



1949

Sokrészecskés rendszerekre vonatkozó egzakt megoldások

Egyetemi doktori (PhD) értekezés

Trencsényi Réka

Témavezető: Dr. Gulácsi Zsolt

DEBRECENI EGYETEM
Természettudományi Doktori Tanács
Fizikai Tudományok Doktori Iskolája
Debrecen, 2014

Ezen értekezést a Debreceni Egyetem Természettudományi Doktori Tanács Fizikai Tudományok Doktori Iskolájának Szilárdtestfizika és anyagtudomány programja keretében készítettem a Debreceni Egyetem természettudományi doktori (PhD) fokozatának elnyerése céljából.

Debrecen, 2014. 11. 24.

.....

Trencsényi Réka
jelölt

Tanúsítom, hogy **Trencsényi Réka** doktorjelölt 2010-2013 között a fent megnevezett Doktori Iskola Szilárdtestfizika és anyagtudomány programjának keretében irányításommal végezte munkáját. Az értekezésben foglalt eredményekhez a jelölt önálló alkotó tevékenységével meghatározóan hozzájárult. Az értekezés elfogadását javasolom.

Debrecen, 2014. 11. 24.

.....

Dr. Gulácsi Zsolt
témavezető

SOKRÉSZECSKÉS RENDSZEREKRE VONATKOZÓ EGZAKT MEGOLDÁSOK

Értekezés a doktori (Ph.D.) fokozat megszerzése érdekében
a fizika tudományágban

Írta: **Trencsényi Réka**, okleveles fizikus

Készült a Debreceni Egyetem Fizikai Tudományok Doktori Iskolájának
Szilárdtestfizika és anyagtudomány programja keretében

Témavezető: **Dr. Gulácsi Zsolt**

A doktori szigorlati bizottság:

elnök: Dr.
tagok: Dr.
Dr.

A doktori szigorlat időpontja:

Az értekezés bírálói:

Dr.
Dr.

A bírálóbizottság:

elnök: Dr.
tagok: Dr.
Dr.
Dr.
Dr.

Az értekezés védésének időpontja:

"Embernek lenni !
Csak embernek, semmi egyébnek,
De annak egésznek, ípnek,
Föld-szülte földnek
És Isten-lehelte szépnek !"

Szüleimnek szeretettel

Tartalom

1. A tartalomról röviden	1
1.1. A tanulmányozott rendszerek	1
1.2. A disszertáció szerkezeti felépítése	2
2. Bevezető	3
2.1. A polifenilén típusú láncok	3
2.2. Fermionikus rendszerek	5
3. A tanulmányozott rendszerek Hamilton-operátorainak felépítése	10
4. Az alkalmazott módszerek bemutatása	13
4.1. Áttekintés	13
4.2. A Pozitív Szemidefinit Operátorok módszere	16
4.2.1. A Hamilton-operátor transzformációja	16
4.2.2. Az alapállapot hullámfüggvény meghatározása	22
4.3. Az Alapállapotot Tartalmazó Altér Meghatározásán alapuló módszer	24
5. A polifenilén típusú láncok alapállapot eredményeinek bemutatása	29
5.1. A rendszer Hamilton-operátora	29
5.2. A $B = 0$ eset tárgyalása	31
5.2.1. A Hamilton-operátor transzformációja	31
5.2.2. Az alapállapot hullámfüggvény meghatározása	34
5.3. A $B \neq 0$ eset tárgyalása	40
5.3.1. A Hamilton-operátor transzformációja	40
5.3.2. Az alapállapot hullámfüggvény meghatározása	43
5.4. A rendszer nemkölcönható sávszerkezete	50
Az 5. fejezet eredményeinek rövid összefoglalása	54

6. A fázistér kiterjesztése és vizsgálata polifenilén típusú láncok esetében	56
6.1. A rendszer Hamilton-operátora	56
6.2. Az alapállapot hullámfüggvény kiinduló formája	57
6.3. A Hamilton-operátor transzformációja	58
6.3.1. A szimmetrizált eset megoldása	60
6.3.2. A nemszimmetrizált eset megoldása	62
6.3.3. Néhány gondolat az 5.2. és 6.3.1-2. alfejezetek eredményeiről	63
6.4. A fázisdiagram szemléltetése és elemzése	65
6.5. A rendszer nemkölcönható sáv szerkezete	67
A 6. fejezet eredményeinek rövid összefoglalása	71
7. Kétdimenziós négyzetes ráccsal rendelkező nanoszerkezetek alapállapot eredményeinek bemutatása	72
7.1. A rendszer Hamilton-operátora	72
7.2. A Hamilton-operátor transzformációja	74
7.3. Az alapállapot hullámfüggvény meghatározása	75
7.4. A rendszer nemkölcönható sáv szerkezete	85
A 7. fejezet eredményeinek rövid összefoglalása	87
8. A kétdimenziós méhsejtes szerkezettel rendelkező nanostruktúra alapállapot eredményeinek bemutatása	89
8.1. A rendszer Hamilton-operátora	89
8.2. A teljes $\mathcal{H}$ Hilbert-tér konstrukciója	92
8.3. A redukált $\mathcal{S}$ Hilbert-tér konstrukciója	94
8.4. A rendszer alapállapota	97
8.5. $\mathcal{S}$ bázisvektorainak konstrukciója	98
8.6. Az alapállapot fizikai tulajdonságai	101
A 8. fejezet eredményeinek rövid összefoglalása	109
9. Összefoglaló	111

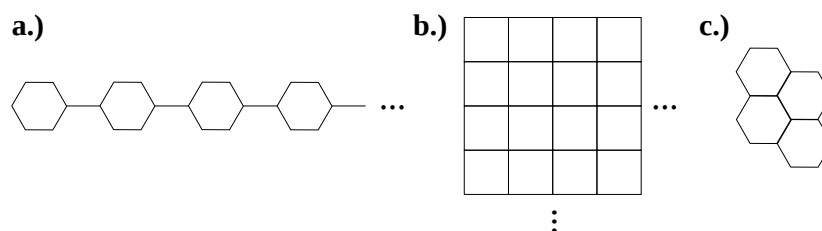
10. Summary	115
Köszönetnyilvánítás	118
Irodalomjegyzék	119
1. Függelék	
$\hat{H} - E_g$ pozitív szemidefinit mivoltának bizonyítása	I
2. Függelék	
A Pozitív Szemidefinit Operátorok módszerének alkalmazása az egydimenziós harmonikus oszcillátor esetében	II
3. Függelék	
A redukált Hilbert-tér 70 bázisvektorának grafikus szemléltetése a méhsejtes nanostruktúra esetében	IV
4. Függelék	
A redukált Hilbert-tér 70 egyenlete a méhsejtes nanostruktúra esetében	X
5. Függelék	
A megjelent közlemények és a konferencia-előadások listája	XVI

1. fejezet

A tartalomról röviden

1.1. A tanulmányozott rendszerek

Doktori tanulmányaim során sokrészecskes, erősen kölcsönható, kvantummechanikailag viselkedő, nemintegrálható, periodikus rendszerek alapállapotai tulajdonságait tanulmányoztam a Hubbard-modell keretében, egzakt módszerek alkalmazásával. A leírás elméleti szilárdtestfizikai apparátust igényel, így az "erősen kölcsönható" jelző – a szakterület fogalomkörének megfelelően – azt jelenti, hogy a kölcsönhatás erőssége sokkal nagyobb, mint a kinetikus energia járuléka. A kölcsönhatás tehát nem perturbációs hatásként jelenik meg, hanem mérvadó tényezőként lép be a fizikai folyamatokba. Ezenkívül érdemes megvilágítani a "nemintegrálható" jelző tartalmát is, ami azt fejezi ki, hogy a rendszer szabadsági fokainak száma meghaladja az értelmezett mozgásállandók számát.



1. ábra : A tanulmányozott rendszerek sematikus ábrái.

A vizsgálatok első szakaszában egy olyan kvázi-egydimenziós struktúrát elemeztem, amely hatszög alakú cellák egymáshoz kapcsolt láncolatából áll az 1.a ábrán látható elrendezés szerint. A hatszögek csúcspontjaiban szénatomok helyezkednek el, melyekhez, a rendszer konkrét kémiai változatától függően, további atomok vagy atomcsoportok kapcsolódhatnak, és a hatszögeket periodikusan egymáshoz láncoló kémiai kötések is különféle atomok valósíthatják meg. A "kvázi-egydimenziós" elnevezés arra utal, hogy noha a kristályszerkezet síkbeli hatszögekből épül fel, a rendszer geometriai rácsa egy egydimenziós láncot alkot. Azokat a szerves polimereket, melyek szerkezeti felépítésük alapján az 1.a ábrán vázolt csoportba tartoznak, összefoglaló néven *polifenilén* típusú vegyületeknek nevezzük. A polifenilének tanulmányozását követően vizsgálataimat az 1.b és 1.c ábrákon feltüntetett *kétdimenziós ráccsal rendelkező nanostruktúrákra* is kiterjesztettem. Az 1.b ábrán felrajzolt négyzetes háló rácspontjaiban olyan fématomok vannak lokalizálva, melyeken nincs eredő mágneses momentum, az 1.c ábra

pedig egy kisméretű, méhsejtes szerkezetű, szénatomokból felépített grafén típusú rendszert mutat be.

Mindhárom rendszer esetében egzakt módszereket használtam fel az alapállapot hullámfüggvény és a hozzá tartozó alapállapot energiá meghatározására, ami azt jelenti, hogy a modellszinten vett közelítésektől eltekintve a számításaim nem tartalmaznak approximációkat. Az eredményeim tehát pontos keretbe foglalják a kapott alapállapotok fizikai jellemzőit olyan körülmények között, amikor a rendszerek, sokrészecskés mivoltukból adódóan, erősen korreláltak.

1.2. A disszertáció szerkezeti felépítése

A könnyebb eligazodás kedvéért szeretnék egy rövid rendszerező áttekintést adni a dolgozatom további fejezeteinek tartalmáról. A bevezetőt magába foglaló 2. fejezetben a kutatási témámhoz kapcsolódó szakirodalmi előzményeket tárgyalom, a 3. fejezetben a tanulmányozott rendszerek Hamilton-operátorainak általános felépítését mutatom be, a 4. fejezetben pedig részletesen ismertetem a számítások során alkalmazott egzakt módszerek előtörténetét és technikai lépéseit. Az ezt követő négy fejezet a saját eredményeimet öleli fel az alábbi felosztás szerint: az 5. fejezet témája a *polifenilén* típusú láncok egzakt alapállapotainak meghatározása és fizikai jellemzése, a 6. fejezet a fázistér kiterjesztésének megvalósítását és vizsgálatát taglalja *polifenilén* típusú láncok esetében, a 7. fejezet egy lehetséges elméleti magyarázatot prezentál a nemmágneses fématomokat tartalmazó *kétdimenziós négyzetes ráccsal rendelkező nanoszerkezetek* ferromágneses viselkedésére vonatkozóan, a 8. fejezet pedig egy *kétdimenziós méhsejtes szerkezettel rendelkező nanostruktúra* egzakt alapállapotainak meghatározását és a kapcsolódó fizikai tulajdonságok feltárását tartalmazza. A disszertációm eredményeit a 9. és 10. fejezetekben található magyar és angol nyelvű összefoglalók sűrítik. Végül, a dolgozatomat a hivatkozásokat felsorakoztató irodalomjegyzék és öt függelék zárja. Az utolsó függelék tájékoztatást ad a megjelent közlemények és az általam tartott konferencia-előadások listájáról.

2. fejezet

Bevezető

2.1. A polifenilén típusú láncok

A polifenilének osztályába számos vegyület besorolható, példaként kiragadva megemlítem a *polifenil-éter*, *polifenilén-oxid*, *polifenilén-szulfid*, *polietilén-tereftalát*, *polibutilén-tereftalát*, aromás *poliamid* és *polifenilén-vinilén* elnevezésű reprezentánsokat. A fentebb felsorolt vegyületek speciális fizikai és kémiai tulajdonságaik folytán rendkívül széles tartományt ölelnek fel a gyakorlati alkalmazások palettáján. A következőkben szeretnék felvillantani néhány elemet az ipari és mérnöki alkalmazások színes spektrumából.

A *polifenil-éter* (PFE) láncstruktúrájában egy-egy oxigénatom által létrehozott kémiai kötéssel kapcsolódnak egymáshoz a hatszöges cellák. A PFE igen figyelemreméltó termikus és oxidációs stabilitással rendelkezik, és az ionizációs sugárzásokkal szemben is nagyfokú biztonságot mutat. Éppen ezért kiválóan alkalmazható olyan berendezésekben és gépekben, amelyek extrém környezeti hatásnak vannak kitéve. Így például folyadékként felhasználható diffúziós pumpákban, ultramagas vákuumot előállító egységekben vagy különböző hűtadási folyamatokban. Ezenkívül széles körben alkalmazzák turbinák, sugárhajtóművek, elektromos csatlakozók vagy magas hőmérsékletű hidraulikus rendszerek kenőanyagaként is. [1-3]

A *polifenilén-oxid* (PFO) lényegében a PFE-nek egyfajta kémiai módosulata, ugyanis a PFE és a PFO közti szerkezeti különbség csupán abban mutatkozik meg, hogy míg a PFE-ben nem kapcsolódnak külső atomok a hatszögekhez, addig a PFO láncában metilcsoportok (CH_3) csatlakoznak bizonyos szénatomokhoz a lánc mentén periodikus elrendezésben. A PFO polimereket műanyag gyantákként tartják számon, amelyek polisztirénnel, üveggel vagy nylonnal képzett kompozitjaikkal együtt alapvető elemei a mechanikailag stabil, nagy szilárdságú, nedvességálló mérnöki műanyagok gyártásának. Ezek főként a számítógépiparban, telekommunikációs eszközök kivitelezésében, illetve autóalkatrészek előállításában kapnak szerepet. [4]

A *polifenilén-szulfid* (PFS) szerkezetét kénatomok által létesített kémiai kötésekkel összekapcsolt aromás hatszögek sorozata alakítja ki. A PFS a termoplasztikus mérnöki műanyagok egyik legkiválóbb variánsa, mely nagyfokú ellenállást mutat a különböző kémiai és termikus hatásokkal szemben, mint például savak és lúgok, fehérítők, rozsdásodás, kopás, napsugárzás, égés. Emellett kitűnő mechanikai tulajdonságokkal is rendelkezik, hiszen magas tűréshatárig formázható és préselhető. A felsorolt előnyös sajátságai miatt alapanyagul szolgálhat membránok, tömítések, csomagolóanyagok,

papírgyártáshoz szükséges filcek vagy széntüzelésű kazánokban alkalmazott fűstsűrítők készítésében. Elektronikai szempontból nélkülözhetetlen fontosságú az a körülmény, hogy az egyébként szigetelő PFS oxidációval vagy adalékanyagok hozzáadásával félvezetővé tehető. Külön érdekessége, hogy műanyag mivolta ellenére ráütéskor fémes hang hallható, amely egyedivé és könnyen felismerhetővé teszi a polimert. [5]

A *polietilén-tereftalát* (PET) a hőre lágyuló polimerek kategóriájába tartozik, ennél fogva kitűnő alapanyagként szolgál szintetikus szálak, mérnöki gyanták előállításában, élelmiszeripari termékek tárolóedényeinek gyártásában (pl. ásványvizes palackok), és minden olyan alkalmazásban, ahol hőformázással készített komponensek funkcionálnak. [6,7]

A *polibutilén-tereftalát* (PBT) szintén a hőre lágyuló műanyagok közé sorolható, amely igen kedvező kémiai és mechanikai tulajdonságokkal rendelkezik. Stabílan ellenáll a különböző oldószerek hatásának, ugyanakkor mechanikailag masszív és hőálló is. Égésgátló anyagokkal kezelve éghetlenné válik, és szigetelőként elsősorban az elektromos és elektronikai iparban hasznosul. [7,8]

Az aromás *poliamid* (Aramid) olyan szálakat képez, melyekben a molekulák orientációja követi a szál tengelyét, így megfelelő módon kihasználható a kémiai kötések erőssége. Az Aramid speciális szálak szerkezete biztosítja azt a strapabíró képességet, ami elengedhetetlen például a munkavédelmi és katonai ruházatok, golyóálló mellények, sportfelszerelések, kerékpárgumik és számos repülőgép-ipari alkalmazás minőségi gyártásához. Az Aramidot remek hőálló tulajdonsága képesíti arra is, hogy helyettesítse az azbesztot. [9]

Végül, zárva a vegyületek felsorakoztatását, a *polifenilén-vinilén* (PFV), alkilált és metoxilezett származékaival együtt, félvezető tulajdonságai miatt értékes képviselője a polifenilén osztálynak. Elektromos és optikai jellemzői alapján főképpen fényemittáló diódák (LED) kialakítására alkalmas. A PFV-t tartalmazó diódák sárga-zöld fényt bocsátanak ki, a dióda által emitált fény frekvenciájának megváltoztatásához pedig olyan PFV-származékokat használnak, melyekben molekulák kicserélése révén biztosítják a kívánt színt. Ezenkívül a PFV organikus napelemek elektrondonor anyagaként is használható. [10,11]

Az előzőekben részletezett hagyományos alkalmazási területek mellett újfajta irányzatok is életre keltek a polifenilén típusú rendszerek vizsgálatai során, mintegy kiterjesztve és továbbfejlesztve ezzel a gyakorlatban potenciálisan megvalósítható és kamatoztatható alkalmazási módokat körét. Ezekben a közleményekben, a rendszerek belső fizikai tulajdonságainak mélyebb megértését megcélózva, tanulmányozták többek között a fotofizikai gerjesztési spektrumot [12,13], illetve fényemissziós jellemzőket [14], mérték az optikai gerjesztéssel indukált tranziens vezetőképességet [15], emellett

foglalkoztak még hőmérsékletfüggő elasztó-hidrodinamikai sajátosságok [16], fajhőbeli frekvenciafüggés [17], valamint dinamikai korrelációk [18] vizsgálatával is. Ezenkívül olyan értekezések is napvilágot láttak, melyek nanotechnológiai alkalmazási lehetőségeket sejtetnek [19], vagy éppen üzemanyagcellák technológiai fejlesztésével kapcsolatos elemzéseket tárnak fel [20]. Megemlítem továbbá azt is, hogy a PFE-re alapozott termoelektromos nanoelektromos kapcsolatos vizsgálatok arra a következtetésre vezettek, hogy az elektronok között fellépő korrelációs effektusok el nem hanyagolható, lényegi szerepet töltenek be a rendszerben lejátszódó fizikai folyamatokban [19], mint ahogyan az már korábban is megállapítást nyert a polifeniléntől eltérő szerkezetű konjugált polimerek esetében [21]. Ez is alátámasztja azon törekvéseimet, miszerint egy sokrészecskés rendszer valósághű leírásához feltétlenül szükség van a korrelációs hatások egzakt figyelembevételére.

A polifenilén típusú struktúrák sokszínű alkalmazhatósága azonban korántsem alkot teljes képet ezen rendszerek sajátosságairól, hiszen a láncok lehetséges fizikai állapotai és az azokat érintő főbb fizikai tulajdonságok tekintetében mind ez idáig nem álltak rendelkezésünkre kiterjedt eredmények. Éppen ezért tűztem ki kutatásaim fő irányvonalaként azt a célt, hogy pontosan meghatározzam a polifenilén alapállapotát, és megvizsgáljam az alapállapot releváns fizikai jellemzőit.

2.2. Fermionikus rendszerek

Az erősen kölcsönható fermionikus rendszereket az utóbbi évtizedekben igen intenzíven növekvő érdeklődés övezte, ugyanakkor a témakör napjainkban is őrzi aktualitását a kondenzált anyagok fizikájának területén. Számos elméleti leírás született, melyek az erősen korrelált elektronrendszerek fizikai tulajdonságait a Hubbard-modell [22] keretein belül tárgyalták. A korreláció természetesen a fermionok számának növelésével egyre szignifikánsabbá válik, azonban már a '90-es évek elején felismerték, hogy az alacsony koncentrációs határeset nemcsak hogy megtartja a Hubbard-modell szintjén kapott rendszerviselkedés főbb sajátosságait [23,24], de alapul szolgálhat nem-perturbatív megoldások kifejlesztésében is [25]. Az alacsony koncentrációs tartomány fizikai jellemzőinek feltérképezése kétrészecskés körülmények figyelembevételével indult el egydimenziós gyűrűk és kétdimenziós tóruszok [26,27], illetve a kétdimenziós kételektron-probléma [28] vizsgálata kapcsán. A továbbiakban kétrészecskés szinten tanulmányozták az elektronok kölcsönhatás okozta delokalizációját négyzetes láncokban [29], lyukak korrelációját ötszöges és hatszöges láncokban [21], az alapállapot stabilitását külső potenciál jelenlétében [30], és emellett magnetooptikailag csapdázott fermionikus lítiumatomok fermionizációjáról is beszámoltak [31].

Továbbfejlesztve a jellemzések kvalitását, háromrészecskés szinten is folytattak vizsgálatok, melyek esetében a közlemények olyan témákat tárgyaltak, mint például háromrészecske-korrelációk alapállapotra vett hatásának tanulmányozása kétdimenziós elektrongázban [32], háromrészecske-korrelációk számítása dinamikus átlagtérelmélettel [33], az energiaspektrum vizsgálata nanogyűrűben szennyező figyelembevételével [34], harmonikusan csapdázott fermionok jellemzése [35,36], ultrahideg káliumatomokkal demonstrált Efimov-effektus leírása [37], kontaktparaméterek jellemzése két dimenzióban [38], vagy atomok viselkedése egydimenziós harmonikus csapdában [39]. Ezek mellett figyelemreméltó helyet kapott a kvantumpettyekbe zárt háromelektron-rendszer elemzésének tárgyköre is, ahol megtalálható a pályaimpulzus-momentumot érintő mágikus számok eredeztetése [40], alapállapotú tulajdonságok elemzése szennyező jelenlétében [41], mágneses térbeli elektron-elektron korrelációk és alapállapotú szimmetriák tanulmányozása [42], mágneses térbeli alapállapotú elektronstruktúra és pályaimpulzus-momentum vizsgálata [43], gyenge mágneses térbeli gerjesztési spektrum és spinszerkezet analízise [44], valamint az energiaspektrum feltárása szilícium-germánium alapú kvantumpettyekben [45,46]. Ezenfelül, a kétdimenziós Schrödinger-egyenlet egzakt [47] és approximatív [48] megoldásai mellett olyan közlemények is születtek, melyek a háromelektron-állapotok összefonódottságával foglalkoztak [44,49].

Négyrészecskés szintre lépve, elsőként olyan publikációkat említek, melyek atomi szintű keretbe foglalva tárgyalták a négyelektronos rendszereket. Ezen tárgykörhöz sorolható például az elektronkorrelációk kvantummechanikai szimmetriájának vizsgálata négyelektronos atomokban [50], négyelektronos atomok és ionok kötött állapotainak analízise [51], a berilliumatom szingulett [52] és triplett [53] állapotainak tanulmányozása, valamint az erős korrelációs határeset [54], illetve kvantumkémiail módszerek [55] megvalósítása a Hook-atomban. Az atomi skálán túlhaladva, számos tanulmány foglalkozott a kvantumpettyekbe zárt négyelektron-struktúra problémájával, melyek esetében példaként hozom az alacsonyan fekvő állapotok feltárását [56], mágneses térbeli alapállapotok meghatározását [57], a Kondo-effektus kísérleti kimutatását [58], illetve mágneses térbeli energiaspektrumok és spinkonfigurációk vizsgálatát [59]. Ezeken túlmenően érdemes szót ejteni olyan értekezésekről is, melyeknek témája az összefonott állapotok kísérleti [60] és elméleti [59] tanulmányozása, valamint a kétdimenziós elektrongáz négyrészecskés optikai gerjesztéseinek leírása [61]. Az elméleti módszerek viszonylatában értékesek az effektív térelmélet [36], a Hartree-Fock perturbációs elmélet [62], illetve a redukált sűrűségmátrixok elméletének [63] eszköztárát felvonultató publikációk is.

A néhányrészecskés jellemzésekhez kapcsolódóan fontosnak tartok még kiemelni olyan közleményeket, melyeknek tárgya a periodikus potenciál és

külső mágneses tér hatása alatt lévő kétdimenziós elektrongáz állapotainak leírása [64], korrelált elektronok viselkedése félvezető kvantumgyűrűben [65], ultrahideg fermionikus atomok kvantumállapotainak ismertetése optikai dipólcspadában [66], Kondo-effektus tanulmányozása Anderson-szennyezők révén létrejövő kvantumpettyekben [67], inhomogén párképződés fermionikus szuperfolyadékban [68], excitonok kötött állapotainak vizsgálata gyémántban [69], valamint nemlokális Coulomb-kölcsönhatás effektusai grafénban, szilícénben és benzolban [70].

A néhányrészeszkés szintről indulva gyakorlatilag folytonosnak tekinthető az átmenet a sokrészeszkés leírások irányába, hiszen néhány tanulmány már a kétrészeske-probléma elemzése nyomán is érdemi információkat jósolt a rendszerek sokrészeszkés viselkedésére vonatkozóan [21,29,31]. A kvázi-egydimenziós struktúrákat illetően mindenképpen sikerként könyvelhető el a háromszöges láncok [71], a gyémántlánc [72], az ötszöges szerves láncok [73], valamint a cikcakk [74] és karosszék [75] típusú hatszöges láncok sokrészeszkés egzakt alapállapotainak meghatározása. Magasabb dimenziókban kivitelezett számítások pedig olyan témaköröket öleltek fel, mint például kétsávós rendszerek nem-Fermi-folyadék típusú viselkedése normál fázisban [76], kétdimenziós, kétsávós, rendezetlen rendszerek egzakt alapállapotainak bemutatása [77], a Hubbard-kölcsönhatás delokalizációs effektusainak egzakt vizsgálata két dimenzióban [78], vagy a kétdimenziós [79-81], illetve a háromdimenziós [79,82,83] periodikus Anderson-modell keretében egzaktul meghatározott alapállapotok tanulmányozása.

Mivel a doktori dolgozatom második felében négyzetes és hatszöges szerkezetű kétdimenziós rendszerek alapállapotai tulajdonságait tárgyalom, szűkségszerűnek tartom bizonyos szempontok alapján rendszerezni a jelzett struktúrákat érintő eddigi ismereteinket. A kétdimenziós rácsok szakirodalmában roppant fajsúlyos helyet foglalnak el a négyzetes és hatszöges kompozíciók, éppen ezért nem meglepő, hogy a témában hosszú évtizedek során tetemes mennyiségű publikáció halmozódott fel. A disszertációm véges mivoltából adódóan az ismeretek felsorakoztatása és rendszerezése során természetesen nem lehet szempont a teljesség igénye, mindenesetre megpróbáltam a lehető legkompaktabb formában összegyűjteni a tárgyhoz tartozó információkat.

A négyzetes rácsokat illetően elsőként a Hubbard-modell keretében levezetett eredményeket említek meg, melyek az elektronkorrelációk csoportelméleti tárgyalásán [84], a Hückel-Hubbard korrelációs diagramok elemzésén [85], illetve szupravezető állapotok leírásán [86-93] túl tanulmányozták a Mott-átmeneteket [89,94,95], és felvetették a kvantum-fázisátalakulások létezésének lehetőségét [96] is. A mágneses tulajdonságok vonatkozásában kimutattak ferromágneses [97] és antiferromágneses [92,95] fázisokat, egzaktul meghatároztak itineráns ferromágneses alapállapotokat [98], valamint megvizsgálták a Nagaoka-állapot instabilitását [99] és háromrészeske-kor-

relációit [100] is. A Hubbard-modellen kívül a négyzetes rendszerekben számos más modellkörülmeny alkalmazását is megvalósították, például a Hubbard–Holstein- [101], a t -J [102-107], a Heisenberg- [108-119], az Ising- [120-128], a Villain- [129], az XY [130-135], az XXZ [136-139], a Union Jack [140], a Dzyaloshinskii–Moriya- [141], a spin-pálya [142], a compass [143] vagy a hard-core [144] modell keretein belül. Elvonatkoztatva a modellszintű leírások típusától kiemelem még azt is, hogy rendkívül kiterjedt vizsgálatokat folytattak a négyzetes rácsok fázisdiagramjainak feltárása kapcsán, ami olyan fázisok megismerését eredményezte, mint például spin-folyadék [109,119], Andreev–Lifshitz-féle szuperszilárd fázis [145,146], ferromágneses [147], valamint félfém [148] állapotok. A különböző fázisok közötti átmenetek tanulmányozása is sok pozitív hozadékat generált, hiszen olyan érdekességeket bocsátottak közre, mint például topologikus [149,150], rendezetlen [151], üvegszerű [133], Kosterlitz–Thouless–Berezinsky-féle [134], paramágnes–antiferromágnes [124,125,127], antiferromágnes–spinfolyadék [152], illetve Mott-szigetelő–szupravezető [153] átmenetek jellemzése. Mindezek mellett foglalkoztak még a kvantum-Hall-effektus [154,155], összefonott állapotok [118,156], spinhullámok [157], illetve nemmágneses [108,158] és felületi [159] szennyezők hatásainak vizsgálatával is.

A méhsejtes szerkezetű, hatszöges struktúrák esetében is igen intenzíven tanulmányozták a rendszer fázisdiagramjait és releváns fázisátalakulásait. Számos értekezés tárgyalta a rendszer alapállapotú fázisdiagramjait [160-170], melyeken paramágneses, ferromágneses, antiferromágneses és spirális fázisok is ábrázolódnak. Az idézett közlemények [160-170] némelyikében arról is beszámoltak, hogy a fázisdiagram meghatározott szelvényét spinfolyadék fázis foglalja el [162,167,170], míg két esetben nem találtak bizonyítékot az állapot kialakulására [168,169]. Az utóbbi években élénk viták forrásává vált a spinfolyadék fázis létezése körül kialakult bizonytalanság, ugyanis a spinfolyadék állapot létrejöttét megerősítő tanulmányokkal [171-177] szemben megjelentek olyan értekezések is, melyek a spinfolyadék fázis hiányát igazolták [178,179]. Ezen túlmenően vizsgáltak szupravezető [180,181] és Mott-szigetelő [182] állapotokat, illetve olyan speciális fázisokat is kimutattak, mint töltéssűrűség-hullámok [183], spinsűrűség-hullámok [184], anomális kvantum-Hall-fázis [185], ortogonális Dirac-félfém [186,187] spinrés [188], Fermi-folyadék [189,190], valamint spinüveg [191] állapotok. A fázisátalakulások elemzése révén is sok értékes információval gyarapodott az ismeretanyag, hiszen a paramágnes–antiferromágnes [192] és antiferromágnes–ferromágnes [160,164] átmenetek tanulmányozása mellett például Néel–"valence bond solid" [193], félfém–szigetelő [192,194], illetve –antiferromágneses szigetelő [195-197], félfém–szupravezető [198], Kondo-szigetelő–spinfolyadék [199], valamint spinfolyadék–Mott-szigetelő [162] tranzíciók leírásával is bővült a paletta. Ezenkívül olyan publikációk is születtek, melyek a rendszer-

ben jelenlévő szennyezők elektronstruktúrára gyakorolt hatását ismertették, például mágneses szennyezők Kondo-modell szintű figyelembevétele [200,201], vagy szennyezőpotenciál Green-függvény módszerrel történő leírása [202] révén. További érdekességként megemlítem azokat a közleményeket is, melyeknek témája a Dirac-pontok mozgásának [203] és rejtett szimmetriáinak [204] feltérképezése, a Haldane-féle hatszöges rács peremállapotainak és összefonódottsági spektrumának analízise [205], valamint szupravezető Josephson-átmenetek [206], illetve a Hofstadter-pillangó [207,208] vizsgálata.

Végezetül megjegyzem, hogy a négyzetes és méhsejtes szerkezetű rendszerek összehasonlító elemzése kapcsán olyan publikációk is részévé váltak a szakirodalomnak, melyek fizikai [209-211] vagy éppen geometriai [212] indíttatású összevetéseket taglálnak.

3. fejezet

A tanulmányozott rendszerek

Hamilton-operátorainak felépítése

Gördülékenyebbé téve a későbbi fejezetek olvashatóságát, szeretnék egy rövid áttekintést adni a disszertációmban tanulmányozott rendszerek Hamilton-operátorainak természetéről. A vizsgált struktúrák sokrészecskes jellegéből adódóan célszerű a leírást kvantumtér-elméleti szinten megvalósítani, ami a részecskék egyszerű keltésével és eltüntetésével effektíve kezelhetőbbé teszi a matematizálást, mint a hagyományos elsőkvantálás. A kvantumtér-elmélet speciális formalizmusát másodkvantálásnak nevezzük. Mint ismeretes, az elsőkvantált elmélet eszközei a differenciáloperátorok és a normalizált hullámfüggvények, míg a másodkvantált formalizmus a lehetséges állapotokat a betöltési számok Hilbert-terének elemeiként kezeli. A betöltési számok segítségével megtestesített állapotokra azonban a differenciáloperátorok nem képesek hatni, így a Hamilton-operátor szerkezetének is a másodkvantált formalizmushoz kell igazodnia. Ennek megfelelően a

$$\hat{H} = \underbrace{\hat{H}_0}_{\text{kinetikus tag}} + \underbrace{\hat{V}}_{\text{kölcsönhatási tag}} \quad (1)$$

Hamilton-operátor $\hat{H}_0$ kinetikus járuléka a

$$\begin{aligned} \hat{H}_0 &= \hat{T}_0 + \sum_{n=1}^m \hat{T}_n \\ \hat{T}_0 &= \sum_{\sigma} \sum_{i=1}^{N_{\Lambda}} \epsilon_i \hat{n}_{i,\sigma}, \quad \hat{T}_n = \sum_{\sigma} \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^{N_{\Lambda}} t_{ij}^{(n)} \hat{c}_{i,\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{j,\sigma} \end{aligned} \quad (2)$$

alakot ölti. (2) kifejezéseiben a $\hat{c}_{i,\sigma}^{\dagger}$ fermionikus keltő operátor létrehoz egy σ spinvetülettel rendelkező elektront a rendszer i csomópontján. $\hat{c}_{i,\sigma}^{\dagger}$ adjungált párja a $\hat{c}_{i,\sigma}$ fermionikus annihiláló operátor, amely eltünteti a σ spinvetületű elektront az i csomóponttól. $\hat{n}_{i,\sigma}$ az i csomópont lokális részecskeszám-operátorát jelöli, ami formáját tekintve $\hat{n}_{i,\sigma} = \hat{c}_{i,\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{i,\sigma}$. Mindezek értelmében $\hat{T}_0$ a kinetikus energia lokális csomóponti járulékait tartalmazza, ahol az ϵ_i lokális egyrészecske-potenciál az i csomóponton tartózkodó elektron energiáját reprezentálja. A kinetikus energia valódi dinamikus járulékait a $\hat{T}_n$ operátorok adják, melyek az elektronok csomóponti ugrásaihoz kapcsolódnak.

Az elektron j -ből i -be történő csomóponti ugrásához a $t_{ij}^{(n)}$ hopping-mátrixelem rendelhető hozzá, amely az i és j csomóponti állapotok átfedési integrálja, és az adott ugrás energiáját határozza meg. A $t_{ij}^{(n)}$ -beli n index lényegében azt jellemzi, hogy milyen távol van egymástól az i és a j csomópont, hiszen n számértéke éppen azt fejezi ki, hogy j hanyadik szomszédja i -nek. Így ha i és j első-, másod-, harmad-, ..., m -edszomszéd viszonyban van egymással, akkor n értéke rendre $n = 1, 2, 3, \dots, m$. m értékét pedig mindig az adott struktúra geometriája és mérete szabja meg azáltal, hogy mi az a legnagyobb szomszéd távolság, ami még értelmezhető a rendszerben. Látható, hogy $\hat{T}_0$ -ban és $\hat{T}_n$ -ben is spinindex és csomóponti index szerinti összegzés szerepel, mivel azonban fermionikus rendszereket tárgyalunk, $\sum_{\sigma}$ két járulékcsoportot foglal magába, nevezetesen a $\sigma = \frac{1}{2}$ és a $\sigma = -\frac{1}{2}$ vetületekhez tartozó komponenseket. $\sum_i$ pedig annyi tagot számlál, amennyit N_{Λ} , vagyis a rendszerben jelenlévő csomópontok maximális száma definiál. Érdemes szem előtt tartani azt a tényt is, hogy n növekedésével rohamosan csökken $t_{ij}^{(n)}$ értéke, hiszen $t_{ij}^{(1)}$ -hez képest $t_{ij}^{(2)}, t_{ij}^{(3)}, t_{ij}^{(4)}, \dots, t_{ij}^{(m)}$ rendre $1, 2, 3, \dots, m - 1$ nagyságrenddel kisebb energiát ad. Ennélfogva abszolút jogosan alkalmazhatók olyan modellszinten vett közelítések, melyek akár már a másodszomszéd járulékoktól kezdődően elhanyagolják $\sum_n \hat{T}_n$ -ben a magasabb rendű elemeket.

Miután ismertettem az (1) Hamilton-operátor $\hat{H}_0$ kinetikus részének másodkvantált formáját, összpontosítsunk a $\hat{V}$ kölcsönhatási tagra. Az 1.1. alfejezetben bemutatott fermionikus rendszerek tanulmányozása folyamán mindvégig Hubbard-típusú modellt alkalmaztam a részecskék között kialakuló kölcsönhatás leírására. Ennek értelmében $\hat{V} = \hat{H}_U$ a

$$\hat{H}_U = U \sum_{i=1}^{N_{\Lambda}} \hat{n}_{i,\sigma} \hat{n}_{i,-\sigma} \quad (3)$$

kifejezés szerint alakul, ahol U a kölcsönhatás erősségét jellemző csatolási állandó. A Hubbard-modell koncepciója a következő gondolatmeneten alapszik: Ha két elektron kölcsönhatását tekintjük vákuumban, akkor a köztük ható Coulomb-taszítás potenciálja a két elektron közötti távolság reciprokával arányosan csökken, tehát a kölcsönhatás a végtelenben válik nullává. Ha viszont megnöveljük az elektronok számát, akkor a Coulomb-taszítás a részecskék által kezd leárnyékolódni, és az árnyékolás annál kifejezettebb, minél több elektron van jelen. Ennek nyomán a Coulomb-taszítás egy rövid hatósugarú, többnyire exponenciálisan lecsengő kölcsönhatássá válik. A Hubbard-modell keretein belül ezen erősen lecsengő függvény sorfejtésében szereplő tagok közül csak a legnagyobb járulékokat vettem figyelembe, amik a függvény kicsi távolságokhoz tartozó részét fedik le. Ezek a kis távolságok fizikailag úgy realizálódnak a rendszerben, hogy két ellentétes spinvetületű

elektron ugyanazon a csomóponton tartózkodik, és a modell csak az egyazon csomóponton lévő elektronok közötti Coulomb-taszítást veszi figyelembe – ahogyan ez (3)-ban is megfigyelhető. Természetesen az egycsomóponti Hubbard-járulékok mellett az első-, másod-, harmad-, ..., m -edszomszéd elektronok közötti Coulomb-taszítás is él a rendszerben, de ezek nagysága rendre $1, 2, 3, \dots, m$ nagyságrenddel kisebb az egycsomóponti tagokhoz viszonyítva, éppen ezért a magasabb rendű, hosszabb hatótávolságú járulékok elhanyagolhatók a leírás során. Ezt a megállapítást olyan kísérleti adatok is alátámasztják, melyek szerint az egycsomóponti Coulomb-taszítás energiája szerves periodikus rendszerekben 10 eV körüli értékre becsülhető [19,21,213-215], tehát a lokális Hubbard-járulékok valóban a legerősebb kölcsönhatást képviselik a rendszerben.

Fontosnak tartom megemlíteni azt is, hogy fermionikus struktúrákban a Coulomb-taszítás mellett elvileg az elektron-fonon kölcsönhatás is releváns lehet, azonban ez általában nem mérvadó a félig töltött szinttől távol, így kis elektronkoncentrációknál az elektron-fonon kölcsönhatás figyelembevétele nem befolyásolja a végeredmények arculatát. Mivel a részecskeszám-koncentráció az általam vizsgált rendszerek mindegyikében jóval a félig töltött szint alatt maradt, a számításaim nem igényelték az elektron-fonon kölcsönhatás modellbeli beiktatását.

Összegezve tehát a fentebb leírtakat, az (1) Hamilton-operátor kvantumtér-elméleti szinten vett kifejezése a

$$\hat{H} = \underbrace{\sum_{\sigma} \left(\sum_{i=1}^{N_{\Lambda}} \epsilon_i \hat{n}_{i,\sigma} + \sum_{n=1}^m \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^{N_{\Lambda}} t_{ij}^{(n)} \hat{c}_{i,\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{j,\sigma} \right)}_{\hat{H}_0} + U \underbrace{\sum_{i=1}^{N_{\Lambda}} \hat{n}_{i,\sigma} \hat{n}_{i,-\sigma}}_{\hat{H}_U} \quad (4)$$

struktúra szerint jön létre.

4. fejezet

Az alkalmazott módszerek bemutatása

4.1. Áttekintés

Ahogy azt már a tartalmi bevezetőben is említettem, kutatásaim során nemintegrálható sokrészecskés rendszerek alapállapotait határoztam meg egzakt számítási technikákra épülő módszerek segítségével. A sokrészecskés problémák témaköre rendkívül gazdag szakirodalmi háttérrel rendelkezik, azonban az értekezések többsége *integrálható* rendszereket tárgyal [216,217]. Az integrálhatóság viszont bizonyos megkötéseket ró ki az adott struktúrára, hiszen egy integrálható rendszerben a szabadsági fokok száma nem haladhatja meg az értelmezett mozgásállandók számát. Ha áthatóbban belegondolunk, akkor ez a megszorítás a valóságos fizikai rendszerekben egyáltalán nem vagy csak speciális esetekben valósulhat meg. Hogy erre tisztább rálátásunk legyen, a következő szempontokat érdemes megfontolni: Jól tudjuk, hogy egy kvantummechanikai rendszerben – a Heisenberg-féle határozatlansági reláció értelmében – nem adható meg egyidejűleg tetszőleges pontossággal a részecske koordinátája és impulzusa. Ennek egyenes következménye az, hogy az $\vec{r}$ - és $\vec{p}$ -tér szeparálódik a leírás során, így ha például koordinátareprezentációban dolgozunk, akkor a részecske szabadsági fokainak számát az $\vec{r}$ -térbeli koordinátáinak száma adja meg. Mivel ez esetben olyan rendszereket tárgyalunk, amelyekben Avogadro-számnyi részecske fordulhat elő, a szabadsági fokok száma értelemszerűen 10^{23} nagyságrendbe esik, ez pedig egy integrálható rendszer esetében nagyságrendileg 10^{23} számú mozgásállandót követelne meg. A valóságos fizikai rendszerekben ilyenfajta feltétel nyilvánvalóan nem teljesíthető, hiszen a természetben csak néhány mozgásállandó állhat rendelkezésünkre. Így az integrálható jelleg csak az általánosságot sértve, egyedi körülmények biztosításával érhető el, például olyan speciális egydimenziós rendszereket alapul véve, ahol az impulzusmegmaradás törvénye skaláris formulává egyszerűsödik, és a részecskék ütközéseik alkalmával a teljes impulzusukat átadják egymásnak. Ennek nyomán minden részecske impulzusa megmarad, vagyis minden szabadsági fokhoz tartozik egy megmaradó mennyiség, ami garantálja az integrálhatóságot. Ezek fényében nem meglepő, hogy az integrálható rendszerek igen nagy hányada egydimenziós [216,217].

Nem férhet kétség ahhoz, hogy az integrálható struktúrákat érintő vizsgálatok során rengeteg értékes fizikai és módszertani ismeret halmozódott fel. Ugyanakkor, mivel a valóságban létező képződmények többsége nem felel meg az integrálhatóság kritériumának, tanulmányoznunk kell a *nem-*

integrálható rendszerek fizikáját is. Ezáltal teljesebbé válhat a sokrészecskés kvantummechanikai rendszerekről alkotott képünk, hiszen megteremthetjük a potenciális lehetőségét annak, hogy eddigi ismereteinket még közelebb vigyük a természet adta valósághoz. Mindemellett a rendszerek sokrészecskés jellegéből eredően az is kulcsfontosságú kérdés, hogy a felhasznált módszer milyen mértékben és milyen minőségben képes valósághű módon kezelni a korrelációs effektusokat. Ilyen szempontból nézve, az erősen kölcsönható, nemintegrálható rendszerek egzakt leírásai fontos értéket képviselnek. Ezenkívül az egzakt diszkussziók egyúttal a közelítési módszerek eredményességét is tesztelhetővé teszik azáltal, hogy összehasonlíthatóvá válnak az approximatív és az egzakt módszerrel kapott megoldások. Másrészt pedig azért is játszanak fontos szerepet az egzakt számítási technikák, mert viszonyítási pontként szolgálhatnak a numerikus módszerek próbája során is. Az egzakt eljárások alkalmazása tehát több szempontból is hasznos és érdekes lehet, ami számomra is komoly motivációt jelentett a számításaim kivitelezésében. Az általam tanulmányozott rendszerek egzakt alapállapotainak meghatározásához két különböző módszert használtam fel: az egyik a *Pozitív Szemidefinit Operátorok* módszere (a továbbiakban PSZO módszer), a másik pedig az *Alapállapotot Tartalmazó Altered Meghatározásán* alapuló módszer (a továbbiakban ATAM módszer).

A pozitív szemidefinit operátorokra épülő eljárásoknak több válfaja létezik, és nemintegrálható rendszerekre vett alkalmazásuk a '90-es években kezdett el igazán felfutni, miután Brandt és Gieseckus 1992-ben publikálta eredményeit [218]. Az általuk bevezetett technikának az volt a lényege, hogy a rendszer Hamilton-operátorát pozitív szemidefinit formára transzformálták, ami lehetővé tette, hogy pontos alsó korlátot adjanak az alapállapot energiájának. Ezután a variációs elv alkalmazásával kiszámítottak egy felső korlátot is, és a kapott alsó és felső korlátok matematikai egyezése megadta a rendszer alapállapot energiáját. Eredményeiket a Hubbard-, illetve a periodikus Anderson-modell példáján keresztül mutatták be. Brandt és Gieseckus módszerét mások is sikeresen alkalmazták például "resonating valence bond" típusú alapállapot [219,220], paramágneses szigetelő és töltéssűrűség-hullám [221], ferromágneses [222,223], valamint szupravezető [224, 225] alapállapotok kimutatására. A módszer segítségével tanulmányozták továbbá a Falicov–Kimball-modellt [226], a kiterjesztett Emery-modellt egy és két dimenzióban [227], illetve a periodikus Anderson-modellt egy, két és három dimenzióban [79,227-229]. A Brandt és Gieseckus által bevezetett eljárás mellett másféle technikákról is olvashatunk a szakirodalomban [76,82, 83,230-238], melyek szintén a pozitív szemidefinit operátorok tulajdonságait használják ki. Néhány kivételtől eltekintve a fentebbi módszerek alkalmazása nem egy kiválasztott rendszerre összpontosult, hanem többnyire az volt a cél, hogy rendszerfüggetlen módon, az adott modell keretében egy ismert

és meghatározott típusú állapotot mutassanak ki alapállapotként. Ezzel szemben a pozitív szemidefinit operátorokra épülő eljárások azon változata, melyet én is alkalmaztam a kutatómunkám során, a tanulmányozandó rendszert jelöli meg kiindulópontként anélkül, hogy az alapállapotról bármiféle előzetes ismeretet tételeznénk fel. Ez az újfajta szemlélet a 2000-es években bontakozott ki. Alkalmazása elsőként négyzetes [72] láncok esetében valósult meg, ezt követően pedig háromszöges [71], ötszöges [73], valamint cikcakk [74], illetve karosszék [75] típusú hatszöges láncok vonatkozásában is eredményre vezetett. Az általam alkalmazott PSZO módszer a következő lépések szerint hajtandó végre: 1.) A Hamilton-operátor pozitív szemidefinit formára való transzformációja. 2.) A transzformáció feltételeinek megadása. 3.) Az alapállapot energiájának kiszámítása. 4.) A legáltalánosabb hullámfüggvényből kiindulva az alapállapot hullámfüggvény meghatározása. 5.) Az alapállapot fizikai tulajdonságainak vizsgálata.

A pozitív szemidefinit operátorokra épülő számítási technikák mellett a 2000-es években olyan módszereket is kidolgoztak, melyek alkalmazása lehetővé teszi, hogy a rendszer egzakt alapállapotát a probléma által adott Hilbert-tér egy kisméretű alterében határozzuk meg. Az eljárás révén számottevő mértékben csökken a Hilbert-tér dimenziója, így az alapállapot fizikai tulajdonságainak vizsgálata a kapott alterben jóval egyszerűbb és kevésbé időigényes. A módszer különböző numerikus változatainak alkalmazásával lehetőség nyílt olyan eredmények bemutatására, melyek a rendszer méretétől függetlenül jellemzik az egzakt alapállapotot. Például az egydimenziós t-J modell tanulmányozásakor fázisszeparációs viselkedést figyeltek meg [239], a kétszárú Hubbard-létrák esetében pedig különböző korrelációs függvényeket számoltak ki [240,241]. A módszert analitikus formában elsőként a Hubbard-modell felhasználásával egy kétdimenziós négyzetes rács példáján keresztül prezentálták [242], melynek eredményeit később a kiterjesztett Hubbard-modell keretében is megvizsgálták [243]. Számításaimban a [242]-ben alkalmazott analitikus ATAM módszert használtam fel, melynek lépései a következők szerint foglalhatók össze: 1.) Az alter induló bázisvektorának konstrukciója. 2.) A Hamilton-operátor induló bázisvektorra vett hatásának kiszámítása. 3.) A Hamilton-operátor alkalmazása az eredményben megjelenő új állapotvektorokra. 4.) A procedura folytatása mindaddig, amíg nem zárul az egyenletrendszer, azaz amíg meg nem találjuk az alter utolsó bázisvektorát. 5.) A kapott egyenletrendszer egzakt diagonalizációja, ami megadja a rendszer alapállapot energiáját és alapállapot hullámfüggvényét. 6.) Az alapállapot fizikai tulajdonságainak vizsgálata.

Az alábbi két alfejezetben részletesen ismertetem a kutatómunkám során alkalmazott metódusok konkrét lépéseit. Az első alfejezetben a *Pozitív Szemidefinit Operátorok* módszerét taglalom, a második alfejezetet pedig az *Alapállapotot Tartalmazó Alter Meghatározásán* alapuló módszer bemu-

tatásának szentelem.

4.2. A Pozitív Szemidefinit Operátorok módszere

4.2.1. A Hamilton-operátor transzformációja

Ismeretes, hogy egy $\hat{P}$ operátor pozitív szemidefinit abban az esetben, ha a $\langle \psi | \hat{P} | \psi \rangle \geq 0$ reláció a $\mathcal{H}$ Hilbert-tér bármely $|\psi\rangle$ hullámfüggvényével teljesíthető. A $\hat{P}|\psi\rangle = p|\psi\rangle$ sajátérték-egyenlet felhasználásával, 1-re normált hullámvektorokat feltételezve $\langle \psi | \hat{P} | \psi \rangle \geq 0$ alapján – könnyedén belátható, hogy $p \geq 0$, azaz a sajátértékek halmaza nemnegatív. Ez azt jelenti, hogy $\hat{P}$ spektrumának van egy jól meghatározott alsó korlátja, a nulla. A PSZO módszer abból indul ki, hogy elvileg minden fizikai rendszert leíró $\hat{H}$ Hamilton-operátor pozitív szemidefinit formára transzformálható. Bebizonyítható ugyanis, hogy amennyiben E_g $\hat{H}$ spektrumának alsó korlátját (az alapállapot energiát) jelöli, $\hat{H} - E_g$ pozitív szemidefinit, azaz $\hat{H} - E_g = \hat{P}$ (Az állítás bizonyítása az 1. Függelékben található meg). Az ismeretlen E_g alapállapot energiát egy C konstans formájában áttéve az egyenlőség jobb oldalára, kialakítható a

$$\hat{H} = \hat{P} + C \quad (5)$$

felírás, ami a Hamilton-operátor pozitív szemidefinit formára transzformált kifejezését adja. Ha ezen (5) transzformált Hamilton-operátorral hatunk a Hilbert-tér egy tetszőleges $|\psi\rangle$ elemére, akkor a $\hat{H}|\psi\rangle = (\hat{P} + C)|\psi\rangle$ egyenlet alakul ki. A továbblépéskor nem szabad szem előtt tévesztenuünk azt a törekvést, hogy rendszerünket az alapállapotában szeretnénk analizálni, éppen ezért $\hat{H}|\psi\rangle = (\hat{P} + C)|\psi\rangle$ jobb oldalát minimum értékre kell beállítanunk. Ezt olyan módon tudjuk véghez vinni, hogy kiszabjuk a

$$\hat{P}|\psi\rangle = 0 \quad (6)$$

feltételt, ami pontosan azt jelenti, hogy $\hat{P}$ spektrumából a legkisebb, azaz a $p = 0$ sajátértéket választjuk ki. Ezáltal eljutunk a $\hat{H}|\psi\rangle = C|\psi\rangle$ sajátérték-egyenlethez, így C valóban a rendszer alapállapot energiáját produkálja, vagyis $C = E_g$. Az E_g alapállapot energiához tartozó $|\psi_g\rangle$ alapállapot hullámfüggvényét a (6) feltétel alapján határozhatjuk meg azáltal, hogy megkonstruáljuk azt a legáltalánosabb $|\psi\rangle$ állapotot, amely eleget tesz a (6)-ban foglalt követelménynek. A fentiek szerint tehát világosan látszik, hogy a (6) kritérium kulcsfontosságú szerepet játszik az alapállapot meghatározásában, ugyanakkor azt is realizálnunk kell, hogy a (6) egyenlőséget az az egyszerű körülmény hívja életre, hogy $\hat{P}$ spektrumának pontosan ismert alsó korlátja van ($p \geq 0$).

A PSZO módszer több szempontból is roppant produktív. Sikeresége egyrészt abban rejlik, hogy az eljárás alkalmazhatósága abszolút független a rendszer dimenziójától és a mozgásállandók számától, vagyis integrálható és nemintegrálható rendszerekben egyaránt keresztülvihető, tetszőleges dimenzióban. A módszer másik nemtriviális erénye pedig abból származik, hogy egzaktul képes megadni a rendszer alapállapotú energiáját anélkül, hogy bármiféle ismeretünk lenne a (4) induló Hamilton-operátor sajátértékeinek alsó korlátjáról. Mivel azonban (5) szerint $\hat{H}$ és $\hat{P}$ csak a C konstansban különbözik egymástól, a $\hat{H}$ -spektrum minimumát a $\hat{P}$ -spektrum alsó korlátjának (a nullának) C -vel eltolt értéke definiálja.

Mindemellett szeretném azt is kiemelni, hogy az (5) szerinti átalakítás számtalan módon kivitelezhető, hiszen a transzformált Hamilton-operátor alakját a $\hat{P}$ operátor konkrét belső szerkezete határozza meg, melyet nagyon sokféleképpen kialakíthatunk azzal a kikötéssel, persze, hogy $\hat{P}$ formája pozitív szemidefinit kell, hogy legyen. Következésképpen az (5) transzformáció többféle módon is előállhat a

$$\begin{aligned}\hat{H}_1 &= \hat{P}_1 + C_1, \\ \hat{H}_2 &= \hat{P}_2 + C_2, \\ \hat{H}_3 &= \hat{P}_3 + C_3, \\ &\vdots\end{aligned}\tag{7}$$

általános felírásnak megfelelően, ahol $\hat{P}_1, \hat{P}_2, \hat{P}_3, \dots$ egymástól eltérő struktúrájú pozitív szemidefinit operátorokat jelentenek, megalkotva ezzel a különböző $\hat{H}_1, \hat{H}_2, \hat{H}_3, \dots$ transzformált Hamilton-operátorokat. A (7)-ben foglalt felbontások természetesen csak abban az esetben lehetnek effektíve helyesek, amennyiben a transzformált $\hat{H}_1, \hat{H}_2, \hat{H}_3, \dots$ Hamilton-operátorok identikusan visszaadják a (4) induló Hamilton-operátort, azaz fennállnak a

$$\begin{aligned}\hat{H} &\equiv \hat{H}_1, \\ \hat{H} &\equiv \hat{H}_2, \\ \hat{H} &\equiv \hat{H}_3, \\ &\vdots\end{aligned}\tag{8}$$

identikus egyenlőségek. Vegyük észre, hogy (8) azonosságai kapcsolatot teremtenek az induló és a transzformált Hamilton-operátor paraméterei között. Az induló Hamilton-operátor paramétereit – ahogyan ez (4)-ből is leolvasható – az $\{\epsilon_i, t_{ij}^{(n)}, U\}$ halmaz tartalmazza, a transzformált $\hat{H}_1, \hat{H}_2, \hat{H}_3, \dots$ Hamilton-operátorok paraméterkészleteit pedig jelöljük rendre a $\{h_1^1, h_2^1, h_3^1, \dots; C_1\}, \{h_1^2, h_2^2, h_3^2, \dots; C_2\}, \{h_1^3, h_2^3, h_3^3, \dots; C_3\}, \dots$, szettek úgy, hogy a $\{h_1^1, h_2^1, h_3^1, \dots\}, \{h_1^2, h_2^2, h_3^2, \dots\}, \{h_1^3, h_2^3, h_3^3, \dots\}, \dots$ csoportok a $\hat{P}_1, \hat{P}_2, \hat{P}_3, \dots$

operátorokat paraméterezik. Ha tevőlegesen is végrehajtjuk (8) egyenlőségeit, akkor eredményül olyan algebrai egyenletrendszereket kapunk, melyekben valóban megjelennek az induló és a transzformált Hamilton-operátorok fentebb említett paraméterei. (8) minden azonossága egyenként generál egy egyenletrendszert, melyeket teljes általánossággal matematikailag szemléletesen az

$$\begin{aligned} F_1(\{\epsilon_i, t_{ij}^{(n)}, U\}, \{h_1^1, h_2^1, h_3^1, \dots; C_1\}) &= 0, \\ F_2(\{\epsilon_i, t_{ij}^{(n)}, U\}, \{h_1^2, h_2^2, h_3^2, \dots; C_2\}) &= 0, \\ F_3(\{\epsilon_i, t_{ij}^{(n)}, U\}, \{h_1^3, h_2^3, h_3^3, \dots; C_3\}) &= 0, \\ &\vdots \end{aligned} \quad (9)$$

függvényformulákba lehet belesűríteni, ahol az $F_1 = 0$, $F_2 = 0$, $F_3 = 0$, ... egyenletrendszerek rendre a $\hat{H} \equiv \hat{H}_1$, $\hat{H} \equiv \hat{H}_2$, $\hat{H} \equiv \hat{H}_3$, ... azonosságokból erednek. A (9)-ben szereplő $F_k = 0$, $k = 1, 2, 3, \dots$, egyenletrendszereket mindvégig úgy kezeljük, hogy az induló Hamilton-operátor $\{\epsilon_i, t_{ij}^{(n)}, U\}$ paramétereit ismertnek tekintjük, a $\hat{H}_k$ operátorok paraméterei viszont (7) felírásának pillanatában még ismeretlenek, így (9) biztosítja annak lehetőségét, hogy kifejezzük a $\{h_1^k, h_2^k, h_3^k, \dots; C_k\}$ készleteket az $\{\epsilon_i, t_{ij}^{(n)}, U\}$ értékeinek függvényében. Amennyiben egy adott $F_k = 0$ egyenletrendszer esetén sikerül matematikailag és fizikailag is helyes megoldást vagy megoldásokat találnunk, akkor biztosak lehetünk abban, hogy $\hat{H} \equiv \hat{H}_k$ teljesül, a releváns $\hat{H}_k = \hat{P}_k + C_k$ transzformáció is korrekt, és $\hat{P}_k$ a $\{h_1^k, h_2^k, h_3^k, \dots\}$ paraméterek által válik meghatározottá. Ellenben, ha az egyenletrendszernek nem léteznek matematikai és fizikai megoldásai, akkor nem használhatjuk tovább az adott $\hat{H}_k = \hat{P}_k + C_k$ transzformációt, helyette újat kell konstruálnunk (5) szerint, és ellenőriznünk kell, hogy ezen új konstrukció kiállja-e az egyenletrendszer megoldhatóságának próbáját. Miután pedig $F_k = 0$ -ból meghatároztuk $\hat{H}_k$ -t (lényegében $\hat{P}_k$ -t és C_k -t), következhet a (6) feltétel megvalósítása, melynek során felépítjük azt a legáltalánosabb $|\psi_g\rangle_k$ hullámfüggvényt, amely engedelmeskedik a $\hat{P}_k|\psi_g\rangle_k = 0$ kitételnek. Ekkor, az alfejezet első szakaszában leírtaknak megfelelően, $|\psi_g\rangle_k$ megadja a rendszer alapállapot hullámfüggvényét, amelyhez az $E_{gk} = C_k$ alapállapot energiája rendelhető hozzá.

Ezenkívül fontos tudnivaló még az is, hogy egy (9)-ben adott $F_k = 0$ egyenletrendszer megoldása, azaz az ismeretlen $\{h_1^k, h_2^k, h_3^k, \dots; C_k\}$ elemek kiszámítása során olyan extra információkhoz is hozzájuthatunk, melyek jól meghatározott kapcsolatokat rögzítenek a Hamilton-operátor $\{\epsilon_i, t_{ij}^{(n)}, U\}$ paraméterei között. A fennálló extra relációk formálisan a $G_k(\{\epsilon_i, t_{ij}^{(n)}, U\})$ alakba tömöríthetők, melyek matematikailag egyenlőségek vagy egyenlőtlen-ségek formájában jöhetnek létre. A G_k feltételek az $\{\epsilon_i, t_{ij}^{(n)}, U\}$ paraméterek

által kifizített fázistérben kelnek életre azáltal, hogy G_k relációi egyértelműen definiálnak a fázistérben egy olyan speciális D_k domént, ahol a kapott $(|\psi_g\rangle_k; E_{g_k})$ alapállapot érvényes. A fenti okfejtés természetesen az összes $k = 1, 2, 3, \dots$ index esetében helytálló lehet, így a (9)-ből származtatott G_k függvénykapcsolatok a

$$\begin{aligned} G_1(\{\epsilon_i, t_{ij}^{(n)}, U\}) &\longrightarrow D_1 \longrightarrow (|\psi_g\rangle_1; E_{g_1}) \\ G_2(\{\epsilon_i, t_{ij}^{(n)}, U\}) &\longrightarrow D_2 \longrightarrow (|\psi_g\rangle_2; E_{g_2}) \\ G_3(\{\epsilon_i, t_{ij}^{(n)}, U\}) &\longrightarrow D_3 \longrightarrow (|\psi_g\rangle_3; E_{g_3}) \\ &\vdots \end{aligned} \quad (10)$$

felírás szerint valósulnak meg. A $(|\psi_g\rangle_1; E_{g_1}), (|\psi_g\rangle_2; E_{g_2}), (|\psi_g\rangle_3; E_{g_3}), \dots$ megoldások tehát a fázistér $D_1, D_2, D_3, \dots$ tartományain léteznek, melyeket a $G_1, G_2, G_3, \dots$ feltételek jelölnek ki. Összefoglalva tehát olyan $(|\psi_g\rangle_k; E_{g_k})$ alapállapotú megoldásokhoz juthatunk el, amelyek a fázistér jól meghatározott, lokális D_k szegmenseiben vannak értelmezve, és a kapott $(|\psi_g\rangle_k; E_{g_k})$ alapállapotok egyenként más és más fizikai tulajdonságokkal lehetnek felruházva. Ezáltal létrejön annak a lehetősége, hogy a D_k domének mentén haladva, zónáról zónára feltérképezzük a teljes fázisteret, és az esetlegesen változó fizikai tulajdonságok szerint elkülönítsük a rendszer olyan fázisait, melyek egymástól eltérő fizikai sajátosságokat mutatnak (pl. paramágneses – ferromágneses vagy szigetelő – vezető átmenetek feltárása). Megjegyzem, hogy nemintegrálható rendszerek egzakt úton kapott alapállapotainak esetében rendszerint tipikusnak számítanak azok az eredmények, amelyekben a globális megoldás a fázistér lokális szelvényeiből épül fel. Ezzel szemben az integrálható rendszerek egzakt alapállapotait általában egyetlen kompakt megoldás írja le, amely a fázistér egészére érvényes.

Szeretném azt is világosan érzékeltetni, hogy különböző D_k doménekben értelmezett $(|\psi_g\rangle_k; E_{g_k})$ alapállapotú megoldásokhoz nemcsak úgy juthatunk el, hogy többféle $\hat{H} \equiv \hat{H}_k$ transzformációt valósítunk meg (8) azonosságai szerint, hanem olyan módon is, hogy kialakítunk egyetlen meghatározott $\hat{H} \equiv \hat{H}_k$ struktúrát, majd megvizsgáljuk, hogy az ebből származó $F_k = 0$ egyenletrendszernek létezhet-e egynél több fizikai megoldása. Amennyiben felkínálkozik az a lehetőség, hogy több különböző $(|\psi_g\rangle'_k; E_{g'_k}), (|\psi_g\rangle''_k; E_{g''_k}), (|\psi_g\rangle'''_k; E_{g'''_k}), \dots$ megoldást találjunk az $F_k = 0$ egyenletrendszerhez, akkor a kapott alapállapotok a megfelelő $G'_k, G''_k, G'''_k, \dots$ relációk nyomán létrejövő $D'_k, D''_k, D'''_k, \dots$ tartományokon fognak fennállni.

Hogy élesebben kirajzolódjanak a fentebb részletezett eljárás főbb mozzanatai, a következőkben szeretném kézzelfoghatóbb módon is kifejtetni azt, hogy az 1.1. alfejezetben felvázolt rendszereim esetében konkrétan hogyan hajtottam végre a módszer egyes lépéseit.

