

Az NNLO járulékok figyelembevétele az illetett $\alpha_s(M_Z)$ -t valamelyest az alacsonyabb értékek felé mozdítja, míg a végeredmény bizonytalanságát csaknem a felére csökkenti.

Összefoglalásként: beszámoltunk egy alapvető természeti állandó, az erős csatolás egy új meghatározásáról. Mérésünkhöz az elektron-positron szétsugárzásban mért energia-energia korreláció eddig elért legnagyobb pontosságú, NNLO+NNLL rendű elméleti leírását és modern Monte-Carlo eseménygenerátorokat használtunk. Az $\alpha_s(M_Z)$ -re kapott értékünk konzisztens a jelenlegi világtalaggal, míg bizonytalansága versenyképes egyéb, elektron-positron szétsugárzásban végzett meghatározásokkal, lásd az 1. ábrát. Az itt bemutatott mérés, illetve egyéb új meghatározások tükrében folyamatban van az erős csatolás világtaljának aktualizálása.

Irodalom

1. Bethke S.: α_s 2016. *Nucl. Part. Phys. Proc.* 282–284 (2017) 149.
2. Del Duca V., Duhr C., Kardos Á., Somogyi G., Trócsányi Z.: Three-Jet Production in Electron-Positron Collisions at Next-to-Next-to-Leading Order Accuracy. *Phys. Rev. Lett.* 117/15 (2016) 152004.
3. Del Duca V., Somogyi G., Trócsányi Z.: A Subtraction scheme for computing QCD jet cross sections at NNLO: Regularization of doubly-real emissions. *JHEP* 0701 (2007) 070; Somogyi G., Trócsányi Z.: A Subtraction scheme for computing QCD jet cross sections at NNLO: Regularization of real-virtual emission. *JHEP* 0701 (2007) 052; Del Duca V., Duhr C., Kardos Á., Somogyi G., Szőr Z., Trócsányi Z., Tulipánt Z.: Jet production in the CoLoRFulNNLO method: event shapes in electron-positron collisions. *Phys. Rev. D* 94/7 (2016) 074019.
4. Tulipánt Z., Kardos Á., Somogyi G.: Energy-energy correlation in electron-positron annihilation at NNLL+NNLO accuracy, *Eur. Phys. J. C* 77/11 (2017) 749.
5. Kardos Á., Kluth S., Somogyi G., Tulipánt Z., Verbitsky A.: Precise determination of $\alpha_s(M_Z)$ from a global fit of energy-energy correlation to NNLO+NNLL predictions. *Eur. Phys. J. C* 78/6 (2018) 498.

AZ ANYAG POLARIZÁCIÓJÁNAK MODERN ELMÉLETE

A polarizáció teljes eloszlásának kiszámolása kristályos rendszerekben

Hetényi Balázs

Fizika Tanszék, Bilkent Egyetem, Ankara, Törökország
MTA–BME Kvantum Dinamika és Korreláció Kutatócsoport, BME

A polarizáció alapvető fizikai mennyiség, alatta az anyag elektromos térre való válaszát értjük. Ha egy molekulát elektromos tér alá helyezünk, a molekulát alkotó töltések – a pozitív atommagok a tér irányába, a negatív elektronok az ellenkező irányba – elmozdulnak, a molekula elektronfelhője eltorzul. Ilyen esetben a térfogatra integrált polarizáció a molekula dipólmomentumának felel meg, azaz a polarizáció kiszámolásához elegendő a töltések és azok pozíciójának a szorzatát kiátlagolni.

Szilárd, kristályos anyagok esetében az elektronok, és az atommagok ugyanúgy elmozdulnak az elektromos tér hatására. Ha klasszikus rendszerről van szó, a polarizáció számolása a szabad molekula esetéhez hasonló, egy fontos módosítással. A rendszert valamilyen kis részekre bontjuk (például egységcellák), és minden egyes egységcellának kiszámoljuk a dipólmomentumát, ezek összege és a teljes térfogat aránya adja a polarizációt. Ez az eljárás az

elektrétek elméletének, például a Clausius–Mossotti-egyenlet [1] alapja.

