

VÁLASZ CSORDÁS ANDRÁS, MTA DOKTORA, BÍRÁLATÁRA

I. BEVEZETŐ

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

Megjegyzés és kérdés nagyon sok volt, így válasz is sok adódott. Ezért, az áthivatkozások könnyebb nyomonkövethetősége végett, minden válasz külön számot kapott, amely a válasz szó után zárójelben található (és többször több részre van felbontva).

A válaszokat 3 külön fejezet (2-4 fejezetek) tartalmazza. A második fejezet a módszerek bemutatásával kapcsolatos megjegyzésekre és kérdésekre válaszol, és két alfejezetre van bontva, a közelítéssel és az egzakt megoldásokat eredményező módszereknek megfelelően. A harmadik fejezet közvetlenül a tézispontokra vonatkozó megjegyzésekre és kérdésekre reagál. Mindezek után, mikor már a disszertáció több részlete is ismert, az utolsó, negyedik fejezetben válaszolok a B.2-B.9 tézispontokra vonatkozó általános megjegyzésekre, amelyek a bírálat 9-ik oldalán találhatók.

A bíráló által kiemelt helyesírási hibákkal kapcsolatban csak azt szeretném elmondani, hogy sajnálom hogy ez így történt, és hogy 18 és 38 éves korom között, intenzíven, a magyar nyelvet írásban nem tudtam használni. Ezt nem mentségnek, hanem megjegyzésnek szántam.

II. A MÓDSZEREK BEMUTATÁSÁVAL KAPCSOLATOS KÉRDÉSEK

A. Közelítéssel nyert eredmények módszerei:

Itt IV.A.2. fejezetben (23. oldal) bemutatott Green függvényes módszer bevezetésével kapcsolatban voltak megjegyzések.

I.) IV.A.2 fejezetre vonatkozó első megjegyzések, második bekezdés 5-ik oldal:
A (3)-as egyenletre vonatkozó megjegyzések.

Válasz: (1)

1.1:

A (3)-as összefüggés (24. oldal) második tagjában a felső határ csak $T \rightarrow 0$ esetben végtelen, amúgy pedig ténylegese $\beta\hbar$. Köszönöm az észrevételt.

1.2:

A megjegyzés itt az volt, hogy a (3)-as alatti 3-ik sor több rossz állítást is tartalmaz. Ez a harmadik sor a következő (az extra megjegyzés zárójelben van): “A $T = 0$ esetben (2) egyenletben (ez a $T > 0$ Gorkov egyenlet) $i\omega_n \rightarrow \omega$ változtatás szükséges, hol ω a t változónak”

A (3)-as egyenlet alatti harmadik sorban egyetlen specifikáció hiányzik, és pedig az, hogy a változtatás után, a (2)-es egyenletből eredményül kapott Green-függvények nevezőjében, a pozitív pólus esetében $\omega + i0$, a negatív pólus esetében pedig $\omega - i0$ kerül az ω változó helyébe (lásd Landau-Lifshitz, Statisztikus Fizika II, Pergamon Press, 41-es paragrafus, 167,168-as oldalak, a 41.14-es képlettől a 41.19-es képletig).

II.) IV.A.2 fejezetre vonatkozó második megjegyzések, második bekezdés, 4-ik sor, 5-ik oldal: A (4)-es egyenletre vonatkozólag a következő megjegyzés áll: Az átlagtér közelítés nem az, ahogy (4) sugallja, mert például ha \hat{O}_1 és \hat{O}_2 keltő vagy eltüntető operátor, és a rendszer normál állapotban van, akkor (4) jobb oldala zérus (ami rossz eredményre vezetne).

Válasz: (2)

Ezt a megjegyzést nem értettem, hiszen a (4)-es képlet utáni megjegyzésekben, az értekezés 24-ik oldalán, a (4)-es képlet alatti 9-ik sorban ez áll: “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 sokrészecskés 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, ahol az ily módon nyert operátoriális tagok járulékait szorzó koefficiensek két operátoros szorzatok átlagértékeiből épülnek fel.”

Azaz a disszertációban olyan nincs, hogy \hat{O}_1 és \hat{O}_2 keltő vagy eltüntető operátor lenne (4) alkalmazásakor.

III.) IV.A.2 fejezetre vonatkozó harmadik megjegyzések, második bekezdés, 7-ik sor, 5-ik oldal: A (4)-es egyenletre vonatkozólag a következő megjegyzés áll, idézem: Ennél az átlagtér közelítés szofisztikáltabb.

Válasz: (3)

A (4)-es közelítést, amint az közvetlenül a (4)-es egyenlet alatt le van az értekezésben írva, a Hamilton operátorban végeztem el mindig, amiután az eredményül kapott effektív Hamilton operátor (\hat{H}_{eff}), a (2) mozgásegyenletbe (a Gorkov egyenletbe) került. Most a Gorkov egyenlet első lépése az (lásd jobboldal, második tag), hogy az \hat{A} operátor és a Hamilton operátor (mostmár \hat{H}_{eff}) kommutátorát kiszámoljuk. Ebből a kommutátorból, a Hamilton operátorban megjelenő tetszőleges konstans kiesik. Ezért, a Gorkov egyenletben, a (4) jobboldalán sokszor megjelölt $-\langle\hat{O}_1\rangle\langle\hat{O}_2\rangle$ tag nem számít, és az eredmény, a mean-field minden “szofisztikáltságát” tartalmazza majd.

Ezen túlmenően, amint azt a 2-es válaszban, és ezáltal a disszertáció 24-ik oldalán olvashatjuk, idézem: “a négy operátoros tagot két operátoros tagok összegére bontja”, azaz a felbontás sokféle képpen történhet, amelyből azon tagokat vesszük figyelembe amelyek végül a legkisebb energiát eredményezik (lásd P. Fazekas, Lecture Notes on Electron Correlation and Magnetism, World Scientific, 2003, 352-es oldal).

IV.) IV.A.2 fejezetre vonatkozó negyedik megjegyzés, második bekezdés, 8-ik sor, 5-ik oldal: Idézem: (7) szintén problémás: $G(AB)$ ahogy jelölve van (nincs megmondva, hogy Matsubara-reprezentációban vagyunk), n-független, így kivihető a szumma elé.

Válasz: (4)

A (7)-es összefüggés alatt ott áll leírva, hogy $G(AB)$ a $T \neq 0$ Green-függvény. A (2) Gorkov egyenletből pedig látszik, hogy a $T > 0$ Green-függvény Matsubara reprezentációban van.

Hadd említsem meg a bíráló 6. oldalán a 6. sorban tett megjegyzést is e ponton, miszerint “a triviális dolgok bőségesen kerülnek ismertetésre”. Pl. itt, ezt próbáltam elkerülni.

B. Egzakt eredmények levezetésénél alkalmazott módszerek:

Az egzakt eredmények levezetésénél alkalmazott módszerekre vonatkozólag megjegyzések és kérdések az V.A és V.B fejezettel kapcsolatban fogalmazottak meg. Ezekkel kapcsolatos válaszok kerülnek most bemutatásra.

I.) V.A fejezetre vonatkozó kérdés bevezetése, 5-ik oldal: A kérdés felvezetése:

...Ugyanez mondható el az V.A. fejezetre, amelyik egy fonalas modell tanulmányozásánál használt módszert ismerteti. Nem világos, hogy ez saját eredmény-e, illetve irodalmi eredményt ismertet. A témában írt saját [11] publikáció (hisz ez egy PRL), nincs ilyen részletes mint ez a rész.

Kérdés: Kérem ismertesse, hogy az V.A. fejezetben leírt részekből melyik tartalmaz saját eredményeket, illetve mi volt a [11] cikk megírásakor már ismert.

Válasz: (5)

Úgy ahogy azt a 63. oldalon ismertettem, az V.A. fejezet legelején található (177) és (178)-as képletetek Chandrasekhar geometriai valószínűségei [129]. Ezen két képletből a (179)-es összefüggés automatikusan következik, így mások is használták [130]. Azonban, a 64-es oldal alsó részén kezdődő “Klaszterképződési Modell” paragrafustól, egész a 72-ik oldal alján lévő “7. Klaszter spin” alfejezetig, az egész az én eredményem. Ehhez azt kell még hozzátennem, hogy azt az ötletet, hogy a $k_B T$ termikus energiaadag klaszter kötést vág, Abrikosov alkalmazta először [130,131,132], és ezt az “Előzmények” II.B.1. alfejezetben, a 14-ik oldalon le is írtam. Megjegyzem, hogy Abrikosov a spin-üveg tanulmányozására használta a geometriai előfordulási valószínűségeket, és a kétkomponensű klaszterhez [(181) képlet] vezető összefüggést fel is írta, de távolságfüggésében (azaz kiintegrálatlanul) használta ([130], 214-es oldal). Ennek megfelelően, a teljes valószínűségi tér levezetése, az összes valószínűségek explicit formájának levezetésével, és a valószínűségi tér fennállásának bizonyításával, az én munkám eredménye.

Most a klaszter spin kiszámításának eljárása általánosságában véve ismertnek tekinthető. De ezen túlmenőleg, az eljárás alkalmazása a konkrétan levezetett klaszterekre (a 72. oldalon kezdődő 7. alfejezet, egész a 78. oldalig, azaz a 7. alfejezet végéig), szintén az én munkám eredménye.

A 8. alfejezet szuszceptibilitási összefüggése, ha a klaszter spin és az előfordulási valószínűségek adottak [(259)-es képlet a 78. oldalon] szintén ismertnek tekinthető. De ennek, a levezetett klaszter spin és előfordulási valószínűségekre vett alkalmazása (8-10. alfejezetek, 78. oldaltól a 81. oldalig, azaz az V.A. fejezet végéig, az alkalmazásokkal együtt), szintén az én munkám eredménye. Ebben a részben benne van a (265)-ös képlet, amiből a hőmérsékletfüggés származik, azaz: $k_B T$ energiaadag ha eléri az (i, j) elemek közötti kötési energiát, akkor a kötést elvágja. Amint említettem, ezt Abrikosov alkalmazta először.

Az előzményeket illetően, hogy mi volt [11] megírásakor ismert, az előbbi szöveg megadja (mindezen információ, igaz nem ennyire részletezve, a II.B.1. “Előzmények” alfejezetben megtalálható).

Még azt szeretném itt megemlíteni, hogy a filiform klaszterekre vonatkozó eredmények a XI-ik fejezetben találhatóak, és bennük egy lényegi rész maga a modell. De a XI-ik fejezet a “Saját modell eredmények” címszó után következik, és ez nem lenne így, ha a modell nem lenne az enyém.

II.) V.B fejezetre vonatkozó kérdések, megjegyzések, 6-ik oldal, második bekezdés: Igen, kijött, hogy a szemléltető példában is már hiba van.

Válasz: (6)

A módszer bemutatás a 81-es oldalról kezdődik, és az alapgondolatok az első alfejezetben a 84-es oldalig vannak bemutatva. Ez a rész írja le az elvi eljárást. A 84-es oldalon egy szemléltető példa indul a pozitív szemidefinit formára való átalakításra vonatkozólag és a fedési egyenletek levezetésére, egy egyszerű esetben. Ez a rész két oldalon keresztül magyaráz, és levezeti a helyes transzformált formát, a helyes fedési egyenletek megadásával a (289)-es képleteket. Az elírás mindezek után, az egyszerű fedési egyenletek megoldásának szemléltetésében van. Sajnálom, hogy többszöri átnézés után se vettem észre.

III.) V.B fejezetre vonatkozó kérdések, megjegyzések, 6-ik oldal, harmadik bekezdés: Idézem: Ez az elsőszomszéd, másodszoyszéd kérdés az eredményeket tartalmazó részben lesz fontos: Egy olyan eredmény sincs az értekezésben, ahol csak elsőszomszéd ugrások lennének, mindig van valamekkora másodszoyszéd ugrás feltételezve azért, hogy a blokk-operátorokkal kifejezett Hamilton-operátor valamennyire szép legyen. A gyöngyszem ebből a szempontból a (494) képlet fölött használt csatolási együttható együtállás: $t_2/2 = t_{2x} = t_{2y} = t_{x\pm y}$, (mellette elsőszomszéd ugrás és hibridizációs tagok). Azaz csak igen-igen speciális esetekben lehet a módszert használni, a legegyszerűbb (csak elsőszomszéd ugrás) valószínűleg nehézségekbe ütközik. Ez viszont sokat levon a módszer értékéből (talán ez magyarázza a kollégák mérsékelt érdeklődését a témában).

Válasz: (7)

7.1:

A 88-as oldalon, részletesen el van magyarázva az a kidolgozott módszertani eljárás, amely

lehetővé teszi a másodsomszéd hopping és hibridizációs tagok kiejtését. A tézispontokra adott válaszok során erre részletes válasz is jelen van, mégpedig a B3 tézispont kérdéseire adott válaszban a [3]-as cikk kapcsán (17.3-as válasz), és a B2-B9 tézispontokhoz kapcsolódó II. és VIII-ik megjegyzésekre adott válaszban (40-es és 46-os válaszok), melyeket nem ismételek itt meg. A végeredmény az, hogy igenis lehet csak elsőszomszéd járulékokkal is számolni, lásd [3], vagy 40.2 választ.

7.2:

Hogy a blokk operátorokkal kifejezett Hamilton operátor mennyire szép, arról nehezen tudnék itt nyilatkozni. De azt el tudom mondani, hogy a disszertáció szemlélteti, hogy bármilyen itt használt Hubbard, vagy periodikus Anderson modell Hamilton operátor, többek között blokk operátorok segítségével, pozitív szemidefinit formára hozható, ha van benne másodsomszéd hopping, ha nincs. Továbbmenőleg, bármely valóságos fizikai rendszert (tehát olyan rendszert, amelynek véges alapállapot energiája van) leíró Hamilton operátort, pozitív szemidefinit formára tudunk alakítani [lásd: disszertáció 90-ik oldal E) alfejezet, vagy [23], 3-ik oldal, (1)-es összefüggés].

7.3:

A “gyöngyszemet” illető “csatolási együttható együttállást” illetőleg, hadd vegyük szemügyre a megadott $t_2/2 = t_{2x} = t_{2y} = t_{x\pm y}$, összefüggéseket, amelyek valójában, a disszertáció 179-es oldalán, a (494) összefüggés felett a következő képpen vannak leírva:

$$t_1 = t_x = t_y, t_2/2 = t_{2x} = t_{2y} = t_{y\pm x}/2, V_1 = V_x^{b,b'} = V_y^{b,b'}.$$

Itt összesen 7 egyenlőség áll. i) Itt az első két egyenlőség ugyanolyan atomból álló (2D) négyzögrácsot definiál és ezt az elsőszomszéd hoppingokra írja fel ($t_x = t_y$), melyeknek a jelölése t_1 lesz ($t_1 = t_x$). Tehát az első két egyenlőség a rácsot választja meg és jelöl. ii) Ha már a négyzögrács rögzítve van, akkor ennek megfelelő kell legyen a többi hopping és hibridizáció is: azaz $t_{2x} = t_{2y}$ (negyedik egyenlőség), és ezen ugrások jelölése $t_2/2 = t_{2x}$ (harmadik egyenlőség), a négyzög diagonális hoppingok egyenlősége $t_{y-x} = t_{y+x}$, illetve a figyelembe vett elsőszomszéd hibridizációk egyenlősége $V_x^{b,b'} = V_y^{b,b'}$ (hetedik egyenlőség), illetve ezek jelölése $V_1 = V_x^{b,b'}$ (hatodik egyenlőség). Azaz eddig az látható, hogy a 7 egyenlőségből, 6 darab a négyzögrács kelléke, és jelölés. iii) Egy egyenlőség marad, az ötödik: $t_{2x} = t_{y+x}/2$. Ez az egyedüli könnyítő feltétel ami jelen van. Lásd a 43-as válasz végét is a 41-ik oldalon, miszerint ezen egyenlőségnek, a fizikai háttérfolyamatok befolyásolásában, fizikailag, nincs jelentősége.

7.4:

A (494)-es képlet pedig, amint az a B8 tézisponthoz kapcsolódó első megjegyzésre adott válaszból (35-ös válasz), illetve a B2-B9 tézispontokhoz kapcsolódó V. megjegyzésre adott 43-as válaszból látszik, nem kondíciókat jelent, hanem a problémakörbe vett behelyezést, azaz arra a problémára állítja rá a Hamilton operátort, amit a XVII-ik fejezetben tanulmányozni szeretnénk, és amely a (494) egyenlet felett részletesen el van magyarázva. Terjedelme miatt ezt nem ismétlem itt meg (lásd 35-ös és 43-as válaszokat).

IV.) V.B fejezetre vonatkozó kérdések, megjegyzések, 6-ik oldal, utolsó bekezdés: Megjegyzés: A (296) jobb oldalának első tagja nem pozitív, hanem negatív definit (a negatív előjel miatt). Ha ezt a felbontást alkalmazzuk, akkor a jobb oldal első tagjához tartozó maximális sajátértékű megoldás lesz az alapállapot, nem pedig az, amelyiket $\hat{\Omega}_{i,\sigma}$ annihilálja. Ez az előjelkérdés több helyen visszaköszön. Érzésem szerint a módszer alkalmazhatósága függ minden csatolási állandó előjelétől.

Válasz: (8)

8.1:

A (296)-os egyenlőség azt magyarázza el a 89-es oldalon, hogy a fedési egyenleteket hogyan határozzuk meg az ott jellemzett $\hat{P}_n = \hat{\Omega}_n \hat{\Omega}_n^\dagger$ esetben. Azaz, (296) jobboldala nem szerepel sehol pozitív szemidefinit Hamilton operátor formában.

8.2:

Az, hogy $\sum_{i,\sigma} \hat{\Omega}_{i\sigma}^\dagger \hat{\Omega}_{i,\sigma}$ vagy $\sum_{i,\sigma} \hat{\Omega}_{i\sigma} \hat{\Omega}_{i,\sigma}^\dagger$ formát használjuk, az attól függ hogy milyen koncentráció tartományt akarunk leírni. Ez a disszertáció módszertani ismertetésében (V.B.3 alfejezet), a B) 91-ik oldal-tól a C) 93-ik oldalon keresztül, egész a 95-ik oldalig terjedő részben található meg. A tézispontoknál adott erre vonatkozó válasz a B7 tézispontot érítő III. válaszban (32-es válaszban) van. Ezen 32-es válasz hangsúlyozza, hogy előjelkövetelmény a fedési egyenletek levezetéséhez nincs kapcsolva. Az ami esetleg előjelkövetelést eredményez, az a fedési egyenlet konkrét megoldása. Példaként említem a XVI-ik fejezetben leírt $\sum_{i,\sigma} \hat{\Omega}_{i\sigma} \hat{\Omega}_{i,\sigma}^\dagger$ átalakítást (482)-es képlet 171-es oldal, melyre kapott fedési egyenletek a (484)-es képletben vannak a 172-ik oldalon. A fedési egyenletek konkrét megoldásából kapott kondíciókból az látszik, hogy a bemutatott esetben csak egyetlen hopping tag (a t_h) kell negatív legyen, hogy a megoldás teljesüljön. A 32-es válasz hangsúlyozza, hogy a fedési egyenletek jobb oldalán álló blokk operátor paraméterek szintén előjellel rendelkeznek, így

átvehetik a hopping tagok előjeleit. Lásd a konkrét példát 31.2 válaszban.

