



$D > 1$ dimenziós erősen kölcsönható
rendszerekre vonatkozó egzakt
megoldások

doktori (Ph.D.) értekezés tézisei

Gurin Péter

Debrecen, 2001.

Készült:

A Debreceni Egyetem
Elméleti Fizikai Tanszékén

Témavezető:

Dr. Gulácsi Zsolt

Bevezetés

Napjaink szilárdtestfizikai és statisztikus fizikai kutatásainak sok központi kérdése az erősen kölcsönható, és ebből kifolyólag gyakran erősen korrelált állapotú elektronrendszer viselkedésének leírásához kapcsolódik. Prominens példák a magas hőmérsékletű szupravezetés, szuperfolyékonyság, kvantum Hall-effektus, nehéz-Fermion rendszerek, nem-Fermi-folyadék viselkedést mutató rendszerek, és a leghétköznapibb ide tartozó jelenség talán a ferromágnesség, amely ősidők óta ismert, de amelynek a teljes megértésétől még ma is messze vagyunk. Ennek a legfőbb oka abban rejlik, hogy a fent említett problémák sok erősen csatolt részecskét tartalmazó kvantummechanikai rendszerekhez kapcsolódnak, amelyekben a széles skálán változó és így nagy értéket is elérő csatolási állandók miatt a hagyományos közelítő eljárások (pl. perturbációszámítás) alkalmazása — ha egyáltalán lehetséges, — nehéz, az így adódó eredmények a paramétertérnek csak egy szűk tartományán érvényesek, és még ennek az érvényességi tartománynak a határai is sokszor nagyon bizonytalanok. Ezért ezen a területen különösen értékesek az egzakt megoldások, főleg akkor, ha ezek a paramétertér széles tartományán és nagy csatolási állandók esetén is érvényesek. Azonban az erősen korrelált rendszerek területén az ismert egzakt megoldási módszerek legnagyobb része csak egy dimenzióban alkalmazható (pl. Bethe Ansatz).

PhD munkám célja a fent leírt problematikus esetekben is alkalmazható új típusú egzakt módszerek kipróbálása erősen kölcsönható sokrészecskés rendszerek népszerű modelljein, illetve ha csak lehetséges, ilyen jellegű módszerek kifejlesztése vagy továbbfejlesztése. Az általam vizsgált modellek mindeddig a Hubbard-modell, illetve annak valamilyen kibővített változatai, valamint a periodikus Anderson-modell voltak.

Ennek keretében munkám első szakaszában egy szisztematikusan először Brandt és Giesekeus által alkalmazott módszer [U. Brandt and A. Giesekeus, Phys. Rev. Lett. **68**, 2648 (1992)] használhatóságát vizsgáltam. A módszer lényege, hogy a variációs elvet — melynek segítségével felső határ adható az alapállapot energiára — kombinálva a Hamilton-operátor konstans ill. pozitív szemidefinit tagok összegére bontásával — amely a pozitív

szemidefinit tagokat elhagyva alsó határt ad az alapállapot energiára — meghatározható a paraméterter olyan tartománya, amelyben az alapállapot energiára vonatkozó egzakt alsó ill. felső határok egybeesnek, így megadják annak pontos értékét. A hozzá tartozó hullámfüggvény — a variációs elv használatából adódóan — szintén ismert. Mivel korábban ezt a módszert csak első szomszéd kölcsönhatásokkal kibővített Hubbard-modell vizsgálatára használták, de bizonyos elméleti és kísérleti tények arra utaltak, hogy a második szomszéd kölcsönhatások fontossága ezzel összemérhető, ezért a cél ennek a kérdésnek a vizsgálata volt.

Később ennek a módszernek az alkalmazásával tanulmányoztam a periodikus Anderson-modellt két dimenzióban. Ennek a kérdésnek a nehézségét jól mutatja, hogy még az egydimenziós esetre vonatkozóan is nagyon kevés egzakt eredmény található az irodalomban. Az általam bemutatott megoldás kapcsolódik a nem-Fermi-folyadék jellegű viselkedést mutató rendszerek manapság hatalmas érdeklődést kiváltó kérdésköréhez.