Ahogy láttuk, első feladatunk az induló Hamilton-operátor átalakítása (5) szerint, ahol a transzformációt a $\hat{P}$ operátor struktúrája határozza meg, tehát először is $\hat{P}$ "finomszerkezetét" kell megalkotnunk. $\hat{P}$ -t a tanulmányozott rendszerek mindegyikében a

$$\hat{P} = \sum_{\sigma} \sum_q \sum_{p=1}^{N_c} \hat{A}_{p,q,\sigma}^{\dagger} \hat{A}_{p,q,\sigma} + \hat{H}_U \quad (11)$$

formula szerint szerkesztettem meg, melyben N_c a rendszert felépítő elemi cellák számát definiálja, a q összegzőindex értelmezési tartományát pedig minden esetben a tanulmányozott rendszer geometriai tulajdonságai és a rendszerben értelmezett $\epsilon_i, t_{ij}^{(n)}$ paraméterek típusai együttesen határozzák meg. Általánosan megállapítható azonban, hogy q értelmezési tartománya nem túl nagy, rendszerint ugyanis cellánként néhány $\hat{A}$ operátor (kb. 4-8) elegendő a Hamilton-operátor transzformációjának megvalósításához. A (11)-beli $\hat{H}_U$ ugyanazon Hubbard-járulékokat jeleníti meg, amelyek az induló (4) Hamilton-operátorban szerepelnek, az $\hat{A}_{p,q,\sigma}$ operátorokat pedig fermionikus annihiláló operátorok lineáris kombinációjaként állítottam elő, azaz

$$\hat{A}_{p,q,\sigma} = \sum_{i \in \alpha_q} x_{q,i}^p \hat{c}_{i,\sigma}. \quad (12)$$

Az $x_{q,i}^p$ koeficienssek (melyek paraméterezik $\hat{A}_{p,q,\sigma}$ -t, és (11) folytán $\hat{P}$ -t is) (12) felírásakor ismeretlenként lépnek be a kifejezésbe, ezért az $x_{q,i}^p$ értékeit ki kell majd számítanunk (lásd később (14)-et). Az összegzés az i csomóponti index szerint történik egy olyan véges α_q tartományon, amely a rendszernek csak néhány, egymáshoz közeli csomópontját foglalja magába. Így voltaképpen az egyes $\hat{A}_{p,q,\sigma}$ operátorok a rendszer kisméretű α_q blokkjain vannak értelmezve, ezért $\hat{A}_{p,q,\sigma}$ -t kézenfekvő a továbbiakban *blokkoperátor*-nak titulálni. (11) felhasználásával tehát az (5) transzformált Hamilton-operátor

$$\hat{H} = \sum_{\sigma} \sum_q \sum_{p=1}^{N_c} \hat{A}_{p,q,\sigma}^{\dagger} \hat{A}_{p,q,\sigma} + \hat{H}_U + K \hat{N} \quad (13)$$

alakban áll elő, ahol láthatóan a C konstans $C = K \hat{N}$ formában vettem fel. $\hat{N}$ a teljes részecskeszám operátorát jelöli, és mivel a részecskeszámot mindvégig mozgásállandóként kezelem, így $\hat{N}$ konstans, K pedig egy olyan struktúrával rendelkező állandó, melyet mindig az induló Hamilton-operátor paraméterei határoznak meg (utalok ismét (14)-re). A Hamilton-operátor transzformációját illetően szeretném megjegyezni, hogy a disszertációmban alkalmazott (13) struktúra speciálisan szétválasztja a Hamilton-operátor

kinetikus és kölcsönhatási járulékait, ez a tagolódás azonban korántsem szükségszerű, hiszen a transzformáció általánosabb szintjén a kinetikus és kölcsönhatási tagok keveredhetnek egymással.

Ahogy már (7) kapcsán is taglaltam, az (5) transzformáció többféleképpen is megalkotható. Vegyük észre, hogy (13) esetében az teszi "képlékeny" a transzformációt, hogy a (12) blokkoperátorok szerkezete többféleképpen is előállítható, hiszen az egyes α_q tartományok nagysága és elrendezése több módon is megválasztható. Így a különböző blokkoperátor-szettek más és más transzformációt valósíthatnak meg, ami megfelel a (7)-ben foglalt felírásnak. Most azonban, a könnyebb áttekinthetőség kedvéért, azt az esetet fogom kifejteni, amikor egyetlen transzformációt kezelünk, azaz (7-10)-ben $k = 1$.

E szerint továbbhaladva, (8) értelmében a (13) transzformált Hamilton-operátornak identikusan vissza kell adnia a (4) induló Hamilton-operátort. Ahhoz, hogy ezt az azonosságot felírassuk, el kell végeznünk a kijelölt $\hat{A}_{p,q,\sigma}^\dagger \hat{A}_{p,q,\sigma}$ szorzatokat, majd az eredményeket összeadva $\sum_\sigma \sum_q \sum_p \hat{A}_{p,q,\sigma}^\dagger \hat{A}_{p,q,\sigma}$ szerint, tagról tagra haladva össze kell hasonlítanunk (13)-at és (4)-et. Így (13) és (4) tagonkénti egyenlővé tétele generál egy egyenletrendszert, ami (9) értelmében az

$$F(\{\epsilon_i, t_{ij}^{(n)}\}, \{x_{q,i}^p; K\}) = 0 \quad (14)$$

alakba sűrítendő. (14) és (9) összehasonlítása alapján látható, hogy (14)-ben nem jelenik meg az U csatolási állandó. Ennek az az oka, hogy a (13)-ban alkalmazott transzformáció a (4) Hamilton-operátornak csak a $\hat{H}_0$ -ban foglalt kinetikus tagjait érinti, a $\hat{H}_U$ Hubbard-járulékokat viszont változatlanul hagyja, ezért a (14) egyenletrendszerben nem találunk olyan egyenletet, amely tartalmazná az U paramétert. (9) $\{h_1, h_2, h_3, \dots\}$ paraméterkészletét jelen esetben az $\{x_{q,i}^p\}$ halmaz testesíti meg, a C konstans helyébe pedig, $C = K\hat{N}$ következtében, K lép. Mindezek ismeretében világosan látszik, hogy – amennyiben (14)-nek létezik fizikailag is helyes matematikai megoldása – a (14) egyenletrendszer alkalmas az $\{x_{q,i}^p; K\}$ paraméterszett meghatározására úgy, hogy $\{x_{q,i}^p; K\}$ kifejezhető az $\{\epsilon_i, t_{ij}^{(n)}\}$ értékeinek függvényében. Továbbá, a (14) megoldásakor kialakuló extra feltételek (10) alapján a

$$G(\{\epsilon_i, t_{ij}^{(n)}\}) \longrightarrow D \longrightarrow (|\psi_g\rangle; E_g) \quad (15)$$

alakban adódnak, ahol a fázistérnek a $G(\{\epsilon_i, t_{ij}^{(n)}\})$ kondíció(k) által kijelölt D zónájában jelenhet meg a $(|\psi_g\rangle; E_g)$ alapállapot. Ezennel tehát elértünk ahhoz a ponthoz, amikor ismert formában rendelkezésünkre állnak az $\hat{A}_{p,q,\sigma}$ blokkoperátorok, illetve (11) folytán maga a $\hat{P}$. Emellett a kapott $K(\{\epsilon_i, t_{ij}^{(n)}\})$ révén az alapállapot energiája is megadható

$$E_g = K(\{\epsilon_i, t_{ij}^{(n)}\})N \quad (16)$$

szerkezettel.

4.2.2. Az alapállapot hullámfüggvény meghatározása

Ezek után az a feladatunk, hogy megkonstruáljuk és (6)-ot felhasználva meghatározzuk azt a $|\psi_g\rangle$ alapállapotot, amely a fentebbi D tartományon érvényes lehet. Ehhez először is meg kell szerkesztenünk egy induló $|\psi\rangle$ hullámfüggvényt, amelyből (6) alkalmazásával megkaphatjuk $|\psi_g\rangle$ -t. Ezen induló hullámfüggvényt a

$$|\psi\rangle = \prod_m \hat{B}_{m,\sigma_m}^\dagger |0\rangle \quad (17)$$

szerkezet szerint építettem fel, ahol $|0\rangle$ a vákuumállapotot reprezentálja, $\hat{B}_{m,\sigma_m}^\dagger$ pedig fermionikus keltő operátorok lineáris kombinációja a

$$\hat{B}_{m,\sigma_m}^\dagger = \sum_{j \in \alpha_m} y_j^m \hat{c}_{j,\sigma_m}^\dagger \quad (18)$$

formulának megfelelően. Rögzített m index esetén az adott $\hat{B}_{m,\sigma_m}^\dagger$ operátor egyetlen, σ_m spinvetületű elektront helyez el a rendszerben, amely a $j \in \alpha_m$ csomópontonok bármelyikén megjelenhet, és $|y_j^m|^2$ megadja annak valószínűségét, hogy az elektron éppen a j -edig csomóponton tartózkodik. Ennélfogva a rendszerbeli elektronok számát a (17) produktumában jelenlévő $\hat{B}_{m,\sigma_m}^\dagger$ operátorok száma, azaz m határozza meg. Látható, hogy az összegzés j futóindexe egy bizonyos α_m -mel jelölt tartományon mozoghat. Ahogyan azt majd a későbbi fejezetekben is látni fogjuk, α_m mérete kulcsfontosságú információt hordoz magában a $\hat{B}_{m,\sigma_m}^\dagger$ operátorok, és ezen keresztül az alapállapot fizikai tulajdonságaira vonatkozóan, ugyanis az α_m -hez tartozó csomópontok száma (azaz a j index által érinthető csomópontok száma) alapvetően megszabja az adott $\hat{B}_{m,\sigma_m}^\dagger$ kiterjedtségét, vagyis a $\hat{B}_{m,\sigma_m}^\dagger$ -et alkotó tagok számát. Ha például α_m a rendszer összes csomópontját tartalmazza, akkor úgynevezett *kiterjedt* állapotok jönnek létre, mivel ebben az esetben $\hat{B}_{m,\sigma_m}^\dagger$ a rendszer teljes terjedelmében él. Ha viszont α_m csak blokszerűen létezhet, azaz csak néhány egymáshoz közeli csomópontot foglal magába, akkor a rendszer egy kisméretű, véges tartományában *lokalizált* állapotok valósulnak meg. α_m méretét mindig a konkrét rendszerben elvégzett számítások mutatják meg, ezen módszertani bevezető szintjén azonban mindenképpen érdemes felfigyelni a *kiterjedt* és a *lokalizált* állapotok kialakulásának elvi lehetőségére. (18) felírásának pillanatában ismeretlenként jelennek meg az y_j^m együtthatók, így csak pontos értékeik kiszámításával válhatnak meghatározottá a $\hat{B}_{m,\sigma_m}^\dagger$ operátorok. Az y_j^m koefficiensek megadása a (6) feltétel alapján történik, amelybe beírva a (11)-beli $\hat{P}$, illetve a (17)-beli $|\psi\rangle$ kife-

jezését, a

$$\left(\sum_{\sigma} \sum_q \sum_p \hat{A}_{p,q,\sigma}^{\dagger} \hat{A}_{p,q,\sigma} + \hat{H}_U \right) \prod_m \hat{B}_{m,\sigma_m}^{\dagger} |0\rangle = 0 \quad (19)$$

egyenlőséghez jutunk el. Emlékezzünk arra, hogy a $\sum_{\sigma} \sum_q \sum_p \hat{A}_{p,q,\sigma}^{\dagger} \hat{A}_{p,q,\sigma}$ járuléklban $\hat{c}_{\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{\sigma}$ típusú operátori tagok jelennek meg, míg a $\hat{H}_U$ Hubbard-járuléklot $\hat{c}_{\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{\sigma} \hat{c}_{-\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{-\sigma}$ felépítésű elemek alkotják. Mivel ezen eltérő szerkezettel rendelkező komponensek matematikailag nem keveredhetnek, azaz nem kezelhetők együttesen egy egyenletben belül maradvá, így (19) kénytelen szétesni a

$$\begin{aligned} \left(\sum_{\sigma} \sum_q \sum_p \hat{A}_{p,q,\sigma}^{\dagger} \hat{A}_{p,q,\sigma} \right) \prod_m \hat{B}_{m,\sigma_m}^{\dagger} |0\rangle &= 0 \quad (a) \\ \hat{H}_U \prod_m \hat{B}_{m,\sigma_m}^{\dagger} |0\rangle &= 0 \quad (b) \end{aligned} \quad (20)$$

egyenlőségekre. (20) megoldásaiból hármas információt nyerhetünk: i.) kiszámíthatjuk az y_j^m koefficiensek konkrét értékeit, ii.) megállapíthatjuk az α_m domének méretét, iii.) következtethetünk az alapállapot fizikai tulajdonságaira, pl. mágneses vagy elektromos jellemzőkre. Koncentráljunk elsőként a (20.a) feltételre, mely legegyszerűbb módon az operátorok sorrendjének megfelelő átrendezésével hajtható végre. Az operátori sorrend megváltoztatásakor az a cél, hogy $\hat{A}_{p,q,\sigma}$ közvetlenül a $|0\rangle$ vákuumállapot elé kerüljön, hiszen $\hat{A}_{p,q,\sigma}$ annihiláló természeténél fogva automatikusan teljesíti az $\hat{A}_{p,q,\sigma}|0\rangle = 0$ egyenlőséget, melynek révén (20.a) jobb oldala valóban nullává válik. Az operátorok felcserélése az

$$\begin{aligned} \{ \hat{A}_{p,q,\sigma}, \hat{B}_{m,\sigma_m}^{\dagger} \} &= 0 \quad (a) \\ \left[\sum_q \hat{A}_{p,q,\sigma}^{\dagger} \hat{A}_{p,q,\sigma}, \hat{B}_{m,\sigma_m}^{\dagger} \right] &= 0 \quad (b) \end{aligned} \quad (21)$$

relációkon keresztül valósítható meg, melyeknek az összes $p, q, m, \sigma, \sigma_m$ indexre teljesülniük kell. Mivel $\hat{A}_{p,q,\sigma}$ eltüntető, $\hat{B}_{m,\sigma_m}^{\dagger}$ pedig keltő operátorok lineáris kombinációja, így – fermionikus rendszerekről lévén szó – a (21.a) egyenlőség felírásakor értelemszerűen az elemi fermionikus keltő és eltüntető operátorok között fennálló $\{ \hat{c}_{i,\sigma}, \hat{c}_{j,\sigma}^{\dagger} \} = \delta_{ij}$ antikommutációs relációkat kell alkalmaznunk. Ezzel szemben (21.b) kommutációs relációt ír elő, aminek az az oka, hogy $\hat{A}_{p,q,\sigma}^{\dagger} \hat{A}_{p,q,\sigma}$ -ban $\hat{c}_{i,\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{j,\sigma}$ típusú operátorszorzatok jelennek meg, ami már nem tisztán elemi fermionikus járulékl, ezért csak kommutációs relációt teljesíthet egy elemi fermionikus keltő operátorral $[\hat{c}_{i,\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{j,\sigma}, \hat{c}_{k,\sigma}^{\dagger}] = \delta_{jk} \hat{c}_{i,\sigma}^{\dagger}$ szerint. A (21) által felkínált lehetőségek közül célszerű elsőként a (21.a) esetet megvizsgálni, mivel ez a számítások technikai kivitelezésének

szempontjából elvileg egyszerűbb lehet, azonban előfordulhatnak olyan esetek is, amikor (21.a) nem vezet megoldásra. Ekkor tovább kell lépni az összetettebb struktúrával rendelkező (21.b) feltétel irányába, és tesztelni kell, hogy teljesíthető-e az előírt egyenlőség. Mindenesetre (21.a) és (21.b) közül akármelyik út bizonyul is járhatónak, az adott antikommutációs vagy kommutációs reláció generál egy olyan egyenletrendszert, amely matematikailag a

$$W(\{x_{q,i}^p\}, \{y_j^m\}) = 0 \quad (22)$$

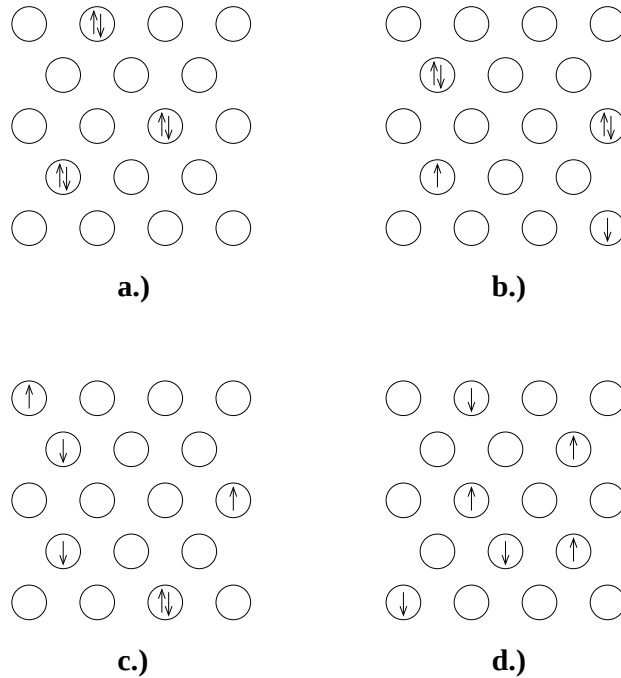
általános függvényalakban realizálható. (22) szintjén az $\{x_{q,i}^p\}$ halmaz elemei már ismertek, hiszen ezeket éppen a (14)-ben foglalt egyenletrendszer megoldásai határozták meg. Ennélfogva (22) biztosítja azt a lehetőséget, hogy kifejezzük az $\{y_j^m\}$ készletet $\{x_{q,i}^p\}$, illetve – (14) okán – végső soron $\{\epsilon_i, t_{ij}^{(n)}\}$ függvényében. Ezzel tehát (20.a) megoldásának menete véget ér, és eredményként megkapjuk az y_j^m együtthatók értékeit, ami alapján az α_m domének kiterjedése is meghatározható, vagyis (20.a) módot ad a fentebb említett i.) és ii.) pontok teljesítésére. Ezek után – a (20.a)-ból nyert információkat felhasználva – a (20.b) kritérium végrehajtásával megállapíthatjuk az alapállapot fizikai tulajdonságait, amivel a iii.) pont is elkészül, és i.), ii.), iii.) összesítésével az alapállapot hullámfüggvényét is egzaktul megadhatjuk.

Mivel a disszertációmban a rács által adott diszkrét geometriai térben értelmezett sokrészecskés, fermionikus rendszereket tárgyalok, így a 4.2. alfejezetben azt mutattam be részletesen, hogy ilyen körülmények között hogyan lehet megvalósítani a PSZO módszer egyes lépéseit. Természetesen az eljárás elvileg bármilyen fizikai rendszer esetében működőképes, de különböző típusú rendszerekben más és más formában alkalmazható. Hogy ezt egy egyszerű példán keresztül demonstráljam, a 2. Függelékben ismertetem a módszer alkalmazását az egydimenziós harmonikus oszcillátor esetében, ami a folytonos geometriai térben egy egyrészecskés, bozonikus szituációt határoz meg.

4.3. Az Alapállapotot Tartalmazó Altér Meghatározásán alapuló módszer

A módszer egy olyan utat kínál a rendszer egzakt alapállapotának meghatározására, amely a probléma Hilbert-tér-dimenziójának számottevő csökkentésével jelentősen megkönnyíti a matematikai tárgyalást és a fizikai tulajdonságok hatékony feltárását. Az eljárás bizonyos szempontból specifikusnak tekinthető, mivel csak olyan rendszerek esetében alkalmazható, amelyekben páros N számú elektron szingulett állapotot hoz létre, azaz

az összegzett spinvetület nulla. Ez fizikailag azt jelenti, hogy a rendszert egy olyan állapotba pozícionáljuk, amely mágneses szempontból rendezetlen, vagyis paramágneses, tehát a maximális szimmetriával rendelkező állapotot testesíti meg. A rendszerben – rögzített páros N számú elektron esetén – a $\mathcal{H}$ Hilbert-tér dimenzióját az N elektron által potenciálisan megvalósítható paramágneses részecskekonfigurációk száma definiálja. Ez tulajdonképpen azt a kombinatorikai kérdést veti fel, hogy az N elektront hányféleképpen helyezhetjük el a rendszer N_Λ számú csomópontján úgy, hogy az összegzett spinvetület nulla legyen, és a nem egyszeresen betöltött csomópontok esetében legfeljebb két részecske tartózkodjon a csomóponton ellentétes spinvetülettel. Az ilyen módon kialakuló részecskekonfigurációk összessége alkotja a teljes Hilbert-tér bázisvektorait. A szemléletesség kedvéért a 2. ábrán bemutatok néhány lehetséges elektronelrendeződést, amely az $N = 6$, $N_\Lambda = 18$ esetet példázza egy általános kétdimenziós szerkezetben.



2. ábra : 6 elektron néhány lehetséges elrendeződése egy 18 csomópontból álló kétdimenziós rendszerben.

Megfigyelhető, hogy az a.), b.), c.), d.) rajzok szerint négy alapvető konfigurációtípus különböztethető meg attól függően, hogy hány duplán betöltött csomópont található az adott elrendezésben. Figyeljünk fel arra a körülményre is, hogy a.)-től d.) felé haladva gyengül az elektronok közötti kölcsönhatás, hiszen a Hubbard-tag csak az egyazon csomóponton lévő részecskék közötti Coulomb-taszítást veszi figyelembe. Így értelemszerűen az

a.) elektronkonfiguráció azon változata reprezentálja a legnagyobb kölcsönhatást képviselő állapotot, melyben a lehető legkisebb a duplán betöltött csomópontok közötti távolság. Kombinatorikai eszközökkel egyszerűen kiszámolhatjuk, hogy ezen $N = 6$, $N_\Lambda = 18$ esetben a teljes Hilbert-tér dimenziója, a négy konfigurációtípus járulékait összegezve, $\dim \mathcal{H} = \binom{18}{3} + \binom{18}{2} \cdot \binom{16}{2} \cdot \binom{2}{1} + \binom{18}{1} \cdot \binom{17}{4} \cdot \binom{4}{2} + \binom{18}{6} \cdot \binom{6}{3} = 665856$.

Érzékelhető tehát, hogy már egy kisméretű, csupán 6 elektront tartalmazó rendszerben is igen tekintélyes a Hilbert-tér mérete, amit matematikailag nem egyszerű kezelni. Ekkor ugyanis a Hamilton-operátor teljes Hilbert-térben vett mátrixa egy (665856×665856) méretű kompozíció, melyet egzaktul diagonalizálnunk kell ahhoz, hogy megkapjuk a rendszer pontos alapállapotát. Ez ilyen viszonylatban nemcsak nehézkes, de igen komoly számítógépes kapacitást is igényel. Mindezeknek fényében értelmet nyer a Hilbert-tér-dimenzió csökkentésének igénye, amit az ATAM módszer segítségével vihetünk véghez. A módszer lényege abban áll, hogy a teljes Hilbert-térben meghatározunk egy olyan kisméretű $\mathcal{S}$ alteret, amely tartalmazza a rendszer alapállapotát. Ez azt jelenti, hogy meg kell konstruálnunk azokat az elektronállapotokat, melyek $\mathcal{S}$ bázisvektorait alkotják. A bázisvektorok megszerkesztéséhez a módszer két alapvető megfigyelést használ fel:

- (M1) Az alapállapot magába foglalja a legnagyobb kölcsönhatást képviselő részecskekonfigurációt (amikor az összes elektronpár duplán betöltött csomópontokat produkál úgy, hogy a dupla betöltések közötti távolság minimális).
- (M2) A rendszer translációinvariáns mivoltából kiindulva, a legnagyobb kölcsönhatást képviselő részecskekonfiguráció minden csomóponton ekvivalens módon, ugyanolyan súlyfaktoral létezhet.

Megjegyzem, hogy az eddigi tapasztalatok során egyetlen olyan ellenpélda sem merült fel, amely megcáfolná az (M1) és (M2) észrevételek helytállóságát.

A kiindulópontok szabatos rögzítését követően az $\mathcal{S}$ altér három fő lépésben építhető fel, melyeket a következő szakaszban ismertetek:

1. lépés

(M1) és (M2) alapján megszerkesztjük az $\mathcal{S}$ altér $|i_1\rangle$ -gyel jelölt első bázisvektorát, melyet a rendszer csomópontjain periodikusan megjelenő legnagyobb kölcsönhatást képviselő konfigurációk összessége alkot.

2. lépés

További bázisvektorokat úgy generálunk, hogy a rendszer (4) Hamilton-operátorával hatunk $|i_1\rangle$ -re, azaz elvégezzük a $\hat{H}|i_1\rangle$ műveletet. Ennek

eredményeképpen kialakul egy egyenlet, melyben $|i_1\rangle$ mellett megjelennek $|i_1\rangle$ -től eltérő konfigurációjú, új $|i_2\rangle, |i_3\rangle, \dots, |i_k\rangle$ vektorok. Az $|i_1\rangle$ -ből való származtatás folytán ezen új báziselemek mindegyike rendelkezik a tulajdonsággal, hogy az adott elektronkonfiguráció periodikusan transzlatált járulékaiknak összessége építi fel.

3. lépés

Hamilton-operátorunkkal hatunk az újonnan kapott $|i_2\rangle, |i_3\rangle, \dots, |i_k\rangle$ állapotokra is, vagyis előállítjuk a $\hat{H}|i_2\rangle, \hat{H}|i_3\rangle, \dots, \hat{H}|i_k\rangle$ által adott egyenleteket, melyekben a már meglévő vektorok mellett újabb $|i_{k+1}\rangle, |i_{k+2}\rangle, |i_{k+3}\rangle, \dots$ konfigurációk is felbukkannak. Ezek után kifejtjük a $\hat{H}|i_{k+1}\rangle, \hat{H}|i_{k+2}\rangle, \hat{H}|i_{k+3}\rangle, \dots$ egyenleteit is, és a procedúrát addig folytatjuk, amíg be nem zárul az egyenletrendszer, azaz amíg meg nem találjuk a báziskészlet utolsó $|i_z\rangle$ záróelemét, amire hatva a Hamilton-operátorral, már nem tűnnek fel újabb vektorok $\hat{H}|i_z\rangle$ egyenletében.

Összesítve tehát kialakul a

$$\begin{aligned}\hat{H}|i_1\rangle &= f_1(|i_1\rangle, |i_2\rangle, \dots, |i_z\rangle) \\ \hat{H}|i_2\rangle &= f_2(|i_1\rangle, |i_2\rangle, \dots, |i_z\rangle) \\ \hat{H}|i_3\rangle &= f_3(|i_1\rangle, |i_2\rangle, \dots, |i_z\rangle) \\ &\vdots \\ \hat{H}|i_z\rangle &= f_z(|i_1\rangle, |i_2\rangle, \dots, |i_z\rangle)\end{aligned}\tag{23}$$

egyenletrendszer, melyben az $|i_1\rangle, |i_2\rangle, \dots, |i_z\rangle$ vektorok lineárisan függetlenek, és 1-re normáltak. Az egyenletek jobb oldalán szereplő $f_j(|i_1\rangle, |i_2\rangle, \dots, |i_z\rangle)$, $j = 1, 2, \dots, z$, függvénykapcsolat pusztán azt hivatott jelölni, hogy kialakul az állapotoknak egy olyan lineáris kombinációja, amely az $|i_1\rangle, |i_2\rangle, \dots, |i_z\rangle$ készletnek csak bizonyos elemeit tartalmazza, így minden egyenletben más és más részhalmazai jelennek meg az $|i_1\rangle, |i_2\rangle, \dots, |i_z\rangle$ szettnek. A (23) által generált $|i_1\rangle, |i_2\rangle, \dots, |i_z\rangle$ állapotok alkotják tehát az $\mathcal{S}$ altér bázisvektorait, ennek értelmében pedig $\dim\mathcal{S} = z$, amelyre teljesül a $z = \dim\mathcal{S} \ll \dim\mathcal{H}$, ezért szokásos az $\mathcal{S}$ alteret redukált Hilbert-térnek is nevezni. A $\dim\mathcal{S} \ll \dim\mathcal{H}$ reláció számszerű érzékeltetésének céljából felsorakoztatok két konkrét esetet: 1.) Például egy négyzetes rács esetében [242], az $N = 4$, $N_\Lambda = 16$ rögzítésével $\dim\mathcal{H} = 14400$ és $\dim\mathcal{S} = 85$, ami igen figyelemreméltó, hiszen $\dim\mathcal{S}$ két nagyságrenddel kisebb, mint $\dim\mathcal{H}$. 2.) Az 1.c ábrán feltüntetett, általam tanulmányozott hatszöges rendszer esetében [244] pedig az $N = 4$, $N_\Lambda = 8$ értékek mellett $\dim\mathcal{H} = 784$ és $\dim\mathcal{S} = 70$, ami egy nagyságrendnyi különbséget jelent.

Ezek után már csak annyi a feladatunk, hogy a redukált Hilbert-térben végrehajtott egzakt diagonalizációval meghatározzuk a rendszer alapállapo-

tát. Ehhez szükségünk van a (23) egyenletrendszer $\tilde{\mathbf{M}}$ együtthatómátrixára, amely a Hamilton-operátor $\{\epsilon_i, t_{ij}^{(n)}, U\}$ paramétereinek függvényeként áll elő, hiszen (23) a (4) Hamilton-operátor $|i_1\rangle, |i_2\rangle, \dots, |i_z\rangle$ vektorokra vett hatása nyomán alakul ki. Ennek megfelelően

$$\tilde{\mathbf{M}} \equiv \tilde{\mathbf{M}}(\{\epsilon_i, t_{ij}^{(n)}, U\}), \quad (24)$$

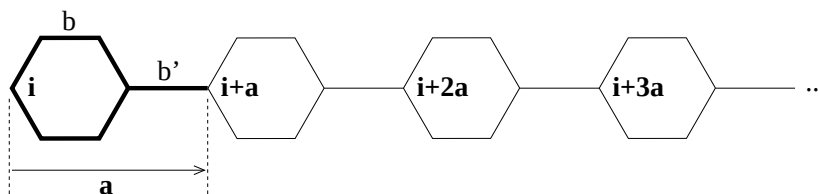
amely értelemszerűen egy $(z \times z)$ méretű mátrixot reprezentál. Így $\tilde{\mathbf{M}}$ egzakt diagonalizációjával hozzájutunk a rendszer $\mathcal{S}$ altérben vett pontos alapállapotához, amit $\tilde{\mathbf{M}}$ spektrumának legkisebb sajátértéke (alapállapoti energijája) és a hozzá tartozó alapállapoti hullámfüggvény(ek) szolgáltatnak. A megoldások helyességét a teljes Hilbert-térben elvégzett egzakt diagonalizáció eredményeivel való egyezés igazolhatja.

5. fejezet

A polifenilén típusú láncok alapállapotí eredményeinek bemutatása

5.1. A rendszer Hamilton-operátora

A tanulmányozott rendszer sematikus vázát a 3. ábra jeleníti meg. A hatszögek csúcspontjaiban szénatomok helyezkednek el, melyekhez a rendszer kémiai összetételét meghatározó atomok vagy atomcsoportok kapcsolódhatnak periodikus elrendezésben (l. 2.1. alfejezet). Az ábra szerint $\mathbf{a}$ jelöli a lánc Bravais-vektorát, és megfigyelhető, hogy egyetlen hatszög alkotja a rendszer primitív elemi celláját, mely az ábrán megvastagított vonallal van kiemelve. A hatszögek oldalhosszát b , a hatszögeket összekapcsoló kötések hosszát pedig b' jelöli. Az $\mathbf{i}$ csomópont-hoz tartozó elemi cellát $\mathbf{a}$ vektorral periodikusan eltolva tetszőleges hosszúságú polimerszerkezet építhető fel.



3. ábra : A tanulmányozott polifenilén vázlata. A lánc polimerszerkezete az $\mathbf{i}$ csomópont-hoz tartozó elemi cella $\mathbf{a}$ Bravais-vektorral történő periodikus eltolásával alakítható ki.

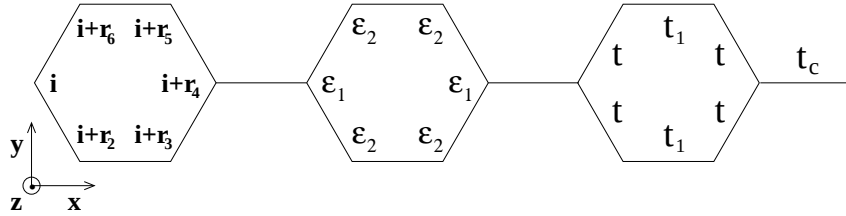
Amennyiben N_c a láncot alkotó cellák száma, a rendszer geometriai rácsa $N_\Lambda = N_c$ darab rácscsomópontot, kristályrácsa pedig $6N_c$ darab csomópontot tartalmaz, hiszen minden elemi cellában hat bázisatom található. Mivel csak egy Bravais-vektor van értelmezve, a rendszer lényegében egy egydimenziós struktúrát határoz meg. Ugyanakkor az elektronok valójában nemcsak az $\mathbf{a}$ vektor által kijelölt irány mentén mozoghatnak, hanem ezen vonalból kilépve, a hatszögek által megszabott síkban sokféle irányban pozíciót válthatnak az egyes csomópontok között. Ekkor viszont mozgásuk felbontható egy az $\mathbf{a}$ vektor irányába eső és egy arra merőleges komponensre. Világos tehát, hogy az egydimenziós jelleg magát a rácsot jellemzi, az elektronok mozgástere azonban két dimenzióban terjedhet ki. Ez a magyarázat indokolja annak helyességét, hogy rendszerünket a "kvázi-egydimenziós" jelzővel illessük. A lánc tetszőleges számú elemi cellát tartalmazhat, és a matematikai számítások zökkenőmentes kivitelezése szempontjából célszerű

periodikus határfeltételeket alkalmazni, ami jelen esetben azt jelenti, hogy a lánc gyűrűszerűen visszacsavarodik önmagába.

A rendszer Hamilton-operátorát a 3. fejezet konceptusai alapján, (4) értelmében a

$$\begin{aligned}
 \hat{H} = & \sum_{\sigma} \sum_{\mathbf{i}=1}^{N_c} \left[\epsilon_1 (\hat{n}_{\mathbf{i},\sigma} + \hat{n}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_4,\sigma}) + \epsilon_2 (\hat{n}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_2,\sigma} + \hat{n}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_3,\sigma} + \hat{n}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_5,\sigma} + \hat{n}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_6,\sigma}) \right] \\
 & + \sum_{\sigma} \sum_{\mathbf{i}=1}^{N_c} \left[t e^{i\frac{\eta}{12}} (\hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_2,\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{\mathbf{i},\sigma} + \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_4,\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_3,\sigma} + \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_5,\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_4,\sigma} + \hat{c}_{\mathbf{i},\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_6,\sigma}) \right. \\
 & + t_1 e^{i\frac{\eta}{3}} (\hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_3,\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_2,\sigma} + \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_6,\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_5,\sigma}) + t_c \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{a},\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_4,\sigma} + H.c. \left. \right] \\
 & + U \sum_{\mathbf{i}=1}^{N_c} (\hat{n}_{\mathbf{i},\sigma} \hat{n}_{\mathbf{i},-\sigma} + \hat{n}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_2,\sigma} \hat{n}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_2,-\sigma} + \hat{n}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_3,\sigma} \hat{n}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_3,-\sigma} \\
 & + \hat{n}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_4,\sigma} \hat{n}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_4,-\sigma} + \hat{n}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_5,\sigma} \hat{n}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_5,-\sigma} + \hat{n}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_6,\sigma} \hat{n}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_6,-\sigma}) \quad (25)
 \end{aligned}$$

kifejezés írja le, melyben ϵ_1, ϵ_2 a lokális egyrészezske-potenciálokat jelölik, t, t_1, t_c elsőszomszéd ugrásokat reprezentálnak, az U csatolási állandó értéke minden csomóponton azonos, $H.c.$ pedig a hermitikusan konjugált tagok jelölésére szolgál. A (25) Hamilton-operátor paramétereinek elhelyezkedését a 4. ábrán lehet nyomon követni, ahol a rajz első hatszögében vannak feltüntetve a csomópontok cellán belüli pozícióját megadó $\mathbf{r}_j$, $j = 1, 2, \dots, 6$, vektorok. Az egyszerűség kedvéért az $\mathbf{i}$ csomópont helyzetét jelölő vektor esetén $\mathbf{r}_1 = \mathbf{0}$. Mivel egyetlen Bravais-vektor van értelmezve a 4. ábra x tengelyének iránya mentén, az $\mathbf{r}_j$, $j = 1, 2, \dots, 6$, vektorok hat lineáris alrácsot különítenek el a hatszöges rendszerben. Megfigyelhető az is, hogy ϵ_1 és ϵ_2 a háromelágazású, illetve a kételágazású csomópontok egyrészezske-potenciáljait adja, t_1 és t_c az x tengellyel párhuzamos elektronugrásokat jellemzi a hatszögek oldalélei, illetve a hatszögeket összekötő szakaszok mentén, t pedig a hatszögek haránt irányú oldalai mentén történő ugrásokhoz van hozzárendelve.



4. ábra : A csomópontok helyzetvektorainak és a (25) Hamilton-operátor paramétereinek szemléltetése.

Rendszerünket a lánc síkjára merőleges, $\vec{B}$ indukciójú külső mágneses térbe helyezzük, mely a 4. ábrán berajzolt z tengely irányába mutat, azaz $B_x =$

$B_y = 0$, $B_z = B$. Ezen külső tér hatását a Hamilton-operátorban a t_{ij} hoppingokat szorzó $e^{i\chi_{ij}}$ alakú Peierls-faktorok veszik figyelembe, ahol χ_{ij} -t a külső mágneses tér $\vec{A}$ vektorpotenciáljának vonalintegrálja határozza meg $\chi_{ij} = \frac{2\pi}{\Phi_0} \int_i^j \vec{A} d\vec{l}$ szerint, $\Phi_0 = \frac{hc}{e}$ értelmezéssel. A számítások könnyítése érdekében az $\vec{A}$ vektorpotenciált a Landau-mértéknek megfelelően, $A_x = A_z = 0$, $A_y = Bx$ formában választottam meg, tehát $\vec{A}$ irányát a 4. ábrán feltüntetett y tengely jelöli ki. Ebben az esetben a t , t_1 , illetve t_c hoppingok Peierls-faktorainak exponenseiben rendre a $\chi = \frac{\eta}{12}$, $\chi_1 = \frac{\eta}{3}$, $\chi_c = 0$ értékek jelennek meg, ahol

$$\eta = \frac{3\sqrt{3}\pi}{\Phi_0} b^2 B, \quad (26)$$

melyben b a lánc hatszögeinek oldalhosszúságát adja meg a 3. ábrának megfelelően.

A következő két alfejezetben részletesen ismertetem a $B = 0$, illetve a $B \neq 0$ körülmények között fennálló alapállapot jellemzőket, amivel világosan rámutatok arra, hogy a külső mágneses tér bekapcsolása miként módosíthatja a rendszer alapvető fizikai tulajdonságait. A pontos alapállapotot mindkét esetben a 4.2. alfejezetben kifejtett PSZO módszer alkalmazásával határoztam meg.

5.2. A $B = 0$ eset tárgyalása

5.2.1. A Hamilton-operátor transzformációja

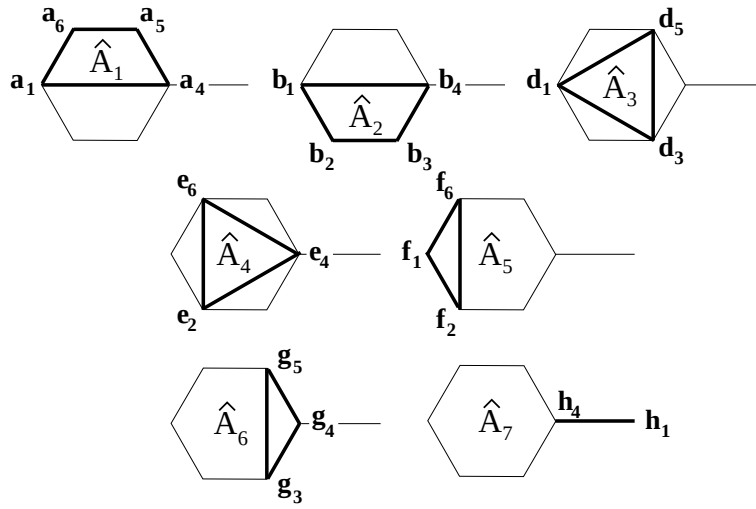
Ahogy azt már a 4.2.1. alfejezetben is bemutattam, az egzakt alapállapot meghatározásának első lépéseként a rendszer induló Hamilton-operátorát pozitív szemidefinit operátorokat tartalmazó formára kell transzformálnunk (13) alapján. Jelen esetben (13) a

$$\hat{H} = \sum_{\sigma} \sum_{q=1}^7 \sum_{i=1}^{N_c} \hat{A}_{i,q,\sigma}^{\dagger} \hat{A}_{i,q,\sigma} + \hat{H}_U + K_1 \hat{N} \quad (27)$$

felírás szerint realizálódik, azaz cellánként hét különböző szerkezetű blokk-operátort értelmeztem, így például a rendszer $\mathbf{i}$ cellájában az

$$\begin{aligned} \hat{A}_{\mathbf{i},1,\sigma} &= a_1 \hat{c}_{\mathbf{i},\sigma} + a_4 \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_4,\sigma} + a_5 \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_5,\sigma} + a_6 \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_6,\sigma}, \\ \hat{A}_{\mathbf{i},2,\sigma} &= b_1 \hat{c}_{\mathbf{i},\sigma} + b_2 \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_2,\sigma} + b_3 \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_3,\sigma} + b_4 \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_4,\sigma}, \\ \hat{A}_{\mathbf{i},3,\sigma} &= d_1 \hat{c}_{\mathbf{i},\sigma} + d_3 \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_3,\sigma} + d_5 \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_5,\sigma}, \\ \hat{A}_{\mathbf{i},4,\sigma} &= e_2 \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_2,\sigma} + e_4 \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_4,\sigma} + e_6 \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_6,\sigma}, \\ \hat{A}_{\mathbf{i},5,\sigma} &= f_1 \hat{c}_{\mathbf{i},\sigma} + f_2 \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_2,\sigma} + f_6 \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_6,\sigma}, \\ \hat{A}_{\mathbf{i},6,\sigma} &= g_3 \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_3,\sigma} + g_4 \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_4,\sigma} + g_5 \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_5,\sigma}, \\ \hat{A}_{\mathbf{i},7,\sigma} &= h_1 \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{a},\sigma} + h_4 \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_4,\sigma} \end{aligned} \quad (28)$$

kifejezések érvényesek. Mivel a lánc minden cellájában hét különböző blokkoperátor van jelen, és a spinindex két lehetséges értéket vehet fel, így (27) első összegjáruléka a rendszerben összesen $2 \cdot 7 \cdot N_c$ számú blokkoperátort értelméz. A (28)-ban bevezetett $\{a, b, d, e, f, g, h\}$ együtthatók a (12)-ben megadott $\{x_{q,i}^p\}$ halmazzal azonosíthatók úgy, hogy a rendszer periodikus struktúrája miatt minden egyes cellát ugyanazon $\{a, b, d, e, f, g, h\}$ készlet jellemez. A (28) operátortípusok blokkszerkezetét az 5. ábra szemlélteti, ahol az egyes rajzok az adott csomóponton ható annihiláló operátor koefficiensét is jelzik.



5. ábra : A (28)-ban megadott blokkoperátor-típusok szemléletes rajzai. Az $\{a, b, d, e, f, g, h\}$ koefficiensek az adott csomóponton ható eltüntető operátorhoz tartoznak.

(27-28) birtokában következhet a (14) egyenletrendszer felírása, mely ez esetben (27) és (25) tagonkénti azonosságából ered, így (14) egyenletei

$$\begin{aligned}
 t &= a_1^* a_6 + f_1^* f_6, \\
 t &= b_2^* b_1 + f_2^* f_1, \\
 t &= b_4^* b_3 + g_4^* g_3, \\
 t &= a_5^* a_4 + g_5^* g_4, \\
 t_1 &= a_6^* a_5, \\
 t_1 &= b_3^* b_2, \\
 t_c &= h_1^* h_4, \\
 0 &= a_4^* a_1 + b_4^* b_1, \\
 0 &= a_5^* a_1 + d_5^* d_1, \\
 0 &= a_4^* a_6 + e_4^* e_6,
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
0 &= b_4^* b_2 + e_4^* e_2, \\
0 &= b_3^* b_1 + d_3^* d_1, \\
0 &= d_5^* d_3 + g_5^* g_3, \\
0 &= e_6^* e_2 + f_6^* f_2, \\
\tilde{\epsilon}_1 &= \epsilon_1 - K_1 = |a_1|^2 + |b_1|^2 + |d_1|^2 + |f_1|^2 + |h_1|^2, \\
\tilde{\epsilon}_1 &= \epsilon_1 - K_1 = |a_4|^2 + |b_4|^2 + |e_4|^2 + |g_4|^2 + |h_4|^2, \\
\tilde{\epsilon}_2 &= \epsilon_2 - K_1 = |a_5|^2 + |d_5|^2 + |g_5|^2, \\
\tilde{\epsilon}_2 &= \epsilon_2 - K_1 = |a_6|^2 + |e_6|^2 + |f_6|^2, \\
\tilde{\epsilon}_2 &= \epsilon_2 - K_1 = |b_2|^2 + |e_2|^2 + |f_2|^2, \\
\tilde{\epsilon}_2 &= \epsilon_2 - K_1 = |b_3|^2 + |d_3|^2 + |g_3|^2
\end{aligned} \tag{29}$$

szerint alakulnak ki, melyek egyértelműen meghatározzák az ismeretlen $\{a, b, d, e, f, g, h; K_1\}$ halmaz elemei és a (25) Hamilton-operátor $\{\epsilon_1, \epsilon_2, t, t_1, t_c\}$ paraméterei között fennálló kapcsolatot. Így (29) megoldásai megadják a (28) blokkoperátorok koefficienseit, illetve a (27) transzformált Hamilton-operátor K_1 paraméterét az $\{\epsilon_1, \epsilon_2, t, t_1, t_c\}$ értékeinek függvényében. Ennek megfelelően, a (29) egyenletrendszert megoldva, a (28) blokkoperátorokra vonatkozóan az

$$\begin{aligned}
\hat{A}_{i,1,\sigma} &= \frac{1}{b_2^*} \left[t \frac{\gamma}{\beta} \hat{c}_{i,\sigma} + t_1 \frac{\beta}{\alpha} \hat{c}_{i+r_5,\sigma} + |b_2|^2 \left(\frac{\alpha}{\beta} \hat{c}_{i+r_6,\sigma} - \frac{t}{t_1} \beta \delta \hat{c}_{i+r_4,\sigma} \right) \right], \\
\hat{A}_{i,2,\sigma} &= \frac{1}{b_2^*} \left[t \gamma \hat{c}_{i,\sigma} + t_1 \hat{c}_{i+r_3,\sigma} + |b_2|^2 \left(\hat{c}_{i+r_2,\sigma} + \frac{t}{t_1} \delta \hat{c}_{i+r_4,\sigma} \right) \right], \\
\hat{A}_{i,3,\sigma} &= d_5 \left[\alpha \hat{c}_{i+r_3,\sigma} + \hat{c}_{i+r_5,\sigma} - t t_1 \frac{\gamma}{\alpha} \frac{1}{|b_2|^2 |d_5|^2} \hat{c}_{i,\sigma} \right], \\
\hat{A}_{i,4,\sigma} &= e_2 \left[\hat{c}_{i+r_2,\sigma} - \alpha \hat{c}_{i+r_6,\sigma} - \frac{t}{t_1} \delta \frac{|b_2|^2}{|e_2|^2} \hat{c}_{i+r_4,\sigma} \right], \\
\hat{A}_{i,5,\sigma} &= \frac{1}{f_6^*} \left[t \frac{\beta^2 - \alpha \gamma}{\beta^2} \hat{c}_{i,\sigma} + \alpha |e_2|^2 \left(\hat{c}_{i+r_2,\sigma} + \frac{\alpha \gamma - \beta^2}{\beta^2 (\gamma - 1)} \hat{c}_{i+r_6,\sigma} \right) \right], \\
\hat{A}_{i,6,\sigma} &= \frac{1}{g_5^*} \left[t \frac{\alpha + \delta \beta^2}{\alpha} \hat{c}_{i+r_4,\sigma} + |d_5|^2 \left(\frac{\alpha + \delta \beta^2}{\delta - 1} \hat{c}_{i+r_5,\sigma} - \alpha \hat{c}_{i+r_3,\sigma} \right) \right], \\
\hat{A}_{i,7,\sigma} &= h_1 \left[\hat{c}_{i+a,\sigma} + t_c \frac{1}{|h_1|^2} \hat{c}_{i+r_4,\sigma} \right]
\end{aligned} \tag{30}$$

kifejezések vezethetők le, melyekbe a

$$\begin{aligned}
|b_2|^2 &= \tilde{\epsilon}_2 \frac{\beta^2 - \alpha \gamma + \frac{\beta^2}{\alpha} (\gamma - 1)}{\beta^2 - \alpha}, \\
|e_2|^2 &= \tilde{\epsilon}_2 \frac{(\gamma - 1)(\alpha^2 - \beta^2)(\alpha \gamma - \beta^2)}{\alpha^2 (\beta^2 - \alpha) [\gamma (1 + \beta^2) - \beta^2 (1 + \frac{1}{\alpha})]}, \\
|d_5|^2 &= \frac{\delta - 1}{\alpha - 1 + \delta (1 + \beta^2)} \left[\tilde{\epsilon}_2 - t_1^2 \frac{\beta^2}{\alpha^2} \frac{1}{|b_2|^2} \right],
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
|g_5|^2 &= \frac{\alpha + \delta\beta^2}{\alpha - 1 + \delta(1 + \beta^2)} \left[\tilde{\epsilon}_2 - t_1^2 \frac{\beta^2}{\alpha^2} \frac{1}{|b_2|^2} \right], \\
|f_6|^2 &= \frac{\alpha(\alpha\gamma - \beta^2)}{\beta^2(\gamma - 1)} |e_2|^2, \\
|h_1|^2 &= \tilde{\epsilon}_1 - \left[t^2 \gamma^2 \left(1 + \frac{1}{\beta^2} + t_1^2 \frac{\alpha - 1 + \delta(1 + \beta^2)}{\delta - 1} \frac{1}{\tilde{\epsilon}_2 \alpha^2 |b_2|^2 - t_1^2 \beta^2} \right) \frac{1}{|b_2|^2} \right. \\
&\quad \left. + t^2 \frac{(\gamma - 1)(\alpha\gamma - \beta^2)}{\alpha\beta^2} \frac{1}{|e_2|^2} \right] \quad (31)
\end{aligned}$$

abszolútérték-négyzetek épülnek be. A (30-31)-ben megjelenő $\alpha, \beta, \gamma, \delta$ valós paraméterek az

$$\frac{\alpha(\alpha\gamma - \beta^2)}{\beta^2(\gamma - 1)} > 0, \quad \frac{\alpha + \delta\beta^2}{\delta - 1} > 0 \quad (32)$$

feltételek teljesülése mellett tetszőlegesen megválaszthatók. Mindemellett, (29) megoldásából eredően

$$K_1 = \epsilon_2 - \sqrt{\frac{\alpha(\beta^4 - \alpha^2)}{[\gamma(\beta^2 - \alpha^2) + \beta^2(\alpha - 1)][\delta(\beta^2 - \alpha^2) + \alpha(\alpha + 1)]}} |t_1|, \quad (33)$$

és kialakul az

$$\epsilon_1 = \frac{t^2}{t_1^2} \delta^2 |b_2|^2 \left(1 + \beta^2 + \frac{|b_2|^2}{|e_2|^2} \right) + t^2 \frac{(\delta - 1)^2}{\alpha^2} \frac{|g_5|^2}{|d_5|^4} + t_c^2 \frac{1}{|h_1|^2} + K_1 \quad (34)$$

extra feltétel, melybe (31) és (33) megfelelő kifejezései helyettesítendők. Így a (34) egyenlőség a (15)-ben említett relációt testesíti meg, amely az alapállapot számára egy meghatározott D tartományt jelöl ki a fázistérben.

5.2.2. Az alapállapot hullámfüggvény meghatározása

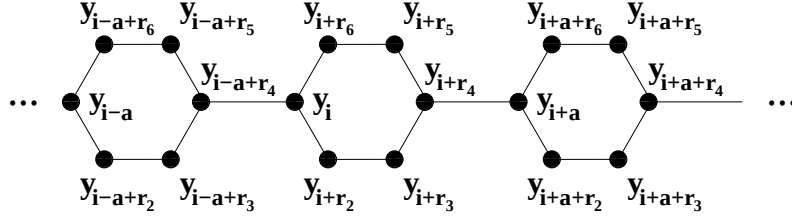
A 4.2.2. alfejezetben leírtak szerint az alapállapot hullámfüggvény meghatározásához elsőként egy induló hullámfüggvényt kell megalkotnunk a (17)-ben foglalt formula alapján, melyet ez esetben a

$$|\psi\rangle = \hat{B}_{1,\sigma}^\dagger |0\rangle \quad (35)$$

kifejezésnek megfelelően alakítottam ki. Tehát kiindulásként egyetlen $\hat{B}^\dagger$ operátort helyeztem el $|\psi\rangle$ -ben, hogy világosan kirajzolódjon egy egyedülként jelenlévő $\hat{B}^\dagger$ járuléka. $\hat{B}_{1,\sigma}^\dagger$ -t a (18)-ban ismertetett módon írtam fel a

$$\hat{B}_{1,\sigma}^\dagger = \sum_{\mathbf{i}=1}^{N_c} \sum_{j=1}^6 y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_j} \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_j,\sigma}^\dagger \quad (36)$$

alak szerint, ami egy olyan kiterjedt operátort valósít meg, melynek a lánc minden egyes csomópontján van komponense. A (36)-ban bevezetett $\hat{B}_{1,\sigma}^\dagger$ struktúráját grafikusan a 6. ábra jeleníti meg, ahol az operátor csomópontjaihoz hozzárendelt y_{i+r_j} együtthatók is fel vannak tüntetve.



6. ábra : A (36) $\hat{B}_{1,\sigma}^\dagger$ operátor kiterjedt szerkezetének illusztrálása. Az y_{i+r_j} együtthatók az adott csomóponton ható keltő operátor szorzófaktorát jelölik.

A (36) konstrukció azért előnyös, mert nem tüntet ki egyetlen csomópontot sem a rendszerben, így nem fenyeget az a veszély, hogy a $\hat{B}_{1,\sigma}^\dagger$ operátor szintjén bármiféle mesterkelt specifikum kerüljön be a jellemzésbe, ami sértené az általánosságot.

A következő lépésben (36) y_{i+r_j} együtthatóit kell kiszámítanunk a (20.a)-ban kijelölt feltétel alapján, és ahogy láttuk, (20.a)-t a (21) kritériumok valamelyikének teljesítésével hajthatjuk végre. Jelen esetben a (21.a) antikommutációs relációk nem lehetnek érvényben, mivel az általuk generált egyenletrendszer ellentmondásra vezetett. Ennek okán a (21.b) kommutációs relációjának megoldásával kellett megpróbálkoznom, ami viszont sikeresnek bizonyult. Ekkor ugyanis (28) és (36) felhasználásával (21.b) a

$$\left[\sum_{q=1}^7 \hat{A}_{i,q,\sigma}^\dagger \hat{A}_{i,q,\sigma} \hat{B}_{1,\sigma'}^\dagger \right] = 0 \quad (37)$$

egyenlőségre vezet, melynek minden i, σ és σ' indexre teljesülnie kell. (37)-ből minden i -re, azaz minden cellában, a $\sum_{q=1}^7$ szerinti hét tagból adódóan, a

$$\begin{aligned} 0 &= y_i(|a_1|^2 + |b_1|^2 + |d_1|^2 + |f_1|^2 + |h_1|^2) + y_{i+r_2}(b_1^* b_2 + f_1^* f_2) \\ &+ y_{i+r_3}(b_1^* b_3 + d_1^* d_3) + y_{i+r_4}(a_1^* a_4 + b_1^* b_4) + y_{i+r_5}(a_1^* a_5 + d_1^* d_5) \\ &+ y_{i+r_6}(a_1^* a_6 + f_1^* f_6), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} 0 &= y_i(b_2^* b_1 + f_2^* f_1) + y_{i+r_2}(|b_2|^2 + |e_2|^2 + |f_2|^2) + y_{i+r_3}b_2^* b_3 \\ &+ y_{i+r_4}(b_2^* b_4 + e_2^* e_4) + y_{i+r_6}(e_2^* e_6 + f_2^* f_6), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} 0 &= y_i(b_3^* b_1 + d_3^* d_1) + y_{i+r_2}b_3^* b_2 + y_{i+r_3}(|b_3|^2 + |d_3|^2 + |g_3|^2) \\ &+ y_{i+r_4}(b_3^* b_4 + g_3^* g_4) + y_{i+r_5}(d_3^* d_5 + g_3^* g_5), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
0 &= y_{\mathbf{i}}(a_4^*a_1 + b_4^*b_1) + y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_2}(b_4^*b_2 + e_4^*e_2) + y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_3}(b_4^*b_3 + g_4^*g_3) \\
&+ y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_4}(|a_4|^2 + |b_4|^2 + |e_4|^2 + |g_4|^2 + |h_4|^2) + y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_5}(a_4^*a_5 + g_4^*g_5) \\
&+ y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_6}(a_4^*a_6 + e_4^*e_6) + y_{\mathbf{i}+\mathbf{a}}h_4^*h_1, \\
0 &= y_{\mathbf{i}}(a_5^*a_1 + d_5^*d_1) + y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_3}(d_5^*d_3 + g_5^*g_3) + y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_4}(a_5^*a_4 + g_5^*g_4) \\
&+ y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_5}(|a_5|^2 + |d_5|^2 + |g_5|^2) + y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_6}a_5^*a_6, \\
0 &= y_{\mathbf{i}}(a_6^*a_1 + f_6^*f_1) + y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_2}(e_6^*e_2 + f_6^*f_2) + y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_4}(a_6^*a_4 + e_6^*e_4) \\
&+ y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_5}a_6^*a_5 + y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_6}(|a_6|^2 + |e_6|^2 + |f_6|^2), \\
0 &= y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_4}h_1^*h_4 + y_{\mathbf{i}+\mathbf{a}}|h_1|^2
\end{aligned} \tag{38}$$

egyenletrendszer származtatható, amely (36) $y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_j}$ koefficienseit egyértelmű kapcsolatba hozza a (28) blokkoperátorok $\{a, b, d, e, f, g, h\}$ együtthatóival, így explicite kibomlik a (22)-ben vázolt függvényreláció. Vegyük észre, hogy (38)-ban megjelennek a (29) egyenletrendszer tagjai, aminek figyelembevételével (38) jóval egyszerűbb alakot ölt a

$$\begin{aligned}
0 &= \tilde{c}_1 y_{\mathbf{i}} + t(y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_2} + y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_6}), \\
0 &= t y_{\mathbf{i}} + \tilde{c}_2 y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_2} + t_1 y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_3}, \\
0 &= t_1 y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_2} + \tilde{c}_2 y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_3} + t y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_4}, \\
0 &= t(y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_3} + y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_5}) + \tilde{c}_1 y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_4} + t_c y_{\mathbf{i}+\mathbf{a}}, \\
0 &= t y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_4} + \tilde{c}_2 y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_5} + t_1 y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_6}, \\
0 &= t y_{\mathbf{i}} + t_1 y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_5} + \tilde{c}_2 y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_6}, \\
0 &= t_c y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_4} + |h_1|^2 y_{\mathbf{i}+\mathbf{a}}
\end{aligned} \tag{39}$$

egyenleteknek megfelelően. (39) megoldásait az

$$\begin{aligned}
y_{\mathbf{i}} &= y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_4} = y_{\mathbf{i}+\mathbf{a}} = 0, \\
y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_2} &= -y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_6}, \quad y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_3} = -y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_5}, \\
y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_2} &= y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_3}, \quad y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_5} = y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_6}
\end{aligned} \tag{40}$$

egyenlőségek adják meg azzal a feltétellel, hogy

$$\tilde{c}_2 = -t_1 > 0. \tag{41}$$

Mivel (40) minden $\mathbf{i}$ -re fennáll, világosan látszik, hogy $y_{\mathbf{i}}$ és $y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_4}$ minden cellából eltűnik, és csak az $y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_2}$, $y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_3}$, $y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_5}$, $y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_6}$ koefficiensek maradnak meg nullától különböző értékkel. Ezenkívül az is megfigyelhető, hogy (40) csupán relációkat rögzít az $y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_2}$, $y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_3}$, $y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_5}$, $y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_6}$ együtthatók között, de

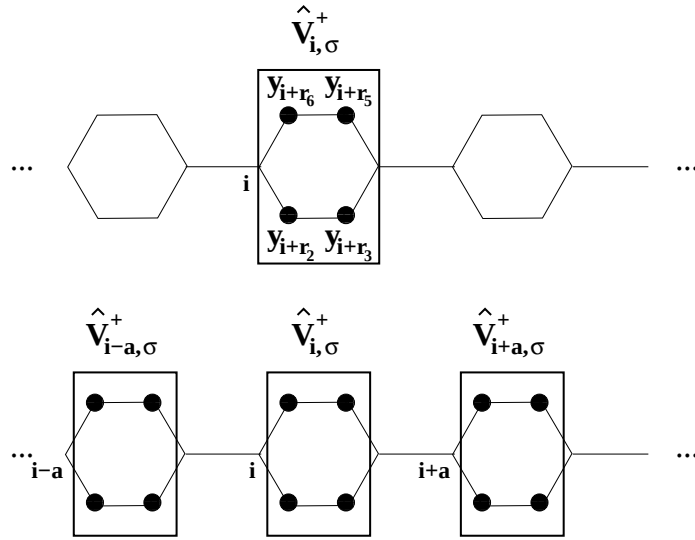
számértéküket nem konkretizálja. Ebből az következik, hogy (40) megoldása például $y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_2} = y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_3} = \mathcal{C}$, $y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_5} = y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_6} = -\mathcal{C}$ alakban felvehető, ahol a $\mathcal{C} \neq 0$ konstans értéke, a normálási feltétel figyelembevételével, tetszőlegesen beállítható. A (40) által felkínált szabad paraméterezés lehetőségét kihasználva, a $\mathcal{C}$ konstans a legegyszerűbb módon $\mathcal{C} = 1$ értékre rögzítettem, vagyis az $y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_2}$, $y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_3}$, $y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_5}$, $y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_6}$ koefficienseket az összes cellában

$$y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_2} = 1, \quad y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_3} = 1, \quad y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_5} = -1, \quad y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_6} = -1 \quad (42)$$

szerint választottam meg. Amennyiben $\mathcal{C}$ értékét nem 1-re rögzítjük, úgy a $\mathcal{C} \neq 1$ konstans értelemszerűen beleolvad a normálási faktorba. A (40,42)-ben foglalt eredmények azt mutatják tehát, hogy a (36) $\hat{B}_{1,\sigma}^\dagger$ operátor szét szakad olyan kisméretű doménekre, melyeket a

$$\hat{V}_{\mathbf{i},\sigma}^\dagger = \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_2,\sigma}^\dagger + \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_3,\sigma}^\dagger - \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_5,\sigma}^\dagger - \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_6,\sigma}^\dagger \quad (43)$$

operátorok definiálnak. A $\hat{V}_{\mathbf{i},\sigma}^\dagger$ blokkokat grafikusan a 7. ábra értelmezi.



7. ábra : A (43) $\hat{V}_{\mathbf{i},\sigma}^\dagger$ operátorok blokkszerkezetének grafikus megjelenítése $B = 0$ esetén.

A felső rajz az $\mathbf{i}$ cellához tartozó $\hat{V}_{\mathbf{i},\sigma}^\dagger$ operátort illusztrálja a (40) szerint megmaradó együtthatókkal, ami világosan mutatja, hogy a négy csomópontot tartalmazó $\hat{V}_{\mathbf{i},\sigma}^\dagger$ blokk összes csomópontja az $\mathbf{i}$ cella hatszögében található, azaz a $\hat{V}_{\mathbf{i},\sigma}^\dagger$ operátor hatása egyetlen cellára korlátozódik. Ez pedig fizikailag azt jelenti, hogy a $\hat{V}_{\mathbf{i},\sigma}^\dagger$ által keltett elektron csak az $\mathbf{i}$ cella megjelölt négy csomópontjának valamelyikén tartózkodhat, így voltaképpen egy olyan elektronállapot jön létre, amely a hatszögben lokalizálva van. A 7. ábra alsó rajza

azt szemlélteti, hogy az adott $\mathbf{i}-\mathbf{a}, \mathbf{i}, \mathbf{i}+\mathbf{a}$ cellákhoz tartozó $\hat{V}_{\mathbf{i}-\mathbf{a},\sigma}^\dagger, \hat{V}_{\mathbf{i},\sigma}^\dagger, \hat{V}_{\mathbf{i}+\mathbf{a},\sigma}^\dagger$ operátorok blokkjai teljes mértékben szeparáltak, tehát nem rendelkeznek közös csomópontokkal. Ezennel elérkeztünk ahhoz a ponthoz, amikor a (20.a) feltételből potenciálisan nyerhető információk kézzel fogható módon kikristályosodtak, hiszen megszületett az az érdemi eredmény, hogy a (35) próbafüggvénybe beépített (36) $\hat{B}_{1,\sigma}^\dagger$ operátor felhasad a kapott $\hat{V}_{\mathbf{i},\sigma}^\dagger$ operátorok által determinált diszjunkt doménekre, ezért a leírás további részében $\hat{B}_{1,\sigma}^\dagger$ helyébe a (43) $\hat{V}_{\mathbf{i},\sigma}^\dagger$ operátorok lépnek, és értelemszerűen a rendszerben lévő elektronok számát az értelmezett $\hat{V}_{\mathbf{i},\sigma}^\dagger$ operátorok száma adja meg. Mivel egy cellában csak egy $\hat{V}_{\mathbf{i},\sigma}^\dagger$ van jelen, a bevihető elektronok maximális számát a lánc N_c cellaszáma határozza meg, azaz legfeljebb N_c darab elektron élhet a rendszerben.

Ezek után már csak azt kell megvizsgálni, hogy a (20.b) kritérium milyen tulajdonságokkal ruházza fel a (43) $\hat{V}_{\mathbf{i},\sigma}^\dagger$ operátorokat. Jelen esetben (20.b) végrehajtása roppant egyszerű, ugyanis a $\hat{V}_{\mathbf{i},\sigma}^\dagger$ operátorok, speciális szerkezetüknél fogva, természetes módon teljesítik a (20.b) relációt. Ezt a következő gondolatmenettel támasztom alá: Ahogyan azt már a 7. ábránál is hangsúlyoztam, a $\hat{V}_{\mathbf{i},\sigma}^\dagger$ operátorok egyetlen csomóponton sem érintkeznek egymással, mivel teljesen szeparált módon vannak jelen az egyes cellákban. Ennek az a következménye, hogy egyáltalán nem alakulnak ki olyan csomópontok, melyeken egyidejűleg megjelenhetne két elektron. Tudvalevő azonban, hogy a Hubbard-tag éppen a duplán betöltött csomópontokat érzékeli a rendszerben, de mivel a dupla betöltések ez esetben eleve hiányoznak, így a Hubbard-tag hatása automatikusan nullát ad (20.b)-ben. Ez pedig azt jelenti, hogy közös érintkezési pontok híján az egyes $\hat{V}_{\mathbf{i},\sigma}^\dagger$ operátorok spinindexei között nem jön létre semmiféle korrelációs effektus, azaz az operátorok σ indexei egymástól függetlenül vehetik fel értéküket, így az elektronok globálisan egy teljesen rendezetlen spinrendszert alkotnak.

A (20.a-b) feltételek fentebb részletezett, aprólékos tanulmányozása nyomán a rendszer alapállapotú hullámfüggvényét a teljes $N \leq N_c$ tartományon a

$$|\psi_g(N \leq N_c)\rangle_0 = \prod_{\mathbf{i}} \hat{V}_{\mathbf{i},\sigma_{\mathbf{i}}}^\dagger |0\rangle \quad (44)$$

alakban kaptam meg, ahol a $\hat{V}_{\mathbf{i},\sigma_{\mathbf{i}}}^\dagger$ operátorokat (43) adja meg, $\sigma_{\mathbf{i}}$ tetszőleges, $|\psi_g\rangle_0$ alsó nullindexe pedig arra utal, hogy nincs jelen külső mágneses tér, tehát $B = 0$. A (44) alapállapot fizikai tulajdonságaival kapcsolatban két fontos következtetésre jutottam: I.) **Az alapállapot lokalizált**, ugyanis $|\psi_g\rangle_0$ -ban lokalizált elektronállapotok élnek, hiszen az egyes $\hat{V}_{\mathbf{i},\sigma_{\mathbf{i}}}^\dagger$ operátorok hatása egyetlen cellára korlátozódik. II.) **Az alapállapot paramágneses**, hiszen az elektronok egymástól független, tetszőleges $\sigma_{\mathbf{i}}$ spinindexszel kerül-

nek be a rendszerbe. Összegezve a nyert ismereteket, a polifenilén típusú lánc külső mágneses tér hiányában lokalizált elektronállapotok által megvalósított paramágnesként viselkedik az alapállapotában, és ez a tulajdonság tetszőleges $N \leq N_c$ részecskeszám esetén megmarad, hiszen N növelésével nem változik meg a $\hat{V}_{1,\sigma_1}^\dagger$ operátorok szeparált és lokalizált karakterisztikája.

