

Topologikus fázisátalakulás, a Thouless-formula vizsgálata kvantum-Hall rendszeren

Werner Miklós Antal

2011

Konzulens: **Dr. Zaránd Gergely**
BME Elméleti Fizika Tanszék



Tartalomjegyzék

1. Bevezetés	3
2. Elméleti Alapok	4
2.1. A lokalizáció egyparaméteres skálaelmélete	4
2.2. Kétparaméteres skálázás kvantum-Hall rendszerben	6
2.3. Elektronok mozgása rácson	7
2.4. A lineáris vezetőképesség-tenzor	9
2.5. Energiaszint-görbületek, a Thouless-formula	11
2.6. Topologikus számok a kvantum-Hall effektusban	13
3. Eredmények	15
3.1. Numerikus megvalósítás	15
3.2. Az egyparaméteres skálázás vizsgálata az energiaszint-görbületek segítségével $B = 0$ mágneses térben	16
3.3. Kvantum-Hall rendszer vizsgálata	20
3.3.1. Kvantum-Hall effektus numerikus megfigyelése kétdimenziós rácson	20
3.3.2. A Thouless-formula általánosíthatóságának vizsgálata	21
3.3.3. Kétparaméteres skálázás kvantum-Hall rendszerben	23
3.4. Eredmények háromdimenziós köbös rácson	25
3.4.1. Egyparaméteres viselkedés mágneses tér nélkül	25
3.4.2. Viselkedés mágneses térben	26
4. Összefoglalás	28
5. Köszönetnyilvánítás	29

1. Bevezetés

A rendezetlen rendszerekbeli kvantum fázisátalakulások a mai szilárdtest fizika egyik legintenzívebben kutatott területét képviselik. Talán a legismertebb ilyen átalakulás az Anderson-féle lokalizációs fázisátalakulás, amikor is a rendezetlenség függvényében az egész mintára kiterjedő elektronállapotok egy kritikus rendezetlenségnél nagyobb rendezetlenségre lokalizálódnak. Egy másik híres példa az erős mágneses térben megjelenő egész számú Hall effektus. Mágneses tér hiányában 2 dimenzióban minden elektronállapot lokalizált [2]. Nagy mágneses térben a helyzet drasztikusan megváltozik. A rendezetlenség által kiszélesített Landau-nívókon (Landau-sávokon) van egy kritikus energia, ahol a lokalizációs hossz végtelenné válik. Az ezen a ponton létrejövő fázisátalakulás egyben az utóbbi évek kutatásainak homlokterébe került topológikus fázisátalakulások prototípusa is. Ez a fázisátalakulás nem írható le hagyományos rendparaméterek segítségével, és a különféle (lokalizált) fázisokat eltérő topológikus kvantum számok különböztetik csak meg egymástól. Míg a mágneses tér nélküli fázisátalakulást az ún. egy paraméteres skálázás segítségével lehet leírni, Pruisken és Khmelnitskii elképzelései szerint a kvantum Hall effektust egy kétparaméteres ($\sigma_{xx} - \sigma_{xy}$ síkon való) skálázás írja le [6, 7].

Munkám célja a skálaelmélet illetve az ún. Thouless formula kapcsolatának vizsgálata. Rendezetlen egydimenziós rendszerek vizsgálatakor Thouless a vezetőképességet az elektronállapotok energiájának a peremfeltétel változtatására való érzékenységevel (dimenziótlan energiaszint görbületével) hozta összefüggésbe [9]. Bár az elméleti levezetéshez túlságosan erős feltételezésekre van szükség, melyek általában nem teljesülnek, a formulát numerikusan igazolták igen széles rendezetlenség-tartományra [10].

Kutatásunk során Thouless formuláját próbáltuk általánosítani két-, és többdimenziós rendezetlen rendszerekre. Az általunk vizsgált rendszerben az elektronokat négyzet rácson írtuk le, szoros kötésű közelítésben. A merőleges mágneses teret Peierls-helyettesítéssel vezettük be. Munkámban először megmutatom, hogy egy kétdimenziós rendszer esetében külső mágneses tér hiányában az energiaszint görbületek eloszlása összeegyeztethető az egyparaméteres skála hipotézissel. Ezt követően kvantum Hall rendszerek Hall- illetve diagonális vezetőképességét tanulmányozom. Különböző méretű és rendezetlenségű minták sokaságát vizsgálva a vezetőképességek síkján vizsgálom azok rendszerméret által generált renormálási csoport folyamatát, és – tudomásom szerint először az irodalomban – numerikusan igazolom Pruisken és Khmelnitskii elképzelését. Ezek után megvizsgálom, hogy hasonlóan a diagonális vezetőképességekhez, létezik-e a Thouless által felfedezetthez hasonló kapcsolat az offdiagonális vezetőképesség és a megfelelő perem-fázisok szerinti vegyes-derivált között. Végezetül három dimenzióban, a lokalizációs átalakulás közelében is megvizsgálom ugyanezeket a kérdéseket.

A dolgozat felépítése a következő: A 2. fejezetben tömören összefoglalom a dolgozat megértéséhez szükséges elméleti alapokat. A 3. fejezetben az általam végzett numerikus számítások eredményeit részletezem, ezen belül először a lokalizáció egyparaméteres skálaelméletét vizsgálom két dimenzióban, majd mágneses tér mellett vizsgálom a rendszer esetleges univerzális tulajdonságait, végül a háromdimenziós rendszer vizsgálata következik. A 4. fejezetben összefoglalom a legfontosabb eredményeket.

2. Elméleti Alapok

Ebben a fejezetben összefoglalom a dolgozat megértéséhez szükséges legfontosabb elméleti alapokat. Az általam vizsgált modellek kivétel nélkül rendezetlen potenciálban mozgó nemkölcsönható elektronokat írnak le. Tömören áttekintem a lokalizációelmélet és a kvantum-Hall-effektus néhány aspektusát, ill. a lehetséges vezetőképesség-definíciókat, ezen belül Thouless vezetőképesség-formuláját.

2.1. A lokalizáció egyparaméteres skálaelmélete

A lokalizáció egyparaméteres skálaelmélete[1] azon a hipotézisen nyugszik, hogy rendezetlen nem kölcsönható elektronrendszerben, $T = 0$ hőmérsékleten csak két releváns hosszúságskála van, a rendszerméret és a lokalizációs hossz, ill. a fémes fázisban az ezt helyettesítő koherenciahossz.¹ A dimenziótlan fizikai mennyiségek csak ezen hosszúságok arányától ($\frac{L}{\xi}$), mint dimenziótlan paramétertől függhetnek, univerzális módon.

A lokalizációelmélet irodalmában az $\frac{L}{\xi}$ arány helyett gyakran a dimenziótlan vezetést veszik skálaparaméternek:

$$g = \frac{h}{e^2} G . \quad (2.1)$$

Az egyparaméteres-skálahipotézis értelmében ennek $\frac{L}{\xi}$ függvényének kell lennie. Tekintsük a dimenziótlan-vezetőképességet, mint $\ln\left(\frac{L}{\xi}\right)$ függvényét:

$$g = g(\ln L - \ln \xi) . \quad (2.2)$$

Ekkor definiálhatjuk a következő β -függvényt:

$$\frac{\partial \ln g}{\partial \ln L} = \frac{1}{g} \frac{\partial g}{\partial \ln L} = \beta(g) . \quad (2.3)$$