Régóta nyitott kérdés az erősen korrelált rendszerek egyik legalapvetőbb modelljének tekinthető egyszerű Hubbard-modell ferromágneses tulajdonságainak kérdése. Habár mára bizonyossá vált, hogy nem ez a ferromágnesség általános modellje, de elméletileg továbbra is érdekes a ferromágnességhez vezető mechanizmusok keresése. Továbbá a modell tulajdonságainak leírása az erősen kölcsönható határesetben félig töltött sáv közelében a magas hőmérsékletű szupravezetők megértése szempontjából is releváns lehet.

Eredmények

Tudományos eredményeimet az alábbi tézispontok tartalmazzák:

1. Általánosítottam Brandt és Giesekus módszerét második szomszéd kölcsönhatásokkal kibővített Hubbard-modellre, és ennek segítségével alapállapot fázisdiagramot adtam a modellre. Eredményeim tet-szőleges egynél nagyobb dimenzióban és félig töltött sáv esetén érvényesek.[1, 2, 3]

- (a) A fázisdiagramban teljesen telített ferromágneses fázis, különböző spin- és töltéssűrűség-hullámokat leíró fázisok stabilitási tartományait, valamint fázisszeperációt mutató tartományt sikerült körülhatárolnom. Ez utóbbira — közelítések használata nélkül — tudomásom szerint korábban nem volt példa az irodalomban $D > 1$ dimenziós rendszer esetén.
- (b) A ferromágneses és a spin- illetve töltéssűrűség-hullám fázisok általam megadott stabilitási tartományai szélesebbek az irodalomban korábban megadottaknál, így azok javításának tekinthetők.
- (c) Lokalizált határesetben — amikor a Hamilton-operátor semmilyen mozgást leíró tagot nem tartalmaz — a bemutatott fázisdiagram teljes, ha a Heisenberg-kölcsönhatás teljesen anizotróp, vagy izotróp és csatolási állandója nem negatív.
- (d) Az eredmények alátámasztják, hogy a második szomszéd kölcsönhatásoknak jelentős szerepük van a rendezett fázisok stabilitási tartományainak kialakításában; erősen befolyásolják ezen tartományok határait, sőt olyan fázisok megjelenéséhez vezetnek, amelyek nélkülük nem lennének stabilak.

2. Mindeddig periodikus Anderson modellre egydimenziós egzakt megoldás sem volt ismert olyan esetben, amikor a kölcsönhatás erőssége véges. Ebben a dolgozatban én ismertettem egy két dimenzióra vonatkozó eredményt, amely az alapállapotot a paramétertér egy hiperfelületén adja meg, amelynek mentén a kölcsönhatás erőssége tetszőleges értékek között változhat. Az alapállapotot leíró hullámfüggvény perturbatív úton nem kapható meg. A megoldás fizikai tartalma a modellparaméterek értékétől függően kétféle lehet: paramágneses Mott-szigetelő, vagy nem-Fermi-folyadék típusú. [6]

- (a) Az egyik típusú megoldás háromnegyedig töltött sáv esetén jelenik meg, és paramágneses Mott szigetelőt ír le, lévén az alapállapotot leíró hullámfüggvényben minden részecske teljesen lokalizált.

(b) A másik megoldás egy új, nem-Fermi-folyadék jellegű normális (nem szimmetriasértő) fázist ír le háromnegyed vagy afeletti sávbetöltöttség esetén. Ebben a fázisban az elektronok impulzustérbeli eloszlásfüggvénye és az ő összes deriváltja folytonos, és emiatt — habár létezik Fermi-energia — Fermi-felület és hozzá tartozó Fermi-impulzus nem definiálható. Ez a fázis a paramétertérben a Mott szigetelőt leíró fázis közelében helyezkedik el, maga pedig erős spindegenerációval jellemezhető paramágnes. A fizikailag érdekes viselkedés bizonyos értelemben egy lapos sáv effektus eredménye. Ha a nemkölcönható problémát úgy módosítjuk, hogy az f sáv magasságát U -val, a kölcsönhatás erősségével eltöljük, az így adódó Hamilton-operátor diagonalizálásából egy teljesen lapos sáv adódik, amely a kölcsönhatás teljes figyelembevételére esetén is megmarad, és így divergenciát okoz az állapotsűrűségben a Fermi-energiánál. Ez a lapos sáv részlegesen betöltött, és egy másik sáv felett helyezkedik el, amely teljesen betöltött. Az alacsony energiájú gerjesztések a Fermi-energiájú részecskék számát növelik azáltal, hogy elektronok ugranak fel az alsó sávból a felső, lapos sávba.

