

**A nemegyensúlyi Anderson szennyező
modell vizsgálata perturbatív
térelméleti módszerekkel**

(Ph.D. tézisfüzet)

Horváth Bertalan

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem
Elméleti Fizika Tanszék

Témavezető:
Prof. Zaránd Gergely

Bevezetés, áttekintés

Az *erősen korrelált* rendszerek fizikája rendkívül fontos és aktívan kutatott területe a kondenzált anyagok fizikájának. Az erősen kölcsönható rendszerek családjába tartozik többek között számos nehéz fermion ötvözet, nem Fermi folyadék anyag, de a magas hőmérsékletű szupravezetők is ide sorolandók. Leírásukra általában olyan egyszerűsített modelleket használunk, mint a Hubbard-modell, vagy a Kondo rács modell, amelyek a kvantum szennyeződések leírására használatos Anderson-, ill. Kondo-modellek rácsváltozatai.

Az erősen korrelált rendszerek egyensúlyi tulajdonságait évtizedek óta vizsgálják mind kísérletileg, mind elméletileg, nemegyensúlyi viselkedésük vizsgálata viszont csak a Kondo-effektus kvantum pöttyökön való demonstrálása óta vált különösen aktív kutatási területté. A mikroelektronika fejlődésével lehetővé vált ugyanis egyetlen mesterséges atomot, azaz korrelált kvantum szennyezést létrehozni, és annak transzporttulajdonságait nemegyensúlyi körülmények között vizsgálni. A vizsgált rendszerekben a kvantum pötty legtöbbször két, az elektronokat bevezető, illetve elvezető kontaktusként funkcionáló elektróda között helyezkedik el. Egy harmadik, kapacitívan csatlakoztatott ún. kapuelektroda segítségével egy három csatlakozással rendelkező, általában egyelektron-tranzisztornak nevezett eszközt kapunk.

A nanotechnológia fejlődésével egyre kisebb méretű és kifinomultabb eszközök állíthatók elő: a kísérletekben már valódi atomok és molekulák kontrollált kontaktálására is képesek és rendkívül alacsony hőmérsékleteket (akár $\sim 10mK$) tudnak előállítani. Az egyre kisebb áramkörök előállítását (miniatürizációt) elsősorban az motiválja, hogy a klasszikus tranzistorok méretei kezdik elérni alkalmazhatóságuk határait, ugyanakkor a még kisebb méretek eléréséhez a kvantum pöttyök segítségével megvalósított egy-elektron tranzistorok jó alternatívát nyújthatnak. Ezek a mikroelektronikai eszközök mindemellett jól kontrollálható paramétereik miatt kiváló lehetőséget nyújtanak az elméleti és kísérleti fizikusoknak a nemegyensúlyi korrelált rendszerek tanulmányozására és a kísérletek elmélettel való összevetésére.

Disszertációm célja nemegyensúlyi Anderson-modellek perturbatív térelméleti modellekkel való vizsgálata. Dolgozatomban a nemegyensúlyi Keldysh-technikát ötvözöm átlagtér közelítéssel, iteratív perturbációs számítással, illetve az ún. fluktuáció kicserélődés közelítéssel, és alkalmazom többnívós kvantum pöttyök leírására.

Bár számos elmélet készült már az Anderson- és a Kondo-modell megoldásainak nemegyensúlyi kiterjesztésére, ezidáig egyik sem bizonyult teljesen kielégítőnek, és az erősen korrelált kvantum pötty rendszereket leíró egy- vagy többszintes Anderson szennyező modellre kielégítő megoldás jelenleg

csak egyensúlyban létezik. Tekintettel erre, illetve arra, hogy sok kísérleti rendszer *valóban* a perturbatív tartományban van, kitüntetett szerepe van az általam használt, az Anderson szennyező modellre alkalmazható, kölcsönhatási paraméterben végrehajtott perturbációs számításokon alapuló technikáknak. Ezek a technikák nem modellspecifikusak, aránylag gyorsak, és jó eséllyel ötvözhetőek molekuláris elektronikai számításokkal is.

Célkitűzések

Disszertációm célja annak vizsgálata, hogy a kölcsönhatási paraméterben végzett, nemegyensúlyi perturbációs számításon alapuló technikák milyen paraméter-tartományokon alkalmazhatóak a nemegyensúlyi Anderson szennyező modellre megbízhatóan, illetve annak vizsgálata, hogy ezek a technikák vajon képesek-e leírni általánosabb kölcsönhatások, illetve több nívó esetében is a korrelált viselkedés finomabb részleteit, és képesek-e kísérletileg megfigyelt vonásokat reprodukálni. Céлом továbbá egy új, az egyszerű iteratív perturbációs számításon túlmutató, megőrző módszer, az úgynevezett nemegyensúlyi fluktuáció kicserélődés közelítés kifejlesztése és vizsgálata is.

Dolgozatomban a bevezető fejezetet követően először az átlagtér-elmélet nemegyensúlyi kiterjesztését vizsgálom meg, és megvizsgálom korlátait a legegyszerűbb, egyszintes modell esetében. Kiemelten foglalkozom az átlagtér-elmélet alapvető hibájával, miszerint ez az elmélet véges mágneses momentum képződését jósolja bizonyos paraméter-tartományokban.

Ezt követően az iterált perturbációs számítást alkalmazom a kétszintes nemegyensúlyi Anderson szennyező modellre, szisztematikus perturbációs számítást alkalmazva a Coulomb-kölcsönhatás és a Hund-csatolás szerint. Kiküszöbölve a mágneses momentummal kapcsolatos instabilitásokat, megadom a módszer alkalmazhatósági tartományát, amelyen stabil konvergenciát kapunk, és megvizsgálom a módszer segítségével a kétszintes Anderson szennyező modell spektrális- és transzport tulajdonságait.