A $\beta(g)$ -függvény univerzális, azaz az egyes, szimetriák által meghatározott univerzalitási osztályokra ugyanazt a görbét várjuk. A $g \gg 1$ és $g \ll 1$ határesetekben meg tudjuk jósolni a függvényt. $g \gg 1$ esetén klasszikus fémes viselkedést várunk, így egy d -dimenziós kocka dimenziótlan vezetőképessége:

$$g(L) \approx \sigma \frac{h}{e^2} \frac{A}{L} = \frac{h}{e^2} \sigma L^{d-2} , \quad (2.4)$$

ahol σ a rendszer fajlagos vezetőképessége. Ebből azonnal kapjuk, hogy:

$$\beta(g \gg 1) \cong d - 2 = \text{const.} \quad (2.5)$$

Az erősen lokalizált tartományban ($g \ll 1$) viszont a hullámfüggvények exponenciálisan lokalizáltak, a vezetőképességet így a méret exponenciális függvényének várjuk:

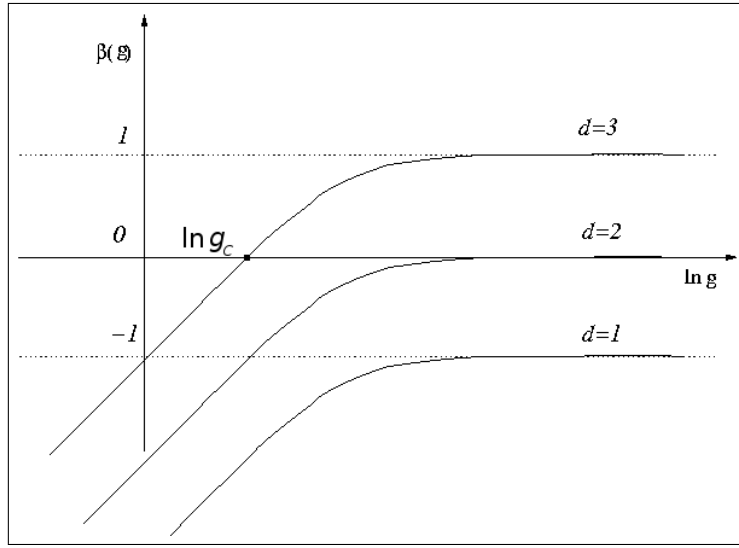
$$g(L) \propto e^{-\alpha L} . \quad (2.6)$$

¹Amennyiben rácson dolgozunk, van még egy mikroszkópikus hosszskála, a rácsállandó. Az univerzális viselkedést abban az esetben láthatjuk, ha ez jóval kisebb a másik két hosszúságnál.

Ebben az esetben:

$$\beta(g \ll 1) \cong \ln g + \text{const.} \quad (2.7)$$

Ezek alapján kvalitatíve az 1. ábrán látható görbéket kapjuk. Egy dimenzióban a rendszer méretét végtelen nagyra növelve a vezetőképesség és fajlagos vezetőképesség minden esetben 0-hoz tart, mely annak a következménye hogy egy dimenzióban minden hullámfüggvény lokalizált. Három dimenzióban egy fázisátalakulást látunk valamely g_c kritikus vezetőképességnél: egy $g > g_c$ vezetőképességű rendszer méretét végtelen nagyra növelve a fajlagos vezetőképesség egy véges értékhez tart, $g < g_c$ esetén pedig nullához. Két dimenzióban a fázisátalakulás megjelenése függ az univerzalitási osztálytól. Perturbatív módszerekkel lehet a nagy- g tartománytól elindulni, ekkor mágneses tér nélküli esetben negatív korrekciót kapunk a β -függvényre, azaz nem várunk fázisátalakulást, ahogy nagy mágneses tér mellett sem. Az ún. szimplektikus sokaságon (spin-pálya kölcsönhatás esetén) a β -függvény korrekciója pozitív, így ekkor létezik lokalizációs fázisátalakulás.



1. ábra. A lokalizáció egyparaméteres skálafüggvényei különböző dimenziókban. Mágneses tér nélkül csak $d > 2$ esetben látunk fázisátalakulást.

Az egyparaméteres viselkedést Kramer és MacKinnon igazolta numerikus munkájában [2]. Ők két- ill. háromdimenziós, egyik irányban (x) nagyon hosszú, a többi irányban periodikus határfeltételeknek megfelelő rendszereket vizsgáltak. Azt találták, hogy a különböző keresztmetszetű rendszerekben látott x -irányú lokalizációs hossz (Ljapunov-exponens) univerzális függvénye egy $\lambda_\infty(W, E)$ hosszskálának, ahol W a rendezetlenség, E pedig az energia. Két dimenzióban az összefüggés egy-egy értelmű, három dimenzióban a λ_∞ mennyiség minden energián egy kritikus $W_c(E)$ rendezetlenségre divergál:

$$\lambda_\infty(W, E) \sim |W - W_c(E)|^{-\nu}, \quad (2.8)$$

ahol ν egy, az univerzalitási osztálytól függő exponens.

2.2. Kétparaméteres skálázás kvantum-Hall rendszerben

Az egyparaméteres skálázás bizonyos esetekben csak korlátozott mértékben teljesül. Például amennyiben mágneses térbe helyezzük a rendszert, egy új hosszskála jelenik meg, a mágneses hossz (L_H). Ez azt jelenti, hogy már három hosszskalánk van, melyekből két független dimenziótlan paramétert kaphatunk. Így várakozásunk szerint, a rendszer univerzális viselkedésének leírásához két dimenziótlan paraméterre lesz szükség, $\frac{L}{L_H}$ -ra ill. $\frac{L}{\xi}$ -re.

Egy rendezett kétdimenziós rendszer mágneses térbeli energiaspektrumában gap-ek (energiarések) nyílnak. A szabad-elektron modellben végtelenül degenerált Landau-nívókat látunk. Szoros-kötésű esetben a helyzet bonyolultabb, ekkor a mágneses tér függvényében az energiaspektrum egy pillangó alakú fraktált formát vesz fel. Ez az ún. Hofstadter-pillangó [3] az egyik első fraktál-szerű viselkedés volt, melyet valódi fizikai rendszert leíró modellben találtak. Ha a szoros-kötésű (négyzet)rács egyes elemi celláin a mágneses fluxus a fluxuskvantum ($\Phi_0 = \frac{h}{e}$) racionális hányada (p/q), akkor a spektrumban q darab alsávot találunk, amennyiben p és q relatív prímek [4]. Ebben az esetben a folytonos és a szoros-kötésű eset kvalitatíve hasonlóan viselkedik. Mint majd a 2.3. alfejezetben látjuk, a periodikus határfeltétel miatt csak ez az eset valósítható meg.

Ha rendezetlenség is jelen van, akkor a Landau-nívók ill. rácson a Landau-alsávok kiszélesednek, és az egyes alsávokon megjelenik egy kritikus energia, ahol a lokalizációs hossz divergál, a többi energián viszont lokalizált állapotokat találunk (2a. ábra). A kritikus energia közelében a lokalizációs hossz az egyes alsávokon hatványfüggvény viselkedést mutat:

$$\xi \sim |E - E_c|^{-\nu}, \quad (2.9)$$

ahol $\nu \approx 2.34$ [5], az átmenetre jellemző kritikus exponens.

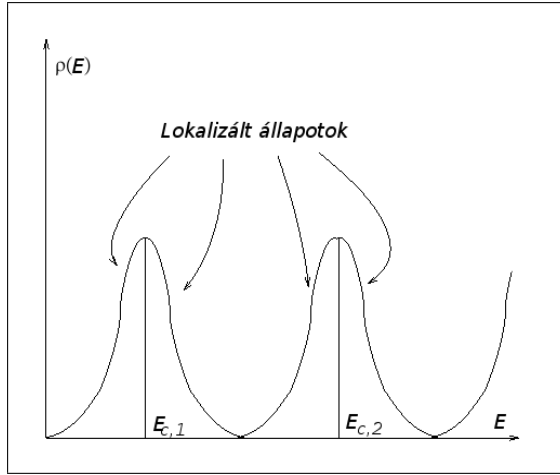
Ez lényegesen különbözik tehát a mágneses tér nélküli esettől, ahol a lokalizációs hossz minden energián véges marad. További érdekes tulajdonság, hogy ha a Fermi-energia elegendően távol van a kritikus energiától, azaz a rendszer lineáris mérete a lokalizációs hosszánál már nagyobb, akkor a Hall-vezetőképesség csak a vezetés-kvantum egész számszorosa lehet, és folytonos esetben minden Landau-alsáv egységnyi vezetéskvantumot hordoz. Rácson a helyzet ettől kissé eltér, de az továbbra is igaz marad, hogy az alsávok Hall-vezetőképessége a vezetéskvantum egész számszorosa.