V.) V.B fejezetre vonatkozó megfogalmazott első kérdés, 7-ik oldal, első bekezdés: Mennyire egyértelmű (302) és (303) ? Én tetszőlegesen sok operátort el tudok képzelni, mert nem volt itt kimondva, hogy $\hat{X}_{n'}$ a keltő és eltüntető Fermi-operátorokat csak lineárisan tartalmazza (Az alkalmazásokban később csak ilyen volt).

Válasz: (9)

Indulásként csak azt jegyzem meg, hogy ahhoz hogy (303)-nak értelme legyen (azaz normálható legyen), $\hat{X}_{n'}^\dagger$ csak keltő operátorokat szabad tartalmazzon (vagy, mindig csak keltő operátorokat tartalmazó alakra hozható).

Most (302) nem egy összefüggés, hanem n_1 darab (és n_1 egy makroszkópikus szám), azaz amennyi a $\hat{P}_{i,\sigma} = \hat{\Omega}_{i,\sigma}^\dagger \hat{\Omega}_{i,\sigma}$ operátorok száma a \hat{H} -ba belépő $\sum_{i=1}^{n_1/2} \sum_{\sigma} \hat{\Omega}_{i,\sigma}^\dagger \hat{\Omega}_{i,\sigma}$ összegben. Ezen n_1 egyenletet tartalmazó egyenletrendszerre kell egy rögzített n' indexet tartalmazó $\hat{X}_{n'}^\dagger$ operátort meghatározni. Az téves elképzelés, hogy egy nagy n_1 számú egyenletet egy találomra odatett $\hat{X}_{n'}^\dagger$ operátor kielégít (Ha én jól értettem, erre mondja a bíráló, hogy "én tetszőlegesen sok operátort el tudok képzelni"). Ezeknek a $\hat{X}_{n'}^\dagger$ operátoroknak mindig egy specifikus formája van, amit együttesen az összes (tegyem hozzá hogy nagyszámú) $\hat{\Omega}_{i,\sigma}$ határoz meg. De ugyanakkor $\hat{X}_{n'}^\dagger$ sok van, és a különböző n' -hez tartozó $\hat{X}_{n'}^\dagger$ operátorokban mindig van valami közös (pl. hasonló formájuk van, de más-más csomóponton kezdődnek). De ez természetes is, mert egy Hamilton operátornak jólmeghatározott alapállapota lehet csak, és az itt kialakított $|\Psi_0\rangle$ -ból (lásd (303)) formálódik majd ki az alapállapot. Az így levezetett összes $\hat{X}_{n'}^\dagger$ operátort (303)-ba helyezve, triviálisan $\sum_n \hat{P}_n |\Psi_0\rangle = 0$ fennáll, tehát az induló, és alapállapoti hullámfüggvényt célzó Hilbert tér vektor (a tanulmányozott \hat{H} forma esetében) mindig (303).

Most a $\hat{X}_{n'}^\dagger$ kifejezését illetőleg (amit meg kell keresni, lehet hogy a bíráló így értette), lineáris tagokkal érdemes próbálkozni először (ha $\hat{\Omega}_{i,\sigma}$ formája nem speciális, mint a B3 tézispontnál adott [4]-re vonatkozó 17.4-es válasz esetében, de ott nem a most tárgyalt Hamilton operátor forma van jelen). A lineáris formák itt nem jelentenek összefonódás hiányt, hiszen egy rögzített n' -re vett $\hat{X}_{n'}^\dagger |0\rangle$ (nagyon speciális esetek kivételével) nem sajátvektor, és $\prod_{n'} \hat{X}_{n'}^\dagger |0\rangle$, az $\hat{X}_{n'}$ operátorokat felbontva, és a szorzást elvégezve, egy makroszkópikus számú tagot tartalmazó összeg, amelynek csak együtt van értelme, tehát összefonódott állapot. Ha lineáris tagokkal nem kapok (302)-re megoldást, akkor bilineáris

formákat kell keresnem, olyanokat, amelyek lineáris tagok szorzatára nem bonthatók fel. Hogy ezek milyenek, az fizikai jelentéssel bír [lásd pl. szupravezető fázis kimutatását ezzel az eljárással: L. G. Sarason, Phys. Rev. B75, 054504 (2007)].

VI.) V.B fejezetre vonatkozó megfogalmazott második kérdés, 7-ik oldal, második bekezdés: Általában hogyan keressük meg egy nemintegrálható, igen nagy szabadságfokú rendszerben a (305) halmazt? Mi van ha I_M üres? Mi van ha az alapállapot degenerált? Ekkor (307) megtalál egy megoldást, hogy találom meg a többit?

Válasz: (10)

10.1:

Egy sokrészecskés nemintegrálható rendszer, mindig nagyon sok szabadságfokkal rendelkezik. A (305) halmaz megkeresése a következőket jelenti: $\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2 + C$, ahol \hat{H}_1 és \hat{H}_2 pozitív szemidefinit operátorok, C egy skalár, és \hat{H}_1 magja megvan [$\ker(\hat{H}_1)$] (az előző pontban adott 9-es válasz utalt arra, hogy ezt hogyan lehet felépíteni, hiszen $\ker(\hat{H}_1)$ -et kifeszítő tagok levezetéséről volt ott szó, melyhez unicitásvizsgálatot is kapcsolni lehet). Ekkor meg kell nézni, hogy $\ker(\hat{H}_1)$ és $\ker(\hat{H}_2)$ -nek mi a közös metszete. A 92-es oldalon \hat{H}_2 formája nincs megadva explicit (csak $\hat{H}_2 = \sum_{n>n_1} \hat{P}_n$ tudott róla, az itt szereplő \hat{P}_n -ek viszont nagyon különböző formájúak lehetnek (attól függően, hogy mi a probléma). Általában, ezen új \hat{P}_n operátorok formájának ismeretében meg kell $\ker(\hat{H}_2)$ Hilbert alteret határozni, majd a $\ker(\hat{H}_1)$ és $\ker(\hat{H}_2)$ magok metszetét kell kiszámolni. Most akkor felmerül a kérdés, hogy $\ker(\hat{H}_2)$ (itt \hat{H}_2 oroszlánrészt a kölcsönhatási tagokból áll) meghatározása hogyan történik. Ebből a célból azt érdemes tenni, hogy a kölcsönhatási tagokat már előre ismert maggal rendelkező formákra kell alakítani. Pl., vegyük a 166. oldalon található (471) egyenlet felett négy sorral szereplő

$$\hat{P}_1 = \sum_{i=1}^{N_\Lambda} (\hat{n}_{i,\uparrow} \hat{n}_{i,\downarrow} - \hat{n}_{i,\uparrow} - \hat{n}_{i,\downarrow} + 1)$$

operátort, amely a Hubbard tagból volt kovácsolva. Ennek a magja olyan állapotokból áll, amelyek mindegyikében, minden csomóponton, legalább egy elektron szerepel. Tehát, ha ezt az operátort jelenítem meg \hat{H}_2 -ként, már ismerem, hogy $\ker(\hat{H}_2)$ pontosan milyen.

Namost, ha $\ker(\hat{H}_1)$ és $\ker(\hat{H}_2)$ -nek van közös metszete, ez abban nyilvánul meg, hogy van olyan $\prod_{n'} \hat{X}_{n'}^\dagger |0\rangle$ szorzat, amely $\ker(\hat{H}_2)$ -ben is benne van. Ezen n' indexekből alakul ki az I_M halmaz.

10.2:

Ha I_M üres (és feltételezzük hogy az induló Hamilton operátor egy valóságos fizikai rendszert jellemez), ez azt jelenti tapasztalataim szerint, hogy az eredeti Hamilton operátort $\hat{H}_1 + \hat{H}_2 + C$ formára transzformáló fedési egyenleteknek nincs megoldása. Ugyanis ha van fedési egyenlet megoldás, ez egy fázisdiagram tartományt jelent, és ott egy fizikai rendszert jellemző Hamilton operátornak kell legyen alapállapota. Ebbe a fázisdiagram tartományba beleszámítódik a koncentráció is, hiszen legtöbbször a C az N -függő, és ezáltal C is mozgatható. Azt már tapasztaltam, hogy I_M nem volt üres, de a megoldás nem ahhoz a koncentráció tartományhoz tartozott, ami engem érdekelt. Ilyenkor a pozitív szemidefinit felbontást kell megváltoztatni.

10.3:

Ha az alapállapot degenerált: Ilyesmi gyakran előfordul. Nézzük pl. a (307) alapállapotot a 92-es oldalon. Itt az $\hat{X}_{n'}^\dagger$ operátorok száma határozza meg a koncentrációt is (hogy a koncentráció ott van, ez jelezve van az egyenlet bal oldalán). Pl. ha az \hat{X}_n^\dagger operátorok lineárisak a keltő operátorokban, azaz egy elektront helyeznek el a rendszerbe, akkor N , a részecskeszám a bal oldalon, egyenlő az \hat{X}_n^\dagger operátorok számával (egyben az I_M halmaz elemeinek a számával). Most például ha a részecskeszám kisebb a csomópontok számánál, akkor megtörténhet az, hogy (307)-ben szereplő operátor szorzatnak részei is a $\hat{H}_2 = \sum_{n>n_1} \hat{P}_n$ magjában vannak. Pl. N részecskére telített ferromágneses állapotnál, az I_M halmaz általában úgy alakul ki, hogy az \hat{X}_n^\dagger operátorok spinje rögzül. Ekkor a (307)-ben lévő szorzat egy részhalmazának is rögzített a spinje, tehát szintén alapállapotot ad (itt általában a Hubbard U-s tag magja által megkövetelt dupla betöltés hiánya teljesül így). Mivel I_M -ből sok $N' < N$ részecskét tartalmazó részhalmaz alakítható ki rögzített N' -re (jelöljük ezeket a részhalmazokat $I_{\alpha,M}(N')$ -el), az alapállapot degenerált lesz. Ekkor, a degeneráció miatt (307) kifejezése

$$|\Psi_g(N' < N)\rangle = \sum_{\alpha} a_{\alpha} [\prod_{n' \in I_{\alpha,M}(N')} \hat{X}_{n'}^\dagger] |0\rangle$$

formára alakul, ahol a_{α} numerikus prefaktorok, a normálhatóság feltétele mellett tetszőlegesen, és a $|\Psi_{\alpha,N'}\rangle = \prod_{n' \in I_{\alpha,M}(N')} \hat{X}_{n'}^\dagger |0\rangle$ vektorok lineárisan függetlenek. A telített ferromágneses eset példáját követve, ha a különböző $I_{\alpha,M}(N')$ halmazok csomópontjai között fedés van (azaz a halmazok mind összeérnek), akkor a telített ferromágneses tulajdonság N' részecskeszámra is megmarad, ha nem, akkor nem marad meg.

10.4:

Kérdéscsoport utolsó kérdése: Ezen kérdéscsoport utolsó kérdése értelmezésem szerint azt kérdezi, hogy mi van ha $\hat{H}_1 = \sum_{n \leq n_1} \hat{P}_n$ magját, rögzített N részecskeszámra, nem egyedül csak a (307), hanem valami ismeretlen (307)-re ortogonális más vektorok és (307) együttese feszíti ki? Nos erről meg lehet győződni az unicitás vizsgálatával. Ebből a megfogalmazásból látszik, hogy itt a mag unicitása (azaz egyértelműsége) a fontos, és teszem ezt a megjegyzést azért, mert hamarosan az unicitásra vonatkozó kérdés is következik. Tehát, az unicitásvizsgálat azt ellenőrzi, hogy a magot (mint Hilbert alteret) kifeszítő összes lineárisan független komponens megvan-e vagy nincs. Nos ez a vizsgálat mutatja meg, hogy (307)-en kívül, a szóban forgó $\ker(\hat{H}_1)$ -nek van-e más komponense, vagy nincs. Ha az ember a (302) egyenrendszer megoldásait türelmesen végignézi, akkor nagy valószínűséggel ilyesmit nem talál (én nem találkoztam ilyesmivel). De ha találkozónék, azt tenném, hogy ellenőrizném, hogy a (307)-re ortogonális (és ugyanazon N részecskeszámhoz tartozó) állapotvektorok a mag részei-e, vagy sem.

VII.) V.B fejezetre vonatkozó megfogalmazott harmadik kérdés felvezetése, 7-ik oldal, harmadik bekezdés: Itt a 98-ik oldalon, a B1) pontban tett állításról van szó. Idézem a teljes szöveget:

Cseles az V.B.4 pontnak már a címe is: “Az unicitás igazolásának lehetősége”. Mintha a jelölt sem lenne biztos a dolgában és rettentően óvatoskodik, nem mondja, hogy amit leír az egy igazi bizonyítás. Itt konkrétan a következő problémám volt: (326) alatt azt mondja, hogy “ W_1^\dagger a $|V\rangle$ normálhatósági kikötése mellett tetszőleges”,... aztán (329)-ben kihozza eredményként W_1^\dagger formáját. Ennek első operátora rögtön a kernelbeli vektort kelt a vákuumból, míg (326) állítja elő a kernelbeli operátorok alakját. Számomra ebből az világos, hogy W_1^\dagger nem tetszőleges és olyan áthallásos érzésem van, mint a feltennénk, amit bizonyítani szeretnénk. Ezt természetesen nem állítom, mert ennek a fejezetnek a megértésére több órát is szántam, de egy idő után feladtam.

Válasz: (11)

11.1:

Az V.B.4. fejezet egy általános módszertani ismertető része ahol a Hamilton operátorról azt mondják hogy \hat{H} , és más konkrétumot, indulóféltben róla nem tudunk. Itt jelenik meg az a cím, hogy “Az unicitás igazolásának lehetősége”, miközben teljesen általánosan, a 95-ik

oldaltól a 96-ik oldal alján lévő A) pontig, bemutatásra kerül, hogy mit értünk itt unicitás alatt, még akkor is, ha az alapállapot degenerált, és ezt hogyan lehet bizonyítani (innen jön a cím). És a 96-ik oldal felülről számított 4-ik sorában [miközben (277)-ben $\hat{H} = \hat{P} + C$ van, és a 96-ik oldal második sorában \hat{P} jelentése meg van ismételve], ott áll: “A $|\Psi_g(N)\rangle$ megoldás akkor teljes, ha kifeszíti a $\ker(\hat{P})$ alteret”. Továbbá 6 sorral előbb le van írva: “Az unicitás tanulmányozása itt matematikai pontossággal azt jelenti, hogy megnézzük teljes e a levezetett $|\Psi_g(N)\rangle$ megoldás”.

11.2:

Az itteni előzmények: 1) $\hat{\Omega}_n$ a (278) formájú (lásd 83. oldal) annihilációs operátor lineárkombináció (lásd a megjegyzést a 98. oldal 2-ik sorában), amire mindig igaz, hogy $\hat{\Omega}_n \hat{\Omega}_n = 0$, 2) a részecskeszám rögzítve van N -re, 3) $\hat{P}_{\mathbf{i},\sigma} = \hat{\Omega}_{\mathbf{i},\sigma}^\dagger \hat{\Omega}_{\mathbf{i},\sigma}$, az n index pedig $n = (\mathbf{i}, \sigma)$.

Ennek következtében, ha az $|V\rangle = \hat{\Omega}_{\mathbf{i},\sigma} \hat{W}_1^\dagger |0\rangle$ (ez a (326)-os egyenlőség), és \hat{W}_1^\dagger operátor tetszőleges a $|V\rangle$ normálhatósági kikötése mellett és $N+1$ részecskét kelt, akkor az $\hat{\Omega}_{\mathbf{i},\sigma} \hat{\Omega}_{\mathbf{i},\sigma} = 0$ összefüggés miatt mindig $\hat{P}_{\mathbf{i},\sigma} |V\rangle = 0$. Azaz $|V\rangle \in \ker(\hat{P}_{\mathbf{i},\sigma})$ teljesül az előbb elmondott értelemben tetszőleges (bármilyen) \hat{W}_1^\dagger -re.

11.3:

A disszertáció azt állítja, hogy a $\ker(\hat{P}_{\mathbf{i},\sigma})$ mag bármely komponense amely N részecskeszámot kelt, (326) formára hozható, azaz felírható így. A 11.2 pont igazolta, hogy (326) az elmondottak értelmében tetszőleges \hat{W}_1^\dagger -re a magban van. A disszertáció megmutatja a (98)-ik oldalon, hogy ha kezdetben másképp is van felírva $\ker(\hat{P}_{\mathbf{i},\sigma})$ egyik komponense, akkor is (326) formára hozható, amint ez (329)-ből látszik.

VIII.) V.B fejezetre vonatkozó megfogalmazott harmadik kérdés, 7-ik oldal, negyedik bekezdés:

Kérdésfelvezetés: Érdekes az unicitás szó jelentése: eredetileg ez egyértelműséget jelent. Az alkalmazásokban van elfajult állapot (pl. az 1/4 rendszertöltés alatti számolásban az alapállapot elfajult).

Feltett kérdés: Ebben az V.B.4 részben kérem mondja meg mit ért unicitás alatt akkor, amikor elfajult állapot van ?

Válasz: (12)

Hogy mit kell érteni itt az unicitás fogalma alatt, azt már a VI. kérdéscsoportra adott utolsó válasz (10.4-es válasz) is érzékelteti: és pedig azt, hogy Hamilton operátor magja

egyértelműen meghatározott (és ezáltal egyértelműen ismert lesz az alapállapot is). (A használt unicitás fogalom a 96. oldal felső 7 sorában található az értekezésben, lásd a 11.1-es választ).

Ha az alapállapot degenerált, ez a következőket jelenti:

A \hat{P} pozitív szemidefinit operátor rögzített N részecskeszámhoz tartozó és $\hat{P}|\phi_i\rangle = 0$ összefüggéseknek eleget tevő lineárisan független $S = (|\phi_1\rangle, |\phi_2\rangle, \dots, |\phi_n\rangle)$ vektorhalmaza egyértelmű (azaz unicitási tulajdonsággal bíró) megoldás, ha $\ker(\hat{P})$ minden lehetséges eleme, az S vektorhalmaz lineárkombinációjaként felírható, és S minden eleme N részecskeszámmal rendelkezik.

