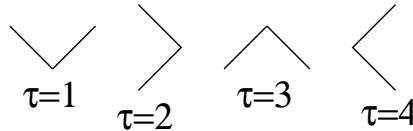
$$\{\hat{A}_{\mathbf{i},v,e}, \hat{W}_{v',\mathbf{i}',\tau,\lambda_{v'},e_{v'}}^\dagger\} = 0 \quad (506)$$



42. Ábra . Egy $L \times L$, $L = 8$ rács $l_{\mathbf{y}+\mathbf{x},v=1,n}$ egyenes vonala. A vonal $\mathbf{y} + \mathbf{x}$ irányba helyezkedik el és teljes egészében csak a $v = 1$ alrács csomópontjain fut keresztül. A $v = 1$ alrács csomópontjai vastagított körökkel vannak jelölve az ábrán. Az $\mathbf{y} + \mathbf{x}$ irányba $L/2 = 4$ ilyen vonal rajzolható.

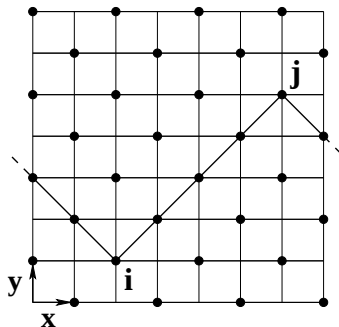
amely az indexek minden lehetséges értékeire fenn kell álljon. A megoldásként adódó $\hat{W}^\dagger$ ismertetése céljából először is egy tört-vonal fogalmat kell értelmezni, majd e mentén elhelyezkedő operátorokból kell bemutatnom $\hat{W}^\dagger$ szerkezetét.

Egy periodikus határfeltételek mellett tárgyalt 2D rendszerben létező (diagonális) egyenes vonalat a 42. Ábra szemlélteti. Ilyen egyenes vonal száma a rendszerben $L/2$. Ha azt akarjuk hogy annyi vonalunk legyen nagyságrendileg ahány csomópont [azaz $\mathcal{O}(L^2)$], a vonalat egy $\mathbf{i}$ tetszőleges pontjában el kell törni (szögben görbíteni). Négy lehetséges törési mód van értelmezve, amelyeket a τ index jelöl meg és a 43. Ábra mutat be.



43. Ábra . A τ index négy különböző értékével jelölt négy különböző törési lehetőség

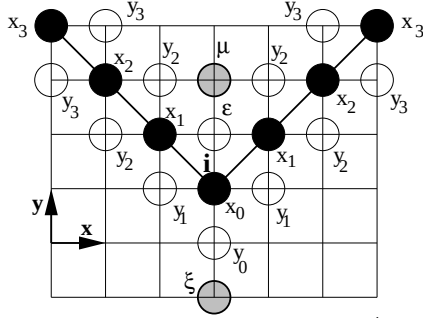
Most eltöröm (elhajlítom $\pi/2$ szöggel) a 42. Ábra egyenes vonalát az $\mathbf{i}$ (amúgy tetszőleges) pontjában, mégpedig $\tau_i = 1$ módon [lásd a 43. Ábra első rajzát]. A keletkezett „tört-vonalat” a 44. Ábra szemlélteti.



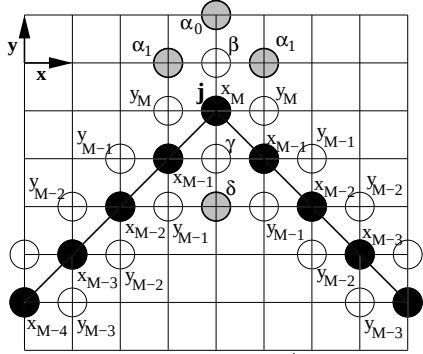
44. Ábra . Az $L \times L$, $L = 8$ rács $l_v(\mathbf{i}, \tau_i = 1)$ tört vonala. A törés a $\mathbf{i}$ csomópontban történt $\tau_i = 1$ irányba.

Megfigyelhető a 44. Ábrán, hogy amennyiben $\tau_1 = 1$ adott, a periodikus határfeltételek miatt a $\mathbf{i}$ törési pont egyértelműen meghatározza a második törési pont $\mathbf{j}$ helyét [ez $\mathbf{j} = \mathbf{i} + (L/2)(\mathbf{y} + \mathbf{x})$] és szögét [$\tau_j = 3$, lásd 43. Ábra harmadik rajzát]. Ez azt jelenti, hogy $\tau_1 = 1$ rögzítésével $\mathbf{i}$ egyértelműen indexeli az értelmezett tört-vonalat. Ilyen (különböző) tört-vonalak száma egy rögzített v alrácsban $L^2/2$.

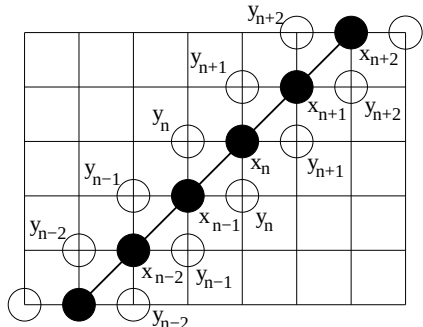
A $\hat{W}_{v,\mathbf{i},\tau=1,\lambda_v,e_v}^\dagger$ tört-vonal operátor egy olyan operátor összeg, mely komponensei az $l_v(\mathbf{i}, \tau_1 = 1)$ tört-vonal mentén helyezkednek el. A $\hat{W}_{v,\mathbf{i},\tau=1,\lambda_v,e_v}^\dagger$ kifejezését algebrai összeggel adó operátorokat a 45-47 Ábrák szemléltetik.



45. Ábra . Az alsó szögpont körüli struktúrája a $\hat{W}_{v=1,\mathbf{i},\tau=1,\lambda_v,e_v}^\dagger$ operátornak amely az $l_{v=1}(\mathbf{i}, \tau_1 = 1)$ tört-vonalra épül. Minden kör egy operátort jelent amit a mellé írt koefficienssel (pl. x_l , y_l , ϵ , μ , stb.) meg kell szorozni és össze kell adni. A tetszőleges $\mathbf{i}'$ csomópontra rajzolt fehér, szürke és fekete körök sorrendben $\hat{D}_{\mathbf{i}',\lambda_v,e_v}^\dagger$, $\hat{F}_{\mathbf{i}',\lambda_v,e_v}^\dagger$ és $\hat{P}_{\mathbf{i}',\lambda_v,e_v}^\dagger = x_{\mathbf{i}'}^d \hat{D}_{\mathbf{i}',\lambda_v,e_v}^\dagger + x_{\mathbf{i}'}^f \hat{F}_{\mathbf{i}',\lambda_v,e_v}^\dagger$ operátorokat jelölnek, ahol $x_{\mathbf{i}'}^d, x_{\mathbf{i}'}^f$ numerikus koefficiensek.



46. Ábra . A felső szögpont körüli struktúrája a $\hat{W}_{v=1,\mathbf{i},\tau=1,\lambda_v,e_v}^\dagger$ operátornak. A jelölések a 45. Ábra jelöléseivel egyeznek.



47. Ábra . A $\hat{W}_{v=1,\mathbf{i},\tau=1,\lambda_v,e_v}^\dagger$ operátor szögpontok közötti struktúrája. A jelölések a 45. Ábra jelöléseivel egyeznek.

A $\hat{W}_{v=1, \mathbf{i}, \tau=1, \lambda_v, e_v}^\dagger$ operátor analitikus kifejezése úgy adódik hogy összeadjuk a 45-47 Ábrák összes (koefficiensekkel beszorzott) járulékait

$$\begin{aligned}
 \hat{W}_{v, \mathbf{i}, \tau=1, \lambda_v, e_v}^\dagger &= \xi \hat{F}_{\mathbf{i}-2\mathbf{y}, \lambda_v, e_v}^\dagger + y_0 \hat{D}_{\mathbf{i}-\mathbf{y}, \lambda_v, e_v}^\dagger + \epsilon \hat{D}_{\mathbf{i}+\mathbf{y}, \lambda_v, e_v}^\dagger + \mu \hat{F}_{\mathbf{i}+2\mathbf{y}, \lambda_v, e_v}^\dagger \\
 &+ \sum_{n=0}^M (x_n^d \hat{D}_{\mathbf{i}+n(\mathbf{x}+\mathbf{y}), \lambda_v, e_v}^\dagger + x_n^f \hat{F}_{\mathbf{i}+n(\mathbf{x}+\mathbf{y}), \lambda_v, e_v}^\dagger) \\
 &+ \sum_{n=1}^{M-1} (x_n^d \hat{D}_{\mathbf{i}+n(\mathbf{y}-\mathbf{x}), \lambda_v, e_v}^\dagger + x_n^f \hat{F}_{\mathbf{i}+n(\mathbf{x}+\mathbf{y}), \lambda_v, e_v}^\dagger) \\
 &+ \sum_{n=1}^{M-1} y_n \hat{D}_{\mathbf{i}+n\mathbf{x}+(n-1)\mathbf{y}, \lambda_v, e_v}^\dagger + \sum_{n=1}^{M-1} y_n \hat{D}_{\mathbf{i}-n\mathbf{x}+(n-1)\mathbf{y}, \lambda_v, e_v}^\dagger \\
 &+ \sum_{n=2}^M y_n \hat{D}_{\mathbf{i}+(n-1)\mathbf{x}+n\mathbf{y}, \lambda_v, e_v}^\dagger + \sum_{n=2}^M y_n \hat{D}_{\mathbf{i}-(n-1)\mathbf{x}+n\mathbf{y}, \lambda_v, e_v}^\dagger \\
 &+ \gamma \hat{D}_{\mathbf{j}-\mathbf{y}, \lambda_v, e_v}^\dagger + \beta \hat{D}_{\mathbf{j}+\mathbf{y}, \lambda_v, e_v}^\dagger + \delta \hat{F}_{\mathbf{j}-2\mathbf{y}, \lambda_v, e_v}^\dagger \\
 &+ \alpha_1 \hat{F}_{\mathbf{j}+\mathbf{y}+\mathbf{x}, \lambda_v, e_v}^\dagger + \alpha_1 \hat{F}_{\mathbf{j}+\mathbf{y}-\mathbf{x}, \lambda_v, e_v}^\dagger + \alpha_0 \hat{F}_{\mathbf{j}+2\mathbf{y}, \lambda_v, e_v}^\dagger, \tag{507}
 \end{aligned}$$

ahol $M = L/2$, $\mathbf{j} = \mathbf{i} + (L/2)(\mathbf{x} + \mathbf{y})$, továbbá az n index szerinti összeg végzésekor a periodikus határfeltételek jelenlétét kell figyelembe venni.

Megjegyzem, hogy $\tau_{\mathbf{i}} = 4$ [ez $\tau_{\mathbf{j}} = 2$ értéket eredményez] hasonló eljárás során vezet a $\hat{W}_{v, \mathbf{i}, \tau=4, \lambda_v, e_v}^\dagger$ operátorhoz, amely tulajdonképpen $\hat{W}_{v, \mathbf{i}, \tau=2, \lambda_v, e_v}^\dagger$ -ben végrehajtott $\mathbf{x} \leftrightarrow \mathbf{y}$ transzformációt jelent.

A $\hat{W}_{v, \mathbf{i}, \tau=2, \lambda_v, e_v}^\dagger$ -ben szereplő numerikus prefaktorok értékei a következők:

$$\begin{aligned}
 x_{M \geq n \geq 0}^d &= (-1)^{n+1} (n+1) y_0 \frac{a_{1,d}}{a_{2,d}}, \quad y_{M \geq n \geq 1} = (-1)^n y_0, \\
 x_0^f &= \frac{y_0}{a_{1,f} a_{2,d}} (a_{1,d}^2 + 4a_{2,d}^2), \quad x_1^f = \frac{2y_0}{a_{1,f} a_{2,d}} (a_{2,d}^2 - a_{1,d}^2), \\
 x_{M-2 \geq n \geq 2}^f &= -\frac{a_{1,d}}{a_{1,f}} x_n^d, \quad \epsilon = -3y_0, \quad \mu = -\xi = \frac{a_{2,d}}{a_{1,f}} y_0, \\
 \alpha_1 &= -\frac{a_{2,d}}{a_{1,f}} (y_M - \frac{a_{2,d}}{a_{1,d}} x_M^d), \quad \beta = -\frac{a_{2,d}}{a_{1,d}} x_M^d, \\
 \gamma &= -\frac{a_{2,d}}{a_{1,d}} (2x_{M-1}^d + x_M^d), \quad \delta = -\frac{a_{2,d}}{a_{1,f}} (\gamma + 2y_{M-1}), \\
 x_{M-1}^f &= -\frac{a_{1,d}}{a_{1,f}} x_{M-1}^d - \frac{a_{2,d}}{a_{1,f}} (2y_{M-1} + y_M + \gamma), \tag{508} \\
 x_M^f &= -\frac{a_{1,d}}{a_{1,f}} x_M^d - \frac{a_{2,d}}{a_{1,f}} (2y_M + \beta + \gamma), \quad \alpha_0 = \frac{a_{2,d}^2 x_M^d}{a_{1,d} a_{1,f}},
 \end{aligned}$$

ahol y_0 tetszőleges, továbbá $x_i = (x_i^d, x_i^f)$.