A transzporttulajdonságok számításánál elengedhetetlen, hogy teljesüljön az árammegmaradás. Ez problémát jelent az iteratív perturbációs számítás során, ugyanakkor teljes elkerülhető, amennyiben ún. *megőrző* közelítést alkalmazunk. Disszertációm utolsó nagy fejezetében ennek megfelelően a *megőrző* fluktuáció-kicserélődés (FLEX) közelítést terjesztem ki nemegyensúlyi esetre. Ez a közelítés a diagramok bizonyos csoportjait végtelen rendig felösszegzi a kölcsönhatási paraméterekben. A dolgozatban az ún. részecske-lyuk diagramokat összegzem fel, ugyanis ezek adják a lényeges járulékot az Anderson szennyező modellel leírt folyamatokhoz. Ezzel a módszerrel is megvizsgálom a modell spektrális- és transzport tulajdonságait.

Új tudományos eredmények

- I. Megoldottam az egyszintes Anderson szennyező modellt nemegyensúlyi átlagtér közelítésben. Megmutattam, hogy a nemegyensúlyi átlagtér megoldás milyen nemfizikai tulajdonságokhoz vezet (hiszterézis, fázisátalakulás, nemegyensúlyi mágnesezettség) már ebben az egyszerű rendszerben is [1].
- II. Feltérképeztem azokat a tartományokat, amelyekben a módszer nemfizikai eredményekhez vezethet (több stabil megoldáshoz, spontán mágnesség kialakulásához, hiszterézishez) olyan nemegyensúlyi, például *ab initio* számításokban, amelyek átlagtér közelítést alkalmaznak. Megmutattam, hogy nagy előfeszítésnél és erős kölcsönhatásnál egy új nemegyensúlyi tartomány létezik, ahol az átlagtér elmélet spontán spin-kialakulást jósol [1].
- III. Megvizsgáltam az átlagtér közelítésben az egyszintes Anderson szennyező modell transzporttulajdonságait is. Megmutattam, hogy az átlagtér megoldás – hibásan – spin polarizált transzportot jósol bizonyos tartományokban [1].
- IV. Általánosítottam az iterált perturbációs számítást a kétszintes nemegyensúlyi Anderson szennyező modellelre, figyelembe véve az energiaszinteken a Hubbard-kölcsönhatást (U), illetve a Hund-csatolást (J). Ezzel a módszerrel egy kétszintes kvantum pötty szingulett-triplett átalakulás körüli viselkedését írtam le, megvizsgálva az egyensúlyi spektrálfüggvényeket, a lineáris vezetőképességet, illetve az áram numerikus deriválásával a differenciális vezetőképességet. A kapott eredményeket kísérleti adatokkal összevetve jó egyezést tapasztaltam attól eltekintve, hogy az alkalmazott közelítés a Kondo-skálára kismértékben hibás értéket ad. Az iteratív perturbációs számítás képes volt reprodukálni a nemegyensúlyi dI/dV görbékben megfigyelhető összes fontos vonást, így az ún. kétlépcsős Kondo-effektust, a szingulett-triplett gap nyílását, és a lineáris vezetőképességben az átmenetnél megfigyelhető maximumot is [2, 3].
- V. Általánosítottam a megőrző, vagyis a megmaradási törvényeket teljesítő fluktuáció-kicserélődés (FLEX) közelítést nemegyensúlyi körülményekre tetszőleges számú energiaszint esetére, és alkalmaztam a kétszintes Anderson szennyező modellre. Az általam kifejlesztett módszer

alkalmas komplikáltabb kvantum pötty rendszerek hatékony leírására [4].

- VI. Megvizsgáltam a kétszintes kvantum pöttyök viselkedését a szingulett-triplett átalakulás környékén nemegyensúlyi fluktuáció-kicserélődés közelítésben is. Az eredményeket kísérleti adatokkal összevetve, azokkal lényegében egyező eredményeket kaptam a spektrálfüggvények, a lineáris vezetőképesség és a differenciális vezetőképesség tekintetében. A közelítés – az iteratív perturbációszámítással ellentétben – a Kondo-skálát realiztikusan adja vissza [4].
- VII. Feltártam a kifejlesztett iterált perturbációszámítás és a fluktuáció-kicserélődés közelítés alkalmazhatósági határait a hibridizációból származó kiszélesedéssel normált kölcsönhatási paraméterek (U/Γ , J/Γ) függvényében, és azt tapasztaltam, hogy mindkét perturbációszámításon alapuló módszer közepes normált kölcsönhatási paraméterértékekig használható [3, 4].

Irodalomjegyzék

- [1] B. Horváth, B. Lazarovits, O. Sauret and G. Zaránd,
Failure of the mean-field approach in the out-of-equilibrium Anderson model,
Phys. Rev. B **77**, 113108 (2008).
- [2] B. Horváth, B. Lazarovits and G. Zaránd,
Perturbative theory of the non-equilibrium singlet-triplet transition,
J. Phys.: Conf. Ser. **200**, 012063 (2010).
- [3] B. Horváth, B. Lazarovits and G. Zaránd,
Nonequilibrium transport theory of the singlet-triplet transition: Perturbative approach,
Phys. Rev. B **82**, 165129 (2010).
- [4] B. Horváth, B. Lazarovits and G. Zaránd,
Fluctuation-exchange approximation theory of the non-equilibrium singlet-triplet transition,
arXiv:1012.5326 (2010) *közlésre elfogadva.*