Pruisen a kvantum-Hall effektus skálaviselkedését vizsgálta [6]. Kísérleti eredményekre ill. a nemlineáris σ -modellen végzett számításokra alapozva arra jutott, hogy a QHE-rendszer fajlagos vezetőképesség-tenzorának elemei, melyek $d = 2$ dimenzióban lényegében dimenziótlan paraméterek:

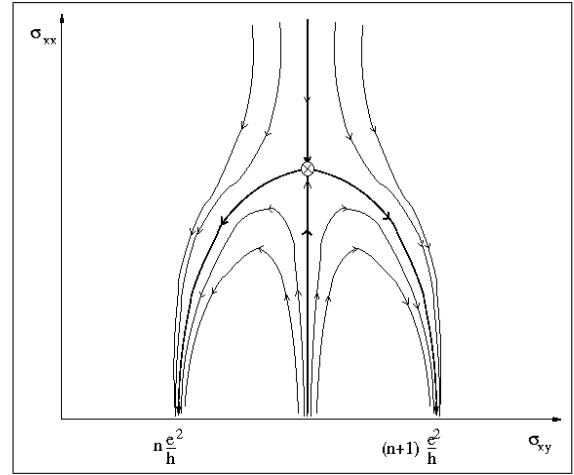
$$\sigma_{ij} = \frac{e^2}{h} g_{ij}, \quad (2.10)$$

a 2b. ábrán látható renormálási folyamtnak megfelelően változnak. A folyamat a hőmérséklet-változtatása generálja. Cikkében Pruisen a vezetőképességek hőmérséklet-függését az inelasztikus szórás hossz (L_{in}) hőmérsékletfüggésével hozza kapcsolatba, így $T \rightarrow 0$ esetben ezen hosszskála szerepét a rendszerméret veszi át. Azt várjuk tehát, hogy $T = 0$ hőmérsékleten a rendszerméret változtatásával hasonló folyamábrát látunk.

A Pruisen-folyamban a vízszintes tengelyen $\sigma_{xx} = 0$ vezetőképességű, azaz szigetelő fixpontokat látunk melyekhez kvantált Hall-vezetőképesség tartozik. Ezek a fixpontok



(a) Kvantum-Hall rendszer állapotsűrűsége. Minden Landau-alsávon találunk egy E_c energiát, ahol a lokalizációs hossz divergál, a többi energián a hullámfüggvények lokalizáltak.



(b) A Pruisken és Khmelnitskii által jó-solt renormálási csoport folyam a kvantum-Hall rendszer vezetőképességeire. A stabil kvantum-Hall fixpontok között, véges σ_{xx} vezetőképességgel megjelennek az ún. rendezetlenségi fixpontok.

2. ábra.

írják le a kvantum-Hall platókat. Azonban minden kvantum-Hall átmenethez tartozik egy másik, hiperbolikus fixpont is. Ezeket tekinthetjük „rendezetlenség”-fixpontnak, és ezek jellemzik a platók közötti átmeneteket.

2.3. Elektronok mozgása rácson

Dolgozatomban az elektronok mozgását rácson vizsgálom. Az egyrészecske Hilbert-teret ebben az esetben a rácshelyekre lokalizált állapotok feszítik ki. Az ilyen állapotokat a rácshellyel indexelhetjük: $|i\rangle$ az i -vel indexelt rácshelyre lokalizált, normált állapot. Amennyiben csak elsőszomszéd hoppingot vezetünk be, a rendszer Hamilton-operátora másodkvantált formalizmusban a következő alakot ölti:

$$\hat{H} = \sum_i \varepsilon_i c_i^\dagger c_i + \sum_{\langle i,j \rangle} t_{ij} c_i^\dagger c_j + t_{ij}^* c_j^\dagger c_i, \quad (2.11)$$

ahol ε_i az i -vel indexelt rácshelyen a rendezetlen potenciális energia. Ezeket egymástól függetlenül a $[-W/2, W/2]$ intervallumból választjuk egyenletes eloszlással. A $c_i^\dagger$ és c_i az i -edik rácshelyre lokalizált elektronállapotot keltő ill. eltüntető fermionikus operátorok. Az $\langle i,j \rangle$ az első szomszéd párokat indexeli. A t_{ij} hoppingok fázisában egy esetleges külső mágneses tér hatása is megjelenhet, Peierls-helyettesítéssel (2.18), éppen ezért jelenleg semmit nem teszünk fel t_{ij} fázisáról.

A helyoperátor lényegében d darab operátor egy d -dimenziós rácsállandójú rács esetén. Pl. az x -koordinátaoperátor a következő alakú:

$$\hat{x} = \sum_i x_i c_i^\dagger c_i. \quad (2.12)$$

Ennek a kvantummechanikai időderiváltja a sebességoperátor x -irányú komponense:

$$\hat{v}^x = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{x}] = \frac{i}{\hbar} \sum_{\langle i,j \rangle} \delta_{ij}^x (t_{ij} c_i^\dagger c_j - t_{ij}^* c_j^\dagger c_i), \quad (2.13)$$

ahol $\delta_{ij}^x = x_j - x_i$ az elmozdulás. Ezen formula így végtelen rácsra érvényes, véges rácson, periodikus határfeltétel esetében, vigyáznunk kell: ekkor ugyanis a sebességoperátor helyes bevezetésénél, ha éppen a peremen vagyunk (pl. $x_j = a$ viszont $x_i = aN_x$), $\delta_{ij}^x = a$ -t kell vennünk elmozdulásnak (azaz $x_j = a(N_x + 1)$).

Az áramoperátort legegyszerűbben egy csomóponti-egyenlet felírásával vezethetjük be. Ehhez tekintsük az i -rácshely töltésének időderiváltját:

$$\dot{q}_i = \frac{ie}{\hbar} [\hat{\mathbf{H}}, c_i^\dagger c_i] = \frac{ie}{\hbar} \sum_k \left(t_{ki} c_k^\dagger c_i - t_{ki}^* c_i^\dagger c_k \right) . \quad (2.14)$$

A $\sum'$ az i rácshely első szomszédaira fut. A (2.14) egyenlet a folytonos esetben felírható kontinuitási egyenletnek felel meg.