Megemlítem, hogy a (508) értékek (506) által adott egyenletrendszer megoldásaként állnak elő. Ezen egyenletrendszer a következő egyenletekből áll:

Az alsó szögpont tartományából (lásd 45. Ábra) adódó egyenletek

$$\begin{aligned}
 a_{1,f} \xi + a_{2,d} y_0 &= 0, \\
 \epsilon a_{2,d} + a_{1,d} x_0^d + a_{1,f} x_0^f &= a_{2,d} y_0,
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& a_{1,f}\mu + a_{2,d}\epsilon + 2y_0a_{2,d} = 0, \\
& a_{2,d}(y_0 + \epsilon) + a_{1,d}x_1^d + a_{1,f}x_1^f = 0, \\
& a_{2,d}x_0^d + a_{1,d}y_0 = 0, \\
& a_{1,d}x_2^d + a_{1,f}x_2^f = 0, \\
& a_{1,d}x_3^d + a_{1,f}x_3^f = 0, \\
& \epsilon a_{1,d} + a_{2,d}(x_0^d + 2x_1^d) = 0, \\
& a_{2,d}(x_0^d + x_1^d) + a_{1,d}y_1 = 0, \quad y_1 = -y_0, \\
& a_{2,d}(x_1^d + x_2^d) + a_{1,d}y_2 = 0, \quad y_2 = y_0, \\
& a_{2,d}(x_2^d + x_3^d) + a_{1,d}y_3 = 0, \quad y_3 = -y_0, \\
& a_{2,d}(x_3^d + x_4^d) + a_{1,d}y_4 = 0, \quad y_4 = y_0.
\end{aligned} \tag{509}$$

A szögpontok közötti tartományból (lásd 47. Ábra) eredő egyenletek [$4 \leq m \leq (M-2)$ esetre adódnak]

$$\begin{aligned}
& a_{1,d}x_m^d + a_{1,f}x_m^f = 0, \\
& a_{2,d}(x_m^d + x_{m+1}^d) = -a_{1,d}y_{m+1}, \\
& y_m = (-1)^m y_0.
\end{aligned} \tag{510}$$

Végül a felső szögpont környezetéből (lásd 46. Ábra) adódó egyenletek

$$\begin{aligned}
& a_{1,f}\delta + a_{2,d}\gamma = -2a_{2,d}y_{M-1}, \\
& 2a_{2,d}y_M + a_{2,d}(\beta + \gamma) + a_{1,d}x_M^d + a_{1,f}x_M^f = 0, \\
& a_{1,f}\alpha_0 + a_{2,d}\beta = 0, \\
& a_{2,d}(\gamma + y_M) + a_{1,f}x_{M-1}^f = -2a_{2,d}y_{M-1} - a_{1,d}x_{M-1}^d, \\
& a_{2,d}(\beta + y_M) = -a_{1,f}\alpha_1, \\
& a_{2,d}(y_M + y_{M-1}) = 0, \\
& a_{2,d}x_M^d + a_{1,d}\gamma = -2a_{2,d}x_{M-1}^d, \\
& a_{2,d}x_M^d + a_{1,d}\beta = 0, \\
& a_{2,d}x_M^d + a_{1,d}y_M = -a_{2,d}x_{M-1}^d.
\end{aligned} \tag{511}$$

A (508) értékeket a (509-511) rendszer megoldása adja. A megoldás során az y_0 változót tetszőleges, de adott mennyiségnek kell tekinteni.

2. Az alapállapot hullámfüggvény

Legyen $|0\rangle$ a vákuum állapot (Fock vákuum), és legyen

$$|\Psi_{e_1, e_2}^{\lambda_1, \lambda_2}\rangle = \prod_{v=1}^2 \prod_{\mathbf{i} \in S_v} (\hat{W}_{v, \mathbf{i}, \tau=1, \lambda_v, e_v}^\dagger \hat{W}_{v, \mathbf{i}, \tau=4, \lambda_v, e_v}^\dagger) |0\rangle, \tag{512}$$

ahol $\hat{W}_{v, \mathbf{i}, \tau, \lambda_v, e_v}^\dagger$ a tört-vonal operátor amely a v alrács $\mathbf{i}$ csomópontjához kötve értelmezett $\tau = \tau_{\mathbf{i}} = 1$ illetve $\tau = \tau_{\mathbf{i}} = 4$ esetben (lásd az előbbi alfejezetet). Ezen értelmezések mellett az $N = 2L^2 = 2N_\Lambda$ részecskeszámhoz tartozó alapállapot hullámfüggvény $U > 0$ esetén

$$|\Psi_g(N = 2L^2)\rangle = |\Psi^{\lambda_1, \lambda_2}_{e_1, e_2}\rangle = \sum_{e_1, e_2 = \pm 1} a_{e_1, e_2}^{\lambda_1, \lambda_2} |\Psi_{e_1, e_2}^{\lambda_1, \lambda_2}\rangle, \quad (513)$$

ahol $a_{e_1, e_2}^{\lambda_1, \lambda_2}$ a normálási kondíciónak eleget tevő, de amúgy tetszőleges konstansok. A (513)-hez tartozó alapállapot energiája $E_g(2L^2) = -2L^2 K_d$, ahol K_d a (501,502)-ban értelmezett.

Hogy miért (513) az alapállapot hullámfüggvény, annak az oka a következő [lásd (302-308) összefüggéseket]: i) Először is (506) miatt a (498) Hamilton operátor első tagjára [lásd (304) összefüggést is], tetszőleges $\lambda_1, \lambda_2, e_1, e_2$ indexekre

$$\hat{G}|\Psi_{e_1, e_2}^{\lambda_1, \lambda_2}\rangle = 0. \quad (514)$$

ii) Továbbmenőleg, a 45-47 Ábrákból észrevehető, hogy $\hat{W}_{v, i, \tau, \lambda_v, e_v}^\dagger$ csupán a v alrácsba helyez el f -elektront (λ_v spintengely és e_v irányítás mellett). A lényeg itt azonban a „csak a v alrácsban” megjegyzés. Ténylegesen, a rajzokon, a fekete és szürke körök jelentenek olyan operátorokat amennyek $\hat{f}_{j, \sigma_j}^\dagger$ operátorokat tartalmaznak, és ezek a körök csak abban az alrácsban találhatók, amely az i csomópontot is magába foglalja. Tehát a (305)-ben adott I_M halmaz úgy alakul ki, hogy egy v alrácshoz tartozó $\hat{W}_{v, i, \tau, \lambda, e}^\dagger$ operátorok közül [ezek mindegyike (514)-nek eleget tesz] csak azokat veszem figyelembe amelyeknek ugyanazon rögzített λ_v, e_v paraméterük van. Így, a $v = 1$ alrács $\hat{W}^\dagger$ operátorai csak a $v = 1$ alrácsba helyeznek el f -elektronokat valamilyen spin irányítással (amelyet $\lambda_{v=1}, e_{v=1}$ határoznak meg), míg a $v = 2$ alrács $\hat{W}^\dagger$ operátorai csak a $v = 2$ alrácsba helyeznek el egy más ($\lambda_{v=2}, e_{v=2}$ által meghatározott) spin irányítású f elektronokat, így dupla f betöltés nem áll elő. Ennek következtében [a (306)-nak megfelelően]

$$U\hat{U}_f|\Psi_{e_1, e_2}^{\lambda_1, \lambda_2}\rangle = 0. \quad (515)$$

A tetszőleges (de rögzített) λ_1, λ_2 értékeket a transzformált (498) Hamilton operátor rögzíti, de e_1, e_2 tetszőlegesek. Így alakul ki (307) alapján a (513)-ban adott alapállapot hullámfüggvény. Amint (498)-ból látszik, az alapállapot energiája ténylegesen $E_g(2L^2) = -2L^2 K_d$.

Megemlítem, hogy a (512)-ben szereplő $\hat{W}^\dagger$ operátorok lineárisan függetlenek. Ez abból következik, hogy mindegyik új $\hat{W}^\dagger$ operátornak amely (512)-be belép van egy új egyenes szegmens körül felépített operátor összeg járuléka amely a többi $\hat{W}^\dagger$ operátorban nem szerepel.

Hangsúlyozni szeretném, hogy a (513) alapállapot hullámfüggvény tetszőleges $U > 0$ esetén igaz. A nyert állapot nem-mágneses.

E. Az egyrészecske lokalizációs hossz kölcsönható esetben

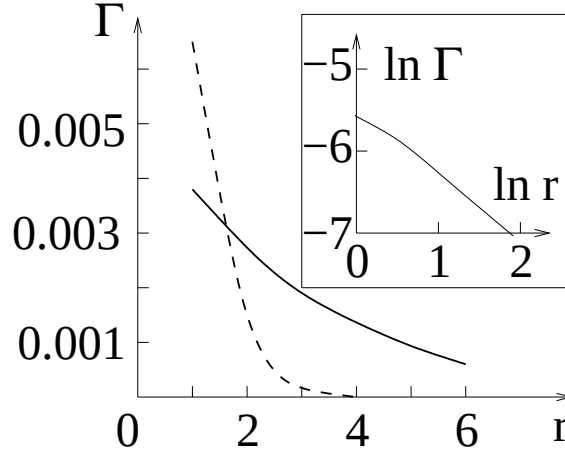
A $\hat{W}^\dagger$ objektumok kiterjedt operátorok. Ez azt jelenti, hogy nincs (506)-nak olyan megoldása amely $N = 2L^2$ esetében a (514,515) összefüggéseket kielégíti és a rendszer olyan tartományába beilleszthető amely mindkét irányba vett mérete nagyságrendileg $\mathcal{O}(L)$ alatti. Továbbmenőleg, a rendszer tetszőlegesen kiválasztott két pontjához ($\mathbf{j}_n, \mathbf{j}_m$) tartozik legalább egy olyan $\hat{W}_{v, i, \tau, \lambda_v, e_v}^\dagger$ operátor, amely a két pontot összeköti. Ez esetben, azért mert minden

$\hat{W}^\dagger$ operátorban $\mathcal{O}(4L)$ számú $\hat{B}^\dagger, \hat{B} = \hat{D}, \hat{F}$ operátor van jelen, továbbá (507)-ben szereplő minden koefficiens nagyságrendje ugyanaz és y_0 által meghatározott [lásd (508)]

$$\langle \hat{W}_{v,i,\tau,\lambda_v,e_v} | \hat{b}_{j_n,\sigma}^\dagger \hat{b}_{j_m,\sigma} | \hat{W}_{v,i,\tau,\lambda_v,e_v} \rangle / \langle \hat{W}_{v,i,\tau,\lambda_v,e_v} | \hat{W}_{v,i,\tau,\lambda_v,e_v} \rangle \sim O(1/L), \quad (516)$$

ahol $|\hat{W}_{v,i,\tau,\lambda_v,e_v}\rangle = \hat{W}_{v,i,\tau,\lambda_v,e_v}^\dagger |0\rangle$ és $r = |\mathbf{j}_n - \mathbf{j}_m|$ tetszőleges. Ezáltal a $\hat{W}^\dagger$ operátorok (512)-ből direkt útat nyitnak az elektronok számára hopping jellegű mozgásban tetszőleges két pont között, azaz a lokalizációs hossz $U > 0$ hatására nagymértékben megnő és ezáltal a Hubbard kölcsönhatás a tanulmányozott esetben delokalizációs hatást idéz elő. Mindez világosan látszik [lásd (492)] $\Gamma(\mathbf{r})$ viselkedésében, amint azt példázatként a 48. Ábra mutatja.

Megjegyzem, hogy a 48. Ábrában $U = 0$ -ra a lecsengés exponenciális ($\lambda_0/|\mathbf{x} + \mathbf{y}| = 0.5$), de $U > 0$ esetében, legalábbis az alkalmazott véges 12×12 -es rendszer esetében exponenciális lecsengésnek még nincs nyoma, továbbá $\Gamma(\mathbf{r})$ több nagyságrenddel megnő az $U = 0$ esethez képest (a $|\mathbf{r}|/(|\mathbf{x} + \mathbf{y}|) = 4$ értéktől kezdődőleg legalább öt nagyságrenddel). Mindez világosan szemlélteti hogy a Hubbard taszítás a tanulmányozott körülmények között delokalizál.



48. Ábra . A $\Gamma(\mathbf{r})$ viselkedése [lásd (492)] az f -elektronokra számolva $U = 0$ (szaggatott vonal) és $U > 0$ (folytonos vonal) esetében 12×12 rácstra. Az alkalmazott $\hat{H}_0$ paraméterek $t_1/t_2 = 10, t_2/V_1 = 0.5, V_1/V_0 = 0.1$ [az E_f a (494)-ből meghatározható], továbbá $\mathbf{r} \parallel (\mathbf{x} + \mathbf{y})$. A feltüntetett $\mathbf{r}$ értékek $|\mathbf{x} + \mathbf{y}|$ egységeiben vannak. A betét kép a $\log - \log$ rajzot mutatja $U > 0$ -ra. Megfigyelhető, hogy pl. $|\mathbf{r}| = 4$ értékre $\Gamma_{U>0}/\Gamma_{U=0} = 2 \times 10^5$. Az eredmény kvalitatíve nem változik más irányba, illetve más V_1/V_0 arányokra. A számítás az egyszerűség kedvéért $\lambda_2 = -1/\lambda_1^*$ mellett történt (a két alrácásban ellentétes spin irány van jelen). Más λ_1, λ_2 értékekre a rajz kvalitatíve változatlan marad.

