

Egyetemi doktori (PhD) értekezés tézisei

Abstract of PhD Thesis

**Sokrészecskés rendszerekre vonatkozó
egzakt megoldások**

Exact results regarding many-body systems

Trencsényi Réka

Témavezető/Supervisor: Dr. Gulácsi Zsolt



DEBRECENI EGYETEM

Fizikai Tudományok Doktori Iskolája

UNIVERSITY OF DEBRECEN

PhD School in Physics

Debrecen, 2014

1. Bevezető

Doktori tanulmányaim során sokrészecskés, erősen kölcsönható, kvantummechanikailag viselkedő, nemintegrálható, periodikus rendszerek alapállapotai tulajdonságait tanulmányoztam a Hubbard-modell keretében, egzakt módszerek alkalmazásával. A leírás elméleti szilárdtest-fizikai apparátust igényel, így az "erősen kölcsönható" jelző – a szakterület fogalomkörének megfelelően – azt jelenti, hogy a részecskék közötti kölcsönhatás erőssége sokkal nagyobb, mint a kinetikus energia járuléka. A kölcsönhatás tehát nem perturbációs effektusként jelenik meg, hanem mérvadó tényezőként lép be a fizikai folyamatokba. Az alkalmazott Hubbard-modell pedig magát a kölcsönhatást az elektronok közötti lokális Coulomb-taszításként veszi figyelembe. Ezenkívül érdemes megvilágítani a "nemintegrálható" jelző tartalmát is, ami azt fejezi ki, hogy a rendszer szabadsági fokainak száma meghaladja az értelmezett mozgásállandók számát.

A vizsgálatok első szakaszában egy kvázi-egydimenziós, *polifenilén* típusú struktúra alapállapotai jellemzőit elemeztem, melynek polimerszerkezetét egymáshoz kapcsolt hatszög alakú cellák láncolata alakítja ki. A hatszögek csúcspontjaiban szénatomok helyezkednek el, melyekhez, a rendszer konkrét kémiai változattól függően, további atomok vagy atomcsoportok kapcsolódhatnak, és a hatszögeket periodikusan egymáshoz láncoló kémiai kötések is különféle atomok által valósulhatnak meg. A "kvázi-egydimenziós" elnevezés arra utal, hogy noha a polifenilén kristályszerkezete síkbeli hatszögekből épül fel, a rendszer geometriai rácsa egy egydimenziós láncot alkot. A polifenilének osztályába számos vegyület besorolható, példaként kiragadva megemlítem a *polifenil-éter*, *polifenilén-oxid*, *polifenilén-szulfid*, *polietiléntereftalát*, *polibutilén-tereftalát*, aromás *poliamid* és *polifenilénvinilén* elnevezésű reprezentánsokat. A polifenilének rendkívül különleges fizikai és kémiai tulajdonságokat mutatnak (masszívan ellenállnak pl. extrém termikus, mechanikai és kémiai hatások-

nak), ami folytán igen széles tartományt ölelnek fel a gyakorlati alkalmazások palettáján, kiváltképp az ipari és mérnöki alkalmazások területén.

Kutatásaim következő fázisában vizsgálataimat kétdimenziós ráccsal rendelkező nanostruktúrákra is kiterjesztettem. Elsőként a nemmágneses fématomokból (pl. arany, palládium) felépülő rendszerek nanoskálán tapasztalt ferromágneses viselkedésének mélyebb mozgatórugóit próbáltam feltárni az elméleti fizika eszközeinek segítségével. Ezen analízis alanyául egy *kétdimenziós négyzetes ráccsal rendelkező nanoszerkezet* szolgált, melynek rácspontjaiban eredő mágneses momentum nélküli fématomok foglalnak helyet. Ezt követően egy *kisméretű, méhsejtes szerkezetű, grafén típusú rendszer* alapállapotí sajátságait tanulmányoztam. A grafén típusú méhsejtes rendszerek a négyzetrácsos struktúrákkal együtt régóta közkedvelt tárgyai a tudományos értekezéseknek, így a felgyűlt ismeretanyag meglehetősen szerteágazó, mely főképpen a négyzetes és hatszöges szerkezetekben kialakuló fázisok és fázisátmenetek sokszínűségét demonstrálja.