Lényegében ez, rögzített N részecskeszámra, $\ker(\hat{P})$ egyértelmű meghatározását jelenti.

III. A TÉZISPONTOKRA VONATKOZÓ KÉRDÉSEK

A1. tézispontozhoz kapcsolódó kérdés, 7-ik oldal:

Kérdés: Kísérletileg vagy elméletileg milyen eredmények igazolták a fázisdiagramot? Kérdezem azért, mert 1994-ben az SDW-ért Nobel díjat adtak, és ilyenkor a téma általában még divatosabb lesz.

Válasz: (13)

Az 1994-es Nobel díjat a neutron spektroszkópiáért adták [B.N. Brockhouse (“for the development of neutron spectroscopy”), C.G. Shull (“for the development of the neutron diffraction technique”)]. Az viszont igaz, hogy a módszert széles körben a szilárdtestfizikában is alkalmazzák, többek között a spin sűrűség hullámok (SSH) tanulmányozásának esetében is.

Az értekezésben bemutatott fázisdiagram fázisválasztó vonalainak vagy felületeinek nagyon pontos számszerű összehasonlítása i) kísérleti adatokkal (a csatolási állandók mérésének nehézsége miatt), ii) más elméleti eredményekkel (a különböző modellek rendkívüli sokszínűsége miatt) nagyon bonyolult. De ennek ellenére kvalitatív és nagyságrendi összehasonlításra igen is van lehetőség.

Ennek tükrében, pl. a [264] összefoglaló cikk viszonylatában a következők sorolhatók fel: T növekedésével, az értekezés 106. oldalán lévő 13. ábra fázisai paramágneses fázisba mennek át, amit nyilvánvalóan minden kísérleti tény igazol. Nagyságrendileg, a (361)

összefüggést használva, $t > T$ határesetben $V/t = 0.5$ -re, a d-hullám kritikus hőmérséklete $t = 1eV$ feltételezéssel, $T_c = 154$ K adódik. Ez az érték nagyságrendileg megfelel a mért értékeknek, hiszen a Cr esetében a Δ_0 kritikus hőmérséklete szobahőmérséklet körül van, és YBaCuO rendszerekben a nagyságrendje Δ_2 -nek ugyanennyi [Phys. Rev. B63, 094503 (2001)]. A 13. ábrában lévő diagramban, az izotróp SSH fázis a Δ_0 fázis. A hozzá tartozó g_0 csatolási állandót oroslánrészét a Hubbard U adja mint lokális Coulomb kölcsönhatás [lásd: disszertáció 105. oldal, (359)-es képlet alatt], amely messzemenőleg a legnagyobb a figyelembe vett csatolások közül. Ha ezen csatolás mellett elsőszomszéd kölcsönhatások jelennek meg mint pl. V , a lényegi anizotróp SSH az értekezésben a (Δ_2, Δ_3) -al jelölt (d-hullám) [lásd [264], arXiv változat (ez mindenkinek hozzáférhető), 50. oldal, (53)-as képlet]. Megfigyelhető (lásd 13. ábra), hogy, a V értékeinek t (hopping)-hoz mért kicsi $[O(1)]$ értékeire, még növekvő U mellett is dominálja a fázisdiagramot ez az anizotróp SSH fázis [a konstans T -re vett metszetekben a fázisválasztó görbe erősen a g_0 tengely felé hajlik]. Ezt [264, 50-ik oldal] összefoglaló cikk világosan alátámasztja. A [264] azt is kiemeli, hogy ha elsőszomszéd kölcsönhatás nincs, a Δ_0 izotróp SSH jelenik csak meg ([264], 25. oldal). Ez is egyezik a 12. és 13. fázisdiagram ábrákon bemutatottakkal (értekezés 106. oldal).

A páratlan k -függvények (105. oldal (358)-as összefüggés, utolsó sor) előfordulási lehetőségét a rendparaméterben többen reprodukálták (ez a $\bar{\Delta}_4$ fázis a 12. ábra fázisdiagramjában a 106-ik oldalon), például [M. Kato, K. Machida, Phys. Rev. B37, 1510 (1988): 1513 oldal, II. Táblázat, 3-ik oszlop]. Ugyanitt az 1512-es oldal I. Táblázatában a d-hullám komponensek is megtalálhatók. $\bar{\Delta}_4$ típusú megoldások szintén jelen vannak pl. [B. Dóra, K. Maki, A. Virosztek Phys. Rev. B66, 165116 (2002)]-ben is.

Megemlítem még azt is, hogy van amikor az anizotróp SSH viselkedést tapasztalva, a teljes Hamilton operátort (ami a teljes fázisdiagramot magába hordozza) átveszik. Pl. uránium tartalmú nehézfermionos rendszerek esetében: [Y. Ohashi, Phys. Rev. B60, 15388 (1999)].

A4. tézispontához kapcsolódó kérdés, 8-ik oldal:

Kérdés: A dolgozatban több helyen is olvasható, hogy az itt vizsgált modell inkább időszerű korrelációkat mutat. Ezt honnan kellene látnom? Az értekezésből ez nem derül ki, hivatkozás sincs, ahonnan ez a félmondat érthetővé válna.

Válasz: (14)

Az értekezés 124-ik oldalán van a válasz (alólról a 13-5 sorok), és hivatkozás is van

feltüntetve rá és pedig [289]. Az Alkalmazott Módszerek (IV-ik fejezet), IV.D alfejezet, 56-os oldal, felülről a 3-ik sorában is hangsúlyozva van, hogy végtelen dimenzióban vett számítások, mivel minden vertex összeolvad, a térbeli korrelációk eltűnnek [azaz, mivel az r -változó zéró lesz, a Fourier transzformált térben a k -függés eltűnik, és csak az ω -függés marad a sajátenergia (self-energy) részben].

Amikor ez a két Phys. Rev. B. cikkem megjelent [7,8] 1991 és 1993-ban, dinamikus mean-field kifejezés még nem volt, az ilyenszerű számításokat akkor módszertanilag $D = \infty$ -nek nevezték. Az azóta átnevezett (és komoly numerikus aparátussal bővített eljárás) lényegében továbbra is lokális maradt, de a standard mean-fieldtől abban különbözik, hogy időkorrelációkat tartalmaz.

Mivel a következő kérdés lényege csak a teljes kontextusból látszik igazán, szükségesnek tartom a kérdéshez tartozó teljes kérdésbevezető rész reprodukálását:

B1. tézispont, 8-ik oldal: Idézem: Egy fonalszerű modell tulajdonságait vizsgálja, amely modellben az van feltételezve, hogy az egymás utáni kötések hossza csökken. A modell csomópontjaiban spinek vannak, így mágneses jellemzők számolhatók a modellre. A 24. ábrán az $(Eu_xSr_{1-x})S$ anyag $x=0.25$ -ös összetétele mellett a modelltől és a [304]-es referenciából származó Curie-konstansok összehasonlítása látható. Nagy problémám, hogy az adott anyag honnan tudja a szálas szerkezetet. Ez egy perkolációt mutató anyag nagyobb x -nél. Az értekezésben a következő mondat van leírva: “A mágneses szuszceptibilitás mérések rég sejtetik, hogy ezen anyagban fonalszerű klaszterképződmények fejlődnek ki [303,304]”. Letöltve a két idézett cikket az előbbi állításra utaló mondatot nem találtam.

Kérdés: Kérem segítsen, hogy a két cikkben hol van az állítás megalapozva (Pl. [304]-ben kis speciesszámú klasztereket vizsgálnak a mérések mellett az adatok megértéséhez. A vizsgált klaszterek között nem csak szálas szerkezetű van).

Érzésem szerint a [304] cikk modellje (a szerzők között általam személyesen ismert D. Stauffer és K. Binder) modellje sokkal jobb, lényegesen többet tud megmagyarázni az adott anyag mért termikus tulajdonságaiból. A jelen modell érdekes, de egyik feltevése, miszerint az egyes kötéstávolságok egyre csökkennek túl erős, reális szálas anyagokban nehéz egy olyan mechanizmust elképzelni, amelyik ezt meg tudá valósítani.

Válasz: (15)

A 24. ábra $x=0.025$ -re vonatkozik nem $x=0.25$ -re. A perkoláció $x_p = 0.13$ -ra lép fel ([304], 2664-es oldal, jobb oszlop, utolsó sor), ezáltal a lejátszódó jelenségeknek semmi köze a perkolációhoz ([304], 2669 oldal, bal oszlop, felülről a 4-ik sor). A [304] szerzői kihangsúlyozzák, hogy $x \leq 0.05$ tartományon nagyon kis klaszterek játszanak szerepet és léteznek, éspedig 3, 2, vagy 1 atomból állnak ([304], 2669 oldal, bal oszlop, felülről az 5-ik sor). A [304] 5. ábrája az első két sorában ezeket felsorolja, és ezek 84.6%-a első látásra fili-form (ezek száma az 5. ábrán: 1,2,3,5,6,7,8,9,10,11,13) az én modellemben is megtalálható. A 4-es számú klaszter esetében egy csomópont két legközelebbi szomszédja kapcsolódik össze. De ez fcc rács, tehát az elsőszomszédok közötti távolság egyezik az elsőszomszéd távolsággal, és akkor ez a klaszter is, $r_1 = r_2$ formában (aszimptótikusan) az én modellemnek is része. Azaz, a [304]-ben bemutatott klaszterek 92.3 %-a a modellemben található ha négykomponensű klasztert is figyelembe veszünk. De az 1,2,3 komponensű klaszterek vannak jelen $x \leq 0.05$ -re ([304], 2669 oldal, bal oszlop, felülről az 5-ik sor), 1-től 11-ig számozva az 5. ábrán, és ezek mind a modellben található. Ezen túlmenőleg, neutron szórási mérések igazolják [303], hogy messzemenőleg az elsőszomszéd kölcsönhatás a legnagyobb, és annak ellenére, hogy egy mágneses atomnak 12 mágneses atom elsőszomszédja lehetséges, mégsem alakulnak ki 3-nál több komponensű tartalmazó agglomerátumok [304] a tanulmányozott koncentráció tartományon.

Megjegyzem továbbá, hogy az értekezésben lévő modellben $r_{n+1} \leq r_n$ (és nem $r_{n+1} < r_n$, ahogy a kérdés állítja) szerepel [lásd (409)], a szögek akár 90 foknál is kisebbek lehetnek ha $r_{n+1} \leq r_n$ teljesül, tehát az anyagnak szálas szerkezetet nem kell tudnia.

D. Stauffer és K. Binder neve gondolom minden szakmabeli számára ismert. [304]-ben az AC szuszceptibilitásban a klaszterek közötti kölcsönhatás következtében kialakuló maximumokra fókuszálnak, azt hasonlítják össze kísérleti adatokkal. Ez $x=0.025$ esetében 0.005 K-en van ([304], 2673 oldal, bal oszlop, 14-ik sor alólról), tehát sokkal alacsonyabb hőmérséklet tartományon mint amit én vizsgáltam. [304]-ben Monte Carlo módszert használnak a kölcsönható klaszterek jellemzésére ([304] 2672 oldal, jobb oszlop, első sor), miközben a klasztereket pontszerűnek tekintik a szimuláció során. Én inter-klaszter kölcsönhatást nem tárgyaltam, AC viselkedést sem, a mérési adatokkal vett összehasonlítás szempontjából az én Phys. Rev. Lett. cikkem [15] és [304] között nincs átfedés az én véleményem szerint. Ezen túlmenőleg én csillagkörnyezetre vonatkozó csillagászati mérésekkel, laser ionizációs párologtatásból származó mérésekkel, szublimációs és grafit porlasztás (sput-

tering) mérésekkel is összehasonlítottam a levezetett eredményeket, amit [304] nem tesz meg. A [304] numerikus munka, az enyém egy nagyon egyszerű modell, amely nagyon kicsi koncentráció tartományokon mérhető össze kísérleti adatokkal, de azért szép, mert pontosan megoldható és hőmérsékletfüggő klaszternövekedési megoldást ad (ismereteim szerint először). Én ezért láttam benne fantáziát.

A bírálóban, ezen a ponton, a 9-ik oldalon, megjelenik egy nagyjából 3/4 oldalnyi bevezetése a B2-B9 tézispontokhoz tartozó megjegyzéseknek és kérdéseknek, amelyekre úgy érzem, reagálnom kell. De, abból az okból kifolyólag, hogy többszöri ismétlésként ne írjam ugyanazt le, és hogy sokkal több részlete az értekezésnek ismert legyen, mindezt a B9 tézispontnál felmerült kérdésekre adott válaszaim után teszem meg, ezen válaszanyag legvégén, a 37-ik oldaltól kezdődőleg.

B2. tézispont, kérdésfelvezető, 9-ik oldal: ... “A 27. ábrával kapcsolatosan az állítás szerepel, hogy $y \rightarrow 1/2$ -re az alapállapot energiája véges, de végtelen deriválttal rendelkezik.”

Kérdés: Ez analitikusan van bizonyítva? Az én szemem az ábra alapján azt mondja, hogy a derivált $1/2$ -nél véges, és z csökkenésével lesz ez a véges érték egyre nagyobb. A modellben hol a nyomás? Egy mellékmondat belekeveri azt a tényt, hogy “a hopping mátrixelemek nyomásfüggőek”, majd rögtön eljut a megállapítás oda (és tézispontként is ki van mondva!) hogy emiatt a “kompresszibilitás anomáliával rendelkezik”. Kérem fogalmazza meg precízen az állítást: Hogyan függnek a csatolási állandók a nyomástól és milyen anomália van a kompresszibilitásban (ugrás, előjelváltás ami instabilizálást okoz?)!

Válasz: (16)

A ritkaföldfémeket tartalmazó rendszerekben rég tapasztalták már [152], hogy fém-szigetelő átmenetüket (pl. Ce esetében) kompresszibilitás anomália követi, miközben a rendszer izostrukturális marad. A szóban forgó Phys. Rev. Lett. cikknek [11] az talán a legfőbb erénye, hogy egy háromdimenziós egzakt megoldás formájában megmutatta, hogy egy ilyen viselkedést tisztán a periodikus Anderson modell is jelezni tud (semmi fononikus járulékok nélkül). Az állítás ezért került a tézispontok közé.

A 27. ábrában feltüntetett divergencia analitikus eredmény. A számolás kvantum-

mechanikai, azaz $T = 0$ -ban levezetett. Az alapállapot energiája y (hopping mátrixelem) szerinti deriváltja divergál az átmenetnél. Egy hopping tag (t) nyomásfüggése:

$$t = (1 + \alpha u)t_0,$$

ahol $u = (\delta V)/V_0$, t_0 a V_0 -hoz tartozó hopping tag, α egy numerikus prefaktor amely rendszertől függő, δV a nyomás okozta térfogatváltozás, t pedig a hopping mátrixelem. [Mindez azért van, mert általában – nem nagyon nagy nyomás tartományon –, a sáv szélesség, a nyomás lineáris függvénye kísérleti adatok szerint [pl. Phys. Rev. Lett. 101,136406 (2008)], továbbá a sáv szélesség t -vel arányos. Mivel nyomással hatva egy 3D testre δV térfogatváltozást okoz, következik hogy $t - t_0 \sim \delta V/V_0$ összefüggés érvényesül].

Ennek megfelelően,

$$\delta t = (\alpha t_0/V_0)\delta V, \text{ azaz } \partial V = (1/C)\partial t,$$

ahol $C = \alpha t_0/V_0$ egy konstans. Most a kompresszibilitás K az

$$\frac{1}{K} = -\frac{1}{V}\frac{\partial P}{\partial V} = +\frac{1}{V}\frac{\partial^2 E}{\partial V^2},$$

hiszen $P = -\partial E/\partial V$, ahol E az alapállapot energiája (N. W. Ashcroft, N. D. Mermin, Solid State Physics, 39-es oldal, 2.33 egyenlet alatti 4-ik sor). Ezek szerint

$$1/K = (1/V)C^2\partial^2 E/\partial t^2,$$

tehát, ha E mennyiség t szerinti deriváltja divergál, K -ban anomáliának kell lenni. Matematikailag az nem számít hogy $y = t_2/t_1$ mert δV kicsi, és ekkor $\alpha \rightarrow (\alpha_2 - \alpha_1)$ változás történik csupán. Mivel t_2 másodsomszéd, t_1 pedig elsőszomszéd hoppingot jellemez, $(\alpha_2 - \alpha_1) \neq 0$, ahol α_2 a t_2 -höz, α_1 pedig a t_1 -hez tartozó koefficiens. A jelen esetben

$$E \sim \{1 + 0.25y^{-2}[1 - (1 - 4y^2)^{1/2}]\}^3$$

áll fenn, így a másodrendű derivált is divergál. Sajnos a tranzíció másik oldalán a megoldás pontosan nem ismert, ezért az anomália amit a modell ad $1/K$ -ban vagy divergencia, vagy végtelen ugrás.

B3. tézispontához kapcsolódó kérdés, 10-ik oldal:

Kérdés: Kérem a dolgozatban tárgyaltaknál részletesebben fogalmazza meg mik az új eredmények a [2,3,4] cikkekben, különös tekintettel az $U = \infty$ esetre.

Válasz: (17)

17.1:

A disszertáció B.3 tézispontjában [(198)-as oldal] a következő megfogalmazás található:

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 specifikus 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].

A helynyerés miatt végzett sorozatos törlések nyomán a disszertáció végső változatában a B.3 pontot alátámasztó eredménybemutató ténylegesen nagyon rövid maradt. Ezért itt, a kérésnek megfelelően, a [2,3,4] cikkek új eredményeit, a B.3 tézispont állításait követve, részletesebben bemutatom. A bemutatott anyag ferdebetűs kiemelt része került tartalmilag a B.3 tézispontba.