Az elméleti modellek általában periodikus határfeltételeket használnak. Ez esetben az „anyagon belül” vagyunk, így a kiszámolt fizikai mennyiség mintán belüli, azaz tömbkomponense számolható, a felületi komponense nem. Kvantumrendszerekben a fent leírt eljárás polarizáció esetében nem alkalmazható, mert a fizikai mennyiségeket operátorokkal írjuk le, és periodikus határfeltételek esetén a pozícióoperátor nem jól definiált. A problémát többféleképpen lehet szemléletessé tenni. Egy periodikus rendszer hullámfüggvényei nem függnék az origótól, őket a rendszer L periódicitáshosszával el lehet tolni, de ez nem igaz a pozícióoperátorra (például $x \neq x+L$). Matematikusabb megfogalmazás szerint, a pozícióoperátort nem írhatjuk fel mindössze a periodikus rendszerünk bázisfüggvényeivel. Korai próbálkozásokban a pozícióoperátort gyakran a „fűrészfog”-függvénnyel helyettesítették ($f(x) = x \bmod L$), de ez az eljárás helytelen. A függvény a cellák határainál nem folytonos. Az ilyen polarizációoperátorból számolt áram a cellák éleinél divergál, természetellenesen viselkedik, a töltések végtelen sebességgel a cella másik oldalára „ugranak”.

A modern polarizációelmélet választ ad a fenti nehézségekre. Mielőtt rátérnénk az elmélet részleteire, érdemes néhány kísérleti tényre emlékezni. Az anyagi polarizáció abszolút értéke kísérletileg nem mérhető mennyiség. A kísérletek *polarizációkülönbségeket* mérnek, például a polarizáció deriváltját valamilyen



Hetényi Balázs elméleti fizikus fő érdeklődési köre a kondenzált anyagok matematikai leírása, azon belül a geometriai fázisokhoz köthető kvantumjelenségek vizsgálata, mint például a polarizáció, a topológiai szigetelők, a szuperfolyékonyság és a töltéstranszport-jelenségek.

más, releváns paraméter (hőmérséklet, térfogat, deformációk stb.) függvényében. A anyagok spontán polarizációja sem egy mérés közvetlen eredménye. Az ilyen kísérletek általában egy hiszterézisgörbén vizslik végig a mintát, amely görbe két végpontja két ellentétes irányban, spontán, polarizált állapot. A fentiek következménye az is, hogy a kísérleti mérések valójában a tranziens áramot – amely a mintát a kezdő állapottól a végállapotba juttatja – mérik. A kvantummechanikában az áram a hullámfüggvény fázisával hozható kapcsolatba. Mint látni fogjuk, a polarizációt is egy, az adott anyagra jellemző mértani (Berry vagy Zak) fázis [2] írja le.

A geometriai fázis

Bár az optikában a mértani fázisok jelentősége már 1954-től ismert volt (Pancharatnam-fázis) a kvantummechanikában a ciklikus jelenségek esetén fellépő fázist *Sir Michael Victor Berry* (1941., Surrey, Egyesült Királyság –) elemezte [2]. Mint ismeretes, a kvantummechanikai állapot, a hullámfüggvény egy tetszőleges fázissal megváltoztatható anélkül, hogy a rendszer fizikai mennyiségei változnának, azaz $\Psi(x)$ hullámfüggvény ekvivalens az $\exp(i\phi)\Psi(x)$ hullámfüggvénnyel. A ϕ fázis nem függ a rendszert leíró kvantumváltozóktól (ez esetben x -től, ami például egy részecske pozíciója lehet), függ viszont a rendszert leíró más egyéb változóktól, amelyeket ebben az összefüggésben paramétereknek szokás nevezni. E megkülönböztetésére szemléletes példa a Born–Oppenheimer-közelítés.