A sokrészesecsés problémák témaköre rendkívül gazdag szakirodalmi háttérrel rendelkezik, azonban az értekezések többsége *integrálható* rendszereket tárgyal. 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. Ez a megszorítás a valóságos fizikai rendszerekben egyáltalán nem vagy csak speciális esetekben valósulhat meg, többnyire egy dimenzióra korlátozva a problémát. Mindemellett 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 teljesíti az integrálhatóság kritériumát, tanulmányoznunk kell a *nemintegrálható* rendszerek fizikáját is. Ezáltal teljesebbé válhat a sokrészesecsés kvantummechanikai rendszerekről alkotott képünk, hiszen megteremthetjük a potenciális lehetőségét annak, hogy eddigi ismeret

reteinket még közelebb vigyük a természet adta valósághoz. 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 szemszögből nézve, az erősen kölcsönható, nemintegrálható rendszerek egzakt leírásai fontos értéket képviselnek. Ezenkívül az egzakt diszkussziók egyúttal a közelítéssel 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 másik pedig az *Alapállapotot Tartalmazó Altered Meghatározásán* alapuló 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 Giesekus 1992-ben publikálta eredményeit. 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 Giesekus módszerét mások is sikeresen alkalmazták például "resonating valence bond" típusú alapállapot, paramágneses szigetelő és töltéssűrűség-hullám, ferromágneses, valamint szupravezető alapállapotok kimutatására. A

módszer segítségével tanulmányozták továbbá a Falicov–Kimball-modellt, a kiterjesztett Emery-modellt egy és két dimenzióban, illetve a periodikus Anderson-modellt egy, két és három dimenzióban. A Brandt és Gieseckus által bevezetett eljárás mellett másféle technikákról is olvashatunk a szakirodalomban, 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 láncok esetében valósult meg, ezt követően pedig háromszöges, ötszöges, valamint cikcakk, illetve karosszék típusú hatszöges láncok vonatkozásában is eredményre vezetett.

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 altérben 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 fázisszeperációs viselkedést figyeltek meg, a kétszárú Hubbard-létrák esetében pedig különböző korrelációs függvényeket számoltak ki. A módszert analitikus formában elsőként a Hubbard-modell felhasználásával egy kétdimenziós négyzetes rács példáján keresztül pre-

zentálták, melynek eredményeit később a kiterjesztett Hubbard-modell keretében is megvizsgálták. Számításaimban az említett analitikus eljárást alkalmaztam a tanulmányozott rendszer egzakt alapállapotainak meghatározására.

2. Az alkalmazott módszerek

A következőkben röviden összefoglalom a *Pozitív Szemidefinit Operátorok* módszerének (a továbbiakban PSZO módszer), illetve az *Alapállapotot Tartalmazó Altér Meghatározásán* alapuló módszer (a továbbiakban ATAM módszer) lényegi elemeit.

2.1. A Pozitív Szemidefinit Operátorok módszere

A módszer alkalmazása a pozitív szemidefinit operátorokra épül. Egy $\hat{P}$ operátort abban az esetben tekintünk pozitív szemidefinitnek, ha a $\langle \psi | \hat{P} | \psi \rangle \geq 0$ reláció a $\mathcal{H}$ Hilbert-tér bármely $|\psi\rangle$ hullámfüggvényével teljesíthető. A pozitív szemidefinit jellegből adódóan az operátorok azzal a speciális tulajdonsággal rendelkeznek, hogy sajátértékeik halmaza nemnegatív, azaz spektrumuknak van egy pontosan ismert alsó korlátja, ami 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 ismeretlen E_g alapállapot energiát egy C konstans formájában áttéve az egyenlőség jobb oldalára, kialakítható a $\hat{H} = \hat{P} + C$ felírás, ami a Hamilton-operátor pozitív szemidefinit formára transzformált kifejezését adja. Ahhoz, hogy valóban a rendszer alapállapotához jussunk el, a $\hat{H}|\psi\rangle = (\hat{P} + C)|\psi\rangle$ egyenlet jobb oldalát minimum értékre kell beállítanunk. Ezt a $\hat{P}|\psi\rangle = 0$ feltétel kiszabásával érhetjük el, ami éppen azt jelenti, hogy $\hat{P}$ spektrumából a legkisebb, azaz

a 0 sajátértéket választjuk ki. Így egy lehető legáltalánosabban megkonstruált $|\psi\rangle$ állapotból kiindulva, a $\hat{P}|\psi\rangle = 0$ feltétel teljesítése révén kiszámítható a rendszer $|\psi_g\rangle$ alapállapotú hullámfüggvénye, a megfelelő alapállapotú energia pedig az $E_g = C$ formula szerint áll elő. A PSZO módszer több szemszögből is roppant produktív. Sikeressége 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 $\hat{H}$ Hamilton-operátor sajátértékeinek alsó korlátjáról. Mivel azonban $\hat{H}$ és $\hat{P}$ csak a C konstansban különbözik egymástól, a $\hat{H}$ -spektrum minimumát a $\hat{P}$ -spektrum alsó korlátjának (a nullának) C -vel eltoltt értéke definiálja.