17.2:

[2]-ben: az indító fontos elem az, hogy előzőleg, a véges U-ra levezetett eredmények mindig diszperzív f-sávot (azaz f-hoppingot), képzetes hibridizációs mátrixelemeket, és anizotrop rendszert (azaz $\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{y}$ nem szimmetriatranszformáció) tartalmaztak (ez utóbbi kondíció [3]-ban teljesíthető). A 2D Hamilton operátornak az az újdonsága, hogy (legalábbis 2d-ben) itt először ír le olyan szituációt, amikor f-hopping nincs (csak f-nívó), a hibridizációs mátrixelemek valóságosak, és a rács nem torzított is lehet (azaz $\mathbf{x} = \mathbf{y}$ nem kizárt). *A levezetett alapállapot egy vezető fázis, amely nem-Fermi folyadék, 3/4 sávtöltésen és felette létezik.*

A Hamilton operátor $\hat{H} = \hat{T}_d + \hat{E}_f + \hat{V} + \hat{U}$, ahol a nem-korrelált sáv kinetikus járuléka

$$\hat{T}_d = \sum_{\mathbf{i},\sigma} [t_{\mathbf{x}} \hat{d}_{\mathbf{i},\sigma}^\dagger \hat{d}_{\mathbf{i}+\mathbf{x},\sigma} + t_{\mathbf{y}} \hat{d}_{\mathbf{i},\sigma}^\dagger \hat{d}_{\mathbf{i}+\mathbf{y},\sigma} + t_{\mathbf{x}+\mathbf{y}} \hat{d}_{\mathbf{i},\sigma}^\dagger \hat{d}_{\mathbf{i}+\mathbf{x}+\mathbf{y},\sigma} + t_{\mathbf{y}-\mathbf{x}} \hat{d}_{\mathbf{i},\sigma}^\dagger \hat{d}_{\mathbf{i}+\mathbf{y}-\mathbf{x},\sigma} + t_{2\mathbf{x}} \hat{d}_{\mathbf{i},\sigma}^\dagger \hat{d}_{\mathbf{i}+2\mathbf{x},\sigma} + t_{2\mathbf{y}} \hat{d}_{\mathbf{i},\sigma}^\dagger \hat{d}_{\mathbf{i}+2\mathbf{y},\sigma} + H.c.],$$

a hibridizációs tag

$$\hat{V} = \sum_{\mathbf{i},\sigma} [V_0 \hat{d}_{\mathbf{i},\sigma}^\dagger \hat{f}_{\mathbf{i},\sigma} + V_{\mathbf{x}} (\hat{d}_{\mathbf{i},\sigma}^\dagger \hat{f}_{\mathbf{i}+\mathbf{x},\sigma} + \hat{f}_{\mathbf{i},\sigma}^\dagger \hat{d}_{\mathbf{i}+\mathbf{x},\sigma}) + V_{\mathbf{y}} (\hat{d}_{\mathbf{i},\sigma}^\dagger \hat{f}_{\mathbf{i}+\mathbf{y},\sigma} + \hat{f}_{\mathbf{i},\sigma}^\dagger \hat{d}_{\mathbf{i}+\mathbf{y},\sigma}) + H.c.],$$

a lokális f-energia $\hat{E}_f = E_f \sum_{\mathbf{i},\sigma} \hat{n}_{\mathbf{i},\sigma}^f$, és \hat{U} a korrelált f-elektronok Hubbard kölcsönhatása (U pozitív). Az előbbiekben (\mathbf{x}, \mathbf{y}) a Bravais vektorok.

Az említett előrelépést az teszi lehetővé, hogy egy teljesen új plakett operátor kerül alkalmazásra, mely rombusz formájú, és f-operátort csak egy pontban (azaz inhomogén módon) tartalmaz. A block operátor kifejezése

$$\hat{A}_{i,\sigma} = a_{1,d}\hat{d}_{i,\sigma} + a_{1,f}\hat{f}_{i,\sigma} + a_{2,d}\hat{d}_{i-y,\sigma} + a_{3,d}\hat{d}_{i+x,\sigma} + a_{4,d}\hat{d}_{i+y,\sigma} + a_{4,d}\hat{d}_{i-x,\sigma}.$$

Az áttranszformált Hamilton operátor formája

$$\hat{H} = \sum_{i,\sigma} \hat{A}_{i,\sigma} \hat{A}_{i,\sigma}^\dagger + U\hat{P} + \hat{R} \quad (1)$$

ahol (N_Λ és N , a rács csomópontjainak és az elektronoknak a száma):

$$\hat{P} = \sum_{\mathbf{i}} (1 - \hat{n}_{\mathbf{i},\uparrow}^f - \hat{n}_{\mathbf{i},\downarrow}^f + \hat{n}_{\mathbf{i},\uparrow}^f \hat{n}_{\mathbf{i},\downarrow}^f), \quad \hat{R} = -UN_\Lambda - 2N_\Lambda(|a_{1,f}|^2 + K) + K\hat{N}, \quad K = \sum_{n=1}^5 |a_{n,d}|^2.$$

A fedési egyenletek

$$-t_x = a_{1,d}^* a_{3,d} + a_{5,d}^* a_{1,d}, \quad -t_y = a_{1,d}^* a_{4,d} + a_{2,d}^* a_{1,d}, \quad -t_{x+y} = a_{5,d}^* a_{4,d} + a_{2,d}^* a_{3,d},$$

$$-t_{y-x} = a_{2,d}^* a_{5,d} + a_{3,d}^* a_{4,d}, \quad -t_{2x} = a_{5,d}^* a_{3,d}, \quad -t_{2y} = a_{2,d}^* a_{4,d}, \quad V_0 = a_{1,d}^* a_{1,f},$$

$$-V_x = a_{1,f}^* a_{3,d} = a_{5,d}^* a_{1,f}, \quad -V_y = a_{1,f}^* a_{4,d} = a_{2,d}^* a_{1,f}, \quad E_f + U + |a_{1,f}|^2 = K,$$

és ezek megoldása a $|t_{x+y}| = |t_{y-x}|$, $|V_0/V_x| = |t_x/(2t_{2x})|$, illetve $sign(\chi) = -sign(t_{x+y})$, $sign(t_x) = sign(V_0)sign(V_x)$ kondíciók mellett, $\chi = t_y/t_x$, $v = V_0/t_x$:

$$|a_{1,d}| = \frac{|t_x|}{2\sqrt{|t_{2x}|}}, \quad |a_{1,f}| = 2\sqrt{|t_{2x}|}|v|, \quad |a_{2,d}| = |a_{4,d}| = |\chi||a_{3,d}| = |\chi||a_{5,d}| = |\chi|\sqrt{|t_{2x}|}, \quad (2)$$

továbbá a $t = |t_{2x}/t_x|$ változó bevezetésével

$$\frac{E_f + U}{|t_x|} = \frac{1}{4t} + 2t(1 + \chi^2 - v^2) \quad (3)$$

kell fennálljon. A levezetett alapállapot

$$|\Psi_g\rangle = \prod_{\mathbf{i}} \hat{A}_{\mathbf{i},\uparrow}^\dagger \hat{A}_{\mathbf{i},\downarrow}^\dagger (\mu_{\mathbf{i},\uparrow} \hat{f}_{\mathbf{i},\uparrow}^\dagger + \mu_{\mathbf{i},\downarrow} \hat{f}_{\mathbf{i},\downarrow}^\dagger) |0\rangle \quad (4)$$

ahol, a normálhatósági követelmény mellett, a $\mu_{i,\sigma}$ numerikus paraméterekre más kikötés nincs, $|0\rangle$ a fermion nélküli vákuállapot. A fenti megoldás $N = 3N_\Lambda$ koncentrációra él ($n_{3/4}$), de (4) megváltoztatásával ($\prod_{i,\sigma} \hat{C}_{1,\mathbf{k},\sigma}^\dagger$ hozzátételét jelenti ez, \hat{C} bemutatása később), $n_{3/4}$ fölé is kiterjeszhető. Az alapállapot vezető ($\delta\mu = \mu^+ - \mu^- = 0$, hol $\mu^+ = E_g(N+1) - E_g(N)$, $\mu^- = E_g(N) - E_g(N-1)$ a részecskeszámtól függő kémiai potenciálok). A (4)-hez tartozó alapállapot energiája

$$\frac{E_g}{N} = K - \frac{N_\Lambda}{N} (U + 2|a_{1,f}|^2 + 2K). \quad (5)$$

A szimmetrikus eset $\chi = 1$ -et jelent, és ez esetben a kapott megoldás $t_1 = t_x = t_y$, $t_2 = t_{2x} = t_{2y} = 0.5t_{x+y} = 0.5t_{y-x}$, $V_1 = V_x = V_y$, $|V_1| = 2|V_0t|$ mellett van jelen a (3)-as tartományon.

Megfigyelhető, hogy (1) transzformált Hamilton operátor kinetikus része

$$\hat{H}_K = \sum_{\mathbf{k},\sigma} E_{1,\mathbf{k}} \hat{C}_{1,\mathbf{k},\sigma}^\dagger \hat{C}_{1,\mathbf{k},\sigma} + \sum_{\mathbf{k},\sigma} E_{2,\mathbf{k}} \hat{C}_{2,\mathbf{k},\sigma}^\dagger \hat{C}_{2,\mathbf{k},\sigma} - UN_\Lambda$$

kétsávós Hamilton operátorba transzformálható, úgy hogy \hat{H}_k a (4)-re hatva (5)-öt adja vissza, tehát az alapállapot Hamilton operátoraként felfogható. Itt, $E_{2,\mathbf{k}} = -K + E_f + U + \epsilon_{\mathbf{k}}^d$, $\epsilon_{\mathbf{k}}^d = K - |a_{\mathbf{k},d}|^2$, $a_{\mathbf{k},d} = a_{1,d} + a_{2,d} \exp(+i\mathbf{k}\mathbf{y}) + a_{3,d} \exp(-i\mathbf{k}\mathbf{x}) + a_{4,d} \exp(-i\mathbf{k}\mathbf{y}) + a_{5,d} \exp(+i\mathbf{k}\mathbf{x})$ egy alsó diszperzív sáv ami teljesen töltve van, $E_{1,\mathbf{k}} = K$ konstans pedig egy felső lapos sáv, amelyet U kelt, és amely félig töltött az $n = n_{3/4}$ koncentráció esetében,

továbbá:

$$\hat{C}_{1,\mathbf{k},\sigma}^\dagger = \frac{1}{D_{\mathbf{k}}}(a_{1,f}^* \hat{d}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger - a_{\mathbf{k},d}^* \hat{f}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger), \quad \hat{C}_{2,\mathbf{k},\sigma}^\dagger = \frac{1}{D_{\mathbf{k}}}(a_{\mathbf{k},d}^* \hat{d}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger + a_{1,f}^* \hat{f}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger),$$

$$\hat{A}_{\mathbf{i},\sigma}^\dagger = \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{i}}(a_{\mathbf{k},d}^* \hat{d}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger + a_{1,f}^* \hat{f}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger), \quad D_{\mathbf{k}} = \sqrt{|a_{1,f}|^2 + |a_{\mathbf{k},d}|^2} :$$

A $\langle \dots \rangle = \langle \Psi_g | \dots | \Psi_g \rangle / \langle \Psi_g | \Psi_g \rangle$ alapállapoti átlagérték szerint

$$\langle \hat{C}_{1,\mathbf{k},\sigma}^\dagger \hat{C}_{1,\mathbf{k},\sigma} \rangle = \frac{1}{2}, \quad \langle \hat{C}_{2,\mathbf{k},\sigma}^\dagger \hat{C}_{2,\mathbf{k},\sigma} \rangle = 1, \quad \langle \hat{C}_{2,\mathbf{k},\sigma}^\dagger \hat{C}_{1,\mathbf{k},\sigma} \rangle = 0. \quad (6)$$

A két utolsó összefüggés nyilvánvaló, mert az alsó sáv teljesen töltött. *De az első összefüggés (6)-ból azt jelzi, hogy nem-Fermi folyadékkal van dolgunk. Az impulzus szerinti eloszlásfüggvényben semmi ugrás sehol sincs (ez $n_{\mathbf{k}}^d$ és $n_{\mathbf{k}}^f$ -ra is igaz), a Fermi energia értelmezhető, a Fermi felület viszont nem, ezáltal a Fermi folyadékokra érvényes Luttinger tétel sem áll fenn (míserint a kölcsönhatás jelenléte a Fermi felület által bezárt térfogaton nem változtat). Tehát egy rigurózan levezetett és 2D-ben létező nem-Fermi folyadék van jelen a jelzett tartományokon.*

17.3:

[3]-ban: A Hamilton operátor ugyanazt a 2D rendszert írja le mint [2] (az induló Hamilton operátor lényegében ugyanaz mint [2] estében, de [3] időben [2] előtt volt publikálva, így tehát f-nívó helyett f-sávot vesz figyelembe a rendszerben, azaz f-hopping tagok is jelen vannak). Mindemellett [3] tisztázta, hogy hogyan kell csak elsőszomszéd hopping tagokkal számolni (eddig mindig, a számolás másodszoyszéd hoppingokat és hibridizációs tagokat is figyelembe vett). Az eljárás kulcsa abban áll, hogy ugyanazon a blokkon két blokk operátort kell figyelembe venni, így a két összeg, éspedig $\sum_{\mathbf{i}} \hat{A}_{\mathbf{i}}^\dagger \hat{A}_{\mathbf{i}}$ és $\sum_{\mathbf{i}} \hat{B}_{\mathbf{i}}^\dagger \hat{B}_{\mathbf{i}}$ összeadása nyomán, a nem kívánatos tagokat ki lehet ejteni. Ez [3]-ban így is történt, de a későbbiekben, a később megjelent leírásokban, a “kiejtés” úgy zajlik, hogy a kiejtendő hopping szakasz mentén kell különböző blokk operátorokból származó járulékok találkozsanak. Egy másik újdonsága [3]-nak az volt, hogy eddig a blokk operátorok rögzített spin vetülettel voltak értelmezve, most viszont, [3]-ban, a blokk operátorok mindkét spinvetületet tartalmazzák. A mai szemmel nézve, az ilyen blokk operátorok a közelmultban gyakran tanulmányozott “aszimmetrikus” (unbalanced) rendszerek jellemzésére nyitnak utat (hol a hopping tag spinvetület függő). Ezen túlmenőleg, a számítás lokalizált állapotra van ráállítva.

Az induló Hamilton operátor $\hat{H} = \hat{T}_d + \hat{T}_f + \hat{E}_f + \hat{V} + \hat{U}$, ahol

$$\hat{T} = \hat{T}_d + \hat{T}_f + \hat{E}_f = \sum_{\mathbf{i},\sigma} [\sum_{\mathbf{r}} (t_{\mathbf{r}}^d \hat{d}_{\mathbf{i},\sigma}^\dagger \hat{d}_{\mathbf{i}+\mathbf{r},\sigma} + t_{\mathbf{r}}^f \hat{f}_{\mathbf{i},\sigma}^\dagger \hat{f}_{\mathbf{i}+\mathbf{r},\sigma} + H.c) + E_f \hat{n}_{\mathbf{i},\sigma}^f].$$

Itt \mathbf{r} első és másodszoyszédokat ($\mathbf{y} \pm \mathbf{x}$) is tartalmaz induláspontként, a matematikai lépések

könnyebb nyomonkövethetősége végett. A hibridizációs tag lokális (\hat{V}_0) és nem-lokális (\hat{V}_n) tagokat is tartalmaz az induló \hat{H} -ban, \hat{V}_n csak elsőszomszéd tagokat vesz figyelembe.

$$\hat{V} = \hat{V}_0 + \hat{V}_n, \quad \hat{V}_0 = \sum_{\mathbf{i},\sigma} (V_0 \hat{d}_{\mathbf{i},\sigma}^\dagger \hat{f}_{\mathbf{i},\sigma} + H.c.), \quad \hat{V}_n = \sum_{\mathbf{i},\mathbf{r},\sigma} [V_{\mathbf{r}} (\hat{d}_{\mathbf{i},\sigma}^\dagger \hat{f}_{\mathbf{i}+\mathbf{r},\sigma} + \hat{f}_{\mathbf{i},\sigma}^\dagger \hat{d}_{\mathbf{i}+\mathbf{r},\sigma}) + H.c.].$$

A rács négyzetesnek tekintett, és [2]-vel ellentétben itt a blokk operátorok a rács ezen négyzetes, 4 csomópontot összekötő celláin vannak értelmezve. De, ahogy ezt a bevezető részben hangsúlyoztam, 2 blokk operátor van minden csomópontozhoz rendelt cellához hozzákötve ($\hat{A}_{\mathbf{i}}$ és $\hat{B}_{\mathbf{i}}$):

$$\hat{A}_{\mathbf{i}} = \sum_{\sigma} \sum_{g=d,f} [a_{1,g,\sigma} \hat{g}_{\mathbf{i},\sigma} + a_{2,g,\sigma} \hat{g}_{\mathbf{i}+\mathbf{x},\sigma} + a_{3,g,\sigma} \hat{g}_{\mathbf{i}+\mathbf{x}+\mathbf{y},\sigma} + a_{4,g,\sigma} \hat{g}_{\mathbf{i}+\mathbf{y},\sigma}],$$

továbbá, a $\hat{B}_{\mathbf{i}}$ értelmezése is azonos, azzal a kivétellel, hogy benne, az $a_{n,g,\sigma}$, $n = 1, 2, \dots, 4$ koeficiensek helyett $b_{n,g,\sigma}$, $n = 1, 2, \dots, 4$ koeficiensek szerepelnek, $g = d, f$.

A transzformált Hamilton operátor formája

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{i}} (\hat{A}_{\mathbf{i}} \hat{A}_{\mathbf{i}}^\dagger + \hat{B}_{\mathbf{i}} \hat{B}_{\mathbf{i}}^\dagger) + U \hat{P} + [K_1 \hat{N} - N_{\Lambda} (4K_1 - 2E_f - U)]$$

ahol $K_1 = K_1(\sigma) = \sum_{n=1}^4 (|a_{n,d,\sigma}|^2 + |b_{n,d,\sigma}|^2)$. A fedési egyenletek nagyon terjedelmesek, a [3] C-mellékletében található meg. A talált megoldás $n_{3/4}$ koncentráción létezik (felső sáv félig töltött) és formája (nem-normalizált alakban, és $x \neq 0$, vagy ∞ -re)

$$|\Psi'_g\rangle = \prod_{\mathbf{i}} (\hat{d}_{\mathbf{i},\uparrow}^\dagger + x \hat{f}_{\mathbf{i},\uparrow}^\dagger) (\hat{d}_{\mathbf{i},\downarrow}^\dagger + x \hat{f}_{\mathbf{i},\downarrow}^\dagger) (\mu_{\mathbf{i},\uparrow} \hat{f}_{\mathbf{i},\uparrow}^\dagger + \mu_{\mathbf{i},\downarrow} \hat{f}_{\mathbf{i},\downarrow}^\dagger) |0\rangle,$$

amely normája

$$\langle \Psi'_g | \Psi'_g \rangle = (1 + x^2)^{N_{\Lambda}} \prod_{\mathbf{i}} (|\mu_{\mathbf{i},\uparrow}|^2 + |\mu_{\mathbf{i},\downarrow}|^2).$$

Itt $\prod_{\mathbf{i}}$ az összes N_{Λ} csomóponton végigfut, $x^2 = |t^f/t^d|$, $\mu_{\mathbf{i},\sigma}$ tetszőleges koeficiensek, azzal a kikötéssel hogy a norma nem lehet zéró. A bemutatott megoldás $t_{y\pm x}^g = V_{y\pm x} = 0$, illetve $t_x^g = t_y^g = t^g$, $V_x = V_y = V$, $g = d, f$ esetében áll fenn, tehát csak szimmetrikus elsőszomszéd hoppingjai vannak (megemlítem, hogy [3] aszimmetrikus esetre is ad megoldást). Ez egy lokalizált állapot amelyre alapállapotú átlagértékre számolva $\langle \hat{T}^d \rangle = \langle \hat{T}^f \rangle = \langle \hat{V}_n \rangle = 0$, továbbá minden csomópontoz $\hat{n}_{\mathbf{i}} |\Psi'_g\rangle = 3 |\Psi'_g\rangle$, azaz minden csomópontoz pontosan 3 elektron található (ezért nincs mozgás). Az $\hat{n}_{\mathbf{i}} = \sum_{\sigma} \sum_{g=d,f} \hat{n}_{\mathbf{i},g,\sigma}$ állandó értéke miatt hosszútávú sűrűség - sűrűség korrelációk vannak a rendszerben.