F. Következmények

A Hubbard taszítás delokalizációs hatása, olyan körülmények között amikor makroszkópiusan elfajult állapotra hat azért lép fel mert $U = 0$ esetében jelen van dupla okupáció, míg $U > 0$ -ra (a tanulmányozott kétsávós esetben) a dupla f okupáció zéró ($U = 0$ -ra $\langle \hat{d}_{i,\uparrow}^f \hat{d}_{i,\uparrow}^f \rangle > 0$, míg $U > 0$ esetében $\langle \hat{d}_{i,\uparrow}^f \hat{d}_{i,\uparrow}^f \rangle = 0$). Ebből látható, hogy a Hubbard taszítás jelenlétében a rendszer arra törekszik, hogy a lehető legkisebb értékre állítsa be az f -dupla betöltést, hogy ezáltal a lehető legkisebb értékre hozza az alapállapot energiát. Ezt viszont úgy éri el, hogy kiterjeszti (szétnyítja, szétszórja) az alapállapot hullámfüggvény

járulékait [a nemkölsönható esetben a (497)-ben $|\Psi_g^0\rangle$ -t felépítő $\hat{C}_{1,\mathbf{k},\sigma}^\dagger$ operátorok $\mathbf{r}$ -térbe transzformált $\hat{C}_{1,\mathbf{i},\sigma}^\dagger$ változata csak az $\mathbf{i}$ csomópont legközelebbi szomszédjaira terjed ki csupán, tehát $\hat{C}_{1,\mathbf{i},\sigma}^\dagger$ egy kis blokkon értelmezhető. Ezzel ellentétben a (513)-ben szereplő és $U > 0$ -ra értelmezett $|\Psi_g\rangle$ operátorait képező $\hat{W}_{v,\mathbf{i},\tau,\lambda_v,e_v}^\dagger$ tagok az egész rendszerre szétfutó kiterjedt operátorok].

Az említett „szétszórás”-hoz azért kell a degeneráció, mert az $U > 0$ alapállapot hullámfüggvény komponenseit a rendszer egy makroszkópikus számú komponensekből álló lineárkombinációból képes előállítani, ezt meg könnyebben tudja megtenni ha ehhez különösebb energiabefektetés nem szükséges, azaz a lineárkombináció elemei ugyanazon energiával rendelkező elfajult állapothoz tartoznak.

Tudomásom szerint 2D-ben, félig töltött kétsávos, kvantummechanikai és véges kölcsönhatású rendszerre az itt bemutatott megoldás képezi az egyedüli explicite ismert egzakt delokalizált alapállapotot.

Az $U > 0$ okozta lokalizáció - delokalizáció átmenet jelenlétén kívül, az eredménynek van még egy nagyon érdekes vonzata a IX. fejezet tükrében. A jelen fejezethez hasonlóan, IX. fejezetben is a rendszer Hamilton operátora PAM típusú, és mindkét esetben az elemzés félig töltött rendszerre vonatkozik. Mindkét esetben a rendszer alapállapota nem mágneses, tehát az f elektronok mágneses momentuma kompenzálódik. A kompenzáció mindkét esetben nemlokális (azaz az f momentumokat nem lokálisan kompenzálják a d elektronok, úgy ahogy azt az egy Kondo szennyeződés kompenzációja nyomán elvárnánk), hanem az f momentumok, maguk közötti kompenzációja is közrejátszik a folyamathoz. A IX. fejezetben tárgyalt szimmetrikus esetben ($E_f = -U/2$) az f momentumok közötti kompenzáció az f -elektronok által létrehozott spin sűrűség hullám formában valósult meg. Az érdekes aspektus itt az (a jelen fejezet azt mutatja), hogy ha kilépünk a szimmetrikus pontból, az f momentumok közötti kompenzáció másképp zajlik (vagy másképp is alakulhat), pl. a jelen esetben, két alrácban fellépő tetszőleges spin irányok globális kompenzációjaként. Egy másik érdekesség az, hogy ez utóbbi esetben alrác rendeződésről beszélhetünk, de úgy, hogy a két alrác által kiválasztott kitüntetett spintengelyek között semmi korreláció nincs.

Megemlítem, hogy az alkalmazhatósági területe a bemutatott eredményeknek kvantumkémiai folyamatokra is kiterjed. Így molekuláris rendszerekre végzett számítások delokalizációs hibáinak felmérésére is felhasználták³²⁷.

dc_890_14

ÖSSZEFOGLALÓ RÉSZ

E fejezetben, a tézisszerű összefoglaló előtt, át szeretném tekinteni a bemutatott új tudományos eredményeket a tág értelemben vett rendeződési formákra koncentrálni, amelyekhez az eredmények kapcsolódnak.

A. Klaszterizáció

1. Rendezetlen klaszterek

Klaszterképződményekre vonatkozólag, megmutattam hogy fonalszerű klaszterképződési folyamat jöhet létre háromdimenziós rendezetlen rendszerben, olyan körülmények között mikor a kiskoncentrációs határesetben és rövid hatótávolságú kölcsönhatások fennállásakor az átlagos részecskék közötti távolság a kölcsönhatás hatósugaránál sokkal nagyobb. A jelenséget hőmérsékletfüggő módon írtam le (XI. fejezet), egy saját fejlesztésű módszer segítségével (V A. alfejezet).

Kétdimenziós rendezetlen elektron rendszerek esetében, szintén mutattam ki klaszterizálási folyamatot, olyan körülmények között amikor a rendezetlenség kétdimenziós rácsban alakul ki és 1/4 rendszerfeltöltés alatt található az anyag. E körülmények között saját fejlesztésű módszer (lásd V B. alfejezet) felhasználásával megmutattam, hogy abban az esetben ha tisztán taszító jellegű egyrészecske csomópont potenciálok vannak jelen és az elektronok között lokális Coulomb taszítás hat, rendezetlen klaszterekre épülő itineráns és globálisan nem-mágneses állapot alakul ki a rendszerben (XIII. fejezet).

Rendezett anyagok esetében, kétsávos elektron rendszerben, szintén mutattam ki klaszterképződési folyamatot kettő (XIV. fejezet) és három (XII. fejezet) dimenzióban, az elektronok között ható lokális Coulomb taszítás jelenlétében. A jelenség szintén 1/4 feltöltés alatt zajlik, rendezetlen klasztereket eredményez, miközben a rendszer globálisan nem-mágneses marad. Hasonló rendezetlen klaszterképződés a kiskoncentrációs határesetben, lánc struktúra esetében (XV. fejezet) is előállt. Az alkalmazott módszer szintén sajátfejlesztésű (lásd V B. alfejezet).

2. Stripe és sakktábla rendeződés

A vonalas (stripe) és sakktábla rendeződést a klaszterizáció keretei között említettem meg azért mert kimutattam, hogy többsávos elektron rendszerek esetében és egynegyed feltöltés alatt ez a rendeződési forma, a rendezetlen klaszterképződéssel együtt, egy közös és makroszkopikusan elfajult állapotban jelenik meg (XIV. fejezet). Megmutattam azonban (XIV. fejezet), hogy a rendezetlen klaszter képződmények eltávolíthatóak az alapállapotból amennyiben a rendszerben disztorziós vonalak, periodikus töltés eloszlás, dimerizáció, vagy sűrűség hullámok vannak jelen. Ezáltal az alapállapot nem degenerált módon stripe típusúvá alakul. Továbbmenőleg kimutattam, hogy a sakktábla rendeződés egy specifikus diagonális stripe rendeződésnek felel meg, tehát elméleti jellemzése a stripe jellemzésével egyidőben

elvégezhető (XIV. fejezet). Az alkalmazott módszer ezúttal is a pozitív szemidefinit operátorok tulajdonságára alapszik (V B. alfejezet) és saját fejlesztésű.

Aláhúzom, hogy a klaszterizációs folyamatok leírására alkalmazott módszerek mindegyike (modellkörülmények között vett) egzakt eredményeket származtató eljárás volt.

B. Szigetelő állapotok

Indulópontként megemlítem, hogy a tanulmányozott szigetelő állapotok nem egyszerű sáv-szigetelők, hanem kölcsönhatás jelenlétében és hozzájárulásával kialakuló állapotok, tehát korrelációs hatások következményei.

Ezekre vonatkozólag, először is megmutattam, hogy elektron rendszerekben és két dimenzióban, lokális Coulomb kölcsönhatás jelenlétében, ilyenfajta állapot leírására a Gutzwiller hullámfüggvény önmagában nem alkalmas és a segítségével ilyen körülmények között levezetett szigetelő állapotok a pluszban alkalmazott közelítések következményei, nem pedig a Gutzwiller hullámfüggvényé (X. fejezet). Az alkalmazott módszer saját fejlesztésű volt (IV C. alfejezet), továbbá a levont következtetésekből kulcs szerepe volt a Gutzwiller hullámfüggvény tárgyalásának pontosságában.

A szigetelő fázisra vonatkozó további eredmények mind a sajátfejlesztésű és (modell-körülmények között) egzakt eredményeket adó V B. alfejezetben részletesen bemutatott módszerrel voltak levezetve.

Rendezetlen kétdimenziós és kétsávós esetben $1/4$ feltöltésen mutattam ki szigetelő fázist, olyan körülmények között amikor a lokális egyrészecske potenciálok (habár rendezetlenek), mind taszító jellegűek. Ez a fázis hosszútávú sűrűség-sűrűség korrelációkat tartalmaz, makroszkópiusan degenerált de nem-mágneses, és kizárólag csomópontra lokalizált elektronokat tartalmaz (XIII. fejezet).

Rendezett rendszerre, szintén kétsávós de három dimenziós esetben $3/4$ feltöltésnek megfelelő koncentráció tartományban mutattam ki szigetelő állapotot (XII. fejezet). Ez is csomópontokra lokalizált töltéshordozókat tartalmaz, hosszútávú sűrűség-sűrűség korrelációkat mutat, nem mágneses és érdekessége, hogy az előfordulási tartományából vett kilépéskor kompresszibilitási anomália megjelenése jellemzi. Szintén e rendszerre, $1/4$ feltöltésen szigetelő, de szaturált ferromágnes állapotot mutattam ki (XII. fejezet).

Több szigetelő állapot kimutatását tettem meg szintén rendezett, de kvázi egydimenziós és négyszög alakú cellával rendelkező láncok esetében (XV. fejezet) is. Ha a töltéshordozók koncentrációját ez esetben $n = N/(3N_c)$ -vel mérjük, ahol N_c a cellák száma és N az elektronok száma, $n = 1/3$ esetében telített ferromágnes szigetelő és lokalizált fázist vezettem le, megmutattam, hogy $n = 4/3$ -ra a fázisdiagramban egy nem-telített ferromágnes és szintén lokalizált szigetelő állapot jelenik meg, továbbá $5/3 < n < 2$ esetre, véges koncentrációs tartományon és zéró külső mágneses tér jelenlétében egy nem-mágneses és lokalizált szigetelő állapot van jelen (XV. fejezet). Ez utóbbi érdekessége, hogy véges, de folytonos koncentrációs tartományon létezik. A kapott szigetelő fázisok plusz jellemzője, hogy külső mágneses illetve elektromos tér változtatásával ezen állapotok be-, és ki-kapcsolhatóak, ezáltal sok potenciális alkalmazási lehetőségnek nyitnak kaput. Megemlítem továbbá, hogy

szigetelő lokalizált rendeződés nematikus fázisok esetében is előált a XIV. fejezetben, a stripe csikok mentén.

C. Delokalizált állapotok

Delokalizált állapotra a fókuszálás legelőször a X. fejezetben esik, de olyan szempontból, hogy nem lehet megszabadulni tőle tisztán a Gutzwiller hullámfüggvény felhasználásával, amely pontosan kezelve nem vezet lokalizált állapothoz. Így tehát itt a delokalizáció nem egy hatás végeredménye, de ezzel ellentétben, hatás végeredményeként jelentkezik a XVII. fejezetben. Ez esetben a nemkölsönható alapállapot félig töltött rendszerre egy sáv szigetelő és makroszkópiusan degenerált. Ilyen körülmények között a Hubbard kölcsönhatás bekapcsolása, abból a célból hogy a lehető legkisebb értékre csökkentse a dupla betöltést és ezáltal az alapállapot energiát, szétszórja a hullámvektor járulékait és ezáltal delokalizációt okoz.

Ezen túlmenőleg, delokalizációs hatást találtam koncentráció változtatás függvényében is a XII. fejezetben $4/3$ rendszertöltés felett, a XV. fejezetben $n > 4/3$ illetve $n > 5/3$ felett két különböző paramétertartományban, és rendezetlen rendszerek esetében a XIII. fejezetben $1/4$ rendszertöltés alatt. Ezen esetekben véges lokalizációs hosszal rendelkező állapot válik végtelen lokalizációs hosszal rendelkező állapottá amely vezető, és speciális tulajdonságai vannak, ezért a következő elkülönített fejezetben térek ki ezekre részletesebben.

Mindegyik itt megemlített esetben a VB. alfejezetben részletesen bemutatott sajátfejlesztésű módszerrel történtek a levezetések.

D. Különleges vezető állapotok

Az első különleges vezető állapot a XII. fejezetben adódik $3/4$ rendszertöltés felett és az az érdekessége hogy $D = 3$ dimenzióban közelítésmentesen levezetett paramágneses nem-Fermi folyadék. Megjelenésekor (a kölcsönhatás jelenléte szükséges ehhez) a Fermi energia igen, de a $\mathbf{k}$ -térbeli Fermi felület nem értelmezhető, ezért a Luttinger tétel sem alkalmazható rá (miszerint a kölcsönhatás bekapcsolása a Fermi felület által bezárt $\mathbf{k}$ -térfogaton nem változtat).

A második különleges vezető, szintén rendezett rendszerre mint az előbb, a XV. fejezetben jelentkezett a négyszög cellájú Hubbard láncban $n = N/(3N_c) > 4/3$ koncentrációtartományban mint korrelált félfém (half metal). Ennek az érdekessége hogy szintén kölcsönhatás jelenlétében jelenik meg, de a koncentráció növelésével, továbbá egy adott spinvetülettel rendelkező elektronokat csomópontokra lokalizált állapotban tartalmaz. Így mozogni csak az ellentétes spinvetülettel rendelkező elektronok tudnak, ezért a rendszer itineráns spin-polarizált tulajdonsággal bír, spin-áram keltésre alkalmas, azaz spintronics-ban alkalmazható.