2.2. Az Alapállapotot Tartalmazó Altér Meghatározásán alapuló módszer

Az eljárás lényege abban áll, hogy a probléma teljes $\mathcal{H}$ Hilbert-terében meghatározunk egy olyan kisméretű $\mathcal{S}$ alteret, amely tartalmazza a rendszer alapállapotát. Ez azt jelenti, hogy meg kell konstruálnunk azokat az elektronállapotokat, melyek az $\mathcal{S}$ redukált Hilbert-tér bázisvektorait alkotják. A bázisvektorok megszerkesztéséhez a módszer két alapvető megfigyelést használ fel: I.) Az alapállapot magába foglalja a legnagyobb kölcsönhatást képviselő részecskekonfigurációt. II.) A rendszer translációinvariáns mivoltából kiindulva, a legnagyobb kölcsönhatást képviselő részecskekonfiguráció minden csomóponton ekvivalens módon, ugyanolyan súlyfaktorial létezhet. A módszer első lépésében az I.) és II.) észrevételek alapján megkonstruáljuk az $\mathcal{S}$ altér $|i_1\rangle$ -gyel jelölt első bázisvektorát, melyet a rendszer csomópontjain periodikusan megjelenő legnagyobb kölcsönhatást kép-

viselő konfigurációk összessége alkot. Ezt követően pedig a rendszer $\hat{H}$ Hamilton-operátorának $|i_1\rangle$ -re vett hatása nyomán további $|i_2\rangle, |i_3\rangle, |i_4\rangle, \dots$ bázisvektorokat generálunk, és a procedúrát addig folytatjuk, amíg meg nem találjuk az $\mathcal{S}$ altér bázisának utolsó $|i_z\rangle$ záróelemét. Ez matematikailag azt jelenti, hogy a $\hat{H}|i_1\rangle, \hat{H}|i_2\rangle, \dots, \hat{H}|i_z\rangle$ műveletek során kialakuló egyenletrendszer bezárul, és z megadja a redukált Hilbert-tér dimenzióját. A rendszer alapállapota ezen z egyenletet tartalmazó egyenletrendszer együtthatóiból képzett mátrix egzakt diagonalizációja révén kapható meg, és a megoldások helyességét a teljes Hilbert-térben elvégzett egzakt diagonalizáció eredményeivel való egyezés igazolhatja. Az ATAM módszer bizonyos szempontból specifikusnak tekinthető, mivel csak olyan rendszerek esetében alkalmazható, melyekben páros számú elektron szingulett állapotot hoz létre, azaz az összegzett spinvetület nulla. Az eljárás segítségével azonban legalább egy nagyságrenddel csökkenthető a Hilbert-tér dimenziója, ami jelentősen megkönnyíti a matematikai operációkhoz szükséges számítógépes kapacitás biztosítását.

3. Eredmények

T_1 tézispont

A PSZO módszer segítségével meghatároztam az N_c számú célalából 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 visel-

kedik. 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. [1,5,K3,K5]

T_2 tézispont

A *polifenilén* típusú rendszerek nemkölcönható sávszerkezetét 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. [1,5,K3,K5]

T_3 tézispont

Megnőveltem 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 fázistér-

nek egy nagyobb méretű tartományán él. Ez esetben is tanulmányoztam a rendszer nemkölcönható sávszerkezetét, és megállapítottam, hogy az induló Hamilton-operátor paraméterkészletének bővítése nem módosítja a sávszerkezet lényegi struktúráját. [2]

T_4 tézispont

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 nemkölcönható sávszerkezet vizsgálatából az is kiderült, hogy a diszperziórelációt nem alkothatja 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 klasszikus 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. [3]

T_5 tézispont

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. [4]