Adott egy rendszer amely elektronokból és atommagokból áll, legyen n elektron pozíciója \mathbf{r}_i ($i = 1, \dots, n$) és N atommag pozíciója \mathbf{R}_I ($I = 1, \dots, N$). Az ilyen rendszer Schrödinger-egyenlete az összes változótól, mind az elektronok, mind az atommagok pozícióitól függ. A Born–Oppenheimer-közelítés kiindulópontja, hogy az atommagok tömege három vagy négy nagyságrenddel nagyobb, mint az elektronoké: azaz közelítő megoldásként az atommagokat térben rögzített objektumoknak vehetjük. Az így kapott Schrödinger-egyenletben az elektronok pozíciói még mindig „igazi” kvantumváltozók, az atommagokéi viszont már „csak” paraméterek. A hullámfüggvény mind a kvantumváltozóktól, mind a $\Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n; \mathbf{R}_1, \dots, \mathbf{R}_N)$ paraméterektől, viszont a fázis csak a $\phi(\mathbf{R}_1, \dots, \mathbf{R}_N)$ paraméterektől függ.

Berry észrevétele az volt, hogy olyan folyamatok esetében, amelyekben a paraméterek egy ciklust követnek, új fizikai mennyiségeket lehet definiálni, amelyek közül a legfontosabb a Berry-fázis:

$$\gamma = i \oint d\Gamma \langle \Psi(\Gamma) | \nabla_{\Gamma} | \Psi(\Gamma) \rangle. \quad (1)$$

Ebben az egyenletben Γ a kvantumrendszert leíró paraméterek összességét jelöli (például Born–Oppenheimer-közelítés esetén ezek az atommagok pozíciói $\Gamma = \mathbf{R}_1, \dots, \mathbf{R}_N$ lehetnek). Az integrál a Γ változók te-

rében lévő ciklikus görbe mentén vett vonalintegrál. A Dirac-jelölésben felírt skalárszorzat jelentése:

$$\begin{aligned} \langle \Psi(\Gamma) | \nabla_{\Gamma} | \Psi(\Gamma) \rangle &= \\ &= \int \dots \int d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_n \Psi^*(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n; \Gamma) \\ &\quad \nabla_{\Gamma} \Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n; \Gamma), \end{aligned} \quad (2)$$

azaz itt az igazi kvantumváltozókat integráljuk ki.

A Berry által leírt fázisnak a kvantummechanikában is voltak előfutárai. Konkrétan a molekulák esetében, ahol a rendszert atommagokra és elektronokra lehet osztani, *Mead* és *Trublar* írt először a ciklikus mozgást végző atommagokban fellépő fázisokról [3], amelyek hatása egy mágneses térre hasonlít. Ezenkívül létezik egy szemléletes analógia a mértani fázisra, a „parallel transzport”. Adott egy felület és egy vektor, amely a felülettel párhuzamosan mutat valamilyen irányba. Ezt a vektort „körbeviszük” a felületen úgy, hogy a vektor iránya az út mentén az út irányával mindig ugyanazt a szöveget zárja be. Amikor a kiinduló ponthoz visszaérünk a vektor valamilyen irányba fog mutatni. Sima, lapos felület esetén a vektor iránya az eredeti iránnyal fog megegyezni, viszont véges görbülettel rendelkező tér esetén (például egy gömb felületén) a körpálya után a vektor az eredetitől eltérő irányba fog mutatni. Ismeretes, hogy a hullámfüggvények is felfoghatók (végtelen dimenziós) vektoroknak, továbbá a Stokes-tétel segítségével az (1) egyenlet egy a zárt görbe által bezárt felületen vett görbületi integrállal alakítható.

Kristályok polarizációja sávelektronok esetén

Az alábbiakban kristályok alatt olyan anyagokat értünk, amelyekben az atommagok szabályos rácsot (három dimenzióban például térben vagy felületen középpontos rács, két dimenzióban például négyzet-rács, háromszögrács vagy méhsejtrács) alkotnak. Az elektronok közötti kölcsönhatástól, valamint az atommagok rezgéseitől eltekintünk. A polarizáció atommagoktól származó komponense ez esetben egyszerű:

$$P_{\text{mag}} = \frac{1}{V} \sum_I Q_I \mathbf{R}_I.$$

A Berry-fázis az elektronokból származó komponenshez szükséges.