A harmadik különlegesebb vezető a XIII. fejezetben $1/4$ koncentráció alatt rendezetlen rendszerre levezetett vezető állapot $D = 2$ két dimenzióban. Ennek érdekessége, hogy kétdimenziós rendezetlen rendszerre használt (ma nemkölsönhatónak nevezett)

skálatörvény az ilyenszerű átalakulást megtiltja. Igaz, hogy a levezetés rendezetlen, de csak taszító jellegű lokális egyrészezske potenciálok jelenlétében történt (nemzéró Hubbard kölcsönhatás jelenlétében), mégis mutatja, hogy kölcsönhatások jelenlétében szigorú tiltás 2D rendezetlen rendszerek esetében vezető fázis megjelenésére nem létezik.

Ki szeretném emelni a XIII. fejezetben levezetett alapállapotokra azt az aspektust, amely a megoldás egzakt jellege miatt szembetűnően látszik: a kölcsönhatás jelenlétében levezetett alapállapotok a kölcsönhatás hiányában elvesztik alapállapot jellegüket, azaz perturbative nem kapcsolhatók a nemkölcsönható rendszer alapállapotaihoz. Rendezetlen rendszerekre ez azt az információt is hordozza, hogy (a kölcsönhatás hiányában) independens elektron közelítésben (azaz egy-részezske körülmények között) levezetett állapotokról semmi sem garantálja, hogy akkár infinitezimálisan kis kölcsönhatás esetében is valami közülük legyen a rendszer valóságos állapotához.

Az alkalmazott módszerre vonatkozó kiemelés szintén fontos a XII. fejezetben levezetett 3D vezető nem-Fermi folyadék állapotra is, hiszen egy ilyen kvalitású állapotra, megbízható információt közelítő módszerekkel származtatni sokkal nehezebb feladat.

E. Szupravezető

A Landau-féle rendparaméterrel jellemezhető fázisok közül a szupravezető állapotok a VII. és VIII. fejezetekben játszanak központi szerepet. Mindkét esetben átlagtér közelítésben tárgyalt és Green függvény technikával leírt koegzisztencia problémákban jelennek e fázisok meg. A VII. fejezetben a síkos felépítésű rendszerekben, inter-sík kapcsolások következtében fellépő szupravezető kritikus hőmérséklet növekedés a végeredmény. Ez, olyan szituációban áll elő, amelyben síkon belüli és síkok közötti szupravezető rendparaméterek együtt léteznek és egyszerre lépnek fel a kritikus hőmérsékleten.

A VIII. fejezetben a szupravezető fázisok spin-sűrűség hullám rendeződéssel léteznek együtt stabil formában. A VIII.B.1. alfejezetben nehéz-fermionos rendszerekre történik az elemzés, anizotrópikus gap-függvények vannak jelen úgy a szupravezető mint a spin-sűrűség hullám esetében, továbbá energetikailag stabil koegzisztencia $(\mathbf{k}, -\sigma; -\mathbf{k} - \mathbf{Q}, \sigma)$ típusú (szinglet, de tömegközépponti momentummal rendelkező) szupravezető átlagok esetében áll elő, ahol $\mathbf{Q}$ a fedési (nesting) vektor. Ettől eltérően, a szupravezető és spin-sűrűség hullám koegzisztencia vizsgálata a VIII.B.2. alfejezetben kétsávós (pl. a *Cr* ötvözetekre specifikus) rendszerre történik. Ekkor dopolt esetben adódik stabil koegzisztencia fázis, amikor is a fedés (nesting) tökéletlen, és a koegzisztencia stabilizáló szerepet (a koegzisztencia tartomány nagy részében) intersáv jellegű szupravezető párosodás veszi át. Mindkét (B.1 és B.2) alfejezetben, a Fermi felület ugyanazon tartományáról származó töltéshordozók játszanak közre úgy a szupravezető, mint a spin-sűrűség hullám rendeződés létrehozásában.

F. Spin-sűrűség hullám

A spin-sűrűség hullám rendeződés a VI., VIII. és IX. fejezetekben fordul elő. Legelőször a VI. fejezetben kapok ilyen fázist eredményül, és ez esetben, az eredmény fontossága az

anizotróp jellegben mutatkozik. Az energetikailag stabil anizotrópikus spin-sűrűség hullám, koegzisztencian fázis révén realizálódik. A VIII fejezetben kiderül, hogy a spin-sűrűség hullám más rendeződési formákkal is koegzisztálhat energetikailag stabil formában. Ebben a fejezetben a szupravezetővel vett együttlétezést vizsgálom és bizonyítom, olyan körülmények között amikor a spin-sűrűség hullám anizotróp (VIII.B.1 alfejezet), de olyan körülmények között is amikor nem az (VIII.B.2 alfejezet).

A VI. és VIII. fejezetek átlagtér elmélet szintű tárgyalása után (a módszer a IV A. alfejezetből való), a korrelációs hatások fokozatos figyelembevételével útján haladva, a spin-sűrűség hullám újból fontos szerephez jut a IX. fejezetben. Ez alkalommal az eredmény dinamikus átlagtér elemekkel átszőtt variációs típusú (a módszer a IV D. alfejezetben került bemutatásra), és azt mutatja, hogy félig töltött rendszertöltés esetében, a szimmetrikus periodikus Anderson modell alapállapota spin-sűrűség hullám jellegű. Az eredmény azért is érdekes mert mutatja hogy a mágneses f -elektronok momentumai nemcsak lokálisan, hanem globálisan $f - f$ korrelációkon keresztül is (részben) kompenzálódnak.

G. Ferromágnesesség

Ferromágneses állapot csak a kvantumosan viselkedő sokrészecskés rendszerekre alkalmazott pozitív szemidefinit operátorok tulajdonságaihoz kapcsolódó és pontos alapállapotokat eredményező eljárással levezetett állapotok között adódott. Elsőként a XII. fejezetben, $1/4$ rendszertöltésen jutottam ilyen állapothoz, de ferromágneses rendeződés a XIV. fejezetben leírt nematikus rendeződés esetében is előállt. Itt $1/4$ rendszertöltés mellett az $R = II$ esetben, telített ferromágnest kapok eredményül a teljes felületen, de stabilizáló tagok jelenlétében, nematikus (fonalmentén rendeződött) ferromágneses állapot is előáll (lásd pl. a 34. Ábra esetében létrejövő 30b. Ábrában bemutatott formájú ferromágneses stripe csíkokat, amelyek ferromágnesesek). Ferromágnes adódik továbbá a XV. fejezetben is, amikor a négyzetes cellájú Hubbard lánc legalsó sávja lapos és félig töltött volt ($n = N/(3N_c) = 1/3$ eset). Ez utóbbi XV. fejezetben ferromágneses állapot félig töltött rendszertöltés felett is adódik, de mivel ez korrelált félfémhez vezet (azaz egy különös vezető), az előző XVIII D. alfejezetben volt megemlítve. Ferromágnesesség adódott a XVI. fejezetben is erősen dopolt tartományban, egy olyan jelenség nyomán, melyben kölcsönhatás keltette effektív lapos sáv keletkezik.

H. Különleges paramágnesek

A paramágneses fázis első látásra közönségesnek tűnő, végeredményben a legtöbb (hőmérsékletet mint paramétert tartalmazó) fázisdiagram része, így felmerülhet a kérdés, hogy egyáltalán miért is érdemes megemlíteni. A levezetett alapállapotok azonban eredményeznek olyan szinglet állapotokat amelyekben hosszútávú térbeli rendezettség a teljes rendszeren belül nincs jelen, a rendszer paramágnesként viselkedik, de a kialakult fázis tulajdonságai merőben különböznek a teljesen rendezetlen, magashőmérsékletű paramágneses fázis tulajdonságaitól. Az alábbiakban, két ilyen esetet sorolnák itt fel e témakörhöz kap-

csolódóan a XV. és a XVII. fejezetekből. Aláhúzom, hogy ezen különlegesebb állapotformák kimutatásához (kvantum esetben) egzakt eredményeket adó módszerekre volt szükség (lásd V B. alfejezetet).

Az első ilyen eset a XV. fejezetben fordul elő, mégpedig $n > 5/3$ rendszertöltés esetében, $\delta = 0$ (zéró külső mágneses tér) mellett. Az előforduló állapot egy folytonos koncentráció tartományon létező szigetelő. E szituációt a négyzetes cellákat tartalmazó lánc esetében mutattam ki. Alapjellemzője, hogy a cellák érintkezési pontjai a dupla betöltésük miatt „befagyottaknak” tekinthetők, a rajtuk keresztüli mozgás tiltott, így a töltéshordozók, a cellán belül még megmaradt két csomóponton (minden cellára ez igaz) tetszőlegesen helyezkedhetnek el. A rendszer paramágneses marad, de a 3 alrács közül egy (a cellák közötti érintkezési pontok alrácsa) teljesen rendezett és hosszútávú korrelációt mutat (minden alrács ponton dupla betöltés található). A másik két alrács teljesen rendezetlen, és az alrácsok között sincs semmi korreláció.

A második ilyen eset a XVII. fejezetben fordul elő félig töltött rendszer esetében és $U > 0$ kölcsönhatás jelenléte mellett (amely makroszkópiusan degenerált állapotra volt rákapcsolva). E szituációban két alrács van jelen és mindegyiken belül, a spin irányítása szempontjából hosszútávú rendezettség uralkodik az f -elektronokra vonatkozólag. De a két alrács között semmiféle korreláció nincs és minden alrácson belül kitüntetett spin tengely, a másik alrácstól függetlenül tetszőlegesen változhat. Az előbb bemutatott XV. fejezethez képest a különbség az, hogy itt minden alrács, egy bizonyos szempontból rendezett, de a hasonlóság az, hogy az alrácsok között, semmiféle korreláció nincs.

Megjegyzem, hogy alrácsokban végbemenő rendeződés közismert, ilyen például az antiferromágnesesség is. De az ismert és eddig leírt esetekben korreláció létezik a különböző alrácsok között, itt viszont semmilyen féle korreláció az alrácsok között nincs.

A saját fejlesztésű módszerek összefoglalása

Ezen összefoglaló fejezetben alá szeretném húzni, hogy nemcsak az előbbi A - H alfejezetekben bemutatott modell elemzésekből származó eredmények jelentik a saját eredményeket, hanem ugyanezen kategóriába sorolhatóak (azaz saját eredményeknek tekinthetők) a saját fejlesztésű módszerek is. Ezek közül a disszertációban három van jelen, amelyeket az alábbiakban szintén összefoglalok.

I. Gutzwiller hullámfüggvénnyel kifejezett átlagértékek tetszőleges dimenzióban vett és más

közelítések nélküli számolása

A módszer részletes bemutatása a problémát részletesen felvázoló IV B. alfejezet után (mely nem saját termés), a IV C. alfejezetben történt, mely az én munkám eredménye. A bemutatott eljárás segítségével a X. fejezetben ismertetett eredmények levezetése történt meg. A módszer lehetőséget ad a Gutzwiller hullámfüggvénnyel kifejezett várható értékek más feltételezés (pl. Gutzwiller közelítés) nélküli kiszámítására tetszőleges dimenzióban $(n/2)^m$ tetszőleges m hatványáig menőleg, ahol $n \leq 1$ a koncentráció. A X. fejezetben

ismertetett 2D esetben $m = 17$ állt fenn, így a legkedvezőtlenebb $n = 1$ esetben is, a számolt értékek mellett öt nagyságrenddel kisebb járulékok voltak elhanyagolva.

II. Fonalszerű és hőmérsékletfüggő klaszternövekedési modell kidolgozása

A módszer részletes bemutatása a V A. alfejezetben történt meg és segítségével a XI. fejezetben bemutatott eredmények voltak levezetve. Az adott modellkörülmények között pontos eredmények levezetését teszi lehetővé és rendezetlen rendszerekben, kiskoncentrációs határesetben végbemenő és specifikus rendszerekben zajló klaszterizációs folyamatok jellemzésére alkalmas. Itt a specifikus és rendezetlen rendszer az, amelyik részecskéi közötti kölcsönhatás rövid hatósugarú, de úgy, hogy a kölcsönhatás hatósugara a legközelebbi szomszéd átlagtávolságához képest sokkal kisebb.

A levezetett előfordulási valószínűségek, ezek hőmérsékletfüggése, a kialakuló kluszterek mágneses szuszeptibilitása, kísérleti adatokkal jó minőségben egyezik.

III. Sokrészecskés kvantummechanikai rendszerek egzakt alapállapotát megadó pontos módszer kidolgozása

Az eljárás részletes bemutatása a V B. alfejezetben történt meg, a módszer a pozitív szemidefinit operátorok tulajdonságain alapszik, továbbá integrálhatóság fennállása illetve dimenziótól függetlenül részecskeszám függő egzakt alapállapotok levezetését teszi lehetővé. A módszer alkalmazása nyomán vezettem le a XII - XVII fejezetekben bemutatott eredményeket.

XIX. AZ ELÉRT ÚJ TUDOMÁNYOS EREDMÉNYEK TÉZISSZERŰ

ÖSSZEFOGLALSA

Az elkövetkezőkben az értekezésben bemutatott új tudományos eredményeket tézisszerűen foglalom össze. A leírásnak megfelelően először a közelítéssel elért eredmények tételes felsorolása jelentkezik (A. pontok), majd a közelítésmentes eredmények (B. pontok) kerülnek bemutatásra.

A. Közelítéssel elért eredmények

A.1. Kiterjesztett Hubbard modell alkalmazásával anizotrópikus spin-sűrűség hullámokból álló fázisok létezését mutattam ki elsők között, olyan körülmények feltételezése mellett amelyek nehézfermionos rendszerekben adódtak. A levezetett fázisok megjelenési lehetőségét nemcsak a rendparaméter egyenletek alapján igazoltam, hanem energetikai stabilitásukat is nyomonkövettem, továbbá termodinamikai viselkedésüket jellemeztem, ^[18,19].