Habár $\mu_{\mathbf{i},\sigma}$ tetszőleges, a norma ismeretében az összes Hamilton operátor tag átlagértéke kiszámítható, és az alapállapotú energia ($x^2 = |t_f/t_d|$):

$$E_g/N_{\Lambda} = U \frac{x^2}{1+x^2} + E_f (1 + \frac{x^2}{1+x^2}) - x^2 (1 + x^2).$$

Látható, hogy ha E_g -ben hopping tagok szerinti deriváltat számolunk (ez itt $t = |t_f/t_d| = x^2$ szerint lehetséges), divergenciát vagy ugrásszerű viselkedést nem találunk, tehát itt a kompresszibilitási anomália nem tapasztalható.

[2,3] megmutatta, hogy fémes és szigetelő fázist a periodikus Anderson modell, pontosan tárgyalva 2D-ben, képes a Hamilton operátor paraméterek "normál" (azaz elvárható) értékeire is visszaadni. Azaz f -sáv nélkül (csupán f -nívóval), valós hibridizációs csatolással, vagy éppenséggel csak elsőszomszéd járulékokat tartalmazó hoppingokkal.

Megemlítem, hogy az itt (17.3-ban) bemutatott 2D szigetelő fázis a tartományán is levezetésre került (spinvetület függő blokk operátorok felhasználásával, Z.G. Acta Phys. Pol. B34, 749 (2003)), ugyanazon fizikai tulajdonságokat eredményezve. Továbbmenőleg, az itt (17.2-ben) bemutatott 2D itineráns fázis, a paraméterter egy másik részén (f -ugrások és képzetes hibridizációk jelenlétében), ugyanazon tulajdonságokkal, [149]-ben található.

17.4:

[4]-ben: Az előző két publikációval ellentétben, [4] 1D szituációban tárgyalja a periodikus Anderson modellt, mégpedig specifikusan $U = \infty$ esetben. Ilyenkor nincs dupla betöltése az f -nívónak, és ez a tény már a Hamilton operátor induló formájában is benne van azáltal, hogy $\hat{f}_{i,\sigma} \rightarrow \hat{g}_{i,\sigma} = \hat{f}_{i,\sigma}(1 - \hat{n}_{i,-\sigma}^f)$ helyettesítés történik. Amúgy, a periodikus Anderson modell $U = \infty$ esetének $\hat{g}_{i,\sigma}$ operátorokkal vett tárgyalásának ötlete nem tőlem származik, egy Dresdai látogatásom során javasolta Klaus Becker.

A Hamilton operátor felírásakor az 1D miatt $\mathbf{i} \rightarrow i$ csomópont számozás használata lehetséges, tehát

$$\hat{H} = \sum_{i,\sigma} [t_1 \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{i+1,\sigma} + t_2 \hat{c}_{i-1,\sigma}^\dagger \hat{c}_{i+1,\sigma} + H.c.] + E_f \sum_{i,\sigma} \hat{g}_{i,\sigma}^\dagger \hat{g}_{i,\sigma} + \sum_{i,\sigma} \{V_0 \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{g}_{i+1,\sigma} + H.c.\} + [V_1 (\hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{g}_{i+1,\sigma} + \hat{g}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{i+1,\sigma}) H.c.].$$

Az alkalmazott blokk operátor három egymásutáni csomóponton értelmezett

$$\hat{A}_{i,\sigma} = a_1 \hat{c}_{i-1,\sigma} + a_2 \hat{c}_{i,\sigma} + a_3 \hat{c}_{i+1,\sigma} + a_f \hat{g}_{i,\sigma},$$

melynek megfelelően a transzformált Hamilton operátor formája

$$\hat{H} = \sum_{i,\sigma} \hat{A}_{i,\sigma} \hat{A}_{i,\sigma}^\dagger + |a_f|^2 \sum_{i,\sigma} \hat{n}_{i,\sigma}^f + (\sum_{n=1}^3 |a_n|^2) \sum_{i,\sigma} \hat{n}_{i,\sigma}^c - 2N_\Lambda [|a_f|^2 + (\sum_{n=1}^3 |a_n|^2)],$$

továbbá a fedési egyenletek

$$t_1 = -(a_1^* a_2 + a_2^* a_3), \quad t_2 = -a_1^* a_3, \quad E_f = -|a_f|^2, \quad V_0 = -a_2^* a_f, \quad -V_1 = a_1^* a_f = a_f^* a_3. \quad (7)$$

A (7)-nek van olyan megoldása, éspedig

$$a_1 = \sqrt{|t_2|} e^{i\theta}, \quad a_2 = -\frac{t_1}{2\sqrt{|t_2|}} e^{i\theta}, \quad a_3 = \sqrt{|t_2|} e^{i(\theta+2\phi)}, \quad a_f = -\sqrt{2|t_2| + \frac{|t_1|^2}{4|t_2|}} e^{i(\theta+\phi)},$$

amelyre $|a_f|^2 = \sum_{n=1,2,3} |a_n|^2$, amelynek az a jelentősége hogy ekkor a Hamilton operátor

$$\hat{H} = \sum_{i,\sigma} \hat{A}_{i,\sigma} \hat{A}_{i,\sigma}^\dagger + (\hat{N} - 4N_\Lambda) \sum_{n=1}^3 |a_n|^2 \quad (8)$$

formára bomlik. Hogy ezen kifejezés kialakulhasson, t_1, t_2 nagysága tetszőlegesen megválasztható,

de a megoldás (ha a paraméterek mind valósak) csak $E_f/|t_1| = (4/|x| + 2|x|)$, $\nu = 2x$ tartományon él, ahol $x = t_2/t_1$, $\nu = V_1/V_0$.

A fenti kondíciókra levezetett alapállapotú hullámfüggvény

$$|\Psi''_g\rangle = [\prod_{i=1}^{N_\Lambda} \hat{A}_{i,\uparrow}^\dagger \hat{A}_{i,\downarrow}^\dagger] \hat{Y}_M^\dagger |0\rangle, \quad \hat{Y}^\dagger = \prod_{j=1}^M [\sum_{i=1}^{N_\Lambda} \sum_\sigma \sum_{b=c,g} \alpha_{i,j,\sigma}^b \hat{b}_{i,\sigma}^\dagger], \quad (9)$$

A (9)-ben az $\prod_i \hat{A}_{i,\uparrow}^\dagger \hat{A}_{i,\downarrow}^\dagger$ átlagosan 2 elektront tesz csomópontonként a rendszerbe, ami a periodikus Anderson modellben félig töltött rendszert jelent. E felé helyez el \hat{Y}^\dagger még $M = 0, 1, 2, \dots, 2N_\Lambda$ darab elektront. Az $\alpha_{i,j,\sigma}^b$ koeficiensek numerikus prefaktorok, amelyekre csak az a kikötés, hogy a hullámfüggvény normáját nem szabad lenullázzák.

A félig töltött rendszer esetében (9) kifejezése egy kicsit leegyszerűsíthető, és pedig

$$|\Psi''_g(N = 2N_\Lambda)\rangle = [\prod_{i=1}^{N_\Lambda} \hat{B}_{i,\uparrow}^\dagger \hat{B}_{i,\downarrow}^\dagger] |0\rangle,$$

ahol $\hat{B}_{i,\sigma} = (\hat{c}_{i-1,\sigma} + \hat{c}_{i+1,\sigma}) + (p\hat{c}_{i,\sigma} + q\hat{g}_{i,\sigma})$, amelyben $p = -t_1/(2|t_2|)$, $q = -\text{sign}(V_1)\sqrt{2+p^2}$, $E_g/N_\Lambda = -2|t_2|q^2$.

A (9)-ben kapott megoldás egy vezető és nem-mágneses állapot ($\delta\mu = \mu^+ - \mu^- = 0$). Érdekes megjegyezni, hogy a megoldás $t_1 = V_0 = 0$ esetre is kiterjeszhető (ekkor a blokk operátor paraméter megoldások másak), hasonló fizikai tulajdonságokkal. A megoldásnak az is értéke, hogy f-ugrást nem tartalmaz, csak f-nívót, úgy mint az eredetileg értelmezett periodikus Anderson modell (generikus PAM). *A (9)-es megoldás, amely félig töltött rendszert, illetve e feletti töltéskoncentrációt ír le az 1D periodikus Anderson modellben $U = \infty$ -re, véges de folytonos paramétertartományon kapjuk. De mivel e modellnek nincsenek integrálható pontjai, és integrálható pontokat csak több más járulék (pl. Heisenberg kölcsönhatás az f-elektronokra) hozzáadásával nyerhetünk, az én véleményem szerint az itt bemutatott eredmény értéket jelent.*

B4. tézispontozhoz kapcsolódó kérdések, 10-ik oldal:

A kérdésselvezető rész kérdései:

I. Idézem a kérdést: Van egy rettentő bonyolult objektum: 6 változótól függő $t_{i,j,i-j,\sigma}^{p,p'}$. Álnaiv kérdésem: Mi szükség van az alsó harmadik indexre? hisz az alsó, első kettőből megkapható, és a megértést sem segíti.

Válasz: (18)

Az alsó, első két index a szakasz (amelyet a “hopping” ír le) végpontjait jelöli, a harmadik index pedig a hopping irányát és nagyságát mutatja, azaz \mathbf{i} -ből \mathbf{j} -be, vagy viszont és mekkorát. Ezen lehetőségeknek megfelelően, más operátor rész tartozik a t-hez, így a

levezetés folyamán, nyomkövetéskor, vagy ellenőrzésénél tudni kell hogy i - j kicsoda. Ezen túlmenően attól függően hogy i - j mekkora, a t jelölhet elsőszomszéd, vagy másodsomszéd tagot. Aláhúzom, hogy a 148-as oldalon, a (435)-ös fedési egyenletekben amelyek a megoldás részét képviselik, ott van a harmadik alsó index, az teszi érthetővé az egyenletrendszert.

II. Idézem a szövegrészt a bírálatból: ...igen speciális dolgok vannak feltételezve: nevezetesen (433), ami széles következményekkel jár. Innentől majdnem követhetetlen, hogy mi a véletlen változó: Eredetileg (431)-ben szereplő csatolási állandók, majd a speciális feltételek miatt a (436) első tagjának egyrészesecske energiáiba, illetve (434)-ben szereplő lineárokombinációs együtthatókba kerül a véletlenség, aztán az átkerül a (441)-ben szereplő v_j -kre, amikről (441) alatt az van mondva, hogy tetszőleges konstansok. Utána ezek lesznek a véletlen változók, és ezek együttes eloszlásfüggvényével vannak a (446) és (447) kifejezések kiértékelve.

Válasz: (19)

Én úgy éreztem, hozzá kell szólnom ehhez a részhez, mert itt a megfogalmazott mondatok együttes hangulata bírál (ugyanúgy mint a 11-es válasznál a kérdés felvezetés). Először is szét szeretném választani a mondatokat két részre, éspedig A) a (433),(431),(436),(434) egyenletekhez kapcsolódó megjegyzéseket külön taglalnám, ezek kapcsolódnak ugyanis a Hamilton operátorhoz, majd B) a (441),(446),(447) egyenleteket veszem szemügyre, amelyek a levezetett alapállapot hullámvektorra vonatkoznak:

19.1:

A) A Hamilton operátorra vonatkozólag azt szeretném kiemelni, hogy $4N_\Lambda$ rendezetlen változót tartalmaz (itt N_Λ a csomópontok száma). Ezek fele hopping, másik fele pedig kölcsönhatási tag, közben a rendszer igazi kölcsönható sokrészesecskes 2D rendszer. Annakidején (2003)-ban vagyunk, a rendezetlenséget egy-elektron problémaként (azaz elektron-elektron kölcsönhatás nélkül) vagy csak t -ben (nem-diagonális), vagy csak ϵ -ban (diagonális) rendezetlenségként tárgyalták (lásd II.B.3. alfejezet, 19. oldal, felőlről a 13-16 sorok). Nálam viszont a probléma: kölcsönható rendezetlen 2D fermionikus rendszer, és a cél egy pontos alapállapot hullámfüggvény levezetése volt. Ezt teljes általánosságban nem tudtam megoldani (talán majd a fiatal generáció előbbre viszi a dolgot). Egy könnyítő feltétel kellett. Ezt képviselik a (432) és (433) egyenletek. Az első, pozitív lokális egyrészesecske potenciálok feltételez (azaz befogó vonzó centrumok nincsenek jelen), a második a bíráló

által említett (433). Ezen összefüggés a szakirodalomban is használt (pl. [313]) és lényegében azt állítja, hogy ha 2 típusú elektron van a rendszerben mondjuk a és b (azaz 2 orbitál van egy csomóponton), akkor ha $t_{aa}/t_{bb} = w^2$, akkor a hibridizációs jellegű t_{ab} -re $t_{aa}/t_{ab} = w$ áll fenn. Ezt a tényállást, nagyságban, és nagyságrendben átfedési integrál számításokkal is alátámasztják [313]. (Hogy egy példát is adjak erre, Aktinium esetében (abszolút értékben és mRy egységekben) $t_{ss\sigma} = 36.33, t_{ff\sigma} = 7.93, t_{sf\sigma} = 15.46$ [J. Durgavich et al., Computational Material Science 112, 395 (2016), 399-es oldal]. $t_{ss\sigma}/t_{ff\sigma} = w^2 = (2.14)^2$, $t_{ss\sigma}/t_{sf\sigma} = w = 2.34$).

Most (431) az eredeti Hamilton operátor, (436) a transzformált Hamilton operátor. Így hát ha rendezetlenség van az eredeti Hamilton operátorban, akkor kötelezően, rendezetlenség lesz a transzformált Hamilton operátorban is, és mindez igaz mindig, függetlenül attól hogy vannak e speciális feltételek, vagy nincsenek. Még azt jegyezném itt meg, hogy az eredeti Hamilton operátor kinetikus és kölcsönhatási tagjaiban is volt rendezetlenség, és mindez ugyanígy megmaradt a transzformált Hamilton operátor esetében is.

Most a (436) transzformált Hamilton operátor blokk operátorai, amelyek a transzformált szinten az egyrészezske járulékot adják, ezek vannak (434)-ben, muszáj rendezetlenséget tartalmaznak, ha a transzformált Hamilton operátor egyrészezske járuléka ezt tartalmazzák. Én itt mindebben sehol semmi ellentmondást nem látok.

19.2:

B) Most jön az alapállapot hullámfüggvény.

Amiután a transzformált Hamilton operátor (\hat{H}) (436)-ban megvan, a legáltalánosabb hullámfüggvény amely $\hat{H}|\Psi_g\rangle = 0$ összefüggést teljesíti az a (441) és (444)-ben adott (lásd a levezetést (442),(443)-ban). Az, hogy e hullámfüggvényben egy tetszőleges v_j paraméter van, az annak köszönhető, hogy \hat{H} rendezetlen. Továbbá, mivel \hat{H} rendezetlen, ezt a (441) alapállapotnak is tükröznie kell, tehát a rendezetlenség szerepét az alapállapotban v_j -nek kell átvennie. Ezért lesznek ezek a hullámfüggvény rendezetlen változói, amelyek szerint a (446) és (447) kifejezések kiértékelve vannak.

III. Idézem a szövegrészt a bírálathoz: Pályámat véletlen ellenállások hálózatának a perkolációs küszöb környékén vett vizsgálatával kezdtem. Emlékeim szerint az eredetileg korrelálatlan összetevők, ha hálózatba vannak kapcsolva, igen erősen együttes viselkedést tudnak okozni. Ebben a problémában is valami hasonló van. Itt a blokk operátorokról

van az feltételezve, hogy korrelálatlanok, de a blokk operátorokban lévő Fermi-operátorok összeérnek.

Válasz: (20)

Ha a blokk operátorokban lévő Fermi-operátorok összeérnek, ez bizonyítja hogy a blokk operátorok korreláltak. Tehát az állítás (miszerint “itt is valami hasonló van”) véleményem szerint nem igaz. A blokk operátorok (434) formája ugyanolyan mint máskor, és a lényeg benne az, hogy az induló (431) Hamilton operátort pontosan alakítják át a pozitív szemidefinit formákat tartalmazó (436) transzformált Hamilton operátorra. A segítőnek mondható feltételek, amint már azt az előbbieken említettem (19.1-es válasz), (432),(433)-ban vannak. Ezek miatt lesz lehetséges az induló Hamilton operátort, a (438) blokk operátorokkal pozitív szemidefinit formára hozni. Tehát, maga a transzformáció pontos, ha matematikailag (432), (433) fennáll.