Az egyszerűség kedvéért tekintsünk egy egydimenziós periodikus (a potenciálra igaz, hogy $V(x) = V(x+a)$) rendszert. A Bloch-tétel szerint a hullámfüggvények, azaz az egyes elektronok által betöltött állapotok formája

$$\Psi_k(x) = \exp(ikx) u_k(x),$$

ahol $-\pi/a < k \leq \pi/a$ (Brillouin-zóna) és $u_k(x+a) = u_k(x)$ (a a rácsállandó). Ebben az esetben a k kristálymomentum egy paraméter, x a kvantumváltozó. A k

egydimenziós, ezért mértani értelemben nem lehet olyan pályát alkotni, amely ciklikus és nem triviális, viszont periodikus határfeltételek esetén a Brillouin-zóna végpontjai fizikailag ekvivalens rendszereket írnak le. Így a következő mértani fázist írhatjuk fel:

$$\gamma_Z = \frac{ia}{2\pi} \int_{-\pi/a}^{\pi/a} dk \langle u_k | \partial_k | u_k \rangle, \quad (3)$$

azaz azt a fázist, amelyben a k paramétert a Brillouin-zónán vezetjük keresztül. Ezt a fázist, amely a kristályos rendszerek jellemzője, Zak tárgyalta először [4]. A kristályok tömbpolarizációja:

$$P = \frac{e}{a} \gamma_Z. \quad (4)$$

Ezen állítás bizonyításától hely hiányában eltekintünk, de három, mellette szóló érvet felsorolunk. Egyrészt, a (3) egyenlet az $i\partial_k$ heurisztikus „pozícióoperátor” „várható értékének” tekinthető. A k paraméter egysége inverz távolság, mert k az elektronállapot hullámszáma. Mint említettük, k nem a kvantumváltozó, ezért $i\partial_k$ a szó szoros értelmében nem tekinthető operátornak, így a γ_Z sem igazi várható érték. Másodszor, a hullámfüggvény megszorozható egy fázisfaktoral (exp($i\theta_k$), mértékinvariancia). A fázisfaktor nem teljesen tetszőleges, a fizikai követelményeknek akkor felel meg, ha igaz, hogy

$$\theta_{\pi/a} = \theta_{-\pi/a} + 2\pi n,$$

ahol n egész szám. Ha a hullámfüggvény fázisát így változtatjuk, akkor megváltozik a mértani fázis és maga a polarizáció is: $P \rightarrow P + ne$ (e az elemi töltés). Más szóval, a polarizáció csak egy ne eltolásig határozható meg, ahol ne n darab egységnyi töltés. E határozatlanság magyarázata, hogy itt a tömbpolarizációról van szó. A periodikus határfeltételek miatt az anyagon belül vagyunk, viszont a teljes polarizáció a tömbpolarizáción kívül a felületen lévő töltések adta komponens-től is függ. A felületi állapotokat az elektronok vagy betöltik vagy nem, de a járulék mindenképpen csak egész számszor az e elemi töltés lehet. Így a mértani fázis alapú tömbpolarizáció megegyezik a fizikai tapasztalattal. Egy harmadik érv, ami a fenti kifejezések mellett szól, hogy Zak eredeti cikkében [4] bebizonyította, hogy a Zak-fázis megfelel a rendszert jellemző Wannier-függvényekre számolt átlagpozícióval.

Általánosítás a soktestesetre

A fent tárgyalt polarizációkifejezések (a (3) és (4) egyenletek) abban az esetben érvényesek, amikor az elektronok közötti kölcsönhatástól eltekintünk, vagy olyan közelítés(ek)e-t vezetünk be, amely(ek) egyrészecskes egyenletekhez vezetnek (például Hartree-Fock- vagy sűrűségfunktóalelmélet-módszerek). Ha ilyen közelítésekkel nem élünk, azaz az elektronok közötti kölcsönhatást explicit akarjuk megoldani, ak-

kor nincs Brillouin-zóna (amely az egyrészecskes hullámfüggvények alkotta Hilbert-tér).