A.2. Réteges felépítésű szupravezető rendszerek tanulmányozása során elsők között megmutattam, hogy a síkok közötti csatolás nemcsak hogy stabilizálja a rendezett fázist,

hanem a szupravezető kritikus hőmérsékletet is növelheti. A síkok közötti csatolás egyrészcse (hopping) és kétrészcse (vonzó jellegű kölcsönhatás) típusú járulékaiknak figyelembevétele mellett például tiszteres szupravezető kritikus hőmérsékletnövekedés is elérhető [17]. Topologikus rendeződés sem veszélyezteti ilyen fázis jelenlétét zéró külső mágneses térben [1].

A.3. Megmutattam, hogy Kondó rácshoz hasonló rendszerekben amelyek kiterjesztett Hubbard modellel leírhatóak, spin-sűrűség hullám és szupravezető koegzisztencia fázis létezhet a fázisdiagram bizonyos tartományain. A koegzisztencia fázist egy $(\mathbf{k}, -\sigma; -\mathbf{k} - \mathbf{Q}, \sigma)$ típusú szupravezetőt generáló átlagérték stabilizálja (ahol $\mathbf{Q}$ a „nesting” vektor), mely következtében a spin-sűrűség hullám és szupravezető rendparaméterek együttesen, energetikailag stabil formában léteznek [20]. A koegzisztenciát stabilizáló tényező jelenléte kétsávós rendszerek esetében is fontosnak bizonyult [21], ez esetben viszont a két sáv jelenléte miatt a inter-sáv típusú szupravezetőt generáló átlagértékek és a dopolás játszanak e szempontból fontos szerepet.

A.4. A szimmetrikus esetben vett periodikus Anderson modellre olyan variációs leírást végeztem, amely tetszőleges dimenzióban és a (Hubbard $U > 0$ -ra vonatkozó) teljes paramétertartományon megfelelő jellemzést biztosít. A variációs hullámfüggvény a Gutzwiller tag mellett a k -térben értelmezett további 6 darab (és k -függő) variációs paramétert tartalmaz. Az alapállapot energiára nagy, illetve kis U esetében számolt perturbációs eredményekkel nagyon jól egyező eredmény adódik. A fázisdiagramban egy kritikus U/t érték felett antiferromágneses rendezettség jelenik meg, melyet a leírás spin-sűrűség hullám szerű viselkedésnek talál [10].

A.5. A szakirodalomban egyedüli (nem szimulációs jellegű) számolást végeztem a kétdimenziós Hubbard modell Gutzwiller hullámfüggvénnyel való jellemzésére Gutzwiller approximáció nélkül. Az eljárás adottnak tekinti a Gutzwiller hullámfüggvényt, és semmilyen más közelítés felhasználása nélkül alapállapot várhatóértékeket fejez ki. A számolás végeredményben perturbatív jellegű, $(g^2 - 1)$ hatványai szerint adja meg az alapállapot várhatóértékeket. Ez olyan koefficiensek segítségével történik amelyeket 8-ad rendig pontosan, majd 9-től végtelen rendig $(n/2)^{17}$ pontossággal adottak (itt g a variációs paraméter, és n a részcsekszám sűrűség). Fém-szigetelő átmenet nem adódik. Az eljárás egy új speciálfüggvény bevezetésével történt, mely lehetővé teszi különböző rendű járulékok tetszőleges dimenzióban vett kifejezését [7, 8]. A nyolcad rendig menő diagramatikus járulékok részletes bemutatása [9]-ben történt. Hangsúlyozni szeretném hogy a felhasznált módszert is saját fejlesztésű.

B. Közelítésmentes eredmények

B.1. Egzakt leírást dolgoztam ki fonalszerű klaszterek hőmérsékletfüggő növekedésének modellezésére. A jellemzés akkor alkalmazható ha kiskonzentrációs rendszerben a részcsekkék közötti átlagos távolság sokkal nagyobb mint a részcsekkék között ható rövidhatótávolságú

kölcsönhatás hatósugara. Az eredmény-hőmérsékletfüggő rigurózus valószínűségi teret eredményez, mely csillagászati mérések, Monte Carlo szimulációk, illetve szilárdtestfizika tárgykörébe tartozó spinrendszerekre vonatkozó mérési eredményeket jó pontossággal ad vissza [15].

B.2. Első ízben publikáltam egzakt alapállapotokat a háromdimenziós periodikus Anderson modellre. A pozitív szemidefinites felbontásra támaszkodó eredmények egy számos kvantummechanikai szuperpozícióra alapuló szigetelő és egy nem-Fermi folyadék típusú vezető fázist eredményeznek $3/4$ sávtöltés körül, illetve ferromágneses fázist $1/4$ sávtöltés esetében. A szigetelő - fém átmenet ritkaföldfémek esetében tapasztalt $\gamma - \alpha$ tranzícióként is értelmezhető. A modelleredmények ezen átmenet során erős kompresszibilitás változást mutatnak mely kísérletileg is tapasztalható. Továbbmenőleg, a levezetett ferromágnesesség a modell körülményei között az első pontos ilyenyszerű eredmény [11, 12].

B.3. Bizonyítottam, hogy a periodikus Anderson modell kétdimenziós változatában is megjelennek a fázisdiagram különböző tartományain nem-Fermi folyadék típusú vezető fázisok, illetve lokalizált tartományok $3/4$ sávtöltés esetében. A közelítésmentes jellemzésnek ez esetben vannak specifikusan 2D-re vonatkozó lépései, és az eredményül kapott fizikai tulajdonságok eltérnek a 3D-ben tapasztaltaktól (pl. kompresszibilitási ugrás a vezető-szigetelő átmenet során nem tapasztalható). A tanulmányozott fázisok a Hamilton operátorban szereplő csatolási állandók elfogadható értékei mellett jelennek meg [2, 3]. A jellemzést félig töltött rendszer esetére is kiterjesztettem, $U = \infty$ határesetben [4].

B.4. Rendezetlen és kölcsönható kétdimenziós rendszerek esetében sikerült közelítésmentesen lokalizáció-delokalizációs átalakulást kimutatnom. A leírás a Hamilton operátor pozitív szemidefinites felbontásán alapszik, de a rendezetlenség jelenléte miatt ez most teljesen lokális paraméterek segítségével történik, és ezáltal az átalakítás következtében fellépő független paraméterek száma a rendszer csomópontjainak számával arányos. Ha a rendszer kétsávós jellegű, a két típusú fermion mobilitásának aránya minden csomóponton ugyanaz, ha a lokális egyrészecske potenciálok minden csomóponton taszító jellegűek, illetve a lokális Coulomb kölcsönhatás (habár lehet rendezetlen) minden csomóponton pozitív, megmutattam, hogy egzakt alapállapot vezethető le. Ez koncentráció függő és $1/4$ sávtöltésen lokalizáció-delokalizációs átalakulást ad. Megmutattam, hogy az átalakulásnál Griffiths fázis fellépése valószínűtlen [5].

B.5. Stripe és sakktábla típusú egzakt és nem-degenerált alapállapotokat vezettem le kétsávós rendszerekre két dimenzióban. A koncentráció csökkentésével egynegyed sávtöltésen homogén fázisok állnak elő. A további részecskeszám koncentráció csökkentés ezeket rendezetlen klaszterekből álló fázisokra szakítja. A további koncentráció csökkentés olyan degenerált alapállapotokat alakít ki, amelyekben stripe és rendezetlen klaszter megoldások együttesen előfordulnak. Ezen szituáció mellett, ha a rendszer Hamilton operátorában stabilizáló járulékok vannak jelen (ilyen pl. disztorziós vonalak, dimerizáció, periodikus töltés eloszlás, sűrűség hullámok, stb.) nem-degenerált stripe alapállapok jelennek meg. Azt is megmutattam, hogy a sakktábla fázis egy specifikus diagonális stripnek

felel meg, így leírására ugyanazon módszertani eljárás alkalmazható [16].

B.6. Négyzetes cellával rendelkező és Hubbard típusú kölcsönhatásokat tartalmazó láncok esetében első alkalommal vezettem le multielektronikus egzakt alapállapotokat [13,14]. A jellemzés a lánc síkjára merőleges mágneses, és elektromos terek jelenlétét is figyelembe veszi különböző elektronkoncentrációs tartományokon és a rendszer egyszerű mi-volta ellenére rendkívül érdekes alapállapotokat mutat ki. Ezek közül megemlítsre méltó pl. telített és telítetlen, szigetelő és vezető ferromágnes, nem-mágneses fázisok, folyamatos és véges koncentrációtartományon kialakuló szigetelő, rögzített spinpolaritással rendelkező töltéshordozók számára kialakuló vezető.

B.7. Pentagon cellával rendelkező láncok esetében, nagykoncentrációs tartományban rigurozusan bizonyítottam, hogy inhomogén lokális Coulomb taszítás képes "effektív" lapos sávot kelteni, olyan körülmények között mikor amúgy, a kinetikus Hamilton operátor által szolgáltatott sávok teljesen diszperzívek^{22,23}, és azt is igazoltam, hogy ilyenyszerű jelenség nemcsak pentagon láncok esetében, hanem sokkal bonyolultabb láncok esetében is megjelenik²⁴. Megállapítottam, hogy a folyamat során, a tanulmányozott esetekben, ferromágnesesség lép fel, egy olyan mechanizmus révén amelyet egy nagymértékű kölcsönhatási energia csökkenés vezérel, és amelyet a dupla betöltés nagyfokú átrendeződése okoz^{23,24}.

B.8. Két dimenzióban és kétsávós rendszer esetében a Hubbard taszítás delokalizáló hatását vizsgáltam. Megmutattam, hogy amennyiben e kölcsönhatás sávszigetelőre hat olyan körülmények között hogy az állapot makroszkópicusan degenerált, delokalizációs hatás áll elő. Ez abban nyilvánul meg, hogy az alapállapot hullámfüggvénybe belépő járulékokat szétszórja a kölcsönhatás annak az érdekében, hogy a dupla betöltést a lehető legjobban csökkentse és ezáltal minimálisra állítsa be az alapállapot energiát. Ezáltal az alapállapot hullámfüggvényben kiterjedt operátorok jelennek meg amelyek a teljes rendszeren végigfutnak és a rendszer tetszőleges két pontját összekötik. Így a lokalizációs hossz nagyon megnő, ez adja a delokalizáló hatást⁶. Az eredmény még két aspektusból fontos. Egyrészt mutatja, hogy kétsávós rendszerben a lokális mágneses momentumok kompenzációja periodikus Anderson típusú jellemzők mellett nagyrészt globális úton történik félig töltött rendszer esetében. Másrészt, egy olyan rendeződési formát jelez amely alrács rendeződésnek nevezhető, és amely jellemzője, hogy alrácsokon belül valamilyen fajta rendeződés áll elő de úgy, hogy különböző alrácsok között semmiféle korreláció nincs jelen⁶.

B.9. Eljárást dolgoztam ki mely alkalmazható tetszőleges dimenziós sokrészecskés kvantummechanikai rendszer egzakt alapállapotainak meghatározására részleges fázisdiagram tartományokon. Az a tény hogy pozitív szemidefinit operátoroknak nincs negatív sajátértékük, triviálisan mindenki számára ismert volt. De annak megmutatásában, hogy ezt effektíve fel lehet használni adott sokrészecskés rendszer alapállapotának konkrét és pontos meghatározására a Hamilton operátorba önkényesen beírt rendszeridegen kiterjesztési tagok nélkül, fontos szerepet játszottam, és ennek rögzített modellhez kötött módszertanát én tettem pontra [2-6,23-25].

dc_890_14

BIBLIOGRAFÍA

- [1] Z. Gulácsi, M. Gulácsi, *Advances in Physics* **47**, 1, (1998).
- [2] Z. Gulácsi, *Eur. Phys. Jour.* **B30**, 295, (2002).
- [3] Z. Gulácsi, *Phys. Rev.* **B66**, 165109, (2002).
- [4] Z. Gulácsi, *Phil. Mag. Lett.* **84**, 405, (2004).
- [5] Z. Gulácsi, *Phys. Rev.* **B69**, 054204, (2004).
- [6] Z. Gulácsi, *Phys. Rev.* **B77**, 245113, (2008).
- [7] Z. Gulácsi, M. Gulácsi, *Phys. Rev.* **B44**, 1475, (1991).
- [8] Z. Gulácsi, M. Gulácsi, B. Jankó, *Phys. Rev.* **B47**, 4168, (1993).
- [9] Z. Gulácsi, M. Gulácsi, *Phil. Mag.* **B69**, 437, (1994).
- [10] Z. Gulácsi, R. Strack, D. Vollhardt, *Phys. Rev.* **B47**, 8594, (1993).
- [11] Z. Gulácsi, D. Vollhardt, *Phys. Rev. Lett.* **91**, 186401, (2003).
- [12] Z. Gulácsi, D. Vollhardt, *Phys. Rev.* **B72**, 075130, (2005).
- [13] Z. Gulácsi, A. Kampf, D. Vollhardt, *Phys. Rev. Lett.* **99**, 026404, (2007).
- [14] Z. Gulácsi, A. Kampf, D. Vollhardt, *Progr. Theor. Phys. Suppl.* **176**, 1, (2008).
- [15] Z. Gulácsi, M. Gulácsi, *Phys. Rev. Lett.* **73**, 3239, (1994).
- [16] Z. Gulácsi, M. Gulácsi, *Phys. Rev.* **B73**, 014524, (2006).
- [17] Z. Gulácsi, M. Gulácsi, I. Pop, *Phys. Rev.* **B37**, 2247, (1988).
- [18] Z. Gulácsi, M. Gulácsi *Phys. Rev.* **B36**, 699, (1987).
- [19] M. Gulácsi, Z. Gulácsi, *Phys. Rev.* **B36**, 748, (1987).
- [20] M. Gulácsi, Z. Gulácsi, *Phys. Rev.* **B39**, 12352, (1989).
- [21] M. Gulácsi, Z. Gulácsi, *Phys. Rev.* **B33**, 6147, (1986).
- [22] Z. Gulácsi, A. Kampf, D. Vollhardt, *Phys. Rev. Lett.* **105**, 266403, (2010).
- [23] Z. Gulácsi, *Int. Jour. Mod. Phys.* **B27**, 1330009, 1, (2013).
- [24] Z. Gulácsi, *Eur. Phys. Jour.* **B87**, 143, (2014).
- [25] Z. Gulácsi, *Jour. of Phys. Conf. Ser.* **410**, 012011, (2013).
- [26] Az Abrikosov, Gorkov, Dzjaloshinskij féle könyvet (lásd Ref.^[63]) kaptam meg orosz nyelven, azzal a kikötéssel, hogy ha tudom mi van benne, bekapcsolódhatok a csoport munkájába. Gyér orosz tudásom miatt először szótárral román nyelvre fordítottam a teljes könyvet – ez a munka 1977-ben fejeződött be, a román kézirat most is birtokomban van, később a csoportból többen lefénymásolták az anyagot –, majd 1979-ig asszimiláltam a technikát. Később, tíz évre rá, az 1989-es változások után, az 1990/1991-es tanévben a Bábes-Bolyai Egyetemen a magyar fizikus csoportnak, egy éves statisztikus fizika kurzus második félévében már hivatalosan tanítottam is az anyagot.
- [27] D. Dadarlat, Z. Gulácsi, *Physica Status Solidi* **B98**, 105, (1980); M. Crisan, Al. Anghel, Z. Gulácsi, *Jour. Magn. Magn. Matter.* **23**, 23, (1981); Z. Gulácsi, M. Crisan, *Jour. Magn. Magn. Matter.* **24**, 141, (1981); A. Giurgiu, I. Pop, M. Popescu, Z. Gulácsi, *Phys. Rev.* **24**, 1350, (1981); M. Crisan, Z. Gulácsi, *Canad. Jour. Phys.* **60**, 649, (1982); M. Gulácsi, M. Crisan, Z. Gulácsi, *Jour. Magn. Magn. Matter.* **39**, 290, (1983).