Ezek után már csak a rendszer alapállapot energiáját kell meghatározni, ehhez azonban vissza kell térnünk a (41)-ben megadott feltételhez, amely $\tilde{\epsilon}_2 = \epsilon_2 - K_1$ révén magába rejti K_1 -et, így (41) szerint

$$K_1 = \epsilon_2 - |t_1|. \quad (45)$$

Itt felhívom a figyelmet arra, hogy (41) $-t_1 > 0$ relációja folytán $t_1 < 0$, ezért $-t_1$ helyébe $|t_1|$ írható. Ez a lépés azért fontos, mert így (45) közvetlen módon összehasonlítható a (33)-ban kapott K_1 -gyel. Tisztán látható, hogy (45) csak abban az esetben teljesülhet, amennyiben

$$\frac{\alpha(\beta^4 - \alpha^2)}{[\gamma(\beta^2 - \alpha^2) + \beta^2(\alpha - 1)][\delta(\beta^2 - \alpha^2) + \alpha(\alpha + 1)]} = 1 \quad (46)$$

fennáll, ami az $\alpha, \beta, \gamma, \delta$ paraméterekre nézve pusztán egy kiegészítő feltételt jelent a (32)-ben kirótt megszorítások mellett. Így K_1 végső (45) alakjával megadható a rendszer alapállapot energiája, amely (16) értelmében

$$E_g(N; \epsilon_2, t_1) = (\epsilon_2 - |t_1|)N. \quad (47)$$

Vegyük észre, hogy a (34)-ben megadott kondíció kiegészül a (41) kikötéssel, aminek következtében az

$$\begin{aligned} \epsilon_1 &= \frac{t^2}{t_1^2} \delta^2 |b_2|^2 \left(1 + \beta^2 + \frac{|b_2|^2}{|e_2|^2} \right) + t^2 \frac{(\delta - 1)^2}{\alpha^2} \frac{|g_5|^2}{|d_5|^4} + t_c^2 \frac{1}{|h_1|^2} + K_1, \\ \epsilon_2 &= -t_1 + K_1, \quad t_1 < 0 \end{aligned} \quad (48)$$

relációk jelölik ki a fázistérben azt a D zónát, amelyben a (44,47) alapállapot érvényes lehet.

5.3. A $B \neq 0$ eset tárgyalása

5.3.1. A Hamilton-operátor transzformációja

Az előző alfejezet részletesen tárgyalta a rendszer alapállapot tulajdonságait olyan körülmények között, amikor nincs jelen külső mágneses tér. Ezek után óhatatlanul megfogalmazódik az az igény, hogy az alapállapotot külső mágneses tér jelenlétében is feltérképezzük. Ez a vizsgálat igen hasznos lehet, hiszen az eredmények birtokában világosan kirajzolódhat az, hogy a mágneses tér bekapcsolása mennyiben módosítja az alapállapot fizikai jellemzőit a $B = 0$ szituációhoz képest. A mágneses teret a lánc síkjára merőlegesen, a 4. ábrán berajzolt z tengely irányában vettem fel, és az 5.1. alfejezetben leírtaknak megfelelően, a vektorpotenciált Landau-mérték szerint választottam meg. Ekkor a (25) induló Hamilton-operátor Peierls-faktoraiba a (26) paraméter épül be.

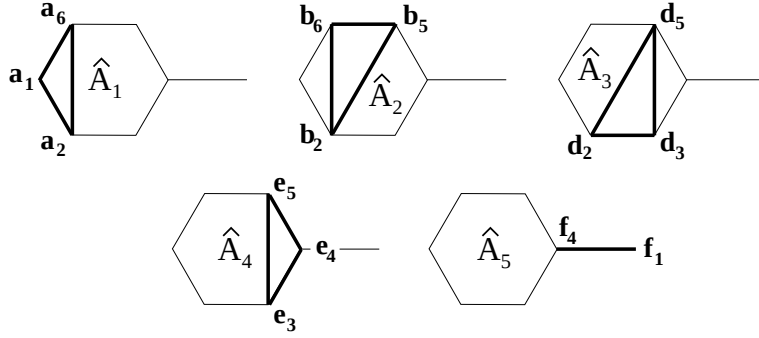
Ahogy a 4.2.1. alfejezet (7) kifejezéseivel is rávilágítottam, az induló Hamilton-operátor pozitív szemidefinit formára történő átalakítása többféleképpen is kivitelezhető, és az egyes transzformációkat a felbontásban szereplő pozitív szemidefinit operátorok eltérő strukturális kialakítása teszi különbözővé. Ezt felhasználva, – hogy egy (27-28)-tól eltérő konstrukciót is kipróbáljak – a (25) Hamilton-operátor transzformációját ezúttal a

$$\hat{H} = \sum_{\sigma} \sum_{q=1}^5 \sum_{i=1}^{N_c} \hat{A}_{i,q,\sigma}^{\dagger} \hat{A}_{i,q,\sigma} + \hat{H}_U + K_2 \hat{N} \quad (49)$$

formula szerint valósítottam meg, melyben cellánként öt különböző blokk-operátor szerepel. A rendszer i cellájában ezen operátorok az

$$\begin{aligned} \hat{A}_{i,1,\sigma} &= a_1 \hat{c}_{i,\sigma} + a_2 \hat{c}_{i+\mathbf{r}_2,\sigma} + a_6 \hat{c}_{i+\mathbf{r}_6,\sigma}, \\ \hat{A}_{i,2,\sigma} &= b_2 \hat{c}_{i+\mathbf{r}_2,\sigma} + b_5 \hat{c}_{i+\mathbf{r}_5,\sigma} + b_6 \hat{c}_{i+\mathbf{r}_6,\sigma}, \\ \hat{A}_{i,3,\sigma} &= d_2 \hat{c}_{i+\mathbf{r}_2,\sigma} + d_3 \hat{c}_{i+\mathbf{r}_3,\sigma} + d_5 \hat{c}_{i+\mathbf{r}_5,\sigma}, \\ \hat{A}_{i,4,\sigma} &= e_3 \hat{c}_{i+\mathbf{r}_3,\sigma} + e_4 \hat{c}_{i+\mathbf{r}_4,\sigma} + e_5 \hat{c}_{i+\mathbf{r}_5,\sigma}, \\ \hat{A}_{i,5,\sigma} &= f_1 \hat{c}_{i+\mathbf{a},\sigma} + f_4 \hat{c}_{i+\mathbf{r}_4,\sigma} \end{aligned} \quad (50)$$

szerkezettel rendelkeznek. Mivel a lánc minden cellájában öt különböző blokkoperátor van értelmezve, és a spinindexnek két értéke lehetséges, így (49) első összegjáruléka összesen $2 \cdot 5 \cdot N_c$ számú blokkoperátort vezet be a leírásba. Értelemszerűen most a (12)-ben megjelölt $\{x_{q,i}^p\}$ halmazt az (50)-beli $\{a, b, d, e, f\}$ koefficiensek alkotják. Tekintettel a rendszer periodikus mivoltára, (50) a lánc összes cellájában érvényes, vagyis minden cellához ugyanazon $\{a, b, d, e, f\}$ készlet rendelhető hozzá. Az (50) operátorok felépítését a 8. ábra demonstrálja az adott csomóponton ható eltüntető operátor együtthatójának jelölésével.



8. ábra : Az (50)-ben megadott blokkoperátor-típusok szemléletes rajzai. Az $\{a, b, d, e, f, \}$ koefficiensek az adott csomóponton ható eltüntető operátorhoz tartoznak.

Jelen esetben (49) és (25) tagonkénti identikussága a

$$\begin{aligned}
 te^{i\frac{\eta}{12}} &= a_1^* a_6, \\
 te^{i\frac{\eta}{12}} &= a_2^* a_1, \\
 te^{i\frac{\eta}{12}} &= e_4^* e_3, \\
 te^{i\frac{\eta}{12}} &= e_5^* e_4, \\
 t_1 e^{i\frac{\eta}{3}} &= d_3^* d_2, \\
 t_1 e^{i\frac{\eta}{3}} &= b_6^* b_5, \\
 t_c &= f_1^* f_4, \\
 0 &= a_2^* a_6 + b_2^* b_6, \\
 0 &= b_2^* b_5 + d_2^* d_5, \\
 0 &= d_3^* d_5 + e_3^* e_5, \\
 \tilde{\epsilon}_1 &= \epsilon_1 - K_2 = |a_1|^2 + |f_1|^2, \\
 \tilde{\epsilon}_1 &= \epsilon_1 - K_2 = |e_4|^2 + |f_4|^2, \\
 \tilde{\epsilon}_2 &= \epsilon_2 - K_2 = |a_2|^2 + |b_2|^2 + |d_2|^2, \\
 \tilde{\epsilon}_2 &= \epsilon_2 - K_2 = |a_6|^2 + |b_6|^2, \\
 \tilde{\epsilon}_2 &= \epsilon_2 - K_2 = |b_5|^2 + |d_5|^2 + |e_5|^2, \\
 \tilde{\epsilon}_2 &= \epsilon_2 - K_2 = |d_3|^2 + |e_3|^2
 \end{aligned} \tag{51}$$

egyenletrendszert produkálja, amely (14) aktuális reprezentációja, és kapcsolatot teremt az ismeretlen $\{a, b, d, e, f; K_2; \eta\}$ halmaz, illetve a (25) Hamilton-operátor $\epsilon_1, \epsilon_2, t, t_1, t_c$ paramétereinek között. (51) megoldásából az

$$\hat{A}_{1,1,\sigma} = \sqrt{\frac{2t^2 \tilde{\epsilon}_2}{\tilde{\epsilon}_2^2 - t_1^2}} \left[\hat{c}_{1,\sigma} + \frac{\tilde{\epsilon}_2^2 - t_1^2}{2t \tilde{\epsilon}_2} (e^{-i\frac{\eta}{12}} \hat{c}_{1+\mathbf{r}_2,\sigma} + e^{i\frac{\eta}{12}} \hat{c}_{1+\mathbf{r}_6,\sigma}) \right],$$

$$\begin{aligned}
\hat{A}_{\mathbf{i},2,\sigma} &= \sqrt{\frac{(\tilde{\epsilon}_2^2 - t_1^2)^2}{2\tilde{\epsilon}_2(\tilde{\epsilon}_2^2 + t_1^2)}} \left[\hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_2,\sigma} - \frac{2t_1\tilde{\epsilon}_2}{\tilde{\epsilon}_2^2 - t_1^2} e^{i\frac{\eta}{2}} \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_5,\sigma} - \frac{\tilde{\epsilon}_2^2 + t_1^2}{\tilde{\epsilon}_2^2 - t_1^2} e^{i\frac{\eta}{6}} \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_6,\sigma} \right], \\
\hat{A}_{\mathbf{i},3,\sigma} &= \sqrt{\frac{2t_1^2\tilde{\epsilon}_2}{\tilde{\epsilon}_2^2 + t_1^2}} \left[\hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_2,\sigma} + \frac{\tilde{\epsilon}_2^2 + t_1^2}{2t_1\tilde{\epsilon}_2} e^{-i\frac{\eta}{3}} \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_3,\sigma} - \frac{\tilde{\epsilon}_2^2 - t_1^2}{2t_1\tilde{\epsilon}_2} e^{-i\frac{\eta}{2}} \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_5,\sigma} \right], \\
\hat{A}_{\mathbf{i},4,\sigma} &= \sqrt{\frac{2t_1^2\tilde{\epsilon}_2}{\tilde{\epsilon}_2^2 - t_1^2}} \left[\hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_4,\sigma} + \frac{\tilde{\epsilon}_2^2 - t_1^2}{2t_1\tilde{\epsilon}_2} (e^{i\frac{\eta}{12}} \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_3,\sigma} + e^{-i\frac{\eta}{12}} \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_5,\sigma}) \right], \\
\hat{A}_{\mathbf{i},5,\sigma} &= \sqrt{|t_c|} \left[\hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{a},\sigma} + \text{sign}(t_c) \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_4,\sigma} \right]
\end{aligned} \tag{52}$$

eredmények adódnak az (50) blokkoperátorokra vonatkozóan, ahol η -t az

$$\eta = (2\ell + 1)\pi \tag{53}$$

egyenlőségben foglalt diszkrét értékek határozzák meg, melyben ℓ tetszőleges egész szám. Mivel az η paraméter (26) szerint arányos a külső mágneses tér indukciójával, így (53) folytán az (52) megoldások csak a

$$B = \frac{\Phi_0}{3\sqrt{3}b^2} (2\ell + 1) \tag{54}$$

szerint kvantált mágneses tér esetében érvényesek. Továbbá, (51) megoldása nyomán

$$\begin{aligned}
K_2 &= \frac{1}{3} \left\{ \epsilon_1 + 2\epsilon_2 - |t_c| + \left\{ (\epsilon_1 - \epsilon_2 - |t_c|) [(\epsilon_1 - \epsilon_2 - |t_c|)^2 + 9(t^2 - t_1^2)] \right. \right. \\
&+ \left\{ (\epsilon_1 - \epsilon_2 - |t_c|)^2 [(\epsilon_1 - \epsilon_2 - |t_c|)^2 + 9(t^2 - t_1^2)]^2 \right. \\
&- \left. [(\epsilon_1 - \epsilon_2 - |t_c|)^2 + 3(2t^2 + t_1^2)]^3 \right\}^{\frac{1}{2}} \left. \right\}^{\frac{1}{3}} \\
&+ \left\{ (\epsilon_1 - \epsilon_2 - |t_c|) [(\epsilon_1 - \epsilon_2 - |t_c|)^2 + 9(t^2 - t_1^2)] \right. \\
&- \left\{ (\epsilon_1 - \epsilon_2 - |t_c|)^2 [(\epsilon_1 - \epsilon_2 - |t_c|)^2 + 9(t^2 - t_1^2)]^2 \right. \\
&- \left. [(\epsilon_1 - \epsilon_2 - |t_c|)^2 + 3(2t^2 + t_1^2)]^3 \right\}^{\frac{1}{2}} \left. \right\}^{\frac{1}{3}} \left. \right\},
\end{aligned} \tag{55}$$

és emellett az

$$\begin{aligned}
(\epsilon_2 - K_2)^2 - t_1^2 &> 0, \quad \epsilon_1 - K_2 - \frac{2t^2(\epsilon_2 - K_2)}{(\epsilon_2 - K_2)^2 - t_1^2} > 0, \\
\frac{2t_1^2(\epsilon_2 - K_2)}{(\epsilon_2 - K_2)^2 + t_1^2} &> 1
\end{aligned} \tag{56}$$

feltételeknek kell teljesülniük, azaz most (15) függvénykapcsolatait az (56) egyenlőtlenségek formájában jönnek létre, meghatározva ezzel a paraméter-tér azon D szegmensét, ahol az alapállapot kereshető.

5.3.2. Az alapállapot hullámfüggvény meghatározása

Az alapállapot meghatározásához szükséges induló hullámfüggvényt ez esetben is az előző alfejezetben bemutatott formulák szerint szerkesztettem meg. Így a (35) kifejezéssel összhangban

$$|\psi\rangle = \hat{B}_{1,\sigma}^\dagger |0\rangle, \quad (57)$$

melyben, (36)-nak megfelelően,

$$\hat{B}_{1,\sigma}^\dagger = \sum_{\mathbf{i}=1}^{N_c} \sum_{j=1}^6 y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_j} \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_j,\sigma}^\dagger, \quad (58)$$

tehát ezúttal is egy olyan állapotból indultam ki, amely a 6. ábra szerint, kiterjedt módon, a lánc minden csomópontját magába foglalja.

Az (58)-ban szereplő $y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_j}$ együtthatók kiszámításában a (21.a)-ban kijelölt antikommutációs relációk ezúttal eredményre vezettek. (50) és (58) felhasználásával (21.a) az

$$\{\hat{A}_{\mathbf{i},q,\sigma}, \hat{B}_{1,\sigma'}^\dagger\} = 0 \quad (59)$$

alakot ölti, melynek minden $\mathbf{i}$, q , σ és σ' indexre teljesülnie kell. Az (59) relációkat a rendszer $\mathbf{i}$ cellájára felírva, a $q = 1, 2, \dots, 5$ eseteknek megfelelően, a

$$\begin{aligned} 0 &= a_1 y_{\mathbf{i}} + a_2 y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_2} + a_6 y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_6}, \\ 0 &= b_2 y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_2} + b_5 y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_5} + b_6 y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_6}, \\ 0 &= d_2 y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_2} + d_3 y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_3} + d_5 y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_5}, \\ 0 &= e_3 y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_3} + e_4 y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_4} + e_5 y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_5}, \\ 0 &= f_1 y_{\mathbf{i}+\mathbf{a}} + f_4 y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_4} \end{aligned} \quad (60)$$

egyenletrendszer adódik, mely (22) szerint összekapcsolja (58) $y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_j}$ koefficienseit az (50) blokkoperátorok $\{a, b, d, e, f\}$ együtthatóival. Az (52) által megadott $\{a, b, d, e, f\}$ szorzófaktorok helyettesítésével (60)

$$\begin{aligned} 0 &= y_{\mathbf{i}} + \frac{\tilde{e}_2^2 - t_1^2}{2t\tilde{e}_2} e^{-i\frac{\eta}{12}} y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_2} + \frac{\tilde{e}_2^2 - t_1^2}{2t\tilde{e}_2} e^{i\frac{\eta}{12}} y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_6}, \\ 0 &= y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_2} + \frac{2t_1\tilde{e}_2}{\tilde{e}_2^2 - t_1^2} e^{i\frac{\eta}{2}} y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_5} + \frac{\tilde{e}_2^2 + t_1^2}{\tilde{e}_2^2 - t_1^2} e^{i\frac{\eta}{6}} y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_6}, \\ 0 &= y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_2} + \frac{\tilde{e}_2^2 + t_1^2}{2t_1\tilde{e}_2} e^{-i\frac{\eta}{3}} y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_3} + \frac{\tilde{e}_2^2 - t_1^2}{2t_1\tilde{e}_2} e^{-i\frac{\eta}{2}} y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_5}, \\ 0 &= \frac{\tilde{e}_2^2 - t_1^2}{2t\tilde{e}_2} e^{i\frac{\eta}{12}} y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_3} + y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_4} + \frac{\tilde{e}_2^2 - t_1^2}{2t\tilde{e}_2} e^{-i\frac{\eta}{12}} y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_5}, \\ 0 &= y_{\mathbf{i}+\mathbf{a}} + \text{sign}(t_c) y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_4} \end{aligned} \quad (61)$$

alakúvá válik, és (61) egyenleteiből az

$$\begin{aligned}
y_{\mathbf{i}} &= y_{\mathbf{i}+\mathbf{a}} = Z \frac{t_1}{t} \frac{\tilde{\epsilon}_2^2 - t_1^2}{\tilde{\epsilon}_2^2 + t_1^2} \left[\frac{\tilde{\epsilon}_2^2}{t_1^2} e^{-i\frac{5\eta}{12}} - e^{i\frac{7\eta}{12}} \right] s, \\
y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_2} &= Z \left[\text{sign}(t_c) e^{i\frac{\eta}{6}} - \frac{\tilde{\epsilon}_2}{t_1} e^{-i\frac{\eta}{3}} \right] s, \\
y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_3} &= s, \\
y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_4} &= Z \text{sign}(t_c) \frac{t_1}{t} \frac{\tilde{\epsilon}_2^2 - t_1^2}{\tilde{\epsilon}_2^2 + t_1^2} \left[e^{i\frac{7\eta}{12}} - \frac{\tilde{\epsilon}_2^2}{t_1^2} e^{-i\frac{5\eta}{12}} \right] s, \\
y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_5} &= Z \left[\text{sign}(t_c) \frac{\tilde{\epsilon}_2}{t_1} e^{-i\frac{\eta}{3}} - e^{i\frac{\eta}{6}} \right] s, \\
y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_6} &= Z \left\{ \frac{\tilde{\epsilon}_2}{t_1} \frac{\tilde{\epsilon}_2^2 - t_1^2}{\tilde{\epsilon}_2^2 + t_1^2} \left[\frac{2t_1^2}{\tilde{\epsilon}_2^2 - t_1^2} e^{i\frac{\eta}{2}} - e^{-i\frac{\eta}{2}} \right] - \text{sign}(t_c) \right\} s, \\
Z &= \left\{ 1 - \text{sign}(t_c) \frac{\tilde{\epsilon}_2}{t_1} \frac{\tilde{\epsilon}_2^2 - t_1^2}{\tilde{\epsilon}_2^2 + t_1^2} \left[\frac{2t_1^2}{\tilde{\epsilon}_2^2 - t_1^2} e^{i\frac{\eta}{2}} - e^{-i\frac{\eta}{2}} \right] \right\}^{-1} \quad (62)
\end{aligned}$$

megoldásokat vezettem le, ahol az $s \neq 0$ paraméter értékét a normálási feltétel határozza meg. (62) kifejezései a rendszer periodikus mivoltából adódóan bármely $\mathbf{i}$ cellaindexre érvényesek, így a lánc minden cellájában a (62) együtthatók jelennek meg. Ez azt jelenti, hogy az egyes cellák $\mathbf{a}$ vektorral transzlatált, ugyanazon $\mathbf{r}_j$ vektorral jellemzett csomópontjainak a koefficiensei megegyeznek, azaz $\dots = y_{\mathbf{i}-2\mathbf{a}+\mathbf{r}_j} = y_{\mathbf{i}-\mathbf{a}+\mathbf{r}_j} = y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_j} = y_{\mathbf{i}+\mathbf{a}+\mathbf{r}_j} = y_{\mathbf{i}+2\mathbf{a}+\mathbf{r}_j} = \dots$, $j = 1, 2, \dots, 6$. Az eddigi eredmények tehát azt mutatják, hogy az (58) $\hat{B}_{1,\sigma}^\dagger$ operátor kiterjedt formában, sértetlenül egy darabban marad, mivel nulla értékű $y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_j}$ koefficiensek hiányában nem bomlik fel több kisebb méretű blokkra. Ez a megállapítás mindenképpen előremutató, hiszen az már most látszik, hogy az előző alfejezetbeli $B = 0$ esethez képest egy kvalitatíve más típusú megoldás bontakozik ki. Ugyanakkor (62) egyelőre csak egy irányjelző, a továbbhaladást segítő részeredmény, ami azonban még nem alkalmas arra, hogy bármiféle végkövetkeztetést vonjunk le a rendszer alapállapotára vonatkozóan. (62) folytán ugyanis egyetlen $\hat{B}_{1,\sigma}^\dagger$ operátor épül be az (57) hullámfüggvénybe, így csupán egyetlen elektron van jelen a rendszerben. Ez nyilvánvalóan nem elegendő egy sokrészecskés jellemzéshez, ezért olyan irányban kellett tovább folytatnom a vizsgálatokat, hogy – továbbra is az (57-58) próbaállapotból kiindulva – milyen módon lehetne megsokszorozni az alapállapotba beilleszthető operátorok (részecskék) számát.

Ennek okán azt próbáltam elemezni, hogy két szomszédos cella (60) típusú egyenleteinek összekapcsolásával kihozhatók-e olyan megoldások, amelyek különböznek a (62)-ben megadott eredménytől, és biztosíthatják egy sokrészecskés állapot kialakulásának lehetőségét. Így tehát (59) antikommutációs relációit két szomszédos cellára összefogva, (50) és (58) alkalmazá-

sával, felírtam az $(\mathbf{i} - \mathbf{a}, \mathbf{i})$ cellapár egyenleteit, melyek

$$\begin{aligned}
0 &= a_1 y_{\mathbf{i}-\mathbf{a}} + a_2 y_{\mathbf{i}-\mathbf{a}+\mathbf{r}_2} + a_6 y_{\mathbf{i}-\mathbf{a}+\mathbf{r}_6}, \\
0 &= b_2 y_{\mathbf{i}-\mathbf{a}+\mathbf{r}_2} + b_5 y_{\mathbf{i}-\mathbf{a}+\mathbf{r}_5} + b_6 y_{\mathbf{i}-\mathbf{a}+\mathbf{r}_6}, \\
0 &= d_2 y_{\mathbf{i}-\mathbf{a}+\mathbf{r}_2} + d_3 y_{\mathbf{i}-\mathbf{a}+\mathbf{r}_3} + d_5 y_{\mathbf{i}-\mathbf{a}+\mathbf{r}_5}, \\
0 &= e_3 y_{\mathbf{i}-\mathbf{a}+\mathbf{r}_3} + e_4 y_{\mathbf{i}-\mathbf{a}+\mathbf{r}_4} + e_5 y_{\mathbf{i}-\mathbf{a}+\mathbf{r}_5}, \\
0 &= f_1 y_{\mathbf{i}} + f_4 y_{\mathbf{i}-\mathbf{a}+\mathbf{r}_4}, \\
0 &= a_1 y_{\mathbf{i}} + a_2 y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_2} + a_6 y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_6}, \\
0 &= b_2 y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_2} + b_5 y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_5} + b_6 y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_6}, \\
0 &= d_2 y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_2} + d_3 y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_3} + d_5 y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_5}, \\
0 &= e_3 y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_3} + e_4 y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_4} + e_5 y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_5}, \\
0 &= f_1 y_{\mathbf{i}+\mathbf{a}} + f_4 y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_4}
\end{aligned} \tag{63}$$

szerint alakulnak ki, és $\mathbf{i}$ bármely cellaindexet jelölheti. (63)-ba az (52)-ben foglalt megoldás $\{a, b, d, e, f\}$ együtthatóit helyettesítve, a

$$\begin{aligned}
0 &= y_{\mathbf{i}-\mathbf{a}} + \frac{\tilde{c}_2^2 - t_1^2}{2t\tilde{c}_2} e^{-i\frac{\eta}{12}} y_{\mathbf{i}-\mathbf{a}+\mathbf{r}_2} + \frac{\tilde{c}_2^2 - t_1^2}{2t\tilde{c}_2} e^{i\frac{\eta}{12}} y_{\mathbf{i}-\mathbf{a}+\mathbf{r}_6}, \\
0 &= y_{\mathbf{i}-\mathbf{a}+\mathbf{r}_2} + \frac{2t_1\tilde{c}_2}{\tilde{c}_2^2 - t_1^2} e^{i\frac{\eta}{2}} y_{\mathbf{i}-\mathbf{a}+\mathbf{r}_5} + \frac{\tilde{c}_2^2 + t_1^2}{\tilde{c}_2^2 - t_1^2} e^{i\frac{\eta}{6}} y_{\mathbf{i}-\mathbf{a}+\mathbf{r}_6}, \\
0 &= y_{\mathbf{i}-\mathbf{a}+\mathbf{r}_2} + \frac{\tilde{c}_2^2 + t_1^2}{2t_1\tilde{c}_2} e^{-i\frac{\eta}{3}} y_{\mathbf{i}-\mathbf{a}+\mathbf{r}_3} + \frac{\tilde{c}_2^2 - t_1^2}{2t_1\tilde{c}_2} e^{-i\frac{\eta}{2}} y_{\mathbf{i}-\mathbf{a}+\mathbf{r}_5}, \\
0 &= \frac{\tilde{c}_2^2 - t_1^2}{2t\tilde{c}_2} e^{i\frac{\eta}{12}} y_{\mathbf{i}-\mathbf{a}+\mathbf{r}_3} + y_{\mathbf{i}-\mathbf{a}+\mathbf{r}_4} + \frac{\tilde{c}_2^2 - t_1^2}{2t\tilde{c}_2} e^{-i\frac{\eta}{12}} y_{\mathbf{i}-\mathbf{a}+\mathbf{r}_5}, \\
0 &= y_{\mathbf{i}} + \text{sign}(t_c) y_{\mathbf{i}-\mathbf{a}+\mathbf{r}_4}, \\
0 &= y_{\mathbf{i}} + \frac{\tilde{c}_2^2 - t_1^2}{2t\tilde{c}_2} e^{-i\frac{\eta}{12}} y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_2} + \frac{\tilde{c}_2^2 - t_1^2}{2t\tilde{c}_2} e^{i\frac{\eta}{12}} y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_6}, \\
0 &= y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_2} + \frac{2t_1\tilde{c}_2}{\tilde{c}_2^2 - t_1^2} e^{i\frac{\eta}{2}} y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_5} + \frac{\tilde{c}_2^2 + t_1^2}{\tilde{c}_2^2 - t_1^2} e^{i\frac{\eta}{6}} y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_6}, \\
0 &= y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_2} + \frac{\tilde{c}_2^2 + t_1^2}{2t_1\tilde{c}_2} e^{-i\frac{\eta}{3}} y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_3} + \frac{\tilde{c}_2^2 - t_1^2}{2t_1\tilde{c}_2} e^{-i\frac{\eta}{2}} y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_5}, \\
0 &= \frac{\tilde{c}_2^2 - t_1^2}{2t\tilde{c}_2} e^{i\frac{\eta}{12}} y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_3} + y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_4} + \frac{\tilde{c}_2^2 - t_1^2}{2t\tilde{c}_2} e^{-i\frac{\eta}{12}} y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_5}, \\
0 &= y_{\mathbf{i}+\mathbf{a}} + \text{sign}(t_c) y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_4}
\end{aligned} \tag{64}$$

egyenletek adódnak, és a (64) egyenletrendszer egy lehetséges megoldását az

$$\begin{aligned}
y_{\mathbf{i}-\mathbf{a}} &= 0, \\
y_{\mathbf{i}-\mathbf{a}+\mathbf{r}_2} &= -e^{i\frac{\eta}{6}} s,
\end{aligned}$$

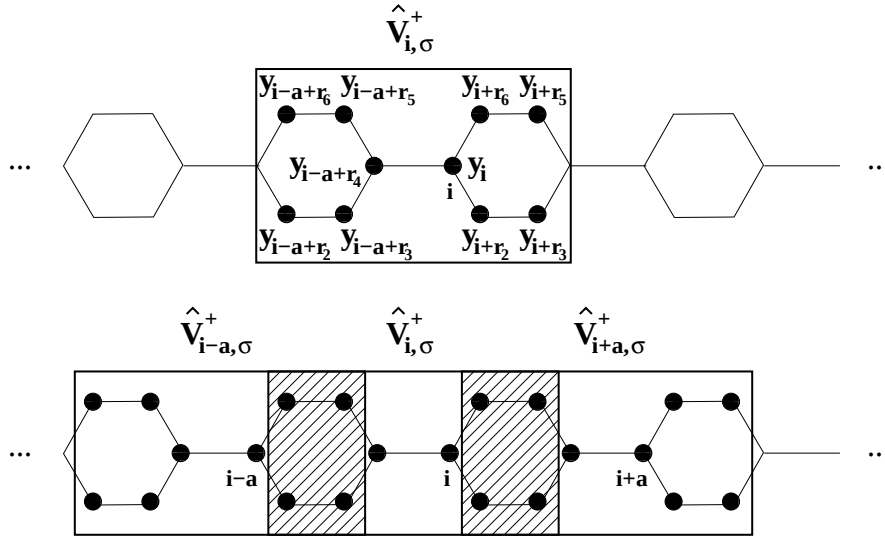
$$\begin{aligned}
y_{\mathbf{i}-\mathbf{a}+\mathbf{r}_3} &= \frac{\tilde{\epsilon}_2}{t_1} \frac{\tilde{\epsilon}_2^2 - t_1^2}{\tilde{\epsilon}_2^2 + t_1^2} \left[\frac{2t_1^2}{\tilde{\epsilon}_2^2 - t_1^2} e^{i\frac{\eta}{2}} - e^{-i\frac{\eta}{2}} \right] s, \\
y_{\mathbf{i}-\mathbf{a}+\mathbf{r}_4} &= \frac{t_1}{t} \frac{\tilde{\epsilon}_2^2 - t_1^2}{\tilde{\epsilon}_2^2 + t_1^2} \left[\frac{\tilde{\epsilon}_2^2}{t_1^2} e^{-i\frac{5\eta}{12}} - e^{i\frac{7\eta}{12}} \right] s, \\
y_{\mathbf{i}-\mathbf{a}+\mathbf{r}_5} &= -\frac{\tilde{\epsilon}_2}{t_1} e^{-i\frac{\eta}{3}} s, \\
y_{\mathbf{i}-\mathbf{a}+\mathbf{r}_6} &= s, \\
y_{\mathbf{i}} &= \text{sign}(t_c) \frac{t_1}{t} \frac{\tilde{\epsilon}_2^2 - t_1^2}{\tilde{\epsilon}_2^2 + t_1^2} \left[e^{i\frac{7\eta}{12}} - \frac{\tilde{\epsilon}_2^2}{t_1^2} e^{-i\frac{5\eta}{12}} \right] s, \\
y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_2} &= \text{sign}(t_c) \frac{\tilde{\epsilon}_2}{t_1} e^{-i\frac{\eta}{3}} s, \\
y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_3} &= -\text{sign}(t_c) s, \\
y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_4} &= 0, \\
y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_5} &= \text{sign}(t_c) e^{i\frac{\eta}{6}} s, \\
y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_6} &= \text{sign}(t_c) \frac{\tilde{\epsilon}_2}{t_1} \frac{\tilde{\epsilon}_2^2 - t_1^2}{\tilde{\epsilon}_2^2 + t_1^2} \left[e^{-i\frac{\eta}{2}} - \frac{2t_1^2}{\tilde{\epsilon}_2^2 - t_1^2} e^{i\frac{\eta}{2}} \right] s, \\
y_{\mathbf{i}+\mathbf{a}} &= 0
\end{aligned} \tag{65}$$

kifejezések prezentálják, melyekben az $s \neq 0$ paraméter a normálási feltétel által megszabott értéket veszi fel. A (65) eredmények tanúsága szerint érdemes volt összekapcsolni az $(\mathbf{i}-\mathbf{a})$ és $\mathbf{i}$ cellák egyenleteit, hiszen $y_{\mathbf{i}-\mathbf{a}}$, $y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_4}$ és $y_{\mathbf{i}+\mathbf{a}}$ zéróvá válik, a fennmaradó tíz koefficiens pedig nullától különböző értéket vesz fel úgy, hogy $y_{\mathbf{i}-\mathbf{a}+\mathbf{r}_j} \neq y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_j}$, $j = 1, 2, \dots, 6$. Ez pedig azt jelenti, hogy az $(\mathbf{i}-\mathbf{a})$ és $\mathbf{i}$ cellák együtthatói nem egyeznek meg. Tehát ezúttal nem olyan megoldás jön létre, amely a (62) eredményhez hasonlóan egyetlen homogén $\hat{B}_{1,\sigma}^\dagger$ operátort produkál, hanem megszületik egy tíz csomópontból álló, két szomszédos cellát egyesítő blokk, melyet (65) értelmében a

$$\begin{aligned}
\hat{V}_{\mathbf{i},\sigma}^\dagger &= y_{\mathbf{i}-\mathbf{a}+\mathbf{r}_2} \hat{c}_{\mathbf{i}-\mathbf{a}+\mathbf{r}_2,\sigma}^\dagger + y_{\mathbf{i}-\mathbf{a}+\mathbf{r}_3} \hat{c}_{\mathbf{i}-\mathbf{a}+\mathbf{r}_3,\sigma}^\dagger + y_{\mathbf{i}-\mathbf{a}+\mathbf{r}_4} \hat{c}_{\mathbf{i}-\mathbf{a}+\mathbf{r}_4,\sigma}^\dagger \\
&+ y_{\mathbf{i}-\mathbf{a}+\mathbf{r}_5} \hat{c}_{\mathbf{i}-\mathbf{a}+\mathbf{r}_5,\sigma}^\dagger + y_{\mathbf{i}-\mathbf{a}+\mathbf{r}_6} \hat{c}_{\mathbf{i}-\mathbf{a}+\mathbf{r}_6,\sigma}^\dagger + y_{\mathbf{i}} \hat{c}_{\mathbf{i},\sigma}^\dagger + y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_2} \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_2,\sigma}^\dagger \\
&+ y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_3} \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_3,\sigma}^\dagger + y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_5} \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_5,\sigma}^\dagger + y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_6} \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_6,\sigma}^\dagger
\end{aligned} \tag{66}$$

operátor definiál. Noha a (65-66) $\hat{V}_{\mathbf{i},\sigma}^\dagger$ által bevezetett blokk két cella járulékait tartalmazza, a könnyedebb átláthatóság kedvéért $\hat{V}_{\mathbf{i},\sigma}^\dagger$ alsó indexében csak az egyik cellaindexet, az $\mathbf{i}$ -t tüntettem fel, amivel $\hat{V}_{\mathbf{i},\sigma}^\dagger$ -t az $(\mathbf{i}-\mathbf{a}, \mathbf{i})$ cellapár helyett formálisan az $\mathbf{i}$ cellához rendeltem hozzá azzal a kitétellel, hogy az $(\mathbf{i}-\mathbf{a})$ cellába is átnyúlnak bizonyos járulécai. Ezáltal a $\dots, \hat{V}_{\mathbf{i}-2\mathbf{a},\sigma}^\dagger, \hat{V}_{\mathbf{i}-\mathbf{a},\sigma}^\dagger, \hat{V}_{\mathbf{i},\sigma}^\dagger, \hat{V}_{\mathbf{i}+\mathbf{a},\sigma}^\dagger, \hat{V}_{\mathbf{i}+2\mathbf{a},\sigma}^\dagger, \dots$ operátorok – jelölésüket tekintve – az adott cellához egyértelműen hozzárendelt, effektíve kétcellás objektumként kezelhetők. A (65-66) $\hat{V}_{\mathbf{i},\sigma}^\dagger$ operátor grafikus megjelenítését a 9. ábra felső rajza mutatja be a releváns koefficiensek feltüntetésével. Értelemszerűen a $\hat{V}_{\mathbf{i},\sigma}^\dagger$ által keltett

elektron a megjelölt tíz csomópont bármelyikén megjelenhet, így – a $B = 0$ eset 7. ábrán vázolt eredményéhez viszonyítva – az a szektor, ahol egy elektron potenciálisan előfordulhat, külső mágneses tér jelenlétében kiszélesedik egy kétcellás tartományra. A 9. ábra alsó rajza a szomszédos $\mathbf{i} - \mathbf{a}, \mathbf{i}, \mathbf{i} + \mathbf{a}$ cellákhoz tartozó $\hat{V}_{\mathbf{i}-\mathbf{a},\sigma}^\dagger, \hat{V}_{\mathbf{i},\sigma}^\dagger, \hat{V}_{\mathbf{i}+\mathbf{a},\sigma}^\dagger$ operátorokat példázza, ahol megfigyelhető, hogy bármely két szomszédos operátor a vonalkázott területen lévő négy csomóponton érintkezik egymással.



9. ábra : A (66) $\hat{V}_{\mathbf{i},\sigma}^\dagger$ operátorok blokszerkezetének grafikus megjelenítése $B \neq 0$ esetén.

Ezen a ponton a (20.a) feltétel tanulmányozása lezárult, és a fentebb részletezett eredmények alapján összegyűjthetők azok a lényegi információk, melyek a vizsgálat ezen szakaszában kulcsfontosságúak. Ezek szerint megállapítható, hogy az (57) próbafüggvénybe beiktatott (58) $\hat{B}_{1,\sigma}^\dagger$ operátor felbontható a kapott $\hat{V}_{\mathbf{i},\sigma}^\dagger$ operátorok által kijelölt kétcellás doménekre, ezért a továbbiakban $\hat{B}_{1,\sigma}^\dagger$ szerepét a (65-66) $\hat{V}_{\mathbf{i},\sigma}^\dagger$ operátorok veszik át, és a rendszerben lévő elektronok számát természetesen most is az értelmezett $\hat{V}_{\mathbf{i},\sigma}^\dagger$ operátorok száma adja meg. Mivel a lánc minden cellájához egyértelműen hozzárendelhető egy $\hat{V}_{\mathbf{i},\sigma}^\dagger$ operátor, maximálisan N_c darab elektron létezhet a rendszerben, így a kapott (65-66) $\hat{V}_{\mathbf{i},\sigma}^\dagger$ operátorok alkalmazásával tényleges lehetőség nyílik egy valódi sokrészcsekés állapot leírására.

Ezt követően természetesen meg kell még vizsgálni azt is, hogy a (20.b) feltétel milyen extra információkat hordoz a (65-66) $\hat{V}_{\mathbf{i},\sigma}^\dagger$ operátorok további tulajdonságaira vonatkozóan. Ahogyan a 9. ábra is szemlélteti, bármely két szomszédos cellában jelenlévő $\hat{V}_{\mathbf{i},\sigma}^\dagger$ négy csomóponton megosztozik, ami azt idézi elő, hogy a négy közös érintkezési pont potenciálisan alkalmassá válik

dupla betöltések kialakulására. Ez a körülmény már sejteti azt, hogy a dupla betöltésekre érzékeny Hubbard-tag szomszédos $\hat{V}_{\mathbf{i},\sigma}^\dagger$ operátorokra vett hatása egyáltalán nem triviális módon teljesíti (20.b)-t. Ahhoz, hogy ezt világosan kifejtsem, az $\mathbf{i}$ és $\mathbf{i} + \mathbf{a}$ cellákban legyenek értelmezve a $\hat{V}_{\mathbf{i},\sigma_1}^\dagger$, illetve a $\hat{V}_{\mathbf{i}+\mathbf{a},\sigma_2}^\dagger$ operátorok úgy, hogy $\mathbf{i}$, illetve a σ_1, σ_2 spinindexek tetszőlegesek. Ekkor a (20.b) feltételt a

$$\hat{H}_U \hat{V}_{\mathbf{i},\sigma_1}^\dagger \hat{V}_{\mathbf{i}+\mathbf{a},\sigma_2}^\dagger |0\rangle = 0 \quad (67)$$

egyenlőség valósítja meg. A kijelölt $\hat{V}_{\mathbf{i},\sigma_1}^\dagger \hat{V}_{\mathbf{i}+\mathbf{a},\sigma_2}^\dagger$ operátorszorzatot elvégezve, majd hatva $\hat{H}_U$ tagjaival, (67)-ből a

$$\begin{aligned} 0 = & U [y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_2}^2 \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_2,\sigma_1}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_2,\sigma_2}^\dagger + y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_3}^2 \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_3,\sigma_1}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_3,\sigma_2}^\dagger \\ & + y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_5}^2 \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_5,\sigma_1}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_5,\sigma_2}^\dagger + y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_6}^2 \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_6,\sigma_1}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_6,\sigma_2}^\dagger] |0\rangle \end{aligned} \quad (68)$$

egyenlet származtatható, mely alapvető fontosságú információt rejt magában. Pillanatok alatt felismerhető, hogy (68) kizárólag abban a speciális esetben adhat igaz egyenlőséget, amikor $\sigma_1 = \sigma_2$ fennáll. Ekkor ugyanis, bevezetve a $\sigma = \sigma_1 = \sigma_2$ jelölést, a rendszer fermionikus jellegének következtében $\hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_j,\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_j,\sigma}^\dagger |0\rangle$, $j = 2, 3, 5, 6$, automatikusan nullává válik. Ez pedig gyakorlatilag azt jelenti, hogy $\hat{V}_{\mathbf{i},\sigma_1}^\dagger$ és $\hat{V}_{\mathbf{i}+\mathbf{a},\sigma_2}^\dagger$ spinindexe ugyanazon σ értékre rögzül, azaz a $\hat{V}_{\mathbf{i},\sigma_1}^\dagger$ és $\hat{V}_{\mathbf{i}+\mathbf{a},\sigma_2}^\dagger$ által keltett elektronok ugyanolyan spinvetülettel kerülnek be a rendszerbe. A fentiek alapján tisztán érthető, hogy (20.b) milyen szerepet játszik a rendszer fizikai arculatának kialakulásában. (20.b) hatása ugyanis abban nyilvánul meg, hogy egymással kontaktusban lévő (közös csomópontokat birtokló) $\hat{V}_{\mathbf{i},\sigma}^\dagger$ operátorok, illetve az általuk keltett elektronok spinindexei korrelálttá válnak azáltal, hogy azonos értéket kényszerülnek felvenni. Ezzel a rendszer lényegében letiltja azt a lehetőséget, hogy két elektron egyazon csomóponton tartózkodjon, így a dupla betöltések eliminációjával energiája minimálisra csökkenhet. Szeretném nyomatékosítani, hogy a spinindexek közötti korreláció létrejöttének alapfeltétele az operátorok érintkezése. Amennyiben azonban a két $\hat{V}_{\mathbf{i},\sigma}^\dagger$ operátor nem rendelkezik közös csomópontokkal, azaz szeparált módon, egymástól távolabb helyezkednek el, akkor a (67) által realizált (20.b) feltétel automatikusan teljesül anélkül, hogy bármiféle korrelációt indukálna a spinindexek között.

Eddig a (20.b) feltétel végrehajtását az egyszerűbb átláthatóság kedvéért csupán két $\hat{V}_{\mathbf{i},\sigma}^\dagger$ operátor viszonylatában mutattam be, de az eredmények tükrében már egyszerűen nyomon követhető kettőnél több $\hat{V}_{\mathbf{i},\sigma}^\dagger$ jelenléte is. Amennyiben a $\hat{V}_{\mathbf{i},\sigma}^\dagger$ operátorok száma nagyobb mint kettő, de sokkal kisebb mint a rendszer celláinak a száma, akkor könnyen előállhat olyan eset, hogy az operátorok teljesen elkülönülnek egymástól, így közös csomópontok híján spinindexeik tetszőlegesek maradnak, mivel nem jön létre köztük korrelációs

effektus. Ha azonban elkezdjük fokozatosan növelni a $\hat{V}_{i,\sigma}^\dagger$ operátorok számát, akkor egyre nagyobb annak a valószínűsége, hogy az operátorok érintkeznek egymással, ami a fentebbiek értelmében aktivizálja a spinindexek közötti korrelációt. Ennek az a következménye, hogy az egymással láncszerűen érintkező operátorok mindegyikének ugyanazon σ értékre rögzül a spinindexe, így tulajdonképpen létrejönnek olyan klaszterek, amelyeken belül minden spin azonos irányba mutat, de az egyes klaszterek között nincs spinkorreláció. Azon határesetben pedig, amikor a $\hat{V}_{i,\sigma}^\dagger$ operátorok száma maximális, azaz a rendszer minden cellájában jelen van egy operátor, akkor egyetlen kiterjedt klaszter alakul ki a láncban, melynek minden spinje azonos irányú.

A (20.a-b) feltételek fentebb kifejtett analízisének eredményeképpen eljuttattam a rendszer alapállapot hullámfüggvényéhez, melyet

$$\begin{aligned} |\psi_g(N < N_c)\rangle_B &= \sum_{\alpha_N} \omega_{\alpha_N} \prod_{i \in \alpha_N} \hat{V}_{i,\sigma_i}^\dagger |0\rangle, \\ |\psi_g(N = N_c)\rangle_B &= \prod_i \hat{V}_{i,\sigma}^\dagger |0\rangle \end{aligned} \quad (69)$$

szerint az $N < N_c$, illetve az $N = N_c$ tartományokon különbözőképpen írtam fel. A (69) formulák $\hat{V}_{i,\sigma_i}^\dagger$, $\hat{V}_{i,\sigma}^\dagger$ operátorait egyaránt (65-66) definiálja, $|\psi_g\rangle_B$ alsó indexe pedig a $B \neq 0$ külső mágneses tér jelenlétét jelzi. $N < N_c$ esetén α_N olyan doméneket jelöl a rendszerben, melyek N darab $\hat{V}_{i,\sigma_i}^\dagger$ operátort tartalmaznak úgy, hogy α_N nem feltétlenül alkot összefüggő tartományt, létrejöhet diszjunkt domének uniójaként is (azaz a $\hat{V}_{i,\sigma_i}^\dagger$ operátorok több különálló klasztert is képezhetnek), és az összegzés az összes lehetséges α_N domén szerint történik. A lineáris kombináció ω_{α_N} prefaktorait a normálási feltétel határozza meg, a $\hat{V}_{i,\sigma_i}^\dagger$ operátorok közül pedig csak azoknak a spinindexe rögzül ugyanazon $\sigma_i = \sigma$ értékre, melyek közös csomópontokon érintkeznek egymással. $N = N_c$ esetében viszont a $\hat{V}_{i,\sigma}^\dagger$ operátorok σ indexe rögzített, hiszen ekkor az operátorok láncszerű egymásbakapcsolódása révén egyetlen kiterjedt klaszter alakul ki. Mindezek alapján a (69) alapállapot fizikai jellemzőit illetően a következő tulajdonságokat állapítottam meg: **I.)**

Az alapállapot lokalizált, de a lokalizációs hossz megnövekszik a mágneses tér hiányában létrejövő lokalizációs hosszhoz képest. Láttuk ugyanis, hogy a $\hat{V}_{i,\sigma}^\dagger$ operátorok hatása két szomszédos cellára terjed ki, ami meghaladja a $B = 0$ esetben kapott, csupán egy cellára korlátozódó lokalizációs hosszat. **II.) Az $N < N_c$ tartományon az alapállapot globálisan paramágneses, az $N = N_c$ határesetben viszont telített ferromágnes ad.** Ez az állítás a fentebbi eredmények alapján világos, hiszen $N < N_c$ esetén a klaszterek σ_i spinindexei nem korreláltak, az $N = N_c$ esetben azonban minden elektron azonos σ spinirányítással kerül be a rendszerbe. Összefoglalva a nyert információkat, a polifenilén típusú lánc alapállapota külső mágneses tér jelenlétében lokalizált, és a rendszer az

$N < N_c$ intervallumon paramágnesként, míg az $N = N_c$ határesetben telített ferromágnesként viselkedik. A kapott ferromágnesesség rendkívül különleges, hiszen egy olyan szerves rendszer produkálja, amely egyáltalán nem tartalmaz mágneses alkotóelemeket.

A (69) alapállapot hullámfüggvényéhez, az (55)-ben foglalt K_2 felhasználásával, (16) értelmében az

$$\begin{aligned}
 E_g(N; \epsilon_1, \epsilon_2, t, t_1, t_c) = & \frac{1}{3} \left\{ \epsilon_1 + 2\epsilon_2 - |t_c| \right. \\
 & + \left\{ (\epsilon_1 - \epsilon_2 - |t_c|) [(\epsilon_1 - \epsilon_2 - |t_c|)^2 + 9(t^2 - t_1^2)] \right. \\
 & + \left\{ (\epsilon_1 - \epsilon_2 - |t_c|)^2 [(\epsilon_1 - \epsilon_2 - |t_c|)^2 + 9(t^2 - t_1^2)]^2 \right. \\
 & \left. \left. - [(\epsilon_1 - \epsilon_2 - |t_c|)^2 + 3(2t^2 + t_1^2)]^3 \right\}^{\frac{1}{2}} \right\}^{\frac{1}{3}} \\
 & + \left\{ (\epsilon_1 - \epsilon_2 - |t_c|) [(\epsilon_1 - \epsilon_2 - |t_c|)^2 + 9(t^2 - t_1^2)] \right. \\
 & - \left\{ (\epsilon_1 - \epsilon_2 - |t_c|)^2 [(\epsilon_1 - \epsilon_2 - |t_c|)^2 + 9(t^2 - t_1^2)]^2 \right. \\
 & \left. \left. - [(\epsilon_1 - \epsilon_2 - |t_c|)^2 + 3(2t^2 + t_1^2)]^3 \right\}^{\frac{1}{2}} \right\}^{\frac{1}{3}} \left. \right\} N \quad (70)
 \end{aligned}$$

alapállapot energiája rendelhető hozzá, és a (69-70) alapállapot, (56) megismétlésével, az

$$\begin{aligned}
 (\epsilon_2 - K_2)^2 - t_1^2 &> 0, \quad \epsilon_1 - K_2 - \frac{2t^2(\epsilon_2 - K_2)}{(\epsilon_2 - K_2)^2 - t_1^2} > 0, \\
 \frac{2t_1^2(\epsilon_2 - K_2)}{(\epsilon_2 - K_2)^2 + t_1^2} &> 1 \quad (71)
 \end{aligned}$$

feltételek által kiszabott fázistértartományon érhető el.

Még egyszer kiemelem, hogy az 5.3. alfejezetben részletezett eredményeim csakis akkor lehetnek helytállóak, ha a mágneses tér indukciója (54) szerint kvantált.

5.4. A rendszer nemkölsönható sávszerkezete

Az 5.2-3. alfejezetekben meghatározott alapállapotok mélyebb analízise céljából tanulmányoztam a rendszer nemkölsönható sávszerkezetét is, amely az $\mathbf{r}$ -térben felírt (25) Hamilton-operátor

$$\hat{H}_0 = \sum_{\sigma} \sum_{i=1}^{N_c} \left[\epsilon_1 (\hat{n}_{\mathbf{i},\sigma} + \hat{n}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_4,\sigma}) + \epsilon_2 (\hat{n}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_2,\sigma} + \hat{n}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_3,\sigma} + \hat{n}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_5,\sigma} + \hat{n}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_6,\sigma}) \right]$$

$$\begin{aligned}
& + \sum_{\sigma} \sum_{\mathbf{i}=1}^{N_c} \left[t e^{i\frac{\eta}{12}} (\hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_2,\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{\mathbf{i},\sigma} + \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_4,\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_3,\sigma} + \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_5,\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_4,\sigma} + \hat{c}_{\mathbf{i},\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_6,\sigma}) \right. \\
& + \left. t_1 e^{i\frac{\eta}{3}} (\hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_3,\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_2,\sigma} + \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_6,\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_5,\sigma}) + t_c \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{a},\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_4,\sigma} + H.c. \right] \quad (72)
\end{aligned}$$

kinetikus járulékanak $\mathbf{k}$ -térbe való transzformációjával térképezhető fel. Ezt az átalakítást az elemi fermionikus eltüntető és keltő operátorok

$$\begin{aligned}
\hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_j+\mathbf{R},\sigma} &= \frac{1}{\sqrt{N_c}} \sum_{\mathbf{k}=1}^{N_c} \hat{c}_{j,\mathbf{k},\sigma} e^{-i\mathbf{k}(\mathbf{i}+\mathbf{r}_j+\mathbf{R})}, \\
\hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_j+\mathbf{R},\sigma}^{\dagger} &= \frac{1}{\sqrt{N_c}} \sum_{\mathbf{k}=1}^{N_c} \hat{c}_{j,\mathbf{k},\sigma}^{\dagger} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{i}+\mathbf{r}_j+\mathbf{R})} \quad (73)
\end{aligned}$$

alakú Fourier-transzformált kifejezéseinek segítségével hajtottam végre. A (73) formulákban $\hat{c}_{j,\mathbf{k},\sigma}$ és $\hat{c}_{j,\mathbf{k},\sigma}^{\dagger}$ a $(\mathbf{k}, \sigma)$ értékpárral jellemzett kvantumállapot eltüntető és keltő operátorát reprezentálja a lánc j , $j = 1, 2, \dots, 6$, alrácában, az $\mathbf{R}$ változó pedig a $\mathbf{0}$ vagy az $\mathbf{a}$ értéket veszi fel. A (73) Fourier-transzformált kifejezések alkalmazásával (72) a

$$\begin{aligned}
\hat{H}_0 &= \sum_{\sigma} \sum_{\mathbf{k}} \left[\epsilon_1 (\hat{n}_{1,\mathbf{k},\sigma} + \hat{n}_{4,\mathbf{k},\sigma}) + \epsilon_2 (\hat{n}_{2,\mathbf{k},\sigma} + \hat{n}_{3,\mathbf{k},\sigma} + \hat{n}_{5,\mathbf{k},\sigma} + \hat{n}_{6,\mathbf{k},\sigma}) \right] \\
&+ \sum_{\sigma} \sum_{\mathbf{k}} \left[t_1 e^{i\frac{\eta}{3}} (\hat{c}_{3,\mathbf{k},\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{2,\mathbf{k},\sigma} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{r}_3-\mathbf{r}_2)} + \hat{c}_{6,\mathbf{k},\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{5,\mathbf{k},\sigma} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{r}_6-\mathbf{r}_5)}) \right. \\
&+ t e^{i\frac{\eta}{12}} (\hat{c}_{1,\mathbf{k},\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{6,\mathbf{k},\sigma} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}_6} + \hat{c}_{2,\mathbf{k},\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{1,\mathbf{k},\sigma} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}_2} + \hat{c}_{4,\mathbf{k},\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{3,\mathbf{k},\sigma} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{r}_4-\mathbf{r}_3)} \\
&+ \left. \hat{c}_{5,\mathbf{k},\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{4,\mathbf{k},\sigma} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{r}_5-\mathbf{r}_4)}) + t_c \hat{c}_{1,\mathbf{k},\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{4,\mathbf{k},\sigma} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{a}-\mathbf{r}_4)} + H.c. \right] \quad (74)
\end{aligned}$$

alakra írható át, melyben

$$\begin{aligned}
\mathbf{k}\mathbf{r}_2 &= \mathbf{k}\mathbf{r}_6 = \mathbf{k}(\mathbf{r}_4 - \mathbf{r}_3) = \mathbf{k}(\mathbf{r}_4 - \mathbf{r}_5) = \frac{kb}{2}, \\
\mathbf{k}(\mathbf{r}_3 - \mathbf{r}_2) &= \mathbf{k}(\mathbf{r}_5 - \mathbf{r}_6) = kb, \\
\mathbf{k}(\mathbf{a} - \mathbf{r}_4) &= kb'. \quad (75)
\end{aligned}$$

A (75) kifejezések számítása során nem szabad megfeledkezni arról, hogy a $\mathbf{k}$ vektor iránya megegyezik az $\mathbf{a}$ Bravais-vektor irányával, és a kapott eredmények, a 3. ábra jelöléseinek megfelelően, az $|\mathbf{a}| = 2b + b'$ összefüggés, illetve $k = |\mathbf{k}|$ figyelembevételével adódnak.

A (74)-ben megadott $\hat{H}_0$

$$\hat{H}_0 = \sum_{\sigma} \sum_{\mathbf{k}} \mathbf{C}_{\mathbf{k},\sigma}^{\dagger} \tilde{\mathbf{M}}_{\mathbf{k}} \mathbf{C}_{\mathbf{k},\sigma} \quad (76)$$

szerint tömöríthető, ahol a

$$\hat{\mathbf{C}}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger = (\hat{c}_{1,\mathbf{k},\sigma}^\dagger, \hat{c}_{2,\mathbf{k},\sigma}^\dagger, \dots, \hat{c}_{6,\mathbf{k},\sigma}^\dagger), \quad \hat{\mathbf{C}}_{\mathbf{k},\sigma} = \begin{pmatrix} \hat{c}_{1,\mathbf{k},\sigma} \\ \hat{c}_{2,\mathbf{k},\sigma} \\ \vdots \\ \hat{c}_{6,\mathbf{k},\sigma} \end{pmatrix} \quad (77)$$

mátrixok a $\mathbf{k}$ -térben értelmezett keltő és eltüntető operátorokat tartalmazzák, a hermitikus $\tilde{\mathbf{M}}_{\mathbf{k}}$ mátrixot pedig

$$\tilde{\mathbf{M}}_{\mathbf{k}} = \begin{pmatrix} \epsilon_1 & te^{-i(\frac{\eta}{12} + \frac{kb}{2})} & 0 & t_c e^{ikb'} & 0 & te^{i(\frac{\eta}{12} - \frac{kb}{2})} \\ te^{i(\frac{\eta}{12} + \frac{kb}{2})} & \epsilon_2 & t_1 e^{-i(\frac{\eta}{3} + kb)} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & t_1 e^{i(\frac{\eta}{3} + kb)} & \epsilon_2 & te^{-i(\frac{\eta}{12} + \frac{kb}{2})} & 0 & 0 \\ t_c e^{-ikb'} & 0 & te^{i(\frac{\eta}{12} + \frac{kb}{2})} & \epsilon_1 & te^{-i(\frac{\eta}{12} - \frac{kb}{2})} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & te^{i(\frac{\eta}{12} - \frac{kb}{2})} & \epsilon_2 & t_1 e^{-i(\frac{\eta}{3} - kb)} \\ te^{-i(\frac{\eta}{12} - \frac{kb}{2})} & 0 & 0 & 0 & t_1 e^{i(\frac{\eta}{3} - kb)} & \epsilon_2 \end{pmatrix} \quad (78)$$

determinálja. A rendszer nemkölsönható sávszerkezetét a (78) $\tilde{\mathbf{M}}_{\mathbf{k}}$ mátrix

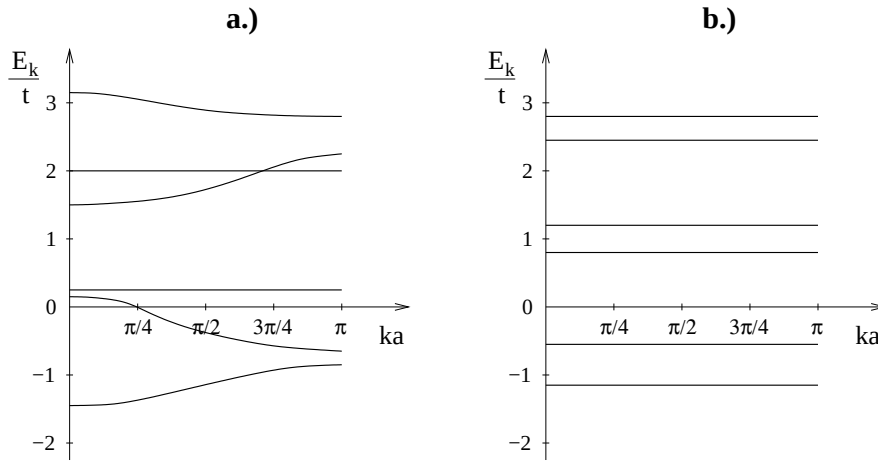
$$\det(\tilde{\mathbf{M}}_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}} \tilde{\mathbf{1}}) = 0 \quad (79)$$

alakú szekuláris egyenletének $E_{\mathbf{k}}$ megoldásai rajzolják ki $\mathbf{k}$ függvényében ($\tilde{\mathbf{1}}$ a (6×6) -os egység mátrixot jelöli). A (79) sajátérték-egyenlet ez esetben a

$$\begin{aligned} 0 &= 4t^2 [t_1^2 - (\epsilon_2 - E_{\mathbf{k}})^2] [t_1 t_c \cos(\mathbf{ka}) \cos(\frac{\eta}{2}) + (\epsilon_1 - E_{\mathbf{k}})(\epsilon_2 - E_{\mathbf{k}})] \\ &- [t_c^2 - (\epsilon_1 - E_{\mathbf{k}})^2] [(\epsilon_2 - E_{\mathbf{k}})^2 - t_1^2]^2 + 4t^4 (\epsilon_2 - E_{\mathbf{k}})^2 \\ &- 2t^4 t_1^2 [1 + \cos(\eta)] \end{aligned} \quad (80)$$

alakot ölti, amely $E_{\mathbf{k}}$ -ra nézve egy hatodfokú algebrai egyenlet, így az $\epsilon_1, \epsilon_2, t, t_1, t_c, \eta$ paraméterek rögzített értékei mellett hat $E_{\mathbf{k},n}$, $n = 1, 2, \dots, 6$, megoldás létezik. A 10. ábrán példaként bemutatom a $t_1/t = 0.9$, $t_c/t = 0.7$, $\epsilon_1/t = 0.5$, $\epsilon_2/t = 1.1$ értékszett esetében adódó $E_{\mathbf{k},n}$ megoldásokat $\mathbf{ka}$ függvényében, ahol minden energia dimenziójú mennyiségnek t a mértéke. Mivel $E_{\mathbf{k},n}$ a (80)-ban szereplő, $\cos(\mathbf{ka})$ -t tartalmazó tag következtében a $\mathbf{ka}$ változónak páros függvénye, a diszperziórelációkat elegendő a $\mathbf{ka} \in [0, \pi]$ tartományon megrajzolni. Az ábra a.) része a külső mágneses tér nélküli, $B = 0$ esetet szemlélteti, amikor is (26)-tal összhangban $\eta = 0$, a b.) rajzon pedig a $B \neq 0$ szituáció eredményei láthatók abban az esetben, amikor $\eta = \pi$. Megjegyzem, hogy a nemkölsönható sávszerkezet $B = 0$ esetén, a Hamilton-operátor paramétereinek megválasztásától függetlenül, mindig két lapos (azaz a $\mathbf{ka}$ tengellyel párhuzamos) sávot tartalmaz (egy konkrét példát mutat a 10.a ábra), melyek a $t_1^2 - (\epsilon_2 - E_{\mathbf{k}})^2 = 0$ reláció nyomán jönnek létre. Ekkor ugyanis (80) jobb oldala automatikusan nullát ad, és jól látszik, hogy a $t_1^2 - (\epsilon_2 - E_{\mathbf{k}})^2 = 0$ egyenlőségből kifejezett két $E_{\mathbf{k}}$ érték nem

függ $\mathbf{k}$ -tól. Ezért válik $\mathbf{ka}$ függvényében konstanssá (lapossá) a két említett sáv. Ezzel szemben ha $B \neq 0$, akkor a nemkölcsonható sávszerkezet összes sávja lapos a Hamilton-operátor paramétereinek bármely értéke esetén (egy konkrét példát mutat a 10.b ábra), de érdekes módon ez a karakterisztika csakis olyan speciális körülmények között teljesül, amikor $\eta = (2\ell + 1)\pi$, ahol ℓ tetszőleges egész szám. Így (26) értelmében a 10.b ábrán példázott sávszerkezettípus kizárólag a $B = \frac{\Phi_0}{3\sqrt{3}b^2}(2\ell + 1)$ szerint kvantált mágneses térben állhat elő, ami tökéletesen összhangban van az (53-54)-ben kapott feltétellel.



10. ábra : A rendszer nemkölcsonható sávszerkezete a.) $B = 0$ ($\eta = 0$), illetve b.) $B \neq 0$ ($\eta = \pi$) esetén. A Hamilton-operátor paramétereit mindkét esetben a $t_1/t = 0.9$, $t_c/t = 0.7$, $\epsilon_1/t = 0.5$, $\epsilon_2/t = 1.1$ értékek rögzítik.

A nemkölcsonható sávszerkezetet illető fentebbi eredmények alapján megállapítható tehát, hogy jól meghatározott, diszkrét értékű indukcióval jellemzett mágneses tér hatására a sávszerkezet összes sávja lapossá válik az $\epsilon_1, \epsilon_2, t, t_1, t_c$ paraméterek tetszőleges tartományán. Szeretném kiemelni, hogy a (69) $|\psi_g(N = N_c)\rangle_B$ ferromágneses alapállapot olyan elektronok által valósul meg, melyek a nemkölcsonható sávszerkezet legalsó lapos sávját félig töltik fel. Ennek felismeréséhez a következőket kell meggondolnunk: Ismeretes, hogy az első Brillouin-zónát alkotó $\mathbf{k}$ -állapotok száma megegyezik a rendszer $\mathbf{r}$ -térben lévő rácscsomópontjainak a számával. A polifenilén esetében éppen N_c darab $\mathbf{i}$ rácscsomópontból épül fel a lánc, így az első Brillouin-zónában N_c darab $\mathbf{k}$ -állapot található, amely – figyelembe véve az elektronok spinvetületének két lehetséges értékét – maximálisan $2N_c$ számú elektronnal tölthető be. Mivel azonban a (69) alapállapot hullámfüggvény $N = N_c$ számú elektron esetén adhat telített ferromágnes, az elektronok a maximálisan rendelkezésre álló $2N_c$ számú állapotnak éppen a felét foglalják

el. Ennélfogva félig töltött alsó sáv alakul ki, amely alacsony részecskeszám-koncentrációt határoz meg. Ha pedig a sáv szerkezet legalsó sávja lapos és félig töltött, akkor Mielke–Tasaki-féle lapossáv-ferromágnesességről beszélünk [245]. Ez fizikailag azt az információt hordozza, hogy a (69)-ben foglalt $|\psi_g(N = N_c)\rangle_B$ ferromágneses alapállapot Mielke–Tasaki-értelemben vett lapossáv-ferromágnesesség formájában valósul meg. Azonban a lapossáv-ferromágnesesség azon típusa, amely csak kvantált mágneses térben jöhet létre, meglehetősen ritka jelenségnek számít, de létezik a szakirodalomban olyan tanulmány, amely szerint gyémánt szerkezetű láncok esetében is hasonló viselkedés figyelhető meg [72].