Nos mindezt bizonyítani is tudom: ha megnézzük a (434)-ben adott plakett operátorokat, vegyük észre, hogy ezekben $a_{n,d}$ és $a_{n,f}$ plakett operátor paraméterek szerepelnek. De a (435) fedési egyenletekben már csak $a_{n,d}$ paraméterek vannak. Tehát, az eredeti fedési egyenletek át letteg ugorva hely hiánya miatt. Az eredeti fedési egyenletekben, minden (435)-ben szereplő sornak, 4 egyenlet megfelelője van. Vegyük példaként (435) első sorát. Az eredeti fedési egyenletekben ez:

$$\begin{aligned}
t_{i,i+1,x,\sigma}^{d,d} &= a_{1,d}^* a_{2,d} \epsilon_{i,\sigma} + a_{4,d}^* a_{3,d} \epsilon_{i-L,\sigma}, \\
t_{i,i+1,x,\sigma}^{f,d} &= a_{1,f}^* a_{2,d} \epsilon_{i,\sigma} + a_{4,f}^* a_{3,d} \epsilon_{i-L,\sigma}, \\
t_{i,i+1,x,\sigma}^{d,f} &= a_{1,d}^* a_{2,f} \epsilon_{i,\sigma} + a_{4,d}^* a_{3,f} \epsilon_{i-L,\sigma}, \\
t_{i,i+1,x,\sigma}^{f,f} &= a_{1,f}^* a_{2,f} \epsilon_{i,\sigma} + a_{4,f}^* a_{3,f} \epsilon_{i-L,\sigma},
\end{aligned} \tag{10}$$

Továbbá, (433) értelmében

$$t_{i,i+1,x,\sigma}^{f,f} = w^2 t_{i,i+1,x,\sigma}^{d,d}, \quad t_{i,i+1,x,\sigma}^{f,d} = w t_{i,i+1,x,\sigma}^{d,d}, \quad t_{i,i+1,x,\sigma}^{d,f} = w t_{i,i+1,x,\sigma}^{d,d} \tag{11}$$

Megfigyelhető, hogy (11) miatt, (10)-nek a megoldása $a_{n,f} = w a_{n,d}$, (itt w valós), miközben (11) (és társai) az értekezés (435) fedési egyenletrendszerévé alakulnak át. Tehát $a_{n,f} = w a_{n,d}$ nem egy találomra felírt egyenlőség, hanem (433) miatt, a fedési egyenletrendszer megoldása. Azaz (432), (433) miatt a (434) blokk operátorokkal, az induló Hamilton operátor transzformációja a (436) formára pontos és pozitív szemidefinit eredményt ad.

IV. Idézem a szövegrészt a bírálathoz: Érzésem szerint nem az a véletlen modell van a végén taglalva, mint aminek a megértése volt az eredeti cél.

Válasz: (21)

A transzformáció pontos, itt ez a lényegi információ. Tehát a (436) transzformált Hamilton operátorban, a (431, 432, 433) mint információ benne van (lásd a 20-as választ). Továbbá, (436) transzformált Hamilton operátor pontos alapállapota (441, 444). Egy pontos alapállapotnak pedig muszáj tudni hogy a kiindulópont (azaz 431, 432, 433) milyen.

V. Idézem a szövegrészt a bírálathoz: Talán ott lehet az ördög elbújtatva, hogy a vizsgált megoldás csak $1/4$ sávtöltésig megy, eddig a Hubbard-tag nem rúg labdába a kikötések miatt.

Válasz: (22)

Nos, ez nem igaz (mármint hogy a Hubbard tag nem rúg labdába). A 151 oldal első 10 sora ezt magyarázza el. Megfigyelhető ugyanis hogy a levezetett alapállapoti hullámfüggvényekben [lásd (444), (445)] nincs dupla betöltés. Azaz, az alapállapoti hullámfüggvények azért olyanok, amilyenek, mert végig ott van a Hubbard-tag. Ha kivesszük a Hubbard tagot, a megoldásokban azonnal megjelenik a dupla betöltés. Az alapállapoti hullámfüggvények formája kvalitatíve megváltozik, hiszen $\hat{O}_{j,\sigma}^\dagger \hat{O}_{j,-\sigma}^\dagger$ tagok jelennek meg benne. Ezért állítottam azt, hogy fermionikus rendezetlen rendszerek egy-elektron közelítésben (azaz independens elektron közelítésben) és inter-elektron kölcsönhatás figyelembevétele nélkül levezetett eredményeiről semmi nem garantálja, hogy infinitezimális inter-elektron kölcsönhatás bevezetésekor érvényben maradjanak.

A megfogalmazott kérdés: Lehet, hogy érvelésem nem helytálló, ezért kérem további érveket hozzon, hogy a végén kihozott lokalizáció-delokalizáció átalakulás generikusan is előfordul (az eredeti modellben).

Válasz: (23)

Amint azt az előzményeket tárgyaló II.B.3. alfejezet 3-6 soraiban (18. oldal) hangsúlyoztam, 1979-ben publikált "skálatörvény" [182], (amelyet ma nem-kölcsönható skálatörvénynek neveznek) megtöltja két dimenziós rendezetlen rendszerek esetében fém-szigetelő tranzíció létét. Az eredmények levezetését tehát nem generitás motiválta, hanem van vagy nincs kérdés. Én a tudományos tevékenységem két évtizednyi szakaszát úgy éltem le, hogy ezen "dogma" (az elnevezés nem tőlem származik, lásd pl. I.L.Aleinen, B.L.Altshuler et al. arXiv:0910.4534, vagy Altshuler Lectures - Lancaster University) hatása alatt éltem,

ezt tanították, és hangsúlyozták számtalanszor konferenciákon, tudományos előadásokon, könyvekben. Kravchenko-tól később (ő publikálta a kilencvenes években a kísérleti cáfolatot, lásd [183]) több konferencia előadásán hallottam, hogy a publikálásra küldött kísérleti cikkeit egyszerűen a “dogma” hangsúlyozásával utasították vissza tekintélyelvek alapján (hiszen [182] szerzői között Phil Anderson is ott van), az ő véleménye szerint, érdemi elemzés vagy reprodukálási kísérlet nélkül. Ilyen körülmények között “van vagy nincs” volt a fő kérdés a munkám megírásakor is. És erre a kérdésre a “van” választ az én eredményem is szolgáltatotta. Most generitást kevésbé hangsúlyozhatok. Ezt az értekezésem 152. oldalán le is írtam (alólról a 3-ik sor), aláhúzva, hogy a befogó centrumok hiányát [(432) képlet] kísérletileg nehéz megvalósítani.

B5. tézisponthoz kapcsolódó kérdések, 11-ik oldal:

A kérdésfelvezető rész kérdései:

I. Idézem a kérdést: ...szerintem (452) bal oldalán az egyik “a”-nak komplex konjugálva kellene lennie.

Válasz: (24)

Igen, az észrevétel helytálló: a (452)-es képlet bal oldalán a második “a”-nak a komplex konjugálva szerepel az összefüggésben. A komplex konjugálási jel itt lemaradt.

II. Idézem a kérdést: Nem világos a 157 oldalon a 2 eset megkülönböztetése: Az egyik esetben $q_n = q = \text{valós}$, a másik esetben $q_n \neq q = \text{valós}$. Ez utóbbin mit kell érteni: a) q_n nem állandó ? b) q_n állandó, de nem valós ?

Válasz: (25)

Az első esetben szóban megfogalmazva a matematikai jelölést: I. q_n egy állandó valós szám. II. A második eset, az első eset tagadása (azaz a megoldás, ha I. kondíciója nem teljesül): q_n nem egyenlő egy állandó valós számmal.

Az én véleményem szerint a jelölés explicit. Igaz, mindezt, egy szóban is le lehetett volna írni a disszertációban.

III. Idézem a kérdést: Érthetetlen a 157. oldalon előforduló Bl_j jelölés. Ez mi ? van-e dimenziója, esetleg szám vagy micsoda (esetleg csak a j-edik blokk jelölésére fenntartott jelölés) ?

Válasz: (26)

Idézem a disszertáció 157-ik oldaláról [(457) képlet alatti 5-ik sor] az erre vonatkozó szöveget: “Az érintkező $\hat{B}_{i,\sigma}^\dagger$ operátorok tetszőleges formájú Bl_j blokkokat építhetnek fel, melyekben N_{Bl_j} számú részecske van, $\sum_j N_{Bl_j} = N$, N_{Bl_j} ezen túlmenőleg tetszőleges.” Tehát: a $\hat{B}_{i,\sigma}^\dagger$ operátorok fermionokat helyeznek el csomópontokra, azaz egy blokkon (csomópont halmazon) hatnak. Ezen blokkokat jelöli Bl_j . Mivel a blokkokra összegezni kell, a j index a különböző blokkokat jelöli.

IV. A megfogalmazott kérdés első alkérdése: Kérem taglalja a csatolási állandók és egyéb paraméterek terében mikor lesz csík, sakktábla vagy rendezetlen klaszterek halmaza a megoldás ! Nem sikerült kihámoznom mikor, melyik rendeződési forma valósul meg.

Válasz: (27)

Először azt említtem meg (161. oldal, a szöveg aljáról számított 5-7 sorok), hogy a sakktábla megoldások egy specifikus diagonális stripe (csík) megoldásnak foghatók fel, így leírásuk egyszerűen a stripe állapot leírásával egyidejűleg megtehető.

Mindezek után az értekezés 161.oldal, D. paragrafus 14. sorától idézek (a mostati kiegészítés zárójelben van): “Az $1/4$ sávöltésen kialakuló homogén fázis, a koncentráció csökkentése nyomán rendezetlen klaszterekből álló állapotra szakad. A koncentráció további csökkentésével a rendezetlen klaszterszerű állapot stripe megoldásokat is megjelentet, de ezek degenerált formában a droplet (avagy rendezetlen klaszter) megoldásokkal együtt léteznek az alapállapotban.”. Mindez azt jelenti, hogy a (448,449) Hamilton operátor nem ad stabil (azaz nem makroszkopikusan degenerált alapállapotban lévő) stripe fázist, ha pontosan tárgyaljuk. Precízen fogalmazva, én azt kerestem, hogy egy 2D rendszerben amiben nincs kitüntetve egy irány sem, ha nem közelítünk, mi teszi nematikussá a rendszert, azaz, mi állít be egy csíkot egy irányba ? Én ilyent nem találtam (448,449) szintjén.

Folytatom most a 161. oldalról az idézetet: “Az elfajulás azonban megszüntethető úgynevezett stabilizáló tagokkal mint például disztorziós vonalak, dimerizáció, periodikus töltés eloszlás, vagy sűrűség hullámok. Ezek segítségével a rendezetlen klaszter állapotok eltávolíthatóak (az alapállapotból) és ezáltal tiszta, nem degenerált stripe alapállapotok adódnak eredményül”. Azaz, ha (448,449)-hez hozzáteszünk egy speciális adalékot (ebből lehetőségeket a 159. oldalon kezdődő alparagrafus kínál az előbb felsoroltak tükrében), nem degenerált stripe alapállapotok jelentethetők meg. Énszerintem mindezt eléggé érthetően

leírtam a B5. tézispontban is.

V. A megfogalmazott kérdés második alkérdése: (455) jobb oldalának első operátora a (455) alatti sorban van definiálva. Ebben szerepel egy v_i , amiről az van írva hogy tetszőleges. Legyen az összes $v_i = 0$. Ekkor csak az egyik spinű elektron van keltve. Ekkor miért nem lesz az állapot mágneses ?

Válasz: (28)

A (455) alatt nem csak az áll, hogy v_i tetszőleges, hanem az is hogy ez az állapot ($R = I$) degenerált [(456) alatti 5-6 sorok]. A degenerációt (amint azt a (456) hullámfüggvény formája mutatja) a v_i adja, tehát a teljes alapállapot hullámfüggvény ekkor (lásd a 10.3 válaszban bemutatott példát):

$$|\Psi_g\rangle = \sum_{\{v_i\}} \alpha_{\{v_i\}} [\prod_{i=1}^{N_A} \hat{C}_{i,\sigma}^\dagger(v_i)] |0\rangle,$$

ahol az összegzés a teljes $\{v_i\}$ szet szerint történik (lineárisan független tagokra). Ez igenis egy paramágneses állapot, és mivel minden csomóponton szigorúan csak egy elektron van az alapállapotban, az alapállapot szigetelő. Az $\alpha_{\{v_i\}}$ paraméterek a normálhatóság kikötése mellett tetszőlegesek. Az adott kifejezésben a degeneráció foka nagyon nagy (makroszkópikus). Itt nem vehetem minden v_i -t zérónak mert ezáltal kvalitatíve változtatok az alapállapoton (azaz a magot távolról sem töltöm ki teljesen).

VI. A megfogalmazott kérdés harmadik alkérdése: Ez ellentétes (mármint az összes $v_i = 0$ -ra kapott ferromágneses állapot) a 159. oldal fentről 6. sorában szereplő állítással, miszerint “ez az állapot degenerált, de globálisan nem mágneses”. Kérem oldja fel az ellentmondást !

Válasz: (29)

Lásd az V. pontban adott 28-as választ.

B7. tézisponthoz kapcsolódó kérdések, 11-ik oldal:

I. A kérdésfelvezető rész kérdése: ... a 176. oldal tetején a 39. ábra csomópontjaira van utalás. Ott semmilyen csomópont nincs. Nem a 40. ábráról van szó ?

Válasz: (30)

De igen. A 176 oldal tetején a 40. ábráról van szó.

II. A megfogalmazott kérdés első alkérdése: (480)-ban legyen az összes csatolási

állandó pozitív. Hogyan lehet a (482) alatt lévő 4. sorban szereplő alakra jutni ?

Válasz: (31)

31.1:

Tanulmányozzuk először a kérdés “hogyan jutunk el” oldalát:

(480)-ban lévő Hamilton operátortól a \hat{H}_G kifejezéséhez való eljutás a kérdés (ez utóbbi van (482) alatt a 4. sorban). Nos ez a következő képpen történik: A (483)-ban a $\hat{G}_{\alpha,i,\sigma}$ operátorok kifejezése meg van adva. Ennek következtében a \hat{H}_G effektív és explicit kiszámítható mert egyszerű bilineáris szorzatok összegét jelenti. Ez egy egyszerű, de terjedelmes munka. Miután ez megvan, a kapott kifejezés minden tagját egyeztetni kell a (480) Hamilton operátor minden tagjával (ezen eljárás részletes ismertetése a 84-es oldalon kezdődő V.B.1 fejezethez tartozó C. alfejezet (281) és (289) egyenlőségei közötti részben van leírva). A Hamilton operátor és \hat{H}_G egyeztetése azt jelenti, hogy (482) összefüggést (azaz az induló és transzformált Hamilton operátorok egyenlőségét), identitásként kezeljük. Azaz külön minden megjelenő operátor koefficiense a bal oldalon, egyenlő kell legyen ugyanazon operátor koefficiensével a jobboldalon. Ez az egyeztetés szintén nagyon egyszerű, de időigényes munka: sorra vesszük az operátorokat a bal oldalon, megkeressük hol van ugyanaz az operátor a jobb oldalon, ezután egyenlővé tesszük a koefficiensüket, majd a két operátort kihúzzuk (azaz ők le voltak tárgyalva, jöhet a következő operátor). A koefficiens egyenlőségéből adódnak a fedési egyenletek (484).

Látható tehát hogy a Hamilton operátor transzformációja mindig egzakt művelet.

31.2:

Következzen most a kérdés “minden csatolási állandó pozitív” oldala:

Amikor a fedési egyenleteket levezetjük, nem érdekelnek a csatolási állandók előjelei, egyszerűen azért, mert ők nem számítanak csak abban az esetben, ha a pozitív szemidefinit formát megváltoztatják. A jelen példában, a (482)-ben szereplő \hat{H}_P miatt, kötelezően $U_n > 0$ kell legyen minden n -re. A többi csatolási állandó előjelétől függetlenül, a (482) pozitív szemidefinit formára való átalakítás fedési egyenletei a (484) egyenletek maradnak. Vegyük pl. ezek közül az első két sorból a négy hoppingot tartalmazó tagot:

$$-t_f = a_{4,6}^* a_{4,5}, -t_h = a_{2,2}^* a_{2,3}, -t_c = a_{5,4}^* a_{5,7}, -t = a_{1,5}^* a_{1,1} = a_{1,1}^* a_{1,2} = a_{3,3}^* a_{3,4} = a_{3,4}^* a_{3,5}.$$

Igaz, hogy a bal oldalak itt negatív előjellel vannak felírva, de az $a_{i,j}$ koefficiens nem pozitív számok, hanem komplexek. Tehát abszorbeálhatják a bal oldali negatív előjeleket, pl. (valos koefficiensekre):

$$a_{5,7} < 0, a_{4,5} < 0, a_{1,1} < 0, a_{3,4} < 0, a_{2,3} < 0. \quad (12)$$

Az ϵ_n előjelek ha pozitívek mind, legfeljebb a (484) utolsó két sorában szereplő q_U , vagy U_n tagokat befolyásolják.

Látható tehát, hogy az előjelkérdések, a pozitív szemidefinit formát közvetlenül nem befolyásoló csatolási állandókra vonatkozólag (és a hoppingok általában ilyenek), csak a fedési egyenletek konkrét megoldásai során lépnek fel. A fedési egyenleteknek pedig [lásd disszertáció 90. oldal F) alfejezet] több megoldása is lehetséges, mindegyik más és más paramétertartományt jelentvén (lásd a 32-es választ is).

Ha történetesen pont azon csatolási állandó értékekre és előjelekre amelyeket vizsgálunk, nem kapunk megoldásokat a fedési egyenletekből azon a koncentráció tartományon amely érdekel, változtathatunk a blokk operátorokon, vagy bevezethetünk új blokk operátorokat a régebbiek mellé. Végeredményben mindent az dönt el, hogy mi érdekel. Engem a XVI-ik fejezetben az érdekelt, hogy pentagon cellájú láncokban, nagykoncentrációs tartományon, tényleg stabilizálhat a Coulomb kölcsönhatás mágneses fázist (tegyem hozzá, egy olyan anyagban, amiben egyáltalán nincs se mágneses atom, se lapos sáv a nemkölcsönható sáv szerkezetben), úgy ahogy ezt van den Brink [235] jósolja vagy nem (lásd disszertáció, 21-ik oldal).

III. A megfogalmazott kérdés második alkérdése: Miért nem a jobb oldal (-1) szerepe fordul elő, hisz egyszer meg kell fordítani a keltő és eltüntető operátorok sorrendjét ?

Válasz: (32)

Erre a kérdésre a válasz a módszerek ismertető V.B fejezet 90. oldalán kezdődő, “Az alapállapotok megkonstruálása” című 3. alfejezet A.) (“Ha $\hat{P}_n = \Omega_n^\dagger \Omega_n$ típusú operátorok vannak jelen \hat{H} -ban”) és B.) (“Ha $\hat{P}_n = \Omega_n \Omega_n^\dagger$ típusú operátorok vannak jelen \hat{H} -ban”) paragrafusokban található meg a 90-95 oldalakon. Itt módszertanilag van leírva, hogy a formától függően mi az általános levezetési folyamat, és hogyan néz ki a végeredmény általánosan. Összegezve az ott elmondottakat: az A.) és a B.) esetben a koncentrációtartomány különböző részein helyezkedik el az alapállapot hullámfüggvény amit eredményül kapunk: A.) esetben félig töltött rendszertöltés alatt, B.) esetben félig töltött rendszertöltés felett. Hogy ez miért van így, az abból következik, hogy az egzakt alapállapot hullámfüggvény levezetése végén kapott kifejezésben össze kell számolni (az alapállapotban szereplő keltő operátorok

száma alapján) hogy hány elektron van a rendszerben. Így az A) esetre vonatkozó (307)-es alapállapot (92. oldal), általában kis koncentrációs tartományt eredményez (félig töltés alatt) és a B.) esetre vonatkozó (313)-as alapállapot (94. oldal) nagykoncentrációs tartományt eredményez (félig töltés felett). Mivel a szóban forgó cikk esetében félig töltés felett elhelyezkedő alapállapot levezetése volt a cél, ez automatikusan indokolta a (482) alatt lévő \hat{H}_G , illetve a transzformált Hamilton operátor használt formáját.