- [28] A. Anghel, N. D. Dadarlat, Z. Gulácsi, Solid State Commun. **35**, 983, (1980); M. Crisan, A. Anghel, Z. Gulácsi, Jour. Magn. Matter. **23**, 23, (1981). Z. Gulácsi, M. Crisan, in „Topics in Theoretical Physics”, vol.II. (Eds: Central Reserach Institute of Physics, Bucharest, 1979), pg.173.
- [29] J. M. Kosterlitz, D. J. Thouless, Jour. of Phys. **C6**, 1181, (1973); J. M. Kosterlitz, Jour. of Phys. **C7**, 1046, (1974).
- [30] Z. Gulácsi, Fázisátalakulások elmélete I., Kossuth Egyetemi Kiadó, Debrecen, 1998, 285 - 340 oldalak.
- [31] A. W. Overhauser, Phys. Rev. **128**, 1437, (1962).
- [32] W. M. Lomer, Proc. Phys. Soc. **80**, 489, (1962).
- [33] E. Fawcett, Rev. Mod. Phys. **60**, 209, (1988).
- [34] P. A. Fedders, P. C. Martin, Phys. Rev. **143**, 245, (1966).
- [35] A. R. Pepper, R. Street, Proc. Phys. Soc. **87**, 971, (1966).
- [36] W. B. Muir, J. O. Strom-Olsen, Phys. Rev. **B4**, 988, (1971).
- [37] Y. Tsunoda, Y. Hamaguchi, N. Kunitomi, jour. Phys. Soc. Jpn. **32**, 394, (1972).
- [38] J. Zittartz, Phys. Rev. **164**, 575, (1967).
- [39] S. ARAJS, T. F. de Young, E. E. Anderson, Jour. Appl. Phys. **41**, 1926, (1970).
- [40] T. M. Rice, Phys. Rev. **B2**, 3619, (1970).
- [41] F. Steglich et al. Phys. Rev. Lett. **43**, 1892, (1979).
- [42] G.R.Stewart, Rev.Mod.Phys. **56**,755,(1984); H.R.Ott et al. Phys.Rev.**B31**,1651,(1985).
- [43] A. J. Leggett, Rev. Mod. Phys. **47**, 331, (1975).
- [44] B. I. Halperin, T. M. Rice, a „Solid State Physics” könyvben, vol. 21, pg. 115, edit. F.Seitz, D. Turnbull, H. Ehrenreich, Acad. Press, New York, 1968, cím: „The excitonic state at the semiconductor-semimetal transition”. Lásd továbbá B.I. Halperin, T. M. Rice, Rev. Mod. Phys. **40**, 755-766, (1968).
- [45] F.X.Bronold, H.Fehske, G.Ropke, Jour.Phys.Soc.Jpn. **76**, (2007), Suppl. A., pg. 27-30.
- [46] J. G. Bednorz, K. A. Müller, Z. Phys. **B64**, 189, (1986).
- [47] M. K. Wu, J. R. Ashburn, C. J. Torng et al., Phys. Rev. Lett. **58**, 908, (1987).
- [48] I. K. Schuller, Phys. Rev. Lett. **44**, 1597, (1980).
- [49] S. T. Ruggiero, T. W. Barbee Jr., M. R. Beasley, Phys. Rev. Lett. **45**, 1299, (1980).
- [50] I. Banerjee, Q. S. Yang, C. M. Falco, I. K. Schuller, Phys. Rev. **B28**, 5037, (1983).
- [51] I. Banerjee, I. K. Schuller, Jour. Low Temp. Phys. **54**, 501, (1984).
- [52] E. I. Kats, Zh. Eksp. Teor. Fiz. **56**, 1675, (1969); **58**, 1471, (1970) [Sov. Phys. JETP **29**, 897, (1969); **31**, 787, (1970)].
- [53] W. Lawrence, S. Doniach, in „Proceedings of the twelfth International Conference on Low Temperature Physics, eds. E. Kanda; Academic Press, Kyoto, 1971, pg. 361.
- [54] R. A. Klemm, M. R. Beasley, A. Luther, Phys. Rev. **B8**, 5072, (1973); R. R. Gerhards, Phys. Rev. **B9**, 2945, (1974); R. A. Klemm, Jour. Low Temp. Phys. **16**, 381, (1974).
- [55] R. A. Klemm, A. Luther, M. R. Beasley, Phys. Rev. **B12**, 877, (1975); S. Takahashi, M. Tachiki, Phys. Rev. **B34**, 3162, (1981).

- [56] R. A. Klemm, K. Scharnberg, Phys. Rev. **B24**, 6361, (1981).
- [57] B. Y. Shapiro, Phys. Lett. **A116**, 73, (1986); Y. J. Qian, J. Q. Zheng, K. S. Birmal et al., Jour. Low Temp. Phys. **49**, 279, (1982).
- [58] A. Migliori, D. M. Ginsberg, Phys. Rev. **B8**, 5065, (1973).
- [59] P. W. Anderson, Science **237**, 1196, (1987).
- [60] T.M.Rice, Phys.Rev. **140**, A1889, (1965); P.C.Hohenberg, Phys.Rev. **158**, 383, (1967).
- [61] P. H. Hor, R. L. Meng, Y. Q. Wang, et al., Phys. Rev. Lett. **58**, 1891, (1987).
- [62] R. R. Gerhardt, Phys. Rev. **B9**, 2945, (1974).
- [63] A. A. Abrikosov, L. P. Gorkov, I. Y. Dzyaloshinskii, Quantum Field Theoretical Methods in Statistical Physics, Pergamon Press, Oxford, 1965.
- [64] A. L. Fetter, J. D. Walecka, Quantum Theory of Many-particle systems, McGraw-Hill Book Company, New York, 1971.
- [65] A. A. Abrikosov, L. P. Gorkov, Zh. Eksp. Teor. Fiz. **39**, 1781, (1960)[Sov. Phys. JETP **12**, 1243, (1961)].
- [66] A. M. Clogston, Phys. Rev. Lett. **9**, 266, (1962).
- [67] B. S. Chandrasekhar, Appl. Phys. Lett. **1**, 7, (1962).
- [68] P. Fulde, R. A. Ferrell, Phys. Rev. **135**, A550, (1964).
- [69] A. I. Larkin, Y. N. Ovchinnikov, Zh. Eksp. Teor. Fiz. **47**, 1136, (1964)[Sov. Phys. JETP **20**, 762, (1965)].
- [70] O.Fischer, M.Peter, a „Magnetism V.” kötetben, eds. H. Suhl, Academic Press, 1973.
- [71] M. Kulic, Phys. Lett. **A81**, 359, (1981).
- [72] M. J. Nass, K. Levin, G. S. Grest, Phys. Rev. **B23**, 1111, (1981).
- [73] M. Ishikawa, O. Fisher, Solid State Commun. **24**, 747, (1977).
- [74] R. M. McCailum, D. C. Johnstone, et al. Solid State Commun. **24**, 391, (1977).
- [75] H. C. Hamaker, L. D. Woolf, H. B. Mackay et al., Solid State Commun. **32**, 389, (1979).
- [76] K.Bechgaard, C.S.Jacobsen, K.Mortensen et al., Solid State Commun. **33**, 1119,(1980).
- [77] T. Kohara, A. Asayama, Y. Nishihara et al., Solid State Commun. **49**, 31, (1984).
- [78] F. Steglich, J. Aarts, C. D. Bredl et al., Phys. Rev. Lett. **43**, 1892, (1979).
- [79] A. P. Ramirez, Phys. Rev. Lett. **57**, 1072, (1986).
- [80] B. Batlogg et al., Phys. Rev. Lett. **55**, 1319, (1985).
- [81] A. de Visser et al., Jour. Mag. Mag. Matter. **54-57**, 375, (1986).
- [82] T. T. M. Palstra et al., Phys. Rev. Lett. **55**, 2727, (1985).
- [83] W. Baltensperger, S. Strassler, Phys. Kondens. Mater. **1**, 20, (1963).
- [84] P. Petalas, W. Baltensperger, Helv. Phys. Acta. **41**, 388, (1968).
- [85] K. Machida, K. Nokura, T. Matsubara, Phys. Rev. Lett. **44**, 821, (1980).
- [86] M.J.Nass, et al. Phys.Rev.Lett.**46**,614,(1981); Phys.Rev. **B25**,4541,(1982).
- [87] O. Sakai, M. Tachiki, T. Koyama et al., Phys. Rev. **B24**, 3830, (1982).
- [88] Y. Suzumara, A. D. S. Nagi, Phys. Rev. **B24**, 5103, (1981).
- [89] K. Machida, T. Matsubara, Jour. Phys. Soc. Jpn. **50**, 3231, (1981); K. Machida, Solid State Commun. **41**, 217, (1982).

- [90] E. W. Fenton, G. C. Psaltakis, Jour. Phys. (Paris) Colloq. **44**, C3-1129, (1983);
E. W. Fenton, Solid State Commun. **50**, 961, (1984); **54**, 633, (1985).
- [91] Y. Nishihara et al., Phys. Rev. **B31**, 5775, (1985).
- [92] K. Machida, M. Kato, Phys. Rev. Lett. **58**, 1986, (1987).
- [93] M. Kato, K. Machida, Phys. Rev. **B37**, 1510, (1988).
- [94] U. Rauchschwalbe et al., Europhys. Lett. **3**, 1619, (1987).
- [95] M. Sigrist, T. M. Rice, Phys. Rev. **B39**, 2200, (1989).
- [96] P. W. Anderson, Phys. Rev. **124**, 41, (1961).
- [97] J. Kondo, Progr. Theor. Phys. **32**, 37, (1964).
- [98] J. R. Schrieffer, P. A. Wolff, Phys. Rev. **149**, 491, (1966).
- [99] G. Czycholl, Phys. Rep. **143**, 277, (1986).
- [100] T. M. Rice, K. Ueda, Phys. Rev. Lett. **55**, 995, (1985); **55**, 2093(E), (1985); Phys. Rev. **B34**, 6420, (1986).
- [101] B. H. Brandow, Phys. Rev. **B33**, 215, (1986).
- [102] W. Metzner, D. Vollhardt, Phys. Rev. Lett. **62**, 324, (1989).
- [103] K. Yosida, A. Yoshimori, a „Magnetism, vol.5” kötetben, eds. H. Suhl, Academic Press, New York, 1973, pg. 253.
- [104] R. Blankenbecler, J. R. Fulco, W. Gill, D. J. Scalapino, Phys. Rev. Lett. **58**, 411, (1987).
- [105] P. Nozieres, Ann. Phys. (Paris) **10**, 19, (1985).
- [106] H. Shiba, P. Fazekas, Progr. Theor. Phys. Suppl. **101**, 403, (1990);
- [107] R. Strack, D. Vollhardt, Mod. Phys. Lett. **B2**, 1377, (1991).
- [108] W. Brenig, E. Müller-Hartmann, Ann. Phys. **1**, 39, (1992).
- [109] M. C. Gutzwiller, Phys. Rev. Lett. **10**, 159, (1963); Phys. Rev. A134, 923, (1964).
- [110] M. C. Gutzwiller, Phys. Rev. A137, 1726, (1965).
- [111] T. Ogawa, K. Kanda, T. Matsubara, Prog. Theor. Phys. **53**, 614, (1975); D. Vollhardt, Rev. Mod. Phys. **56**, 99, (1984).
- [112] G. Kotliar, A. E. Ruckenstein, Phys. Rev. Lett. **57**, 1362, (1986).
- [113] A. Atland, B. Simons, „Interaction effects in tight-binding systems”, a „Condensed Matter Field Theory” c. könyvben, Cambridge University Press, 2006, pg. 58.
- [114] W. F. Brinkman, T. M. Rice, Phys. Rev. **B2**, 4302, (1970).
- [115] Hogy e tény mélységét látni lehessen aláhúdom, hogy ha egy számítógépes publikációs adatbázist megnéznék (pl. ISI Web of knowledge), akkor kiderül, hogy az utolsó 30 évben publikált 10^3 nagyságrendű számú és Gutzwiller hullámfüggvényt tartalmazó cikk több mint fele, fém szigetelő átmenettel kapcsolatos és *GA* közelítésben dolgozik.
- [116] T. A. Kaplan, P. Horsch, P. Fulde, Phys. Rev. Lett. **49**, 889, (1982).
- [117] P. Horsch, T. A. Kaplan, Jour. Phys. **C16**, L1203, (1983).
- [118] E. H. Lieb, F. Y. Wu, Phys. Rev. Lett. **20**, 1445, (1968).
- [119] M. Takahashi, Jour. Phys. **10**, 1289, (1977).
- [120] K. Hashimoto, Phys. Rev. **B31**, 7368, (1985).
- [121] D. Baeriswyl, K. Maki, Phys. Rev. **B31**, 6633, (1985).
- [122] C. Gros, R. Joynt, T. M. Rice, Phys. Rev. **b36**, 381, (1987).