A csomóponti-egyenlet alapján leolvashatjuk az $\langle i, j \rangle$ kötésen folyó áram operátorát, melynek előjele a konvenció szerint $i \rightarrow j$ irányban pozitív:

$$I_{\langle i, j \rangle} \equiv \frac{ie}{\hbar} \left(t_{ij} c_i^\dagger c_j - t_{ij}^* c_j^\dagger c_i \right) . \quad (2.15)$$

Ebből definiálhatjuk a kötésen lévő „áramsűrűséget”. Ehhez tegyük fel, hogy egy a -élhosszúságú d -dimenziós köbös rácson dolgozunk. (A továbbiakban csak köbös rácsokkal foglalkozunk.) Ekkor minden kötéshez egy a^{d-1} felületet tartozik, amin a kötés árama átfolyik. Mivel az áramsűrűség vektor, így kötés irányát is figyelembe kell vennünk. Az $\langle i, j \rangle$ bondon lévő áramsűrűségoperátor x - ill. y -komponensei:

$$j_{\langle i, j \rangle}^x = \frac{ie}{a^d \hbar} \delta_{ij}^x \left(t_{ij} c_i^\dagger c_j - t_{ij}^* c_j^\dagger c_i \right) , \quad (2.16)$$

$$j_{\langle i, j \rangle}^y = \frac{ie}{a^d \hbar} \delta_{ij}^y \left(t_{ij} c_i^\dagger c_j - t_{ij}^* c_j^\dagger c_i \right) . \quad (2.17)$$

Homogén mágneses tér Landau-mértékben periodikus határfeltétel esetén

A mágneses tér bevezetéséhez az ún. Peierls-helyettesítést használhatjuk. Jelölje a mágneses tér nélküli hoppingokat t_{ij}^0 . A mágneses teret ekkor a hoppingok fázisa tartalmazza:

$$t_{ij} = t_{ij}^0 e^{-\frac{ie}{\hbar} \int_i^j \mathbf{A} d\mathbf{r}} = t_{ij}^0 e^{-\frac{ie}{\hbar} (A_x \delta_{ij}^x + A_y \delta_{ij}^y)} . \quad (2.18)$$

A megjelenő A_x és A_y mennyiségek az élhez rendelt vektorpotenciál komponensei, azaz másként fogalmazva a vektorpotenciál élre vett átlagai.

A homogén mágneses teret Landau-mértékben felírt vektorpotenciál segítségével vezethetjük be legegyszerűbben. A vektorpotenciál ekkor:

$$\mathbf{A} = (-By, 0, 0) . \quad (2.19)$$

A vektorpotenciál csak a rácshelyek közötti hopping fázisában jelenik meg. Véges méretű, periodikus határfeltételnek megfelelő rendszerben B nem vehet fel tetszőleges értéket. Ha y -irányban a rendszer L_y méretű, a hopping értékének ki kell elégítenie a periodicitási feltételt:

$$t_{ij}(y + L_y) = t_{ij}(y) . \quad (2.20)$$

A Peierls-helyettesítés szerint viszont:

$$t_{ij}(y) = t_{ij}^0(y) e^{+\frac{ie}{\hbar} Bya} , \quad (2.21)$$

ahol a a rácsállandó. A (2.20) feltételből így következik, hogy:

$$\frac{e}{\hbar} B L_y a = 2\pi n . \quad (2.22)$$

Felhasználva, hogy $L_y = N_y a$, és hogy $\Phi = B a^2$ az egy elemi cellán lévő mágneses fluxus, azt kapjuk, hogy:

$$\Phi = \frac{h}{e} \frac{n}{N_y} = \Phi_0 \frac{n}{N_y} , \quad (2.23)$$

ahol Φ_0 a korábban már bevezetett fluxuskvantum. Landau-mértékben tehát csak olyan mágneses terek megengedettek, hogy az elemi cellán átmenő mágneses fluxus a fluxuskvantumnak megfelelő törtrésze.

2.4. A lineáris vezetőképesség-tenzor

Hagyományosan a vezetőképességet a Kubo-Greenwood formula segítségével az áram-áram korrelációs függvényből számítják. A teljesség kedvéért ezt számítást tömören összefoglalom. Először tekintsük egy tetszőleges nemkölsönható fermion-rendszerben a Kubo-formulát [8]. A rendszer Hamilton-operátora:

$$\hat{\mathbf{H}} = \hat{\mathbf{H}}_0 - h(t)\hat{\mathbf{B}} , \quad (2.24)$$

ahol $\hat{\mathbf{H}}_0 = \sum_{\alpha} E_{\alpha} c_{\alpha}^{\dagger} c_{\alpha}$ egy ismert rendszer Hamilton-operátora diagonalizált alakban, $c_{\alpha}^{\dagger}$ és c_{α} a rendszer nemkölsönható fermionikus kvázirészecskéinek keltő ill. eltüntető operátorai, $\hat{\mathbf{B}} = \sum_{\alpha, \beta} B_{\alpha\beta} c_{\alpha}^{\dagger} c_{\beta}$ a rendszert perturbáló operátor. A perturbáció időben nem állandó, az időfüggését a $h(t)$ függvény hordozza.

A $\hat{\mathbf{D}} = \sum_{\alpha, \beta} D_{\alpha\beta} c_{\alpha}^{\dagger} c_{\beta}$ operátor várható értékét szeretnénk a t időpontban kiszámítani. Ezt kifejezhetjük az általános Kubo-formulával:

$$\langle D \rangle(t) = \sum_{\alpha} f(E_{\alpha}) D_{\alpha\alpha} + \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dt' \theta(t') h(t-t') \sum_{\alpha, \beta} (f(E_{\alpha}) - f(E_{\beta})) e^{i\omega_{\alpha\beta} t'} D_{\alpha\beta} B_{\beta\alpha} , \quad (2.25)$$

ahol $\omega_{\alpha\beta} = \frac{E_{\alpha} - E_{\beta}}{\hbar}$, $f(E)$ a Fermi-függvény, $\theta(t)$ pedig az egységugrás-függvény.

A célunk egy homogén, időben állandó elektromos térre adott áramválasz kiszámítása, a külső térben lineáris rendig. Természetesen egy külső mágneses tér jelen lehet, amit már a t_{ij} hoppingok tartalmaznak. Az elektromos teret egy időben változó vektorpotenciál segítségével vezetjük be:

$$\mathbf{A} \rightarrow \mathbf{A} + \mathbf{A}_E(t) , \quad (2.26)$$

$$\mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{A}_E}{\partial t} . \quad (2.27)$$

Tekintsük először általánosan időfüggő, x -irányú homogén elektromos tér, és ennek megfelelő $\mathbf{A}_E(t)$ vektorpotenciál esetét. Ekkor a hoppingok időfüggővé válnak, bennük az időben változó vektorpotenciál is megjelenik:

$$\tilde{t}_{ij} = t_{ij} e^{-\frac{ie}{\hbar} A_E(t) \delta_{ij}^x} = t_{ij} - A_E(t) \frac{ie}{\hbar} \delta_{ij}^x t_{ij} + o(A_E^2) . \quad (2.28)$$

Fontos megjegyezni, hogy t_{ij} tartalmazza a vektorpotenciál statikus részét, mely a mágneses tér hatását írja le. A perturbált Hamilton-operátor így A_E -ben lineáris rendig:

$$\hat{\mathbf{H}} \cong \hat{\mathbf{H}}_0 - A_E(t) \frac{ie}{\hbar} \sum_{\langle i,j \rangle} \delta_{ij}^x \left(t_{ij} c_i^\dagger c_j - t_{ij}^* c_j^\dagger c_i \right) = \hat{\mathbf{H}}_0 - eA_E(t) \hat{\mathbf{v}}^x, \quad (2.29)$$

ahol a $\hat{\mathbf{v}}^x$ az eredeti (perturbáció nélküli) sebességoperátor. Az elektromos térbe helyezett rendszerben az áramsűrűség a rendezetlenség következtében a hely függvényében erősen fluktuál, mi azonban az átlagos áramválaszt szeretnénk vizsgálni, azaz az áramsűrűség egész rendszerre vett átlagát fogjuk kiszámítani. Ebben viszont definíció szerint a perturbált rendszer hoppingjai szerepelnek, emiatt megjelenik egy A_E -vel arányos diamágneses járulék is:

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{j}}^x(t) &= \frac{1}{V} \sum_{\langle i,j \rangle} a^d \tilde{j}_{\langle i,j \rangle}^x = \frac{ie}{V\hbar} \sum_{\langle i,j \rangle} (\tilde{t}_{ij} c_i^\dagger c_j - \tilde{t}_{ij}^* c_j^\dagger c_i) = \\ &= \frac{e}{V} \hat{\mathbf{v}}^x + \frac{e^2}{V\hbar^2} A_E(t) \sum_{\langle i,j \rangle} (\delta_{ij}^x)^2 \left(t_{ij} c_i^\dagger c_j + t_{ij}^* c_j^\dagger c_i \right) + o(A_E^2). \end{aligned} \quad (2.30)$$