T_6 tézispont

A redukált Hilbert-térben analizáltam a *kétdimenziós méhsejtes szerkezettel rendelkező nanostruktúra* alapállapotai tulajdonságait. Elsőként azt vizsgáltam meg, hogy az E_g alapállapot energiája hogyan viselkedik a Hubbard-kölcsönhatás U csatolási állandójának függvényében, és megállapítottam, hogy az $E_g(U)$ görbe telítési jelleget mutat. Érdekességképpen 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 alapállapotú 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 alapállapotú energia 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 alapállapotú 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. [4]

1. Introduction

In my PhD thesis I studied the ground state properties of strongly interacting, quantum mechanically behaving, nonintegrable, periodic many-particle systems in the framework of the Hubbard model, by application of exact methods. The description requires an apparatus of theoretical condensed matter physics, so – according to the concepts of the field – the "strongly interacting" attribute means that the strength of the interaction between the particles is much greater than the contributions of the kinetic energy. The interaction therefore appears not as a perturbational effect, but it enters the physical processes as a significant factor. The applied Hubbard model takes the interaction itself into account as local Coulomb repulsion between the electrons. It is also worth making clear the content of the "nonintegrable" attribute, which expresses that the number of the degrees of freedom of the system exceeds the number of the defined constants of motion.

In the first period of the examinations I analysed the ground state characteristics of a quasi-1D structure of *polyphenylene* type, whose polymer construction is formed by the chain of interlocked hexagon-shaped cells. In the vertices of the hexagons carbon atoms are located, to which, depending on the concrete chemical variant of the system, further atoms or groups of atoms can be connected, and the chemical bonds, linking the hexagons together periodically, can also be realized by various atoms. The "quasi-1D" name refers to that although the crystal structure of polyphenylene is built up by planar hexagons, the geometrical lattice of the system creates a one-dimensional chain. In the class of polyphenylenes several compounds can be listed, as examples I mention the *polyphenyl ether*, *polyphenylene oxide*, *polyphenylene sulfide*, *polyethylene terephthalate*, *polybutylene terephthalate*, aromatic *polyamide* and *polyphenylene vinylene* representatives. Polyphenylenes show extremely special physical and

chemical properties (they resist massively e.g. extreme thermal, mechanical and chemical effects), and due to this they cover a quite broad range in the spectrum of the practical applications, especially in the field of industrial and engineering applications.

In the next stage of my research I extended the investigations to nanostructures possessing two-dimensional lattice, as well. First, by means of theoretical physics I tried to reveal the deeper drivers of nanoscale ferromagnetism of systems constructed by nonmagnetic metal atoms (e.g. gold, palladium). The subject of this analysis was a *nanostructure possessing two-dimensional square lattice*, whose lattice sites are occupied by metal atoms without resultant magnetic moments. Then I studied the ground state features of a *small-sized honeycomb-structured graphene-like system*. Graphene-like honeycomb systems together with the square-lattice structures have been popular topics of the scientific papers for a long time, so the collected knowledge is rather diversified, which demonstrates mainly the variegation of phases and phase transformations evolving in square and hexagonal systems.

The theme of the many-particle problems possesses an exceptionally rich literature background, however, the majority of the papers discuss *integrable systems*. But the integrability inflicts certain requirements for the given structure, since in an integrable system the degrees of freedom can not exceed the number of the defined constants of motion. In real physical systems this restriction can not be implemented at all or can be fulfilled only in special cases, confining the problem mostly to one dimension. Nevertheless, there is no doubt that during the investigations regarding integrable structures a lot of valuable physical and methodological knowledge have been accumulated. However, since most of the formations existing in reality do not satisfy the criterion of integrability, we have to study the physics of *nonintegrable* systems, as well. Thereby, our image of the quantum mechanical many-particle systems can become more complete, since we can create the potential possibility to take our previous knowledge

closer to the reality given by the nature. Arising from the many-particle character of the systems, it is also a crucial question how realistic the used method can treat the correlation effects. From this point of view, the exact descriptions of the strongly interacting, nonintegrable systems represent an important value. At the same time, exact discussions also make the efficiency of approximation methods testable by comparing the solutions obtained by approximate and exact methods, respectively. On the other hand, exact calculation techniques play an important role, because they can serve as a benchmark during the probe of numerical methods, as well. Thus the application of exact procedures can be useful and interesting in several respects, which gave me, too, serious motivation in performing of my calculations. In order to determine the exact ground states of the studied systems I used two different methods: the one is the method of *Positive Semidefinite Operators*, and the other is the method based on the *Determination of the Subspace Containing the Ground State*.