Az 5.2-3. alfejezetekben láttuk, hogy a rendszerben legfeljebb N_c számú elektron lehet jelen, hiszen N minden esetben az $N \leq N_c$ intervallumon mozgott függetlenül attól, hogy be volt-e kapcsolva a külső mágneses tér. A nemkölsönható sáv szerkezet megrajzolása és elemzése folytán pedig az is egyértelművé válik, hogy $N \leq N_c$ kis koncentrációs tartományt értelmez, így a kapott (44,47), illetve (69-70) alapállapotok mindegyike alacsony részecskeszám-koncentrációs intervallumon érvényes.

Az 5. fejezet eredményeinek rövid összefoglalása

Az 5. fejezetben a PSZO módszer segítségével meghatároztam az N_c számú cellából felépülő kvázi-egydimenziós *polifenilén* struktúrák egzakt alapállapotait. Periodikus határfeltételek alkalmazása mellett arra az eredményre jutottam, hogy külső mágneses tér hiányában az alapállapot a teljes $N \leq N_c$ elektronszám-tartományon paramágneses és lokalizált. A lánc síkjára merőleges mágneses tér hatása alatt azonban az $N < N_c$ intervallumban az elektronok lokalizációs hossza megnövekszik a mágneses tér hiányában létrejövő lokalizációs hosszhoz képest. Ez végső soron ahhoz vezet, hogy az $N = N_c$ határesetben a rendszer telített ferromágnesként viselkedik. Ezek alapján azt a következtetést vontam le, hogy a külső mágneses tér ki-/bekapcsolásával változtatható az elektronok lokalizációs hossza, és $N = N_c$ esetén a rendszer paramágneses alapállapotából átbillenthető egy ferromágneses alapállapotba. Ez a viselkedés rendkívül különleges, hiszen a jelzett ferromágnesesség egy olyan szerves rendszerben idézhető elő, melynek atomjai nem rendelkeznek eredő mágneses momentummal. A nemkölsönható sáv szerkezetet érintő vizsgálataim szerint a létrejövő paramágneses és ferromágneses alapállapotok a kis koncentrációs részecskeszám-tartományon érvényesek. Elemzéseim során arra is rámutattam, hogy mágneses térben a sáv szerkezet összes sávja lapossá válik, ez az effektus azonban kizárólag kvantált indukciójú mágneses tér esetén jön létre. Az $N = N_c$ számú elektron pedig éppen félig tölti fel a sáv szerkezet legalsó lapos sávját, ami azt

jelenti, hogy a kapott ferromágnesesség ún. Mielke–Tasaki-féle lapossáv-ferromágnesesség formájában valósul meg. A fentebbiekkel összhangban azonban a Mielke–Tasaki-féle lapossáv-ferromágnesesség ez esetben csak kvantált mágneses térben alakulhat ki, ami meglehetősen ritka jelenségnek számít. Az 5. fejezetben bemutatott eredményeimet a [246] publikáció tartalmazza.

6. fejezet

A fázistér kiterjesztése és vizsgálata polifenilén típusú láncok esetében

A polifenilén fajtájú láncok alapállapotának feltárása után azt tanulmányoztam, hogy hogyan lehetne kiterjeszteni a paraméterter azon tartományát, ahol adott típusú alapállapotú megoldások létezhetnek. Ez a fázistérbeli elemzés nemcsak a fizikai ismereteink bővülését szolgálhatja, hanem matematikai szempontból is mindenképpen hasznos és izgalmas kihívás, hiszen elősegítheti a számítások technikai fejlesztését is.

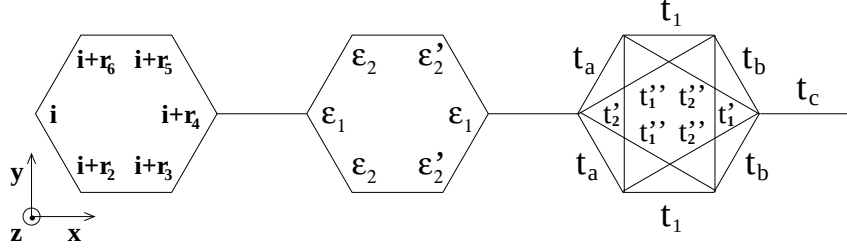
6.1. A rendszer Hamilton-operátora

Kiindulásként kibővítettem a (25) Hamilton-operátor paramétereinek a halmazát oly módon, hogy megnöveltem az értelmezett egyrészecske-potenciálok és hoppingok számát. Ennek megfelelően a rendszer (4)-ben vetített Hamilton-operátorát

$$\begin{aligned}
\hat{H} = & \sum_{\sigma} \sum_{i=1}^{N_c} \left[\epsilon_1 (\hat{n}_{i,\sigma} + \hat{n}_{i+\mathbf{r}_4,\sigma}) + \epsilon_2 (\hat{n}_{i+\mathbf{r}_2,\sigma} + \hat{n}_{i+\mathbf{r}_6,\sigma}) \right. \\
& + \epsilon'_2 (\hat{n}_{i+\mathbf{r}_3,\sigma} + \hat{n}_{i+\mathbf{r}_5,\sigma}) \left. \right] + \sum_{\sigma} \sum_{i=1}^{N_c} \left[t_a (\hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{i+\mathbf{r}_6,\sigma} + \hat{c}_{i+\mathbf{r}_2,\sigma}^\dagger \hat{c}_{i,\sigma}) \right. \\
& + t_b (\hat{c}_{i+\mathbf{r}_4,\sigma}^\dagger \hat{c}_{i+\mathbf{r}_3,\sigma} + \hat{c}_{i+\mathbf{r}_5,\sigma}^\dagger \hat{c}_{i+\mathbf{r}_4,\sigma}) + t_1 (\hat{c}_{i+\mathbf{r}_3,\sigma}^\dagger \hat{c}_{i+\mathbf{r}_2,\sigma} + \hat{c}_{i+\mathbf{r}_6,\sigma}^\dagger \hat{c}_{i+\mathbf{r}_5,\sigma}) \\
& + t'_1 \hat{c}_{i+\mathbf{r}_5,\sigma}^\dagger \hat{c}_{i+\mathbf{r}_3,\sigma} + t'_2 \hat{c}_{i+\mathbf{r}_2,\sigma}^\dagger \hat{c}_{i+\mathbf{r}_6,\sigma} + t''_1 (\hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{i+\mathbf{r}_5,\sigma} + \hat{c}_{i+\mathbf{r}_3,\sigma}^\dagger \hat{c}_{i,\sigma}) \\
& + t''_2 (\hat{c}_{i+\mathbf{r}_4,\sigma}^\dagger \hat{c}_{i+\mathbf{r}_2,\sigma} + \hat{c}_{i+\mathbf{r}_6,\sigma}^\dagger \hat{c}_{i+\mathbf{r}_4,\sigma}) + t_c \hat{c}_{i+\mathbf{a},\sigma}^\dagger \hat{c}_{i+\mathbf{r}_4,\sigma} + H.c. \left. \right] \\
& + U \sum_{i=1}^{N_c} (\hat{n}_{i,\sigma} \hat{n}_{i,-\sigma} + \hat{n}_{i+\mathbf{r}_2,\sigma} \hat{n}_{i+\mathbf{r}_2,-\sigma} + \hat{n}_{i+\mathbf{r}_3,\sigma} \hat{n}_{i+\mathbf{r}_3,-\sigma} \\
& + \hat{n}_{i+\mathbf{r}_4,\sigma} \hat{n}_{i+\mathbf{r}_4,-\sigma} + \hat{n}_{i+\mathbf{r}_5,\sigma} \hat{n}_{i+\mathbf{r}_5,-\sigma} + \hat{n}_{i+\mathbf{r}_6,\sigma} \hat{n}_{i+\mathbf{r}_6,-\sigma})
\end{aligned} \tag{81}$$

szerint írtam fel, melyben $\epsilon_1, \epsilon_2, \epsilon'_2$ a lokális egyrészecske-potenciálokat jelölik, t_a, t_b, t_1, t_c az elsőszomszéd, míg t'_1, t'_2, t''_1, t''_2 a másodszozomszéd hoppingokat reprezentálják, U értéke pedig továbbra is minden csomóponton azonos. A (81) Hamilton-operátor paramétereit grafikusan a 11. ábra szemlélteti, ahol a lánc első cellája tartalmazza a megszokott csomóponti jelöléseket. Látható továbbá, hogy ϵ_1 a háromelágazású, ϵ_2 és ϵ'_2 pedig a kételágazású csomópontok egyrészecske-potenciáljait demonstrálja. t_1 és t_c az x tengellyel párhuzamos hoppingokat definiálja a hatszögek oldalélei, illetve a

hatszögeket összekötő szakaszok mentén, míg t_a és t_b a hatszögek haránt irányú oldalai mentén van értelmezve. t'_1 és t'_2 a hatszögeken belül az y tengellyel párhuzamos elektronugrásokhoz kapcsolódik, t''_1 és t''_2 pedig rézsútos irányokban történő ugrásokat jellemez.



11. ábra : A csomópontok helyzetvektorainak és a (81) Hamilton-operátor paramétereinek szemléltetése.

A Hamilton-operátor paraméterhalmazának fentebbi bővítése több szempontból nézve is praktikus. Egyrészt biztos talaja lehet a célul kitűzött fázistér-kiterjesztésnek, hiszen a paraméterek típusának és számának növelésével eleve egy szélesebb tartományon mozogva deríthetjük fel a fázistér egyes szegmenseit. Másrészt pedig az is detektálhatóvá válik, hogy a másodszomszéd hoppingok modellszinten vett bevezetése befolyásolja-e a rendszer alapvető fizikai jellegét.

6.2. Az alapállapot hullámfüggvény kiinduló formája

A (81) Hamilton-operátorban az egyszerűbb matematizálás kedvéért nem vettem figyelembe Peierls-faktorokat, így a leírás nem vezet be külső mágneses teret. Ezért az alapállapot megoldások csakis a (44) által előírt

$$|\psi_g(N \leq N_c)\rangle_0 = \prod_i \hat{V}_{i,\sigma_i}^\dagger |0\rangle \quad (82)$$

formában kereshetők, ahol a $\hat{V}_{i,\sigma_i}^\dagger$ operátorokat a (43) szerkezet alapján a

$$\hat{V}_{i,\sigma_i}^\dagger = y_{i+r_2} \hat{c}_{i+r_2,\sigma_i}^\dagger + y_{i+r_3} \hat{c}_{i+r_3,\sigma_i}^\dagger + y_{i+r_5} \hat{c}_{i+r_5,\sigma_i}^\dagger + y_{i+r_6} \hat{c}_{i+r_6,\sigma_i}^\dagger \quad (83)$$

kifejezés értelmezi (l. 7. ábra). Hangsúlyozom, hogy a (83)-ban szereplő, egyelőre ismeretlen y_{i+r_j} , $j = 2, 3, 5, 6$, koeficiensek számértéke nem feltétlenül egyezik meg (43) együtthatóival, tehát (83) pusztán az alkalmazandó operátorok struktúráját rögzíti. Így (83) csak az y_{i+r_j} faktoroknak a (81) paraméterei által meghatározott fázistérben történő levezetése után vehető össze (43)-mal. Ahhoz azonban, hogy össze lehessen hasonlítani az 5.2. alfejezet eredményeit a kiterjesztett fázistérben adódó eredményekkel, ez eset-

ben is egzakt módon kell meghatározni a rendszer alapállapotát. A 4.2. alfejezet irányvonalát követve, a procedúra első lépéseként természetesen a (81) Hamilton-operátor pozitív szemidefinit transzformációját kell végrehajtani, amit a következő alfejezetben részletezek.

6.3. A Hamilton-operátor transzformációja

A (81) Hamilton-operátor pozitív szemidefinit formára történő átalakítását (13) értelmében a

$$\hat{H} = \sum_{\sigma} \sum_{q=1}^7 \sum_{i=1}^{N_c} \hat{A}_{i,q,\sigma}^{\dagger} \hat{A}_{i,q,\sigma} + \hat{H}_U + K \hat{N} \quad (84)$$

formulával indítottam el, ahol a lánc minden cellájában a (28) szerinti

$$\begin{aligned} \hat{A}_{i,1,\sigma} &= a_1 \hat{c}_{i,\sigma} + a_4 \hat{c}_{i+\mathbf{r}_4,\sigma} + a_5 \hat{c}_{i+\mathbf{r}_5,\sigma} + a_6 \hat{c}_{i+\mathbf{r}_6,\sigma}, \\ \hat{A}_{i,2,\sigma} &= b_1 \hat{c}_{i,\sigma} + b_2 \hat{c}_{i+\mathbf{r}_2,\sigma} + b_3 \hat{c}_{i+\mathbf{r}_3,\sigma} + b_4 \hat{c}_{i+\mathbf{r}_4,\sigma}, \\ \hat{A}_{i,3,\sigma} &= d_1 \hat{c}_{i,\sigma} + d_3 \hat{c}_{i+\mathbf{r}_3,\sigma} + d_5 \hat{c}_{i+\mathbf{r}_5,\sigma}, \\ \hat{A}_{i,4,\sigma} &= e_2 \hat{c}_{i+\mathbf{r}_2,\sigma} + e_4 \hat{c}_{i+\mathbf{r}_4,\sigma} + e_6 \hat{c}_{i+\mathbf{r}_6,\sigma}, \\ \hat{A}_{i,5,\sigma} &= f_1 \hat{c}_{i,\sigma} + f_2 \hat{c}_{i+\mathbf{r}_2,\sigma} + f_6 \hat{c}_{i+\mathbf{r}_6,\sigma}, \\ \hat{A}_{i,6,\sigma} &= g_3 \hat{c}_{i+\mathbf{r}_3,\sigma} + g_4 \hat{c}_{i+\mathbf{r}_4,\sigma} + g_5 \hat{c}_{i+\mathbf{r}_5,\sigma}, \\ \hat{A}_{i,7,\sigma} &= h_1 \hat{c}_{i+\mathbf{a},\sigma} + h_4 \hat{c}_{i+\mathbf{r}_4,\sigma} \end{aligned} \quad (85)$$

blokkoperátor-típusokat értelmeztem az 5. ábrán szemléltetett struktúráknak megfelelően.

(84) és (81) tagonkénti azonosságából ezúttal a (14)-et megtestesítő

$$\begin{aligned} t_a &= a_1^* a_6 + f_1^* f_6, \\ t_a &= b_2^* b_1 + f_2^* f_1, \\ t_b &= a_5^* a_4 + g_5^* g_4, \\ t_b &= b_4^* b_3 + g_4^* g_3, \\ t_1 &= a_6^* a_5, \\ t_1 &= b_3^* b_2, \\ t_c &= h_1^* h_4, \\ 0 &= a_4^* a_1 + b_4^* b_1, \\ t'_1 &= d_5^* d_3 + g_5^* g_3, \\ t'_2 &= f_2^* f_6 + e_2^* e_6, \\ t''_1 &= a_1^* a_5 + d_1^* d_5, \\ t''_1 &= a_6^* a_4 + e_6^* e_4, \\ t''_2 &= b_3^* b_1 + d_3^* d_1, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
t_2'' &= b_4^* b_2 + e_4^* e_2, \\
\tilde{\epsilon}_1 &= \epsilon_1 - K = |a_1|^2 + |b_1|^2 + |d_1|^2 + |f_1|^2 + |h_1|^2, \\
\tilde{\epsilon}_1 &= \epsilon_1 - K = |a_4|^2 + |b_4|^2 + |e_4|^2 + |g_4|^2 + |h_4|^2, \\
\tilde{\epsilon}_2 &= \epsilon_2 - K = |a_5|^2 + |d_5|^2 + |g_5|^2, \\
\tilde{\epsilon}_2 &= \epsilon_2 - K = |a_6|^2 + |e_6|^2 + |f_6|^2, \\
\tilde{\epsilon}_2' &= \epsilon_2' - K = |b_2|^2 + |e_2|^2 + |f_2|^2, \\
\tilde{\epsilon}_2' &= \epsilon_2' - K = |b_3|^2 + |d_3|^2 + |g_3|^2
\end{aligned} \tag{86}$$

egyenletrendszer származtatható, melyben az $\{a, b, d, e, f, g, h; K\}$ ismeretlen paraméterek halmaza összekapcsolódik a Hamilton-operátor $\epsilon_1, \epsilon_2, \epsilon_2', t_a, t_b, t_1, t_c, t_1', t_2', t_2''$ tényezőivel. (86) megoldása során két különböző utat jártam végig. Elsőként a fázistér azon tartományára szorítkoztam, melyet az $\epsilon_2 = \epsilon_2', t_a = t_b = t, t_1' = t_2' = t', t_1'' = t_2'' = t''$ egyenlőségek jelölnek ki. Ezt az esetet a "szimmetrizált" jelzővel illettem, mivel az egyes paraméterpárok közötti egyenlőségeket a hatszög geometriája által meghatározott szimmetriák alapján írtam fel (l. 11. ábra). Ezt követően azt az esetet is megvizsgáltam, amikor az $\epsilon_2, \epsilon_2', t_a, t_b, t_1', t_2', t_1'', t_2''$ paraméterek között nem állnak fenn a fentebbi egyenlőségek, azaz "nemszimmetrizált" körülmények figyelembevételével is megkerestem (86) megoldásait. Aztán pedig (86) szimmetrizált és nemszimmetrizált megoldásainak birtokában, (83) és (85) felhasználásával, a (21.a) értelmében felírt

$$\{\hat{A}_{\mathbf{i},q,\sigma}, \hat{V}_{\mathbf{i},\sigma_{\mathbf{i}}}^\dagger\} = 0 \tag{87}$$

antikommutációs relációk alapján mindkét esetben kiszámítottam a (83) induló operátor $y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_j}$ együtthatóit. (87) egyenleteinek természetesen az összes lehetséges $\mathbf{i}, q, \sigma$ és $\sigma_{\mathbf{i}}$ indexek esetében teljesülnie kell. (83) és (85) helyettesítésével (87) a lánc bármely $\mathbf{i}$ cellájában a

$$\begin{aligned}
0 &= a_5 y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_5} + a_6 y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_6}, \\
0 &= b_2 y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_2} + b_3 y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_3}, \\
0 &= d_3 y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_3} + d_5 y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_5}, \\
0 &= e_2 y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_2} + e_6 y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_6}, \\
0 &= f_2 y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_2} + f_6 y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_6}, \\
0 &= g_3 y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_3} + g_5 y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_5}
\end{aligned} \tag{88}$$

egyenletrendszer formájában áll elő, ami (22)-t reprezentálja. (88) a szimmetrizált és nemszimmetrizált esetekben egyaránt érvényes, hiszen az $\hat{A}_{\mathbf{i},q,\sigma}$, illetve a $\hat{V}_{\mathbf{i},\sigma_{\mathbf{i}}}^\dagger$ operátorok struktúrája mindkét esetben (85), illetve (83) által adott. Figyeljük meg, hogy – noha (88) egyenletei a $q = 1, 2, \dots, 7$ esetekből származnak – (88) csupán hat egyenletet tartalmaz. Ennek egyszerűen az az

oka, hogy $q = 7$ esetén az $\hat{A}_{\mathbf{i},7,\sigma}$ és a $\hat{V}_{\mathbf{i},\sigma_{\mathbf{i}}}^\dagger$ operátorok nem érintkeznek közös csomópontokon, így $\{\hat{A}_{\mathbf{i},7,\sigma}, \hat{V}_{\mathbf{i},\sigma_{\mathbf{i}}}^\dagger\} = 0$ bármely $\mathbf{i}$, σ és $\sigma_{\mathbf{i}}$ indexek esetén automatikusan teljesül, tehát a hetedik egyenlet $0 = 0$ típusú azonosságot ad. A (86) és a (88) egyenletrendszerek szimmetrizált és nonszimmetrizált fázistértartományokon képzett megoldásait a következő két alfejezet taglalja.

6.3.1. A szimmetrizált eset megoldása

A (86) egyenletrendszer szimmetrizált megoldása nyomán a (85) blokk-operátorokat az

$$\begin{aligned}
\hat{A}_{\mathbf{i},1,\sigma} &= \sqrt{\tilde{\epsilon}_2 - t'} \left[\frac{t_1}{\tilde{\epsilon}_2 - t'} \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_5,\sigma} + \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_6,\sigma} \right], \\
\hat{A}_{\mathbf{i},2,\sigma} &= \sqrt{\tilde{\epsilon}_2 - t'} \left[\hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_2,\sigma} + \frac{t_1}{\tilde{\epsilon}_2 - t'} \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_3,\sigma} \right], \\
\hat{A}_{\mathbf{i},3,\sigma} &= \frac{t''}{\alpha} \left[\frac{\alpha^2}{t''} \hat{c}_{\mathbf{i},\sigma} + \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_3,\sigma} + \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_5,\sigma} \right], \\
\hat{A}_{\mathbf{i},4,\sigma} &= \sqrt{t' - \frac{t^2}{\beta^2}} \left[\hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_2,\sigma} + \frac{t''}{t' - \frac{t^2}{\beta^2}} \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_4,\sigma} + \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_6,\sigma} \right], \\
\hat{A}_{\mathbf{i},5,\sigma} &= \frac{t}{\beta} \left[\frac{\beta^2}{t} \hat{c}_{\mathbf{i},\sigma} + \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_2,\sigma} + \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_6,\sigma} \right], \\
\hat{A}_{\mathbf{i},6,\sigma} &= \sqrt{t' - \frac{(t'')^2}{\alpha^2}} \left[\hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_3,\sigma} + \frac{t}{t' - \frac{(t'')^2}{\alpha^2}} \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_4,\sigma} + \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_5,\sigma} \right], \\
\hat{A}_{\mathbf{i},7,\sigma} &= \sqrt{\tilde{\epsilon}_1 - \alpha^2 - \beta^2} \left[\hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{a},\sigma} + \frac{t_c}{\tilde{\epsilon}_1 - \alpha^2 - \beta^2} \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_4,\sigma} \right] \quad (89)
\end{aligned}$$

kifejezések szerint kaptam meg, melyekben az $\alpha, \beta \neq 0$ mennyiségek szabad paraméterként kezelhetők. Ezenkívül (86) megoldásából adódóan

$$\begin{aligned}
K &= \epsilon_1 - \frac{1}{2} \left[\frac{(t'')^2 \beta^2}{t' \beta^2 - t^2} + \frac{t^2 \alpha^2}{t' \alpha^2 - (t'')^2} + \alpha^2 + \beta^2 \right. \\
&\quad \left. + \sqrt{\left(\frac{(t'')^2 \beta^2}{t' \beta^2 - t^2} + \frac{t^2 \alpha^2}{t' \alpha^2 - (t'')^2} - \alpha^2 - \beta^2 \right)^2 + 4t_c^2} \right], \quad (90)
\end{aligned}$$

a kapcsolódó extra feltételeket pedig a

$$\begin{aligned}
t_1 &= \epsilon_2 - K - t', \quad t_1 > 0, \\
\epsilon_1 - K - \alpha^2 - \beta^2 &> 0, \quad t' - \frac{(t'')^2}{\alpha^2} > 0, \quad t' - \frac{t^2}{\beta^2} > 0 \quad (91)
\end{aligned}$$

relációk határozzák meg. Ez esetben tehát (15) függvénykapcsolatait a (91) összefüggések alakítják ki.

A (89) blokkoperátorok együtthatóit (88) egyenleteibe beírva, a

$$\begin{aligned}
0 &= \frac{t_1}{\tilde{\epsilon}_2 - t'} y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_5} + y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_6}, \\
0 &= y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_2} + \frac{t_1}{\tilde{\epsilon}_2 - t'} y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_3}, \\
0 &= y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_3} + y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_5}, \\
0 &= y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_2} + y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_6}, \\
0 &= y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_2} + y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_6}, \\
0 &= y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_3} + y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_5}
\end{aligned} \tag{92}$$

kapcsolatrendszer alakul ki, melynek megoldása lehet az

$$y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_2} = 1, \quad y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_3} = -\frac{\tilde{\epsilon}_2 - t'}{t_1}, \quad y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_5} = \frac{\tilde{\epsilon}_2 - t'}{t_1}, \quad y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_6} = -1 \tag{93}$$

értékthalmaz. Vegyük észre azonban, hogy (91) $t_1 = \tilde{\epsilon}_2 - t'$ egyenlősége folytán a (93)-ban megadott $y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_3}$ és $y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_5}$ koeficiensek valójában az $y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_3} = -1$, illetve az $y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_5} = 1$ értékeket veszik fel. Ebből következően a (83) $\hat{V}_{\mathbf{i},\sigma_1}^\dagger$ operátorokra vonatkozó megoldás

$$\hat{V}_{\mathbf{i},\sigma_1}^\dagger = \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_2,\sigma_1}^\dagger - \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_3,\sigma_1}^\dagger + \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_5,\sigma_1}^\dagger - \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_6,\sigma_1}^\dagger \tag{94}$$

formájában áll elő. Összehasonlítva a (94)-ben, illetve a (43)-ban foglalt eredményeket, rögtön megállapítható, hogy habár a két megoldás, szerkezetüket tekintve, kvalitatíve egyazon osztályba tartozik, (94) és (43) azonban lineárisan független egymástól, így kvantitatíve különböző a két megoldás. (94) birtokában a rendszer (82) alapállapotú hullámfüggvényét

$$|\psi_g(N \leq N_c)\rangle_0 = \prod_{\mathbf{i}} (\hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_2,\sigma_1}^\dagger - \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_3,\sigma_1}^\dagger + \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_5,\sigma_1}^\dagger - \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_6,\sigma_1}^\dagger) |0\rangle \tag{95}$$

határozza meg, amelyhez (90) figyelembevételével, (16) alapján az

$$\begin{aligned}
E_g(N; \epsilon_1, t, t_c, t', t'') &= \left\{ \epsilon_1 - \frac{1}{2} \left[\frac{(t'')^2 \beta^2}{t' \beta^2 - t^2} + \frac{t^2 \alpha^2}{t' \alpha^2 - (t'')^2} + \alpha^2 + \beta^2 \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + \sqrt{\left(\frac{(t'')^2 \beta^2}{t' \beta^2 - t^2} + \frac{t^2 \alpha^2}{t' \alpha^2 - (t'')^2} - \alpha^2 - \beta^2 \right)^2 + 4t_c^2} \right] \right\} N,
\end{aligned} \tag{96}$$

alapállapotú energia rendelhető hozzá. Jegyezzük meg, hogy a (95-96) alapállapot a (91) relációk által kiszabott, szimmetrizált fázistértartományon lehet érvényben.

6.3.2. A nemszimmetrizált eset megoldása

A (86) egyenletrendszer nemszimmetrizált megoldása a (85) blokkoperátorok tekintetében az

$$\begin{aligned}
\hat{A}_{\mathbf{i},1,\sigma} &= \sqrt{\frac{t_1}{\gamma}} \left[\hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_5,\sigma} + \gamma \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_6,\sigma} \right], \\
\hat{A}_{\mathbf{i},2,\sigma} &= \sqrt{\frac{t_1}{\gamma}} \left[\gamma \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_2,\sigma} + \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_3,\sigma} \right], \\
\hat{A}_{\mathbf{i},3,\sigma} &= \sqrt{t'_1 - \lambda^2} \left[\frac{t''_1}{t'_1 - \lambda^2} \hat{c}_{\mathbf{i},\sigma} + \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_3,\sigma} + \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_5,\sigma} \right], \\
\hat{A}_{\mathbf{i},4,\sigma} &= \sqrt{t'_2 - \mu^2} \left[\hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_2,\sigma} + \frac{t''_2}{t'_2 - \mu^2} \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_4,\sigma} + \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_6,\sigma} \right], \\
\hat{A}_{\mathbf{i},5,\sigma} &= \mu \left[\frac{t_a}{\mu^2} \hat{c}_{\mathbf{i},\sigma} + \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_2,\sigma} + \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_6,\sigma} \right], \\
\hat{A}_{\mathbf{i},6,\sigma} &= \lambda \left[\hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_3,\sigma} + \frac{t_b}{\lambda^2} \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_4,\sigma} + \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_5,\sigma} \right], \\
\hat{A}_{\mathbf{i},7,\sigma} &= \sqrt{\tilde{\epsilon}_1 - \frac{t_a^2}{\mu^2} - \frac{(t''_1)^2}{t'_1 - \lambda^2}} \left[\hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{a},\sigma} + \frac{t_c}{\tilde{\epsilon}_1 - \frac{t_a^2}{\mu^2} - \frac{(t''_1)^2}{t'_1 - \lambda^2}} \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_4,\sigma} \right] \quad (97)
\end{aligned}$$

eredményekre vezetett, ahol γ, λ, μ értéke tetszőlegesen megválasztható, és (86) megoldása alapján

$$\begin{aligned}
K &= \epsilon_1 - \frac{1}{2} \left[\frac{t_a^2}{\mu^2} + \frac{t_b^2}{\lambda^2} + \frac{(t''_1)^2}{t'_1 - \lambda^2} + \frac{(t''_2)^2}{t'_2 - \mu^2} \right. \\
&\quad \left. + \sqrt{\left(\frac{t_b^2}{\lambda^2} + \frac{(t''_2)^2}{t'_2 - \mu^2} - \frac{t_a^2}{\mu^2} - \frac{(t''_1)^2}{t'_1 - \lambda^2} \right)^2 + 4t_c^2} \right]. \quad (98)
\end{aligned}$$

Emellett az

$$\begin{aligned}
\epsilon_2 - K &= \gamma t_1 + t'_2, \quad \epsilon'_2 - K = \frac{t_1}{\gamma} + t'_1, \quad \gamma > 0, \quad t_1, t'_1, t'_2 > 0, \\
t'_1 - \lambda^2 &> 0, \quad t'_2 - \mu^2 > 0, \quad \epsilon_1 - K - \frac{t_a^2}{\mu^2} - \frac{(t''_1)^2}{t'_1 - \lambda^2} > 0 \quad (99)
\end{aligned}$$

feltételeknek kell teljesülniük, amelyek (15) relációit aktualizálják.

A (97) blokkoperátorok koefficienseinek a (88) egyenletrendszerbe történő helyettesítése a

$$\begin{aligned}
0 &= y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_5} + \gamma y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_6}, \\
0 &= \gamma y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_2} + y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_3}, \\
0 &= y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_3} + y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_5}, \\
0 &= y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_2} + y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_6}, \\
0 &= y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_2} + y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_6},
\end{aligned}$$

$$0 = y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_3} + y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_5} \quad (100)$$

egyenlőségekre vezet, melyeknek egy lehetséges megoldását az

$$y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_2} = 1, \quad y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_3} = -\gamma, \quad y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_5} = \gamma, \quad y_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_6} = -1 \quad (101)$$

értékek adják meg. A (101) eredmények felhasználásával a (83) $\hat{V}_{\mathbf{i},\sigma_i}^\dagger$ operátorok a

$$\hat{V}_{\mathbf{i},\sigma_i}^\dagger = \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_2,\sigma_i}^\dagger - \gamma \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_3,\sigma_i}^\dagger + \gamma \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_5,\sigma_i}^\dagger - \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_6,\sigma_i}^\dagger \quad (102)$$

alakot öltik, és megfigyelhető, hogy (102) speciálisan a $\gamma = 1$ pontban reprodukálja (94)-et. Egyébként pedig $\gamma \neq 1$ esetén (102) és (94) lineárisan függetlenek, így azonos szerkezetű, de kvantitatíve különböző megoldásokat írnak le. (102) felhasználásával a (82) alapállapot hullámfüggvény ezúttal

$$|\psi_g(N \leq N_c)\rangle_0 = \prod_{\mathbf{i}} (\hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_2,\sigma_i}^\dagger - \gamma \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_3,\sigma_i}^\dagger + \gamma \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_5,\sigma_i}^\dagger - \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_6,\sigma_i}^\dagger) |0\rangle \quad (103)$$

szerint alakul ki, melyhez a kapcsolódó alapállapot energiát (98) révén, (16) értelmében az

$$E_g(N; \epsilon_1, t_a, t_b, t_c, t'_1, t'_2, t''_1, t''_2) = \left\{ \epsilon_1 - \frac{1}{2} \left[\frac{t_a^2}{\mu^2} + \frac{t_b^2}{\lambda^2} + \frac{(t''_1)^2}{t'_1 - \lambda^2} + \frac{(t''_2)^2}{t'_2 - \mu^2} \right. \right. \\ \left. \left. + \sqrt{\left(\frac{t_b^2}{\lambda^2} + \frac{(t''_2)^2}{t'_2 - \mu^2} - \frac{t_a^2}{\mu^2} - \frac{(t''_1)^2}{t'_1 - \lambda^2} \right)^2 + 4t_c^2} \right] \right\} N \quad (104)$$

kifejezés definiálja. Ez esetben a (103-104) alapállapot a (99)-ben megadott feltételek által kijelölt, nemszimmetrizált fázistértartományon érhető el.

6.3.3. Néhány gondolat az 5.2. és 6.3.1-2. alfejezetek eredményeiről

Az átláthatóság kedvéért ezen a ponton érdemesnek tartom összegezni és fizikai szempontból értelmezni az 5.2. és 6.3.1-2. alfejezetekben bemutatott eredményeimet. Láttuk, hogy a (48), a (91), illetve a (99) relációk által megformált fázistértartományokon létező (43-44), (95), illetve (103) alapállapot hullámfüggvények matematikai részleteiket (koefficienseiket) tekintve különbözőek (kivétel ez alól a $\gamma = 1$ pont, ahol (95) és (103) azonos), szerkezeti felépítésük azonban megegyezik, hiszen mindhárom megoldás ugyanazon négy alrács $\mathbf{i}+\mathbf{r}_2, \mathbf{i}+\mathbf{r}_3, \mathbf{i}+\mathbf{r}_5, \mathbf{i}+\mathbf{r}_6$ csomópontjain jelentet meg járulékokat. Ez a rendszer fizikai aspektusaira levetítve azt eredményezi, hogy a (43-44), a (95), illetve a (103) formulák olyan lokalizált elektronállapotok által létrehozott paramágneses alapállapotokat valósítanak meg, melyek mindegyike az $N \leq N_c$ által definiált kis koncentrációs tartományon érvényes, de

a paraméterter más és más tartományán bukkannak fel. Ahogyan a 4.2.1. alfejezet negyedik bekezdésében is említettem, nemintegrálható rendszerek esetében tipikusan számítanak az olyan globális alapállapotú megoldások, melyek a fázistér lokális szelvényein léteznek. A korábbi alfejezetekben kapott eredmények ennek az állításnak szemléletes megtestesülései, amikor is a (43-44), (95), (103) által globalizált alapállapot a (48), (91), (99) által lokalizált doméneken fordul elő.

Szeretnék arra is rámutatni, hogy a másodsomszéd hoppingok bevezetésével, a végeredmények tanúsága szerint, nem változott meg a rendszer alapvető fizikai karaktere, hiszen a (43-44) (ahol a levezetés kiindulópontja az elsőszomszéd hoppingokat tartalmazó (25) Hamilton-operátor volt) és a (95,103) alapállapotok (ahol a levezetés kiindulópontjaként szolgáló (81) Hamilton-operátor másodsomszéd ugrásokat is figyelembe vett) ugyanolyan tulajdonságokkal rendelkeznek. Ebből kiindulva arra a következtetésre jutottam, hogy az alapállapot fizikai jellemzőinek feltárása szempontjából modellszinten ténylegesen elegendő az elsőszomszéd hoppingokat bevonni a leírásba. Ha azonban szélesebb rálátást szeretnénk a fázistérre, akkor például a másodsomszéd hoppingok bevezetésével kiterjesztett paraméterkészlet alkalmazása, a matematikai manőverek során felmerülő módszertani fejlesztések mellett, hatékony eszköze lehet a fizikai kép finomításának is.

A megjegyzéseim zárásaként érdemes még néhány gondolatot kiemelni. A Hamilton-operátor pozitív szemidefinit átalakítását illetően, a számítások technikai lebonyolításának szempontjából különbséget kell tennünk az 5. és 6. fejezet matematikai stratégiái között. Idézzük fel az 5. fejezet (27-28), illetve (49-50) transzformációs formuláit. A két eset a (25) induló Hamilton-operátor két különböző transzformációját valósítja meg, ami megfelel annak, hogy (7) értelmében többféle transzformációs út is kínálkozhat. Így a két esetben (8-9) nyomán két különböző egyenletrendszer alakult ki, melyek (29) és (51) alakjában realizálódtak. Az 5. fejezetben tehát két különböző egyenletrendszert kellett kezelnem és megoldanom a $B = 0$, illetve $B \neq 0$ szituációnak megfelelően. Ezzel szemben a 6. fejezet (81) induló Hamilton-operátorát csak egyféleképpen alakítottam át (84-85) szerint, így (8-9)-ből egyetlen egyenletrendszer származott, melyet (86) hozott létre. Ebben az esetben tehát ugyanazon egyenletrendszer két különböző megoldása adta a szimmetrizált és nonszimmetrizált paraméterek esetén kiszámított eredményeket, összhangban a 4.2.1. alfejezet ötödik bekezdésében megemlített észrevétellel. Mindezek fényében érzékelhető, hogy a PSZO módszer meglehetősen tág matematikai mozgásteret biztosít, ami változatossá teheti a leírást, hiszen – éppen a matematikai szabadságból adódóan – több olyan megoldás is kihozható, melyek fizikailag is helyes és elfogadható eredményre vezetnek.

6.4. A fázisdiagram szemléltetése és elemzése

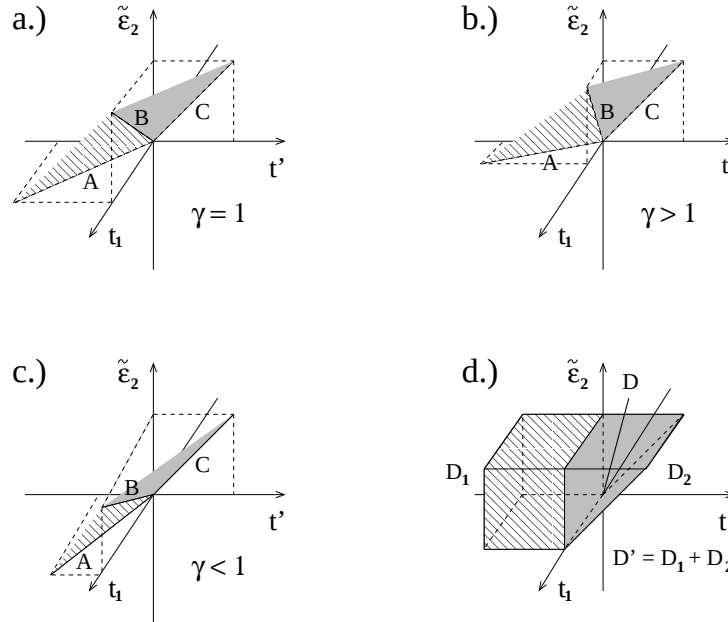
A 6.3. alfejezet eredményeinek birtokában tanulmányoztam a rendszer fázisdiagramját, és ennek során azt vizsgáltam, hogy (91), illetve (99) kapcsolatai milyen mértékben terjesztik ki a (48) által meghatározott fázistérbeli domént. Mivel a (81) Hamilton-operátor összesen 12 változtatható értékű paramétert tartalmaz $(\epsilon_1, \epsilon_2, \epsilon'_2, t_a, t_b, t_1, t_c, t'_1, t'_2, t''_1, t''_2, U)$, a teljes fázistér ezen 12 mennyiség együttese feszíti ki, azaz jelen esetben a teljes paraméterter egy 12 dimenziós sokaság. Ezt három dimenzióban nyilván nem lehet teljes egészében szemléltetni, ezért célszerű a 12 paraméterből hármat kiválasztani, és az általuk definiált szegmenst analizálni. Mivel (48) második, illetve (91) és (99) első relációja az $\tilde{\epsilon}_2, t_1, t'$ paraméterhármast tartalmazza az

$$\begin{aligned} 1. \quad & \tilde{\epsilon}_2 = -t_1, \quad t_1 < 0, \\ 2. \quad & \tilde{\epsilon}_2 = t_1 + t', \quad t_1 > 0, \\ 3. \quad & \tilde{\epsilon}_2 = \gamma t_1 + t', \quad t_1 > 0, \end{aligned} \tag{105}$$

kollekció szerint, így – hogy a három tartomány érdemben összehasonlítható legyen – kézenfekvő az $\tilde{\epsilon}_2, t_1, t'$ tengelyek által kifeszített régiót tanulmányozni. (105.1), (105.2), illetve (105.3) rendre (48), (91), illetve (99) említett relációinak újbóli felsorakoztatása, ahol a (105.3)-beli t' t'_2 -t jelöli. Látható, hogy t_1 előjele szerint (105) egyenlőségei két csoportra oszthatók, hiszen (105.1) a $t_1 < 0$, míg (105.2-3) a $t_1 > 0$ tartományon érvényes. Ez azt mutatja, hogy (105.1) és (105.2-3) között nem lehet átfedés a fázistérben, ennél fogva az $\tilde{\epsilon}_2, t_1, t'$ koordináta-rendszer t_1 tengelye mentén haladva két diszjunkt domén különíthető el.

Elsőként koncentráljunk (105.2-3) egyenlőségeire. (105.2) és (105.3) a $\gamma = 1$ pontban ugyanazt a kifejezést produkálja, viszont $\gamma \neq 1$ esetén különböző zónákat határoznak meg. Ezért a $\gamma = 1$ pontot vízválasztónak tekintve, azt vizsgáltam meg, hogy a γ paraméter változtatásával (105.3) milyen tartományokat söpör végig a $0 < \gamma < 1$, illetve a $\gamma > 1$ intervallumban. Az eredményeimet a 12. ábra demonstrálja, ahol az a.), b.), c.) rajzok rendre a $\gamma = 1$, $\gamma > 1$, illetve a $\gamma < 1$ esetekben kialakuló síkokat reprezentálják. A síkokat mindhárom ábrán az A, B, C betűkkel jelölt lineáris szakaszok feszítik ki, melyek az $\tilde{\epsilon}_2 = 0$ (A), $t' = 0$ (B), illetve a $t_1 = 0$ (C) egyenlőségek által definiált koordinátasíkokban helyezkednek el, és meredekségük (105) formulájából olvasható le. Mivel C meredeksége $t_1 = 0$ nyomán független a γ paraméter értékétől, C a 12.a-c rajzok mindegyikén egy egységnyi meredekségű egyenesként rögzül. Ezzel szemben az A és B egyenesek γ változtatásával saját síkjukban mozognak, hiszen meredekségük γ -val változik. Ennek értelmében megfigyelhető, hogy γ növekedésével A a t' , míg B az $\tilde{\epsilon}_2$ tengelyhez közeledik (l. 12.a és 12.b ábra),

γ csökkenése viszont A -t és B -t egyaránt a t_1 tengely irányába mozdítja el (l. 12.a és 12.c ábra). Következésképpen az A és B szakaszok által kifeszített bevonalkázott sík a 12.d ábrán vázolt bevonalkázott kocka D_1 térfogati tartományát söpörheti végig, a B és C egyenesek által kijelölt szürke sík pedig a 12.d ábra szürke D_2 félkockájában mozoghat. Ez tehát azt jelenti, hogy a (105.2-3) relációk a 12.d ábra bevonalkázott kockája és szürke félkockája által együttesen alkotott $D' = D_1 + D_2$ domént rajzolják ki a fázistérben, így a szimmetrizált esetben kapott (95-96) alapállapot, illetve a nemszimmetrizált esetben meghatározott (103-104) alapállapot szintúgy ezen D' tartományon jelenhet meg.



12. ábra : A fázistér lineáris D , illetve kiterjesztett, térfogati D' doménjei, melyeken a levezetett lokális és paramágneses alapállapot létezhet. Az ábra a.), b.) és c.) rajzain D' kialakulása követhető nyomon.

(105.2-3) után térjünk rá a (105.1)-ben megadott kapcsolatra, melynek ábrázolása rendkívül egyszerű, hiszen az $\tilde{\epsilon}_2 - t_1$ koordinátasíkban egy egy-ségnyi meredekségű egyenest definiál. Ezen D betűvel jelölt egyenest a 12.d ábrán tüntettem fel, így világosan látszik D és D' viszonya. Emlékeztetek, hogy D azt a tartományt jeleníti meg a fázistérben, ahol a (43-44,47) alapállapot helytálló lehet.

A 12. ábra eredményei alapján megállapítottam, hogy ugyanazon fizikai tulajdonságokkal rendelkező – a (43-44), (95), illetve (103) által megvalósított – lokalizált és paramágneses alapállapot nemcsak egy szűk D vonal mentén, hanem egy kiterjedtebb D' térfogati tartományon is érvényes lehet.

6.5. A rendszer nemkölcsonható sávszerkezete

A fázistér kiterjesztését követően a (81) Hamilton-operátor által definiált, kibővített paraméterkészlet esetében is kiszámítottam a rendszer nemkölcsonható sávszerkezetét, melynek ismerete jelen esetben két szempontból is fontos lehet. Egyrészt a nemkölcsonható sávszerkezet feltárásával hozzájuthatunk olyan információkhoz, amik árnyalhatják vagy finomíthatják az alapállapotról kialakult fizikai képet (l. 5.4. alfejezet). Másrészt pedig az alábbiakban bemutatandó eredmények alapján felmérhető, hogy a paraméterek halmazának (81) szerinti kibővítése mennyiben befolyásolja, illetve módosítja-e az 5.4. alfejezetben kialakult sávszerkezet jellemzőit.

A számítások elvégzéséhez elsőként az $\mathbf{r}$ -térben megadott (81) Hamilton-operátor

$$\begin{aligned}
\hat{H}_0 = & \sum_{\sigma} \sum_{\mathbf{i}=1}^{N_c} \left[\epsilon_1 (\hat{n}_{\mathbf{i},\sigma} + \hat{n}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_4,\sigma}) + \epsilon_2 (\hat{n}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_2,\sigma} + \hat{n}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_6,\sigma}) \right. \\
& + \epsilon'_2 (\hat{n}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_3,\sigma} + \hat{n}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_5,\sigma}) \left. + \sum_{\sigma} \sum_{\mathbf{i}=1}^{N_c} \left[t_a (\hat{c}_{\mathbf{i},\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_6,\sigma} + \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_2,\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{\mathbf{i},\sigma}) \right. \right. \\
& + t_b (\hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_4,\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_3,\sigma} + \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_5,\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_4,\sigma}) + t_1 (\hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_3,\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_2,\sigma} + \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_6,\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_5,\sigma}) \\
& + t'_1 \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_5,\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_3,\sigma} + t'_2 \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_2,\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_6,\sigma} + t''_1 (\hat{c}_{\mathbf{i},\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_5,\sigma} + \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_3,\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{\mathbf{i},\sigma}) \\
& \left. \left. + t''_2 (\hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_4,\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_2,\sigma} + \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_6,\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_4,\sigma}) + t_c \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{a},\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_4,\sigma} + H.c. \right] \right. \quad (106)
\end{aligned}$$

kinetikus részének $\mathbf{k}$ -térbe történő transzformációját kell megvalósítani, ami az elemi fermionikus eltüntető és keltő operátorok

$$\begin{aligned}
\hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_j+\mathbf{R},\sigma} &= \frac{1}{\sqrt{N_c}} \sum_{\mathbf{k}=1}^{N_c} \hat{c}_{j,\mathbf{k},\sigma} e^{-i\mathbf{k}(\mathbf{i}+\mathbf{r}_j+\mathbf{R})}, \\
\hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{r}_j+\mathbf{R},\sigma}^{\dagger} &= \frac{1}{\sqrt{N_c}} \sum_{\mathbf{k}=1}^{N_c} \hat{c}_{j,\mathbf{k},\sigma}^{\dagger} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{i}+\mathbf{r}_j+\mathbf{R})} \quad (107)
\end{aligned}$$

alakú Fourier-transzformált formuláinak alkalmazásával vihető végig. A (107)-beli $\hat{c}_{j,\mathbf{k},\sigma}$ és $\hat{c}_{j,\mathbf{k},\sigma}^{\dagger}$ a $(\mathbf{k}, \sigma)$ értékpárral jellemzett kvantumállapot eltüntető és keltő operátorát reprezentálja a lánc j , $j = 1, 2, \dots, 6$, alrácsában, az $\mathbf{R}$ változó pedig a $\mathbf{0}$ vagy az $\mathbf{a}$ értéket veszi fel. A (107) által adott Fourier-transzformált kifejezéseket (106) tagjaiba helyettesítve, $\hat{H}_0$

$$\begin{aligned}
\hat{H}_0 = & \sum_{\sigma} \sum_{\mathbf{k}} \left[\epsilon_1 (\hat{n}_{1,\mathbf{k},\sigma} + \hat{n}_{4,\mathbf{k},\sigma}) + \epsilon_2 (\hat{n}_{2,\mathbf{k},\sigma} + \hat{n}_{6,\mathbf{k},\sigma}) + \epsilon'_2 (\hat{n}_{3,\mathbf{k},\sigma} + \hat{n}_{5,\mathbf{k},\sigma}) \right] \\
& + \sum_{\sigma} \sum_{\mathbf{k}} \left[t_a (e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}_6} \hat{c}_{1,\mathbf{k},\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{6,\mathbf{k},\sigma} + e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}_2} \hat{c}_{2,\mathbf{k},\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{1,\mathbf{k},\sigma}) \right.
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + t_b (e^{i\mathbf{k}(\mathbf{r}_4-\mathbf{r}_3)} \hat{c}_{4,\mathbf{k},\sigma}^\dagger \hat{c}_{3,\mathbf{k},\sigma} + e^{i\mathbf{k}(\mathbf{r}_5-\mathbf{r}_4)} \hat{c}_{5,\mathbf{k},\sigma}^\dagger \hat{c}_{4,\mathbf{k},\sigma}) + t_c e^{i\mathbf{k}(\mathbf{a}-\mathbf{r}_4)} \hat{c}_{1,\mathbf{k},\sigma}^\dagger \hat{c}_{4,\mathbf{k},\sigma} \\
& + t_1 (e^{i\mathbf{k}(\mathbf{r}_3-\mathbf{r}_2)} \hat{c}_{3,\mathbf{k},\sigma}^\dagger \hat{c}_{2,\mathbf{k},\sigma} + e^{i\mathbf{k}(\mathbf{r}_6-\mathbf{r}_5)} \hat{c}_{6,\mathbf{k},\sigma}^\dagger \hat{c}_{5,\mathbf{k},\sigma}) + t'_1 \hat{c}_{5,\mathbf{k},\sigma}^\dagger \hat{c}_{3,\mathbf{k},\sigma} \\
& + t'_2 \hat{c}_{2,\mathbf{k},\sigma}^\dagger \hat{c}_{6,\mathbf{k},\sigma} + t''_1 (e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}_5} \hat{c}_{1,\mathbf{k},\sigma}^\dagger \hat{c}_{5,\mathbf{k},\sigma} + e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}_3} \hat{c}_{3,\mathbf{k},\sigma}^\dagger \hat{c}_{1,\mathbf{k},\sigma}) \\
& + t''_2 (e^{i\mathbf{k}(\mathbf{r}_4-\mathbf{r}_2)} \hat{c}_{4,\mathbf{k},\sigma}^\dagger \hat{c}_{2,\mathbf{k},\sigma} + e^{i\mathbf{k}(\mathbf{r}_6-\mathbf{r}_4)} \hat{c}_{6,\mathbf{k},\sigma}^\dagger \hat{c}_{4,\mathbf{k},\sigma}) + H.c.] \quad (108)
\end{aligned}$$

szerint alakul át, melyben a

$$\begin{aligned}
\mathbf{k}\mathbf{r}_3 &= \mathbf{k}\mathbf{r}_5 = \mathbf{k}(\mathbf{r}_4 - \mathbf{r}_2) = \mathbf{k}(\mathbf{r}_4 - \mathbf{r}_6) = \frac{3kb}{2}, \\
\mathbf{k}\mathbf{r}_2 &= \mathbf{k}\mathbf{r}_6 = \mathbf{k}(\mathbf{r}_4 - \mathbf{r}_3) = \mathbf{k}(\mathbf{r}_4 - \mathbf{r}_5) = \frac{kb}{2}, \\
\mathbf{k}(\mathbf{r}_3 - \mathbf{r}_2) &= \mathbf{k}(\mathbf{r}_5 - \mathbf{r}_6) = kb, \\
\mathbf{k}(\mathbf{a} - \mathbf{r}_4) &= kb' \quad (109)
\end{aligned}$$

egyenlőségek érvényesek. (109) eredményeinek számításakor figyelembe vetttem, hogy $\mathbf{k}$, melynek hossza $k = |\mathbf{k}|$, a Bravais-vektor irányába mutat, és a 3. ábra jelöléseinek értelmében $|\mathbf{a}| = 2b + b'$.

A (108)-ban foglalt kinetikus járulékok tagjait a

$$\hat{H}_0 = \sum_{\sigma} \sum_{\mathbf{k}} \mathbf{C}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \tilde{\mathbf{M}}_{\mathbf{k}} \mathbf{C}_{\mathbf{k},\sigma} \quad (110)$$

kifejezés sűríti magába, melyben a

$$\hat{\mathbf{C}}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger = (\hat{c}_{1,\mathbf{k},\sigma}^\dagger, \hat{c}_{2,\mathbf{k},\sigma}^\dagger, \dots, \hat{c}_{6,\mathbf{k},\sigma}^\dagger), \quad \hat{\mathbf{C}}_{\mathbf{k},\sigma} = \begin{pmatrix} \hat{c}_{1,\mathbf{k},\sigma} \\ \hat{c}_{2,\mathbf{k},\sigma} \\ \vdots \\ \hat{c}_{6,\mathbf{k},\sigma} \end{pmatrix} \quad (111)$$

mátrixok a $\mathbf{k}$ -térben értelmezett keltő és eltüntető operátorok sor-, illetve oszlopvektorait jelenítik meg, az $\tilde{\mathbf{M}}_{\mathbf{k}}$ mátrixot pedig az

$$\tilde{\mathbf{M}}_{\mathbf{k}} = \begin{pmatrix} \epsilon_1 & t_a e^{i\frac{kb}{2}} & t'_1 e^{i\frac{3kb}{2}} & t_c e^{-ikb'} & t''_1 e^{i\frac{3kb}{2}} & t_a e^{i\frac{kb}{2}} \\ t_a e^{-i\frac{kb}{2}} & \epsilon_2 & t_1 e^{ikb} & t''_2 e^{i\frac{3kb}{2}} & 0 & t'_2 \\ t'_1 e^{-i\frac{3kb}{2}} & t_1 e^{-ikb} & \epsilon'_2 & t_b e^{i\frac{kb}{2}} & t'_1 & 0 \\ t_c e^{ikb'} & t'_2 e^{-i\frac{3kb}{2}} & t_b e^{-i\frac{kb}{2}} & \epsilon_1 & t_b e^{-i\frac{kb}{2}} & t''_2 e^{-i\frac{3kb}{2}} \\ t''_1 e^{-i\frac{3kb}{2}} & 0 & t'_1 & t_b e^{i\frac{kb}{2}} & \epsilon'_2 & t_1 e^{-ikb} \\ t_a e^{-i\frac{kb}{2}} & t'_2 & 0 & t''_2 e^{i\frac{3kb}{2}} & t_1 e^{ikb} & \epsilon_2 \end{pmatrix} \quad (112)$$

hermitikus tömb állítja elő. A nemkölsönható sávszerkezet megrajzolásához szükség van a (112) $\tilde{\mathbf{M}}_{\mathbf{k}}$ mátrix

$$\det(\tilde{\mathbf{M}}_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}} \tilde{\mathbf{1}}) = 0 \quad (113)$$

szekuláris egyenletére, amely megadja a rendszer $E_{\mathbf{k}}(\mathbf{k})$ diszperziórelációját ($\tilde{\mathbf{1}}$ a (6×6) -os egységmátrixot jelöli). A (113) sajátérték-egyenletet ezúttal a

$$\sum_{m=0}^6 A_m E_{\mathbf{k}}^m + \sum_{m=0}^3 B_m E_{\mathbf{k}}^m \cos(\mathbf{k}\mathbf{a}) = 0 \quad (114)$$

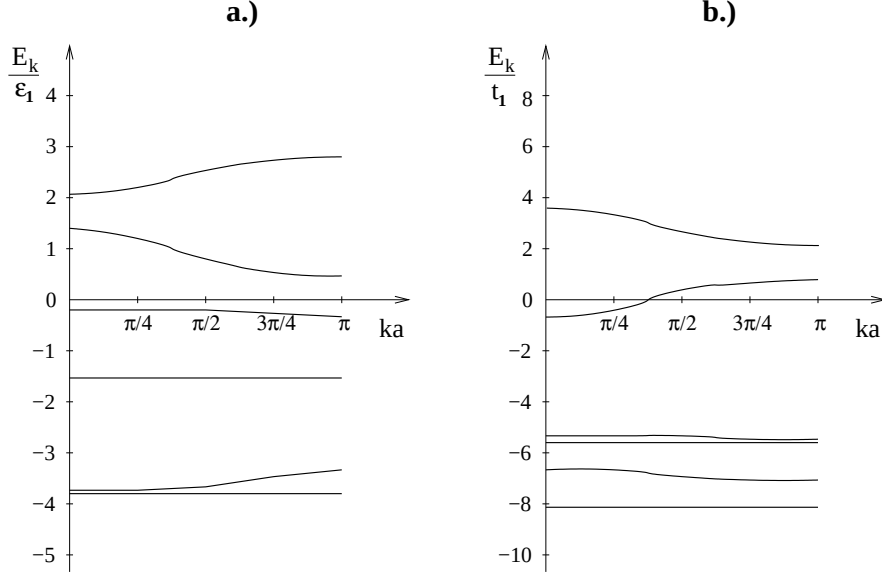
formula valósítja meg, ahol az A_m , $m = 0, 1, \dots, 6$, illetve a B_m , $m = 0, 1, \dots, 3$, koefficienseket a következő kifejezések adják meg:

$$\begin{aligned} A_0 &= 2\epsilon_1\epsilon_2\epsilon'_2[\epsilon_1 t_1^2 + \epsilon_2(t_b^2 + (t_1'')^2) + \epsilon'_2(t_a^2 + (t_2'')^2) - 2t_1(t_a t_1'' + t_b t_2'')] \\ &+ \epsilon_1^2(\epsilon'_2)^2(t_2'')^2 + \epsilon_2^2(\epsilon'_2)^2 t_c^2 - \epsilon_1^2\epsilon_2^2[(\epsilon'_2)^2 - (t_1'')^2] - 2\epsilon_1\epsilon_2^2 t_1'(t_b^2 + (t_1'')^2) \\ &- 2\epsilon_1(\epsilon'_2)^2 t_2'(t_a^2 + (t_2'')^2) - \epsilon_1^2(t_1' t_2' - t_1^2)^2 - 2\epsilon_1\epsilon_2[(t_a t_1' - t_1 t_1'')^2 \\ &+ (t_b t_1 - t_1' t_2'')^2] - 2\epsilon_1\epsilon'_2[(t_a t_1 - t_2' t_1'')^2 + (t_b t_2' - t_1 t_2'')^2] \\ &+ 2\epsilon_1(t_1' t_2' - t_1^2)[t_1'(t_a^2 + (t_2'')^2) + t_2'(t_b^2 + (t_1'')^2) - 2t_1(t_a t_1'' + t_b t_2'')] \\ &+ 4(t_a t_b - t_1' t_2'')^2(\epsilon_2 t_1' + \epsilon'_2 t_2' - \epsilon_2 \epsilon'_2 - t_1' t_2' + t_1^2) \\ &- t_c^2[2\epsilon_2\epsilon_2' t_1^2 + \epsilon_2^2(t_1')^2 + (\epsilon'_2)^2(t_2'')^2 - (t_1' t_2' - t_1^2)^2], \\ A_1 &= 2\{(\epsilon_1\epsilon_2 + \epsilon_1\epsilon'_2 + \epsilon_2\epsilon'_2)[\epsilon_1\epsilon_2\epsilon'_2 + 2t_1(t_a t_1'' + t_b t_2'')] - \epsilon_1\epsilon_2(t_1')^2(\epsilon_1 + \epsilon_2) \\ &- \epsilon_1\epsilon'_2(t_2'')^2(\epsilon_1 + \epsilon'_2) - \epsilon_2\epsilon_2' t_c^2(\epsilon_2 + \epsilon'_2) - \epsilon_1 t_1^2(\epsilon_1\epsilon_2 + \epsilon_1\epsilon'_2 + 2\epsilon_2\epsilon'_2) \\ &- \epsilon_2(t_b^2 + (t_1'')^2)(\epsilon_1\epsilon_2 + 2\epsilon_1\epsilon'_2 + \epsilon_2\epsilon'_2) - \epsilon'_2(t_a^2 + (t_2'')^2)(2\epsilon_1\epsilon_2 + \epsilon_1\epsilon'_2 + \epsilon_2\epsilon'_2) \\ &+ \epsilon_1(t_1' t_2' - t_1^2)^2 + \epsilon_2 t_1'(t_b^2 + (t_1'')^2)(2\epsilon_1 + \epsilon_2) + \epsilon'_2 t_2'(t_a^2 + (t_2'')^2)(2\epsilon_1 + \epsilon'_2) \\ &+ t_c^2[t_1^2(\epsilon_2 + \epsilon'_2) + \epsilon_2(t_1')^2 + \epsilon'_2(t_2'')^2] + 2(t_a t_b - t_1' t_2'')^2(\epsilon_2 + \epsilon'_2 - t_1' - t_2') \\ &- (t_1' t_2' - t_1^2)[t_1'(t_a^2 + (t_2'')^2) + t_2'(t_b^2 + (t_1'')^2) - 2t_1(t_a t_1'' + t_b t_2'')] \\ &+ (\epsilon_1 + \epsilon_2)[(t_a t_1' - t_1 t_1'')^2 + (t_b t_1 - t_1' t_2'')^2] + (\epsilon_1 + \epsilon'_2)[(t_a t_1 - t_2' t_1'')^2 \\ &+ (t_b t_2' - t_1 t_2'')^2]\}, \\ A_2 &= -\epsilon_1^2\epsilon_2^2 - \epsilon_1^2(\epsilon'_2)^2 - \epsilon_2^2(\epsilon'_2)^2 - 4(\epsilon_1 + \epsilon_2 + \epsilon'_2)[\epsilon_1\epsilon_2\epsilon'_2 + t_1(t_a t_1'' + t_b t_2'')] \\ &+ 2(t_a^2 + (t_2'')^2)[(\epsilon'_2)^2 + 2\epsilon'_2(\epsilon_1 + \epsilon_2) + \epsilon_1\epsilon_2 - t_2'(\epsilon_1 + 2\epsilon'_2)] - (t_1' t_2' - t_1^2)^2 \\ &+ 2(t_b^2 + (t_1'')^2)[\epsilon_2^2 + 2\epsilon_2(\epsilon_1 + \epsilon'_2) + \epsilon_1\epsilon'_2 - t_1'(\epsilon_1 + 2\epsilon_2)] - 4(t_a t_b - t_1' t_2'')^2 \\ &+ (t_1')^2(\epsilon_1^2 + 4\epsilon_1\epsilon_2 + \epsilon_2^2) + (t_2')^2(\epsilon_1^2 + 4\epsilon_1\epsilon'_2 + (\epsilon'_2)^2) + t_c^2(\epsilon_2^2 + 4\epsilon_2\epsilon'_2 + (\epsilon'_2)^2) \\ &- 2t_1^2 - (t_1')^2 - (t_2')^2 + 2t_1^2[\epsilon_1^2 + 2\epsilon_1(\epsilon_2 + \epsilon'_2) + \epsilon_2\epsilon'_2] - 2[(t_a t_1' - t_1 t_1'')^2 \\ &- (t_b t_1 - t_1' t_2'')^2 - (t_a t_1 - t_2' t_1'')^2 - (t_b t_2' - t_1 t_2'')^2], \\ A_3 &= 2\{(\epsilon_1 + \epsilon_2)((\epsilon'_2)^2 - (t_1'')^2) + (\epsilon_1 + \epsilon'_2)(\epsilon_2^2 - (t_2'')^2) + (\epsilon_2 + \epsilon'_2)(\epsilon_1^2 - t_c^2) \\ &+ 4\epsilon_1\epsilon_2\epsilon'_2 - (t_a^2 + (t_2'')^2)(\epsilon_1 + \epsilon_2 + 2\epsilon'_2) - (t_b^2 + (t_1'')^2)(\epsilon_1 + 2\epsilon_2 + \epsilon'_2) \\ &- t_1^2(2\epsilon_1 + \epsilon_2 + \epsilon'_2) + t_1'(t_b^2 + (t_1'')^2) + t_2'(t_a^2 + (t_2'')^2) + 2t_1(t_a t_1'' + t_b t_2'')\}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
A_4 &= -[\epsilon_1^2 + \epsilon_2^2 + (\epsilon_2')^2 + 4(\epsilon_1\epsilon_2 + \epsilon_1\epsilon_2' + \epsilon_2\epsilon_2')] + (t_1')^2 + (t_2')^2 + t_c^2 \\
&\quad + 2(t_a^2 + t_b^2 + t_1^2 + (t_1'')^2 + (t_2'')^2), \\
A_5 &= 2(\epsilon_1 + \epsilon_2 + \epsilon_2'), \\
A_6 &= -1, \\
B_0 &= 4t_c\{\epsilon_2 t_1''(\epsilon_2' t_1^2 + \epsilon_2 (t_1')^2) + t_b t_1''(\epsilon_2 t_1^2 + \epsilon_2' (t_2')^2) - \epsilon_2 \epsilon_2'(\epsilon_2 t_b t_1'' + \epsilon_2' t_a t_2'') \\
&\quad + t_1(t_a t_b + t_1' t_2'')(\epsilon_2 \epsilon_2' - \epsilon_2 t_1' - \epsilon_2' t_2') + \epsilon_2^2 t_b t_1' t_1'' + (\epsilon_2')^2 t_a t_2' t_2'' \\
&\quad + (t_1' t_2' - t_1^2)[t_1(t_a t_b + t_1' t_2'') - t_a t_1' t_2'' - t_b t_2' t_1'']\}, \\
B_1 &= 4t_c[t_a t_2'' \epsilon_2'(2\epsilon_2 + \epsilon_2') + t_b t_1'' \epsilon_2(\epsilon_2 + 2\epsilon_2') - 2(\epsilon_2 t_b t_1' t_1'' + \epsilon_2' t_a t_2' t_2'') \\
&\quad - t_1(t_a t_b + t_1' t_2'')(\epsilon_2 + \epsilon_2' - t_1' - t_2') - t_a t_2''(t_1^2 + (t_1')^2) \\
&\quad - t_b t_1''(t_1^2 + (t_2')^2)], \\
B_2 &= -4t_c[t_a t_2''(\epsilon_2 + 2\epsilon_2') + t_b t_1''(2\epsilon_2 + \epsilon_2') - t_1(t_a t_b + t_1' t_2'') - t_a t_2' t_2'' \\
&\quad - t_b t_1' t_1''], \\
B_3 &= 4t_c(t_a t_2'' + t_b t_1''). \tag{115}
\end{aligned}$$

(114) $E_{\mathbf{k}}$ -ra nézve egy hatodfokú algebrai egyenlet, így az $\epsilon_1, \epsilon_2, \epsilon_2', t_a, t_b, t_1, t_c, t_1', t_2', t_1'', t_2''$ paraméterhalmaz rögzített értékei mellett hat $E_{\mathbf{k},n}$, $n = 1, 2, \dots, 6$, megoldás jön létre. A $\mathbf{ka}$ függvényében kialakuló $E_{\mathbf{k},n}$ megoldásokra vonatkozóan a 13. ábra mutat be egy-egy példát, ahol az a.) rajz a szimmetrizált $\epsilon_2/\epsilon_1 = -2$, $t/\epsilon_1 = 0.9$, $t_1/\epsilon_1 = 1.152$, $t_c/\epsilon_1 = 1$, $t'/\epsilon_1 = 0.7$, $t''/\epsilon_1 = -0.7$ paraméterértékek esetén kialakuló diszperziórelációkat demonstrálja, a b.) rajz pedig a nonszimmetrizált $\epsilon_1/t_1 = -1.3$, $\epsilon_2/t_1 = -4.314$, $\epsilon_2'/t_1 = -5.814$, $t_a/t_1 = t_b/t_1 = -2.5$, $t_c/t_1 = 1.1$, $t_1'/t_1 = t_2'/t_1 = 1.8$, $t_1''/t_1 = t_2''/t_1 = -0.6$ paraméterkészlet által meghatározott megoldásokat szemlélteti. A 13. ábrán minden energia dimenziójú mennyiség az a.) esetben ϵ_1 , a b.) esetben pedig t_1 egységekben van mérve. Mivel $E_{\mathbf{k},n}$ a (114)-ben szereplő, $\cos(\mathbf{ka})$ -t tartalmazó tag következtében a $\mathbf{ka}$ változónak páros függvénye, a diszperziórelációkat elegendő a $\mathbf{ka} \in [0, \pi]$ tartományon megrajzolni. Ahogyan a 13. ábra is példázza, a kibővített paraméterkészlet segítségével kiszámolt nemkölcsonható sávszerkezet a szimmetrizált és a nonszimmetrizált esetekben egyaránt strukturális hasonlóságot mutat a 10.a ábrán vázolt esettel, hiszen a hat sáv közül kettő mindig lapos. Ebből pedig az következik, hogy a 10.a, illetve a 13. ábrák által illusztrált sávszerkezetek fizikailag ugyanazt a képet festik, mivel egymáshoz képest nem hordoznak többlet információt. Így kijelenthető, hogy a paraméterhalmaz kiterjesztése nem módosítja a nemkölcsonható sávszerkezet

alapvető makrokarakterisztikáját.