Az átlagos áramsűrűség y -komponensében a diamágneses tag nem jelenik meg, mivel a vektorpotenciál x -irányú:

$$\hat{\mathbf{j}}^y = \frac{e}{V} \hat{\mathbf{v}}^y. \quad (2.31)$$

Először tekintsük a $\hat{\mathbf{j}}^x$ várható értékének időben vett Fourier-transzformáltját A_E -ben lineáris rendig, használva a (2.25) formulát:

$$\begin{aligned} \langle \hat{\mathbf{j}}^x \rangle(\omega) &= A_E(\omega) \frac{e^2}{V\hbar^2} \sum_{\alpha} f(E_{\alpha}) \langle \alpha | \sum_{\langle i,j \rangle} (\delta_{ij}^x)^2 \left(t_{ij} |i\rangle \langle j| + t_{ij}^* |j\rangle \langle i| \right) | \alpha \rangle \\ &\quad - \frac{e^2}{\hbar V} A_E(\omega) \sum_{\alpha, \beta} (f(E_{\alpha}) - f(E_{\beta})) v_{\alpha\beta}^x v_{\beta\alpha}^x \frac{1}{\omega + \omega_{\alpha\beta} + i\eta}. \end{aligned} \quad (2.32)$$

(2.27)-ből következik hogy $\mathbf{E}(\omega) = i\omega \mathbf{A}_E(\omega)$. A vezetőképesség-tenzor a következőképp kapcsolja össze az áramsűrűséget az elektromos térrel:

$$\mathbf{j}(\omega) = \underline{\underline{\sigma}}(\omega) \mathbf{E}(\omega). \quad (2.33)$$

Mi $\underline{\underline{\sigma}}$ statikus, $\omega \rightarrow 0$ határesetét szeretnénk kiszámítani, amiről némi közvetlen számolással beláthatjuk, hogy valós, és a következő kifejezést ölti²:

$$\sigma_{xx}(\omega \rightarrow 0) = -\frac{\pi e^2}{V\hbar} \sum_{\alpha\beta} f'(E_{\alpha}) \delta_{\eta}(E_{\alpha} - E_{\beta}) |v_{\alpha\beta}^x|^2. \quad (2.34)$$

Teljesen hasonló levezetéssel, a $\hat{\mathbf{j}}^y$ mennyiség várható értékét véve, az offdiagonális (Hall)-vezetőképességre a következő kifejezést nyerjük:

$$\sigma_{xy}(\omega \rightarrow 0) = \frac{ie^2}{V\hbar} \sum_{\alpha, \beta \neq \alpha} f(E_{\alpha}) \frac{v_{\alpha\beta}^y v_{\beta\alpha}^x - v_{\alpha\beta}^x v_{\beta\alpha}^y}{(\varepsilon_{\beta} - \varepsilon_{\alpha})^2}. \quad (2.35)$$

² $\delta_{\eta}(x)$ -el az $\eta \rightarrow 0$ -limitből kapott Dirac-deltát jelölöm.

A (2.34) ill. (2.35) egyenletek a $T \rightarrow 0$ határesetben a következő alakot öltik³ :

$$\sigma_{xx}(\omega \rightarrow 0, T \rightarrow 0) = \frac{\pi e^2}{V\hbar} \sum_{\alpha\beta} \delta_\eta(E_\alpha - E_\beta) \delta_T(E_\alpha - E_F) |v_{\alpha\beta}^x|^2, \quad (2.36)$$

$$\sigma_{xy}(\omega \rightarrow 0, T \rightarrow 0) = \frac{ie^2}{V\hbar} \sum_{E_\alpha < E_F} \sum_{\beta \neq \alpha} \frac{v_{\alpha\beta}^y v_{\beta\alpha}^x - v_{\alpha\beta}^x v_{\beta\alpha}^y}{(E_\beta - E_\alpha)^2}. \quad (2.37)$$

Egy véges rendszerben σ_{xy} jól definiált, σ_{xx} viszont nem. A Dirac-deltákat ki kell szélesítenünk, mind T , mind η nagyobb kell, hogy legyenek az átlagos szinttávolságnál.

2.5. Energiaszint-görbületek, a Thouless-formula

Mint láttuk, véges rendszerben a lineáris válaszméletből kapott σ_{xx} nem jól definiált, nehezen meghatározható mennyiség. Thouless azonban levezetett egy összefüggést, mely összekapcsolja σ_{xx} -et az energiaszintek peremfeltétel változtatására bekövetkező átlagos görbületével. A peremfeltétel változtatásának hatását könnyebb megérteni folytonos esetben. Az általánosítás rácsra ezután már könnyen megtehető. Tekintsük tehát először egy elektromágneses térben mozgó elektron Hamilton-operátorát két dimenzióban:

$$\hat{\mathbf{H}} = \frac{(\mathbf{p} - e\mathbf{A})^2}{2m} + V. \quad (2.38)$$

Tekintsük a rendszert x - és y -irányban φ_x és φ_y fázissal eltolt periodikus peremfeltétellel, azaz a hullámfüggvényekre teljesüljön tetszőleges m és n egészekre, hogy:

$$\psi(x + nL_x, y + mL_y) = e^{i(n\varphi_x + m\varphi_y)} \psi(x, y). \quad (2.39)$$

A szintek sajátenergiái a φ_x és φ_y síma függvényei. A szintek görbületeit a következő kifejezések definiálják:

$$c_{xx}(\alpha) = \frac{\partial^2 E_\alpha}{\partial \varphi_x^2}, \quad c_{xy}(\alpha) = \frac{\partial^2 E_\alpha}{\partial \varphi_x \partial \varphi_y}. \quad (2.40)$$

A további számításhoz vezessük be a φ hullámfüggvényt a következő mértéktranszformációval:

$$\varphi(x, y) = \psi(x, y) e^{-i\left(\varphi_x \frac{x}{L_x} + \varphi_y \frac{y}{L_y}\right)}. \quad (2.41)$$

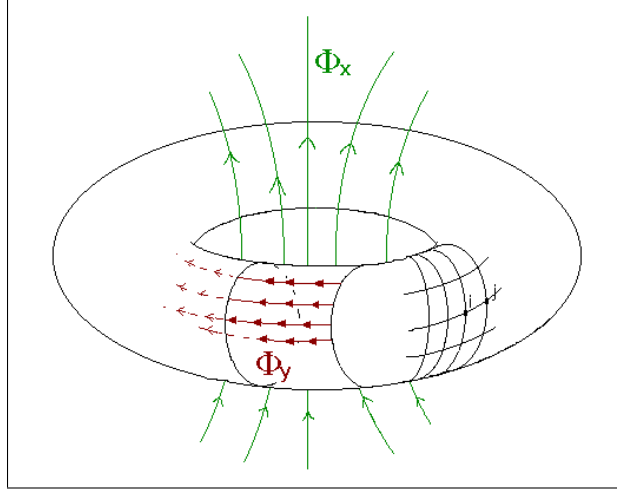
Ekkor φ már a periodikus határfeltételeknek tesz eleget, és a rá ható transzformált Hamilton-operátor alakja:

$$\hat{\mathbf{H}}' = e^{-i\left(\varphi_x \frac{x}{L_x} + \varphi_y \frac{y}{L_y}\right)} \hat{\mathbf{H}} e^{i\left(\varphi_x \frac{x}{L_x} + \varphi_y \frac{y}{L_y}\right)} = \frac{(\mathbf{p} - e\mathbf{A} - e\mathbf{A}_\varphi)^2}{2m} + V, \quad (2.42)$$

ahol $\mathbf{A}_\varphi = \left(-\frac{\varphi_x}{eL_x}, -\frac{\varphi_y}{eL_y}\right)$.