A modern polarizáció általánosítását sok test esetére Resta végezte el. Az általa megadott kifejezés [4]:

$$P = \frac{e}{2\pi} \text{Im} \log \langle \Psi | \exp \left(i \frac{2\pi}{L} \hat{X} \right) | \Psi \rangle. \quad (5)$$

A rendszer ez esetben $L = na$ -ban (azaz nem egy egységcellában, hanem egy szupercellában) periodikus, ahol n egész szám. Az

$$\hat{X} = \sum_{i=1}^N x_i$$

operátor a teljes pozícióoperátor, azaz a szupercellában lévő részecskék pozícióinak összege. Az (5) kifejezést Resta két érveléssel támasztja alá. Egyrészt a P idő szerinti deriváltja ez esetben a részecskék áramának felel meg. Egy adiabatikus ciklus alatt a részecskék száma egy egységcellán belül csak egész számmal változhat (Thouless-töltéspumpa [5]), és a P -ből levezetett áram ezt a feltételt kielégíti. Resta második érve, hogy ha egy olyan rendszert veszünk, amelyben nincs kölcsönhatás (azaz a hullámfüggvény egy sávból alkotott Slater-determináns), akkor visszanyerjük a (3) és (4) kifejezéseket. A Resta által levezetett formalizmusból még egy fontos mennyiség, a ξ Resta-Sorella-koherenciahossz kapható, amelynek definíciója:

$$\xi^2 = -\frac{L^2}{2\pi} \text{Re} \log \langle \Psi | \exp \left(i \frac{2\pi}{L} \hat{X} \right) | \Psi \rangle. \quad (6)$$

Ez a mennyiség a polarizáció varianciájának felel meg, ξ számolása lehetővé teszi, hogy szigetelőket és vezetőket megkülönböztessünk. A ξ koherenciahossz ideális vezető esetén végtelen, szigetelők esetében véges. Érdekes, hogy e kritérium elvi alapjait – évtizedekkel a modern polarizációelmélet előtt – Kohn [6] fektette le. Klasszikus esetben a vezetőket és szigetelőket közötti különbség az egyes töltéshordozók lokalizációjától függ: ha ezek lokalizáltak (kötött töltések), akkor az anyag szigetelő (az anyag az elektromos tér hatására nem vezet, hanem polarizálódik). Kohn sejtése volt, hogy a kvantum esetben ez a kritérium csak részben fedti a valóságot. Ilyenkor nem az egyes töltéshordozók lokalizációja a mérvadó, hanem az összes töltéshordozó tömegközéppontjéé. Az (5) és (6) kifejezések az összes töltés pozíciójától függenek.

A Resta- és Resta-Sorella-kifejezések rácsmodellek esetében – az elektronsűrűségtől függően – kiegészítésre szorulhatnak. Ha a részecskesűrűség egységcellánként p/q részecske, ahol p és q egész számok, akkor a helyes kifejezés:

$$P = \frac{e}{2\pi q} \text{Im} \log \langle \Psi | \exp \left(i \frac{2\pi}{L} q \hat{X} \right) | \Psi \rangle, \quad (7)$$

és a koherenciahossz is hasonlóképpen módosul. Erre szemléletes példa a Hubbard-modell 1/2-es ré-

szecskesűrűség-esete, amelyben a q szorzó nélkül a ξ a hossz a q szorzó nélkül végtelenhez tartana, annak ellenére, hogy ez a rendszer a kanonikus Mott-szigetelő [4].

A polarizációamplitúdó mint karakterisztikus függvény

A statisztikában a valószínűségeloszlásokat momentumokkal vagy kumulánsokkal lehet jellemezni. A momentumokat és a kumulánsokat a valószínűségeloszlás karakterisztikus függvényéből lehet megadni. Adott egy x véletlen változó $P(x) > 0$ ($\int dx P(x) = 1$) valószínűségeloszlása. A karakterisztikus függvény definíciója:

$$f_k = \int dx P(x) \exp(ikx). \quad (8)$$

Az n -ed rendű M_n momentumok vagy C_n kumulánsok definíciója:

$$M_n = (-i)^n \left. \frac{\partial^n f_k}{\partial k^n} \right|_{k=0} = \langle x^n \rangle, \quad (9)$$