13. ábra : A rendszer nemkölcsonható sávszerkezete a Hamilton-operátor a.) $\epsilon_2/\epsilon_1 = -2$, $t/\epsilon_1 = 0.9$, $t_1/\epsilon_1 = 1.152$, $t_c/\epsilon_1 = 1$, $t'/\epsilon_1 = 0.7$, $t''/\epsilon_1 = -0.7$, illetve **b.)** $\epsilon_1/t_1 = -1.3$, $\epsilon_2/t_1 = -4.314$, $\epsilon'_2/t_1 = -5.814$, $t_a/t_1 = t_b/t_1 = -2.5$, $t_c/t_1 = 1.1$, $t'_1/t_1 = t'_2/t_1 = 1.8$, $t''_1/t_1 = t''_2/t_1 = -0.6$ értékekre rögzített paramétereinek esetében.

A 6. fejezet eredményeinek rövid összefoglalása

A 6. fejezetben megnöveltem a *polifenilén* típusú láncok fázisterének méretét. A kapott paramágneses és lokalizált alapállapot ugyanis a fázistérnek csak egy keskeny, lineáris tartományán volt érvényes, ezért szükségesnek tartottam megvizsgálni azt, hogy ez a tartomány kiterjeszthető-e egy nagyobb doménre. Ennek érdekében kibővítettem a rendszer induló Hamilton-operátorának paraméterhalmazát, ami által a fentebb említett lineáris sávot sikerült kiszélesítenem egy speciális alakú térfogati zónára. Ezzel igazoltam, hogy a paramágneses és lokalizált alapállapot valójában a fázistérnek egy nagyobb méretű tartományán él. Ez esetben is tanulmányoztam a rendszer nemkölcsonható sávszerkezetét, és megállapítottam, hogy az induló Hamilton-operátor paraméterkészletének bővítése nem módosítja a sávszerkezet lényegi struktúráját. A 6. fejezetben foglalt eredményeim alapját a [247] közlemény képezi.

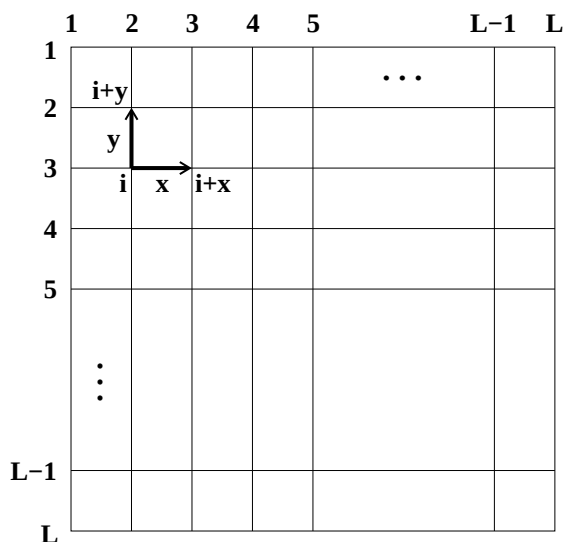
7. fejezet

Kétdimenziós négyzetes ráccsal rendelkező nanoszerkezetek alapállapoti eredményeinek bemutatása

Jól ismert tény, hogy amennyiben egy nemmágneses fématomokból (pl. arany, palládium) felépülő minta méretét nanoskálán mérhető értékre csökkentjük, akkor a minta ferromágneses viselkedésűvé válhat [248-250]. Kutatásaim során arra kerestem a választ, hogy ez a nanotartományban tapasztalható effektus miként jöhet létre, és elméleti szinten, megfelelő matematikai apparátus felhasználásával, megpróbáltam egy lehetséges magyarázatot adni a jelenség mibenlétére. Eredményeimet a következőkben foglalom össze.

7.1. A rendszer Hamilton-operátora

A vizsgált rendszer felépítését vázlatosan a 14. ábra mutatja be. A kétdimenziós rács csomópontjaiban olyan fémes atomok helyezkednek el, amelyeken nincs eredő mágneses momentum.



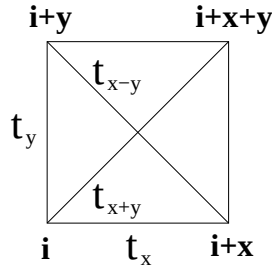
14. ábra : A vizsgált kétdimenziós négyzetes rács sematikus ábrája. Az i csomópontot az x, y Bravais-vektorokkal periodikusan eltolva felépíthető egy $(L \times L)$ méretű rendszer.

Az ábra értelmében az $\mathbf{i}$ csomóponthoz berajzolt $\mathbf{x}$ és $\mathbf{y}$ a rács Bravais-vektorait jelöli a négyzetes struktúra egymásra merőleges irányai mentén. Az $\mathbf{x}, \mathbf{y}$ primitív vektorok által kifeszített, négyzet alakú primitív elemi cella $\mathbf{x}, \mathbf{y}$ irányú periodikus eltolásával tetszőleges méretű rendszer szerkeszthető $(L \times L)$ típusú kompozícióban, így a rendszerben lévő rácscsomópontok számát egyszerűen $N_\Lambda = L \times L = L^2$ adja. L értéke tetszőleges lehet, és annak érdekében, hogy a rendszer peremei ne okozzanak bonyodalmakat a matematikai leírásban, praktikus $\mathbf{x}, \mathbf{y}$ irányú periodikus határfeltételeket alkalmazni. Ennek eredményeképpen a síkban kiterített rácsból egy zárt felület jön létre a térben, ami lényegében egy metallikus szemcsét produkál.

A rendszer Hamilton-operátorát (4) struktúrájának megfelelően a

$$\begin{aligned} \hat{H} = & \sum_{\sigma} \sum_{\mathbf{i}=1}^{N_\Lambda} (t_x \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{x},\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{i},\sigma} + t_y \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{y},\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{i},\sigma} + t_{x+y} \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{x}+\mathbf{y},\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{i},\sigma} \\ & + t_{x-y} \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{x}-\mathbf{y},\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{i},\sigma} + H.c.) + U \sum_{\mathbf{i}=1}^{N_\Lambda} \hat{n}_{\mathbf{i},\sigma} \hat{n}_{\mathbf{i},-\sigma} \end{aligned} \quad (116)$$

kifejezés adja meg, melyben t_x, t_y elsőszomszéd, míg t_{x+y}, t_{x-y} másodszomszéd hoppingokat jelölnek, az U csatolási állandó értéke pedig a rács minden csomópontján azonos. Látható, hogy – a korábbi fejezetek Hamilton-operátoraival ellentétben – a (116) formulában nem vettem figyelembe $\sum_{\sigma} \sum_{\mathbf{i}=1}^{N_\Lambda} \epsilon_{\mathbf{i}} \hat{n}_{\mathbf{i},\sigma}$ alakú, lokális egyrészecske-potenciál jellegű járulékokat. Ennek oka abban keresendő, hogy a rendszert, homogén kémiai összetételéből adódóan, ekvivalens csomópontok alkotják, aminek következtében $\epsilon_{\mathbf{i}}$ minden csomóponton ugyanolyan értéket vesz fel, azaz $\epsilon_{\mathbf{i}} = \epsilon$. Ez pedig ahhoz vezet, hogy a $\sum_{\sigma} \sum_{\mathbf{i}=1}^{N_\Lambda} \epsilon_{\mathbf{i}} \hat{n}_{\mathbf{i},\sigma} = 2N_\Lambda \epsilon$ egyenlőség írható fel, ahol $2N_\Lambda \epsilon$ rögzített méretű rendszer esetén állandónak tekinthető. De tudjuk, hogy egy Hamilton-operátorban additív módon megjelenő konstans nem hordoz valódi fizikai tartalmat, ezért ez esetben az egyrészecske-potenciál típusú járulékok modellszinten vett elhanyagolása jogos.



15. ábra : A (116) Hamilton-operátor paramétereinek szemléltetése.

A (116) Hamilton-operátor paramétereit grafikusán a 15. ábra prezentálja,

ahol nyomon követhető, hogy t_x , illetve t_y az $\mathbf{x}$, illetve $\mathbf{y}$ irányokban történő elektronugrásokat definiálja a négyzetek oldalélei mentén, t_{x+y} , illetve t_{x-y} pedig az $\mathbf{x} + \mathbf{y}$, illetve $\mathbf{x} - \mathbf{y}$ irányok szerinti hoppingokat jelöli a négyzetek átlói mentén.

A kiindulópontok rögzítése után meghatároztam és tanulmányoztam a rendszer alapállapotú jellemzőit, amit a következő szakaszban mutatok be. Az egzakt alapállapot meghatározását a 4.2. alfejezetben taglalt PSZO módszer lépései szerint végeztem el.

7.2. A Hamilton-operátor transzformációja

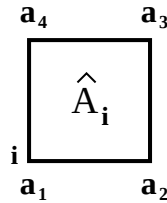
A (116) induló Hamilton-operátort (13) értelmében a

$$\hat{H} = \sum_{\sigma} \sum_{\mathbf{i}=1}^{N_{\Lambda}} \hat{A}_{\mathbf{i},\sigma}^{\dagger} \hat{A}_{\mathbf{i},\sigma} + \hat{H}_U + K \hat{N} \quad (117)$$

kifejezés szerint alakítottam át, ami világosan mutatja, hogy a rendszer minden $\mathbf{i}$ csomópontjához hozzárendelt cellájában egyetlen blokkoperátort definiáltam az

$$\hat{A}_{\mathbf{i},\sigma} = a_1 \hat{c}_{\mathbf{i},\sigma} + a_2 \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{x},\sigma} + a_3 \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{x}+\mathbf{y},\sigma} + a_4 \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{y},\sigma} \quad (118)$$

által megadott alakban. Mivel cellánként egy blokkoperátor szerepel a leírásban, így tekintettel a spinindex két lehetséges értékére, (117) első összegjáruléka $2N_{\Lambda}$ számú blokkoperátort tartalmaz. A (12)-ben bevezetett $\{x_{q,i}^p\}$ halmazt ezúttal (118) $\{a_1, a_2, a_3, a_4\}$ koefficiensei alakítják ki, és a rendszer periodikus szerkezetéből adódóan minden cellát ugyanazon $\{a_1, a_2, a_3, a_4\}$ érték-halmaz jellemez. A rács $\mathbf{i}$ cellájában értelmezett (118) blokkoperátor struktúráját a 16. ábra jeleníti meg, ahol megfigyelhető, hogy a csomóponti koefficiensek számozása a négyzet bal alsó sarkában lévő $\mathbf{i}$ csomópontból kiindulva pozitív körüljárási irány szerint történik.



16. ábra : A (118)-ban megadott blokkoperátor szemléletes rajza a rendszer $\mathbf{i}$ cellájában. Az $\{a_1, a_2, a_3, a_4\}$ koefficiensek az adott csomóponton ható eltüntető operátorhoz tartoznak.

(117) és (116) tagonkénti azonossága nyomán (14) a

$$\begin{aligned}
 t_x &= a_2^* a_1 + a_3^* a_4, \\
 t_y &= a_4^* a_1 + a_3^* a_2, \\
 t_{x+y} &= a_3^* a_1, \\
 t_{x-y} &= a_4^* a_2, \\
 K &= -(|a_1|^2 + |a_2|^2 + |a_3|^2 + |a_4|^2)
 \end{aligned} \tag{119}$$

egyenletrendszer formájában bomlik ki, amely egyértelmű kapcsolatot határoz meg az ismeretlen $\{a_1, a_2, a_3, a_4; K\}$ készlet és a (116) Hamilton-operátor $t_x, t_y, t_{x+y}, t_{x-y}$ paraméterei között. A (119) egyenletrendszernek több különböző megoldása is létezik, most azonban csak az alapállapot hullámfüggvény 7.3. alfejezetben bemutatandó meghatározásához is felhasznált, legegyszerűbb megoldást adom meg, amikor is $t_x = t_y = t_1$, $t_{x+y} = t_{x-y} = t_2$, illetve $a_1 = a_2 = a_3 = a_4 = a$. Ezen homogén és izotróp esetben (119) megoldása alapján a (118) blokkoperátor

$$\hat{A}_{\mathbf{i},\sigma} = \sqrt{t_2} (\hat{c}_{\mathbf{i},\sigma} + \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{x},\sigma} + \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{x}+\mathbf{y},\sigma} + \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{y},\sigma}) \tag{120}$$

alakban áll elő, K értékét pedig a

$$K = -4t_2 \tag{121}$$

kifejezés határozza meg. (119) homogén és izotróp megoldása a

$$t_2 = \frac{t_1}{2}, \quad t_1, t_2 > 0 \tag{122}$$

extra feltételeket generálja, melyek a (15)-ben vetített relációk aktuális formuláit adják, és az alapállapot számára egy nem túl resztriktív D tartományt jelölnek ki a fázistérben.

7.3. Az alapállapot hullámfüggvény meghatározása

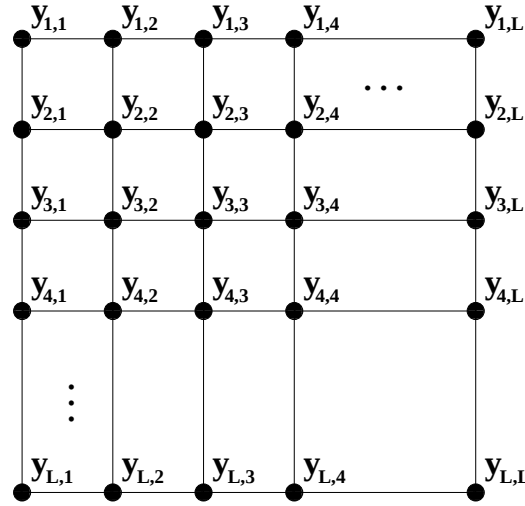
Az alapállapot meghatározásához szükséges induló hullámfüggvényt a (17) formula alapján

$$|\psi\rangle = \prod_m \hat{B}_{m,\sigma_m}^\dagger |0\rangle \tag{123}$$

szerint konstruáltam meg, melyben m értelmezési tartománya egyelőre ismeretlen, és a $\hat{B}_{m,\sigma_m}^\dagger$ operátorokat (18) mintájára a

$$\hat{B}_{m,\sigma_m}^\dagger = \sum_{\mathbf{i}=1}^L \sum_{\mathbf{j}=1}^L y_{\mathbf{i},\mathbf{j}}^m \hat{c}_{(j-1)\mathbf{x}+(i-1)\mathbf{y},\sigma_m}^\dagger \tag{124}$$

szerkezettel írtam fel. A (124) kifejezés $\mathbf{i}$ és $\mathbf{j}$ összegzőindexei az $(L \times L)$ méretű rendszer sor- és oszlopindexeit definiálják. Így az $y_{\mathbf{i},\mathbf{j}}$ faktor a rács $(j-1)\mathbf{x} + (i-1)\mathbf{y}$ pozícióvektorral megjelölt $(\mathbf{i},\mathbf{j})$ csomópontján ható $\hat{c}_{(j-1)\mathbf{x}+(i-1)\mathbf{y},\sigma}^\dagger$ keltő operátor együtthatóját determinálja azzal a kitétel, hogy a $(j-1)\mathbf{x} + (i-1)\mathbf{y}$ vektorok origója az $(\mathbf{i},\mathbf{j}) = (1,1)$ csomópontba (l. 14. ábra) van helyezve. Mivel (124)-ben $\mathbf{i}$ és $\mathbf{j}$ egyaránt az $\{1, 2, 3, \dots, L\}$ értékkészlet elemein fut végig, azaz (124) összege a rács valamennyi csomópontját magába foglalja, így minden $\hat{B}_{m,\sigma_m}^\dagger$ operátor kiterjedt szerkezettel rendelkezik. A (124)-ben megadott $\hat{B}_{m,\sigma_m}^\dagger$ struktúráját illetően a 17. ábra segíti az eligazodást, amely az egyes csomópontokhoz tartozó $y_{\mathbf{i},\mathbf{j}}$ együtthatók indexelését szemlélteti.



17. ábra : A (124) $\hat{B}_{m,\sigma_m}^\dagger$ operátor kiterjedt szerkezetének szemléltetése az egyes csomópontokon ható keltő operátorok $y_{\mathbf{i},\mathbf{j}}$ koefficienseinek megjelölésével.

A (124) konstrukció eleget tesz az általánosság kritériumának, hiszen a rács minden csomópontját figyelembe veszi anélkül, hogy bármelyik csomópontnak kitüntetett szerepe lenne. Így a kiinduló formulák szintjén nem jelenik meg olyan specializáció, ami eleve sértené a leírás általánosságát.

(124) $y_{\mathbf{i},\mathbf{j}}$ koefficienseinek kiszámításához a (21.a)-ban foglalt antikommutációs relációkat használtam fel. (118) és (124) helyettesítésével (21.a) az

$$\{\hat{A}_{\mathbf{i},\sigma}, \hat{B}_{m,\sigma_m}^\dagger\} = 0 \quad (125)$$

formában kezelendő, melynek minden $\mathbf{i}$, m , σ és σ_m indexre teljesülnie kell. Rögzített m index esetén a (125) által előírt egyenletek számát az $\mathbf{i}$ index lehetséges értékei definiálják. Mivel az $N_\Lambda = L^2$ csomópontot tartalmazó rács minden egyes csomópontjához egyetlen $\hat{A}_{\mathbf{i},\sigma}$ operátor van

hozzárendelve, az $\mathbf{i}$ index az $\{1, 2, 3, \dots, L^2\}$ készletből veheti fel az értékeit. Következésképpen, rögzített σ index esetén, összesen L^2 számú $\hat{A}_{\mathbf{i},\sigma}$ operátor van jelen a rendszerben, tehát (125) L^2 darab egyenletet foglal magába, fixen tartott m és σ mellett. Ezen L^2 egyenlet felírásakor a rács $n = 1, 2, 3, \dots, L$ sorindexe szerint rendeztem tömbökbe az egyenleteket, azaz L darab tömböt hoztam létre oly módon, hogy egy adott tömb a rács egy adott sorában lévő $\hat{A}_{\mathbf{i},\sigma}$ operátorokkal felírt (125) antikommutációs relációkat gyűjti össze. Mivel minden sorban L darab $\hat{A}_{\mathbf{i},\sigma}$ operátor helyezhető el, minden tömböt L számú egyenlet alkot. Például a rendszer n -edik sorára vonatkozó (125) antikommutációs relációk a

$$\begin{aligned}
0 &= a_1 y_{n,1}^m + a_2 y_{n,2}^m + a_3 y_{n-1,2}^m + a_4 y_{n-1,1}^m, \\
0 &= a_1 y_{n,2}^m + a_2 y_{n,3}^m + a_3 y_{n-1,3}^m + a_4 y_{n-1,2}^m, \\
0 &= a_1 y_{n,3}^m + a_2 y_{n,4}^m + a_3 y_{n-1,4}^m + a_4 y_{n-1,3}^m, \\
0 &= a_1 y_{n,4}^m + a_2 y_{n,5}^m + a_3 y_{n-1,5}^m + a_4 y_{n-1,4}^m, \\
&\vdots \\
0 &= a_1 y_{n,L}^m + a_2 y_{n,1}^m + a_3 y_{n-1,1}^m + a_4 y_{n-1,L}^m
\end{aligned} \tag{126}$$

tömböt alakítják ki, melyben m rögzített, n pedig az $1, 2, 3, \dots, L$ halmazon fut végig, így a fentebbiek értelmében (126) L^2 egyenletet foglal magába. (126) tehát azon egyenletrendszerek kategóriájába sorolható, melyek méretét a vizsgált rendszer nagysága szabja meg, ezért (126) csak az L rendszerméret véges értékű rögzítésével zárulhat és válhat matematikailag kezelhetővé. Ez azonban nem jelenti azt, hogy kizárólag véges rendszerekre nyerhetünk információt, hiszen a (126) típusú egyenletrendszerek kis véges L rendszerméret esetén adódó megoldása általában kiterjeszthető tetszőleges nagyságú L értékekre is, biztosítva ezzel a termodinamikai határeset megvalósításának lehetőségét. Ezt az irányvonalat követve, kiindulásképpen egy (6×6) méretű rácsot vizsgáltam meg, azaz (126) egyenleteit $L = 6$ szerint írtam fel, és a kapott eredményeket tetszőlegesen nagy L értékekre is általánosítottam.

$L = 6$ esetén a (126) egyenletrendszer 36 egyenletet tartalmaz, melyek hatosával a

$$\begin{aligned}
0 &= a_1 y_{n,1}^1 + a_2 y_{n,2}^1 + a_3 y_{n-1,2}^1 + a_4 y_{n-1,1}^1, \\
0 &= a_1 y_{n,2}^1 + a_2 y_{n,3}^1 + a_3 y_{n-1,3}^1 + a_4 y_{n-1,2}^1, \\
0 &= a_1 y_{n,3}^1 + a_2 y_{n,4}^1 + a_3 y_{n-1,4}^1 + a_4 y_{n-1,3}^1, \\
0 &= a_1 y_{n,4}^1 + a_2 y_{n,5}^1 + a_3 y_{n-1,5}^1 + a_4 y_{n-1,4}^1, \\
0 &= a_1 y_{n,5}^1 + a_2 y_{n,6}^1 + a_3 y_{n-1,6}^1 + a_4 y_{n-1,5}^1, \\
0 &= a_1 y_{n,6}^1 + a_2 y_{n,1}^1 + a_3 y_{n-1,1}^1 + a_4 y_{n-1,6}^1
\end{aligned} \tag{127}$$

tömböknek megfelelően tagolódnak. (127) az $n = 1, 2, \dots, 6$ értékek folytán összesen hat tömböt foglal magába, és ahogy látható, az m indexet $m = 1$ szerint rögzítettem, kijelölve ezzel a levezetendő $\hat{B}_{1,\sigma_1}^\dagger$ operátort, melyet (124) értelmében, $L = 6$ figyelembevételével a

$$\hat{B}_{1,\sigma_1}^\dagger = \sum_{i=1}^6 \sum_{j=1}^6 y_{i,j}^1 \hat{c}_{(j-1)\mathbf{x}+(i-1)\mathbf{y},\sigma_1}^\dagger \quad (128)$$

struktúra definiál. Az $\hat{A}_{i,\sigma}$ operátorok $\{a_1, a_2, a_3, a_4\}$ együtthatóira vonatkozó, (120)-ban foglalt homogén és izotróp $a_1 = a_2 = a_3 = a_4 = \sqrt{t_2}$ megoldást felhasználva, (127) tömbjei a

$$\begin{aligned} 0 &= y_{n,1}^1 + y_{n,2}^1 + y_{n-1,2}^1 + y_{n-1,1}^1, \\ 0 &= y_{n,2}^1 + y_{n,3}^1 + y_{n-1,3}^1 + y_{n-1,2}^1, \\ 0 &= y_{n,3}^1 + y_{n,4}^1 + y_{n-1,4}^1 + y_{n-1,3}^1, \\ 0 &= y_{n,4}^1 + y_{n,5}^1 + y_{n-1,5}^1 + y_{n-1,4}^1, \\ 0 &= y_{n,5}^1 + y_{n,6}^1 + y_{n-1,6}^1 + y_{n-1,5}^1, \\ 0 &= y_{n,6}^1 + y_{n,1}^1 + y_{n-1,1}^1 + y_{n-1,6}^1 \end{aligned} \quad (129)$$

egyenleteknek megfelelően egyszerűsödnek, ahol $n = 1, 2, \dots, 6$. A (129) egyenletrendszer legegyszerűbb megoldástípusait az

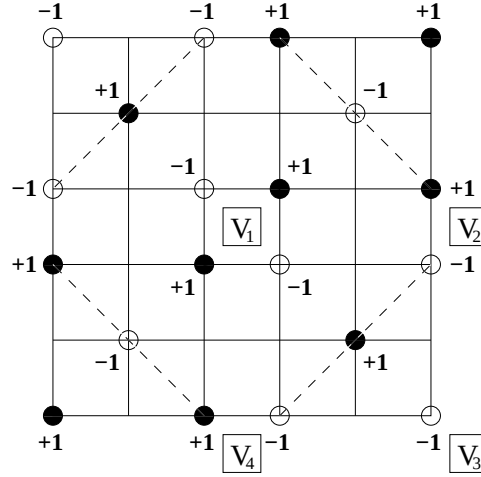
$$\begin{aligned} y_{1,2}^1 &= y_{1,5}^1 = y_{2,1}^1 = y_{2,3}^1 = y_{2,4}^1 = y_{2,6}^1 = y_{3,2}^1 = y_{3,5}^1 = \\ y_{4,2}^1 &= y_{4,5}^1 = y_{5,1}^1 = y_{5,3}^1 = y_{5,4}^1 = y_{5,6}^1 = y_{6,2}^1 = y_{6,5}^1 = 0, \\ y_{1,4}^1 &= y_{1,6}^1 = y_{2,2}^1 = y_{3,4}^1 = y_{3,6}^1 = \\ y_{4,1}^1 &= y_{4,3}^1 = y_{5,5}^1 = y_{6,1}^1 = y_{6,3}^1 = 1, \\ y_{1,1}^1 &= y_{1,3}^1 = y_{2,5}^1 = y_{3,1}^1 = y_{3,3}^1 = \\ y_{4,4}^1 &= y_{4,6}^1 = y_{5,2}^1 = y_{6,4}^1 = y_{6,6}^1 = -1 \end{aligned} \quad (130)$$

értékek adják, így (130) és (128) alapján a $\hat{B}_{1,\sigma_1}^\dagger$ operátor tagjai a

$$\begin{aligned} \hat{B}_{1,\sigma_1}^\dagger &= -\hat{c}_{0,\sigma_1}^\dagger - \hat{c}_{2\mathbf{x},\sigma_1}^\dagger + \hat{c}_{3\mathbf{x},\sigma_1}^\dagger + \hat{c}_{5\mathbf{x},\sigma_1}^\dagger + \hat{c}_{\mathbf{x}+\mathbf{y},\sigma_1}^\dagger - \hat{c}_{4\mathbf{x}+\mathbf{y},\sigma_1}^\dagger \\ &- \hat{c}_{2\mathbf{y},\sigma_1}^\dagger - \hat{c}_{2\mathbf{x}+2\mathbf{y},\sigma_1}^\dagger + \hat{c}_{3\mathbf{x}+2\mathbf{y},\sigma_1}^\dagger + \hat{c}_{5\mathbf{x}+2\mathbf{y},\sigma_1}^\dagger + \hat{c}_{3\mathbf{y},\sigma_1}^\dagger \\ &+ \hat{c}_{2\mathbf{x}+3\mathbf{y},\sigma_1}^\dagger - \hat{c}_{3\mathbf{x}+3\mathbf{y},\sigma_1}^\dagger - \hat{c}_{5\mathbf{x}+3\mathbf{y},\sigma_1}^\dagger - \hat{c}_{\mathbf{x}+4\mathbf{y},\sigma_1}^\dagger + \hat{c}_{4\mathbf{x}+4\mathbf{y},\sigma_1}^\dagger \\ &+ \hat{c}_{5\mathbf{y},\sigma_1}^\dagger + \hat{c}_{2\mathbf{x}+5\mathbf{y},\sigma_1}^\dagger - \hat{c}_{3\mathbf{x}+5\mathbf{y},\sigma_1}^\dagger - \hat{c}_{5\mathbf{x}+5\mathbf{y},\sigma_1}^\dagger \end{aligned} \quad (131)$$

kifejezés szerint alakulnak ki. A (131) $\hat{B}_{1,\sigma_1}^\dagger$ operátor felépítését a 18. ábra illusztrálja a megfelelő csomóponti koefficiensek $+1$, illetve -1 értékeinek

feltüntetésével, melyek fekete, illetve fehér pontokkal vannak megjelölve. Az ábra rendkívül szemléletes, hiszen jelentősen megkönnyíti annak felismerését, hogy a $\hat{B}_{1,\sigma_1}^\dagger$ operátor vortexes szerkezettel rendelkezik, ami a berajzolt szaggatott vonalak mentén alakul ki. Az $\mathbf{x}, \mathbf{y}$ irányú periodikus határfeltételek alkalmazása folytán négy ekvivalens vortexcentrum jön létre, melyeket a V_1, V_2, V_3, V_4 jelzésekkel ellátott négyzetek reprezentálnak.



18. ábra : A (131) $\hat{B}_{1,\sigma_1}^\dagger$ operátor vortexes szerkezetének szemléltetése a releváns csomóponti koefficiensek megjelölésével. V_1, V_2, V_3, V_4 az operátor négy ekvivalens vortexcentrumát képezi.

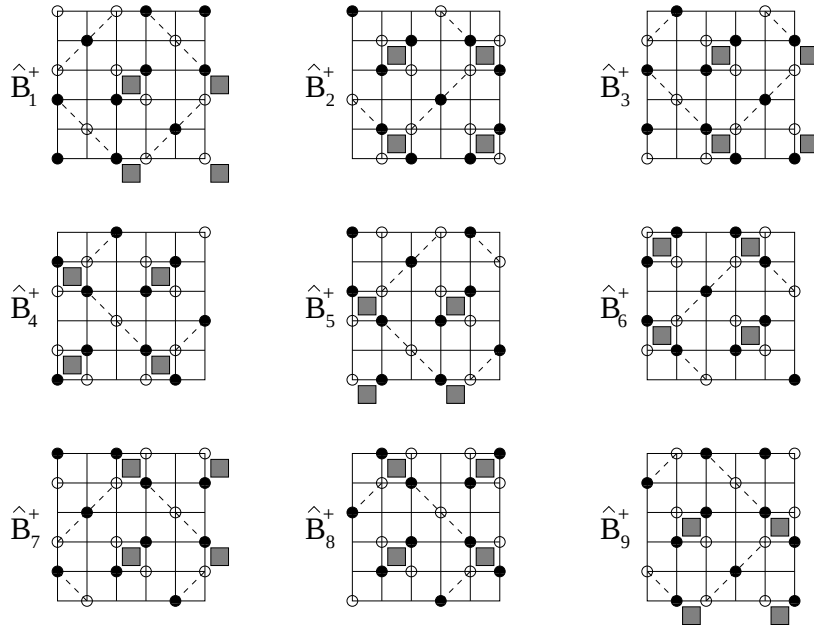
A vortexcentrumok jelenléte roppant hasznos, mivel rácsbeli pozíciójuk változtatásával további $\hat{B}_{m,\sigma_m}^\dagger$, $m = 2, 3, 4, \dots$, operátorok forrásai lehetnek, melyek beépülve (123) produktumába, egy valódi sokrészecskes jellemzés irányába terelhetik a leírást. Észre kell vennünk azonban, hogy a négy vortexcentrum egymáshoz viszonyított elhelyezkedése rögzített, ugyanis csak ennek biztosításával maradhat meg az operátorok vortexes jellege. V_1, V_2, V_3, V_4 tehát nem mozgatható egymástól függetlenül, így például V_1 elmozdításakor egy tömbként váltanak pozíciót a rácsban. Mivel minden vortexközéppont gyakorlatilag egy adott csomópont (pl. a vortexcentrum bal alsó sarkában lévő csomópont)hoz van hozzárendelve a rácsban, minden $\hat{B}_{m,\sigma_m}^\dagger$, $m = 1, 2, 3, \dots$, operátorhoz négy vortexcsomópont tartozik. Ezért a rendszert alkotó N_Λ csomópontnak effektíve a negyede szolgálhat új $\hat{B}_{m,\sigma_m}^\dagger$ operátorok megszerkesztésére, azaz összesen $N_\Lambda/4$ számú $\hat{B}_{m,\sigma_m}^\dagger$ értelmezhető a rendszerben. Ez azt jelenti, hogy a vizsgált (6×6) méretű, $N_\Lambda = 36$ csomópontot tartalmazó rácsban 9 $\hat{B}_{m,\sigma_m}^\dagger$ operátor definiálható. Ahhoz, hogy a kilenc operátor egyértelműen meghatározható és megkülönböztethető legyen, célszerű az együtt mozgó négy vortexcentrum közül egyre fókuszálni, és a kiválasztott vortexközéppont lehetséges pozícióváltásait nyo-

mon követni a rácsban. Ennek megfelelően a V_1 centrumra esett a választásom, melynek lehetséges pozícióit a 19. ábra 1-től 9-ig számozott cellái jelölik ki. Ha ugyanis V_1 a számozott tartományon kívül eső cellákra is centrálódhatna, akkor olyan $\hat{B}_{m,\sigma_m}^\dagger$ vortexek állnának elő, melyek nem képeznek új operátorokat.

	2	3	4	
	9	1	5	
	8	7	6	

19. ábra : A V_1 centrum lehetséges pozícióit jelölő cellák számozása.

A 19. ábra 1, 2, 3, ..., 9 számozású celláira centrált $\hat{B}_{1,\sigma_1}^\dagger, \hat{B}_{2,\sigma_2}^\dagger, \hat{B}_{3,\sigma_3}^\dagger, \dots, \hat{B}_{9,\sigma_9}^\dagger$ operátorok vortexeit a 20. ábra összesíti, ahol folyamatában is végigkövethető, hogy a 18. ábrán is vázolt $\hat{B}_{1,\sigma_1}^\dagger$ vortexből kiindulva, a V_1 centrum 1, 2, 3, ..., 9 sorrendű tologatásával hogyan képződnek az új $\hat{B}_{2,\sigma_2}^\dagger, \hat{B}_{3,\sigma_3}^\dagger, \dots, \hat{B}_{9,\sigma_9}^\dagger$ operátorok. A 20. ábra vortexcentrumait szürke négyzetek jelölik, és a 18. ábrával összhangban, a fekete csomópontok együtthatója $+1$, míg a fehéré -1 értékű.



20. ábra : A $\hat{B}_{m,\sigma_m}^\dagger$, $m = 1, 2, 3, \dots, 9$, operátorok vortexeinek szemléltetése egy (6×6) -os rácsban. A vortexcentrumokat szürke négyzetek jelölik.

A 20. ábra $\hat{B}_{1,\sigma_1}^\dagger$ operátorát matematikailag (131) értelmezi, az újonnan megrajzolt $\hat{B}_{2,\sigma_2}^\dagger, \hat{B}_{3,\sigma_3}^\dagger, \dots, \hat{B}_{9,\sigma_9}^\dagger$ operátorok kifejezéseit pedig a

$$\begin{aligned}\hat{B}_{2,\sigma_2}^\dagger &= \hat{c}_{0,\sigma_2}^\dagger - \hat{c}_{3\mathbf{x},\sigma_2}^\dagger - \hat{c}_{\mathbf{x}+\mathbf{y},\sigma_2}^\dagger + \hat{c}_{2\mathbf{x}+\mathbf{y},\sigma_2}^\dagger + \hat{c}_{4\mathbf{x}+\mathbf{y},\sigma_2}^\dagger - \hat{c}_{5\mathbf{x}+\mathbf{y},\sigma_2}^\dagger \\ &+ \hat{c}_{\mathbf{x}+2\mathbf{y},\sigma_2}^\dagger - \hat{c}_{2\mathbf{x}+2\mathbf{y},\sigma_2}^\dagger - \hat{c}_{4\mathbf{x}+2\mathbf{y},\sigma_2}^\dagger + \hat{c}_{5\mathbf{x}+2\mathbf{y},\sigma_2}^\dagger - \hat{c}_{3\mathbf{y},\sigma_2}^\dagger \\ &+ \hat{c}_{3\mathbf{x}+3\mathbf{y},\sigma_2}^\dagger + \hat{c}_{\mathbf{x}+4\mathbf{y},\sigma_2}^\dagger - \hat{c}_{2\mathbf{x}+4\mathbf{y},\sigma_2}^\dagger - \hat{c}_{4\mathbf{x}+4\mathbf{y},\sigma_2}^\dagger + \hat{c}_{5\mathbf{x}+4\mathbf{y},\sigma_2}^\dagger \\ &- \hat{c}_{\mathbf{x}+5\mathbf{y},\sigma_2}^\dagger + \hat{c}_{2\mathbf{x}+5\mathbf{y},\sigma_2}^\dagger + \hat{c}_{4\mathbf{x}+5\mathbf{y},\sigma_2}^\dagger - \hat{c}_{5\mathbf{x}+5\mathbf{y},\sigma_2}^\dagger,\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\hat{B}_{3,\sigma_3}^\dagger &= \hat{c}_{\mathbf{x},\sigma_3}^\dagger - \hat{c}_{4\mathbf{x},\sigma_3}^\dagger - \hat{c}_{\mathbf{y},\sigma_3}^\dagger - \hat{c}_{2\mathbf{x}+\mathbf{y},\sigma_3}^\dagger + \hat{c}_{3\mathbf{x}+\mathbf{y},\sigma_3}^\dagger + \hat{c}_{5\mathbf{x}+\mathbf{y},\sigma_3}^\dagger \\ &+ \hat{c}_{2\mathbf{y},\sigma_3}^\dagger + \hat{c}_{2\mathbf{x}+2\mathbf{y},\sigma_3}^\dagger - \hat{c}_{3\mathbf{x}+2\mathbf{y},\sigma_3}^\dagger - \hat{c}_{5\mathbf{x}+2\mathbf{y},\sigma_3}^\dagger - \hat{c}_{\mathbf{x}+3\mathbf{y},\sigma_3}^\dagger \\ &+ \hat{c}_{4\mathbf{x}+3\mathbf{y},\sigma_3}^\dagger + \hat{c}_{4\mathbf{y},\sigma_3}^\dagger + \hat{c}_{2\mathbf{x}+4\mathbf{y},\sigma_3}^\dagger - \hat{c}_{3\mathbf{x}+4\mathbf{y},\sigma_3}^\dagger - \hat{c}_{5\mathbf{x}+4\mathbf{y},\sigma_3}^\dagger \\ &- \hat{c}_{5\mathbf{y},\sigma_3}^\dagger - \hat{c}_{2\mathbf{x}+5\mathbf{y},\sigma_3}^\dagger + \hat{c}_{3\mathbf{x}+5\mathbf{y},\sigma_3}^\dagger + \hat{c}_{5\mathbf{x}+5\mathbf{y},\sigma_3}^\dagger,\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\hat{B}_{4,\sigma_4}^\dagger &= \hat{c}_{2\mathbf{x},\sigma_4}^\dagger - \hat{c}_{5\mathbf{x},\sigma_4}^\dagger + \hat{c}_{\mathbf{y},\sigma_4}^\dagger - \hat{c}_{\mathbf{x}+\mathbf{y},\sigma_4}^\dagger - \hat{c}_{3\mathbf{x}+\mathbf{y},\sigma_4}^\dagger + \hat{c}_{4\mathbf{x}+\mathbf{y},\sigma_4}^\dagger \\ &- \hat{c}_{2\mathbf{y},\sigma_4}^\dagger + \hat{c}_{\mathbf{x}+2\mathbf{y},\sigma_4}^\dagger + \hat{c}_{3\mathbf{x}+2\mathbf{y},\sigma_4}^\dagger - \hat{c}_{4\mathbf{x}+2\mathbf{y},\sigma_4}^\dagger - \hat{c}_{2\mathbf{x}+3\mathbf{y},\sigma_4}^\dagger \\ &+ \hat{c}_{5\mathbf{x}+3\mathbf{y},\sigma_4}^\dagger - \hat{c}_{4\mathbf{y},\sigma_4}^\dagger + \hat{c}_{\mathbf{x}+4\mathbf{y},\sigma_4}^\dagger + \hat{c}_{3\mathbf{x}+4\mathbf{y},\sigma_4}^\dagger - \hat{c}_{4\mathbf{x}+4\mathbf{y},\sigma_4}^\dagger \\ &+ \hat{c}_{5\mathbf{y},\sigma_4}^\dagger - \hat{c}_{\mathbf{x}+5\mathbf{y},\sigma_4}^\dagger - \hat{c}_{3\mathbf{x}+5\mathbf{y},\sigma_4}^\dagger + \hat{c}_{4\mathbf{x}+5\mathbf{y},\sigma_4}^\dagger,\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\hat{B}_{5,\sigma_5}^\dagger &= \hat{c}_{0,\sigma_5}^\dagger - \hat{c}_{\mathbf{x},\sigma_5}^\dagger - \hat{c}_{3\mathbf{x},\sigma_5}^\dagger + \hat{c}_{4\mathbf{x},\sigma_5}^\dagger + \hat{c}_{2\mathbf{x}+\mathbf{y},\sigma_5}^\dagger - \hat{c}_{5\mathbf{x}+\mathbf{y},\sigma_5}^\dagger \\ &+ \hat{c}_{2\mathbf{y},\sigma_5}^\dagger - \hat{c}_{\mathbf{x}+2\mathbf{y},\sigma_5}^\dagger - \hat{c}_{3\mathbf{x}+2\mathbf{y},\sigma_5}^\dagger + \hat{c}_{4\mathbf{x}+2\mathbf{y},\sigma_5}^\dagger - \hat{c}_{3\mathbf{y},\sigma_5}^\dagger \\ &+ \hat{c}_{\mathbf{x}+3\mathbf{y},\sigma_5}^\dagger + \hat{c}_{3\mathbf{x}+3\mathbf{y},\sigma_5}^\dagger - \hat{c}_{4\mathbf{x}+3\mathbf{y},\sigma_5}^\dagger - \hat{c}_{2\mathbf{x}+4\mathbf{y},\sigma_5}^\dagger + \hat{c}_{5\mathbf{x}+4\mathbf{y},\sigma_5}^\dagger \\ &- \hat{c}_{5\mathbf{y},\sigma_5}^\dagger + \hat{c}_{\mathbf{x}+5\mathbf{y},\sigma_5}^\dagger + \hat{c}_{3\mathbf{x}+5\mathbf{y},\sigma_5}^\dagger - \hat{c}_{4\mathbf{x}+5\mathbf{y},\sigma_5}^\dagger,\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\hat{B}_{6,\sigma_6}^\dagger &= -\hat{c}_{0,\sigma_6}^\dagger + \hat{c}_{\mathbf{x},\sigma_6}^\dagger + \hat{c}_{3\mathbf{x},\sigma_6}^\dagger - \hat{c}_{4\mathbf{x},\sigma_6}^\dagger + \hat{c}_{\mathbf{y},\sigma_6}^\dagger - \hat{c}_{\mathbf{x}+\mathbf{y},\sigma_6}^\dagger \\ &- \hat{c}_{3\mathbf{x}+\mathbf{y},\sigma_6}^\dagger + \hat{c}_{4\mathbf{x}+\mathbf{y},\sigma_6}^\dagger + \hat{c}_{2\mathbf{x}+2\mathbf{y},\sigma_6}^\dagger - \hat{c}_{5\mathbf{x}+2\mathbf{y},\sigma_6}^\dagger + \hat{c}_{3\mathbf{y},\sigma_6}^\dagger \\ &- \hat{c}_{\mathbf{x}+3\mathbf{y},\sigma_6}^\dagger - \hat{c}_{3\mathbf{x}+3\mathbf{y},\sigma_6}^\dagger + \hat{c}_{4\mathbf{x}+3\mathbf{y},\sigma_6}^\dagger - \hat{c}_{4\mathbf{y},\sigma_6}^\dagger + \hat{c}_{\mathbf{x}+4\mathbf{y},\sigma_6}^\dagger \\ &+ \hat{c}_{3\mathbf{x}+4\mathbf{y},\sigma_6}^\dagger - \hat{c}_{4\mathbf{x}+4\mathbf{y},\sigma_6}^\dagger - \hat{c}_{2\mathbf{x}+5\mathbf{y},\sigma_6}^\dagger + \hat{c}_{5\mathbf{x}+5\mathbf{y},\sigma_6}^\dagger,\end{aligned}$$

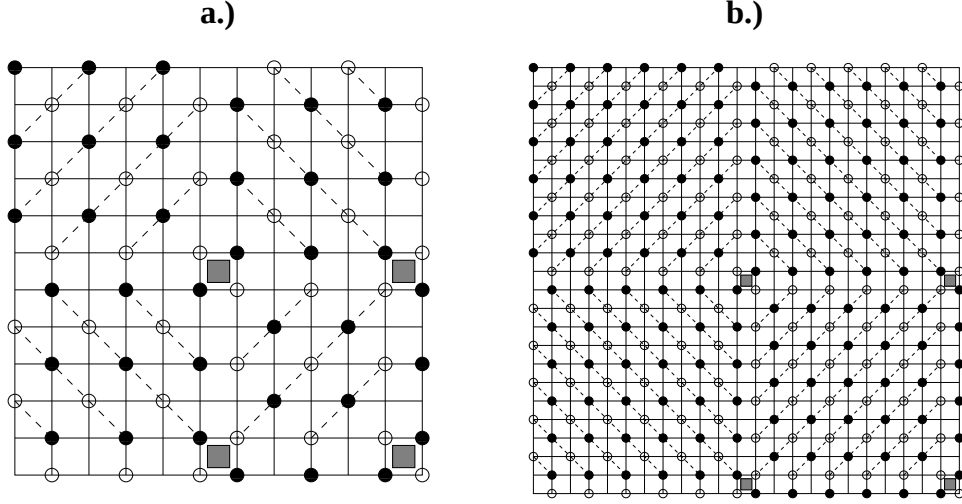
$$\begin{aligned}\hat{B}_{7,\sigma_7}^\dagger &= \hat{c}_{0,\sigma_7}^\dagger + \hat{c}_{2\mathbf{x},\sigma_7}^\dagger - \hat{c}_{3\mathbf{x},\sigma_7}^\dagger - \hat{c}_{5\mathbf{x},\sigma_7}^\dagger - \hat{c}_{\mathbf{y},\sigma_7}^\dagger - \hat{c}_{2\mathbf{x}+\mathbf{y},\sigma_7}^\dagger \\ &+ \hat{c}_{3\mathbf{x}+\mathbf{y},\sigma_7}^\dagger + \hat{c}_{5\mathbf{x}+\mathbf{y},\sigma_7}^\dagger + \hat{c}_{\mathbf{x}+2\mathbf{y},\sigma_7}^\dagger - \hat{c}_{4\mathbf{x}+2\mathbf{y},\sigma_7}^\dagger - \hat{c}_{3\mathbf{y},\sigma_7}^\dagger \\ &- \hat{c}_{2\mathbf{x}+3\mathbf{y},\sigma_7}^\dagger + \hat{c}_{3\mathbf{x}+3\mathbf{y},\sigma_7}^\dagger + \hat{c}_{5\mathbf{x}+3\mathbf{y},\sigma_7}^\dagger + \hat{c}_{4\mathbf{y},\sigma_7}^\dagger + \hat{c}_{2\mathbf{x}+4\mathbf{y},\sigma_7}^\dagger \\ &- \hat{c}_{3\mathbf{x}+4\mathbf{y},\sigma_7}^\dagger - \hat{c}_{5\mathbf{x}+4\mathbf{y},\sigma_7}^\dagger - \hat{c}_{\mathbf{x}+5\mathbf{y},\sigma_7}^\dagger + \hat{c}_{4\mathbf{x}+5\mathbf{y},\sigma_7}^\dagger,\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\hat{B}_{8,\sigma_8}^\dagger &= \hat{c}_{\mathbf{x},\sigma_8}^\dagger - \hat{c}_{2\mathbf{x},\sigma_8}^\dagger - \hat{c}_{4\mathbf{x},\sigma_8}^\dagger + \hat{c}_{5\mathbf{x},\sigma_8}^\dagger - \hat{c}_{\mathbf{x}+\mathbf{y},\sigma_8}^\dagger + \hat{c}_{2\mathbf{x}+\mathbf{y},\sigma_8}^\dagger \\
&+ \hat{c}_{4\mathbf{x}+\mathbf{y},\sigma_8}^\dagger - \hat{c}_{5\mathbf{x}+\mathbf{y},\sigma_8}^\dagger + \hat{c}_{2\mathbf{y},\sigma_8}^\dagger - \hat{c}_{3\mathbf{x}+2\mathbf{y},\sigma_8}^\dagger - \hat{c}_{\mathbf{x}+3\mathbf{y},\sigma_8}^\dagger \\
&+ \hat{c}_{2\mathbf{x}+3\mathbf{y},\sigma_8}^\dagger + \hat{c}_{4\mathbf{x}+3\mathbf{y},\sigma_8}^\dagger - \hat{c}_{5\mathbf{x}+3\mathbf{y},\sigma_8}^\dagger + \hat{c}_{\mathbf{x}+4\mathbf{y},\sigma_8}^\dagger - \hat{c}_{2\mathbf{x}+4\mathbf{y},\sigma_8}^\dagger \\
&- \hat{c}_{4\mathbf{x}+4\mathbf{y},\sigma_8}^\dagger + \hat{c}_{5\mathbf{x}+4\mathbf{y},\sigma_8}^\dagger - \hat{c}_{5\mathbf{y},\sigma_8}^\dagger + \hat{c}_{3\mathbf{x}+5\mathbf{y},\sigma_8}^\dagger, \\
\hat{B}_{9,\sigma_9}^\dagger &= -\hat{c}_{\mathbf{x},\sigma_9}^\dagger + \hat{c}_{2\mathbf{x},\sigma_9}^\dagger + \hat{c}_{4\mathbf{x},\sigma_9}^\dagger - \hat{c}_{5\mathbf{x},\sigma_9}^\dagger + \hat{c}_{\mathbf{y},\sigma_9}^\dagger - \hat{c}_{3\mathbf{x}+\mathbf{y},\sigma_9}^\dagger \\
&- \hat{c}_{\mathbf{x}+2\mathbf{y},\sigma_9}^\dagger + \hat{c}_{2\mathbf{x}+2\mathbf{y},\sigma_9}^\dagger + \hat{c}_{4\mathbf{x}+2\mathbf{y},\sigma_9}^\dagger - \hat{c}_{5\mathbf{x}+2\mathbf{y},\sigma_9}^\dagger + \hat{c}_{\mathbf{x}+3\mathbf{y},\sigma_9}^\dagger \\
&- \hat{c}_{2\mathbf{x}+3\mathbf{y},\sigma_9}^\dagger - \hat{c}_{4\mathbf{x}+3\mathbf{y},\sigma_9}^\dagger + \hat{c}_{5\mathbf{x}+3\mathbf{y},\sigma_9}^\dagger - \hat{c}_{4\mathbf{y},\sigma_9}^\dagger + \hat{c}_{3\mathbf{x}+4\mathbf{y},\sigma_9}^\dagger \\
&+ \hat{c}_{\mathbf{x}+5\mathbf{y},\sigma_9}^\dagger - \hat{c}_{2\mathbf{x}+5\mathbf{y},\sigma_9}^\dagger - \hat{c}_{4\mathbf{x}+5\mathbf{y},\sigma_9}^\dagger + \hat{c}_{5\mathbf{x}+5\mathbf{y},\sigma_9}^\dagger \quad (132)
\end{aligned}$$

formulák adják meg. További elemzésekkel megmutattam, hogy a (131-132)-ben foglalt operátorok közül valójában csak a $\hat{B}_{1,\sigma_1}^\dagger, \hat{B}_{2,\sigma_2}^\dagger, \hat{B}_{3,\sigma_3}^\dagger, \hat{B}_{4,\sigma_4}^\dagger, \hat{B}_{6,\sigma_6}^\dagger$ tekinthető lineárisan függetlennek, mivel a $\hat{B}_{5,\sigma_5}^\dagger, \hat{B}_{7,\sigma_7}^\dagger, \hat{B}_{8,\sigma_8}^\dagger, \hat{B}_{9,\sigma_9}^\dagger$ operátorok a $\hat{B}_{1,\sigma_1}^\dagger, \hat{B}_{2,\sigma_2}^\dagger, \hat{B}_{3,\sigma_3}^\dagger, \hat{B}_{4,\sigma_4}^\dagger, \hat{B}_{6,\sigma_6}^\dagger$ vortexek lineáris kombinációjaként előállíthatók a $\hat{B}_{5,\sigma_5}^\dagger = -\hat{B}_{1,\sigma_1}^\dagger - \hat{B}_{3,\sigma_3}^\dagger - \hat{B}_{4,\sigma_4}^\dagger$, $\hat{B}_{7,\sigma_7}^\dagger = \hat{B}_{3,\sigma_3}^\dagger + \hat{B}_{4,\sigma_4}^\dagger - \hat{B}_{6,\sigma_6}^\dagger$, $\hat{B}_{8,\sigma_8}^\dagger = \hat{B}_{2,\sigma_2}^\dagger - \hat{B}_{4,\sigma_4}^\dagger + \hat{B}_{6,\sigma_6}^\dagger$, $\hat{B}_{9,\sigma_9}^\dagger = -\hat{B}_{1,\sigma_1}^\dagger - \hat{B}_{2,\sigma_2}^\dagger - \hat{B}_{3,\sigma_3}^\dagger$ felírás szerint. Ez azt mutatja, hogy $L = 6$ esetén $\ell = 5$ lineárisan független vortex értelmezhető a rendszerben, tehát ℓ értéke közel esik L -hez, azaz a jelenlévő elektronok száma a rendszer lineáris méretével arányos: $\ell \sim L$.

A (131-132) operátorok által prezentált vortex típusú megoldások könnyedén kiterjeszthetők nagyobb méretű négyzetes rácsokra is azzal a feltétellel, hogy L értéke csak páros szám lehet, ugyanis az $\mathbf{x}, \mathbf{y}$ irányú periodikus határfeltételek – a vortexvonalak mentén létező ± 1 koefficienssek vonatkozásában – kizárólag páros L esetén alkalmazhatók konzisztens módon. A nagyobb méretű rendszerekben kialakuló vortexvonalak szemléltetéséhez példaként felrajzoltam egy (12×12) , illetve egy (24×24) nagyságú rácsban kifejlődő vortexet, melyek a 21. ábra a.), illetve b.) blokkjain követhetők nyomon. Megfigyelhető, hogy a rendszerméret növekedésével, a ± 1 együtthatók meghatározott rendjét követve, a vortexvonalak száma is sokasodik, azonban a rendszer méretétől függetlenül minden esetben négy vortexcentrum van jelen, amiket az ábrán a szürke négyzetek pozicionálnak. A fekete, illetve fehér körök ezúttal is a $+1$, illetve -1 együtthatóval rendelkező csomópontokat jelzik. Mivel bármely páros L által meghatározott rendszerméret esetén négy centrum rendelhető hozzá egy adott vortexhez, általánosan kijelenthető, hogy az N_Λ csomópont negyede alkalmas vortexek kialakítására. Így a rács méretétől függetlenül összesen $N_\Lambda/4$ $\hat{B}_{m,\sigma_m}^\dagger$ operátor értelmezhető a rendszerben, melyek közül csak $\ell \sim L$ számú vortex tekinthető lineárisan függetlennek. Ezzel a (20.a) feltétel teljesítését maradéktalanul kimerítettem, aminek eredményeképpen kiderült, hogy a

(123) próbafüggvénybe beépülő (124) $\hat{B}_{m,\sigma_m}^\dagger$ operátorok – a 18. és a 21. ábrán is példázott – speciális vortexes szerkezettel rendelkeznek, és az m index értelmezési tartományát bármely páros L esetében az $[1, \ell \sim L]$ intervallum jelöli ki, tehát (123) összesen $N = \ell \sim L$ $\hat{B}_{m,\sigma_m}^\dagger$ operátort (elektront) tartalmazhat.



21. ábra : (12×12) , illetve (24×24) méretű rendszerben kialakuló vortexek rajzai. A vortexcentrumokat szürke négyzetek jelölik.

(20.a) végrehajtását követően természetesen most sem maradhat el a (20.b) feltétel elemzése, mely a rendszer alapállapotára nézve további értékes információkat rejthet magában. (20.b) megvalósítását a (6×6) -os rendszer (131-132) $\hat{B}_{m,\sigma_m}^\dagger$ operátorainak példáján keresztül mutatom be úgy, hogy az egyszerűbb átláthatóság kedvéért két operátort, például a (131) $\hat{B}_{1,\sigma_1}^\dagger$ -et és a (132)-beli $\hat{B}_{2,\sigma_2}^\dagger$ -et helyezem el a (123) próbafüggvényben tetszőleges σ_1 , illetve σ_2 spinindexszel. Ekkor (20.b) a

$$\hat{H}_U \hat{B}_{1,\sigma_1}^\dagger \hat{B}_{2,\sigma_2}^\dagger |0\rangle = 0 \quad (133)$$

egyenlőségre vezet, melyben $\hat{H}_U$ -nak az elvégzett $\hat{B}_{1,\sigma_1}^\dagger \hat{B}_{2,\sigma_2}^\dagger$ operátorszorzatra vett hatása nyomán a

$$\begin{aligned} 0 = & U \left[-\hat{c}_{0,\sigma_1}^\dagger \hat{c}_{0,\sigma_2}^\dagger - \hat{c}_{3\mathbf{x},\sigma_1}^\dagger \hat{c}_{3\mathbf{x},\sigma_2}^\dagger - \hat{c}_{\mathbf{x}+\mathbf{y},\sigma_1}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{x}+\mathbf{y},\sigma_2}^\dagger - \hat{c}_{4\mathbf{x}+\mathbf{y},\sigma_1}^\dagger \hat{c}_{4\mathbf{x}+\mathbf{y},\sigma_2}^\dagger \right. \\ & + \hat{c}_{2\mathbf{x}+2\mathbf{y},\sigma_1}^\dagger \hat{c}_{2\mathbf{x}+2\mathbf{y},\sigma_2}^\dagger + \hat{c}_{5\mathbf{x}+2\mathbf{y},\sigma_1}^\dagger \hat{c}_{5\mathbf{x}+2\mathbf{y},\sigma_2}^\dagger - \hat{c}_{3\mathbf{y},\sigma_1}^\dagger \hat{c}_{3\mathbf{y},\sigma_2}^\dagger \\ & - \hat{c}_{3\mathbf{x}+3\mathbf{y},\sigma_1}^\dagger \hat{c}_{3\mathbf{x}+3\mathbf{y},\sigma_2}^\dagger - \hat{c}_{\mathbf{x}+4\mathbf{y},\sigma_1}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{x}+4\mathbf{y},\sigma_2}^\dagger - \hat{c}_{4\mathbf{x}+4\mathbf{y},\sigma_1}^\dagger \hat{c}_{4\mathbf{x}+4\mathbf{y},\sigma_2}^\dagger \\ & \left. + \hat{c}_{2\mathbf{x}+5\mathbf{y},\sigma_1}^\dagger \hat{c}_{2\mathbf{x}+5\mathbf{y},\sigma_2}^\dagger + \hat{c}_{5\mathbf{x}+5\mathbf{y},\sigma_1}^\dagger \hat{c}_{5\mathbf{x}+5\mathbf{y},\sigma_2}^\dagger \right] |0\rangle \end{aligned} \quad (134)$$

tagok maradnak meg. Mivel a $\hat{H}_U$ Hubbard-járulék a duplán betöltött csomópontokat érzékeli nemtriviális módon, ezért (134) tagjai értelemsze-

rúen azon csomópontokból származnak, melyeken $\hat{B}_{1,\sigma_1}^\dagger$ és $\hat{B}_{2,\sigma_2}^\dagger$ érintkezik egymással. A 20. ábra első két rajza alapján könnyen felismerhető, hogy $\hat{B}_{1,\sigma_1}^\dagger$ és $\hat{B}_{2,\sigma_2}^\dagger$ közös $(\mathbf{i}, \mathbf{j})$ csomópontjait az $(1, 1), (1, 4), (2, 2), (2, 5), (3, 3), (3, 6), (4, 1), (4, 4), (5, 2), (5, 5), (6, 3), (6, 6)$ koordinátájú pozíciók határozzák meg, melyek kialakítják (134) 12 járulékát. (134) pedig a fermionikus rendszerek által definiált $\hat{c}_{1,\sigma}^\dagger \hat{c}_{1,\sigma}^\dagger |0\rangle = 0$ reláció folytán csakis abban a speciális esetben teljesülhet, amikor a $\hat{B}_{1,\sigma_1}^\dagger$ és a $\hat{B}_{2,\sigma_2}^\dagger$ operátorok azonos spinvetületű elektronokat vezetnek be a rendszerbe, azaz $\sigma_1 = \sigma_2 = \sigma$.

Ez a megállapítás természetesen nemcsak két operátor viszonylatában lehet helytálló. Láttuk, hogy bármely páros L által adott rendszerméret esetén összesen $N = \ell \sim L$ darab lineárisan független $\hat{B}_{m,\sigma_m}^\dagger$ vortex jelehet meg a rácsban, melyek ugyanazon $(L \times L)$ méretű síktartományban halmozódnak egymásra. Ezért könnyen megeshet, hogy egy adott csomóponton több operátor is érintkezik egymással. Ekkor $\hat{H}_U$ hatása a (133-134)-ben szemléltetett kétrészecskés esethez hasonlóan azt eredményezi, hogy minden $\hat{B}_{m,\sigma_m}^\dagger$, $m = 1, 2, 3, \dots, \ell$, operátornak ugyanazon $\sigma_m = \sigma$ értékre rögzül a spinindexe, ami azt jelenti, hogy a rács összes elektronja azonos spinvetülettel kerül be a leírásba. A $\hat{H}_U$ Hubbard-járulék hatása nyomán tehát korreláció jön létre az elektronok spinvetületei között, ami arra vezet, hogy a rendszer a többszörösen betöltött csomópontok kiiktatásával minimalizálja az energiáját.

A (20.a-b) feltételek fentebbi elemzésével összegyűjtött ismeretek alapján, a (123) próbafüggvényből kiindulva, az $(L \times L)$ méretű rendszer alapállapot hullámfüggvényét a

$$|\psi_g\rangle = \prod_{m=1}^{\ell \sim L} \hat{B}_{m,\sigma}^\dagger |0\rangle \quad (135)$$

kifejezés szerint állapítottam meg. (135)-ben a rögzített σ indexszel rendelkező $\hat{B}_{m,\sigma}^\dagger$ operátorok speciális négycentrumos vortexeket alkotnak (l. pl. a 18. vagy a 21. ábrát), és (135) bármely páros L által meghatározott $(L \times L)$ méretű, $N_\Lambda = L^2$ csomópontot tartalmazó négyzetes rács esetén érvényes. Mivel az $N = \ell \sim L$ számú vortex – a σ spinindex korrelációja révén – egy spinpolarizált elektronrendszert generál a rácsban, (135) egy telített, itineráns ferromágneses alapállapotot produkál. Hangsúlyozom, hogy a kapott ferromágnesesség külső terek befolyásától mentesen, spontán módon alakul ki a rendszerben, hiszen a spinpolarizált állapotot tisztán az elektronok spinindexei közötti korrelációs effektusok hozzák létre.

A (135) alapállapot hullámfüggvényéhez, a (121)-ben megadott K felhasználásával, (16) szerint az

$$E_g(N; t_2) = -4t_2 N \quad (136)$$

alapállapot energiát kapcsolható, és a (135-136) alapállapot, (122) ismételt felírásával, a

$$t_2 = \frac{t_1}{2}, \quad t_1, t_2 > 0 \quad (137)$$

feltételek által megszabott fázistértartományon lehet releváns.

A fentebbi eredmények alapján tehát megállapítható, hogy egy tetszőleges páros L által meghatározott $(L \times L)$ méretű rendszerben $N = \ell \sim L$ számú elektron lehet jelen, így a részecskék koncentrációját a $\rho = \ell/L^2 \sim L/L^2 = 1/L$ ráta határozza meg. Amennyiben a periodikus határfeltételek révén kialakuló szemcse makroszkopikus, azaz lineáris mérete $L \sim 10^{23}$ nagyságrendbe esik, az elektronok $\rho \sim 10^{-23} \sim 0$ koncentrációja gyakorlatilag elhanyagolható, ezért a kapott ferromágneses viselkedés makroszkopikus skálán (termodinamikai határesetben) eltűnik. Ha azonban nanoméretű szemcséket tekintünk, akkor például $L = 6$ esetén a $\rho = 1/6$ érték már számottevő a kis koncentrációs tartományban, ami azt eredményezi, hogy a ferromágnesesség igazából csak nanoskálán válik megfigyelhetővé. Így lényegében a fentebb kifejtett eredmények a nemmágneses fématomokból felépülő nanoszemcsék ferromágneses viselkedésének egy lehetséges – kvantummechanikai és matematikai alapokon nyugvó – magyarázatát prezentálják.