A peremfeltétel megváltoztatása tehát egy vektorpotenciál bevezetésével ekvivalens. Ha a periodikus határfeltételnek megfelelően a rendszert egy tórusznak tekintjük, a fázisok

³ $\delta_T(x)$ -el a Fermi-függvény deriváltjából $T \rightarrow 0$ határesetben kapott delta-függvényt jelölöm.



3. ábra. A peremfeltétel változtatása a φ_x és φ_y fázisokkal az tórusz által közrefogott mágneses terek fluxusával van kapcsolatban: $\varphi_{x,y} = \frac{\Phi_{x,y}}{2\pi\Phi_0}$.

lényegében a tórusz közepén ill. belsejében átmenő mágneses fluxusoknak felelnek meg, ahogy a 3. ábrán is látható.

Rácson a peremfeltétel változtatása alatt egy ilyen homogén vektorpotenciál bevezetését fogom érteni. A hoppingok megváltozása így:

$$\begin{aligned} \tilde{t}_{ij} &= t_{ij} e^{\frac{i}{\hbar} \left(\frac{\delta_{ij}^x}{L_x} \varphi_x + \frac{\delta_{ij}^y}{L_y} \varphi_y \right)} = t_{ij} \left[1 + \frac{i}{\hbar} \left(\frac{\delta_{ij}^x}{L_x} \varphi_x + \frac{\delta_{ij}^y}{L_y} \varphi_y \right) \right. \\ &\quad \left. - \frac{1}{\hbar^2} \left(\frac{(\delta_{ij}^x)^2}{2L_x^2} \varphi_x^2 + \frac{\delta_{ij}^x \delta_{ij}^y}{L_x L_y} \varphi_x \varphi_y + \frac{(\delta_{ij}^y)^2}{2L_y^2} \varphi_y^2 \right) + o(\varphi^3) \right]. \end{aligned} \quad (2.43)$$

A Hamilton-operátor a fázistolásokban másodrendig sorfejtve:

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{H}}' &= \hat{\mathbf{H}} + \frac{\varphi_x}{L_x} \hat{\mathbf{v}}^x + \frac{\varphi_y}{L_y} \hat{\mathbf{v}}^y - \frac{\varphi_x^2}{2L_x^2} \sum_{\langle i,j \rangle} (\delta_{ij}^x)^2 \left(t_{ij} c_i^\dagger c_j + t_{ij}^* c_j^\dagger c_i \right) \\ &\quad - \frac{\varphi_y^2}{2L_y^2} \sum_{\langle i,j \rangle} (\delta_{ij}^y)^2 \left(t_{ij} c_i^\dagger c_j + t_{ij}^* c_j^\dagger c_i \right) \\ &\quad - \frac{\varphi_x \varphi_y}{L_x L_y} \sum_{\langle i,j \rangle} \delta_{ij}^x \delta_{ij}^y \left(t_{ij} c_i^\dagger c_j + t_{ij}^* c_j^\dagger c_i \right). \end{aligned} \quad (2.44)$$

Amennyiben φ_x és φ_y kicsiny paraméterek, úgy perturbációként kezelhetők. Az energia-sajátértékekre másodrendű perturbációs számítást végezve, majd csak a φ -kben másodrendű tagokat megtartva, ki tudjuk számítani a szintek görbületeit:

$$\begin{aligned} \mathcal{C}_{xx} \equiv \frac{\partial^2 E_\alpha}{\partial \varphi_x^2} &= -\frac{1}{L_x^2} \langle \alpha | \sum_{\langle k,j \rangle} (\delta_{kj}^x)^2 \left(t_{kj} |k\rangle \langle j| + t_{kj}^* |j\rangle \langle k| \right) | \alpha \rangle + \\ &\quad + \frac{2}{L_x^2} \sum_{\beta \neq \alpha} \frac{|\langle \alpha | \hat{\mathbf{v}}^x | \beta \rangle|^2}{E_\alpha - E_\beta}, \end{aligned} \quad (2.45)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{C}_{xy} \equiv \frac{\partial^2 E_\alpha}{\partial \varphi_x \partial \varphi_y} &= \frac{1}{L_x L_y} \sum_{\beta \neq \alpha} \frac{\langle \alpha | \hat{\mathbf{v}}^y | \beta \rangle \langle \beta | \hat{\mathbf{v}}^x | \alpha \rangle + \langle \alpha | \hat{\mathbf{v}}^x | \beta \rangle \langle \beta | \hat{\mathbf{v}}^y | \alpha \rangle}{E_\alpha - E_\beta} \\ &\quad - \frac{1}{L_x L_y} \langle \alpha | \sum_{\langle k, j \rangle} (\delta_{kj}^y) (\delta_{kj}^x) (t_{kj} | k \rangle \langle j | + t_{kj}^* | j \rangle \langle k |) | \alpha \rangle . \end{aligned} \quad (2.46)$$

A vegyesderivált kifejezésében a második tag négyzetrácson zérust ad, ugyanis ott minden kötés vagy vízszintes, vagy függőleges, így $\delta_{kj}^x \delta_{kj}^y = 0$ minden éltre.

Thouless a folytonos esetben, erős feltételezéseket téve a rendszerre⁴, a következő sejtést fogalmazta meg a dimenziótlan vezetőképesség értékére [9, 10]:

$$g_T = \frac{h}{e^2} G = \pi \frac{\langle |\mathcal{C}_{xx}| \rangle}{\Delta} , \quad (2.47)$$

ahol $\langle |\mathcal{C}_{xx}| \rangle$ a szintgörbületek abszolútértékének várható értéke a Fermi-energián, Δ pedig az L -méretű rendszerben az átlagos szinttávolság, ugyanúgy a Fermi-nívón.

A sejtést analitikusan bizonyítani nem lehet, numerikusan azonban igen széles rendezetlenség tartományban igaznak bizonyul [10]. Számításaim során a g_{xx} dimenziótlan vezetőképességet ezért mindig a (2.47) formulával számolom.

2.6. Topologikus számok a kvantum-Hall effektusban

Két dimenzióban a σ_{xy} Hall-vezetőképesség csak kvantált értékeket vehet fel. Ennek komoly, topológiai okai vannak.

Tekintsük a lineáris válaszméletből kapott Hall-vezetőképesség formulát:

$$\sigma_{xy} = \frac{ie^2}{V\hbar} \sum_{E_\alpha < E_F} \sum_{\beta \neq \alpha} \frac{v_{\alpha\beta}^y v_{\beta\alpha}^x - v_{\alpha\beta}^x v_{\beta\alpha}^y}{(E_\beta - E_\alpha)^2} = \sum_{E_\alpha < E_F} \sigma_{xy}(\alpha) , \quad (2.48)$$

ahol bevezettem az egyes szintek $\sigma_{xy}(\alpha)$ Hall-vezetőképességét:

$$\sigma_{xy}(\alpha) = \frac{ie^2}{V\hbar} \sum_{\beta \neq \alpha} \frac{v_{\alpha\beta}^y v_{\beta\alpha}^x - v_{\alpha\beta}^x v_{\beta\alpha}^y}{(E_\beta - E_\alpha)^2} . \quad (2.49)$$