- [123] H. Yokoyama, H. Shiba, Jour. Phys. Soc. Jpn. **56**, 1490, (1987).
- [124] W. Metzner, D. Vollhardt, Phys. Rev. Lett. **59**, 121, (1987).
- [125] W. Metzner, D. Vollhardt, Phys. Rev. **B37**, 7382, (1988).
- [126] F. Gebhard, D. Vollhardt, Phys. Rev. Lett. **59**, 1472, (1987).
- [127] R. Tao, F. Y. Wu, Jour. Phys. **A20**, L299, (1987).
- [128] R. Abilock, Am. Math. Mon. **74**, 720, (1967).
- [129] S. Chandrasekhar, Rev. Mod. Phys. **15**, 1, (1943).
- [130] A. A. Abrikosov, S. I. Moukhin, Jour. Low Temp. Phys. **33**, 207, (1987).
- [131] A. A. Abrikosov, Jour. Low Temp. Phys. **33**, 505, (1987).
- [132] A. A. Abrikosov, Adv. in Phys. **29**, 869, (1980).
- [133] D. C. Mattis, An Encyclopedia of Exactly Solved Models in One Dimension. The Many-Body Problem, World Scientific, New Jersey, 1993.
- [134] A. Das, Integrable Models, World Scientific Lecture Notes in Physics, Vol. 30., World Scientific, New Jersey, 1989.
- [135] D. J. Klein, Jour. Phys. **A15**, 661, (1982).
- [136] U. Brandt, A. Giesekeus, Phys. Rev. Lett. **68**, 2648, (1992).
- [137] R. Strack, Phys. Rev. Lett. **70**, 833, (1993).
- [138] A. A. Ovchinnikov, Mod. Phys. Lett. **B7**, 1397, (1993).
- [139] J. de Boer, V. E. Korepin, A. Schadschneider, Phys. Rev. Lett. **74**, 789, (1995).
- [140] R. Strack, D. Vollhardt, Phys. Rev. Lett. **70**, 2637, (1993).
- [141] R. Strack, D. Vollhardt, Phys. Rev. Lett. **72**, 3425, (1994).
- [142] A. Montorsi, D. K. Campbell, Phys. Rev. **B53**, 5153, (1996).
- [143] L. G. Sarasua, M. A. Continentino, Phys. Rev. **B65**, 233107, (2002).
- [144] L. G. Sarasua, M. A. Continentino, Phys. Rev. **B69**, 073103, (2004).
- [145] P. Gurin, Z. Gulácsi, Phil. Mag. **B76**, 827, (1997).
- [146] I. Orlik, Z. Gulácsi, Phil. Mag. Lett. **78**, 177, (1998).
- [147] I. Orlik, Z. Gulácsi, Phil. Mag. **B81**, 1587, (2001).
- [148] Z. Gulácsi, I. Orlik, Jour. of Phys. **A34**, L359, (2001).
- [149] P. Gurin, Z. Gulácsi, Phys. Rev. **B64**, 045118, (2001); Phys. Rev. **65**, 129901(E), (2002).
- [150] T. Yanagisawa, Phys. Rev. Lett. **70**, 2024, (1993); *ibid.* **70**, 3523, (1993).
- [151] C. Noce, Phys. Rep. **431**, 173, (2006), (10.4 paragrafus); *ibid.* **439**, 160, (2007).
- [152] B. Johansson, Phil. Mag. **30**, 30, (1974).
- [153] C. Huscroft, A. K. McMahan, R. T. Scalettar, Phys. Rev. Lett. **82**, 2342, (1999).
- [154] M. B. Zöllfl et al., Phys. Rev. Lett. **87**, 276403, (2001).
- [155] K. Held, A. K. McMahan, R. T. Scalettar, Phys. Rev. Lett. **87**, 276404, (2001).
- [156] K. Held et al., Phys. Rev. Lett. **85**, 373, (2000).
- [157] K. Held, R. Bulla, Eur. Phys. Jour. **B17**, 7, (2000).
- [158] P. van Dongen et al., Phys. Rev. **B64**, 195123, (2001).
- [159] Y. Ono et al., Eur. Phys. Jour. **B19**, 375, (2001).
- [160] P. W. Anderson, The theory of superconductivity in the high- T_c cuprates, Princeton Series in Physics, Princeton University Press, New Jersey, 1997.

- [161] S. Tomonaga, Progr. Theor. Phys. **5**, 544, (1950).
- [162] J. M. Luttinger, Jour. of Math. Phys. **4**, 1154, (1963).
- [163] P. Nozieres, Jour de Phys. **2**, 443, (1992).
- [164] J. W. Clark, V. A. Khodel, M. V. Zverev, Phys. Rev. **B71**, 012401, (2005).
- [165] H. Freire, E. Correa, A. Ferraz, Phys. Rev. **B71**, 165113, (2005).
- [166] J. M. Luttinger, Phys. Rev. **119**, 1153, (1960).
- [167] P. Fazekas, E. Müller-Hartmann, Z. Phys. **B85**, 285, (1991).
- [168] V. Dorin, P. Schlottmann, Jour. Appl. Phys. **73**, 5400, (1993).
- [169] B. Möller, P. Wölfle, Phys. Rev. **B48**, 10320, (1993).
- [170] P. Fazekas, Phil. Mag. **B76**, 797, (1997).
- [171] R. Doradzinski, J. Spalek, Phys. Rev. **B56**, R14239, (1997).
- [172] A. N. Tahvildar-Zadeh, M. Jarell, J. K. Freericks, Phys. Rev. **55**, R3332, (1997).
- [173] M. Guerrero, R. M. Noack, Phys. Rev. **53**, 3707, (1997).
- [174] F. B. Anders, Phys. Rev. Lett. **83**, 4638, (1999).
- [175] D. Meyer, W. Nolting, Phys. Rev. **B62**, 5657, (2000).
- [176] C. D. Batista, J. Bonca, J. E. Gubernatis, Phys. Rev. Lett. **88**, 187203, (2002).
- [177] J. W. Rasul, Phys. Rev. **B68**, 134450, (2003).
- [178] Y. A. Izyumov, D. S. Alekseev, Phys. Met. Metallogr. **97**, 15, (2004).
- [179] D. C. Mattis, „The Theory of Magnetism Made Simple”, World Scientific Publishing, New Jersey, Edition 2006, ISBN 981238579-7, pg.342-343, Ref.[85], továbbá pg. 552.
- [180] P. A. Lee, T. V. Ramakrishnan, Rev. Mod. Phys. **57**, 287, (1985).
- [181] J. D. Maynard, Rev. Mod. Phys. **73**, 401, (2001).
- [182] E. Abrahams, P. W. Anderson, et al. Phys. Rev. Lett. **42**, 673, (1979).
- [183] S. V. Kravchenko, G. V. Kravchenko, et al. Phys. Rev. **B50**, 8039, (1994).
- [184] E. Abrahams, S. V. Kravchenko, M. P. Sarachik, Rev. Mod. Phys. **73**, 251, (2001).
- [185] D. Belitz, T. R. Kirkpatrick, Rev. Mod. Phys. **66**, 261, (1994).
- [186] D. K. Morr, N. A. Stavropoulos, Phys. Rev. **B67**, 020502(R), (2003).
- [187] M. Kohmoto, L. P. Kadanoff, C. Tang, Phys. Rev. Lett. **50**, 1870, (1983).
- [188] D. R. Grempel, S. Fishman, R. E. Prange, Phys. Rev. Lett. **49**, 833, (1982).
- [189] U. Grimm, M. Schreiber, „Quasicrystals - Structure and Physical Properties”, ed. H.-R. Trebin (Wiley-VCH, Weinheim, 2003), pp. 210-235 (cond-mat/0212140).
- [190] U. Grimm, R. A. Römer, G. Schliecker, Ann. Phys. (Leipzig) **7**, 389, (1998).
- [191] D. Levine, P. J. Steinhardt, Phys. Rev. Lett. **53**, 2477, (1984).
- [192] S. Ostlund, R. Pandit, H. J. Schellnhuber, E. Siggia, Phys. Rev. Lett. **50**, 1873, (1983).
- [193] M. Kohmoto, B. Sutherland, C. Tang, Phys. Rev. **B35**, 1020, (1987).
- [194] R. Penrose, Bull. Inst. Math. Appl. **10**, 266, (1974).
- [195] M. Gardner, Sci. Am. **236**, 110, (1977).
- [196] M. Kohmoto, B. Sutherland, Phys. Rev. **B34**, 3849, (1986).
- [197] B. Sutherland, Phys. Rev. **B34**, 3904, (1986).
- [198] M. Arai, T. Tokihiro, T. Fujiwara, M. Kohmoto, Phys. Rev. **B38**, 1621, (1988).
- [199] P. Repetowicz, U. Grimm, M. Schreiber, Phys. Rev. **B58**, 13482, (1998).

- [200] R. G. Hennig, K. F. Kelton, et al. Phys. Rev. **B67**, 134202, (2003).
- [201] E. Y. Vedmedenko, H. P. Oepen, J. Kirschner, Phys. Rev. Lett. **90**, 137203, (2003).
- [202] J. Zaanen, O. Gunnarsson, Phys. Rev. **B40**, R7391, (1989).
- [203] S. A. Kivelson et al., Rev. Mod. Phys. **75**, 1201, (2003).
- [204] M. B. Salamon, M. Jaime, Rev. Mod. Phys. **73**, 583, (2001).
- [205] J. Q. Yan, J. S. Zhou, J. B. Goodenough, Phys. Rev. **B68**, 104520, (2003).
- [206] E. L. Nagaev, Usp. Fiz. Nauk **166**, 833, (1996) [Phys. Usp. **39**, 781, (1996)].
- [207] R. G. Stewart, Rev. Mod. Phys. **73**, 797, (2001).
- [208] T. Hanaguri et al., Nature **430**, 1001, (2004).
- [209] O. N. Bakharev et al., Phys. Rev. Lett. **93**, 37002, (2004).
- [210] D. H. Lee, S. A. Kivelson, Phys. Rev. **B67**, 024506, (2003).
- [211] S. M. Hayden et al., Nature **429**, 531, (2004).
- [212] J. M. Tranquada et al., Nature **429**, 534, (2004).
- [213] U. Löv, V. J. Emery, K. Fabricius, S. A. Kivelson, Phys. Rev. Lett. **72**, 1918, (1994).
- [214] G. A. Mansoori, „Principles of Nanotechnology: Molecular-Based Study of Condensed Matter in Small Systems”, World Scientific, Singapore, 2005.
- [215] J. E. Anthony, Angewante Chemie Internat. **47**, 452, (2007).
- [216] R. Arita, Y. Suwa, K. Kuroki, et al., Phys. Rev. Lett. **88**, 127202, (2002).
- [217] J. H. Cho et al., Nature Mater. **7**, 900, (2008).
- [218] A. C. R. Grayson et al., Nature Mater. **2**, 767, (2003).
- [219] M. W. Long et al., Jour. of Phys. **C6**, 481, (1994).
- [220] E. Müller-Hartmann, Jour. Low Temp. Phys. **99**, 349, (1995).
- [221] S. Daul, R. M. Noak, Phys. Rev. **B58**, 2635, (1997).
- [222] A. Mielke, Phys. Lett. **A174**, 443, (1993).
- [223] H. Tasaki, Phys. Rev. Lett. **75**, 4678, (1995).
- [224] H. K. Kono, Y. Kuramoto, Jour. Phys. Soc. Jpn. **75**, 084706, (2006).
- [225] O. Derzhko, A. Honecker, J. Richter, Phys. Rev. **B76**, 220402(R), (2007).
- [226] J. Vidal et al., Phys. Rev. Lett. **85**, 3906, (2000).
- [227] W. P. Su, J. R. Schrieffer, A. J. Heeger, Phys. Rev. Lett. **42**, 1698, (1979); Phys. Rev. **B22**, 2099, (1980).
- [228] A. J. Heeger, S. Kivelson, J. R. Schrieffer, W. P. Su, Rev. Mod. Phys. **60**, 781, (1988).
- [229] G. Brocks, J. van den Brink, A. F. Morpurgo, Phys. Rev. Lett. **93**, 146405, (2004).
- [230] R. McNeill, R. Siudak, J. H. Wardlaw, D. E. Weiss, Australian J. Chem. **16**, 1056, (1963).
- [231] A. A. Correa et al. Synth. Met, **121**, 1836, (2001); O. R. Nascimento et al. Phys. Rev. **B67**, 144422, (2003); F.R.de Paula et al. J.Mag.Mag.Matter. **320**, e193, (2008).
- [232] Y. Suwa, R. Arita, K. Kuroki, H. Aoki, Phys. Rev. **B68**, 174419, (2003); R. Arita et al. Phys. Rev. Lett. **88**, 127202, (2002); Phys. Rev. **B68**, 140403, (2003).
- [233] Y. Suwa, R. Arita, K. Kuroki, H. Aoki, Phys. Rev. **B82**, 235127, (2010).
- [234] T. O. Wehling et al. Phys. Rev. Lett. **106**, 236805, (2011).
- [235] G. Brooks, J. van den Brinnk, A. F. Morpurgo, Phys. Rev. Lett. **93**, 146405, (2004).