$$C_n = (-i)^n \left. \frac{\partial^n \ln f_k}{\partial k^n} \right|_{k=0}.$$

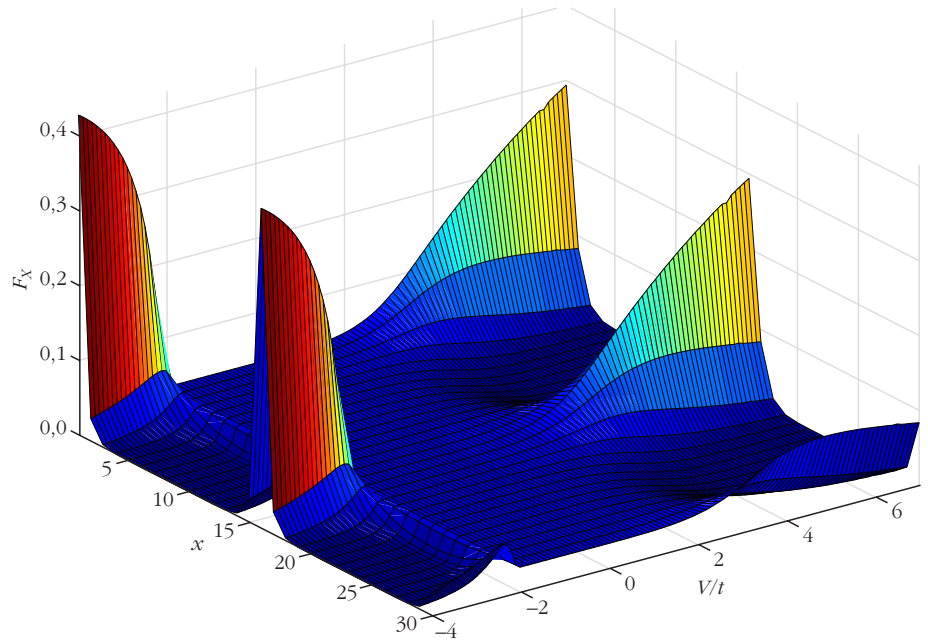
$M_1 = C_1$ az x változó átlaga, C_2 a varianciája. C_3, C_4 magasabb rendű kumulánsok, az előbbi „ferdeségnek” (angolul „skew”-nak), az utóbbit pedig kurtózisanak vagy púposágnak szokás nevezni.

A polarizációamplitúdó definíciója:

$$Z_q = \langle \Psi | \exp\left(i \frac{2\pi}{L} q \hat{X}\right) | \Psi \rangle. \quad (10)$$

Z_q a teljes pozíció (X) karakterisztikus függvénye, azaz f_k megfeleltethető Z_q -nak, ha k -t $2\pi L^{-1}q$ -nak feleltetjük meg, amennyiben adott egy F_X valószínűségeloszlás-függvény. A periodicitás miatti lényeges különbség, hogy a Z_q függvényben a q változó csak egész számértékeket vehet fel, míg k folytonos. Ezért a polarizációamplitúdóból a momentumokat és a kumulánsokat csak diszkrét deriváltak által (például véges differencia) lehet definiálni. Ezek a diszkrét deriváltak folytonos limeszbe mennek át, ha a rendszer L mérete a végtelenhez tart.

Külön érdekesség az F_X eloszlás viszonya a Wannier-függvények négyzetével, amikor a nem kölcsön-