There are several kinds of procedures based on positive semidefinite operators, and their application for nonintegrable systems started to pick up really in the '90s, after Brandt and Gieseke published their results in 1992. The essence of the technique introduced by them was that one transformed the Hamiltonian of the system into positive semidefinite form, which allowed to provide an exact lower bound of the ground state energy. After this, by the application of the variational principle one calculated also an upper bound, and the mathematical matching of the obtained lower and upper bounds yielded the ground state energy of the system. They showed their results by the example of the Hubbard and the periodic Anderson model, respectively. The method of Brandt and Gieseke was applied successfully by others, as well, for demonstrating e.g. resonating valence bond, paramagnetic insulator and charge density wave, ferromagnetic, and superconducting ground states. Furthermore, the Falicov–Kimball model, the one- and two-dimensional extended Emery model, and the

one-, two- and three-dimensional periodic Anderson model were also studied by the method. Beside the procedure introduced by Brandt and Giesekeus we can read about other techniques, too, in the literature, which utilize also the properties of positive semidefinite operators. Apart from some exceptions, the application of the above methods focused not on a chosen system, but mostly the aim was to exhibit a known and defined type of states as ground state in a system-independent way, in the frame of the given model. Contrarily, the version of the procedures based on positive semidefinite operators, which was applied by me, too, in the course of my research work, assigns the system to be studied as a starting point without assuming any previous knowledge regarding the ground state. This new perspective developed in the 2000s. Its application was performed first in case of quadrilateral chains, and subsequently it led to results in respect of triangular, pentagonal, zig-zag and armchair type of hexagonal chains, as well.

Beside the calculation techniques based on positive semidefinite operators, also such methods were worked out in the 2000s whose application allows to determine the exact ground state of the system in a small-sized subspace of the Hilbert space given by the problem. By means of the procedure the dimension of the Hilbert space decreases significantly, so the investigation of the physical properties of the ground state is much simpler and less time-consuming in the obtained subspace. By the application of different numerical versions of the method it was possible to show such results which describe the exact ground state independently of the system size. For instance, during the study of the one-dimensional t-J model phase separational behaviour was observed, and in case of the two-leg Hubbard ladders several correlation functions were calculated. The method in analytical form was first presented by the example of a two-dimensional square lattice by using the Hubbard model, whose results were examined later in the framework of the extended Hubbard model, as well.

In my calculations I applied the mentioned analytical procedure for the determination of the exact ground states of the studied system.

2. The applied methods

Hereinafter, I will summarize briefly the essential elements of the method of *Positive Semidefinite Operators* (henceforth PSO method) and the method based on the *Determination of the Subspace Containing the Ground State* (henceforth DSCGS method), respectively.

2.1. The method of Positive Semidefinite Operators

The application of the method is based on the positive semidefinite operators. An operator $\hat{P}$ is considered to be positive semidefinite in that case if the relation $\langle \psi | \hat{P} | \psi \rangle \geq 0$ can be satisfied by any $|\psi\rangle$ wave function of the $\mathcal{H}$ Hilbert space. Due to the positive semidefinite nature, the operators possess the special property that the set of their eigenvalues is nonnegative, i.e. their spectrum has an exactly known lower bound, which is the zero. The PSO method has the starting point that in principle every $\hat{H}$ Hamiltonian describing a physical system can be transformed into a positive semidefinite form. Namely, it can be proved that, if E_g denotes the lower bound of the spectrum of $\hat{H}$ (the ground state energy), $\hat{H} - E_g$ is positive semidefinite, i.e. $\hat{H} - E_g = \hat{P}$. Transferring the unknown E_g ground state energy to the right-hand side of the equation in the form of a constant C , the inscription $\hat{H} = \hat{P} + C$ can be established, which provide the expression of the Hamiltonian transformed into positive semidefinite form. In order to indeed get to the ground state of the system, the right-hand side of the equation $\hat{H}|\psi\rangle = (\hat{P} + C)|\psi\rangle$ has to be set to a minimum value. It can be accomplished by imposing the condi-

