

dc\_890\_14

AKADÉMIAI DOKTORI ÉRTEKEZÉS TÉZISEI

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

Dr. Gulácsi Zsolt

Debreceni Egyetem  
Elméleti Fizikai Tanszék

Debrecen, 2014

## I. BEVEZETÉS

A PhD fokozatomat (tematika a rendezetlen, többnyire fagyott rendszerekkel volt kapcsolatos) 1985-ben szereztem a Bábes-Bolyai Tudományegyetemen, Kolozsváron. Ezt minősítette Kandidátusi fokozattá a Tudományos Minősítő Bizottság Budapesten, 1993-ban. Az itt bemutatott tézisek így az 1985-ös évet követő majdnem 30 éves tudományos tevékenység megfogalmazott eredményeiből válogatnak koherens módon a megválasztott tematika alapján.

## II. A KUTATÁSOK ELŐZMÉNYE

Sokrészecskés, kvantummechanikai és kölcsönható szilárdtestfizikai rendszerek kvantumtérelméleti módszerekkel vett, vagy modellszinten pontos elméleti tanulmányozása – terület mely tudományos tevékenységemet 1985 után körvonalazza – Debrecenbe érkezésem előtt, a Debreceni Egyetemen, tudomásom szerint nem folyt. Az e tárgykörbe tartozó rendszerek rendeződési formáinak és e folyamatok törvényszerűségeinek tanulmányozása azonban világszinten komolyan zajlott és az érdeklődés központjába állt, hiszen a nyomon követett periódusban több olyan anyagcsoport felfedezése történt amely különös tulajdonságokkal rendelkező és több esetben új rendeződési lehetőségeket hozott napvilágra. E rendszerek közé sorolhatóak például a nehézfermionos anyagok, magashőmérsékletű szupravezetők, nagy magnetoellenállást mutató rendszerek, erősen korrelált rendszerek, vezető polimérek, és nem utolsósorban mesterségesen előállított rendszerek mint pl. optikai rácsokban kialakított konfigurációk. Ezt a háttérrel, amely ösztönző kérdésselvetései mellett a kutatás zajlott, részletesen az értekezés II. fejezete mutatja be.

## III. A VIZSGÁLATOK CÉLKITŰZÉSEI

A témakör a sokrészecskés rendszerek tág értelemben vett rendezettségére való törekvésének leírása. A célkitűzés ezen folyamat jellemezhetőségének fejlesztése,

sokszínűségének kidomborítása, törvényszerűségeinek feltárása, leírási lehetőségeinek fejlesztése, szabályosságainak kimutatása, új rendeződési formák észrevétele, leírási módszertanának továbbfejlesztése.

A tanulmányozás vonala a korrelációs hatások erősödésének, és ezen hatások a leírás szintjén vett mind pontosabb és pontosabb figyelembevételének útját követi. Az elemzés során nemcsak az a fontos hogy a jelenség fizikai háttere és mikéntje láthatóvá váljon, hanem az is, hogy a felhasznált módszer maga mennyire képes számot adni a folyamatról, és mindezt milyen kvalitással teszi.

Az évek multával a tanulmányozott folyamatokban az erős kölcsönhatási hatások és a korreláltság fontosságának kidomborodása következtében, a jellemzés szintjén fokozatosan hangsúlyozottabbá vált a munkámban a pontosság, a közelítések elhagyása. Ennek következtében, a tanulmányozott periódus két egymáshoz kapcsolódó, de módszertani eljárásaiban elkülöníthető szakaszra bomlik: az első évtized a különböző közelítések alkalmazásának időszaka, míg a második rész, terjedelmének nagyságrendjében nagyjából kétszer akkora időszak, a közelítésmentesség periódusa.

#### IV. ALKALMAZOTT MÓDSZEREK

A közelítéses jellemzések a szilárdtestfizika tárgykörét képező sokrészecskés rendszerek kvantumtérelméleti leírásából származó  $T = 0$  és  $T \neq 0$  hőmérsékleten vett Green-függvény technikájának fegyvertárára alapoznak (VI,VII,VIII. fejezetek), illetve variációs jellegűek (IX, X. fejezetek). Az utóbbiak közül, a X. fejezetben alkalmazott Gutzwiller hullámfüggvénnyel  $D > 1$  dimenzióban vett, és más közelítéseket nem alkalmazó számolási módszer saját fejlesztésű.

A közelítésmentes jellemzések, figyelembe véve hogy sokrészecskés többnyire nem egydimenziós kvantummechanikai rendszerekről van szó, majdnem teljes egészében szűz talajon formálódtak, technikai és többször elvi lépéseikben is saját fejlesztésben kidolgozott eljárások. Ezen alkalmazott módszerek közül az értekezés kettőt példáz, mégpedig a) a

lejátszódó folyamat definíciószerű értelmezése, majd a definíció rigurózus keretek között vett matematikai nyomonkövetése (hőmérsékletfüggő fonalszerű klaszternövekedés jellemzése, XI. fejezet), b) a Hamilton operátor pozitív szemidefinit formára való átalakítása, a levezetett formához tartozó legkisebb energiájú és részecskeszám függő sajátállapotok megkeresése, majd ezek fizikai tulajdonságának feltárása és jellemzése (XII - XVII fejezetek).