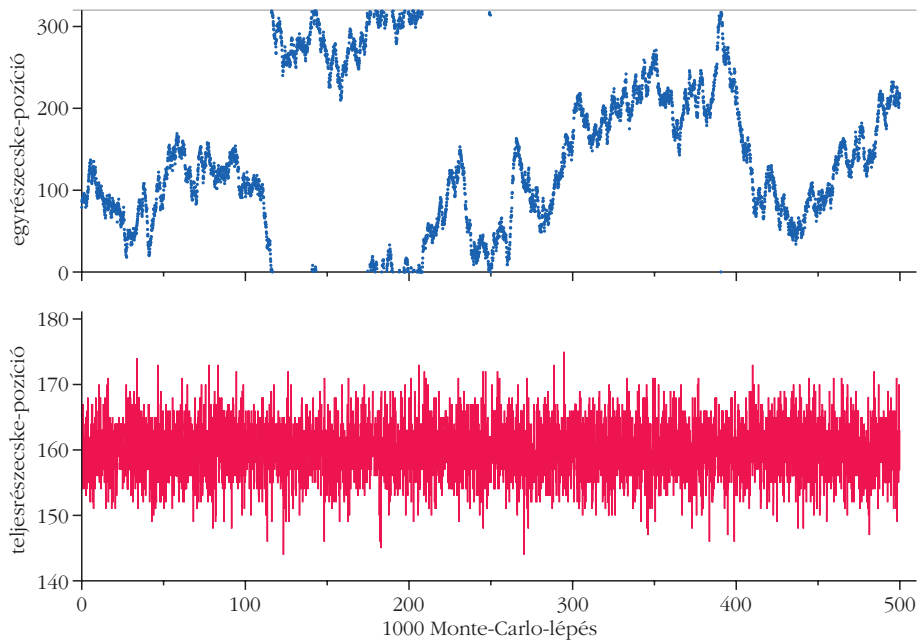


1. ábra. F_X a Z_q függvény diszkrét Fourier-transzformáltja, vagyis a polarizációeloszlás egy egydimenziós, spintelen, kölcsönható, fermionikus rácsmodell esetére. A V/t a kölcsönhatás és az átugrási integrál aránya.

ható rendszerek esetét nézzük. Az első momentum mindkét esetben egy egyszerű átlag. Az első esetben az X változó $P(X)$ -re számolt átlaga, a másodikban a Wannier-függvények átlagpozíciója. Magasabb kumulánsok esetében már nem ilyen egyszerű a megfeleltetés. Az X változó magasabb rendű kumulánsai különböző Wannier-függvények átfedésének feleltethetők meg. A többletpozíció klasszikus átlagként viselkedik, míg az egyes részecskék pozíciója nem. Ez az eredmény összhangban van Kohn tételével, amely szerint kvantumrendszerek esetén a szigetelés kritériuma a teljes pozíció lokalizációja, amely nem feltétlenül jelenti az egyes töltéshordozók lokalizációját.

Számolások egydimenziós modellekre

Az 1. ábra a Z_q függvény F_X Fourier-transzformáltját mutatja egy spintelen fermionrácsmodell esetében [7]. A modellt két paraméter jellemez: a t átugrási integrál, amely az elektronok rácspontok között mobilitását adja meg, valamint az elektronok közötti V kölcsönhatás, amely csak akkor hat, amikor két elektron egymás mellett lévő rácspontokon helyezkedik el. A számolást egy $L = 30$ méretű rácson egzakt diagonalizációs módszerrel, periodikus határfeltételekkel végeztük el. Az elektronsűrűség rácspontonként $1/2$. Ezt a modellt – a legegyszerűbb kölcsönható modell lévén – már sokan tanulmányozták. A modell anyagtudományi jelentősége, hogy magyarázatot ad a Verwey-átmenetre [8], egy olyan fém-szigetelő átmenetre, amely egyes kristályos anyagok elektronjainak egy spincsatornáján belül történik meg (például vas-oxid -153 °C). Ezen kívül a modell áttérképezhető az egyszerű Heisenberg-modellre is. A modelltől ismert,



2. ábra. Az egyrészecske- (fent), valamint a teljesrészecske-pozíció (alul) egy szimuláció futama alatt a bozonikus Hubbard-modellben, $L = 320$ méretű rácson.

hogy $|V/t| = 2$ -nél mutat átmeneteket. A $-V = -2t$ átmenet egy energiarés nélküli fémes rendszert választ el egy olyan szigetelőtől, amelyben az elektronok „összeragadnak”, azaz a negatív V vonzó kölcsönhatása miatt nagy valószínűséggel egymás mellé kerülnek. A $V = -2t$ pedig ugyancsak egy fémes rendszert választ el egy szigetelőtől, de ez esetben a szigetelő fázis egy töltéssűrűség-hullám.

Az F_x eloszlásból mindkét átmenet tisztán látszik. A szigetelő fázisokban ($|V/t| > 2$) az eloszlásnak két éles csúcsa van, a fémes fázisban a csúcsok eltűnnek, az eloszlás lapos. Az a tény, hogy az eloszlás kétcsúcsos az egységcellánkénti $p/q = 1/2$ -es elektronsűrűség következménye, emiatt szükséges a $q = 2$ korrekció.