7.4. A rendszer nemkölcsonható sáv szerkezete

A nanoskálán tapasztalt ferromágneses alapállapot teljes körű vizsgálatának érdekében ezúttal is feltártam a rendszer nemkölcsonható sáv szerkezetét. A számítások induló lépéseként elvégeztem az $\mathbf{r}$ -térben felírt (116) Hamilton-operátor

$$\begin{aligned} \hat{H}_0 = & \sum_{\sigma} \sum_{\mathbf{i}=1}^{N_{\Lambda}} (t_x \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{x},\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{\mathbf{i},\sigma} + t_y \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{y},\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{\mathbf{i},\sigma} + t_{x+y} \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{x}+\mathbf{y},\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{\mathbf{i},\sigma} \\ & + t_{x-y} \hat{c}_{\mathbf{i}+\mathbf{x}-\mathbf{y},\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{\mathbf{i},\sigma} + H.c.) \end{aligned} \quad (138)$$

kinetikus részének $\mathbf{k}$ -térbeli Fourier-transzformációját, melynek alapját az elemi fermionikus eltüntető és keltő operátorok szintjén realizálódó

$$\begin{aligned} \hat{c}_{\mathbf{i},\sigma} &= \frac{1}{\sqrt{N_{\Lambda}}} \sum_{\mathbf{k}=1}^{N_{\Lambda}} \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{i}}, \\ \hat{c}_{\mathbf{i},\sigma}^{\dagger} &= \frac{1}{\sqrt{N_{\Lambda}}} \sum_{\mathbf{k}=1}^{N_{\Lambda}} \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma}^{\dagger} e^{i\mathbf{k}\mathbf{i}} \end{aligned} \quad (139)$$

formulák képezték. A (139) kifejezések $\hat{c}_{\mathbf{k},\sigma}$ és $\hat{c}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger$ operátorai a $(\mathbf{k}, \sigma)$ értékpár által megjelölt kvantumállapot eltüntető és keltő operátorát jelenítik meg. A (139) Fourier-transzformált alakok segítségével (138) a

$$\begin{aligned} \hat{H}_0 = & \sum_{\sigma} \sum_{\mathbf{k}} [t_x (e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}} + e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}}) + t_y (e^{i\mathbf{k}\mathbf{y}} + e^{-i\mathbf{k}\mathbf{y}}) + t_{x+y} (e^{i\mathbf{k}(\mathbf{x}+\mathbf{y})} \\ & + e^{-i\mathbf{k}(\mathbf{x}+\mathbf{y})}) + t_{x-y} (e^{i\mathbf{k}(\mathbf{x}-\mathbf{y})} + e^{-i\mathbf{k}(\mathbf{x}-\mathbf{y})})] \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma} \end{aligned} \quad (140)$$

felírás szerint alakítható át, melyben az $E_{\mathbf{k}}$ -val jelölt

$$\begin{aligned} E_{\mathbf{k}} = & t_x (e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}} + e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}}) + t_y (e^{i\mathbf{k}\mathbf{y}} + e^{-i\mathbf{k}\mathbf{y}}) + t_{x+y} (e^{i\mathbf{k}(\mathbf{x}+\mathbf{y})} + e^{-i\mathbf{k}(\mathbf{x}+\mathbf{y})}) \\ & + t_{x-y} (e^{i\mathbf{k}(\mathbf{x}-\mathbf{y})} + e^{-i\mathbf{k}(\mathbf{x}-\mathbf{y})}) \end{aligned} \quad (141)$$

összeg határozza meg a rendszer diszperziórelációját. Mivel a tanulmányozott négyzetes rácsot egyetlen alrác alkotja, így magától értetődő módon (141) egyetlen $E_{\mathbf{k}}$ energiafelületet rajzol ki $\mathbf{k}$ függvényében. A $\mathbf{k}$ vektornak az $\mathbf{x}, \mathbf{y}$ Bravais-vektorokra eső $\mathbf{k}\mathbf{x}$, illetve $\mathbf{k}\mathbf{y}$ vetületeit a $k_x = \mathbf{k}\mathbf{x}$, illetve a $k_y = \mathbf{k}\mathbf{y}$ jelölésekkel ellátva, és felhasználva a trigonometrikus és exponenciális függvények között fennálló $\cos \alpha = (e^{i\alpha} + e^{-i\alpha})/2$ kapcsolatot, (141) az

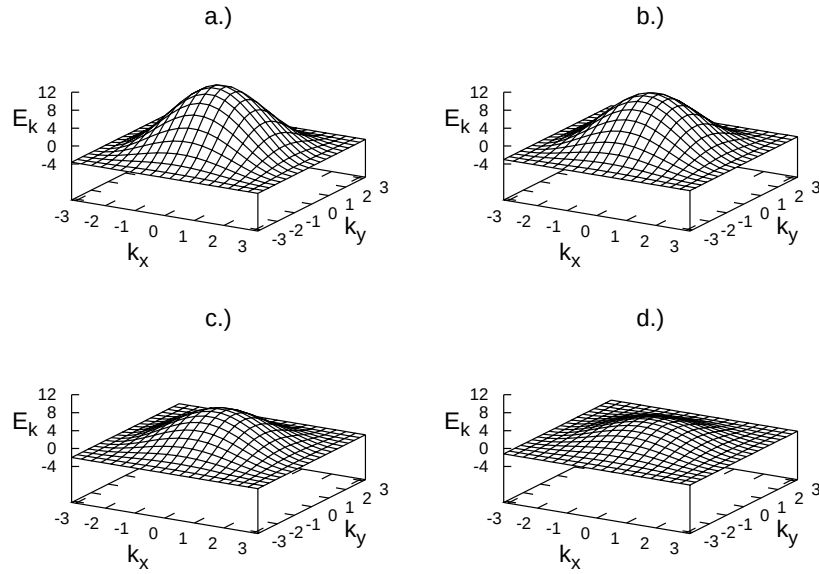
$$\begin{aligned} E_{\mathbf{k}} = & 2t_x \cos k_x + 2t_y \cos k_y + 2t_{x+y} \cos(k_x + k_y) \\ & + 2t_{x-y} \cos(k_x - k_y) \end{aligned} \quad (142)$$

alakra hozható. (142) pedig a $t_x = t_y = t_1$ és a $t_{x+y} = t_{x-y} = t_2$ egyenlőségek által adott homogén és izotrop esetben, a $\cos(\alpha + \beta) + \cos(\alpha - \beta) = 2 \cos \alpha \cos \beta$ összefüggés alkalmazásával,

$$E_{\mathbf{k}} = 2t_1 (\cos k_x + \cos k_y) + 4t_2 \cos k_x \cos k_y \quad (143)$$

szerint írható át. Rögtön felismerhető, hogy a (143) diszperziórelációból – a triviális $t_1 = t_2 = 0$ esettől eltekintve – semmilyen módon nem tüntethető el a $\mathbf{k}$ -függés, azaz a t_1 és t_2 paraméterek által definiált fázistérben sehol nem létezik olyan tartomány, ahol a $k_x - k_y$ síkkal párhuzamos energiafelületek, vagyis lapos sávok jönnének létre. Néhány konkrét példát szemléltet a 22. ábra, amely a (143) diszperzióreláció térbeli ábrázolása a $k_x, k_y \in [-\pi, \pi]$ intervallum által kijelölt első Brillouin-zónában az a.) $t_1 = 1.8, t_2 = 0.9$, a b.) $t_1 = 1.5, t_2 = 0.75$, a c.) $t_1 = 1, t_2 = 0.5$, illetve a d.) $t_1 = 0.6, t_2 = 0.3$ értékekre rögzített paraméterek esetében. A (143) által meghatározott nemkölsönható sávszerkezet vizsgálatának tehát az a legfőbb tanulsága, hogy az $E_{\mathbf{k}}$ energiafelület semmilyen körülmények között nem képezhet lapos sávot. Ez fizikailag azt jelenti, hogy a (135) ferromágneses alapállapot nem Mielke–Tasaki-típusú, hiszen a spinpolarizált állapot nem lapos sáv által

valósul meg a rendszerben, hanem a 7.3. alfejezetben ismertetett módon, az elektronok spinkorrelációs mechanizmusának eredményeképpen alakul ki. Ezen spinkorrelációs effektus révén létrejövő spinpolarizált állapot a ferromágnesesség klasszikus értelemben vett változataihoz képest egy teljesen újfajta mechanizmust valósít meg, melyről elsőként két korábbi tanulmányomban [74,75] számoltam be cikcakk, illetve karosszék típusú hatszöges polimerláncok vonatkozásában.



22. ábra : A rendszer nemkölcönható sávszerkezete a Hamilton-operátor a.) $t_1 = 1.8$, $t_2 = 0.9$, b.) $t_1 = 1.5$, $t_2 = 0.75$, c.) $t_1 = 1$, $t_2 = 0.5$, d.) $t_1 = 0.6$, $t_2 = 0.3$ szerint rögzített paraméterkészlete mellett.

A 7. fejezet eredményeinek rövid összefoglalása

A 7. fejezetben a PSZO módszer alkalmazásával tanulmányoztam a nemmágneses fématomokból felépülő rendszerek nanoskálán tapasztalható ferromágneses viselkedésének mélyebb mozgatórugóit. A vizsgált rendszert egy kétdimenziós négyzetes ráccsal rendelkező nanostruktúra adta, melynek rácspontjaiban nemmágneses fématomok foglalnak helyet. Periodikus határfeltételek és az elektronok felületi mozgásának figyelembevétele mellett speciális vortexes szerkezetű, ferromágneses alapállapotra bukkantam. A "vortexes" – magyarul "örvényes" – kifejezés ez esetben arra utal, hogy az elektronok csak meghatározott vortexvonalak mentén létezhetnek a rendszerben. A kapott alapállapot ferromágneses mivoltát az elektronok spinin-

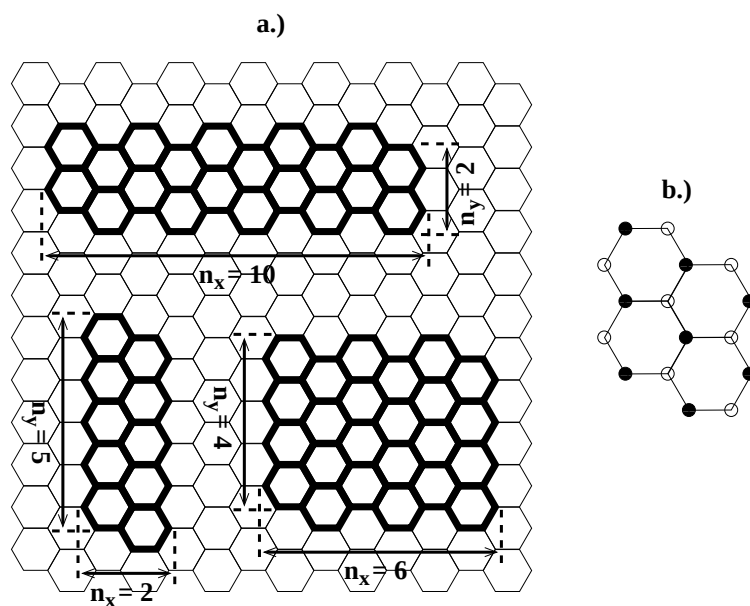
dexei között létrejövő korrelációs hatások generálják. A nemkölcönható sáv szerkezet vizsgálatából az is kiderült, hogy a diszperziórelációt nem alakíthatja lapos sáv, tehát a kialakuló spinpolarizált állapot nem produkálhat Mielke–Tasaki-értelemben vett lapossáv-ferromágnesességet. Így a spinkorrelációs effektus révén előálló spinpolarizált állapot a ferromágnesesség klaszikus értelemben vett változataihoz képest egy teljesen újfajta mechanizmust képvisel. Számításaim szerint az alapállapotban jelenlévő elektronok száma arányos a rendszer lineáris méretével, aminek következtében az elektronok felületi koncentrációja fordított arányban áll a lineáris rendszermérettel. Ennélfogva a kapott ferromágnesesség csak nanoskálán releváns (termodinamikai határesetben eltűnik), és a kis koncentrációs részecskeszám-tartományban érvényes. Összességében véve tehát az eredmények a nemmágneses fématomokból felépülő nanoszemcsékben létrejövő ferromágnesességnek egy lehetséges – kvantummechanikai és matematikai alapokon nyugvó – magyarázatát adhatják. A 7. fejezetben kapott eredmények publikált formában a [251] közleményben érhetők el.

8. fejezet

A kétdimenziós méhsejtes szerkezettel rendelkező nanostruktúra alapállapotí eredményeinek bemutatása

8.1. A rendszer Hamilton-operátora

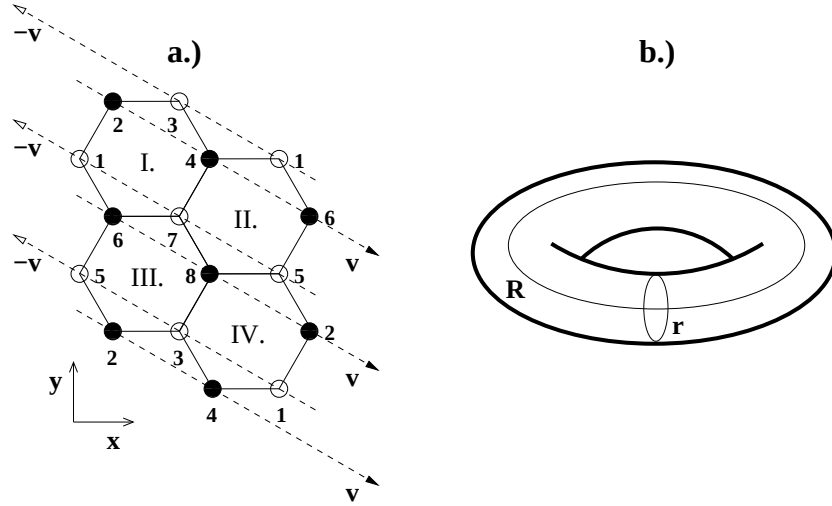
A szénatomokból felépülő, méhsejtes szerkezetű kristályrácsok a grafén típusú rendszerek osztályába sorolhatók, hiszen hexagonális vázuk egy olyan tömbként képzelhető el, amely egy grafénsík $n = n_x \times n_y$ számú szomszédos hatszöget tartalmazó alakzatának kimetszésével jön létre úgy, hogy n_x (n_y) a kivágandó idom x (y) iránya mentén egymáshoz csatlakozó hatszögek száma.



23. ábra : a.) Néhány grafénsíkból kimetszhető méhsejtes rendszer illusztrációja az $n = 10 \times 2 = 20$, $n = 2 \times 5 = 10$, $n = 6 \times 4 = 24$ által adott esetekben. b.) A grafénsíkból kivágható legkisebb méretű, $n_x \times n_y$ szerkezetű kétdimenziós alakzat, melyet $n_x = n_y = 2$ jellemez.

Az ily módon konstruálható struktúrák vizualizálását a 23.a ábra segíti, ahol példaként három elrendezést rajzoltam fel az $n = 10 \times 2 = 20$, $n = 2 \times 5 = 10$, $n = 6 \times 4 = 24$ esetek megválasztásával. A fenti technikával megsz-

erkeszthető legkisebb méretű kétdimenziós, méhsejtes rendszert a 23.b ábra demonstrálja, ahol megfigyelhető, hogy $n_x = n_y = 2$ révén a rács négy hatszögből épül fel. A rendszer csomópontjai fekete és fehér körökkel vannak megkülönböztetve, ami azonban csupán azt hivatott érzéltetni, hogy a grafén típusú struktúra a fekete, illetve a fehér pontokból álló Ω_1 , illetve Ω_2 alrácok uniójaként is felfogható.



24. ábra : a.) A rendszer hatszögeinek és csomópontjainak számozását bemutató ábra. Az x, y irányú periodikus határfeltételek következtében az Ω_1 alrác csomópontjai a v , az Ω_2 alrác csomópontjai pedig a $-v$ irányok mentén ciklikusan permutálva követik egymást. b.) A periodikus határfeltételek eredményeként a rendszer által kialakított tóruszfelület, ahol R a toroidális, míg r a poloidális körvonalat jelöli.

Az I-IV. jelzéssel ellátott hatszögek csomópontjainak számozása a 24.a ábrán követhető nyomon. A csomópontok számozásakor az I. és a III. hatszög felső négy csúcsa által meghatározott trapézokat vettem alapul úgy, hogy az I. trapéz 1, 2, 3, 4, illetve a III. trapéz 5, 6, 7, 8 csomópontjai negatív körüljárási irány szerint követik egymást. Ezen számozási rendszer azt eredményezi, hogy az Ω_1 alrác a páros, az Ω_2 alrác pedig a páratlan számokkal megjelölt csomópontokat foglalja magába. Az x, y irányú periodikus határfeltételek alkalmazása folytán az Ω_1 alrác 2, 4, 6, illetve az Ω_2 alrác 1, 3, 5 csomópontjai egybevágnak a II. és a IV. hatszög széleit alkotó csomópontokkal, amit a 24.a ábra csomóponti számozása világosan tükröz. Emellett az is megfigyelhető, hogy az Ω_1 alrác 2, 4, 6, 8, illetve az Ω_2 alrác 1, 3, 5, 7 csomópontjai speciálisan, a szaggatott vonallal kijelölt v , illetve $-v$ irányok mentén ciklikus permutáció szerint követik egymást. Gyakorlatilag tehát összesen nyolc csomópont alkotja a rendszert, melyek közül hat csomópont (1, 2, 3, 4, 5, 6) –

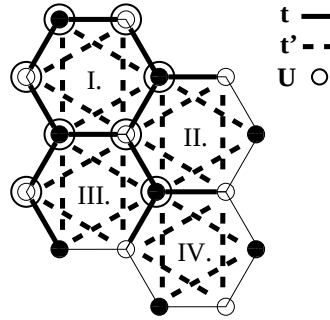
a rendszer határszélén lévő pozíciójuknál fogva – periodikus határfeltételek hatásának van alávetve, így a nyolcból csupán kettő (7 és 8) tekinthető valódi belső csomópontnak. Az x, y irányú periodikus határfeltételek kiszabása továbbá azt idézi elő, hogy az $x - y$ síkban kiterített rendszerből egy zárt, térbeli felület jön létre, amely egy tóruszt feszít ki. A keletkező tóruszt a 24.b ábra prezentálja, ahol a toroidális körvonalat R , míg a poloidális körvonalat r jelöli. A tórusz képződése során az x tengely az r , az y tengely pedig az R körvonalra simul rá, aminek következtében poloidális irányban n_x , toroidális irányban pedig n_y transzlátált hatszög burkolja be periodikusan a tórusz felületét.

A kiindulópontok rögzítése után felírtam a rendszer Hamilton-operátorát, amelyet (4) szerkezetét követve a

$$\begin{aligned}
\hat{H} = \sum_{\sigma} [& t (\hat{c}_{1,\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{2,\sigma} + \hat{c}_{1,\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{4,\sigma} + \hat{c}_{1,\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{6,\sigma} + \hat{c}_{2,\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{3,\sigma} + \hat{c}_{2,\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{5,\sigma} + \hat{c}_{3,\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{4,\sigma} \\
& + \hat{c}_{3,\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{8,\sigma} + \hat{c}_{4,\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{7,\sigma} + \hat{c}_{5,\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{6,\sigma} + \hat{c}_{5,\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{8,\sigma} + \hat{c}_{6,\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{7,\sigma} + \hat{c}_{7,\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{8,\sigma}) \\
& + t'_I \hat{c}_{1,\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{3,\sigma} + t'_I \hat{c}_{1,\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{7,\sigma} + t'_I \hat{c}_{2,\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{4,\sigma} + t'_I \hat{c}_{2,\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{6,\sigma} + t'_I \hat{c}_{3,\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{7,\sigma} \\
& + t'_I \hat{c}_{4,\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{6,\sigma} + t'_{II} \hat{c}_{1,\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{5,\sigma} + t'_{II} \hat{c}_{1,\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{7,\sigma} + t'_{II} \hat{c}_{4,\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{6,\sigma} + t'_{II} \hat{c}_{4,\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{8,\sigma} \\
& + t'_{II} \hat{c}_{5,\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{7,\sigma} + t'_{II} \hat{c}_{6,\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{8,\sigma} + t'_{III} \hat{c}_{2,\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{6,\sigma} + t'_{III} \hat{c}_{2,\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{8,\sigma} + t'_{III} \hat{c}_{3,\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{5,\sigma} \\
& + t'_{III} \hat{c}_{3,\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{7,\sigma} + t'_{III} \hat{c}_{5,\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{7,\sigma} + t'_{III} \hat{c}_{6,\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{8,\sigma} + t'_{IV} \hat{c}_{1,\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{3,\sigma} + t'_{IV} \hat{c}_{1,\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{5,\sigma} \\
& + t'_{IV} \hat{c}_{2,\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{4,\sigma} + t'_{IV} \hat{c}_{2,\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{8,\sigma} + t'_{IV} \hat{c}_{3,\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{5,\sigma} + t'_{IV} \hat{c}_{4,\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{8,\sigma} + H.c.] \\
& + U (\hat{n}_{1,\uparrow} \hat{n}_{1,\downarrow} + \hat{n}_{2,\uparrow} \hat{n}_{2,\downarrow} + \hat{n}_{3,\uparrow} \hat{n}_{3,\downarrow} + \hat{n}_{4,\uparrow} \hat{n}_{4,\downarrow} + \hat{n}_{5,\uparrow} \hat{n}_{5,\downarrow} + \hat{n}_{6,\uparrow} \hat{n}_{6,\downarrow} \\
& + \hat{n}_{7,\uparrow} \hat{n}_{7,\downarrow} + \hat{n}_{8,\uparrow} \hat{n}_{8,\downarrow}) \quad (144)
\end{aligned}$$

kifejezéssel definiáltam. Ami (144) paramétereit illeti, t elsőszomszéd, míg $t'_I, t'_{II}, t'_{III}, t'_{IV}$ másodszomszéd hoppingokat jelenítenek meg, az U csatolási állandó pedig a rács összes csomópontján ugyazast az értéket veszi fel. Ezek mellett azonban nem tüntettem fel lokális egyrészezske-potenciálokat tartalmazó $\sum_{\sigma} \sum_{\mathbf{i}} \epsilon_{\mathbf{i}} \hat{n}_{\mathbf{i},\sigma}$ alakú összegjárulékot. Ennek az a magyarázata, hogy a tanulmányozott méhsejtes rendszer kémiai összetételét tekintve teljesen homogén, hiszen minden csomópontját egy szénatom tölti be, és a periodikus határfeltételek miatt minden szénatom, ekvivalens módon, háromelágazású csomópontban foglal helyet. Így $\epsilon_{\mathbf{i}} = \epsilon$ minden csomóponton azonos értékkel vehető figyelembe, ami azt eredményezi, hogy a Hamilton-operátorban a $\sum_{\sigma} \sum_{\mathbf{i}=1}^8 \epsilon_{\mathbf{i}} \hat{n}_{\mathbf{i},\sigma} = 2 \cdot 8 \cdot \epsilon$ konstans jelenik meg. Mivel azonban egy Hamilton-operátorbeli állandó nem befolyásolja a konkrét fizikai tartalmat, az egyrészezske-potenciál típusú tagok modellszinten vett kiiktatása helytálló. A (144) Hamilton-operátor paramétereit grafikusan a 25. ábra mutatja be. A rajz világosan érzékelteti, hogy a rendszerben összesen 12, megvastagított vonallal jelölt t , illetve 24, szaggatott vonallal jelölt t' hopping értelmezhető,

a bekarikázott csúcspontok pedig a rendszert alkotó 8 csomópontot emelik ki, melyeken az U csatolási állandó definiálható. A csomópontok bekarikázásával, illetve a hatszögek oldaléleinek megvastagításával biztosítható, hogy minden U -, illetve t -járulék csak egyszer szerepeljen, hiszen a be nem karikázott csomópontok, illetve a meg nem vastagított oldalélek figyelembevétele a periodikus határfeltételek alkalmazása folytán duplikált tagokat generálna a Hamilton-operátorban. A t' hoppingok esetében a periodikus határfeltételek nem idéznek elő közvetlen átfedést, így a szaggatott vonalak által reprezentált elektronugrások mindegyike egyszeresen épül be a Hamilton-operátorba. Mivel azonban a t' ugrások végpontjai a rendszer határszélein helyezkednek el, a Hamilton-operátorban megjelennek olyan tagok, melyek azonos operátori indexekkel rendelkeznek, ezért a t' hoppingok $I - IV$ római indexeinek feltüntetésével szükségeszerű egyértelműsíteni, hogy az adott másodsomszéd ugrás melyik hatszögben történik. A $t'_I, t'_{II}, t'_{III}, t'_{IV}$ jelölés tehát inkább csak technikai jellegű megkülönböztetés, mert egyébként értéküket tekintve minden másodsomszéd ugrás ekvivalens, azaz $t'_I = t'_{II} = t'_{III} = t'_{IV} = t'$.

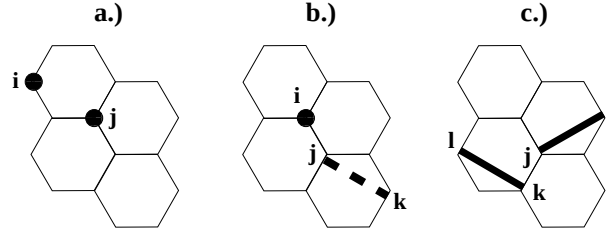


25. ábra : A (144) Hamilton-operátor paramétereinek szemléltetése.

A (144) Hamilton-operátor által jellemzett méhsejtes rácsban $N = 4$ elektront helyeztem el, és a rendszer egzakt alapállapotát a 4.3. alfejezetben tárgyalt ATAM módszer segítségével határoztam meg.

8.2. A teljes $\mathcal{H}$ Hilbert-tér konstrukciója

A 4.3. alfejezetben rögzített útmutatásoknak megfelelően, a teljes Hilbert-tér bázisvektorait a szingulett állapotot megvalósító $N = 4$ elektron lehetséges konfigurációi determinálják. Négy elektron esetén, az adott elrendezésben előforduló duplán betöltött csomópontok száma alapján, három alapvető konfigurációtípus különböztethető meg, melyek képi megjelenítéseit a 26. ábra szemlélteti.



26. ábra : A négy elektron által potenciálisan létrehozható három konfigurációtípus (bázisvektortípus), melyekben a fekete körök dupla betöltéseket reprezentálnak, a szaggatott vonal antiparallel, a folytonos vonalak pedig parallel elektronpárokat jelenítenek meg.

Az ábra a.), b.), c.) rajzai egy-egy példát mutatnak be a három lehetséges konfigurációtípusra vonatkozóan, melyekben rendre 2, 1, 0 fekete pettyel jelölt, duplán betöltött csomópont szerepel. A rajzok további grafikus elemeit illetően, tetszőleges (j, k) csomópontokat összekötő szaggatott vonal mindig egy olyan antiparallel elektronpárt definiál, melynek σ ($-\sigma$) spinvetületű elektronja a j , $-\sigma$ (σ) spinvetületű elektronja pedig a k csomóponton jelenik meg. Tetszőleges (i, j) , illetve (k, l) csomópontokat összekapcsoló folytonos vonalak pedig minden esetben olyan parallel elektronpárokat jelölnek, melyek tagjai az (i, j) csomópontpárt σ ($-\sigma$), míg a (k, l) csomópontpárt $-\sigma$ (σ) spinvetülettel foglalják el. A 26. ábra bázisvektortípusai a következő matematikai formulákkal írhatók le: A 26.a konfigurációt a

$$|\psi_a(i, j)\rangle = (\hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{i,-\sigma}^\dagger) (\hat{c}_{j,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,-\sigma}^\dagger) |0\rangle \quad (145)$$

állapotvektor értelmezi, melyben $|0\rangle$ a vákuumállapotot jelöli, és $i \neq j$ igaz. A (145) típusú bázisvektorok felírásakor az $i < j$ feltétel kikötésével könnyedén elkerülhető egyazon állapotvektor kettőződése. A 26.b elrendezés a

$$|\psi_b(i; j, k)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{i,-\sigma}^\dagger) [(\hat{c}_{j,\sigma}^\dagger \hat{c}_{k,-\sigma}^\dagger) + (\hat{c}_{k,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,-\sigma}^\dagger)] |0\rangle \quad (146)$$

kifejezéssel jellemezhető, ahol az $i \neq j$, $i \neq k$ és a $j \neq k$ egyenlőtlenségek teljesülése automatikusan biztosítja a bázisvektorok egyszeres figyelembevételét. Végül, a 26.c konstrukciót a

$$|\psi_c(j, i; l, k)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [(\hat{c}_{j,\sigma}^\dagger \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger) (\hat{c}_{l,-\sigma}^\dagger \hat{c}_{k,-\sigma}^\dagger) + (\hat{c}_{j,-\sigma}^\dagger \hat{c}_{i,-\sigma}^\dagger) (\hat{c}_{l,\sigma}^\dagger \hat{c}_{k,\sigma}^\dagger)] |0\rangle \quad (147)$$

bázisvektor definiálja oly módon, hogy $i \neq j \neq k \neq l$, és a duplex állapotvektorok kizárása érdekében célszerű kiszabni a $j > i$, $l > k$ kondíciókat.

$N = 4$, $N_\Lambda = 8$ esetén tehát a (145-147) formulákkal leírt, ortonormált állapotvektorok összessége adja a teljes Hilbert-tér bázisvektorait, így $\mathcal{H}$ di-

menziója a (145-147)-ben foglalt három vektortípus járulékainak összegzése nyomán $\dim \mathcal{H} = \binom{8}{2} + \binom{8}{1} \cdot \binom{7}{2} \cdot \binom{2}{1} + \binom{8}{2} \cdot \binom{6}{2} = 784$.

8.3. A redukált $\mathcal{S}$ Hilbert-tér konstrukciója

A 4.3. alfejezet **1. lépése** szerint, az (M1-M2) észrevételek felhasználásával megszerkesztettem az $\mathcal{S}$ altér induló $|i_1\rangle \equiv |1\rangle$ bázisvektorát, melyet matematikailag az

$$|1\rangle = \frac{1}{2}(|\psi_a(2,3)\rangle + |\psi_a(6,7)\rangle + |\psi_a(8,5)\rangle + |\psi_a(4,1)\rangle) \quad (148)$$

kifejezés határoz meg. (148) $|\psi_a(i,j)\rangle$ tagjainak szerkezetét a (145)-ben rögzített formula írja elő, és az (i,j) csomópontok számozása természetesen továbbra is a 24.a ábra jelöléseit követi. Az $|1\rangle$ bázisvektor felépítését grafikusán a 3. Függelékben mellékelt F3.1 ábra első rajza demonstrálja, ahol megfigyelhető a négy ekvivalens pozíció, melyben a hatszögek x tengellyel párhuzamos oldalélei mentén elhelyezkedő duplán betöltött csomópontpár létezhet a rácsban.

Követve a módszer **2. lépését**, a (148) induló állapotvektor birtokában, a (144) Hamilton-operátor alkalmazásával előállítottam $\hat{H}|1\rangle$ egyenletét, amely a

$$\hat{H}|1\rangle = 2U|1\rangle + 2t|8\rangle + 2t|10\rangle + 4t'|17\rangle + 4t'|18\rangle + 4t'|22\rangle \quad (149)$$

alak által adott tagokat produkálja. Látható, hogy a (149) egyenletben $|1\rangle$ mellett öt új, lineárisan független bázisvektor jelenik meg, amiket a $|8\rangle, |10\rangle, |17\rangle, |18\rangle, |22\rangle$ jelölésekkel láttam el, és struktúrájuk az F3.1, illetve az F3.2 ábrák megfelelő rajzain követhető nyomon. Itt jegyzem meg, hogy a $\hat{H}$ hatása nyomán újonnan létrejövő bázisvektorok számozásának kialakításakor nem a vektorok megjelenési sorrendjét vettem figyelembe, hanem – a könnyebb átláthatóság és a világos rendszerezés kedvéért – a (145-147) által adott strukturális sorrend betartása mellett, az állapotvektorokat szerkezeti felépítésük szerint soroltam be, amit az F3.1-F3.6 ábrák összessége egyértelműen tükröz. Az F3.1-F3.6 ábrák bázisvektorait jellemző matematikai kifejezések pedig a következő instrukciók szerint állapíthatók meg: i.) Egy adott vektor összes járulékát fel kell írni a (145-147)-ben deklarált szabályszerűségek alapján. ii.) Az ily módon kapott járulékokat össze kell adni. iii.) Az állapotvektorok ortonormált mivoltának biztosítása végett az összeget normálni kell.

Ezek után, a módszer **3. lépésében** megfogalmazott feladatnak megfelelően, kiszámítottam a **2. lépésben** kapott új bázisvektorok $\hat{H}|8\rangle, \hat{H}|10\rangle,$

$\hat{H}|17\rangle, \hat{H}|18\rangle, \hat{H}|22\rangle$ egyenleteit, melyek a

$$\begin{aligned}
\hat{H}|8\rangle &= 2t|1\rangle + 2t|4\rangle + U|8\rangle + 2t'|10\rangle + 2t'|14\rangle + t|22\rangle + t|25\rangle \\
&+ 2t'|27\rangle + 2t'|28\rangle - 2t|37\rangle - 2t'|42\rangle - 2t'|43\rangle - 2t'|47\rangle \\
&+ t|52\rangle - 2t|53\rangle + t|57\rangle - 2t'|65\rangle, \\
\hat{H}|10\rangle &= 2t|1\rangle + 2t|5\rangle + 2t'|8\rangle + U|10\rangle + 2t'|15\rangle + t|22\rangle + t|25\rangle \\
&+ 2t'|26\rangle + 2t'|28\rangle - 2t|38\rangle + 2t'|41\rangle - 2t'|44\rangle + 2t'|47\rangle \\
&+ t|52\rangle + 2t|54\rangle + t|57\rangle + 2t'|66\rangle, \\
\hat{H}|17\rangle &= 4t'|1\rangle + 4t'|3\rangle + U|17\rangle + 2t'|18\rangle + 2t'|19\rangle + 2t'|20\rangle \\
&+ 2t'|22\rangle + t|26\rangle + t|28\rangle - 4t'|29\rangle + 2t'|32\rangle + 2t'|34\rangle \\
&+ 4t'|37\rangle + t|41\rangle + t|47\rangle - 2t'|50\rangle - 2t'|52\rangle, \\
\hat{H}|18\rangle &= 4t'|1\rangle + 4t'|2\rangle + 2t'|17\rangle + U|18\rangle + 2t'|19\rangle + 2t'|21\rangle \\
&+ 2t'|22\rangle + t|27\rangle + t|28\rangle + 4t'|30\rangle + 2t'|31\rangle + 2t'|34\rangle \\
&+ 4t'|38\rangle - t|42\rangle - t|47\rangle + 2t'|51\rangle - 2t'|52\rangle, \\
\hat{H}|22\rangle &= 4t'|1\rangle + 4t'|7\rangle + t|8\rangle + t|10\rangle + t|14\rangle + t|15\rangle + 2t'|17\rangle \\
&+ 2t'|18\rangle + 2t'|20\rangle + 2t'|21\rangle + U|22\rangle + 2t'|31\rangle + 2t'|32\rangle \\
&- 4t'|33\rangle - t|43\rangle - t|44\rangle - 2t'|50\rangle + 2t'|51\rangle - t|65\rangle \\
&+ t|66\rangle + 4t'|68\rangle
\end{aligned} \tag{150}$$

kifejezések formájában valósulnak meg. A (150)-ben újonnan létrejövő bázisvektorok szerkezetét az F3.1-F3.6 ábrák megfelelő grafikái prezentálják. Végül, (150) új állapotaiból kiindulva, $\hat{H}$ hatása nyomán újabb és újabb egyenleteket generáltam, és a procedúrát addig folytattam, amíg az egyenletrendszer be nem zárult, azaz amíg el nem érkeztem a vektorkészlet utolsó, $|i_z\rangle$ záróeleméhez, melyet ez esetben $|i_{70}\rangle \equiv |70\rangle$ definiál. Tehát a redukált Hilbert-tér dimenziója $\dim\mathcal{S} = 70$.

Az **1., 2., 3. lépések** eredményeit egybevetve, a redukált $\mathcal{S}$ Hilbert-térben $z = 70$ lineárisan független, ortonormált állapotvektor alakul ki, melyek $\mathcal{S}$ bázisát alkotják, és a 70 bázisvektor összesített egyenleteit a 4. Függelék (F4) jelzésű tömbjében adom meg. Az F3.1-F3.6 ábrák rajzain az (F4)-ben foglalt $|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle, \dots, |70\rangle$ állapotvektorok mindegyike szerepel, és még egyszer pontosítom, hogy a bázisvektorok matematikai formuláit az egyes vektorjárulékoknak a (145-147)-ben rögzített szabályszerűségek alapján felírt, normalizált összege határozza meg, a rajzok csomóponti számozásait illetően pedig a 24.a ábra jelölései a mérvadók.

Az (F4) egyenletrendszerrel kapcsolatban érdemes felfigyelni arra, hogy az $|1\rangle$ vektorból kiindulva, $\hat{H}$ sorozatos hatásai folytán az egyenletekben megjelennek a $|2\rangle$ és a $|3\rangle$ állapotvektorok is, melyek fajtájukat tekintve az

$|1\rangle$ bázisvektor által képviselt kategóriába sorolhatók, hiszen az $|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle$ állapotok mindegyike olyan elektronkonfigurációt valósít meg, melyben a két duplán betöltött csomópont közötti távolság a lehető legkisebb, azaz legnagyobb kölcsönhatást képviselő elektronkonfigurációnak titulálhatók (l. F3.1 ábra). $|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle$ egy osztályba rendezése valóban nem alaptalan, mert az (F4) egyenletrendszer teljes egészében reprodukálható azokban az esetekben is, amikor a $|2\rangle$ vagy a $|3\rangle$ bázisvektort tekintjük az egyenletrendszer kiindulópontjának. Ez gyakorlatilag azt jelenti, hogy $|1\rangle$ helyett $|2\rangle$ vagy $|3\rangle$ tölti be az induló vektor szerepét, amelyre a (144) Hamilton-operátorral hatva, majd $\hat{H}$ -t az újonnan keletkező állapotokra sorozatosan alkalmazva, (F4) identikus módon visszaadódik.

Az $|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle$ bázisvektorokkal kapcsolatban még egy fontos észrevételt szeretnék megemlíteni. Ezen legnagyobb kölcsönhatást képviselő $|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle$ állapotok jellemzőit érdekességgéppen összehasonlítottam egy korábbi tanulmány [242] eredményeivel. A szerzők [242]-ben egy $N_\Lambda = 16$ csomópontból felépülő, $N = 4$ elektront tartalmazó négyzetes rácsot tanulmányoztak az ATAM módszer alkalmazásával, ahol $\dim\mathcal{H} = 14400$ és $\dim\mathcal{S} = 85$. A [242]-beli legnagyobb kölcsönhatást képviselő konfigurációk a duplán betöltött csomópontpár adott csomópont körüli 90° -os elforgatásával jönnek létre, ami egybevág azzal a körülménnyel, hogy a rendszer maga is 90° -os forgási szimmetriával rendelkezik. Ennek következtében az összes legnagyobb kölcsönhatást képviselő konfiguráció egyetlen induló állapotvektort képez. Az általam vizsgált méhsejtes rendszer esetében azonban másfajta viselkedést tapasztaltam. Az F3.1 ábrán ugyanis megfigyelhető, hogy az $|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle$ vektorok egyes komponensei a duplán betöltött csomópontpár adott csomópont körüli 120° -os elforgatása révén alakulnak ki (pl. a csomópontpár 2 számú csomópont körüli 120° -os elforgatásai az $|1\rangle$ vektor első, a $|2\rangle$ vektor második, illetve a $|3\rangle$ vektor első rajzát eredményezik). Maga a rendszer azonban kicsi mérete miatt nem rendelkezik a méhsejtrácsra elvárt szimmetriatulajdonságokkal, így a 120° -os síkbeli forgatással szemben sem mutat invarianciát, ezért az $|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle$ állapotok szeparált módon jelennek meg, és nem adódhatnak össze egyetlen induló vektorban. Végeredményben tehát a szimmetriatulajdonságokból adódó különbségek vezetnek ahhoz, hogy míg a négyzetes rendszer esetében ($\dim\mathcal{H} = 14400$, $\dim\mathcal{S} = 85$) két nagyságrendnyi, addig az elemzett hatszöges próbatest esetében ($\dim\mathcal{H} = 784$, $\dim\mathcal{S} = 70$) egy nagyságrendnyi eltérés mutatkozik a teljes és a redukált Hilbert-tér dimenziója között.

8.4. A rendszer alapállapota

A 4.3. alfejezetben jelzett (24) mátrix ez esetben az (F4) egyenletrendszer együtthatóiból épül fel, ezért $\tilde{\mathbf{M}}$ az

$$\tilde{\mathbf{M}} \equiv \tilde{\mathbf{M}}(t, t', U) \quad (151)$$

formula szerint argumentálható, és (151) értelemszerűen egy (70×70) -es méretű kompozíciót alkot. A rendszer alapállapotának meghatározásához fel kellett tárnom a (151) mátrix spektrumát, amit a 4.3. alfejezetben említett egzakt diagonalizációs eljárással számítottam ki, majd a kapott spektrumból kikerestem a legkisebb sajátértékhez tartozó sajátvektort. Az ily módon előállított alapállapotú megoldások ellenőrzése céljából elvégeztem a teljes Hilbert-térbeli (784×784) -es mátrix egzakt diagonalizációját is, melynek eredményeit összehasonlítottam a redukált Hilbert-térben kapott spektrummal, és megállapítottam, hogy a (784×784) -es mátrix ugyanazt az alapállapotot reprodukálja, mint a (70×70) -es. Ennek tudatában tehát a rendszer alapállapotú hullámfüggvénye a

$$|\psi_g\rangle = \sum_{i=1}^{70} x_i |i\rangle \quad (152)$$

összeggel adható meg, melyben az x_i együtthatók konkrét számértékei az egzakt diagonalizáció eredményeképpen állnak elő, az $|i\rangle$, $i = 1, 2, 3, \dots, 70$, bázisvektorokat pedig az F3.1-F3.6 ábrák összesítik.

	$t' = 0$	$t' = 0.1$	$t' = 0.5$
U	E_g		
0.0	-8.000000000000	-7.200000000000	-8.000000000000
0.5	-7.826052697604	-7.029096523521	-7.826554868506
1.0	-7.675901871093	-6.886663391590	-7.678117036240
1.5	-7.545391958586	-6.766883213589	-7.550564402476
2.0	-7.431230836069	-6.665278322743	-7.440430706187
2.5	-7.330781976775	-6.578374280956	-7.344831780650
3.0	-7.241912968838	-6.503455227928	-7.261386257598
3.5	-7.162884307355	-6.438383639055	-7.188137025326
4.0	-7.092266429238	-6.381465768299	-7.123478675601
4.5	-7.028876746763	-6.331350302916	-7.066093843884
5.0	-6.971731130272	-6.286951600765	-7.014899323332

1. Táblázat: E_g alapállapotú energiaértékek U függvényében $t' = 0$, $t' = 0.1$, illetve $t' = 0.5$ esetén.

Az 1. Táblázatban a $t' = 0$, $t' = 0.1$, $t' = 0.5$ hoppingértékek kiválasztásával példaként feltüntettem néhány E_g alapállapotú energiaértéket az U

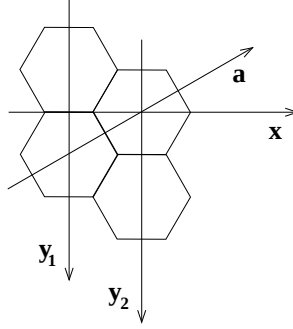
csatolási állandó függvényében úgy, hogy minden energia dimenziójú mennyiség a t egység szerint van skálázva. A táblázatban szereplő adatok a redukált Hilbert-térben kapott legkisebb sajátértékeket jelenítik meg, melyek tökéletes egyezést mutatnak a teljes Hilbert-térben adódó alapállapot energiáértékekkel. Ez alátámasztja azt a tényt, hogy a redukált Hilbert-tér 8.3. alfejezetben részletezett konstrukciója helyes, ennél fogva az $\mathcal{S}$ altérben kiszámított legkisebb sajátértékek a hozzájuk tartozó sajátvektorokkal együtt valóban a rendszer alapállapotát definiálják.

8.5. $\mathcal{S}$ bázisvektorainak konstrukciója

Ebben az alfejezetben szeretnék rávilágítani az F3.1-F3.6 ábrákon vázolt $|1\rangle - |70\rangle$ bázisvektorok konstrukciójának sajátos ismérveire, melyek voltaképpen a tanulmányozott rendszer kis méretének és a periodikus határfeltételek alkalmazásának együttes következményeiként adódnak. A 8.1. alfejezetben ugyanis már utaltam arra, hogy a rendszer csomópontjainak többsége a rács határszélein lévő pozíciókban helyezkedik el. Ennek következtében igen erőteljesen érvényesülnek a periodikus határfeltételek hatásai, melyek domináns mivoltukból eredően szükségszerű lenyomatot képeznek az állapotvektorok szerkezeti felépítésében is. Ahogyan az F3.1-F3.6 ábrák rajzain is nyomon követhető, a bázisvektorok maximálisan kettő, négy vagy nyolc grafikus komponenssel rendelkeznek, így bármely $|i\rangle$, $i = 1, 2, 3, \dots, 70$, vektor az

$$|i\rangle = N_i \sum_{m=1}^{m_{max}} |i_m\rangle \quad (153)$$

felírás szerint realizálható. (153)-ban az N_i faktor az adott állapot normáltóságát biztosítja, m_{max} értéke a grafikus komponensek számától függően 2, 4 vagy 8, az $|i_m\rangle$ állapotok pedig az $|i\rangle$ vektort alkotó $\mathcal{C}_{i,m}$, $m = 1, \dots, m_{max}$, konfigurációkat prezentálják, melyek matematikailag a (145-147)-ben adott szabályszerűségek alapján megkonstruált formulákkal definiálhatók. Az egyértelműség kedvéért megjegyzem, hogy az F3.1-F3.6 ábrák rajzain egy adott $|i\rangle$ vektor $\mathcal{C}_{i,m}$ konfigurációi növekvő m index szerint követik egymást. A (153) $|i\rangle$ állapotok $\mathcal{C}_{i,m}$ konfigurációinak egy egységes kép szerinti áttekintéséhez a következő szempontok figyelembevétele szükséges: i.) Minden $|i\rangle$ állapot sorában az első konfiguráció, azaz $\mathcal{C}_{i,1}$ adottnak tekintett. ii.) A sorban következő, további $\mathcal{C}_{i,m>1}$ konfigurációk pedig $\mathcal{C}_{i,1}$ -ből kiindulva, elemi szimmetriatranszformációk alkalmazásával származtathatók. A szimmetriaműveletek értelmezéséhez négy tengelyt vettem fel a hatszöges rácsban, melyeket a $\gamma = a, x, y_1, y_2$ jelölésekkel láttam el, és irányításukat a 27. ábrán tüntettem fel.



27. ábra : A rendszerben értelmezett a, x, y_1, y_2 tengelyek ábrázolása.

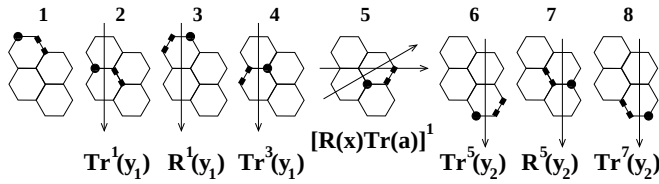
A $C_{i,m>1}$ konfigurációk szerkesztéséhez két alapvető szimmetriatranszformációt vezettem be, melyeket a $Tr(\gamma \neq x)$, illetve az $R(\gamma \neq a)$ jelölés prezentál. $Tr(\gamma \neq x)$ egy translációt valósít meg a $\gamma \neq x$ tengely mentén úgy, hogy az adott konfigurációt tengelyirányban eltolja $\mathbf{b}$ vektorral, melynek hossza megegyezik a hatszögek másodsomszéd távolságával. $R(\gamma \neq a)$ pedig egy rotációt hoz létre oly módon, hogy az adott konfigurációt 180° -os szöggel elforgatja a $\gamma \neq a$ tengely körül. A fenti konvenciók alkalmazásával bármely $|i\rangle$, $i = 1, 2, 3, \dots, 70$, bázisvektor $C_{i,m>1}$ konfigurációi a

$$\begin{aligned} C_{i,2} &= Tr(y_1) C_{i,1}, & C_{i,3} &= R(y_1) C_{i,1}, & C_{i,4} &= Tr(y_1) C_{i,3}, \\ C_{i,5} &= [R(x)Tr(a)] C_{i,1}, & C_{i,6} &= Tr(y_2) C_{i,5}, \\ C_{i,7} &= R(y_2) C_{i,5}, & C_{i,8} &= Tr(y_2) C_{i,7} \end{aligned} \quad (154)$$

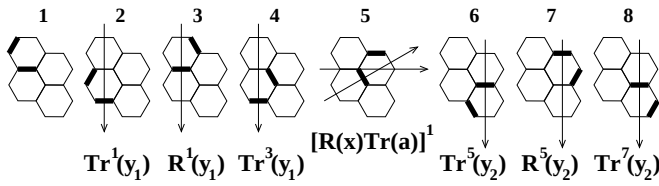
operációk nyomán jönnek létre. Az $m_{max} = 8$ grafikus komponenszt tartalmazó $|i\rangle$ vektorok esetében (154) $C_{i,m>1}$ konfigurációi a hatszöges rács effektíve különböző csomópontjaira pozicionálódnak. Ezzel szemben az $m_{max} = 4$, illetve az $m_{max} = 2$ komponenssel rendelkező $|i\rangle$ vektorok esetében (154) bizonyos $C_{i,m>1}$ járulékaik egybevágnak, ezért a $C_{i,2}, \dots, C_{i,8}$ által adott készlet multiplikált konfigurációkat foglal magába. Az F3.1-F3.6 ábrák $|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle, \dots, |70\rangle$ készletéből példaként kiválasztottam néhány vektort, melyek esetében a 28. ábrán grafikusán is ábrázoltam a (154) transzformációk egymást követő lépéseit. Megfigyelhető, hogy az adott $|i\rangle$ vektor $C_{i,m}$ konfigurációinak m indexe a rajzok fölé van helyezve, a $P = Tr, R$ transzformációkat illetően pedig – a képi redundancia elkerülése végett – a $C_{i,m'} = P(\gamma) C_{i,m} = P^m(\gamma)$ jelölést alkalmaztam, amely mindig a $P^m(\gamma)$ transzformáció által előállított konfiguráció rajza alatt jelenik meg. A 28.a ábra az $m_{max} = 8$ komponenszt tartalmazó $|8\rangle$ és $|31\rangle$ vektorok szerkesztését mutatja be, és világosan látszik, hogy nem fordulnak elő multiplikált konfigurációk, azaz $C_{8,m}$ és $C_{31,m}$, $m = 1, 2, \dots, 8$, mindegyike egyszer jelenik meg. A 28.b ábrán az $m_{max} = 4$ komponenssel rendelkező $|1\rangle$ és $|7\rangle$ vektorok konstrukciója követhető nyomon, ahol jól látható, hogy mind a négy

konfiguráció kétszer szerepel, azaz $\mathcal{C}_{1,1} \equiv \mathcal{C}_{1,3}$, $\mathcal{C}_{1,2} \equiv \mathcal{C}_{1,4}$, $\mathcal{C}_{1,5} \equiv \mathcal{C}_{1,7}$, $\mathcal{C}_{1,6} \equiv \mathcal{C}_{1,8}$, illetve $\mathcal{C}_{7,1} \equiv \mathcal{C}_{7,4}$, $\mathcal{C}_{7,2} \equiv \mathcal{C}_{7,3}$, $\mathcal{C}_{7,5} \equiv \mathcal{C}_{7,8}$, $\mathcal{C}_{7,6} \equiv \mathcal{C}_{7,7}$. Végül, a 28.c ábra az $m_{max} = 2$ komponensből felépülő $|29\rangle$ és $|70\rangle$ vektorok előállítását példázza, ahol észrevehető, hogy mindkét konfiguráció négyszer fordul elő, azaz $\mathcal{C}_{29,1} \equiv \mathcal{C}_{29,3} \equiv \mathcal{C}_{29,6} \equiv \mathcal{C}_{29,8}$, $\mathcal{C}_{29,2} \equiv \mathcal{C}_{29,4} \equiv \mathcal{C}_{29,5} \equiv \mathcal{C}_{29,7}$, illetve $\mathcal{C}_{70,1} \equiv \mathcal{C}_{70,4} \equiv \mathcal{C}_{70,5} \equiv \mathcal{C}_{70,8}$, $\mathcal{C}_{70,2} \equiv \mathcal{C}_{70,3} \equiv \mathcal{C}_{70,6} \equiv \mathcal{C}_{70,7}$. A fentebbi okfejtés tehát világosan mutatja, hogy az F3.1-F3.6 ábrák összes $|i\rangle$ vektora a (154)-ben felsorakoztatott transzformációs lépések alkalmazásával generálható, azzal a kitétellel, hogy a megadott szimmetriatranszformációk a négykomponensű vektorokat duplikált, a kétkomponensűeket pedig kvadruplikált formában produkálják.

$|8\rangle$ vektor

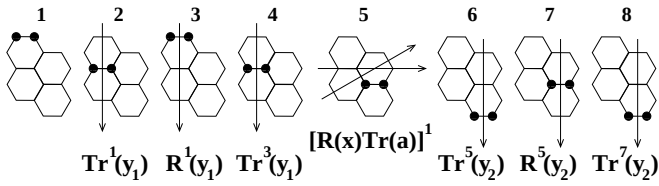


$|31\rangle$ vektor

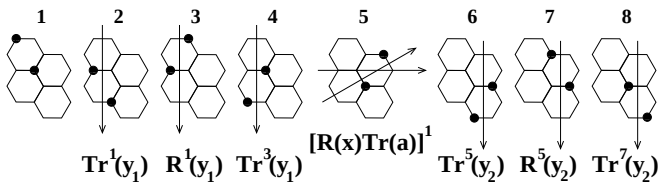


28.a

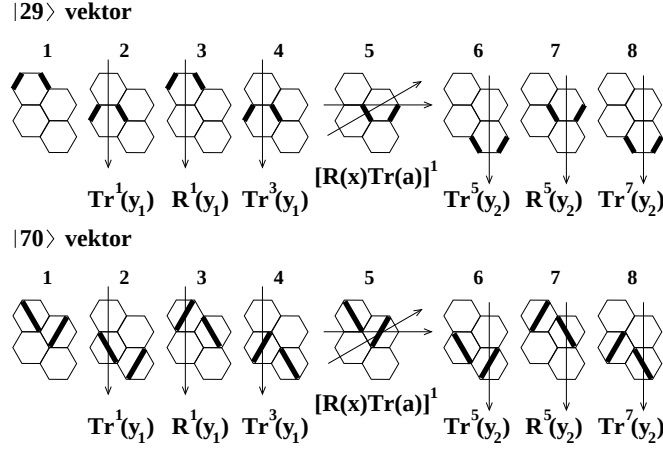
$|1\rangle$ vektor



$|7\rangle$ vektor



28.b

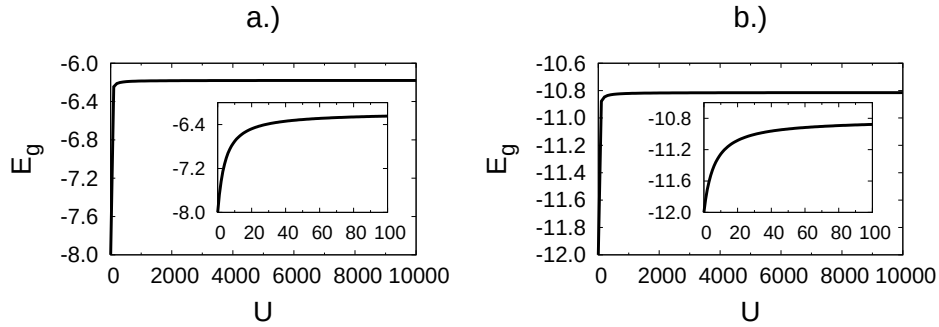


28.c

28. ábra : A nyolkekomponensű $|8\rangle$ és $|31\rangle$, a négykomponensű $|1\rangle$ és $|7\rangle$, illetve a kétkomponensű $|29\rangle$ és $|70\rangle$ vektorok grafikus szerkesztése a (154)-ben összegyűjtött transzformációs lépések alkalmazásával.

8.6. Az alapállapot fizikai tulajdonságai

A redukált $\mathcal{S}$ Hilbert-térben meghatározott (152) hullámfüggvény és a hozzá tartozó alapállapot energiája ismeretében számos alapállapot tulajdonság elemezhető. A vizsgálataim során elsőként azt tanulmányoztam, hogy az alapállapot energiája hogyan függ a kölcsönhatás erősségétől, azaz E_g hogyan változik U függvényében. Szakirodalmi adatok azt jegyzik, hogy a Hubbard-típusú modellek esetében, egydimenziós [252-254] és kétdimenziós [255] rendszerekben egyaránt gyakran tapasztalható olyan karakterisztika, mely szerint a szingulett alapállapot energiája véges tartományon növekvő U -val folyamatosan növekszik. Emellett az is ismeretes, hogy integrálható egydimenziós rendszerek Bethe Ansatz módszerrel számolt alapállapot energiája az $U \rightarrow \infty$ határesetben szaturációt mutat [256], azonban ez a viselkedés a rendszer ferromágneses mivoltával kapcsolódik össze [257]. Mindezek alapján tehát azt várhatnánk, hogy a tanulmányozott méhsejtes szerkezetű, kétdimenziós rendszer esetében folyamatosan növekvő $E_g(U)$ függvény adódik, annál is inkább, mert a legnagyobb kölcsönhatást képviselő részecskekonfigurációk (nevezetesen az $|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle$ vektorok) az alapállapot részét képezik. Ezzel szemben az egzakt diagonalizációs eljárás alapján számításaim más jellegű grafikonokat produkáltak, ugyanis azt az eredményt kaptam, hogy növekvő U mellett a négyrészecskes szingulett alapállapot energiája telítésbe fordul. Egy konkrét példát szemléltet a 29.a ábra, amely a $t'/t = 0.5$ érték beállításával készült.

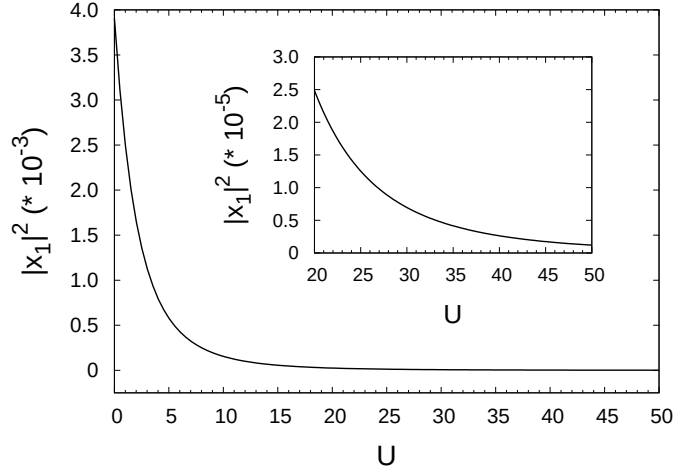


29. ábra : Az E_g alapállapotú energia telítési görbéje a kölcsönhatást jellemző U paraméter függvényében a.) hatszöges, illetve b.) négyzetes rács esetén.

További elemzéseim során az is világossá vált, hogy a bemutatott telítési görbe nem kizárólag a grafén típusú rendszerek specifikuma, hiszen a négyzetes rácsok $E_g(U)$ függvénye is hasonló tulajdonságot mutat. A 29.b ábra egy (4×4) -es kiterjedésű, $N = 4$ elektront tartalmazó négyzetes rács szingulett alapállapotú energiáját jeleníti meg a kölcsönhatás erősségének függvényében. A 29.b grafikont a [242]-ben feltüntetett publikáció adatainak felhasználásával rajzoltam meg. A 29. ábra minden mennyiségét a t egység skálázza, és mindkét rajz esetében megfigyelhető, hogy a szaturáció az 1000-es léptékű skála viszonylatában elég hamar, kb. az $U = 40$ értéknél jelenik meg. Hangsúlyozom, hogy a szakirodalom nemintegrálható kétdimenziós rendszerek egzakt eredményeinek szintjén korábban nem számolt be az $E_g(U)$ függvények fentebb vázolt szaturációs jellegéről.

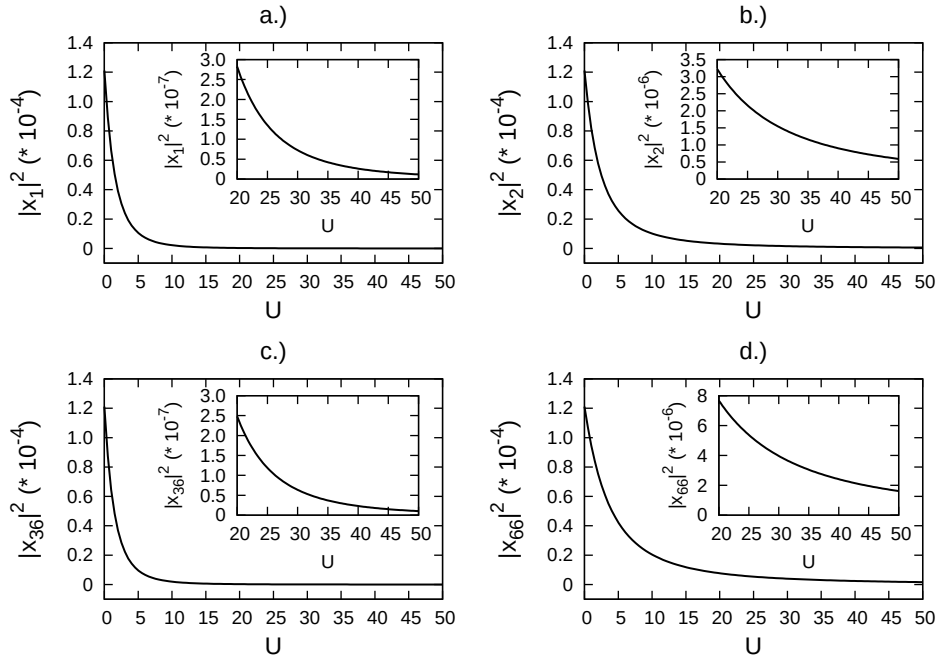
A 29. ábrán tapasztalt sajátos karakterisztika okán természetes módon vetődik fel a kérdés, hogy vajon milyen fizikai okok állhatnak a telítési görbe kialakulásának hátterében. Hogy erre érdemi magyarázatot adhassak, elkezdtem tanulmányozni a (152) alapállapotú hullámfüggvény x_i koefficienseit a kölcsönhatás erősségének függvényében. Mivel a Coulomb-taszítás az egyedüli interakció, amely modellszinten értelmezve van a rendszerben, így értelemszerűen azon bázisvektorok x_i együtthatóit kellett megvizsgálnom, melyek a Hubbard-kölcsönhatás szempontjából relevánsak, azaz tartalmaznak legalább egy duplán betöltött csomópontot, ahol az U csatolási állandó él. Az elemzések során azt tapasztaltam, hogy a dupla betöltést tartalmazó bázisvektorok x_i koefficienseinek abszolútérték-négyzetei erőteljes csökkenést mutatnak, miközben U növekszik. Ez fizikailag azt jelenti, hogy az x_i -hez tartozó $|i\rangle$ vektor előfordulási valószínűsége U növelésével drasztikusan lecseng, ami egybevág azzal, hogy az alapállapotú energia telítésbe fordul. $E_g(U)$ szaturációs jellegét ugyanis éppen az idézi elő, hogy a rendszer, a Coulomb-taszítást effektíve hordozó elektronkonfigurációk megjelenési valószínűségének rohamos hanyatlása miatt, U növelése ellenére sem

képes tovább növelni az alapállapot energiáját, ami végső soron $E_g(U)$ platójának kialakulásához vezet. A 30. ábra példaként az – elsőszomszéd távolságban pozicionált két dupla betöltést tartalmazó – $|1\rangle$ bázisvektor $|x_1|^2$ előfordulási valószínűségét illusztrálja U függvényében a $t'/t = -0.6$ paraméterérték esetében, amikor is az alapállapot nemdegenerált.



30. ábra : A hatszöges rács $|1\rangle$ bázisvektorának előfordulási valószínűsége a kölcsönhatás erősségének függvényében $t'/t = -0.6$ esetén. Az alapállapot nemdegenerált.

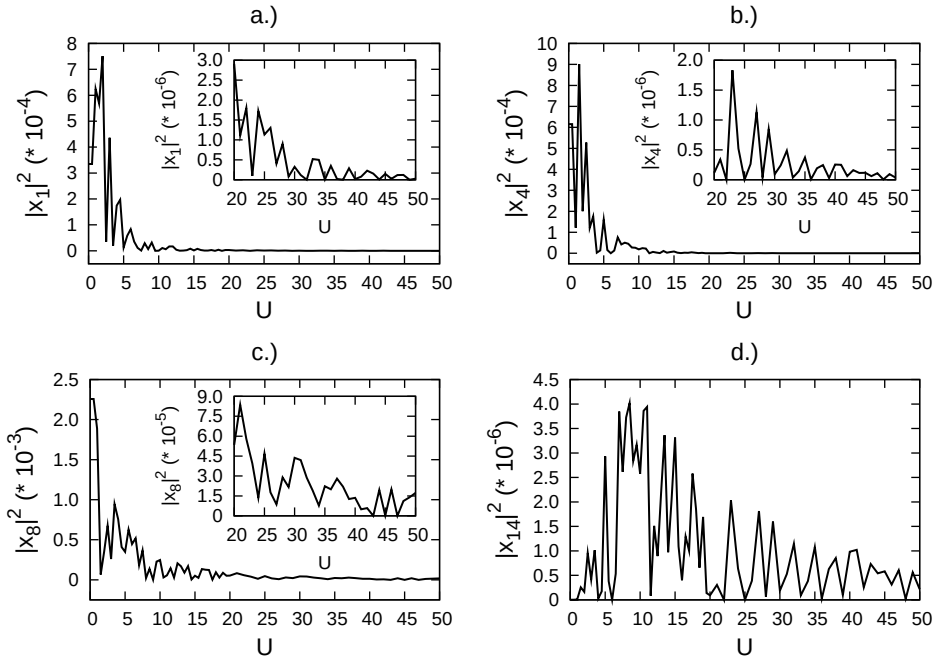
Hasonló csökkenés mutatkozik a [242]-ben tárgyalt négyzetes rács esetén is, melynek néhány grafikonját a 31. ábra jeleníti meg. Az ábra a.), b.), c.), d.) rajzai rendre az $|1\rangle, |2\rangle, |36\rangle, |66\rangle$ vektorok előfordulási valószínűségeit prezentálják, melyeket a [242]-ben jelzett publikáció adatai és vektorjelölései alapján készítettem el. A négyzetes rács $|1\rangle, |2\rangle, |36\rangle, |66\rangle$ bázisvektorainak szerkezetét illetően, $|1\rangle$ két elsőszomszéd távolságban lévő duplán betöltött csomópontból épül fel, $|2\rangle$ -ben egy dupla betöltés és két elsőszomszéd távolságban elhelyezkedő szimpla betöltés szerepel a dupla betöltéstől mért elsőszomszéd pozícióban, $|36\rangle$ két harmadszomszéd távolságban lévő dupla betöltést tartalmaz, $|66\rangle$ -ot pedig egy dupla betöltés és két elsőszomszéd távolságban található szimpla betöltés alkotja a dupla betöltéstől számított harmadszomszéd pozícióban. Az ábrákon megfigyelhető, hogy a hatszöges rendszerhez hasonlóan, a négyzetes rács esetén is igen erőteljes az állapotok valószínűségének csökkenése, ami azt mutatja, hogy a két rendszer dupla betöltést tartalmazó bázisvektorai nemdegenerált körülmények között kvalitatíve hasonlóképpen viselkednek. A pontosság kedvéért megjegyzem, hogy a 30-31. ábrák mennyiségei t egységeiben értendők.



31. ábra : A négyzetes rács $|1\rangle, |2\rangle, |36\rangle, |66\rangle$ bázisvektorainak előfordulási valószínűségei a kölcsönhatás erősségének függvényében. Az alapállapot nemdegenerált.