tion $\hat{P}|\psi\rangle = 0$, which even means that one chooses the smallest, i.e. the 0 eigenvalue from the spectrum of $\hat{P}$. Thus, starting from a most generally constructed $|\psi\rangle$ state, by the fulfillment of the condition $\hat{P}|\psi\rangle = 0$, the $|\psi_g\rangle$ ground state wave function of the system can be calculated, and the corresponding ground state energy is resulted in the formula $E_g = C$. The PSO method is very productive also in several respects. On one hand, its success lies therein that the applicability of the procedure is absolutely independent of the dimension of the system and the number of the constants of motion, in other words, it can be carried out also in integrable and nonintegrable systems, in arbitrary dimension. On the other hand, the second nontrivial virtue of the method arises from the fact that it can yield the ground state energy of the system exactly, without having any cognition about the lower bound of the eigenvalues of the $\hat{H}$ Hamiltonian. Since $\hat{H}$ and $\hat{P}$ differ, however, only in the constant C , the minimum of the $\hat{H}$ -spectrum is defined by the C -shifted value of the lower bound of the $\hat{P}$ -spectrum (the zero).

2.2. The method based on the Determination of the Subspace Containing the Ground State

The substance of the procedure is that in the full Hilbert space of the problem one determines a small-sized $\mathcal{S}$ subspace, which contains the ground state of the system. This means that one has to construct the electron states which constitute the base vectors of the $\mathcal{S}$ reduced Hilbert space. In order to build up the base vectors, the method utilizes two fundamental observations: I.) The ground state includes the particle configuration representing the strongest interaction. II.) Starting from the translation invariant nature of the system, the most interacting particle configuration can exist equivalently with the same weight on each site. In the first step of the method, based on the remarks I.) and II.), one constructs the first base vector of the $\mathcal{S}$ subspace

denoted by $|i_1\rangle$, which is created by the sum of the most interacting configurations appearing periodically on the sites of the system. Subsequently, one generates further $|i_2\rangle, |i_3\rangle, |i_4\rangle, \dots$ base vectors by operating with the $\hat{H}$ Hamiltonian of the system to $|i_1\rangle$, and the procedure is continued until one finds the last $|i_z\rangle$ final element of the base of subspace $\mathcal{S}$. This mathematically means that the system of equations evolving by the operations $\hat{H}|i_1\rangle, \hat{H}|i_2\rangle, \dots, \hat{H}|i_z\rangle$ closes, and z provides the dimension of the reduced Hilbert space. The ground state of the system can be obtained by exact diagonalization of the matrix built by the coefficients of the system of equations containing these z equations, and the correctness of the solutions can be confirmed by the accordance with the results of the exact diagonalization performed in the full Hilbert space. The DSCGS method, from a certain viewpoint, can be considered as a special way, since it can be applied only in case of such systems in which even-numbered electrons generate a singlet state, i.e. the total spin projection is zero. By means of the procedure, however, the dimension of the Hilbert space can be reduced at least by one order of magnitude, which facilitates significantly the ensuring of the computational capacity needed for the mathematical operations.

3. Results

T_1 thesis point

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. [1,5,K3,K5]

T_2 thesis point

According to my investigations regarding the bare band structure of the *polyphenylene* systems, 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. [1,5,K3,K5]

T_3 thesis point

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. [2]

T_4 thesis point

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. [3]

T_5 thesis point

By making use of the DSCGS method, under the implementation of periodic boundary conditions, I determined the ground state of a *nanostructure 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. [4]

T_6 thesis point

In the reduced Hilbert space I analysed the ground state properties of the *nanostructure possessing two-dimensional honeycomb lattice*. 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 arised 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 everyhow a novel meaning for the *Zitterbewegung* which

I interpret in this case as an interference of the quasi-degenerate states. [4]

A megjelent közlemények listája

List of publications

a.) A doktori dolgozat témájához kapcsolódó közlemények

Publications related to the PhD thesis

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
Other publications

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: -**

Konferencia-előadások

Talks

(Az alábbi felsorolásban
az általam tartott előadások szerepelnek)

(The following list includes the lectures given by me)

K1. 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.

K2. 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.

K3. 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.

K4. Statisztikus Fizikai Nap 2010

Budapest, Magyar Tudományos Akadémia,

2010. március 22.

Trencsényi Réka

*"Behatároltság és korrelációk okozta ferromágnesesség
egzakt eredmények tükrében"*

K5. Statisztikus Fizikai Nap 2012

Budapest, Magyar Tudományos Akadémia,

2012. március 14.

Trencsényi Réka

*"Hexagonális láncok közötti hasonlóságok és különbségek
egzakt alapállapotok tükrében"*

**K6. 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.