- [236] J. Hubbard, J. B. Torrance, Phys.Rev. Lett. **47**, 1750, (1981).
- [237] T. Egami, S. Ishihara, M. Tachiki, Science **261**, 1307, (1994).
- [238] G. Ortiz, R. Martin, Phys. Rev. **B49**, 14202, (1994).
- [239] R. Resta, S. Sorella, Phys. Rev. Lett. **74**, 4738, (1995); *ibid.* **82**, 370, (1999).
- [240] M. Fabrizio, A. O. Gogolin, A. A. Nersesyan, Phys. Rev. Lett. **83**, 2014, (1999).
- [241] T. Wilkens, R. M. Martin, Phys. Rev. **B63**, 235108, (2001).
- [242] C. D. Batista, A. A. Aligia, Phys. Rev. Lett. **92**, 246405, (2004).
- [243] A. Garg, H. R. Krishnamurthy, M. Randeria, Phys. Rev. Lett. **97**, 046403, (2006).
- [244] N. Paris et al., Phys. Rev. Lett. **98**, 046403, (2007).
- [245] S. S. Kancharla, E. Dagotto, Phys. Rev. Lett. **98**, 016402, (2007).
- [246] D. Vollhardt, „Perspectives in Many-Particle Physics”, Proc. CXXI Enrico Fermi Internat. School, Varenna-1992, Nort-Holland, Amsterdam, 1994, pg. 31.
- [247] R. B. Laughlin, Phys. Rev. Lett. **50**, 1395, (1983).
- [248] R. Moessner, A. Ramirez, Phys. Today **59**(2), 24, (2006).
- [249] L.D.Landau, E.M.Lifsic, Elméleti Fizika IX., Stat. Fizika II., Tankönyvkiadó, 1981.
- [250] K. Maki, M. Sakurai, Progr. Theor. Phys. **47**, 1110, (1972).
- [251] M. Abramowitz, I. Stegun, Spravochnik po specialnie functiam, Nauka, 1979.
- [252] I. M. Rijik, I.S. Gradstein, Tablici integralov, sum, rjadov i proizvedenij, Moskva, 1951.
- [253] A. P. Prudnikov, Y. A. Brychkov, O. I. Marichev: Integrals and Series Vol.1., Gordon and Breach Science Publishers New York, 1986, 439 old., 2.5.27.15 kifejezés.
- [254] F. Gebhard, Phys. Rev. **B41**, 9452, (1990).
- [255] H. G. Bohn, W. Zinn, B. Dorner, A. Kollmar, Phys. Rev. **B22**, 5447, (1980).
- [256] G.Eiselt, J.Kotzler, H.Maletta, D.Staufner, K.Binder, Phys.Rev. **B19**, 2664, (1979).
- [257] Florian Gebhard, The Mott metal-insulator transition, Springer Tracts in Modern Physics Vol. 137, Springer, Berlin, 1997, pg.7.
- [258] F.H.L. Essler, V.E. Korepin, K. Schoutens, Nuclear Physics **B384**, 431, (1992).
- [259] K. Miyake, T. Matsura, H. Jichu, Y. Nagaoka, Progr. Theor. Phys. **72**, 1063, (1984).
- [260] H.Jichu, T.Matsuura, Y.Kuroda, Progr.Theor.Phys. **72**, 366, (1984); T.Matsura et al. Progr. Theor. Phys. **72**,402,(1984); K.Miyake et al. Progr.Theor.Phys. **72**, 652, (1984).
- [261] M. Gulácsi, Z. Gulácsi, Solid. State Commun. **56**, 1059, (1985).
- [262] Z.Fisk, et al. Nature **320**, 124, (1986); H.R.Ott et al. Phys.Rev.Lett. **52**, 1551, (1984).
- [263] M. Gulácsi, Z. Gulácsi, Solid State Commun. **64**, 1075, (1987).
- [264] P.Thalmeier, G.Zwicknagl in „Unconventional Superconductivity and Magnetism in Lanthanide and Actinide Intermetallic Compounds”, Handbook on the Physics and Chemistry of Rare Earths, Elsevier, 2003., (cond-mat/0312540), pg. 281.
- [265] B. Dóra, K. Maki, A. Virosztek, Phys. Rev. **B66**, 165116, (2002).
- [266] M. Stier, S. Henning, W. Nolting, Jour. Phys. Cond. Mat. **23**, 1, (2011).
- [267] M. Gulácsi, Z. Gulácsi, Jour. Magn. Magn. Matter. **76-77**, 83, (1988).
- [268] Z. Gulácsi, M. Gulácsi, V. Tosa, Jour. Magn. Magn. Matter. **76-77**, 516, (1988).
- [269] E. P. Nahmedov, M. Hüner, Physica **C299**, 301, (1998); A. Kuzemsky, I. Kuzemskaya, Physica **C383**, 140, (2002).

- [270] M. Inoue et al. Jour. Phys. Soc. Jpn. **56**, 3622, (1987).
- [271] G. Gorski, J. Mizia, K. Kucab, ArXiv Cond-Mat/0410632.
- [272] V. Taufour et al., Phys. Rev **B89**, 220509(R), (2014); S. S. Tinchev, Physica C. **470**, 626, (2010).
- [273] M. Gulácsi, Z. Gulácsi, Phys. Rev. **B42**, 3981, (1990).
- [274] M. Gulácsi, Z. Gulácsi, Int. Jour. Mod. Phys. **B1**, 1101, (1988).
- [275] Z. Gulácsi, M. Gulácsi, Int. Jour. Mod. Phys. **B1**, 1107, (1988).
- [276] Z. Gulácsi, M. Gulácsi, Phys. Rev. **B40**, 708, (1989).
- [277] M. Gulácsi, A. R. Bishop, Z. Gulácsi, Physica **C244**, 87, (1995).
- [278] M. Gulácsi, Z. Gulácsi, Phys. Rev. **B39**, 714, (1989); Solid State Commun. **90**, 51, (1994).
- [279] G. Czycholl, S. Doniach, Jour. Magn. Magn. Matter. **47-48**, 17, (1985).
- [280] K. Takeda, T. Kohara, Phys. Lett. **A106**, 321, (1984).
- [281] G. C. Psaltakis, E. W. Fenton, Jour. Phys. **C16**, 3913, (1983).
- [282] M. Sigrist, K. Ueda, Rev. Mod. Phys. **63**, 239, (1991); A. Amato, Rev. Mod. Phys. **69**, 1119, (1997).
- [283] K. H. Benneman, J. B. Ketterson Eds., „The Physics of Superconductors. Vol.II. Superconductivity in Nanostructures, High T_c and Novel Superconductors, Organic Superconductors”, Springer-Verlag 2004, (Fejezet: P. S. Riseborough, G. M. Schmiedeshoff, J. L. Smith, Heavy-Fermion Superconductivity), pg. 899.
- [284] K. Kubo et al. Phys. Rev. **B75**, 224509 (2007).
- [285] R. M. Fernandes, J. Schmalian, Phys. Rev. **B82**, 014521 (2010).
- [286] S. K. King et al. IEEE T Magn. **48**, 4247 (2012).
- [287] H. L. Alberts, et al. Jour. of Phys. Condens. Matter. **3**, 1793, (1991).
- [288] E. Fawcett et al. Rev. Mod. Phys. **66**, 25, (1994).
- [289] K. Held, I. A. Nekrasov, G. Keller et al., Phys. Newsletter **56**, 65, (2003).
- [290] K. Held, Advances in Phys. **56**, 829, (2007).
- [291] H. Watanabe, M. Ogata, Phys. Rev. **B81**, 113111, (2010).
- [292] A. Avella, Eur. Phys. Jour. **B87**, 45, (2014).
- [293] H. Yokoyama, Progress of Theor. Phys. **108**, 59, (2002).
- [294] D. Vollhardt, in „Perspectives in Many-Body Physics”, International School of Physics Enrico Fermi - Course CXXI, edited by R. A. Broglia, J. R. Schrieffer and P. F. Bortignon, North-Holland, Amsterdam–Oxford–New York–Tokyo, 1994, ref. 54, pg. 92.
- [295] B. Hetenyi, E. G. Evertz, W. von der Linden, Phys. Rev. **B80**, 045107, (2009); B. Hetényi, Phys. Rev. **B82**, 115104, (2010).
- [296] J. Buenenrann et al., Europhys. Lett. **98**, 27006, (2012).
- [297] K. W. Hinke et al. Science **241**, 1319, (1988), ibid. **244**, 562, (1989).
- [298] R. E. Honig, J. Chem. Phys. **22**, 124, (1954).
- [299] S. N. Schaner et al. Phys. Rev. Lett. **65**, 625, (1990).
- [300] J. Berkowitz, W. A. Chupka, J. Chem. Phys. **40**, 2735, (1964).
- [301] P. P. Radi et al., J. Chem. Phys. **88**, 2809, (1988).
- [302] G. von Helden et al., Science **259**, 1300, (1993); J. Chem. Phys. **95**, 3835, (1991).

- [303] H. G. Bohm, W. Zinn, B. Dömer, A. Kollmar, Phys. Rev. **B22**, 5447, (1980).
- [304] G. Eiselt, J. Kotzler, H. Maletta, D. Staufer, K. Binder, Phys. Rev. **B19**, 2664, (1979).
- [305] M. Gulácsi, Z. Gulácsi, lásd „Exactly solvable models in statistical mechanics: historical perspectives and current status, eds. C. King and F. Y. Wu, Series on Advances in Statistical Mechanics, Vol. 13, World Scientific, 1997, pg. 115-121.
- [306] G. Opposits, Z. Gulácsi, Phil. Mag. **B81**, 21, (2001).
- [307] M. Hunyadi, Z. Gulácsi, Phys. Rev. **B53**, 2326, (1996); I. Daruka, Z. Gulácsi, Phys. Rev. **E58**, 5403, (1998); E. Kovács, Z. Gulácsi, Phil. Mag. **B81**, 341, (2001); E. Kovács, Z. Gulácsi, Phil. Mag. **86**, 1997, (2006); R. Trencsényi, Z. Gulácsi, ibid. **94**, 2195, (2014).
- [308] J. M. Wills, O. Eriksson, A. M. Boring, Phys. Rev. Lett. **67**, 2215, (1991).
- [309] T. Ito et al. Phys. Rev. **B59**, 8923, (1999).
- [310] A. Avela, Eur. Phys. Jour. **B87**, 45, (2014).
- [311] A. A. Lopes et al., Phys. Rev. **B89**, 235418, (2014).
- [312] M. Kollar, R. Strack, D. Vollhardt, Phys. Rev. **B53**, 9225, (1996).
- [313] T. Hotta, Phys. Rev. **B67**, 10448, (2003).
- [314] Z. Gulácsi, M. Gulácsi, Jour. of Phys. **A19**, 2123, (1986).
- [315] M. Gulácsi, Z. Gulácsi, Phys. Rev. **B33**, 3483, (1986).
- [316] S. Gupta et al., Physica **B355**, 299, (2005).
- [317] S. Gupta, S. Sil, B. Bhattacharya, Jour. of Phys. **C18**, 1987, (2006).
- [318] Xiao-Liang Liu et al., Physica **B383**, 226, (2006).
- [319] F. L. Tang, X. Zhang, Appl. Phys. Lett. **90**, 142501, (2007).
- [320] A. Mielke, H. Tasaki, Commun. Math. Phys. **158**, 341, (1993).
- [321] A. Mielke, Eur. Phys. Jour. B. **85**, 184 (2012); E. O. Osafie et al. Greener Jour. of Sci. Eng. and Technol. Res. **3**, 135, (2013); D. Baeriswyl, Ann. der Phys. (Berlin) **523**, 724, (2011); A. Maksymenko et al. Phys. Rev. Lett. **109**, 096404, (2012); A. A. Lopes et al. Phys. Rev. B. **89**, 235418, (2014); O. Derzhko et al. arXiv:1404.2230/2014; V. A. Khodel, arXiv:1406.3857/2014.
- [322] R. Trencsényi, E. Kovács, Zs. Gulácsi, Phil. Mag. **89**, 1953, (2009).
- [323] I. Chalupa, Z. Gulácsi, Jour. of Phys.: Condens. Matter. **19**, 386209, (2007).
- [324] Zs. Gulácsi, M. Gulácsi, Aditi Journal of Mathematical Physics **4**, 44, (2013); M. Gulácsi, Gy. Kovács, Zs. Gulácsi, Phil. Mag. Lett. **94**, 269, (2014).
- [325] E. Kovács, R. Trencsényi, Zs. Gulácsi, IOP Conf. Series **47**, 012048, (2013).
- [326] D. L. Jie, Z. Yuan, F. S. Wei, Chinese Phys. B. **23**, 027502, (2014); A. Ralko, G. Bouzerar, Europhys. Lett **101**, 47003, (2013); N. B. Kopnin, M. Ijas, A. Harju, Phys. Rev. B. **87**, 140503, (2013); O. Derzhko, J. Richter, O. Krupnitska, Phys. Rev. B. **88**, 094426, (2013); A. Maksymenko et al., Phys. Rev. Lett. **109**, 096404, (2012).
- [327] M. Lundberg, Y. Nishimoto, S. Irle, Int. Jour. Quant. Chem. **112**, 1701, (2012).