A (2.44) formulából leolvashatjuk, hogy $\hat{\mathbf{v}}^x = L_x \partial_{\varphi_x} \hat{\mathbf{H}}$ ill. $\hat{\mathbf{v}}^y = L_y \partial_{\varphi_y} \hat{\mathbf{H}}$. Kihasználva, hogy kétdimenziós esetben $V = L_x L_y$, az α -szint Hall-vezetőképessége:

$$\sigma_{xy}^\alpha = \frac{ie^2}{\hbar} \sum_{\beta \neq \alpha} \frac{\langle \alpha | \frac{\partial \hat{\mathbf{H}}}{\partial \varphi_y} | \beta \rangle \langle \beta | \frac{\partial \hat{\mathbf{H}}}{\partial \varphi_x} | \alpha \rangle - \langle \alpha | \frac{\partial \hat{\mathbf{H}}}{\partial \varphi_x} | \beta \rangle \langle \beta | \frac{\partial \hat{\mathbf{H}}}{\partial \varphi_y} | \alpha \rangle}{(E_\beta - E_\alpha)^2} . \quad (2.50)$$

Viszont a fázisbeli elsőrendű perturbációszámításból azt kapjuk, hogy:

$$\left| \frac{\partial \alpha}{\partial \varphi_{x,y}} \right\rangle = \sum_{\beta \neq \alpha} \frac{|\beta\rangle}{E_\alpha - E_\beta} \langle \beta | \frac{\partial \hat{\mathbf{H}}}{\partial \varphi_{x,y}} | \alpha \rangle . \quad (2.51)$$

⁴Feltételezte, hogy a $v_{\alpha\beta}$ mátrixelemek sokaságátlagosan csekély mértékben függ csak az $E_\alpha - E_\beta$ mennyiségektől, továbbá azt, hogy az energiaszintek elhelyezkedése korrelálatlan. Ez utóbbi feltételezésről biztosan tudjuk, hogy hamis, ugyanis a véletlen-mátrix elméletből következik, hogy az energiasajátértékek között ún. szinttaszítás lép fel.

Ezt felhasználva nyerjük az alábbi alakot az α -szint Hall-vezetőképességére:

$$\sigma_{xy}(\alpha) = \frac{ie^2}{\hbar} \left(\left\langle \frac{\partial \alpha}{\partial \varphi_y} \middle| \frac{\partial \alpha}{\partial \varphi_x} \right\rangle - \left\langle \frac{\partial \alpha}{\partial \varphi_x} \middle| \frac{\partial \alpha}{\partial \varphi_y} \right\rangle \right). \quad (2.52)$$

Ez a kifejezés a φ_x és φ_y által koordinátázott tóruszon egy 2-formát definiál, melynek átlaga a teljes tóruszra egy ún. topologikus integrál-invariáns [11]:

$$\frac{ie^2}{(2\pi)^2 \hbar} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} d\varphi_x d\varphi_y \left(\left\langle \frac{\partial \alpha}{\partial \varphi_y} \middle| \frac{\partial \alpha}{\partial \varphi_x} \right\rangle - \left\langle \frac{\partial \alpha}{\partial \varphi_x} \middle| \frac{\partial \alpha}{\partial \varphi_y} \right\rangle \right) = \frac{e^2}{2\pi \hbar} n = \frac{e^2}{h} n, \quad (2.53)$$

ahol n egész, melyet a $(\varphi_x, \varphi_y) \rightarrow |\alpha(\varphi_x, \varphi_y)\rangle$ leképzés Chern-számának szoktak nevezni, ez a szám sorolja az egyes α állapotokat topologikus osztályokba.

A szakirodalomban az $|\alpha\rangle$ állapot Hall-vezetőképességét a (2.53) integrállal szokták definiálni [11]. Fizikailag valóban indokolható az egyik fázis (pl. φ_x) szerinti integrálás, hiszen a DC méréseket alacsony frekvencián, Lock-in erősítővel végzik, így a mérés során az időfüggő térben lényegében átlagolunk az egyik fázis szerint. A φ_y szerinti integrálást azonban ekkor is nehéz indokolni.

Azt kaptuk tehát, hogy a szintek fázis-szerint átlagolt Hall-vezetőképessége az $\frac{e^2}{h}$ vezetékquantum egész számszorosa. Még egy érdekes eredmény, hogy ha felösszegezzük ezen Hall-vezetőképességeket, akár fázis szerint átlagolva, akár nem, az egyes Landau-alsávokra vett összeg is $\frac{e^2}{h}$ egész számszorosa, és az egyes alsávokat ez a szám jellemzi, nem túl nagy rendezetlenség mellett mindig ugyanazt kapjuk.

3. Eredmények

Munkám során a (2.11) modellt numerikusan vizsgáltam, 2 ill. 3 dimenzióban. A főként lineáris algebrai számításokat MatLab környezetben végeztem.

Először lokalizáció egyparaméteres elméletét a görbületek szemszögéből vizsgálom meg, kétdimenziós rendszerben. Megmutatom, hogy a dimenziótlan görbületek eloszlásfüggvényei egyparaméteres viselkedést mutatnak, ahol a Thouless által bevezetett g_T vezetőképesség (2.47) megfelelő paraméter.

Ezt követően kvantum-Hall rendszerben numerikusan reprodukálom Pruisken renormálási csoport-folyamát, majd megvizsgálom, látok-e kétparaméteres viselkedést a görbületek síkján. Eredményem szerint c_{xy} , és az ebből származtatott dimenziótlan abszolút keresztgörbület nem alkalmas második skálaparaméternek.

Végül háromdimenziós rendszerekre vonatkozó kezdeti eredményeket mutatok be.

3.1. Numerikus megvalósítás

Számításaimban nemkölsönható elektronok rendszerét vizsgálom, melynek sajátállapotait egyértelműen meghatározza a (2.11)-nek megfelelő egyrészezske Hamilton-operátor, melyet periodikus határfeltétel mellett tekintek:

$$\hat{H} = \sum_i \varepsilon_i |i\rangle \langle i| + \sum_{\langle i,j \rangle} (t_{ij} |i\rangle \langle j| + t_{ij}^* |j\rangle \langle i|) . \quad (3.1)$$

A hosszúságot a ráczállandóban mérem, továbbá $\hbar = 1$ és $e = 1$ egységeket használok.

(3.1)-ben a rendezetlenséget reprezentáló ε_i rácshely-energiákat egymástól függetlenül egyenletes eloszlással választottam a $[-W/2, W/2]$ intervallumból. A hoppingok abszolútértékét mindig 1-nek választottam, fázisukat a külső homogén mágneses térnek ill. a peremfeltételek esetleges φ_x és φ_y fázistolásának megfelelően rögzítettem.

A Hamilton-operátor numerikus diagonalizációja után az egyes szintek görbületeit ($\mathcal{C}_{xx}$ és $\mathcal{C}_{xy}$) a (2.45) és (2.46) segítségével számítottam ki. A szintek Hall-vezetőképességét a (2.49) egyenlet alapján határoztam meg.

A számítást sok rendezetlenség-realizációra elvégezve, meghatározhatók az egyes mennyiségek statisztikai tulajdonságai. Miután a különböző mennyiségek függenek általában az energiától, az energiaspektrumot egyenletesen, ΔE szélességű intervallumokra osztottam, majd nagyszámú (rendszer méret függvényében 1000 - 100000) mintára kiszámítottam az adott energia-intervallumhoz tartozó mennyiségeket.