Ennek a feltett kérdésnek egy második vetülete is van, mert benne ki van hangsúlyozva az előjel. Hadd térjek most ki újból erre az aspektusra (lásd a 31.2-es választ is). Amikor az ember eldönti, hogy az előbb említett A.) vagy B.) specifikus formát választja a transzformált Hamilton operátorban, csak a koncentrációtartomány vezérli, az előjel nem. Ugyanis, a (484) fedési egyenletekből látszik, hogy habár a csatolási állandók a bal oldalon egy kitett negatív előjellel szerepelnek (pl. a Hubbard U is), ez nem jelenti azt, hogy indulópontban előjelük korlátozott (pl. U-mindig pozitív volt az értekezésben). Ez azzal kapcsolatos, hogy a hopping tagok esetében a blokk operátor paraméterek, a lokális egyrészesecske potenciálok és a kölcsönhatási tagra vonatkozólag a q_U paraméter abszorbeálhatja a kitett negatív előjelet. Az előjelresztrikciókat nem a felbontás, hanem a fedési egyenletek megoldásaihoz tartozó resztrikciók adják a számítás végén. Pl. az itt konkrétan tanulmányozott esetben a megoldási kondíciók (487)-ben vannak feltüntetve. Ott a Hamilton operátor paraméterek közül csak a t_h -ra kapott kikötés $t_h < 0$ formájú, a többire nincs előjelkikötés. És specifikusan ezt az előjelet nem \hat{H}_G adja, hanem a talált fedési egyenlet megoldás. Most ha nekem pont egy olyan megoldás kell ahol $t_h > 0$, a fedési egyenlet egy másik megoldását kell keresnem (ez ha van más paramétertartományba visz), vagy más blokk operátorokat kell használnom (ami szintén más paramétertartományba helyez el).

IV. A megfogalmazott kérdés harmadik alkérdéscsoportja: Mi a szerepe a 37. ábrán látható, az elemi cellában szereplő 6. atomnak ? Fontos hogy ez itt legyen ? Ha igen, kérem, vázolja a 6. atom szerepét !

Válasz: (33)

A rendszer ami itt vizsgálva van egy valóságos rendszer. A leggyakoribb vezető polimér ötszögű cellákból áll, és vezető polimért legelőször ilyen formában állítottak elő poliotiófénként. Ezen ötszögű cellák a valós anyagban nem érnek egymáshoz, ezért szerepel a 37. ábrán az ötszögeket összekötő szakasz (lásd t_c hopping). Továbbmenőleg, a valóságos ilyen-

szerű anyagok ötszögének (főképp felső csúcán) antennák helyezkednek el (lásd: poliaminotriazol), sokszor több atomból felépítve, melyeknek csak egy nagyon egyszerű változata a 37. ábrán lévő felső 6-os atom. Gondolom belátható, hogy 4 atommal cellánként (ha nincs antenna és ötszögek közötti kötésvonal) sokkal könnyebb számolni mint 6 atommal cellánként, ahogy az, az értekezésben van. De így, 6 atommal cellánként könnyebb kísérletezőkkel érintkezni. Mi több, a külső antennák kémiaiilag könnyebben elérhetőek, így különböző hatásokat a rendszerre könnyebb gyakorolni, és ha az antenna az elméleti modellben is ott van, akkor a hatás magyarázata is kézzelfekvőbb. A kezdeti eredmények különböző konferencia bemutatásai után, a kísérletezőkkel folytatott tárgyalásokból világosan láthatóak voltak ezen aspektusok, amiket itt felsoroltam.

V. A megfogalmazott kérdés negyedik alkérdése: A munka utóéletét a 176 oldal G. pontban vázolja a jelölt. Itt van egy mondat. “Ezen fejezetben bemutatott eredmények több csoport tevékenységét intenzíven befolyásolták. Ezalatt mit kell érteni azon kívül, hogy a munkát meghivatkozták ?

Válasz: (34)

1. Sok nemzetközi konferencia meghívott előadási meghívásokat kapok külföldön melyeken a módszert kell bemutatnom, illetve a vele elért eredményeket. Egy évben általában 3 ilyen meghívásnak tudtam eleget tenni az utóbbi években (ezek listája, a bemutatott anyagokkal együtt a honlapomon van: www.phys.unideb.hu/~gulacsi/). Az országok között volt Kína, India, Törökország, Németország, Spanyolország és Olaszország. Az idén az USA-ba is kaptam ilyenszerű meghívást (International Conference on Mesoscopic and Condensed Matter Physics, Chicago, Oct. 2016).

2. Török féllal, melyben a külföldi partner részéről a Bilkent Egyetem és a Sakarya Egyetem szerepel, közös TÉT pályázatot adtunk be 2015 decemberében a témakörben.

3. Nemzetközi Nyári Iskolákra kapok meghívásokat mint előadó. Ebben az évben: 3rd International Summer School on Exact and Numerical Models of Low Dimensional Quantum Structures, 16-24 Aug. 2016, Ankara, nemzetközi iskolán 8 óra bemutatási időt kaptam. Jövőre: “Designing and Perturbing Flatband Networks in Condensed Matter and Photonics” van kilátásban, helyszín: Center for Theoretical Physics of Complex Systems Daejeon, South Korea, ahova az útiköltségemet is előreláthatólag fizetik.

4. Több újkeletű nemzetközi kollaborációs programba kaptam meghívást (itt nem

említem meg a már régebről fennállókat, melyek gyakorlatilag mind ebben a témakörben futnak): a) Ain Shams Cairoi Magánegyetemmel elektron-fonon kölcsönhatást kezdtünk számolni pentagon láncokban és vezető polimérekben általában. Az első cikk 2016 elején már meg is jelent (Phil. Mag. Lett. DOI: 10.1080/09500839.2016.1150611). b) Magdeburgi Egyetemmel (Johannes Richter csoportja) polimérláncok nem-lapos sáv típusú ferromágnesessége témakörben indult közös kutatási programom amelyben a Lvivi Egyetem is részt vesz. c) Uzhgorodi Egyetemmel (Ukrajna) egzakt diagonalizációs közös programunk indult (véges) polimérláncokra és alacsonydimenziós szerves rendszerekre. A numerikus munkát Konstantin Glukhov végzi. Ezt a munkát a Magdeburgi Egyetemmel vett kollaborációba kötöttem be az idén.

5. Az utóbbi időben több Kinában tartott nemzetközi konferencia meghívott előadás után (2012-2015 periodusban összesen 6 darab) 3 hónapos meghívást kaptam a Shenyangi Kinai Nemzeti Laboratórium (ez lényegében Akadémiai Kutatóintézet) részéről. 2016 február végétől május legvégéig tartozkodom itt, tanítok is (többek között a saját módszeremet), a bírálatokat is itt kaptam meg, itt válaszoltam a bírálói kérdésekre és a védés rám háruló tennivalóit is innen végeztem.

B8. tézisponthoz kapcsolódó kérdések, 12-ik oldal:

A kérdésfelvezető rész megjegyzései:

I. megjegyzés: Ez egy izgalmas tézisponthoz, hisz félig töltött megoldásokat keres, ugyanakkor ezt a tézisponthoz alátámasztó munka mindössze 2 hivatkozást kapott. Az okát korábban már taglaltam, a nagyon-nagyon speciális megközelítésekkel (a (494) körül vannak eldugva) véltem megmagyarázni.

Válasz: (35)

Úgy érzem, erre a megjegyzésre reagálnom kell, hiszen a valaha publikált anyagaim közül ez a 2008-as Phys. Rev. B. cikk [6] igényelt a legtöbb munkát. Hadd nézzünk körül az említett (494) kondíciók körül: A rendszer egy 2D itineráns rendszer. 2006-2007 periodusból származó Kvantum Monte Carlo és DMFT (dinamikus mean-field) adatok szerint [243,245] (az értekezés 179. oldala, 3. paragrafus legeleje, illetve az előzményeket bemutató II.B.7 paragrafus, 22.oldal), ha ez a rendszer a) szigetelő állapotban van, de úgy hogy b) az alapállapot makroszkópicusan degenerált, egy nagyon érdekes és meglepő jelenség zajlik le: a Hubbard U növelésével delokalizációt érünk el. Ez azért meglepő, mert általában U

növelésével lokalizáció áll elő. Az említett irodalmi adatokban a kritikus $U = U_c$ (ahol a szigetelő - vezető tranzíció elő áll) nagyon kis értékeket is felvehet, ezért én $U_c = 0$ esetet vizsgáltam, ami azt jelenti hogy $U=0$ esetben szigetelő fázis van (makroszkópicusan degenerált), $U > 0$ esetben pedig delokalizáció áll elő. Én azt vizsgáltam, hogy egzakt módon tárgyalva, ez előfordulhat e vagy sem.

Hogy mindezt meg lehessen valósítani vettem egy kétsávos rendszert, ami a periodikus Anderson modell. Most akkor kerülök a probléma tárgykörébe, ha az $U = 0$ esetet úgy állítom be, hogy szigetelő fázis legyen (azaz alsó sáv teljesen töltött, a felső sáv teljesen üres, és a két sáv nem ér össze, a csupán kinetikus tagot tartalmazó Hamilton operátorral leírt rendszerben). De ez nem elég, a szigetelő fázis makroszkópicusan degenerált kell legyen, ami azt jelenti, hogy az alsó sáv, lapos sáv. Nos ezeket a kondíciókat állítja be a (494) összefüggés. Tehát szó sincs arról, hogy nagyon specifikus megkötések legyenek elrejtve a (494) összefüggésben. Ezek a kondíciók állítják be a problémát a tanulmányozni kívánt szituációra. Mindez, a 179. oldalon lévő 3. paragrafusban világosan el van mondva.

II. megjegyzés: Idézem: Megint van egy λ “varázsfaktor” (500)-ban, ami tetszőleges komplex szám, amelynek rögzítéséről nem sok szó esik.

Válasz: (36)

Az (500)-ban adott \hat{B} operátorokban szereplő λ jelentését $B = D, F$, akövetkező oldalon lévő (82. oldal) 2-es paragrafus magyarázza el, mely paragrafus címe “A \hat{D}, \hat{F} operátorok fizikai jelentése”. Ebből a paragrafusból látszik, hogy a megoldás olyan fermionokat termel ki, amelyek spinjének fel-le kvantifikációs tengelye egy tetszőleges, a λ paraméter által meghatározott tengely. Az is el van itt magyarázva, hogy $\lambda = 1$ ezt a tengelyt az x-irányba, $\lambda = i$ az y-irányba, és $\lambda \rightarrow \infty$ a z irányba állítja be. A megoldás ennek a tengelynek a térbeli irányításától nem függ, ezért λ tetszőleges.

Én ezt nem látom varázsfaktornak.

A megfogalmazott kérdés: Hogyan függ az alapállapot energiája a Hubbard U -tól ?

Válasz: (37)

Az alsó lapos sávval rendelkező Hubbard kölcsönhatást tartalmazó modellek esetében gyakran előfordul, hogy a megoldás tetszőleges $U > 0$ -ra fennáll. Ez az eset fordul elő itt is. Tehát U jelenléte lesz a fontos, nem a nagysága. Ezáltal az U nagysága nem lép be

explicit az alapállapot energiába, csupán az számít, hogy van vagy nincs. A lapos sáv ferromágnesességnél is pl. ez a helyzet. Mindennek az az oka, hogy makroszkópicusan degenerált az alapállapot, azaz az U csak átrendezést okoz, nem alapállapot energia változást. Ez azért van így, mert makroszkópikus számú állapot van jelen, amelyeknek ugyanaz az energiája, és ezek között egy csomó van, amelyik nincs kihasználva [pl. $(\hat{f}_{i,\uparrow}^\dagger \hat{f}_{i,\downarrow}^\dagger)(\hat{d}_{j,\uparrow}^\dagger \hat{d}_{j,\downarrow}^\dagger)$ van, de $(\hat{f}_{i,\uparrow}^\dagger \hat{d}_{i,\downarrow}^\dagger)(\hat{f}_{j,\downarrow}^\dagger \hat{d}_{j,\uparrow}^\dagger)$ nincs $U = 0$ -ra, ahol $|\mathbf{i} - \mathbf{j}|/|\mathbf{a}| \gg 1$, és $|\mathbf{a}|$ a rácsállandó]. De ez távolról sem jelenti azt, hogy U nem számít, hiszen a pusztán jelenléte, a dupla f-betöltések számának drasztikus megváltoztatásával (Avogadro számnyi nagyságrendű változásról van itt szó makroszkópikus rendszerben), kvalitatíve változtatja meg az alapállapotot. Amint a 188. oldalon lévő 48. ábra ezt mutatja, a jelen esetben az f-dupla betöltések kizárása a hosszútávú f-hopping alapállapot várható értékét több nagyságrenddel növeli meg.

B9. tézispontozhoz kapcsolódó kérdés, 12-ik oldal:

A kérdésfelvezető rész megjegyzése: A tézispontot alátámasztott cikkek között megjelenik két új, eddig még nem taglalt cikk: az [5],[25].

Kérdés:

Kérem indokolja meg miért nem írt erről a két cikkről korábban ! Mi az új ezekben a korábban már leírtakhoz képest ?

Válasz: (38)

A 145. oldalon kezdődő XIII-ik fejezet teljes egészében az [5]-ös cikkről szól (lásd idézet a 146. oldal 17. sorában), a [25]-ös cikk pedig a módszertani bemutatáshoz tartozik, a 84-es oldal C) alfejezete feletti 8-ik sorban, vagy a 81-es oldalon (alólról a 3-ik sorban) idézve van.

IV. B2-B9 TÉZISPONTOKHOZ TARTOZÓ ÁLTALÁNOS MEGJEGYZÉSEK

Mindezek után, amint azt elmondtam a B2 válaszok megfogalmazása előtt, a B2-B9 tézispontokra vonatkozó és a 9-ik oldalon található általános megjegyzésekre válaszolok alább.

I. Megjegyzés, B2-B9 tézispontok, 9. oldal: ...az értekezést végigolvasva, meg kell jegyezni, hogy mindig van valami kis csel, hogy az adott probléma azért még a kezelhetőség

határán maradjon. Szó sincs róla, hogy pl. a Hubbard-modellt tetszőleges csatolási állandók és betöltéseknél meg lehetne oldani.

Válasz: (39)

Ezen a ponton egy dolgot szeretnék aláhúzni. Nem integrálható rendszerekre vonatkozó pontos megoldások területén vagyunk. Pillanatnyilag ez azt jelenti hogy az alapállapotra és közvetlen közelségére tudunk valamit pontosan mondani. Azaz, az ami az integrálható esetben fennállt, mégpedig, hogy egyetlen matematikai formalizmus keretei között a teljes energia spektrumot és az integrálhatósági tartományon belül a teljes fázisdiagramot pontosan át tudjuk fésülni, az megszűnt létezni. Itt rétegekben kell feltérképezni a paraméter tartományt. Egy rétegre tudok csak pontosan számolni, és ha azt akarom, hogy a teljes fázisdiagramról pontos képem legyen, több réteget kell átfésülnöm, és az így kapott “párhuzamos” információkat kell összekötnöm. Egy réteg egy pozitív szemidefinites felbontáshoz tartozó fedési egyenletrendszer egy megoldását jelenti. Ha több réteget akarok, vagy kell kapnom ugyanazon fedési egyenletrendszer egy másik megoldását (ez automatikusan más paraméter tartományba visz mert más megoldás), vagy másik felbontást kell legyártanom, ami mivel más fedési egyenletekkel rendelkezik, újból más megoldást jelent, azaz más paraméter tartományt ír le. Mindezen információ a 90. oldalon lévő F) alfejezetben megtalálható, és a módszerbemutató fejezet részét képezi. De egyben szemléltetve is volt, pl. a XII-ik fejezet 3D periodikus Anderson model 3/4 rendszertöltés feletti nem-Fermi folyadék fázisa 3 különböző rétegben volt levezetve, mindhárom rétegre ugyanazon fizikai tulajdonságokat és kvalitatív viselkedést visszkapva [12].

II. Megjegyzés, B2-B9 tézispontok, 9. oldal: Ezen kis cselek (távolról sem teljes a lista): Mindenütt kell legalább másodsomszéd kölcsönhatás

Válasz: (40)

40.1:

Gondolom ez elírás: itt másodsomszéd hoppingra gondolt a bíráló, hiszen sehol a disszertációban másodsomszéd kölcsönhatás (legalábbis a B2-B9 tézispontokat érítőleg) nincs.

Nos ez nem igaz (mármint hogy kell másodsomszéd hopping). Ugyanis ki lett dolgozva annak a módszertana, hogy hogyan kell a pozitív szemidefinit felbontás során a másodsomszéd járulékoktól megszabadulni [lásd a 88-ik oldalon a 11-ik ábra feletti 10-ik sortól kezdődő szöveget, melyet a 11-ik ábra a (293-295)-ig menő képletekkel együtt

szemléltet]. Az eljárás lényege végül is egyszerű: ha el akarok távolítani egy hopping szakaszt amely a blokk operátorokból megjelenik, de a Hamilton operátorba nincs, akkor két blokkot kell az illető szakaszra ráállítanom, hogy ki tudjam ejteni. Azaz, az illető szakasz mentén legalább két blokk operátor kell járulékot adjon, és így a két járulék összege zéróvá tételével, a nemkivánt tag kiejthető. Pl. csak egy blokk járulék esetén, egy hopping a fedési egyenletekben $t = a_1^*a_2$ formában néz ki. Az a_1 vagy a_2 blokk koefficienseket itt nem tehetem egyenlővé zéróval, mert magát a blokkot, úgy ahogy választottam, szüntetem ezáltal meg. De ha 2 blokk ad járulékot a t hoppingra, akkor a t egyenlete $t = a_1^*a_2 + b_1^*b_2$ lesz, ahol megtehetem $a_1^*a_2 + b_1^*b_2 = 0$ megkövetelését, mert ezáltal a választott blokkjaim “életbe maradnak”, de ugyanakkor $t = 0$ révén a nemkívánatos hopping kiesik. A B3 tézispont [3]-as publikációjához tartozó megoldás (lásd a 17.3 választ), ezt az eljárást használja fel arra, hogy mind a hoppingokból, mind a hibridizációs tagból a másodsomszéd járulékokat kiejtse.