3. Ismertettem egy olyan eljárást, amelynek a segítségével az egyszerű Hubbard-modell végtelen erős kölcsönhatás határesetében tanulmányozható. A formalizmus — a leírás szintjén — szeparáltan kezeli a spin és a töltés szabadsági fokokat, és explicit kifejezi a spinhátter hatását a mozgó lyukra.[4, 5]

(a) Explicit megmutattam, hogyan fejezhető ki egy meghatározott spinnel és spin vetülettel jellemzett invariáns altérben adott bázisban a Hamilton-operátor mátrixelemei az N -ed fokú szimmetrikus csoport bizonyos irreducibilis ábrázolásainak mátrixelemeivel. (N a részecskék száma.) Ez hasznos lehet kis rendszerekre vonatkozó numerikusan egzakt diagonalizálási feladatok esetén.

(b) Kidolgoztam egy magas hőmérsékletű sorfejtési eljárást, amelyben az állapotösszeg kiszámításához szükséges összegzésnek a spin

szabadsági fokokra vonatkozó része analitikusan kifejezhető a szimmetrikus csoport karaktereinek segítségével. Erre alapozva növelhető a “world line” algoritmusú Monte Carlo szimuláció hatékonysága.

- (c) Az említett formalizmus keretében a ferromágnesesség Nagaokamechanizmusa könnyen interpretálható: a rendszert felépítő elektronok fermion jellege nem jut érvényre a végtelen erős kölcsönhatás miatt, ha csak egy lyuk van a rendszerben. A helyzet hasonló egy dimenzióban nyílt határfeltételek esetén (a részecskék száma tetszőleges), vagy páratlan számú részecske esetén periodikus határfeltételek mellett, és páros számú részecske esetén antiperiodikus határfeltételek mellett.

A tézisek alapjául szolgáló közlemények

- [1] *Exact phase diagram for extended Hubbard model in $D > 1$ dimensions with next-nearest-neighbour interaction terms*, P. Gurin and Zs. Gulácsi, Low Temp. Phys. **21**, 2643 (1996).
- [2] *Hubbard model with next-nearest-neighbour interaction terms in higher dimensions: New exactly solvable cases*, P. Gurin and Zs. Gulácsi, Phil. Mag. B **76**, 827 (1997).
- [3] *Exact results related to the extended Hubbard model with increased interaction range in $D > 1$ dimensions*, P. Gurin and Zs. Gulácsi, Phil. Mag. B **78**, 315 (1998).
- [4] *$T \geq 0$ properties of the infinitely repulsive Hubbard model for arbitrary number of holes*, P. Gurin and Zs. Gulácsi, Phil. Mag. B **81**, 321 (2001).
- [5] *Magnetic properties of the infinitely repulsive Hubbard model near half filling*, P. Gurin and Zs. Gulácsi, Phil. Mag. B, in press

- [6] *Exact solutions for the periodic Anderson model in 2D: A Non-Fermi liquid state in normal phase*, P. Gurin and Zs. Gulácsi, Phys. Rev. B, in press

Előadások, poszterek

- [7] *Exact results related to the phase diagram of the extended Hubbard model containing next-nearest-neighbour terms*, P. Gurin and Zs. Gulácsi, Adriatica Research Conference on the Electron Quantum Liquid in Systems of Reduced Dimensions, Book of Abstract p.71, ICTP, Trieste, Italy, July 2-5, 1996
- [8] *Exact results for extended Hubbard model with next-nearest-neighbour interaction terms in $d = 2, 3$ dimensions*, P. Gurin, 16th General Conference of the EPS Condensed Matter Division, Book of Abstract p.145, Leuven, Belgium, August 25-28, 1997
- [9] *Search for exact solutions for the Hubbard model in higher dimensions*, P. Gurin, III Trieste Conference on Statistical Field Theory, Book of Abstract p.112, ICTP, Trieste, Italy, June 22-26, 1998
- [10] *The two hole problem in the $U = \infty$ Hubbard model: Ferromagnetism vs. singlet state*, P. Gurin, The 20th IUPAP International Conference on Statistical Physics, Book of Abstract PO03/36, Paris, France, July 20-24, 1998