Az eloszlás tanulmányozásából kvantitatív eredményeket is ki lehet hozni. A polarizáció varianciájának végesméret-skálázásával meg lehet határozni a fázisátmeneti pontokat. A vezető fázisban a polarizáció varianciája lineárisan függ a mérettől (azaz a termodinamikai limeszben a variancia a végtelenhez tart), míg a szigetelő fázisokban a méret szerinti kitevő egynél jóval kevesebb. Ez esetben a variancia – termodinamikai limeszben – véges kell legyen. Bár az egzakt diagonalizáció csak kis méretű rácokra alkalmazható, számolásaink a fenti állításokkal összhangban vannak [7, 9].

A 2. ábra a bozonikus Hubbard-modell esetére, egy szimuláció futama alatt mutatja az egyrészecske-, valamint a teljesrészecske-pozíciót. Ehhez a számoláshoz egy variációs Monte-Carlo-módszert használtunk [9], az x tengely az ábrán a Monte-Carlo-lépésszámot mutatja. A rácst itt $L = 320$ méretű, a részecskesűrűség egységnyi. Az átugrási integrál és a kölcsönhatás aránya $t/U = 0,25$, ilyenkor a modell szigetelőfázisban van. Az ábra felső része egy részecske pozíciójának pályáját mutatja, amely a kicserélődési kölcsönhatás által delokalizálódik, míg az ábra alsó része a tömegközéppont pályáját ábrázolja. Az egyrészecske-pálya a teljes rácst bejárja, míg a tömegközéppont csak a rácst középpontját szórja körül. Szemléletes példa a Kohn-tételre: ez egy szigetelőrendszer, amelyben a teljes pozíció lokalizált, míg az egyes részecskék pozíciója nem.

Összefoglalás

Összefoglalás

A modern polarizációelmélet (geometriai és Zak-fázis) alapjainak áttekintése után az elmélet soktestválogatásból kumulánsokat vezetünk le. A kumulánsok alkalmasak a polarizáció eloszlásának rekonstruálására, valamint végesméret-skálázásukból kikövetkeztethetők a fém-szigetelő átmenetek modellszámolások esetében. A bozonikus Hubbard-modell igen szemléletes példa Kohn tételére.

Irodalom

1. E. M. Purcell, D. J. Morin: *Electricity and Magnetism*. Cambridge University Press (2013).
2. M. V. Berry, *Proc. Roy. Soc. London A392* (1984) 45.
3. C. A. Mead, D. G. Truhlar, *J. Chem. Phys.* 70 (1979) 2284.
4. R. Resta, *J. Phys. Cond. Mat.* 12 (2000) R107.
5. D. J. Thouless, *Phys. Rev. B* 27 (1983) 6083.
6. W. Kohn, *Phys. Rev.* 133 (1964) A171.
7. B. Hetényi, B. Dóra, *Phys. Rev. B* 99 (2019) 085126.
8. F. Walz, *J. Phys. Cond. Mat.* 14 (2002) R285.
9. B. Hetényi, L. M. Martelo, B. Tanatar, *Phys. Rev. B* 100 (2019) 174517.

Szerkesztőség: 1092 Budapest, Ráday utca 18. földszint III., Eötvös Loránd Fizikai Társulat. Telefon/fax: (1) 201-8682

A Társulat Internet honlapja <http://www.elft.hu>, e-postacíme: elft@elft.hu

Kiadja az Eötvös Loránd Fizikai Társulat, felelős kiadó Groma István főtítká, felelős szerkesztő Lendvai János főszerkesztő.

Kéziratokat nem őrzünk meg és nem küldünk vissza. A szerzőknek tiszteletpéldányt küldünk.

Nyomdai előkészítés: Kármán Stúdió, nyomdai munkálatok: OOK-PRESS Kft., felelős vezető: Szathmáry Áttila ügyvezető igazgató.

Terjeszti az Eötvös Loránd Fizikai Társulat, előfizethető a Társulathoz vagy postautalványon a 10200830-32310274-00000000 számú egyszámlán.

Megjelenik havonta (nyáron duplaszámmal), egyes szám ára: 1000.- Ft (duplaszámé 2000.- Ft) + postaköltség.

HU ISSN 0015–3257 (nyomtatott) és **HU ISSN 1588–0540** (online)