40.2:

Nyomatékosan szeretném hangsúlyozni, hogy az állítás miszerint “Mindenütt kell legalább másodsomszéd hopping” nem fedi a valóságot, és ezt példázhatom konkrétan is, a disszertációban nagy részletességgel bemutatott anyag szintjén is a XVI-ik fejezettel, (pentagon cellájú láncok), ahol egyáltalán másodsomszéd ugrás nincs. Ha megnézzük a (483)-ban bemutatott blokk operátorokat (172. oldal), láthatjuk, hogy ezek közül 3 darab ($\hat{G}_{1,i,\sigma}, \hat{G}_{2,i,\sigma}, \hat{G}_{3,i,\sigma}$), háromszögeken értelmezett, melyek a (2,5) és (3,5) csomópontokat összekötő szakaszokat is tartalmazzák, tehát ezen szakaszokon “másodsomszéd ugrásokat” generálnal (lásd 37. ábra, 171-es oldal), amelyek viszont a (480) induló Hamilton operátorban (170. oldal), nincsenek benne. Ezeket a hoppingokat ki kell ejteni, és ezért itt konkrétan szemléltetve van az az eljárás amiről a 40.1 válasz beszél, és amelyet a disszertáció a módszertani ismertető keretei között, a 88-ik oldalon bemutat. A $\hat{G}_{2,i,\sigma}$ blokk operátor szerepe (többek között) pontosan az, hogy ezen “nem kívánatos ugrásokat” kiejtse. Az a tény, hogy a (2,5) és (3,5) másodsomszéd ugrások akarattal ki vannak ejtve, a (484)-es fedési egyenletek második sorának két utolsó zéróval egyenlő összefüggéseiből látszanak. Nos ez a “zéró”, pontosan a $t_{2,5} = t_{3,5} = 0$ hoppingokat jelenti. Ezt azért vagyok kényszerülve külön hangsúlyozni, mert a bírálat, a csak elsőhopping jelenlétének állítólagos hiányát, a módszer értékével hozza kapcsolatba (lásd V.B. fejezetre vonatkozó megjegyzések, kérdések, bírálat 6-ik oldal, harmadik bekezdés, a 7-es válaszok (itt 5. oldal) generálója).

40.3:

Ezen példa aláhúzza azt a tényt, hogy ez a módszer ami kialakult, és amelyről a B2-B9 tézispontok kapcsán itt beszélünk, ma már távolról sem az aminek Brandt és Gisekus [136] idejében negyed évszázaddal ezelőtt indult, amikor is ráálltak egy hullámfüggvényre, és megkonstruálták azt a Hamilton operátort ami ezt a hullámfüggvényt adja eredményül mint alapállapot. Ma a módszer fordítva működik: egy rögzített Hamilton operátorból indulunk ki amit pont ráállítunk arra a problémára ami érdekel. Majd anélkül hogy valamit is tudnánk (matematikailag) arról az alapállapotról ami kialakul majd, levezetjük. Mindezt nagyon jól szemlélteti pl. a XVII fejezetben bemutatott probléma (az ami a B8-as tézisponthoz kapcsolódik), ahol világosan megfogalmazott a kiindulópont mint Hamilton operátor (lásd a 35-ös választ), és a feladat az, hogy a hozzá tartozó megoldást (mint alapállapotot) kell megkeresni (lásd a B.8 pontnál adott 35-37 válaszokat). Hasonlóan, a XVI-ik fejezetben (B.7-es tézispont), magaskoncentrációs tartományon, teljes diszperzív nemkölsönható sáv szerkezettel nézzük, hogy U képes e mágneses fázist stabilizálni egy egyáltalán mágneses atomot nem tartalmazó szerves rendszerben vagy nem (lásd a 31.2 válasz végét és a 32-es választ). A módszertani fejlesztésekre vonatkozólag, hogy más példát is említsek, a 2D-3D periodikus Anderson modellnél, hol kezdetben csak f-hopping és képzetes hibridizáció jelenlétében adódtak az eredmények (lásd a 17-es válaszokat), módszertani eljárások kidolgozásával, ma lehet f-hopping nélkül (azaz csak f-nívóval), valós hibridizációval, és akár csak elsőszomszéd hopping és hibridizációs tagokkal számolni. Mindezt az információt (azaz hogy ma a módszer fordítva működik), a disszertáció, a 15-16-ik oldalon, a módszer előzményeit bemutató II. fejezet B.2.a) paragrafusa utolsó 17 sorában tartalmazza.

40.4:

Szeretnék itt még egy aspektust hangsúlyozni: ha az ember kísérletezőkkel tárgyal valós anyagokról, a másodsomszéd tagok jelenléte nem hátrány, hanem előny. És továbbmenőleg, pl. a dinamikus mean-field (DMFT), ab-initio sáv szerkezetet vesz át, tehát a hoppingokat végtelen rendig tartalmazza. Ha ugyanazt a valós anyagot akarom tárgyalni mint ők, és nincs legalább másodsomszéd hoppingom, nem kommunikálhatok velük. Pedig ugyanazt az anyagot próbáljuk leírni, és esetleg egymás eredményeiből tanulni szeretnénk.

III. Megjegyzés, B2-B9 tézispontok, 9. oldal:

Több esetben is a transzformált alak együtthatójára van kikötés (pl. $a_{n,f} = wa_{n,d}$), ilyenkor nem világos ez mit jelent az eredeti csatolási állandók terében.

Válasz: (41)

Én itt azt látom, hogy az itt szereplő állítás nem igaz: i) Egyetlen eset sincs ahol a fedési egyenletek megoldása közben plusz kikötések lettek volna felhasználva mint azok amelyek az indulás pillanatában rögzítve voltak, azaz mindig, az induló Hamilton operátornak, az induló kondíciók melletti transzformációja egzakt, ii) amint azt a B4 tézisponthoz kapcsolódó válaszoknál bizonyítottam (lásd III. pont (10-11) egyenletei, 20-as válasz), az $a_{n,f} = wa_{n,d}$ egyenlőség a fedési egyenletek megoldását képezi a (433) induló kondíció mellett.

IV. Megjegyzés, B2-B9 tézispontok, 9. oldal: A Hubbard-kölcsönhatás a bemutatott esetek többségében lényegében nem hat (Ebbe a csoportba sorolom azt is, ha pl. a (422)-ben ható \hat{P}_i operátor annihilálja az alapállapotot (B2-B7 tézispontok)).

Válasz: (42)

Hadd vegyem sorra az eseteket: A (422) 3D Hamilton operátor a XII-es fejezetben (B2-B3 tézispontok) egy Phys. Rev. Lett. anyag része [11], és ha \hat{P}_i annihilálja az alapállapotot, és \hat{P}_i csatolási állandója a Hubbard U , akkor matematikailag a Hubbard U hatott. Fizikailag, pl. 3/4 töltés körül egy 3D nem-Fermi folyadékot és egy szigetelő fázist tudtam kimutatni, az utóbbi elhagyásakor kompresszibilitási anomália lépven fel (lásd a B2-nél adott 16. választ). Mindez eltűnik ha $U = 0$. Azaz fizikailag is, az én véleményem szerint, a Hubbard kölcsönhatás nagyon is hatott.

A B3-as tézispontnál felhasznált cikkek részletes bemutatása során látszik (lásd a B3-hoz kapcsolódó 17-es válaszokat), hogy 2D-ben levezetett fázisok szintén eltűnnek $U=0$ esetében, és U , az alapállapot energiában is szerepel explicit módon.

A XIII-ik fejezet (B4-es tézispont) mutatja, hogy az $U > 0$ esetben levezetett fázis megszűnik létezni $U = 0$ -ra, miközben az alapállapot kvalitatíve megváltozik, és egy lokalizáció - delokalizációs átmenetet lehet a koncentráció függvényében kimutatni 2D rendezetlen rendszerben egy "van vagy nincs" kérdésre válaszolva. Az eredmény itt is $U > 0$ -nak köszönhető (lásd a B4-hez kapcsolódó 20 és 22 válaszokat).

A XIV-ik fejezetben (B5 tézispont) meg lehet mondani hogy a 2D rendszer elemzett kölcsönható Hamilton operátora képtelen önmaga csíkos szerkezetet létrehozni, és hogy ilyesmi létrejöjjön, valami mással kell a rendszer tudtára hozni hogy nematikus, azaz

hogy egy irány ki van tüntetve (lásd a B5 ponthoz kapcsolódó 27-es választ). Az $U = 0$ nemkölcsönható esetre (hiszen ő rendeződést nem hoz létre), ezt nem lehet megtenni, tehát itt se lehetne semmi információt a viselkedésre vonatkozólag mondani, ha U nem hatott volna végig aktívan.

A XV-ik fejezet (B6-os tézispont), melyhez kérdések nem kapcsolódtak, nagyon érdekes rendezett fázisokkal van tele amelyet az $U = 0$ nemkölcsönható eset elvből nem produkálhat.

A XVI-ik fejezetben (B7-es tézispont), mely egy Phys. Rev. Lett. [22] publikációhoz tartozik többek között, a rendszer egy adott nemkölcsönható, teljesen diszprzív sávszerkezettel indul, amelyben tehát $U = 0$ -ra nincs lapos sáv. Ebben a rendszerben, az $U > 0$ legyárt egy teljesen diszperziómentes sávot amelybe rendkívül érdekes rendezett fázisokat hoz létre, amelyek tárgyalása $U > 0$ nélkül egyáltalán nem is lehetséges.

Ezekre a B2 – B7 esetekre hangzik el az az állítás, hogy “a Hubbard kölcsönhatás a bemutatott esetek többségében nem hat.”

V. Megjegyzés, B2-B9 tézispontok, 9. oldal: Az igazán izgalmas, félig töltött esetben (B7 tézispont) viszont a (494) feltételek, illetve az előző sorban a másod, és harmad szomszédok ugrásainak együtthatójára kirótt feltételek együttesen eredményezik csak, hogy (502)-vel adott transzformált megoldások “szépek” legyenek.

Válasz: (43)

Először is, itt bizonyára, egy elírás történetett, mert (494)-es képlet a XVII. fejezetben van, amely a B8 tézispontoz tartozik, tehát itt B7 tézispont helyett, B8 tézispont áll valójában a megjegyzésben.

Amint azt a B8-as pontnál adott 35-ös válaszban leírtam, a (494)-es egyenlőségek a tanulmányozott probléma keretei közé helyezést jelentik, nem “szépítő” feltételeket. Az “előző sorban szereplő” 7 egyenlőség közül, 6 darab, ugyanazon atomokból felépített négyzet cellát definiál és jelöl:

$$t_x = t_y = t_1, t_{2x} = t_{2y} = t_2/2, V_x^{b,b'} = V_y^{b,b'} = V_1.$$

A megmaradt hetedik összefüggés t_{2x} és $t_{y\pm x}$ arányát rögzíti 1/2-re. A fizikai eredmény, (lásd a B8 tézispontnál, a megfogalmazott kérdésre adott 37-es választ), történetesen az, hogy $U = 0$ -ra a makroszkópiusan degenerált állapotban pl. a $(\hat{f}_{i,\uparrow}^\dagger \hat{f}_{i,\downarrow}^\dagger)(\hat{d}_{j,\uparrow}^\dagger \hat{d}_{j,\downarrow}^\dagger)$ állapot van, de pl. $(\hat{f}_{i,\uparrow}^\dagger \hat{d}_{i,\downarrow}^\dagger)(\hat{f}_{j,\downarrow}^\dagger \hat{d}_{j,\uparrow}^\dagger)$ állapot nincs. Ezért U belépésekor, az f-elektronokat szétteríti a felületen,

azaz megszünteti az $U > 0$ -ra energianövelő (f-dupla betöltött) csomópontokat és ezáltal az f-elektronok hosszútávú hopping valószínűségét nagymértékben megnöveli, azaz delokalizáló hatást fejt ki. Nincs véleményem szerint fizikai ok amely ezt a tényt függővé tegye t_{2x} és $t_{y\pm x}$ arányától. Amúgy, a $t_{2x}/t_{y\pm x} = 1/2$ arány az elvárt fizikai nagyságrend arányoknak megfelel, és kiküszöbölése (lásd disszertáció 88. oldal), két ugyanazon csomópontonhoz kötött blokk operátor bevezetésével történhet meg. Ez a lépés, az amúgy is komplikált számítást még jobban elbonyolítaná. Ezt a lépést, ami nem kis időigénnyel is járna, nem tettem meg mert nem láttam értelmét, ugyanis fizikai okot nem láttam arra, hogy ez, a fizikai háttérfolyamatot megváltoztatná.

VI. Megjegyzés, B2-B9 tézispontok, 9. oldal: érzésem szerint eléggé sok feltétel van kiróva, mert az általános (tetszőleges csatolási állandójú esetek) továbbra is megoldatlanok.

Válasz: (44)

Amint azt a tárgyalt B2-B9 tézispontokhoz tartozó I. Megjegyzésre adott 39-es válaszban elmondtam, nem állunk integrálható modellek területén. Itt csak a paramétertartomány egy adott rétege tanulmányozható csak egyszerre pontosan. Így ki kell választanom azt a paraméter tartomány réteget ami érdekel, és egy ilyen elemzésből nem lehet “tetszőleges csatolási állandójú” eredményt szolgáltatni egzakt módon.

VII. Megjegyzés, B2-B9 tézispontok, 9. oldal: Ezért érzem a tézispontok némelyikében a megfogalmazást barokkosan túlzónak, mert a megfogalmazások azt sugallják, hogy a vizsgált paramétereknél általánosabb esetben is felléphet a tézispontban fellépő jelenség.

Válasz: (45)

Itt a megjegyzésben nincs pontos tézispont megjelölés, konkrét megfogalmazásra vonatkozó utalás. Én úgy gondolom, hogy a B2-B9 tézispontok mögött tények, és eredmények állnak. De ezen túlmenően, ha már “más” paramétertartomány is említésbe került, aláhúzom a következőket:

i) a B.2 tézispont esetében (XII-ik fejezet), 3D PAM 3/4 rendszertöltés feletti nem-Fermi folyadék fázis jelenlétét, ugyanazon fizikai tulajdonságokkal, a paramétertér 3 különböző szejletén igazoltam [12], a 3/4 rendszertöltésen megjelenő szigetelő fázisról, a kiemelt tulajdonságával együtt (kompresszibilitási anomália), a részletesen bemutatott megoldáson kívül (140-141 oldalak) bizonyítottam, hogy tetszőleges 3D Bravais rácsban fellép ([12], C-

Appendix)

ii) a B.3 tézispont esetében (XII-ik fejezet) a 2D PAM modellben $3/4$ rendszertöltés felett levezetett nem-Fermi folyadék fázisról először lett igazolva hogy f-hopping nélkül, valós hibridizációkkal, és nem-torzított rácsban is jelen van [2]. Az f-hoppingok és képzetes hibridizációk jelenléte mellett ezen fázis szintén megjelenhet [149]. A $3/4$ rendszertöltésen megjelenő szigetelő fázis két különböző paramétertér szeleten van levezetve (spinvetület független blokk operátorokkal [3], és spinvetület függő blokk operátorok jelenlétében Z.G. Acta Phys. Pol. B34, 749 (2003)), ugyanazon fizikai tulajdonságokat eredményezve.

iii) a B.4 tézispont esetében (XIII-ik fejezet) a rendezetlen rendszereket éritő megoldás úgy diagonális, mint nem-diagonális rendezetlenség esetében is fennáll.

iv) a B.5 tézispont esetében (XIV-ik fejezet) a csík fázisra vonatkozó megállapítások, és pedig, hogy az $n_r = 1/4$ rendszertöltésen megjelenő homogén fázis $n < n_r$ -re rendezetlen klaszterekből felépített fázisba megy át, amelyben a koncentráció csökkentésével, a degenerált alapállapotban a stripe fázis is megjelenik, minden n_r -en jelenlévő homogén fázisra igaz. Ennek megfelelően, hogy a 2D PAM-on túlmenőleg, szupplementáris tagokra van szükség a csík fázis stabilizálására, szintén minden n_r -en jelen lévő homogén fázisra igaz. Ezek közül 2 példát mutat be a disszertáció, két különböző esetre.

v) a B.6 tézispont esetében (XV-ik fejezet) az van kiemelve hogy “első alkalommal” vannak egzakt multielektronikus alapállapotaink a négyszöges cellájú láncra és fel vannak sorolva, hogy mellyek ezek.

vi) a B.7 tézispont esetében (pentagon cellájú láncok, XVI-ik fejezet) a kimutatott effektív, kölcsönhatás által létrehozott lapos sávról igazoltam, hogy nagyon nagyszámú és különböző formájú polimérben létrejön [23,24]

vii) a B.8 tézispont esetében (XVII-ik fejezet) a problémába helyezésen kívül, egyetlen “könnyítő” feltételezés van ($p = t_{2x}/t_{y\pm x} = 1/2$), amely az elvárt fizikai nagyságrendeket a két szóban forgó hoppingra nagyságrendileg helyesen állítja be, és nincs fizikai ok jelen, amely p megváltoztatásával, a tapasztalt folyamat fizikai hátterének megváltoztatását idézné elő.

viii) a B.9. tézispont esetében, mely a módszertani fejlesztésekhez fűződik, azt említeném meg, hogy a) olyan alapállapotú hullámfüggvényeket kapunk eredményül, amelyek indulópontban ismeretlenek voltak, továbbá b) a PAM esetében (és a polimérek kivételével minden előbbi fejezet végül is ide sorolható), véges $U > 0$ szituációban vagyunk, c) a levezetések nem a Hamilton operátor random bővítései alapján történnek, hanem egy megtervezett és

bemutatott stratégia alapján mely minden alkalommal alkalmazva van, tehát ezen esetek a Brandt [136] illetve Strack [137] idejében alkalmazott módszerrel nem elérhetők.

VIII. Megjegyzés, B2-B9 tézispontok, 9. oldal: Továbbra sem tudom, hogy mi a helyzet, ha csak elsőszomszéd ugrások és hibridizációs potenciálok vannak jelen.

Válasz: (46)

Lásd a II. megjegyzésre adott 40-es választ.

Shenyang, 2016 május 7.

Dr. Gulácsi Zsolt