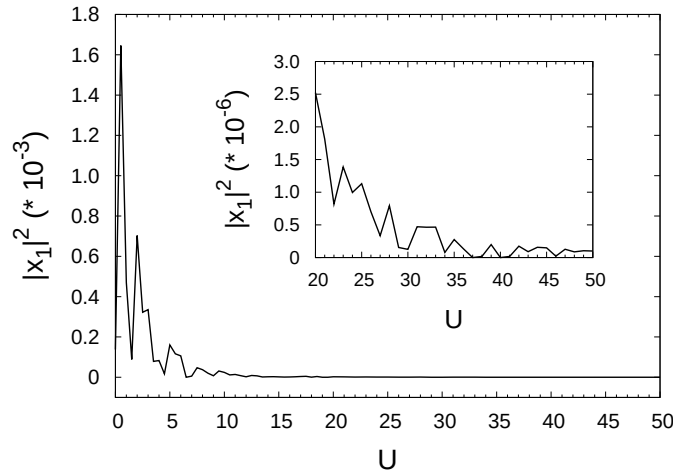
A fentebbiek alapján érzékelhető, hogy nemdegenerált alapállapotban a hatszöges és a négyzetes cellákból felépülő rendszerek minőségileg hasonló viselkedést produkálnak a kölcsönhatás effektusainak viszonylatában. A továbbiakban azonban lényeges eltérések mutatkoznak a két rendszer között, melyek a méhsejtes szerkezetben megjelenő, $|\psi_{g,1}\rangle$ és $|\psi_{g,2}\rangle$ vektorok által adott, kvázidegenerált alapállapotok következményeiként könyvelhetők el. A "kvázidegenerált" kifejezés arra utal, hogy a $|\psi_{g,1}\rangle$, illetve a $|\psi_{g,2}\rangle$ vektorokhoz tartozó $E_{g,1}$, illetve $E_{g,2}$ alapállapot energiák a számítások numerikus hibahatárán belül kb. 12 tizedesjegyre kiterjedő egyezést mutatnak, tehát az alapállapot nem szigorúan degenerált. A kvázidegeneráció a fázistérnek egy meglehetősen széles tartományára kiterjed, ami nem meglepő, hiszen a méhsejtes szerkezetű rendszerekre vonatkozóan korábbi tanulmányokban is fellelhető hasonló információ [258-260]. A kvázidegenerált és ortonormált $|\psi_{g,1}\rangle, |\psi_{g,2}\rangle$ vektorok által adott alapállapot esetében a 32. ábra vázolja néhány $|x_i|^2$ koefficiens grafikonját, melyek – a nemdegenerált szituációhoz hasonlóan – erőteljes lecsengést mutatnak, azonban a csökkenő tendenciára ezúttal egyfajta oszcilláció (reszketés) is szuperponálódik. Az a.), b.), c.), d.) rajzok rendre az $E_{g,1}$ energiájú $|\psi_{g,1}\rangle$ állapot $|1\rangle, |4\rangle, |8\rangle, |14\rangle$ bázisvektorainak előfordulási valószínűségeit ábrázolják U függvényében a

$t'/t = 0.5$ paraméterérték megválasztásával. Az $|1\rangle, |4\rangle, |8\rangle, |14\rangle$ bázisvektorok struktúrájára vonatkozóan megemlítem, hogy $|1\rangle$, illetve $|4\rangle$ két elsőszomszéd, illetve másodszomszéd távolságban lévő duplán betöltött csomópontból épül fel, $|8\rangle$, illetve $|14\rangle$ pedig egy dupla és két szimpla betöltést tartalmaz a dupla betöltéstől mért első-, illetve másodszomszéd pozícióban. Ahogyan az a 32. ábrán is megfigyelhető, a reszketés $|\psi_{g,1}\rangle$ minden bázisvektora esetében kvalitatíve hasonló képet mutat, és a függvénynek minden esetben határozott maximuma van, mely az $|1\rangle$ vektornál az $U = 2$, a $|4\rangle$ vektornál az $U = 1.5$, a $|8\rangle$ vektornál az $U = 0$, a $|14\rangle$ vektornál pedig az $U = 8.5$ érték által megadott pontban realizálódik. Természetesen az ábra mennyiségeit ezúttal is a t egység skálázza.



32. ábra : A hatszöges rács $|1\rangle, |4\rangle, |8\rangle, |14\rangle$ bázisvektorainak előfordulási valószínűségei a kölcsönhatás erősségének függvényében $t'/t = 0.5$ esetén. Az alapállapot kvázidegenerált.

Megjegyzem, hogy a fentebb bemutatott reszketés a $t' = 0$ esetben is megmarad, amit az $|1\rangle$ bázisvektor koefficiensének példáján keresztül a 33. ábrával támasztok alá. Látható, hogy a grafikon kvalitatíve ez esetben is a 32. ábra rajzaihoz hasonló karakterisztikával rendelkezik, a függvény maximuma pedig az $U = 0.5$ pontban található. Mint mindig, az ábra mennyiségei most is t egységekre vonatkoznak.



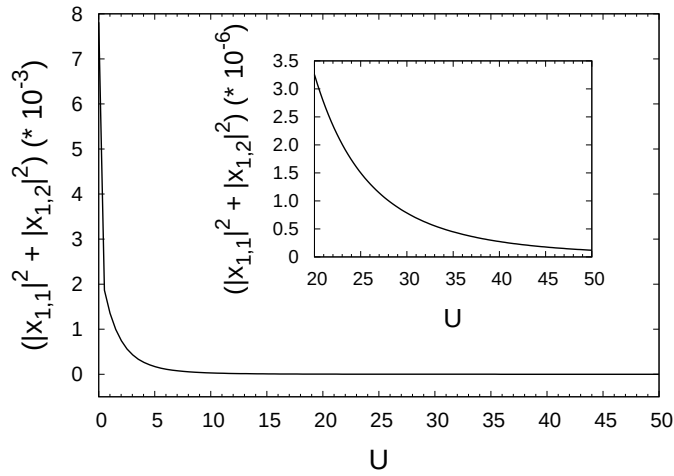
33. ábra : A hatszöges rács $|1\rangle$ bázisvektorának előfordulási valószínűsége a kölcsönhatás erősségének függvényében $t'/t = 0$ esetén. Az alapállapot kvázidegenerált.

A reszketés jelensége hagyományos értelemben véve a relativisztikus Dirac-elektron pozíciójának időfüggésében megfigyelhető oszcillációhoz kapcsolódik, ami a szakirodalomban Erwin Schrödinger nyomán az ún. *Zitterbewegung* (magyarul reszketőmozgás) elnevezés szerint ismert [261,262]. A jelenség lényege abban áll, hogy a vákuumban mozgó szabad, relativisztikus Dirac-elektron hullámcsomagját alkotó pozitív és negatív energiájú állapotok interferenciája fluktuációt idéz elő az elektron pozíciójában, ami voltaképpen egy időbeli oszcillációt generál. Az oszcilláció azonban nemcsak az elektron pozíciójában nyilvánul meg, hiszen a reszketés a sebességben, a pályaperdületben és a spinben is megmutatkozik. A Zitterbewegung – minden vonatkozásával együtt – régóta közkedvelt tárgya a szakirodalmi cikkeknek, mégis jobbra a 2000-es években vált igazán népszerű témává. A tudósok igen intenzív és kiterjedt vizsgálatokat folytattak ezen a területen, létrehozva ezzel egy rendkívül szerteágazó és sokszínű szövevényt, melynek szálai a Zitterbewegung jelensége köré fonódnak. Segítve az eddigi szakirodalmi tanulmányok áttekintését, a következő szakaszban röviden felsorakoztatom azokat a struktúrákat és a figyelembe vett fizikai körülményeket, melyek a Zitterbewegung kialakulása szempontjából relevánsak lehetnek. A reszketés tanulmányozásának egyik legtermészetesebb és legkézenfekvőbb módja a Dirac-egyenlet megoldásából származó eredmények vizsgálata. Számos értekezés foglalkozott a Dirac-egyenlet problémájával, melyek szabad [263,264], kezdetben lokalizált [265], lokalizált [266,267], illetve elektromágneses potenciálok hatása alatt lévő [268] Dirac-részecskék oszcillációját tárgyalták. Emellett az is ismert, hogy reszketés nem kizárólag relativisztikus körülmé-

nyek között jöhet létre, hiszen a Zitterbewegung nemrelativisztikus analógja is megfigyelhető például kétsávós rendszerekben [269,270] vagy egydimenziós periodikus láncokban [271,272]. Igen nagyszámú publikáció született a kondenzált anyagok fizikájának témakörében, melyek főként félvezetőkben [273-286], egyrétegű [287-300] és kétrétegű [287-289,299] grafénban, szén nanocsövekben [289,301], illetve szupravezetőkben [287,302] lévő elektronok reszketését írták le. Szilárdtestekben rámutattak a periodikus potenciál és a Zitterbewegung közvetlen kapcsolatára [281,303], és félvezetők esetében gyakran a Rashba-típusú [275,276,278-280,282-286], illetve a Dresselhaus-féle [275,276,278,279] spin-orbit kölcsönhatás viszonylatában is elemezték a reszketési effektust. A vizsgálatok során sok esetben külső elektromos [276,278,290,291,300,304] és mágneses [283,285,293,294,296-300,304,305] teretek hatását is figyelembe vették, melyek lenyomatot képeznek a Zitterbewegung karakterisztikájában. Ezenkívül a grafén esetében azt is tesztelték, hogy a szennyezők jelenléte hogyan befolyásolja a reszketést, és arra a következtetésre jutottak, hogy az oszcilláció túléli a szennyezések által okozott perturbációt [296]. Érdekeséggéppen említést tesznek arról is, hogy néhány tanulmány az elektron reszketését egyértelmű kapcsolatba hozta a spin-Hall-effektussal [276,278], illetve a Berry-fázissal [291,306,307], egy értekezésben pedig beszámoltak az elektron elektromágneses térnek oszcillációjáról is, melynek frekvenciája megegyezik az elektron Zitterbewegungjának rezgésszámával, és egy periódusra vett időbeli átlaga visszaadja az elektron klasszikus Coulomb-terét [308]. Az eredmények arra is rávilágítottak, hogy félvezetőkben az elektronok mellett a lyukak is képesek oszcillációt produkálni [274,279,282], sőt az utóbbi években olyan közleményeket is publikáltak, melyekben csapdázott ionok [309,310], hideg [311,312], illetve ultrahideg [313,314] atomok reszketését mutatták be. Mindemellett olyan eredmények is napvilágot láttak, melyek szerint a Zitterbewegung klasszikus hullámterjedési jelenségekben is megfigyelhető, például periodikus rendszerekben haladó akusztikai [315,316] vagy optikai [317-321] hullámok esetében. Az általános elméleti leírásokon [307,322] túlmenően számos javaslat született a Zitterbewegung kísérleti megfigyelésére [267,275,290,298,299,306] is.

Ahogy az a 32-33. ábrákon is látható, az általam tanulmányozott méhsejtes szerkezetű rendszerben az egyes elektronállapotok előfordulási valószínűségének oszcillációja nem időbeli folyamatként jelenik meg, hanem a Hubbard-kölcsönhatás erősségének függvényében rajzolódik ki. Ez az eredmény újszerű jelentéstartalommal ruházza fel a reszketés jelenségét, amely mindenképpen hozzájárul a Zitterbewegung palettájának színesítéséhez, hiszen az előző bekezdésben sorra vett, eddig megjelent közlemények az adott objektum (elektron, lyuk, atom, ion, klasszikus hullám) pozíciójának, sebességének vagy spinjének időbeli vagy térbeli oszcillációját tárgyalták. A

32-33. ábrákon figyelemmel kísérhető a reszketés tranziens jellege is, ugyanis a feltüntetett előfordulási valószínűségek az $U \rightarrow \infty$ határesetben gyakorlatilag nullává válnak, vagyis teljes mértékben lecsengenek. Mint ismeretes, a Zitterbewegung jelenségét minden esetben az adott körülmények között érvényes interferencia idézi elő. Ezzel összhangban, a méhsejtes szerkezetű rendszer esetében a reszketés a kvázidegenerált alapállapotot megvalósító $|\psi_{g,1}\rangle$ és $|\psi_{g,2}\rangle$ hullámvektorok interferenciájának eredményeképpen jön létre. Ezen állítás ellenőrzése céljából kiszámítottam a kvázidegenerált $|\psi_{g,n}\rangle$, $n = 1, 2$, alapállapot $|i\rangle$ bázisvektorának $x_{i,n}$, $n = 1, 2$, koefficienseiből képzett abszolútérték-négyzetek $\sum_{n=1,2} |x_{i,n}|^2$ összegét, melyet U függvényében ábrázolva, folytonosan lecsengő görbét kaptam, azaz a reszketés eltűnik. Egy konkrét példát illusztrál a 34. ábra, melyen az $|1\rangle$ bázisvektorhoz tartozó $\sum_{n=1,2} |x_{1,n}|^2$ összeg folytonos lefutása jelenik meg a kölcsönhatás erősségének függvényében a $t'/t = 0.5$ paraméterérték mellett. Az ábra minden mennyisége t egységben értendő. Az eredményeim tehát azt mutatják, hogy kvázidegenerált alapállapot adott $|i\rangle$ bázisvektora esetén $|x_{i,n}|^2$ (n rögzített) U függvényében reszketve cseng le, a $\sum_{n=1,2} |x_{i,n}|^2$ összeg azonban oszcilláció nélkül fogyatkozik (l. 32.a és 34. ábrák).



34. ábra : A hatszöges rács $|1\rangle$ bázisvektorához tartozó $\sum_{n=1,2} |x_{1,n}|^2$ valószínűség a kölcsönhatás erősségének függvényében $t'/t = 0.5$ esetén. Az alapállapot kvázidegenerált.

Az alfejezetben prezentált eredmények egyértelműen rávilágítanak a hatszöges és a négyzetes rácsok fizikai tulajdonságainak különbségeire, hiszen láthatjuk, hogy a kölcsönhatás erősségének kismértékű vagy akár infinitezimális változtatására a hatszöges struktúra sokkal érzékenyebben reagál, ezért a rendszer kölcsönhatás által befolyásolt sokrészecskés viselkedése alapvető eltérést mutathat a négyzetes rács tulajdonságaihoz viszonyítva.

A 8. fejezet eredményeinek rövid összefoglalása

A 8. fejezetben az ATAM módszer felhasználásával, periodikus határfeltételek megvalósítása mellett, meghatároztam egy *kétdimenziós méhsejtes szerkezettel rendelkező nanostruktúra* alapállapotát. A négy hatszögből felépülő és összesen nyolc különböző csomópontot tartalmazó rácsban négy elektront helyeztem el. Ebben az esetben a szingulett állapotokat képező bázisvektorok egy $\dim \mathcal{H} = 784$ dimenziós Hilbert-teret állítanak elő. Az ATAM módszer előírásai szerint megalkottam egy $\dim \mathcal{S} = 70$ dimenziós redukált Hilbert-teret, aminek köszönhetően egy nagyságrendnyi "nyereség" könyvelhető el $\dim \mathcal{H}$ és $\dim \mathcal{S}$ viszonylatában. A rendszer alapállapotát egzakt diagonalizációs technikával határoztam meg, és eredményeim helyességét az bizonyítja, hogy az $\mathcal{S}$ és $\mathcal{H}$ terekben elvégzett számítások egyező megoldásokra vezettek. A redukált Hilbert-térben analizáltam a rendszer alapállapot tulajdonságait. Elsőként azt vizsgáltam meg, hogy az E_g alapállapot energiája hogyan viselkedik a Hubbard-kölcsönhatás U csatolási állapotjának függvényében, és megállapítottam, hogy az $E_g(U)$ görbe telítési jelleget mutat. Érdekességgéppen egy négy elektront tartalmazó négyzetes rács esetében is megrajoltam az $E_g(U)$ függvényt, melynek elkészítéséhez egy korábbi publikáció adatait használtam fel. Az $E_g(U)$ görbe ezen négyzetes rács esetében is telítésbe fordul, ami azt jelzi, hogy a kapott szaturációs viselkedés nem rendszerspecifikum. Ugyanakkor mégis figyelemreméltó, mert nemintegrálható kétdimenziós rendszerek egzakt eredményeinek szintjén a szakirodalom korábban nem számolt be hasonló karakterisztikáról. Ezek után természetes módon vetődött fel a kérdés, hogy vajon milyen fizikai okok állhatnak a telítés kialakulásának hátterében. Hogy erre érdemi magyarázatot adhassak, tanulmányoztam az alapállapot hullámfüggvény redukált Hilbert-térbeli bázisvektorainak előfordulási valószínűségét a kölcsönhatás erősségének függvényében. Ennek során olyan bázisvektorokat kellett megvizsgálnom, melyek legalább egy dupla betöltést tartalmaznak, hiszen a Hubbard-kölcsönhatás csak a duplán betöltött csomópontokon érvényesül a rendszerben. Azt tapasztaltam, hogy a tanulmányozott méhsejtes és az említett négyzetes rács esetében az ábrázolt valószínűségek mindegyike erőteljes folytonos lecsengést produkál, ami egybevág azzal, hogy az alapállapot energiája telítésbe fordul. $E_g(U)$ szaturációs jellegét ugyanis éppen az idézi elő, hogy a rendszer, a bázisvektorok valószínűségének rohamos hanyatlása miatt, növekvő U ellenére sem képes tovább növelni az alapállapot energiáját. A méhsejtes rendszerben azonban, kvázidegenerált alapállapotok esetén, a bázisvektorok valószínűségének csökkenő görbéjére egyfajta oszcilláció (reszketés) is szuperponálódik, azaz megfigyelhető a *Zitterbewegung* jelensége. A "kvázidegenerált" kifejezés arra utal, hogy az állapotokhoz tartozó energiák kb. 12 tizedesjegyre kiterjedő egyezést mutatnak, tehát

az alapállapot nem szigorúan degenerált. A Zitterbewegung hagyományos értelemben véve a relativisztikus Dirac-elektron pozíciójának időbeli oszcillációját jelenti, amely a Dirac-elektron hullámcsomagját alkotó pozitív és negatív energiájú állapotok interferenciájának eredményeképpen jön létre. A Zitterbewegung azonban számos esetben megfigyelhető nemrelativisztikus körülmények között is, például félvezetőbeli elektronok és lyukak, csapdázott ionok, hideg atomok, vagy éppen klasszikus hullámok időbeli reszketéseként. Hangsúlyozom, hogy a tanulmányozott méhsejtes rendszerben tapasztalt reszketés nem időbeli folyamatként jelenik meg, hanem a Hubbard-kölcsönhatás erősségének függvényében rajzolódik ki. Ez mindenképpen újszerű jelentéstartalommal ruházza fel a Zitterbewegung jelenségét, amit ez esetben a kvázidegenerált állapotok interferenciájaként interpretálok. A 8. fejezet eredményeinek folyóiratcikk-formátuma a [244] hivatkozásban található meg.

9. fejezet

Összefoglaló

Doktori disszertációmban sokrészecskés, erősen kölcsönható, kvantummechanikailag viselkedő, nemintegrálható, periodikus rendszerek alapállapotai tulajdonságait tanulmányoztam a Hubbard-modell keretében, egzakt módszerek felhasználásával. Vizsgálataim tárgyát az 1. fejezetben vázolt kvázi-egydimenziós polifenilén típusú láncok, valamint kétdimenziós négyzetes, illetve méhsejtes szerkezettel rendelkező nanostruktúrák képezték. A rendszerek alapállapotainak meghatározásához a 4. fejezetben bemutatott *Pozitív Szemidefinit Operátorok* módszerét (PSZO módszer), illetve az *Alapállapotot Tartalmazó Altér Meghatározásán* alapuló módszert (ATAM módszer) alkalmaztam. Mindkét eljárással egzaktul, azaz közelítések nélkül produkálható a rendszer alapállapot hullámfüggvénye a járulékos alapállapot energiával együtt.

Az 5. fejezetben a PSZO módszer segítségével meghatároztam az N_c számú cellából felépülő kvázi-egydimenziós *polifenilén* struktúrák egzakt alapállapotait. Periodikus határfeltételek alkalmazása mellett arra az eredményre jutottam, hogy külső mágneses tér hiányában az alapállapot a teljes $N \leq N_c$ elektronszám-tartományon paramágneses és lokalizált. A lánc síkjára merőleges mágneses tér hatása alatt azonban az $N < N_c$ intervallumban az elektronok lokalizációs hossza megnövekszik a mágneses tér hiányában létrejövő lokalizációs hosszhoz képest. Ez végső soron ahhoz vezet, hogy az $N = N_c$ határesetben a rendszer telített ferromágnesként viselkedik. Ezek alapján azt a következtetést vontam le, hogy a külső mágneses tér ki-/bekapcsolásával változtatható az elektronok lokalizációs hossza, és $N = N_c$ esetén a rendszer paramágneses alapállapotából átbillenthető egy ferromágneses alapállapotba. Ez a viselkedés rendkívül különleges, hiszen a jelzett ferromágnesesség egy olyan szerves rendszerben idézhető elő, melynek atomjai nem rendelkeznek eredő mágneses momentummal. A nemkölcsönható sávszerkezetet érintő vizsgálataim szerint a létrejövő paramágneses és ferromágneses alapállapotok a kis koncentrációs részecskeszám-tartományon érvényesek. Elemzéseim során arra is rámutattam, hogy mágneses térben a sávszerkezet összes sávja lapossá válik, ez az effektus azonban kizárólag kvantált indukciójú mágneses tér esetén jön létre. Az $N = N_c$ számú elektron pedig éppen félig tölti fel a sávszerkezet legalsó lapos sávját, ami azt jelenti, hogy a kapott ferromágnesesség ún. Mielke–Tasaki-féle lapossáv-ferromágnesesség formájában valósul meg. A fentebbiekkel összhangban azonban a Mielke–Tasaki-féle lapossáv-ferromágnesesség ez esetben csak kvantált mágneses térben alakulhat ki, ami meglehetősen ritka jelenségnek számít.

Az 5. fejezetben bemutatott eredményeimet a [246] publikáció tartalmazza.

A 6. fejezetben megnöveltem a *polifenilén* típusú láncok fázistérnek méretét. A kapott paramágneses és lokalizált alapállapot ugyanis a fázistérnek csak egy keskeny, lineáris tartományán volt érvényes, ezért szükségesnek tartottam megvizsgálni azt, hogy ez a tartomány kiterjeszthető-e egy nagyobb doménre. Ennek érdekében kibővítettem a rendszer induló Hamilton-operátorának paraméterhalmazát, ami által a fentebb említett lineáris sávot sikerült kiszélesítenem egy speciális alakú térfogati zónára. Ezzel igazoltam, hogy a paramágneses és lokalizált alapállapot valójában a fázistérnek egy nagyobb méretű tartományán él. Ez esetben is tanulmányoztam a rendszer nemkölcsonható sávszerkezetét, és megállapítottam, hogy az induló Hamilton-operátor paraméterkészletének bővítése nem módosítja a sávszerkezet lényegi struktúráját. A 6. fejezetben foglalt eredményeim alapját a [247] közlemény képezi.

A 7. fejezetben a PSZO módszer alkalmazásával tanulmányoztam a nemmágneses fématomokból felépülő rendszerek nanoskálán tapasztalható ferromágneses viselkedésének mélyebb mozgatórugóit. A vizsgált rendszert egy *kétdimenziós négyzetes ráccsal rendelkező nanostruktúra* adta, melynek rácspontjaiban nemmágneses fématomok foglalnak helyet. Periodikus határfeltételek és az elektronok felületi mozgásának figyelembevétele mellett speciális vortexes szerkezetű, ferromágneses alapállapotra bukkantam. A "vortexes" – magyarul "örvényes" – kifejezés ez esetben arra utal, hogy az elektronok csak meghatározott vortexvonalak mentén létezhetnek a rendszerben. A kapott alapállapot ferromágneses mivoltát az elektronok spinindexei között létrejövő korrelációs hatások generálják. A nemkölcsonható sávszerkezet vizsgálatából az is kiderült, hogy a diszperziórelációt nem alakíthatja lapos sáv, tehát a kialakuló spinpolarizált állapot nem produkálhat Mielke–Tasaki-értelemben vett lapossáv-ferromágnesességet. Így a spinkorrelációs effektus révén előálló spinpolarizált állapot a ferromágnesesség klaszikus értelemben vett változataihoz képest egy teljesen újfajta mechanizmust képvisel. Számításaim szerint az alapállapotban jelenlévő elektronok száma arányos a rendszer lineáris méretével, aminek következtében az elektronok felületi koncentrációja fordított arányban áll a lineáris rendszermérettel. Ennélfogva a kapott ferromágnesesség csak nanoskálán releváns (termodinamikai határesetben eltűnik), és a kis koncentrációs részecskeszámtartományban érvényes. Összességében véve tehát az eredmények a nemmágneses fématomokból felépülő nanoszemcsékben létrejövő ferromágnesességnek egy lehetséges – kvantummechanikai és matematikai alapokon nyugvó – magyarázatát adhatják. A 7. fejezetben kapott eredmények publikált formában a [251] közleményben érhetők el.

A 8. fejezetben az ATAM módszer felhasználásával, periodikus határfeltételek megvalósítása mellett, meghatároztam egy *kétdimenziós méhsejtes*

szerkezettel rendelkező nanostruktúra alapállapotát. A négy hatszögből felépülő és összesen nyolc különböző csomópontot tartalmazó rácsban négy elektront helyeztem el. Ebben az esetben a szingulett állapotokat képező bázisvektorok egy $\dim \mathcal{H} = 784$ dimenziós Hilbert-teret állítanak elő. Az ATAM módszer előírásai szerint megalkottam egy $\dim \mathcal{S} = 70$ dimenziós redukált Hilbert-teret, aminek köszönhetően egy nagyságrendnyi "nyereség" könyvelhető el $\dim \mathcal{H}$ és $\dim \mathcal{S}$ viszonylatában. A rendszer alapállapotát egzakt diagonalizációs technikával határoztam meg, és eredményeim helyességét az bizonyítja, hogy az $\mathcal{S}$ és $\mathcal{H}$ terekben elvégzett számítások egyező megoldásokra vezettek. A redukált Hilbert-térben analizáltam a rendszer alapállapot tulajdonságait. Elsőként azt vizsgáltam meg, hogy az E_g alapállapot energiája hogyan viselkedik a Hubbard-kölcsönhatás U csatolási állapotjának függvényében, és megállapítottam, hogy az $E_g(U)$ görbe telítési jelleget mutat. Érdekességgéppen egy négy elektront tartalmazó négyzetes rács esetében is megrajzoltam az $E_g(U)$ függvényt, melynek elkészítéséhez egy korábbi publikáció adatait használtam fel. Az $E_g(U)$ görbe ezen négyzetes rács esetében is telítésbe fordul, ami azt jelzi, hogy a kapott szaturációs viselkedés nem rendszerspecifikum. Ugyanakkor mégis figyelemreméltó, mert nemintegrálható kétdimenziós rendszerek egzakt eredményeinek szintjén a szakirodalom korábban nem számolt be hasonló karakterisztikáról. Ezek után természetes módon vetődött fel a kérdés, hogy vajon milyen fizikai okok állhatnak a telítés kialakulásának hátterében. Hogy erre érdemi magyarázatot adhassak, tanulmányoztam az alapállapot hullámfüggvény redukált Hilbert-térbeli bázisvektorainak előfordulási valószínűségét a kölcsönhatás erősségének függvényében. Ennek során olyan bázisvektorokat kellett megvizsgálnom, melyek legalább egy dupla betöltést tartalmaznak, hiszen a Hubbard-kölcsönhatás csak a duplán betöltött csomópontokon érvényesül a rendszerben. Azt tapasztaltam, hogy a tanulmányozott méhsejtes és az említett négyzetes rács esetében az ábrázolt valószínűségek mindegyike erőteljes folytonos lecsengést produkál, ami egybevág azzal, hogy az alapállapot energiája telítésbe fordul. $E_g(U)$ szaturációs jellegét ugyanis éppen az idézi elő, hogy a rendszer, a bázisvektorok valószínűségének rohamos hanyatlása miatt, növekvő U ellenére sem képes tovább növelni az alapállapot energiáját. A méhsejtes rendszerben azonban, kvázidegenerált alapállapotok esetén, a bázisvektorok valószínűségének csökkenő görbéjére egyfajta oszcilláció (reszketés) is szuperponálódik, azaz megfigyelhető a *Zitterbewegung* jelensége. A "kvázidegenerált" kifejezés arra utal, hogy az állapotokhoz tartozó energiák kb. 12 tizedesjegyre kiterjedő egyezést mutatnak, tehát az alapállapot nem szigorúan degenerált. A *Zitterbewegung* hagyományos értelemben véve a relativisztikus Dirac-elektron pozíciójának időbeli oszcillációját jelenti, amely a Dirac-elektron hullámcsomagját alkotó pozitív és negatív energiájú állapotok interferenciájának eredményeképpen jön létre.

A Zitterbewegung azonban számos esetben megfigyelhető nemrelativisztikus körülmények között is, például félvezetőbeli elektronok és lyukak, csapdázott ionok, hideg atomok, vagy éppen klasszikus hullámok időbeli reszketéseként. Hangsúlyozom, hogy a tanulmányozott méhsejtes rendszerben tapasztalt reszketés nem időbeli folyamatként jelenik meg, hanem a Hubbard-kölcsönhatás erősségének függvényében rajzolódik ki. Ez mindenképpen újszerű jelentéstartalommal ruházza fel a Zitterbewegung jelenségét, amit ez esetben a kvázidegenerált állapotok interferenciájaként interpretálok. A 8. fejezet eredményeinek folyóiratcikk-formátuma a [244] hivatkozásban található meg.

10. fejezet

Summary

In my PhD thesis I studied the ground state properties of strongly interacting, quantum mechanically behaving, nonintegrable, periodic many-body systems in the framework of the Hubbard model, by application of exact methods. The subjects of my investigations were quasi-1D chains of polyphenylene type, as well as nanostructures possessing two-dimensional square, and honeycomb lattice, respectively. In order to deduce the ground states of the systems, I applied the method of *Positive Semidefinite Operators* (PSO method), and the method based on the *Determination of the Subspace Containing the Ground State* (DSCGS method), respectively. The ground state wave function of the system, together with the ground state energy can be produced with both procedures in exact terms, i.e. without approximations.

By means of the PSO method I determine the exact ground states of quasi-1D *polyphenylene* structures containing N_c cells. Under the application of periodic boundary conditions I reached the conclusion that in the absence of external magnetic field the ground state is paramagnetic and localized in the whole domain of the electron number $N \leq N_c$. However, under the influence of a magnetic field perpendicular to the plane of the chain, in the interval $N < N_c$ the localization length of the electrons increases as compared to that in the lack of the magnetic field. This finally leads to that in the borderline case $N = N_c$ the system behaves as a saturated ferromagnet. Based on these I concluded that the localization length of the electrons can be altered by switching on/off the external magnetic field, and in case of $N = N_c$ the system can be tilted from a paramagnetic to a ferromagnetic ground state. This behaviour is extremely special, because the mentioned ferromagnetism can be induced in such an organic system whose atoms do not possess resultant magnetic moments. According to my investigations regarding the bare band structure, the evolving paramagnetic and ferromagnetic ground states are valid in the low concentration range of the particle number. During my analysis I pointed out, too, that in a magnetic field all bands of the band structure become flat, this effect, however comes into existence exclusively in case of a magnetic field having quantized induction. The $N = N_c$ electrons fill the lowest flat band of the band structure even up to half, which means that the obtained ferromagnetism is realized in the form of so-called Mielke–Tasaki-like flat band ferromagnetism. In accordance with the above statements, however, the Mielke–Tasaki-like flat band

ferromagnetism can develop in this case only in a quantized magnetic field, which is rated quite rare phenomenon. The publication in [246] contains my results.

I increased the size of the phase space of the *polyphenylene* chains. Namely, the obtained paramagnetic and localized ground state was valid only in a narrow, linear domain of the phase space, hence I deemed it necessary to investigate the possibility to enlarge this range. To this end, I expanded the set of parameters of the starting Hamiltonian of the system, whereby I succeeded in broadening the above mentioned linear sector to a volumetrical zone having a special shape. Herewith I corroborated that the paramagnetic and localized ground state is present in fact in a larger sized domain of the phase space. I studied also in this case the bare band structure of the system, and I stated that the expansion of the set of parameters of the starting Hamiltonian does not modify the essential features of the band structure. The base of my results is given by the article in [247].

By applying the PSO method I studied the deeper drivers of the ferromagnetic behaviour of nanoscale systems consisting of nonmagnetic metal atoms. The examined system was given by a *nanostructure possessing two-dimensional square lattice*, whose lattice sites are occupied by nonmagnetic metal atoms. Under the consideration of periodic boundary conditions and surface motion of the electrons, I found a ferromagnetic ground state having a special vortex-like character. The "vortex-like" expression in this case refers to that the electrons can exist only along certain vortex lines in the system. The ferromagnetic nature of the obtained ground state is generated by correlation effects of spin indices of the electrons. Following the investigation of the bare band structure, it also turned out that the dispersion relation can not be created by a flat band, so the evolving spin-polarized state can not produce Mielke–Tasaki-like flat band ferromagnetism. Thus the spin-polarized state arising from the spin correlation effect, compared to the classical variants of ferromagnetism, represents a quite new type of mechanism. According to my calculations, the number of electrons presenting in the ground state is proportional to the linear size of the system, and as a consequence, the surface concentration of the electrons is in inverse proportion to the linear system size. Hence, the obtained ferromagnetism is relevant only in nanoscale (it disappears in thermodynamic limit) and valid in the low concentration range of the particle number. Overall, the results can provide a possible explanation – based on quantum mechanical and mathematical grounds – for ferromagnetism of nanograins built up by nonmagnetic metal atoms. The obtained results are available by published form in [251].

By making use of the DSCGS method, under the implementation of periodic boundary conditions, I determined the ground state of a *nano-*

structure possessing two-dimensional honeycomb lattice. I placed four electrons in the lattice constructed by four hexagons and containing in all eight different sites. In this case the base vectors forming singlet states produce a $\dim \mathcal{H} = 784$ -dimensional Hilbert space. According to the rules of the DSCGS method I composed a $\dim \mathcal{S} = 70$ -dimensional reduced Hilbert space, which enabled a gain of one order of magnitude in the relation of $\dim \mathcal{H}$ and $\dim \mathcal{S}$. I determined the ground state of the system by exact diagonalization technique, and the correctness of my results is proved by the fact that the calculations performed in spaces $\mathcal{S}$ and $\mathcal{H}$ led to matching solutions. In the reduced Hilbert space I analysed the ground state properties of the system. First I investigated how the E_g ground state energy behaves in the function of the U coupling constant of the Hubbard interaction, and I stated that the $E_g(U)$ curve shows saturation character. As a matter of interest, I depicted the $E_g(U)$ function also in case of a square lattice containing four electrons. To the preparation of the function I used the data of an earlier publication. The $E_g(U)$ curve turns into saturation in case of this square lattice, as well, which indicates that the obtained saturation behaviour is not system specificity. However, it is remarkable because, at the level of exact results of nonintegrable two-dimensional systems, the literature has not reported before on similar characteristic. Then, of course, the question arises what kind of physical causes can be behind the evolving of the saturation. In order to give a substantive explanation, I studied the probability of the base vectors of the ground state wave function in the reduced Hilbert space in the function of the interaction strength. During this I had to investigate such base vectors which contain at least one double occupancy, since the Hubbard interaction prevails only on the double occupied sites in the system. I experienced that, in case of the studied honeycomb and the mentioned square lattice, all of the plotted probabilities produce a strong continuous decay, which coincides with the fact that the ground state energy turns into saturation. Namely, the saturation character of $E_g(U)$ is caused by even the fact that the system, because of the rapid decrease of the probability of the base vectors, despite increasing U can not enhance its ground state energy. In the honeycomb lattice, however, in case of quasi-degenerate ground states, also an oscillation (trembling) is superimposed to the decreasing curve of the probability of the base vectors, i.e. the phenomenon of *Zitterbewegung* can be observed. The "quasi-degenerate" expression refers to that the energies belonging to the states show a match extending for about 12 digits, thus the ground state is not strictly degenerate. The *Zitterbewegung* in traditional sense means the temporal oscillation of the position of the relativistic Dirac electron, which comes into existence as a result of the interference of the positive- and negative-energy states creating the wave packet of the Dirac electron. The *Zitterbewegung*, however, can be observed

in many cases under nonrelativistic circumstances, as well, for example as temporal oscillation of electrons and holes in semiconductors, trapped ions, cold atoms, or even classical waves. I emphasise that the oscillation experienced in the studied honeycomb system appears not as a temporal process, but it is plotted in the function of the strength of the Hubbard interaction. This provide anyhow a novel meaning for the Zitterbewegung which I interpret in this case as an interference of the quasi-degenerate states. The results can be found in the reference [244].

Köszönetnyilvánítás

Tisztelettel megköszönöm a Témavezetőmnek, Dr. Gulácsi Zsoltnak, hogy magas szintű tudásával és példamutató becsületességével segítette a doktori tanulmányaim végzését, és köszönetet mondok mindazon embereknek, akik őszinte szívvel és önzetlen szeretettel támogattak a munkám során.

Irodalomjegyzék

- [1] M.E. Joaquim, "Polyphenyl Ether Lubricants" in Synthetic Lubricants and High-performance Functional Fluids, edited by R.L. Rudnick and R.L. Shubkin, (Marcel Dekker, New York, USA, 1999), p. 239.
- [2] B. Jakobsen, K. Niss, and N.B. Olsen, Jour. Chem. Phys. **123**, 234511, (2005).
- [3] S. Hamid and S.A. Burian, "Polyphenyl Ether Lubricants" in Synthetics, Mineral Oils, and Bio-based Lubricants: Chemistry and Technology, edited by L.R. Rudnick, (Taylor and Francis Publisher, Abingdon, UK, 2006), p. 175.
- [4] G. Chowdhury et al., Polyphenylene Oxide and Modified Polyphenylene Oxide Membranes: Gas, Vapor and Liquid Separation, edited by G. Chowdhury, B. Kruczek, and T. Matsuura, (Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, The Netherlands, 2001).
- [5] D. Parker, J. Bussink, H.T. van de Grampel, G.W. Wheatley, E.U. Dorf, E. Ostlinning, and K. Reinking, "Polymers, High-Temperature" in Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry, (Wiley-VCH, Weinheim, Germany, 2002).
- [6] E.D. Weil and S.V. Levchik, Flame Retardants for Plastics and Textiles: Practical Applications, (Hanser Publication, New York, USA, 2009), p. 106.
- [7] M.C. Hough et al., The Plastic Compendium, Vol. 1, Key Properties, Sources, (Rapra Technology, LTD, British Printing Company Publication, Shawbury, UK, 1995).
- [8] D.K. Platt, Engineering and High Performance Plastics: Market Report, (Rapra Technology, Birmingham, UK, 2003).
- [9] H.G. Elias and F. Vohwinkel, New Commercial Polymers, Vol. 2, (Gordon and Breach Science Publisher, Amsterdam, The Netherlands, 1986), p. 290.
- [10] J.H. Burroughes, D.D.C. Bradley, A.R. Brown, R.N. Marks, K. Mackay, R.H. Friend, P.L. Burns, and A.B. Holmes, Nature **347**, 539, (1990).
- [11] J. Li, N. Sun, Z.X. Guo, C. Li, Y. Li, L. Dai, D. Zhu, D. Sun, Y. Cao, L. Fan, Jour. Phys. Chem. B **106**, 11509, (2002).
- [12] Y. N. Gartstein, M.J. Rice, and E.M. Conwell, Phys. Rev. B **51**, 5546(R), (1995).
- [13] A. Chakrabarti and S. Mazumdar, Phys. Rev. B **59**, 4839, (1999).
- [14] A. Ruini, M.J. Caldas, G. Bussi, and E. Molinari, Phys. Rev. Lett. **88**, 206403, (2002).
- [15] H. Němec, H.K. Nienhuys, E. Perzon, F. Zhang, O. Inganäs, P. Kužel, and V. Sundström, Phys. Rev. B **79**, 245326, (2009).
- [16] T. Reddyhoff, H.A. Spikes, and A.V. Olver, Tribol. Lett. **36**, 69, (2009).
- [17] B. Jakobsen, N.B. Olsen, and T. Christensen, Phys. Rev. E **81**, 061505, (2010).
- [18] C. Maggi, B. Jakobsen, and J.C. Dyre, arXiv: cond-mat/1003.0341, (2010).
- [19] J.P. Bergfield, M. Solis, and C.A. Stafford, ACS Nano **4**, 5314, (2010).
- [20] D. Xing and J. Kerres, Polym. Adv. Technol. **17**, 591, (2006).
- [21] G. Brocks, J. van den Brink, and A.F. Morpurgo, Phys. Rev. Lett. **93**, 146405, (2004).
- [22] J. Hubbard, Proc. R. Soc. (London) A, **276**, 238, (1963).

- [23] G.C. Papavassiliou and V.M. Yartsev, Chem. Phys. Lett. **200**, 209, (1992).
- [24] L.M. Falicov and C.R. Proetto, Phys. Rev. B **47**, 14407, (1993).
- [25] M. Fabrizio, A. Parola, and E. Tosatti, Phys. Rev. B **44**, 1033, (1991).
- [26] C. Mei, L. Chen, Zeit. Phys. B **72**, 429, (1988).
- [27] L. Chen, C. Mei, Phys. Rev. B **39**, 9006, (1989).
- [28] A. Parola, S. Sorella, M. Parrinello, and E. Tosatti, Dynamics of magnetic fluctuations in high temperature superconductors, edited by G. Reiner, P. Horsch, and G. Psaltakis, (Plenum, New York, 1990).
- [29] J. Vidal, B. Doucot, R. Mosseri, and P. Butaud, Phys. Rev. Lett. **85**, 3906, (2000).
- [30] F.M. Pont and P. Serra, Jour. Phys. A: Math. Theor. **41**, 275303, (2008).
- [31] G. Zürn, F. Serwane, T. Lompe, A.N. Wenz, M.G. Ries, J.E. Bohn, and S. Jochim, Phys. Rev. Lett. **108**, 075303, (2012).
- [32] Y. Kwon, D.M. Ceperley, R.M. Martin, Phys. Rev. B **48**, 12037, (1993).
- [33] M. Himmerich and M. Letz, Phys. Rev. B **64**, 144519, (2001).
- [34] J.L. Zhu, S. Hu, Z. Dai, X. Hu, Phys. Rev. B **72**, 075411, (2005).
- [35] J.P. Kestner and L.M. Duan, Phys. Rev. A **76**, 033611, (2007).
- [36] I. Stetcu, B.R. Barrett, U. van Kolck, and J.P. Vary, Phys. Rev. A **76**, 063613, (2007).
- [37] S. Roy, M. Landini, A. Trenkwalder, G. Semeghini, G. Spagnolli, A. Simoni, M. Fattori, M. Inguscio, and G. Modugno, Phys. Rev. Lett. **111**, 053202, (2013).
- [38] F.F. Bellotti, T. Frederico, M.T. Yamashita, D.V. Fedorov, A.S. Jensen, and N.T. Zinner, New Jour. Phys. **16**, 013048, (2014).
- [39] P. D'Amico and M. Rontani, Jour. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **47**, 065303, (2014).
- [40] W.Y. Ruan, Y.Y. Liu, C.G. Bao, Z.Q. Zhang, Phys. Rev. B **51**, 7942(R), (1995).
- [41] Y.M. Liu, G.M. Huang, and C.G. Bao, Phys. Rev. B **70**, 073313, (2004).
- [42] B. Szafran and F.M. Peeters, Phys. Rev. B **71**, 245314, (2005).
- [43] W. Xie, Phys. Rev. B **74**, 115305, (2006).
- [44] Y. Li, C. Yannouleas, and U. Landman, Phys. Rev. B **76**, 245310, (2007).
- [45] Z. Liu, L. Wang, and K. Shen, Phys. Rev. B **85**, 045311, (2012).
- [46] Y.F. Ren, L. Wang, Z. Liu, and M.W. Wu, Phys. E **63**, 329, (2014).
- [47] R.B. Laughlin, Phys. Rev. B **27**, 3383, (1983).
- [48] L.L. Margolin, S. Tsiklauri, arXiv: math-ph/0710.3143, (2007).
- [49] X.J. Liu, X.Y. Wu, J.B. Lu, J. Ma, H. Li, S.Q. Zhang, G.H. Wang, H.M. Li, H.C. Yuan, and H.X. Gao, arXiv: quant-ph/1401.6874, (2014).
- [50] C.G. Bao, Phys. Rev. A **50**, 2182, (1994).
- [51] A.M. Frolov and D.M. Wardlaw, Phys. Rev. A **78**, 042506, (2008).
- [52] M.B. Ruiz, F. Latorre, A.M. Frolov, arXiv: physics.atom-ph/1311.2440, (2013).

-
- [53] A.M Frolov, M.B. Ruiz, Chem. Phys. Lett. **595-596**, 197, (2014).
 - [54] J. Cioslowski and E. Grzebielucha, Phys. Rev. A **77**, 032508, (2008).
 - [55] C. Amovilli, N. H. March, Phys. Rev. A **83**, 044502, (2011).
 - [56] C.G. Bao, W.Y. Ruan, and Y.Y. Liu, Phys. Rev. B **53**, 10820, (1996).
 - [57] M.B. Tavernier, E. Anisimovas, F.M. Peeters, B. Szafran, J. Adamowski, and S. Bednarek, Phys. Rev. B **68**, 205305, (2003).
 - [58] G. Granger, M.A. Kastner, I. Radu, M.P. Hanson, and A.C. Gossard, Phys. Rev. B **72**, 165309, (2005).
 - [59] Y. Li, C. Yannouleas, and U. Landman, Phys. Rev. B **80**, 045326, (2009).
 - [60] C.A. Sackett, D. Kielpinski, B.E. King, C. Langer, V. Meyer, C.J. Myatt, M. Rowe, Q.A. Turchette, W.M. Itano, D.J. Wineland, and C. Monroe, Nature **404**, 256, (2000).
 - [61] A.V. Koudinov, C. Kehl, A.V. Rodina, J. Geurts, D. Wolverson, and G. Karczewski, Phys. Rev. Lett. **112**, 147402, (2014).
 - [62] F.W. Byron Jr. and C.J. Joachain, Phys. Rev. **157**, 7, (1967).
 - [63] G.P. Barnett and H. Shull, Phys. Rev. **153**, 61, (1967).
 - [64] W. Florek, Acta Phys. Pol. **99**, 601, (2001).
 - [65] T. Chwiej and B. Szafran, Phys. Rev. B **78**, 245306, (2008).
 - [66] F. Serwane, G. Zürn, T. Lompe, T.B. Ottenstein, A.N. Wenz, S. Jochim, Science **332**, 336, (2011).
 - [67] P.P. Baruselli, R. Requist, M. Fabrizio, and E. Tosatti, Phys. Rev. Lett. **111**, 047201, (2013).
 - [68] P.O. Bugnion, J.A. Lofthouse, and G.J. Conduit, Phys. Rev. Lett. **111**, 045301, (2013).
 - [69] J. Omachi, T. Suzuki, K. Kato, N. Naka, K. Yoshioka, and M. Kuwata-Gonokami, Phys. Rev. Lett. **111**, 026402, (2013).
 - [70] M. Schüler, M. Rosner, T.O. Wehling, A.I. Lichtenstein, and M.I. Katsnelson, Phys. Rev. Lett. **111**, 036601, (2013).
 - [71] Z. Gulácsi, A. Kampf, D. Vollhardt, Prog. Theor. Phys. Suppl. **176**, 1, (2008).
 - [72] Z. Gulácsi, A. Kampf, and D. Vollhardt, Phys. Rev. Lett. **99**, 026404, (2007).
 - [73] Z. Gulácsi, A. Kampf, and D. Vollhardt, Phys. Rev. Lett. **105**, 266403, (2010).
 - [74] R. Trencsényi, E. Kovács, and Z. Gulácsi, Phil. Mag. **89**, 1953, (2009).
 - [75] R. Trencsényi, Z. Gulácsi, Eur. Phys. Jour. B **75**, 511, (2010).
 - [76] Z. Gulácsi and I. Orlik, Jour. Phys. A: Math. Gen. **34**, L359, (2001).
 - [77] Z. Gulácsi, Phys. Rev. B **69**, 054204, (2004).
 - [78] Z. Gulácsi, Phys. Rev. B **77**, 245113, (2008).
 - [79] I. Orlik and Z. Gulácsi, Phil. Mag. Lett. **78**, 177, (1998).
 - [80] Z. Gulácsi, Eur. Phys. Jour. B **30**, 295, (2002).
 - [81] Z. Gulácsi, Phys. Rev. B **66**, 165109, (2002).

- [82] Z. Gulácsi and D. Vollhardt, Phys. Rev. Lett. **91**, 186401, (2003).
- [83] Z. Gulácsi and D. Vollhardt, Phys. Rev. B **72**, 075130, (2005).
- [84] G. Fano, F. Ortolani, A. Parola, Phys. Rev. B **46**, 1048, (1992).
- [85] H. Zhu, Y. Jiang, Acta Chim. Sin. **51**, 527, (1993).
- [86] J. Kishine and H. Namaizawa, Prog. Theor. Phys. **93**, 519, (1995).
- [87] J. Ferrer and M.A. González-Alvarez, Phys. Rev. B **57**, 7470, (1998).
- [88] S. Mo, A. Sudbø, Phys. C **383**, 279, (2002).
- [89] H. Yokoyama, M. Ogata, and Y. Tanaka, Jour. Phys. Soc. Jpn. **75**, 114706, (2006).
- [90] K. Kubo, Phys. Rev. B **75**, 224509, (2007).
- [91] S.R. Hassan, B. Davoudi, B. Kyung, and A.M.S. Tremblay, Phys. Rev. B **77**, 094501, (2008).
- [92] A.H. Nevidomskyy, C. Scheiber, D. Sénéchal, and A.M.S. Tremblay, Phys. Rev. B **77**, 064427, (2008).
- [93] J.M.P. Carmelo, arXiv: cond-mat/0804.2388, (2010).
- [94] T. Miyagawa and H. Yokoyama, Jour. Phys. Soc. Jpn. **80**, 084705, (2011).
- [95] A. Yamada, K. Seki, R. Eder, and Y. Ohta, Phys. Rev. B **88**, 075114, (2013).
- [96] V. Voroshilov, arXiv: cond-mat/1404.3140, (2014).
- [97] K. Kubo, Phys. Rev. B **79**, 020407(R), (2009).
- [98] Y. Li, E.H. Lieb, and C. Wu, Phys. Rev. Lett. **112**, 217201, (2014).
- [99] P. Wurth, G. Uhrig, and E. Müller-Hartmann, Ann. Phys. **508**, 148, (1996).
- [100] J. Igarashi, M. Takahashi, and T. Nagao, Jour. Phys. Soc. Jpn. **68**, 3682, (1999).
- [101] M. Acquarone, M. Cuoco, C. Noce, A. Romano, Phys. B **261**, 725, (1999).
- [102] J.A. Riera, Phys. Rev. B **64**, 104520, (2001).
- [103] A. Miyanaga and H. Yamase, Phys. Rev. B **73**, 174513, (2006).
- [104] Z. Nussinov and A. Rosengren, Phil. Mag. Lett. **87**, 515, (2007).
- [105] D. Poilblanc, C. Weber, F. Milac, M. Sigrist, Jour. Mag. Mat. **310**, 523, (2007).
- [106] M. Rigol, T. Bryant, and R.R.P. Singh, Phys. Rev. E **75**, 061119, (2007).
- [107] C.P. Chou and T.K. Lee, Phys. Rev. B **85**, 104511, (2012).
- [108] J. Behre and S. Miyashita, Jour. Phys. A: Math. Gen. **25**, 4745, (1992).
- [109] J. Ferrer, Phys. Rev. B **47**, 8769, (1993).
- [110] B.B. Beard, R.J. Birgeneau, M. Greven, and U.J. Wiese, Phys. Rev. Lett. **80**, 1742, (1998).
- [111] K. Kato, S. Todo, K. Harada, N. Kawashima, S. Miyashita, and H. Takayama, Phys. Rev. Lett. **84**, 4204, (2000).
- [112] S.E. Krüger, J. Richter, J. Schulenburg, D.J.J. Farnell, R.F. Bishop, Phys. Rev. B **61**, 14607, (2000).

-
- [113] A.F. Albuquerque, M. Troyer, and J. Oitmaa, Phys. Rev. B **78**, 132402, (2008).
 - [114] R. Darradi, O. Derzhko, R. Zinke, J. Schulenburg, S.E. Krüger, and J. Richter, Phys. Rev. B **78**, 214415, (2008).
 - [115] J. Richter and J. Schulenburg, Eur. Phys. Jour. B **73**, 117, (2010).
 - [116] J. Richter, R. Darradi, J. Schulenburg, D.J.J. Farnell, and H. Rosner, Phys. Rev. B **81**, 174429, (2010).
 - [117] P. Sindzingre, N. Shannon, and T. Momoi, Jour. Phys.: Conf. Ser. **200**, 022058, (2010).
 - [118] A.B. Kallin, M.B. Hastings, R.G. Melko, and R.R.P. Singh, Phys. Rev. B **84**, 165134, (2011).
 - [119] L. Wang, D. Poilblanc, Z.C. Gu, X.G. Wen, and F. Verstraete, Phys. Rev. Lett. **111**, 037202, (2013).
 - [120] C.J. Hamer, Jour. Phys. A: Math. Gen. **33**, 6683, (2000).
 - [121] W.P. Orrick, B. Nickel, A.J. Guttmann, and J.H.H. Perk, Jour. Stat. Phys. **102**, 795, (2001).
 - [122] A. Kalz, A. Honecker, S. Fuchs, and T. Pruschke, Jour. Phys.: Conf. Ser. **145**, 012051, (2009).
 - [123] A.A. Saberi, Jour. Stat. Mech.: Theor. Exp. P07030, (2009).
 - [124] J. Yin and D.P. Landau, Phys. Rev. E **80**, 051117, (2009).
 - [125] A. Kalz and A. Honecker, Phys. Rev. B **84**, 174407, (2011).
 - [126] A. Kashuba, arXiv: cond-mat/1101.5077, (2011).
 - [127] S. Jin, A. Sen, W. Guo, and A.W. Sandvik, Phys. Rev. B **87**, 144406, (2013).
 - [128] I.Q. Sikakana, arXiv: cond-mat/1301.2400, (2013).
 - [129] O. Kapikranian and Y. Holovatch, Phys. Rev. B **81**, 134437, (2010).
 - [130] O. Derzhko, J. Richter, T. Verkholyak, Acta Phys. Pol. B **32**, 3427, (2001).
 - [131] O. Derzhko, T. Verkholyak, R. Schmidt, J. Richter, Phys. A: Stat. Mech. Appl. **320**, 407, (2003).
 - [132] O. Derzhko, T. Krokhamalskii, Phys. B: Cond. Mat. **337**, 357, (2003).
 - [133] V. Alba, A. Pelissetto, and E. Vicari, Jour. Stat. Mech.: Theor. Exp. P03006, (2010).
 - [134] Y.B. Deng, Q. Gu, Chin. Phys. Lett. **31**, 020504, (2014).
 - [135] J.F. Yu, Z.Y. Xie, Y. Meurice, Y. Liu, A. Denblyker, H. Zou, M.P. Qin, J. Chen, and T. Xiang, Phys. Rev. E **89**, 013308, (2014).
 - [136] M. Kohno and M. Takahashi, Phys. Rev. B **56**, 3212, (1997).
 - [137] D.J.J. Farnell and R.F. Bishop, arXiv: cond-mat/0606060, (2006).
 - [138] P. Chen, C.Y. Lai, and M.F. Yang, Jour. Stat. Mech.: Theor. Exp. P10001, (2009).
 - [139] R. Darradi, J. Richter, J. Schulenburg, R.F. Bishop, P.H.Y. Li, Jour. Phys.: Conf. Ser. **145**, 012049, (2009).
 - [140] A. Collins, J. McEvoy, D. Robinson, C.J. Hamer, and Z. Weihong, Jour. Phys.: Conf. Ser. **42**, 71, (2006).

- [141] A. Voigt and J. Richter, *Jour. Phys.: Cond. Mat.* **8**, 5059, (1996).
- [142] E. Zinasas, O.P. Sushkov, and J. Oitmaa, *Phys. Rev. B* **64**, 184431, (2001).
- [143] J. Dorier, F. Becca, and F. Mila, *Phys. Rev. B* **72**, 024448, (2005).
- [144] N.G. Zhang and C.L. Henley, *Eur. Phys. Jour. B* **38**, 409, (2004).
- [145] G. Katomeris, F. Selva, and J.L. Pichard, *Eur. Phys. Jour. B* **31**, 401, (2003).
- [146] Z.A. Németh and J.L. Pichard, *Eur. Phys. Jour. B* **33**, 87, (2003).
- [147] W. Selke and C. Ekiz, *Jour. Phys.: Cond. Mat.* **23**, 496002, (2011).
- [148] J.M. Hou, *Phys. Rev. Lett.* **111**, 130403, (2013).
- [149] F. Onufrieva, P. Pfeuty, *Jour. Phys. Chem. Sol.* **59**, 1853, (1998).
- [150] M. Kiselev, F. Bouis, F. Onufrieva, and P. Pfeuty, *Eur. Phys. Jour. B* **16**, 601, (2000).
- [151] P. Tomczak and J. Richter, *Jour. Phys. A: Math. Gen.* **34**, L461, (2001).
- [152] Y. Qi, Z.C. Gu, *Phys. Rev. B* **89**, 235122, (2014).
- [153] Y. Ran, A. Vishwanath, and D.H. Lee, *arXiv: cond-mat/0806.2321*, (2008).
- [154] R. Roy, *arXiv: cond-mat/0603271*, (2006).
- [155] S.K. Maiti, M. Dey, S.N. Karmakar, *Phys. Lett. A* **376**, 1366, (2012).
- [156] N.B. Christensen, H.M. Rønnow, D.F. McMorrow, A. Harrison, T.G. Perring, M. Enderle, R. Coldea, L.P. Regnault, and G. Aeppli, *Proc. Nat. Acad. Sci. U.S.A.* **104**, 15264, (2007).
- [157] M.Z. Ahmed, *arXiv: cond-mat/1110.4369*, (2011).
- [158] R.K. Kaul, R.G. Melko, M.A. Metlitski, and S. Sachdev, *Phys. Rev. Lett.* **101**, 187206, (2008).
- [159] M.I. Molina, *Phys. Rev. B* **74**, 045412, (2006).
- [160] R.F. Bishop and P.H.Y. Li, *Phys. Rev. B* **85**, 155135, (2012).
- [161] R.F. Bishop, P.H.Y. Li, D.J.J. Farnell, and C.E. Campbell, *Jour. Phys.: Cond. Mat.* **24**, 236002, (2012).
- [162] R.Q. He and Z.Y. Lu, *Phys. Rev. B* **86**, 045105, (2012).
- [163] A. Kalz, M. Arlego, D. Cabra, A. Honecker, and G. Rossini, *Phys. Rev. B* **85**, 104505, (2012).
- [164] P.H.Y. Li, R.F. Bishop, D.J.J. Farnell, J. Richter, C.E. Campbell, *Phys. Rev. B* **85**, 085115 (2012).
- [165] P.H.Y. Li, R.F. Bishop, D.J.J. Farnell, C.E. Campbell, *Phys. Rev. B* **86**, 144404, (2012).
- [166] F. Mezzacapo and M. Boninsegni, *Phys. Rev. B* **85**, 060402(R), (2012).
- [167] H. Zhang and C.A. Lamas, *Phys. Rev. B* **87**, 024415, (2013).
- [168] Z. Zhu, D.A. Huse, and S.R. White, *Phys. Rev. Lett.* **111**, 257201, (2013).
- [169] R.F. Bishop, P.H.Y. Li, and C.E. Campbell, *Phys. Rev. B* **89**, 214413, (2014).
- [170] P.H.Y. Li, R.F. Bishop, and C.E. Campbell, *Phys. Rev. B* **89**, 220408(R), (2014).

-
- [171] Z.Y. Meng, T.C. Lang, S. Wessel, F.F. Assaad, and A. Muramatsu, *Nature* **464**, 847, (2010).
- [172] F. Wang, *Phys. Rev. B* **82**, 024419, (2010).
- [173] D.C. Cabra, C.A. Lamas, H.D. Rosales, *Mod. Phys. Lett. B* **25**, 891, (2011).
- [174] B.K. Clark, D.A. Abanin, and S.L. Sondhi, *Phys. Rev. Lett.* **107**, 087204, (2011).
- [175] Y.M. Lu and Y. Ran, *Phys. Rev. B* **84**, 024420, (2011).
- [176] G. Wang, M.O. Goerbig, C. Miniatura, and B. Grémaud, *Europhys. Lett.* **95**, 47013, (2011).
- [177] J. Carrasquilla, A. Di Ciolo, F. Becca, V. Galitski, and M. Rigol, *Phys. Rev. B* **88**, 241109(R), (2013).
- [178] S. Sorella, Y. Otsuka, and S. Yunoki, *Sci. Rep.* **2**, 992, (2012).
- [179] S.R. Hassan and D. Sénéchal, *Phys. Rev. Lett.* **110**, 096402, (2013).
- [180] K. Kuroki and R. Arita, *Phys. Rev. B* **63**, 174507, (2001).
- [181] Z.C. Gu, H.C. Jiang, D.N. Sheng, H. Yao, L. Balents, and X.G. Wen, *Phys. Rev. B* **88**, 155112, (2013).
- [182] H.Y. Yang, A.F. Albuquerque, S. Capponi, A.M. Läuchli, and K.P. Schmidt, *New Jour. Phys.* **14**, 115027, (2012).
- [183] N.A. García-Martínez, A.G. Grushin, T. Neupert, B. Valenzuela, and E.V. Castro, *Phys. Rev. B* **88**, 245123, (2013).
- [184] T. Li, *Europhys. Lett.* **97**, 37001, (2012).
- [185] T. Durić, N. Chancellor, and I.F. Herbut, *Phys. Rev. B* **89**, 165123, (2014).
- [186] Y. Zhong, K. Liu, Y.Q. Wang, and H.G. Luo, *Phys. Rev. B* **86**, 165134, (2012).
- [187] Y. Zhong, H.G. Luo, *Int. Jour. Mod. Phys. B* **27**, 1361002, (2013).
- [188] K. Takano, *Phys. Rev. B* **74**, 140402(R), (2006).
- [189] E.V. Castro, A.G. Grushin, B. Valenzuela, M.A.H. Vozmediano, A. Cortijo, F. de Juan, *Phys. Rev. Lett.* **107**, 106402, (2011).
- [190] W. Wu and A.M.S. Tremblay, *Phys. Rev. B* **89**, 205128, (2014).
- [191] S.L.A. de Queiroz, *Phys. Rev. B* **73**, 064410, (2006).
- [192] K. Seki and Y. Ohta, *arXiv: cond-mat/1209.2101*, (2012).
- [193] S. Pujari, K. Damle, and F. Alet, *Phys. Rev. Lett.* **111**, 087203, (2013).
- [194] M.T. Tran and K. Kuroki, *Phys. Rev. B* **79**, 125125, (2009).
- [195] I.F. Herbut, *Phys. Rev. Lett.* **97**, 146401, (2006).
- [196] F.F. Assaad and I.F. Herbut, *Phys. Rev. X* **3**, 031010, (2013).
- [197] L. Janssen and I.F. Herbut, *Phys. Rev. B* **89**, 205403, (2014).
- [198] B. Roy and I.F. Herbut, *Phys. Rev. B* **82**, 035429, (2010).
- [199] S. Saremi and P.A. Lee, *Phys. Rev. B* **75**, 165110, (2007).

- [200] L. Dell’Anna, Jour. Stat. Mech.: Theor. Exp. P01007, (2010).
- [201] Y. Zhong, K. Liu, Y.F. Wang, Y.Q. Wang, and H.G. Luo, Eur. Phys. Jour. B **86**, 195, (2013).
- [202] M. Sherafati, S. Satpathy, Phys. Stat. Sol. B **248**, 2056, (2011).
- [203] Y. Hasegawa, K. Kishigi, Phys. Rev. B **86**, 165430, (2012).
- [204] J.M. Hou, arXiv: cond-mat/1406.3800, (2014).
- [205] Z. Huang and D.P. Arovas, arXiv: cond-mat/1205.6266, (2012).
- [206] E. Granato, Phys. Rev. B **87**, 094517, (2013).
- [207] A. Agazzi, J.P. Eckmann, G.M. Graf, Jour. Stat. Phys. **156**, 417, (2014).
- [208] A. Mishra, S.R. Hassan, and R. Shankar, arXiv: cond-mat/1401.5295, (2014).
- [209] M. Ahmed, arXiv: cond-mat/1110.6488, (2011).
- [210] T. Li, arXiv: cond-mat/1101.1352, (2011).
- [211] H. Yao and S.A. Kivelson, Phys. Rev. Lett. **108**, 247206, (2012).
- [212] P. Moree and H.J.J. te Riele, Math. Comp. **73**, 451, (2003).
- [213] Z. Vardeny and J. Tanc, Phys. Rev. Lett. **54**, 1844, (1985).
- [214] D. Baeriswyl, D.K. Campbell, and S. Mazumdar, Phys. Rev. Lett. **56**, 1509, (1986).
- [215] T.O. Wehling, E.U. Sasioglu, C. Friedrich, A.I. Lichtenstein, M.I. Katsnelson, and S. Blügel, Phys. Rev. Lett. **106**, 236805, (2011).
- [216] D.C. Mattis, The Many-Body Problem: An Encyclopedia of Exactly Solved Models in One Dimension, (World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd., Singapore, 1993).
- [217] V.E. Korepin, F.H.L. Eßler, Exactly Solvable Models of Strongly Correlated Electrons, in: Advanced Series in Mathematical Physics, Vol. 18, (World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd., Singapore, 1994).
- [218] U. Brandt, A. Giesekeus, Phys. Rev. Lett. **68**, 2648, (1992).
- [219] H. Tasaki, Phys. Rev. Lett. **70**, 3303, (1993).
- [220] A. Tanaka, Jour. Phys. A: Math. Gen. **37**, 1559, (2004).
- [221] R. Strack, D. Vollhardt, Phys. Rev. Lett. **70**, 2637, (1993).
- [222] R. Strack, D. Vollhardt, Phys. Rev. Lett. **72**, 3425 (1994).
- [223] M. Kollar, R. Strack, D. Vollhardt, Phys. Rev. B **53**, 9225, (1996).
- [224] L.G. Sarasua, Phys. Rev. B **75**, 054504, (2007).
- [225] L.G. Sarasua, Phys. B **406**, 3622, (2011).
- [226] L.G. Sarasua, M.A. Continentino, Phys. Rev. B **69**, 073103, (2004).
- [227] R. Strack, Phys. Rev. Lett. **70**, 833, (1993).
- [228] I. Orlik, Z. Gulácsi, Phil. Mag. B **76**, 845, (1997).
- [229] I. Orlik, Z. Gulácsi, Phil. Mag. B **81**, 1587, (2001).