## V. ÚJ TUDOMÁNYOS EREDMÉNYEK

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 adóttak. 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 egyrészecske (hopping) és kétrészecske (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 létezik 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 kétsávú 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 részecskeszám 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 kiskoncentrációs rendszerben a részecskék közötti átlagos távolság sokkal nagyobb mint a részecskék 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 ilyen szerű 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 egyrészesecske 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 alapállapokok jelennek meg. Azt is megmutattam, hogy a sakktábla fázis egy specifikus diagonális stripnak 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 megemlítésre 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 ilyen szerű jelenség nemcsak pentagon láncok esetében, hanem sokkal bonyolultabb láncok esetében is megjelenik [24]. 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 hatást [6]. 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 jelen [6].

B.9. Eljárást dolgoztam ki mely alkalmazható tetszőleges dimenziós sokrészesecsés 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].

## VI. A TÉZISEK ALAPJÁUL SZOLGÁLÓ KÖZLEMÉNYEK

1. Z. Gulácsi, M. Gulácsi, *Advances in Physics* **47**, 1, (1998); Theory of phase transitions in two-dimensional systems.

2. Z. Gulácsi, *Eur. Phys. Jour.* **B30**, 295, (2002); Exact ground state for the periodic Anderson model in  $D = 2$  dimensions at finite value of the interaction and absence of the direct hopping in the correlated  $f$ -band.

3. Z. Gulácsi, *Phys. Rev.* **B66**, 165109, (2002); Plaquette operators used in the rigorous study of the ground states of the periodic Anderson model in  $D = 2$  dimensions.

4. Z. Gulácsi, *Phil. Mag. Lett.* **84**, 405, (2004); Exact ground state for the generic periodic Anderson model around half-filling.

5. Z. Gulácsi, *Phys. Rev.* **B69**, 054204, (2004); Exact multi-electronic electron-concentration dependent ground-states for disordered two-dimensional two-band systems in presence of disordered hoppings and finite on-site random interactions.

6. Z. Gulácsi, *Phys. Rev.* **B77**, 245113, (2008); Delocalization effect of the Hubbard repulsion in exact terms and two dimensions.

7. Z. Gulácsi, M. Gulácsi, *Phys. Rev.* **B44**, 1475, (1991); Analytic description of the Hubbard model in  $D$ -dimensions with the Gutzwiller wave function.

8. Z. Gulácsi, M. Gulácsi, B. Jankó, *Phys. Rev.* **B47**, 4168, (1993); High order perturbation expansion for the two-dimensional Hubbard model using the Gutzwiller wave function.

9. Z. Gulácsi, M. Gulácsi, *Phil. Mag.* **B69**, 437, (1994); Diagrammatic expansion of  $\phi^4$  theory and lattice models up to eighth order.
10. Z. Gulácsi, R. Strack, D. Vollhardt, *Phys. Rev.* **B47**, 8594, (1993); Accurate variational results for the symmetric periodic Anderson model in  $D = 1, 2, 3$  dimensions.
11. Z. Gulácsi, D. Vollhardt, *Phys. Rev. Lett.* **91**, 186401, (2003); Exact insulating and conducting ground states of a periodic Anderson model in three dimensions.
12. Z. Gulácsi, D. Vollhardt, *Phys. Rev.* **B72**, 075130, (2005); Exact ground states of the periodic Anderson model in  $D = 3$  dimensions.
13. Z. Gulácsi, A. Kampf, D. Vollhardt, *Phys. Rev. Lett.* **99**, 026404, (2007); Exact many-electron ground states on the diamond Hubbard chain.
14. Z. Gulácsi, A. Kampf, D. Vollhardt, *Progr. Theor. Phys. Suppl.* **176**, 1, (2008); Exact many-electron ground states on diamond and triangle Hubbard chains.
15. Z. Gulácsi, M. Gulácsi, *Phys. Rev. Lett.* **73**, 3239, (1994); Exact solution for a chainlike cluster growth model.
16. Z. Gulácsi, M. Gulácsi, *Phys. Rev.* **B73**, 014524, (2006); Exact stripe, checkerboard, and droplet ground states in two dimensions.
17. Z. Gulácsi, M. Gulácsi, I. Pop, *Phys. Rev.* **B37**, 2247, (1988); Enhancement of the superconducting critical temperature in layered compounds.
18. Z. Gulácsi, M. Gulácsi *Phys. Rev.* **B36**, 699, (1987); Spin-density waves in heavy-fermion compounds: A theoretical study.
19. M. Gulácsi, Z. Gulácsi, *Phys. Rev.* **B36**, 748, (1987); Theoretical description of the spin-density waves in heavy-fermion systems.
20. M. Gulácsi, Z. Gulácsi, *Phys. Rev.* **B39**, 12352, (1989); Superconductivity and spin-density wave in heavy-fermion systems.
21. M. Gulácsi, Z. Gulácsi, *Phys. Rev.* **B33**, 6147, (1986); Theory of coexistence between itinerant-electron antiferromagnetism and superconductivity.
22. Z. Gulácsi, A. Kampf, D. Vollhardt, *Phys. Rev. Lett.* **105**, 266403, (2010); Route to ferromagnetism in organic polymers.

23. Z. Gulácsi, *Int. Jour. Mod. Phys.* **B27**, 1330009, 1, (2013); Exact ground states of correlated electrons on pentagon chains.
24. Z. Gulácsi, *Eur. Phys. Jour.* **B87**, 143, (2014); Interaction-created effective flat bands in conducting polymers.
25. Z. Gulácsi, *Jour. of Phys. Conf. Ser.* **410**, 012011, (2013); Exact results for non-integrable systems.