-
- [230] A. Klümper, A. Schadschneider, and J. Zittartz, *Europhys. Lett.* **24**, 293, (1993).
- [231] J. de Boer, *Phys. Rev. Lett.* **75**, 4298, (1995).
- [232] S. Albeverio, S.M. Fei, *Europhys. Lett.* **41**, 665, (1998).
- [233] C. Dziurzik, A. Schadschneidera, and J. Zittartz, *Eur. Phys. Jour. B* **12**, 209, (1999).
- [234] A. Montorsi, D.K. Campbell, *Phys. Rev. B* **53**, 5153, (1996).
- [235] P. Gurin, Z. Gulácsi, *Phys. Rev. B* **64**, 045118, (2001).
- [236] R.B. Laughlin, *Phil. Mag.* **86**, 1165, (2006).
- [237] L. Huijse, N. Moran, J. Vala, and K. Schoutens, *Phys. Rev. B* **84**, 115124, (2011).
- [238] M. Nakamura, Z.Y. Wang, and E.J. Bergholtz, *Phys. Rev. Lett.* **109**, 016401, (2012).
- [239] E. Kovács, Z. Gulácsi, *Phil. Mag. B* **81**, 1557, (2001).
- [240] E. Kovács, Z. Gulácsi, *Jour. Phys. A: Math. Gen.* **38**, 10273, (2005).
- [241] E. Kovács, Z. Gulácsi, *Phil. Mag. B* **86**, 1997, (2006).
- [242] E. Kovács, Z. Gulácsi, *Phil. Mag. B* **86**, 2073, (2006).
- [243] S. Harir, M. Bennai, and Y. Boughaleb, *Fiz. A (Zagreb)* **17**, 59, (2008).
- [244] R. Trencsényi, K. Glukhov, Z. Gulácsi, *Phil. Mag.* **94**, 2195, (2014).
- [245] A. Mielke and H. Tasaki, *Commun. Math. Phys.* **158**, 341, (1993).
- [246] R. Trencsényi, K. Gulácsi, E. Kovács, Z. Gulácsi, *Ann. Phys. (Berlin)* **523**, 741, (2011).
- [247] R. Trencsényi, Z. Gulácsi, *Phil. Mag.* **92**, 4657, (2012).
- [248] B. Sampedro, P. Crespo, A. Hernando, R. Litrán, J.C. Sánchez López, C. López Cartes, A. Fernández, J. Ramírez, J. González Calbet, and M. Vallet, *Phys. Rev. Lett.* **91**, 237203, (2003).
- [249] P. Crespo, R. Litrán, T.C. Rojas, M. Multigner, J.M. de la Fuente, J.C. Sánchez López, M.A. García, A. Hernando, S. Penadés, and A. Fernández, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 087204, (2004).
- [250] S. Banerjee, S.O. Raja, M. Sardar, N. Gayathri, B. Ghosh, A. Dasgupta, *arXiv: cond-mat/0912.3319*, (2010).
- [251] E. Kovács, R. Trencsényi, Z. Gulácsi, *Jour. Phys.: Conf. Ser.* **47**, 012048, (2013).
- [252] B. Verstichel, H. van Aggelen, W. Poelmas, S. Wouters, and D. Van Neck, *Comput. Theor. Chem.* **1003**, 12, (2013).
- [253] S.G. Chung, *Phys. Lett. A* **361**, 396, (2007).
- [254] M. Jemai, P. Schuck, J. Dukelsky, and R. Bennaceur, *Phys. Rev. B* **71**, 1, (2005).
- [255] H. Shi and S. Zhang, *Phys. Rev. B* **88**, 125132, (2013).
- [256] E.H. Lieb and F.Y. Wu, *Phys. A* **321**, 1, (2003).
- [257] M. Kollar and D. Vollhardt, *Phys. Rev. B* **65**, 155121, (2002).
- [258] E. McCann and V.I. Falko, *Phys. Rev. B* **71**, 085415, (2005).
- [259] I. Klich, S.H. Lee, and K. Iida, *Nat. Comm.* **5**, 3497, (2014).

- [260] M. Zarenia, A. Chaves, G.A. Farias, F.M. Peeters, Phys. Rev. B **84**, 245403, (2011).
- [261] E. Schrödinger, Sitz. Preuss. Akad. Wiss. Phys. Math. Kl. **24**, 418, (1930).
- [262] A.O. Barut and A.J. Bracken, Phys. Rev. D **23**, 2454, (1981).
- [263] K. Huang, Am. Jour. Phys. **20**, 479, (1952).
- [264] B. Thaller, arXiv: quant-ph/0409079, (2008).
- [265] J.A. Lock, Am. Jour. Phys. **47**, 797, (1979).
- [266] E. Romera, Phys. Rev. A **84**, 052102, (2011).
- [267] Y.X. Wang, J. Cao, and S.J. Xiong, Eur. Phys. Jour. B **85**, 237, (2012).
- [268] J.W. Braun, Q. Su, and R. Grobe, Phys. Rev. A **59**, 604, (1999).
- [269] L. Ferrari and G. Russo, Phys. Rev. B **42**, 7454, (1990).
- [270] F. Cannata, L. Ferrari, Phys. Rev. B. **44**, 8599, (1991).
- [271] F. Cannata, L. Ferrari, G. Russo, Solid State Comm. **74**, 309, (1990).
- [272] S.V. Vonsovskii, M.S. Svirskii, L.M. Svirskaya, Theor. Math. Phys. **94**, 243, (1993).
- [273] N. Shmueli, A. Yacoby, and Y. Imry, Europhys. Lett. **29**, 711, (1995).
- [274] Z.F. Jiang, R.D. Li, S.C. Zhang, and W.M. Liu, Phys. Rev. B **72**, 045201, (2005).
- [275] J. Schliemann, D. Loss, and R.M. Westervelt, Phys. Rev. Lett. **94**, 206801, (2005).
- [276] S.Q. Shen, Phys. Rev. Lett. **95**, 187203, (2005).
- [277] W. Zawadzki, Phys. Rev. B **72**, 085217, (2005).
- [278] P. Brusheim and H.Q. Xu, Phys. Rev. B **74**, 205307, (2006).
- [279] J. Schliemann, D. Loss, and R.M. Westervelt, Phys. Rev. B **73**, 085323, (2006).
- [280] E. Bernardes, J. Schliemann, M. Lee, J.C. Egues, and D. Loss, Phys. Rev. Lett. **99**, 076603, (2007).
- [281] T.M. Rusin and W. Zawadzki, Jour. Phys.: Cond. Mat. **19**, 136219, (2007).
- [282] J. Schliemann, Phys. Rev. B **75**, 045304, (2007).
- [283] U. Zülicke, J. Bolte, and R. Winkler, New Jour. Phys. **9**, 355, (2007).
- [284] V.Y. Demikhovskii, G.M. Maksimova, and E.V. Frolova, Phys. Rev. B **78**, 115401, (2008).
- [285] J. Schliemann, Phys. Rev. B **77**, 125303, (2008).
- [286] Z. Wilamowski, W. Ungier, M. Havlicek, and W. Jantsch, arXiv: cond-mat/1001.3746, (2010).
- [287] J. Cserti and G. Dávid, Phys. Rev. B **74**, 172305, (2006).
- [288] M.I. Katsnelson, Eur. Phys. Jour. B **51**, 157, (2006).
- [289] T.M. Rusin and W. Zawadzki, Phys. Rev. B **76**, 195439, (2007).
- [290] B. Trauzettel, Ya.M. Blanter, and A.F. Morpurgo, Phys. Rev. B **75**, 035305, (2007).
- [291] R. Englman, T. Vértesi, Phys. Rev. B **78**, 205311, (2008).

-
- [292] G.M. Maksimova, V.Y. Demikhovskii, and E.V. Frolova, Phys. Rev. B **78**, 235321, (2008).
- [293] T.M. Rusin and W. Zawadzki, Phys. Rev. B **78**, 125419, (2008).
- [294] J. Schliemann, New Jour. Phys. **10**, 043024, (2008).
- [295] A.H. Castro Neto, F. Guinea, N.M.R. Peres, K.S. Novoselov and A.K. Geim, Rev. Mod. Phys. **81**, 109, (2009).
- [296] V. Krueckl and T. Kramer, New Jour. Phys. **11**, 093010, (2009).
- [297] E. Romera and F. de los Santos, Phys. Rev. B **80**, 165416, (2009).
- [298] T.M. Rusin and W. Zawadzki, Phys. Rev. B **80**, 045416, (2009).
- [299] Y.X. Wang, Z. Yang, and S.J. Xiong, Europhys. Lett. **89**, 17007, (2010).
- [300] P.E. de Brito, H.N. Nazareno, Phys. B **407**, 1068, (2012).
- [301] W. Zawadzki, Phys. Rev. B **74**, 205439, (2006).
- [302] D. Lurié and S. Cremer, Physica (Amsterdam), **50**, 224, (1970).
- [303] W. Zawadzki, T.M. Rusin, Phys. Lett. A **374**, 3533, (2010).
- [304] A.O. Barut and W.D. Thacker, Phys. Rev. D **31**, 2076, (1985).
- [305] A. Bermudez, M.A. Martin-Delgado, and E. Solano, Phys. Rev. Lett. **99**, 123602, (2007).
- [306] J. Cserti and G. Dávid, Phys. Rev. B **82**, 201405(R), (2010).
- [307] G. Dávid, J. Cserti, Phys. Rev. B **81**, 121417(R), (2010).
- [308] J. Vaz Jr. and W.A. Rodriguez Jr., Phys. Lett. B **319**, 203, (1993).
- [309] L. Lamata, J. León, T. Schätz, and E. Solano, Phys. Rev. Lett. **98**, 253005, (2007).
- [310] R. Gerritsma, G. Kirchmair, F. Zähringer, E. Solano, R. Blatt, and C.F. Roos, Nature **463**, 68, (2010).
- [311] J.J. Song and B.A. Foreman, Phys. Rev. A **80**, 045602, (2009).
- [312] D. Braun, Phys. Rev. A **82**, 013617, (2010).
- [313] M. Merkl, F.E. Zimmer, G. Juzeliūnas, and P. Öhberg, Europhys. Lett. **83**, 54002, (2008).
- [314] J.Y. Vaishnav and C.W. Clark, Phys. Rev. Lett. **100**, 153002, (2008).
- [315] X. Zhang and Z. Liu, Phys. Rev. Lett. **101**, 264303, (2008).
- [316] Y. Wang, S. Peng, Y. Ye, H. Jia, Z. He, M. Ke, H. Yang, C. Qiu, Z. Liu, Phys. Lett. A **374**, 4933, (2010).
- [317] X. Zhang, Phys. Rev. Lett. **100**, 113903, (2008).
- [318] L.G. Wang, Z.G. Wang, and S.Y. Zhu, Europhys. Lett. **86**, 47008, (2009).
- [319] F. Dreisow, M. Heinrich, R. Keil, A. Tunnermann, S. Nolte, S. Longhi, and A. Szameit, Phys. Rev. Lett. **105**, 143902, (2010).
- [320] S. Longhi, Opt. Lett. **35**, 235, (2010).
- [321] S. Longhi, Jour. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **43**, 205402, (2010).
- [322] R. Winkler, U. Zülicke, J. Bolte, Phys. Rev. B **75**, 205314, (2007).

1. Függelék

$\hat{H} - E_g$ pozitív szemidefinit mivoltának bizonyítása

Kiindulásképpen tekintsünk egy $\hat{H}$ Hamilton-operátort, melynek spektrumában E_g jelöli az alapállapot energiát, és a $\mathcal{H}$ Hilbert-tér egy tetszőleges $|\psi\rangle$ elemével írjuk fel $\hat{H}$ sajátérték-egyenletét a

$$\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle \quad (F1.1)$$

által adott alakban. Az (F1.1)-beli E energiaértékekre fennáll az $E \geq E_g$ reláció, hiszen E_g $\hat{H}$ sajátértékeinek alsó korlátját definiálja.

Ezután a $\mathcal{H}$ Hilbert-tér egy tetszőleges $|\psi\rangle$ elemével írjuk fel $\hat{H} - E_g$ sajátérték-egyenletét is a

$$(\hat{H} - E_g)|\psi\rangle = E'|\psi\rangle \quad (F1.2)$$

kifejezés szerint, ahol E' a $\hat{H} - E_g$ operátor sajátértékeit adja meg, és nyilvánvalóan azt kell bebizonyítanunk, hogy $E' \geq 0$, mivel $\hat{H} - E_g$ csakis ez esetben lehet pozitív szemidefinit. Ehhez célszerű (F1.2)-t átrendezni a

$$\hat{H}|\psi\rangle = (E' + E_g)|\psi\rangle \quad (F1.3)$$

formulának megfelelően, hiszen így módon (F1.1) és (F1.3) közvetlenül kapcsolatba hozható egymással. Látható ugyanis, hogy (F1.1) és (F1.3) bal oldalán ugyanazon $\hat{H}|\psi\rangle$ szerepel, aminek következményeképpen a két egyenlőség jobb oldalának is egyeznie kell. Ez pedig ahhoz vezet, hogy megállapíthatjuk az

$$E = E' + E_g \quad (F1.4)$$

relációt, amelyből E' -t kifejezve eljutunk az

$$E' = E - E_g \quad (F1.5)$$

egyenlőséghez. Ezzel gyakorlatilag el is készült a bizonyítás, hiszen (F1.1) felírását követően világossá tettük, hogy $E \geq E_g$, így (F1.5) folytán $E' \geq 0$ valóban teljesül.

2. Függelék

A Pozitív Szemidefinit Operátorok módszerének alkalmazása az egydimenziós harmonikus oszcillátor esetében

Az egydimenziós harmonikus oszcillátor Hamilton-operátorát $-\hbar = m = \omega = 1$ egységek esetén – a

$$\hat{H} = \frac{1}{2}\hat{p}^2 + \frac{1}{2}\hat{x}^2 \quad (F2.1)$$

kifejezés szerint írhatjuk fel, ahol $\hat{p}$ és $\hat{x}$ az oszcillátor impulzusának és pozíciójának operátorait jelölik. A

$$\begin{aligned} \hat{p} &= \hat{a}^\dagger + \hat{a} \\ \hat{x} &= i(\hat{a}^\dagger - \hat{a}) \end{aligned} \quad (F2.2)$$

transzformációk alkalmazásával (i a komplex képzetes egység) az (F2.1) Hamilton-operátor a

$$\hat{H} = \hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \quad (F2.3)$$

alakra hozható, ami éppen egyezik az oszcillátor Hamilton-operátorának másodkvantált formájával. Ennek megfelelően $\hat{a}^\dagger$, illetve $\hat{a}$ bozonikus keltő, illetve eltüntető operátor. Ha (F2.3)-at összevetjük a módszer által előírt $\hat{H} = \hat{P} + C$ transzformációs formulával, akkor láthatjuk, hogy ez esetben egyetlen pozitív szemidefinit operátor szerepel a felbontásban, nevezetesen $\hat{a}^\dagger \hat{a}$, azaz $\hat{P} = \hat{a}^\dagger \hat{a}$, az alapállapot energiát megadó C konstans pedig egyszerűen $C = \frac{1}{2}$.

Az alapállapot hullámfüggvény meghatározásához a módszer a $\hat{P}|\psi\rangle = 0$ feltételt használja fel, melyben a kiinduló $|\psi\rangle$ hullámfüggvény a lehető legáltalánosabb konstrukcióval rendelkezik. Oszcillátorunk esetében a legáltalánosabb állapotvektort a betöltési számok Hilbert-terében vett $|n\rangle$ testesíti meg, így a $\hat{P}|\psi\rangle = 0$ feltétel most

$$\hat{a}^\dagger \hat{a}|n\rangle = 0 \quad (F2.4)$$

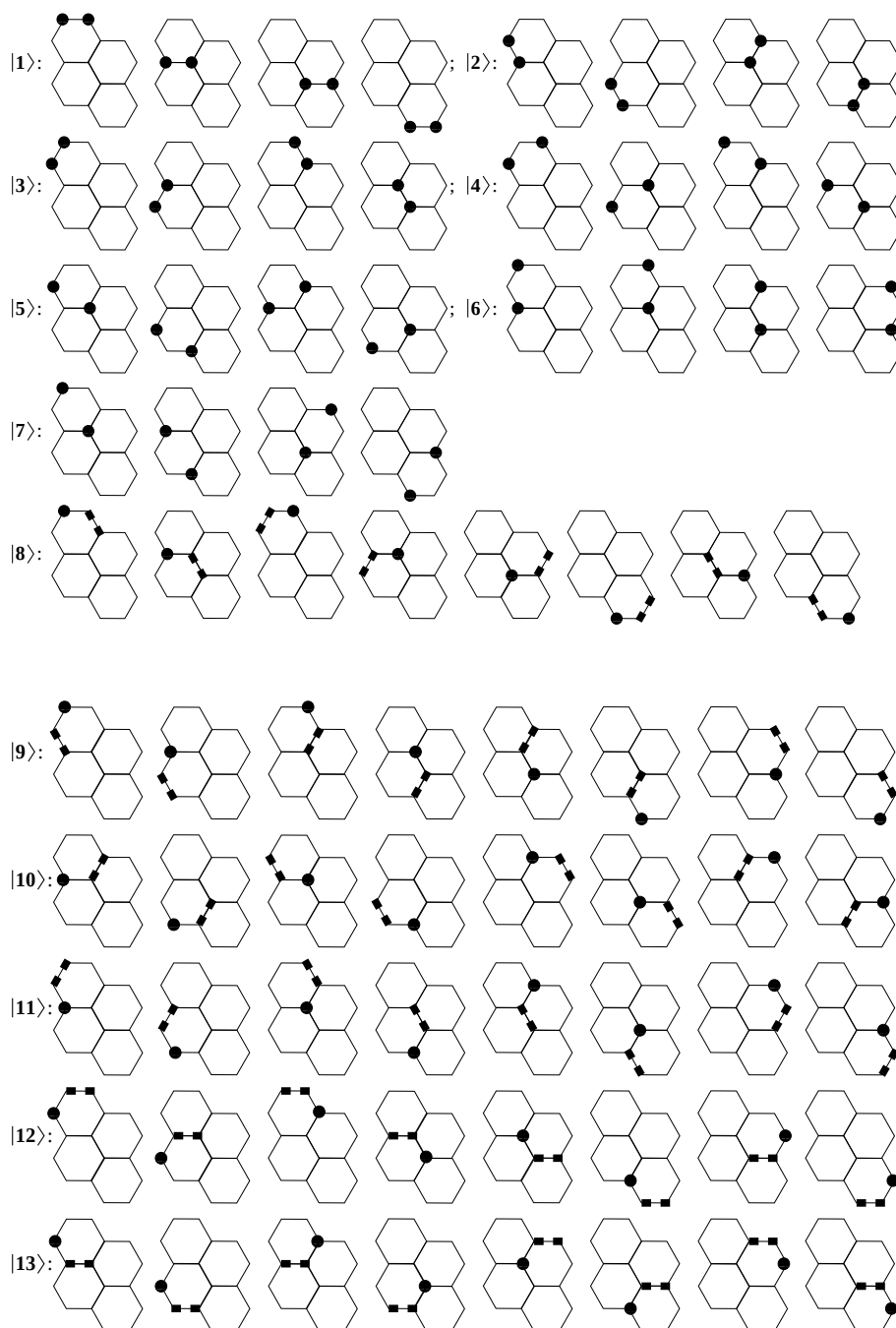
formában áll elő. Az (F2.4) egyenlőség egyedüli megoldása az $|n\rangle = |0\rangle$ állapot, hiszen ekkor $\hat{a}|0\rangle = 0$ definíció szerint teljesül. Ez azt jelenti, hogy az oszcillátor alapállapot hullámfüggvényét az $|n\rangle_g = |0\rangle$ vákuumállapot definiálja, melyhez a kapcsolódó alapállapot energiát a fentebbiek értelmében az $E_g = \frac{1}{2}$ érték adja.

A 4.2. alfejezetben végigvezetett módszertani lépések és a jelen függelékben tárgyalt eljárás összehasonlítása világosan rámutat arra, hogy különböző

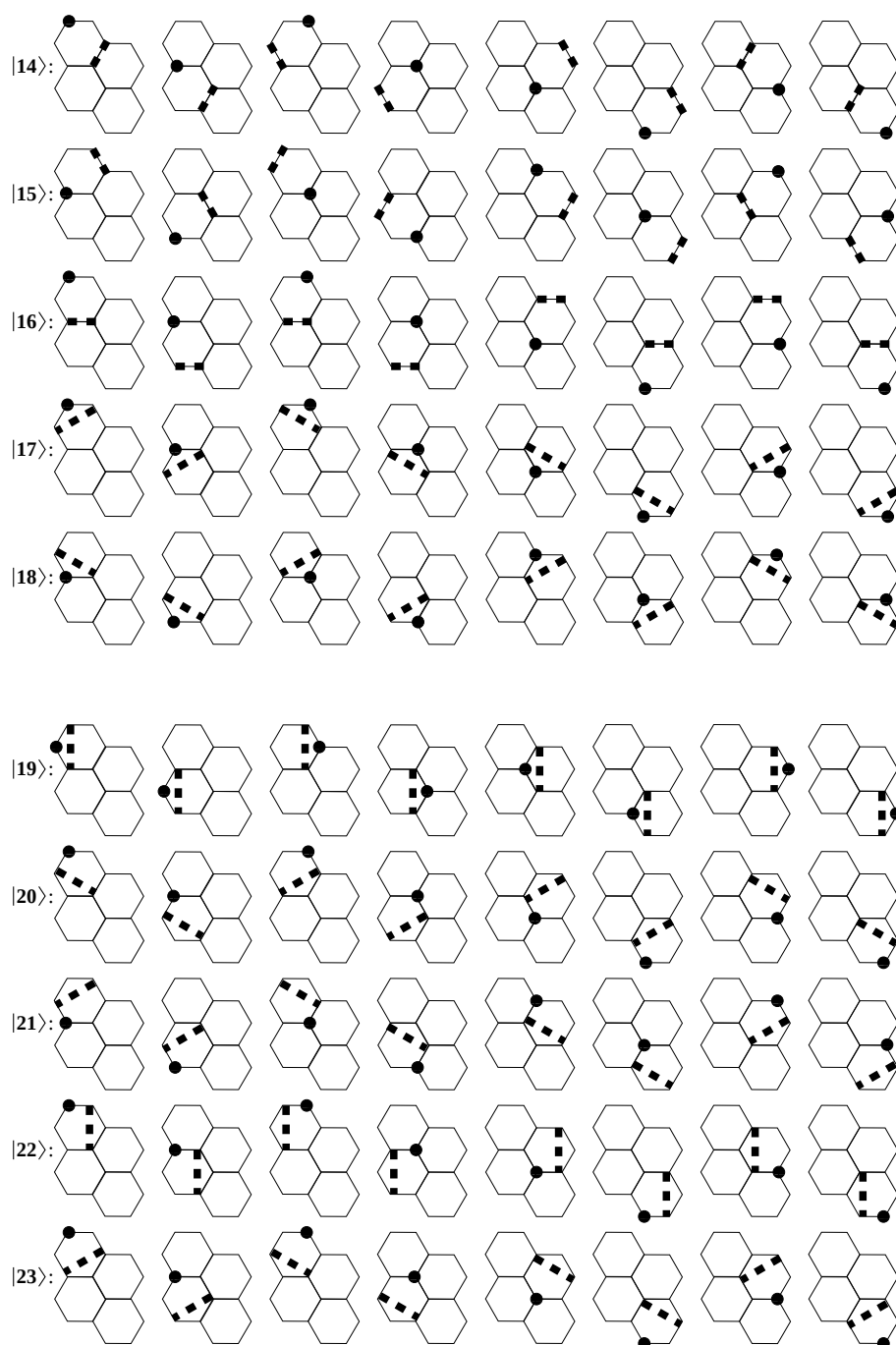
típusú rendszerek esetében mennyire eltérő lehet a PSZO módszer egyes lépéseinek konkrét megvalósítása, így az is látható, hogy a sokrészecskés szilárdtestek problémájához képest egy egyszerű egydimenziós, egyrészecskés esetben az eljárás alkalmazása már-már triviálisnak mondható.

3. Függelék

A redukált Hilbert-tér 70 bázisvektorának grafikus szemléltetése a méhsejtes nanostruktúra esetében

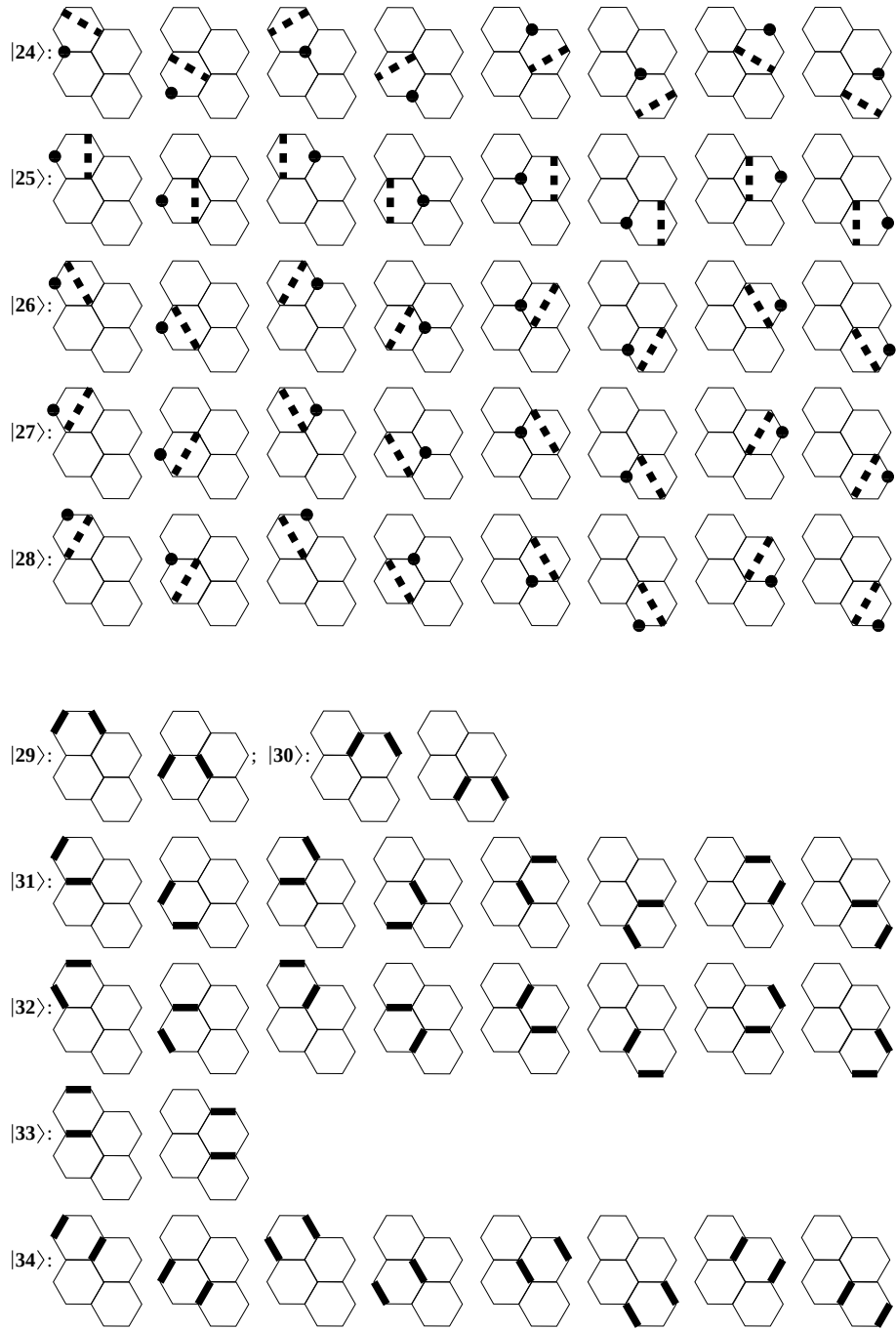


F3.1 ábra : A redukált Hilbert-tér $|1\rangle - |13\rangle$ bázisvektorainak szerkezeti felépítése

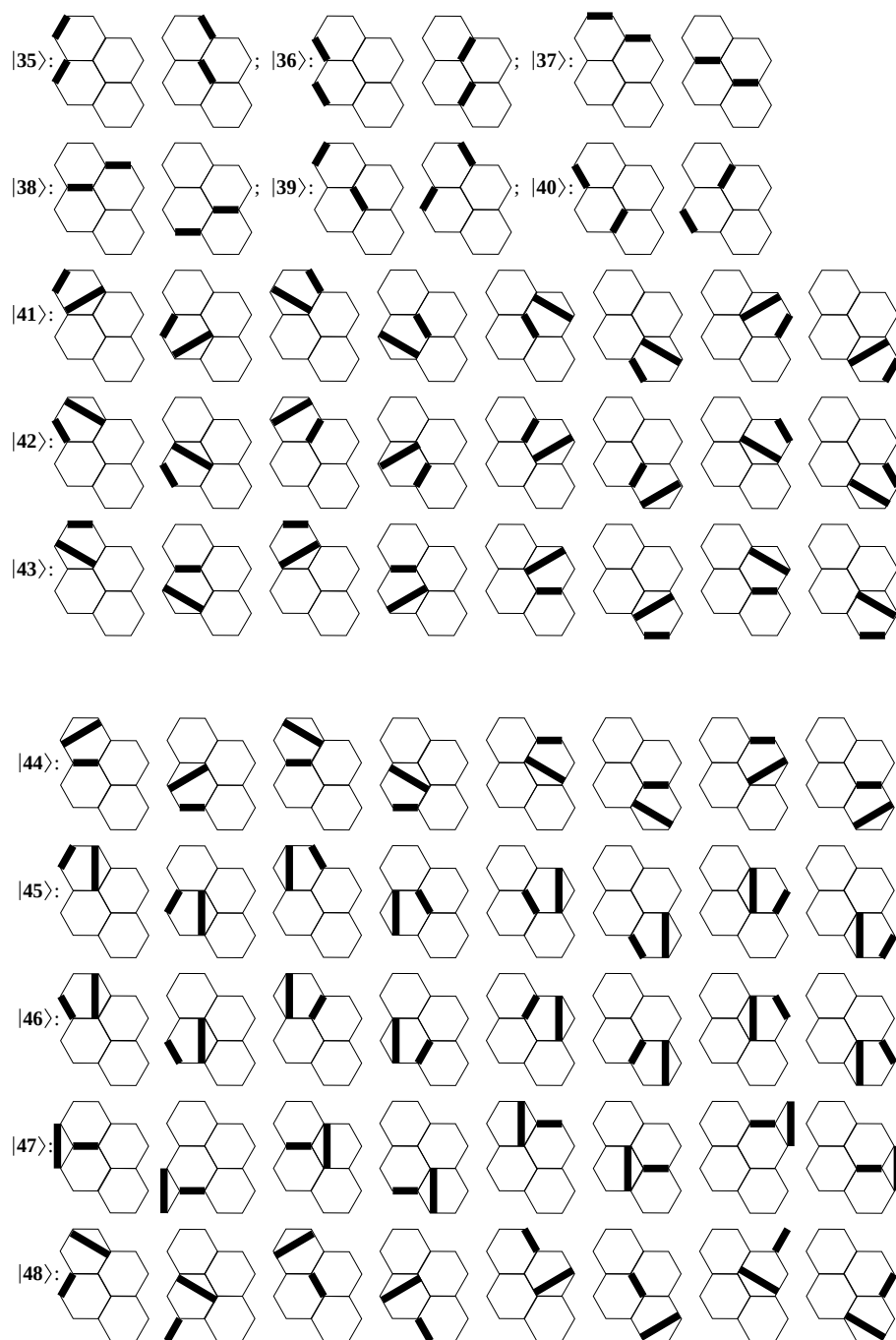


F3.2 ábra : A redukált Hilbert-tér $|14\rangle - |23\rangle$ bázisvektorainak szerkezeti felépítése

VI

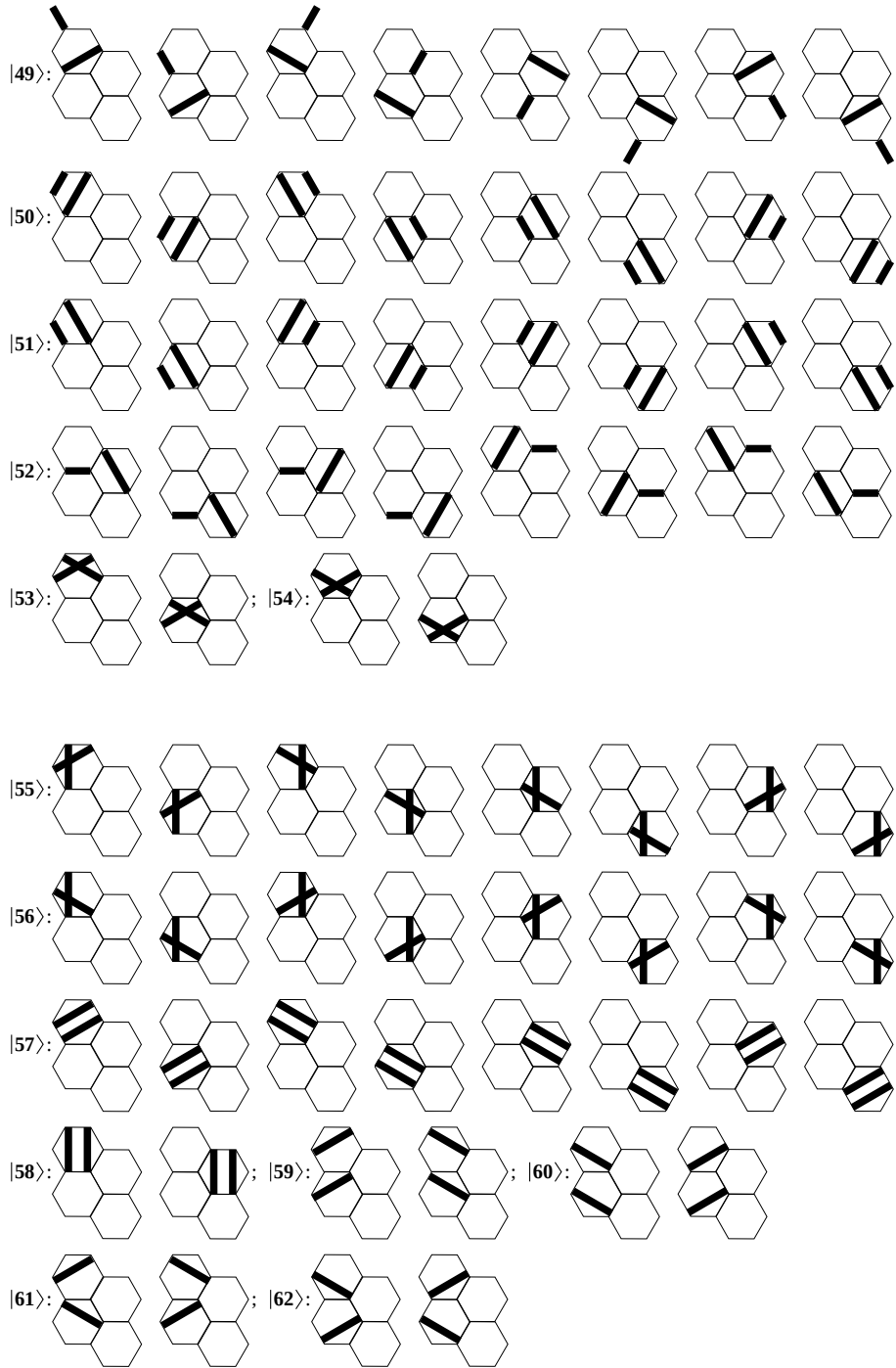


F3.3 ábra : A redukált Hilbert-tér $|24\rangle - |34\rangle$ bázisvektorainak szerkezeti felépítése

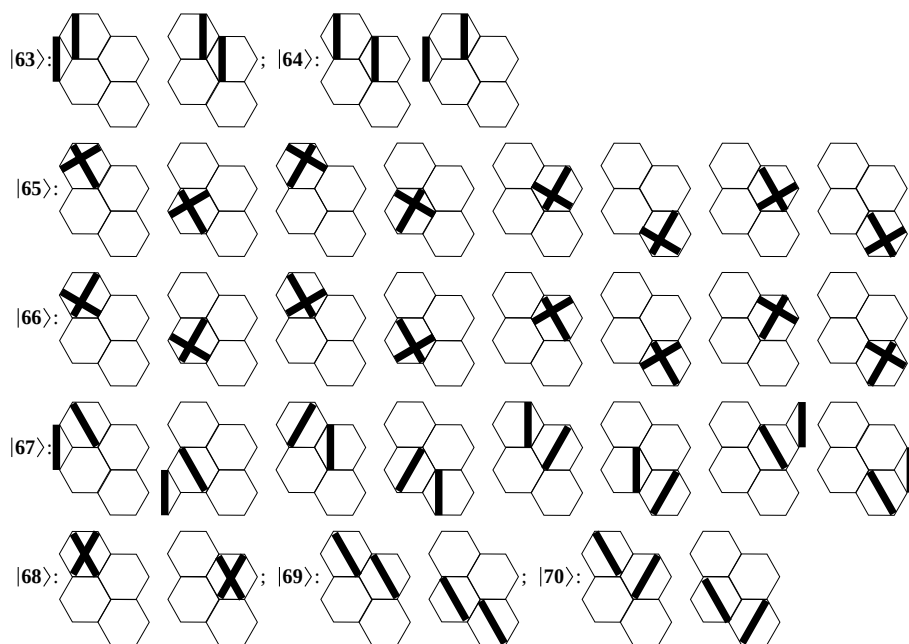


F3.4 ábra : A redukált Hilbert-tér $|35\rangle - |48\rangle$ bázisvektorainak szerkezeti felépítése

VIII



F3.5 ábra : A redukált Hilbert-tér $|49\rangle - |62\rangle$ bázisvektorainak szerkezeti felépítése



F3.6 ábra : A redukált Hilbert-tér $|63\rangle - |70\rangle$ bázisvektorainak szerkezeti felépítése

4. Függelék

A redukált Hilbert-tér 70 egyenlete a méhsejtes nanostruktúra esetében

$$\begin{aligned}
\hat{H}|1\rangle &= 2U|1\rangle + 2t|8\rangle + 2t|10\rangle + 4t'|17\rangle + 4t'|18\rangle + 4t'|22\rangle, \\
\hat{H}|2\rangle &= 2U|2\rangle + 2t|11\rangle + 2t|13\rangle + 4t'|18\rangle + 4t'|19\rangle + 4t'|21\rangle, \\
\hat{H}|3\rangle &= 2U|3\rangle + 2t|9\rangle + 2t|12\rangle + 4t'|17\rangle + 4t'|19\rangle + 4t'|20\rangle, \\
\hat{H}|4\rangle &= 2U|4\rangle + 2t|8\rangle + 2t|12\rangle + 2t|14\rangle + 4t'|23\rangle + 4t'|25\rangle, \\
\hat{H}|5\rangle &= 2U|5\rangle + 2t|10\rangle + 2t|13\rangle + 2t|15\rangle + 4t'|24\rangle + 4t'|25\rangle, \\
\hat{H}|6\rangle &= 2U|6\rangle + 2t|9\rangle + 2t|11\rangle + 2t|16\rangle + 4t'|23\rangle + 4t'|24\rangle, \\
\hat{H}|7\rangle &= 2U|7\rangle + 2t|14\rangle + 2t|15\rangle + 2t|16\rangle + 4t'|20\rangle + 4t'|21\rangle + 4t'|22\rangle, \\
\hat{H}|8\rangle &= 2t|1\rangle + 2t|4\rangle + U|8\rangle + 2t'|10\rangle + 2t'|14\rangle + t|22\rangle + t|25\rangle + 2t'|27\rangle \\
&\quad + 2t'|28\rangle - 2t|37\rangle - 2t'|42\rangle - 2t'|43\rangle - 2t'|47\rangle + t|52\rangle - 2t|53\rangle \\
&\quad + t|57\rangle - 2t'|65\rangle, \\
\hat{H}|9\rangle &= 2t|3\rangle + 2t|6\rangle + U|9\rangle + 2t'|12\rangle + 2t'|16\rangle + t|20\rangle + t|23\rangle + 2t'|26\rangle \\
&\quad + 2t'|28\rangle + 2t|35\rangle + 2t'|41\rangle + 2t'|47\rangle - 2t'|48\rangle + t|50\rangle + t|55\rangle \\
&\quad + 2t|63\rangle + 2t'|67\rangle, \\
\hat{H}|10\rangle &= 2t|1\rangle + 2t|5\rangle + 2t'|8\rangle + U|10\rangle + 2t'|15\rangle + t|22\rangle + t|25\rangle + 2t'|26\rangle \\
&\quad + 2t'|28\rangle - 2t|38\rangle + 2t'|41\rangle - 2t'|44\rangle + 2t'|47\rangle + t|52\rangle + 2t|54\rangle \\
&\quad + t|57\rangle + 2t'|66\rangle, \\
\hat{H}|11\rangle &= 2t|2\rangle + 2t|6\rangle + U|11\rangle + 2t'|13\rangle + 2t'|16\rangle + t|21\rangle + t|24\rangle + 2t'|27\rangle \\
&\quad + 2t'|28\rangle - 2t|36\rangle - 2t'|42\rangle - 2t'|47\rangle - 2t'|49\rangle - t|51\rangle - t|56\rangle \\
&\quad - 2t|63\rangle - 2t'|67\rangle, \\
\hat{H}|12\rangle &= 2t|3\rangle + 2t|4\rangle + 2t'|9\rangle + U|12\rangle + 2t'|14\rangle + t|20\rangle + t|23\rangle + 2t'|26\rangle \\
&\quad + 2t'|27\rangle + 2t|29\rangle - 2t'|41\rangle + 2t'|42\rangle + 2t'|45\rangle + t|50\rangle + 2t|53\rangle \\
&\quad + t|55\rangle + 2t'|65\rangle, \\
\hat{H}|13\rangle &= 2t|2\rangle + 2t|5\rangle + 2t'|11\rangle + U|13\rangle + 2t'|15\rangle + t|21\rangle + t|24\rangle + 2t'|26\rangle \\
&\quad + 2t'|27\rangle - 2t|30\rangle - 2t'|41\rangle + 2t'|42\rangle - 2t'|46\rangle - t|51\rangle - 2t|54\rangle \\
&\quad - t|56\rangle - 2t'|66\rangle, \\
\hat{H}|14\rangle &= 2t|4\rangle + 2t|7\rangle + 2t'|8\rangle + 2t'|12\rangle + U|14\rangle + 2t'|15\rangle + 2t'|16\rangle \\
&\quad + t|20\rangle + t|22\rangle + t|23\rangle + t|25\rangle - 2t'|44\rangle - 2t'|48\rangle + t|50\rangle \\
&\quad + t|52\rangle + t|55\rangle + t|57\rangle - 2t|61\rangle + 2t'|66\rangle + 2t'|67\rangle + 2t|69\rangle,
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\hat{H}|15\rangle &= 2t|5\rangle + 2t|7\rangle + 2t'|10\rangle + 2t'|13\rangle + 2t'|14\rangle + U|15\rangle + 2t'|16\rangle \\
&+ t|21\rangle + t|22\rangle + t|24\rangle + t|25\rangle - 2t'|43\rangle - 2t'|49\rangle - t|51\rangle \\
&+ t|52\rangle - t|56\rangle + t|57\rangle - 2t|62\rangle - 2t'|65\rangle - 2t'|67\rangle - 2t|70\rangle, \\
\hat{H}|16\rangle &= 2t|6\rangle + 2t|7\rangle + 2t'|9\rangle + 2t'|11\rangle + 2t'|14\rangle + 2t'|15\rangle + U|16\rangle \\
&+ t|20\rangle + t|21\rangle + t|23\rangle + t|24\rangle + 2t'|45\rangle - 2t'|46\rangle + t|50\rangle \\
&- t|51\rangle + t|55\rangle - t|56\rangle - 2t|58\rangle + 2t'|65\rangle - 2t'|66\rangle - 2t|68\rangle, \\
\hat{H}|17\rangle &= 4t'|1\rangle + 4t'|3\rangle + U|17\rangle + 2t'|18\rangle + 2t'|19\rangle + 2t'|20\rangle + 2t'|22\rangle \\
&+ t|26\rangle + t|28\rangle - 4t'|29\rangle + 2t'|32\rangle + 2t'|34\rangle + 4t'|37\rangle + t|41\rangle \\
&+ t|47\rangle - 2t'|50\rangle - 2t'|52\rangle, \\
\hat{H}|18\rangle &= 4t'|1\rangle + 4t'|2\rangle + 2t'|17\rangle + U|18\rangle + 2t'|19\rangle + 2t'|21\rangle + 2t'|22\rangle \\
&+ t|27\rangle + t|28\rangle + 4t'|30\rangle + 2t'|31\rangle + 2t'|34\rangle + 4t'|38\rangle - t|42\rangle \\
&- t|47\rangle + 2t'|51\rangle - 2t'|52\rangle, \\
\hat{H}|19\rangle &= 4t'|2\rangle + 4t'|3\rangle + 2t'|17\rangle + 2t'|18\rangle + U|19\rangle + 2t'|20\rangle + 2t'|21\rangle \\
&+ t|26\rangle + t|27\rangle + 2t'|31\rangle + 2t'|32\rangle - 4t'|35\rangle + 4t'|36\rangle - t|41\rangle \\
&+ t|42\rangle - 2t'|50\rangle + 2t'|51\rangle, \\
\hat{H}|20\rangle &= 4t'|3\rangle + 4t'|7\rangle + t|9\rangle + t|12\rangle + t|14\rangle + t|16\rangle + 2t'|17\rangle + 2t'|19\rangle \\
&+ U|20\rangle + 2t'|21\rangle + 2t'|22\rangle + 2t'|31\rangle + 2t'|34\rangle - 4t'|39\rangle + t|45\rangle \\
&- t|48\rangle + 2t'|51\rangle - 2t'|52\rangle + t|65\rangle + t|67\rangle + 4t'|70\rangle, \\
\hat{H}|21\rangle &= 4t'|2\rangle + 4t'|7\rangle + t|11\rangle + t|13\rangle + t|15\rangle + t|16\rangle + 2t'|18\rangle + 2t'|19\rangle \\
&+ 2t'|20\rangle + U|21\rangle + 2t'|22\rangle + 2t'|32\rangle + 2t'|34\rangle - 4t'|40\rangle - t|46\rangle \\
&- t|49\rangle - 2t'|50\rangle - 2t'|52\rangle - t|66\rangle - t|67\rangle - 4t'|69\rangle, \\
\hat{H}|22\rangle &= 4t'|1\rangle + 4t'|7\rangle + t|8\rangle + t|10\rangle + t|14\rangle + t|15\rangle + 2t'|17\rangle + 2t'|18\rangle \\
&+ 2t'|20\rangle + 2t'|21\rangle + U|22\rangle + 2t'|31\rangle + 2t'|32\rangle - 4t'|33\rangle - t|43\rangle \\
&- t|44\rangle - 2t'|50\rangle + 2t'|51\rangle - t|65\rangle + t|66\rangle + 4t'|68\rangle, \\
\hat{H}|23\rangle &= 4t'|4\rangle + 4t'|6\rangle + t|9\rangle + t|12\rangle + t|14\rangle + t|16\rangle + U|23\rangle + t|27\rangle \\
&+ t|28\rangle - t|42\rangle + t|45\rangle - t|47\rangle - t|48\rangle + 4t'|59\rangle + 4t'|64\rangle \\
&+ t|65\rangle + t|67\rangle, \\
\hat{H}|24\rangle &= 4t'|5\rangle + 4t'|6\rangle + t|11\rangle + t|13\rangle + t|15\rangle + t|16\rangle + U|24\rangle + t|26\rangle \\
&+ t|28\rangle + t|41\rangle - t|46\rangle + t|47\rangle - t|49\rangle - 4t'|60\rangle - 4t'|64\rangle \\
&- t|66\rangle - t|67\rangle,
\end{aligned}$$

XII

$$\begin{aligned}
\hat{H}|25\rangle &= 4t'|4\rangle + 4t'|5\rangle + t|8\rangle + t|10\rangle + t|14\rangle + t|15\rangle + U|25\rangle + t|26\rangle \\
&+ t|27\rangle - t|41\rangle + t|42\rangle - t|43\rangle - t|44\rangle - 4t'|59\rangle + 4t'|60\rangle \\
&- t|65\rangle + t|66\rangle, \\
\hat{H}|26\rangle &= 2t'|9\rangle + 2t'|10\rangle + 2t'|12\rangle + 2t'|13\rangle + t|17\rangle + t|19\rangle + t|24\rangle \\
&+ t|25\rangle + U|26\rangle - t|31\rangle - t|34\rangle + 2t'|43\rangle - 2t'|45\rangle \\
&+ 2t'|48\rangle + 2t'|49\rangle + t|56\rangle - t|57\rangle, \\
\hat{H}|27\rangle &= 2t'|8\rangle + 2t'|11\rangle + 2t'|12\rangle + 2t'|13\rangle + t|18\rangle + t|19\rangle + t|23\rangle \\
&+ t|25\rangle + U|27\rangle - t|32\rangle - t|34\rangle + 2t'|44\rangle + 2t'|46\rangle \\
&+ 2t'|48\rangle + 2t'|49\rangle - t|55\rangle - t|57\rangle, \\
\hat{H}|28\rangle &= 2t'|8\rangle + 2t'|9\rangle + 2t'|10\rangle + 2t'|11\rangle + t|17\rangle + t|18\rangle + t|23\rangle \\
&+ t|24\rangle + U|28\rangle - t|31\rangle - t|32\rangle + 2t'|43\rangle + 2t'|44\rangle \\
&- 2t'|45\rangle + 2t'|46\rangle - t|55\rangle + t|56\rangle, \\
\hat{H}|29\rangle &= 2t|12\rangle - 4t'|17\rangle - 4t'|34\rangle + 2t|45\rangle + 4t'|50\rangle, \\
\hat{H}|30\rangle &= -2t|13\rangle + 4t'|18\rangle + 4t'|34\rangle + 2t|46\rangle + 4t'|51\rangle, \\
\hat{H}|31\rangle &= 2t'|18\rangle + 2t'|19\rangle + 2t'|20\rangle + 2t'|22\rangle - t|26\rangle - t|28\rangle + 2t'|32\rangle \\
&- 4t'|33\rangle + 2t'|34\rangle - 4t'|35\rangle + 4t'|38\rangle - 4t'|39\rangle - t|41\rangle - t|47\rangle \\
&- 2t'|50\rangle - 2t'|52\rangle, \\
\hat{H}|32\rangle &= 2t'|17\rangle + 2t'|19\rangle + 2t'|21\rangle + 2t'|22\rangle - t|27\rangle - t|28\rangle + 2t'|31\rangle \\
&- 4t'|33\rangle + 2t'|34\rangle + 4t'|36\rangle + 4t'|37\rangle - 4t'|40\rangle + t|42\rangle + t|47\rangle \\
&+ 2t'|51\rangle - 2t'|52\rangle, \\
\hat{H}|33\rangle &= -4t'|22\rangle - 4t'|31\rangle - 4t'|32\rangle + 2t|43\rangle + 2t|44\rangle, \\
\hat{H}|34\rangle &= 2t'|17\rangle + 2t'|18\rangle + 2t'|20\rangle + 2t'|21\rangle - t|26\rangle - t|27\rangle - 4t'|29\rangle \\
&+ 4t'|30\rangle + 2t'|31\rangle + 2t'|32\rangle - 4t'|39\rangle - 4t'|40\rangle + t|41\rangle - t|42\rangle \\
&- 2t'|50\rangle + 2t'|51\rangle, \\
\hat{H}|35\rangle &= 2t|9\rangle - 4t'|19\rangle - 4t'|31\rangle - 2t|48\rangle + 4t'|50\rangle, \\
\hat{H}|36\rangle &= -2t|11\rangle + 4t'|19\rangle + 4t'|32\rangle + 2t|49\rangle + 4t'|51\rangle, \\
\hat{H}|37\rangle &= -2t|8\rangle + 4t'|17\rangle + 4t'|32\rangle + 2t|43\rangle - 4t'|52\rangle, \\
\hat{H}|38\rangle &= -2t|10\rangle + 4t'|18\rangle + 4t'|31\rangle + 2t|44\rangle - 4t'|52\rangle, \\
\hat{H}|39\rangle &= -4t'|20\rangle - 4t'|31\rangle - 4t'|34\rangle - 2t|45\rangle + 2t|48\rangle, \\
\hat{H}|40\rangle &= -4t'|21\rangle - 4t'|32\rangle - 4t'|34\rangle + 2t|46\rangle + 2t|49\rangle,
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\hat{H}|41\rangle &= 2t'|9\rangle + 2t'|10\rangle - 2t'|12\rangle - 2t'|13\rangle + t|17\rangle - t|19\rangle + t|24\rangle \\
&- t|25\rangle - t|31\rangle + t|34\rangle + 2t'|43\rangle - 2t'|45\rangle - 2t'|48\rangle - 2t'|49\rangle \\
&+ t|56\rangle + t|57\rangle, \\
\hat{H}|42\rangle &= -2t'|8\rangle - 2t'|11\rangle + 2t'|12\rangle + 2t'|13\rangle - t|18\rangle + t|19\rangle - t|23\rangle \\
&+ t|25\rangle + t|32\rangle - t|34\rangle - 2t'|44\rangle - 2t'|46\rangle + 2t'|48\rangle + 2t'|49\rangle \\
&+ t|55\rangle - t|57\rangle, \\
\hat{H}|43\rangle &= -2t'|8\rangle - 2t'|15\rangle - t|22\rangle - t|25\rangle + 2t'|26\rangle + 2t'|28\rangle + 2t|33\rangle \\
&+ 2t|37\rangle + 2t'|41\rangle + 2t'|44\rangle + 2t'|47\rangle - t|52\rangle - t|57\rangle - 2t|60\rangle \\
&+ 2t|62\rangle - 2t'|66\rangle, \\
\hat{H}|44\rangle &= -2t'|10\rangle - 2t'|14\rangle - t|22\rangle - t|25\rangle + 2t'|27\rangle + 2t'|28\rangle + 2t|33\rangle \\
&+ 2t|38\rangle - 2t'|42\rangle + 2t'|43\rangle - 2t'|47\rangle - t|52\rangle - t|57\rangle + 2t|59\rangle \\
&+ 2t|61\rangle + 2t'|65\rangle, \\
\hat{H}|45\rangle &= 2t'|12\rangle + 2t'|16\rangle + t|20\rangle + t|23\rangle - 2t'|26\rangle - 2t'|28\rangle + 2t|29\rangle \\
&- 2t|39\rangle - 2t'|41\rangle - 2t'|47\rangle - 2t'|48\rangle + t|50\rangle + t|55\rangle - 2t|58\rangle \\
&+ 2t|64\rangle + 2t'|67\rangle, \\
\hat{H}|46\rangle &= -2t'|13\rangle - 2t'|16\rangle - t|21\rangle - t|24\rangle + 2t'|27\rangle + 2t'|28\rangle + 2t|30\rangle \\
&+ 2t|40\rangle - 2t'|42\rangle - 2t'|47\rangle + 2t'|49\rangle + t|51\rangle + t|56\rangle + 2t|58\rangle \\
&+ 2t|64\rangle + 2t'|67\rangle, \\
\hat{H}|47\rangle &= -2t'|8\rangle + 2t'|9\rangle + 2t'|10\rangle - 2t'|11\rangle + t|17\rangle - t|18\rangle - t|23\rangle \\
&+ t|24\rangle - t|31\rangle + t|32\rangle + 2t'|43\rangle - 2t'|44\rangle - 2t'|45\rangle - 2t'|46\rangle \\
&+ t|55\rangle + t|56\rangle, \\
\hat{H}|48\rangle &= -2t'|9\rangle - 2t'|14\rangle - t|20\rangle - t|23\rangle + 2t'|26\rangle + 2t'|27\rangle - 2t|35\rangle \\
&+ 2t|39\rangle - 2t'|41\rangle + 2t'|42\rangle - 2t'|45\rangle - t|50\rangle - t|55\rangle - 2t|59\rangle \\
&+ 2t|61\rangle - 2t'|65\rangle, \\
\hat{H}|49\rangle &= -2t'|11\rangle - 2t'|15\rangle - t|21\rangle - t|24\rangle + 2t'|26\rangle + 2t'|27\rangle + 2t|36\rangle \\
&+ 2t|40\rangle - 2t'|41\rangle + 2t'|42\rangle + 2t'|46\rangle + t|51\rangle + t|56\rangle + 2t|60\rangle \\
&+ 2t|62\rangle + 2t'|66\rangle, \\
\hat{H}|50\rangle &= t|9\rangle + t|12\rangle + t|14\rangle + t|16\rangle - 2t'|17\rangle - 2t'|19\rangle - 2t'|21\rangle - 2t'|22\rangle \\
&+ 4t'|29\rangle - 2t'|31\rangle - 2t'|34\rangle + 4t'|35\rangle + t|45\rangle - t|48\rangle - 2t'|51\rangle \\
&+ 2t'|52\rangle + t|65\rangle + t|67\rangle - 4t'|68\rangle + 4t'|69\rangle,
\end{aligned}$$

XIV

$$\begin{aligned}
\hat{H}|51\rangle &= -t|11\rangle - t|13\rangle - t|15\rangle - t|16\rangle + 2t'|18\rangle + 2t'|19\rangle + 2t'|20\rangle \\
&+ 2t'|22\rangle + 4t'|30\rangle + 2t'|32\rangle + 2t'|34\rangle + 4t'|36\rangle + t|46\rangle + t|49\rangle \\
&- 2t'|50\rangle - 2t'|52\rangle + t|66\rangle + t|67\rangle + 4t'|68\rangle + 4t'|70\rangle, \\
\hat{H}|52\rangle &= t|8\rangle + t|10\rangle + t|14\rangle + t|15\rangle - 2t'|17\rangle - 2t'|18\rangle - 2t'|20\rangle - 2t'|21\rangle \\
&- 2t'|31\rangle - 2t'|32\rangle - 4t'|37\rangle - 4t'|38\rangle - t|43\rangle - t|44\rangle + 2t'|50\rangle \\
&- 2t'|51\rangle - t|65\rangle + t|66\rangle + 4t'|69\rangle - 4t'|70\rangle, \\
\hat{H}|53\rangle &= -2t|8\rangle + 2t|12\rangle + 4t'|55\rangle - 4t'|57\rangle + 2t|65\rangle, \\
\hat{H}|54\rangle &= 2t|10\rangle - 2t|13\rangle + 4t'|56\rangle + 4t'|57\rangle + 2t|66\rangle, \\
\hat{H}|55\rangle &= t|9\rangle + t|12\rangle + t|14\rangle + t|16\rangle - t|27\rangle - t|28\rangle + t|42\rangle + t|45\rangle + t|47\rangle \\
&- t|48\rangle + 4t'|53\rangle - 4t'|58\rangle - 4t'|61\rangle + 4t'|63\rangle + t|65\rangle + t|67\rangle, \\
\hat{H}|56\rangle &= -t|11\rangle - t|13\rangle - t|15\rangle - t|16\rangle + t|26\rangle + t|28\rangle + t|41\rangle + t|46\rangle \\
&+ t|47\rangle + t|49\rangle + 4t'|54\rangle + 4t'|58\rangle + 4t'|62\rangle + 4t'|63\rangle + t|66\rangle \\
&+ t|67\rangle, \\
\hat{H}|57\rangle &= t|8\rangle + t|10\rangle + t|14\rangle + t|15\rangle - t|26\rangle - t|27\rangle + t|41\rangle - t|42\rangle - t|43\rangle \\
&- t|44\rangle - 4t'|53\rangle + 4t'|54\rangle - 4t'|61\rangle - 4t'|62\rangle - t|65\rangle + t|66\rangle, \\
\hat{H}|58\rangle &= -2t|16\rangle - 2t|45\rangle + 2t|46\rangle - 4t'|55\rangle + 4t'|56\rangle, \\
\hat{H}|59\rangle &= 4t'|23\rangle - 4t'|25\rangle + 2t|44\rangle - 2t|48\rangle + 2t|65\rangle, \\
\hat{H}|60\rangle &= -4t'|24\rangle + 4t'|25\rangle - 2t|43\rangle + 2t|49\rangle + 2t|66\rangle, \\
\hat{H}|61\rangle &= -2t|14\rangle + 2t|44\rangle + 2t|48\rangle - 4t'|55\rangle - 4t'|57\rangle, \\
\hat{H}|62\rangle &= -2t|15\rangle + 2t|43\rangle + 2t|49\rangle + 4t'|56\rangle - 4t'|57\rangle, \\
\hat{H}|63\rangle &= 2t|9\rangle - 2t|11\rangle + 4t'|55\rangle + 4t'|56\rangle + 2t|67\rangle, \\
\hat{H}|64\rangle &= 4t'|23\rangle - 4t'|24\rangle + 2t|45\rangle + 2t|46\rangle + 2t|67\rangle, \\
\hat{H}|65\rangle &= -2t'|8\rangle + 2t'|12\rangle - 2t'|15\rangle + 2t'|16\rangle + t|20\rangle - t|22\rangle + t|23\rangle \\
&- t|25\rangle + 2t'|44\rangle - 2t'|48\rangle + t|50\rangle - t|52\rangle + 2t|53\rangle + t|55\rangle \\
&- t|57\rangle + 2t|59\rangle - 2t'|66\rangle + 2t'|67\rangle - 2t|68\rangle + 2t|70\rangle, \\
\hat{H}|66\rangle &= 2t'|10\rangle - 2t'|13\rangle + 2t'|14\rangle - 2t'|16\rangle - t|21\rangle + t|22\rangle - t|24\rangle \\
&+ t|25\rangle - 2t'|43\rangle + 2t'|49\rangle + t|51\rangle + t|52\rangle + 2t|54\rangle + t|56\rangle \\
&+ t|57\rangle + 2t|60\rangle - 2t'|65\rangle + 2t'|67\rangle + 2t|68\rangle + 2t|69\rangle,
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\hat{H}|67\rangle &= 2t'|9\rangle - 2t'|11\rangle + 2t'|14\rangle - 2t'|15\rangle + t|20\rangle - t|21\rangle + t|23\rangle \\
&- t|24\rangle + 2t'|45\rangle + 2t'|46\rangle + t|50\rangle + t|51\rangle + t|55\rangle + t|56\rangle \\
&+ 2t|63\rangle + 2t|64\rangle + 2t'|65\rangle + 2t'|66\rangle + 2t|69\rangle + 2t|70\rangle, \\
\hat{H}|68\rangle &= -2t|16\rangle + 4t'|22\rangle - 4t'|50\rangle + 4t'|51\rangle - 2t|65\rangle + 2t|66\rangle, \\
\hat{H}|69\rangle &= 2t|14\rangle - 4t'|21\rangle + 4t'|50\rangle + 4t'|52\rangle + 2t|66\rangle + 2t|67\rangle, \\
\hat{H}|70\rangle &= -2t|15\rangle + 4t'|20\rangle + 4t'|51\rangle - 4t'|52\rangle + 2t|65\rangle + 2t|67\rangle \quad (F4)
\end{aligned}$$

5. Függelék

A megjelent közlemények és a konferencia-előadások listája

a.) A doktori dolgozat témájához kapcsolódó közlemények

1. **R. Trencsényi, K. Gulácsi, E. Kovács, Z. Gulácsi**
"Exact ground states for polyphenylene type of hexagon chains"
 Annalen der Physik (Berlin) **523**, 741-750, (2011), **IF: 0.841**
2. **R. Trencsényi, Z. Gulácsi**
"The emergence domain of an exact ground state in a non-integrable system: the case of the polyphenylene type of chains"
 Philosophical Magazine **92**, 4657-4675, (2012), **IF: 1.596**
3. **E. Kovács, R. Trencsényi, Z. Gulácsi**
"Magnetic nano-grains from a non-magnetic material: a possible explanation"
 Journal of Physics: Conference Series **47**, 012048-012053, (2013), **IF:-**
4. **R. Trencsényi, K. Glukhov, Z. Gulácsi**
"Exact ground state for the four-electron problem in a 2D finite honeycomb lattice"
 Philosophical Magazine **94**, 2195-2223, (2014), **IF: 1.427**
5. **R. Trencsényi, E. Kovács, Z. Gulácsi**
"Comparison of exact ground states of different Hubbard hexagon chains"
 UM ITTC, ISBN 978-963-661-773-8, 1-6. o., **IF: -**
 XXVI. microCAD International Scientific Conference
 Miskolci Egyetem, 2012. március 29-30.
6. **R. Trencsényi**
"Localization length tuned by external magnetic field in polyphenylene type of polymers"
 Acta Physica Debrecina **XLVI**, 165-173, (2012), **IF: -**
7. **R. Trencsényi**
"Some interesting remarks related to phase diagrams of polyphenylene structures"
 Acta Physica Debrecina **XLVII**, 213-221, (2013), **IF: -**

b.) Egyéb közlemények

8. **R. Trencsényi, E. Kovács, Z. Gulácsi**
"Correlation and confinement induced itinerant ferromagnetism in chain structures"
 Philosophical Magazine **89**, 1953-1974, (2009), **IF: 1.273**

9. **R. Trencsényi, Z. Gulácsi**
"Ferromagnetism without flat bands in thin armchair nanoribbons"
 European Physical Journal B **75**, 511-525, (2010), **IF: 1.575**

10. **R. Trencsényi, E. Kovács, Z. Gulácsi**
"Exact ground states in hexagon chains"
 UM ITTC, ISBN 978-963-661-873-5, 57-62. o., **IF: -**
 XXIII. microCAD International Scientific Conference
 Miskolci Egyetem, 2009. március 19-20.

11. **R. Trencsényi, Z. Gulácsi**
"Correlation effects in armchair chains"
 UM ITTC, ISBN 978-963-661-960-2, 75-80. o., **IF: -**
 XXV. microCAD International Scientific Conference
 Miskolci Egyetem, 2011. március 31. – április 01.

12. **R. Trencsényi, Z. Gulácsi**
"Confinement effects in interacting chain structures"
 Acta Physica Debrecina **XLIV**, 177-182, (2010), **IF: -**

13. **R. Trencsényi**
"Investigation of armchair hexagon chains by exact methods"
 Acta Physica Debrecina **XLV**, 234-240, (2011), **IF: -**

c.) Konferencia-előadások

1. **XXIII. microCAD International Scientific Conference**
Miskolci Egyetem, 2009. március 19-20.
R. Trencsényi, E. Kovács, Z. Gulácsi
"Exact ground states in hexagon chains"
UM ITTC, ISBN 978-963-661-873-5, 57-62. o.
2. **XXV. microCAD International Scientific Conference**
Miskolci Egyetem, 2011. március 31. – április 01.
R. Trencsényi, Z. Gulácsi
"Correlation effects in armchair chains"
UM ITTC, ISBN 978-963-661-960-2, 75-80. o.
3. **XXVI. microCAD International Scientific Conference**
Miskolci Egyetem, 2012. március 29-30.
R. Trencsényi, E. Kovács, Z. Gulácsi
"Comparison of exact ground states of different Hubbard hexagon chains"
UM ITTC, ISBN 978-963-661-773-8, 1-6. o.
4. **Statisztikus Fizikai Nap 2010**
Budapest, Magyar Tudományos Akadémia, 2010. március 22.
Trencsényi Réka
"Behatároltság és korrelációk okozta ferromágnesesség egzakt eredmények tükrében"
5. **Statisztikus Fizikai Nap 2012**
Budapest, Magyar Tudományos Akadémia, 2012. március 14.
Trencsényi Réka
"Hexagonális láncok közötti hasonlóságok és különbségek egzakt alapállapotok tükrében"
6. **XXX. Jubileumi Országos Tudományos Diákköri Konferencia**
Nyíregyházi Főiskola, 2011. április 27-29.
Fizika, Földtudományok és Matematika Szekció, Szilárdtestfizika Tagozat
Trencsényi Réka
"Hexagonális cellájú, kvázi-egydimenziós láncstruktúrák egzakt alapállapotának vizsgálata"
NYF, ISBN 978-615-5097-15-7, 138. o.