Meghatároztam az egyes szintek dimenziótlan görbületeit:

$$c_{xx} = \frac{\mathcal{C}_{xx}}{\Delta(E)} , \quad c_{xy} = \frac{\mathcal{C}_{xy}}{\Delta(E)} , \quad (3.2)$$

ahol $\Delta(E)$ az átlagos szinttávolság, azaz az állapotsűrűség reciproka az E energián. A dimenziótlan görbületek abszolútértékének a különböző rendezetlenségekre vett átlaga:

$$c \equiv \overline{c_{xx}} = \langle |c_{xx}| \rangle \left(= \frac{g_T}{\pi} \right) , \quad \overline{c_{xy}} = \langle |c_{xy}| \rangle , \quad (3.3)$$

ahol a később sokszor előforduló $\overline{c_{xx}}$ -et gyakran csak c -vel jelölöm. Az energiaszintek, mint a (2.49) formulában láttuk, Hall-vezetőképességet hordoznak. Kiszámítottam a szint Hall-vezetőképesség abszolútértékének várható értékét az E -energia körüli energiaszintekre:

$$\langle |\sigma_{xy}(\alpha)| \rangle , \quad (3.4)$$

továbbá a teljes Hall-vezetőképesség energiafüggő várhatóértékét is meghatároztam:

$$\overline{\sigma_{xy}}(E) = \left\langle \sum_{\alpha(E_\alpha < E)} \sigma_{xy}^\alpha \right\rangle. \quad (3.5)$$

Az egyparaméteres viselkedés vizsgálatánál ezen mennyiségeken kívül a dimenziótlan görbületek eloszlását is meghatároztam az egyes energia-intervallumokra.

3.2. Az egyparaméteres skálázás vizsgálata az energiaszint-görbületek segítségével $B = 0$ mágneses térben

Amennyiben a rendezetlen rendszert mágneses tér nélküli esetben vizsgáljuk, úgy a 2.1. fejezetben tárgyalt egyparaméteres viselkedést várjuk. Mágneses tér nélkül, periodikus határfeltétel esetén a hoppingok választhatók valósnak. Én minden kötésen 1-nek választottam.

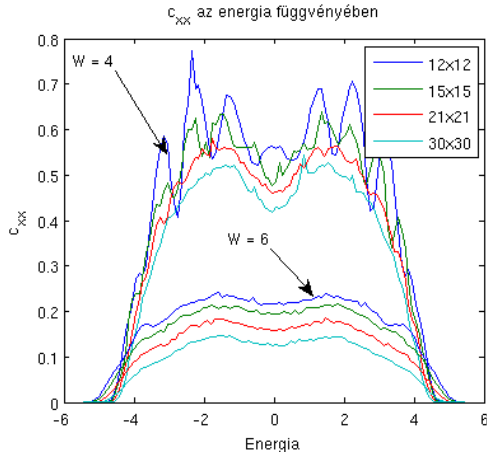
Amennyiben elfogadjuk az egyparaméteres skálázáshipotézist, úgy a rendszert a Fermi-nívón jellemző bármely univerzális mennyiség az egyetlen paraméter univerzális függvénye kell legyen. A lokalizáció egyparaméteres skálaelméletében paraméternek a dimenziótlan vezetőképességet szokták tekinteni. Ennek megfelelően, a Thouless-formula alapján én a (3.3) egyenletben definiált $c = \overline{c_{xx}}$ dimenziótlan görbületet használtam paraméternek, kutatásomban azt vizsgáltam, jó paraméter-e ez?

Ennek megállapításához különböző méretű és rendezetlenségű rendszerekre sokezer realizációra kiszámítottam a szintek görbületeit, majd az egyes, keskeny energia-intervallumokra átlagolva nyertem a $c(L, W, E)$ mennyiséget, mely az L rendszerméret, W rendezetlenség és E energia függvénye. Elsőként azt vizsgáltam, igaz-e hogy a c méretfüggése csak magától a c mennyiségtől függ:

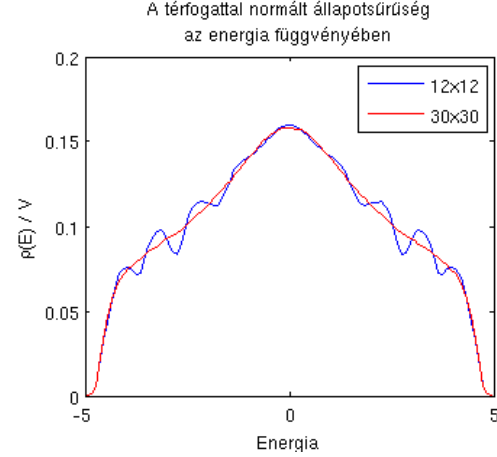
$$\frac{\partial \ln c}{\partial \ln L} \stackrel{?}{=} \beta_c(c). \quad (3.6)$$

A futtatások zömét kétdimenziós rendszereken végeztem, négyféle méreten: 12×12 , 15×15 , 21×21 és 30×30 . A rendezetlenség 5-féle értékét vizsgáltam $W = 4$, $W = 5$, $W = 6$, $W = 8$ és $W = 10$. Az átlagolt, dimenziótlan görbületek az energia függvényében a 4a. ábrán láthatók.

Láthatjuk, hogy kis rendezetlenségekre és kis rendszerméretre az energia függvényében erősen hullámzik a mennyiség. Ez a viselkedés már az állapotsűrűségben is megjelenik (4b. ábra). Ezt a következő módon érthetjük meg: Ha a rendszerben nincs rendezetlenség, úgy a véges méret miatt diszkrét, sokszorososan degenerált energianívókat látunk. A rendezetlenség ezen nívókat sávvá szélesíti, és ha elegendően nagy, akkor össze is mossza őket. Ha a rendszerünk túl kicsi, vagy nem eléggé rendezetlen, úgy az állapotsűrűségben még láthatjuk a nyomait a diszkrét energia-nívóknak. Láthatóan az átlagos görbületekben ez sokkal erőteljesebben megjelenik. Természetesen vehetnénk nagyobb rendszereket, ekkor azonban - ha szeretnénk elérni ugyanazt az $\frac{L}{\xi}$ arányt - úgy nagyobb lokalizációs hossz, és így kisebb rendezetlenség kell, ami nehezíti a dolgunkat. A rendszer méretének növelésében a legnagyobb korlát a futtatási idő, amely egy realizációra a mátrix méretének köbével, így két dimenzióban az oldalhosszban L^6 -nal skáláz. Egy realizációban a sajátenergiák és így a nyert görbület-adatok száma L^2 -tel arányosan nő, de még így is, azonos adatmennyiség mellett a skálázás L^4 -es.

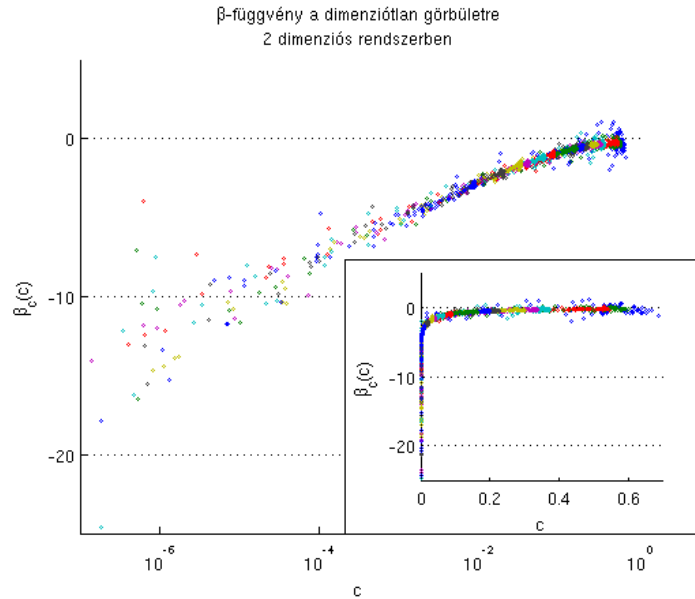


(a) A c dimenziótlan görbület az energia függvényében $W=4$ és $W=6$ esetén. Láthatóan a kisebb rendezetlenségnél ez a mennyiség erősen hullámzó, nem univerzális viselkedést mutat.



(b) Az egységnyi térfogatra normált állapotsűrűség 12×12 és 30×30 méretű rendszerre $W=4$ esetén. A kisebb rendszerméret esetén hullámzó viselkedést látunk

4. ábra.



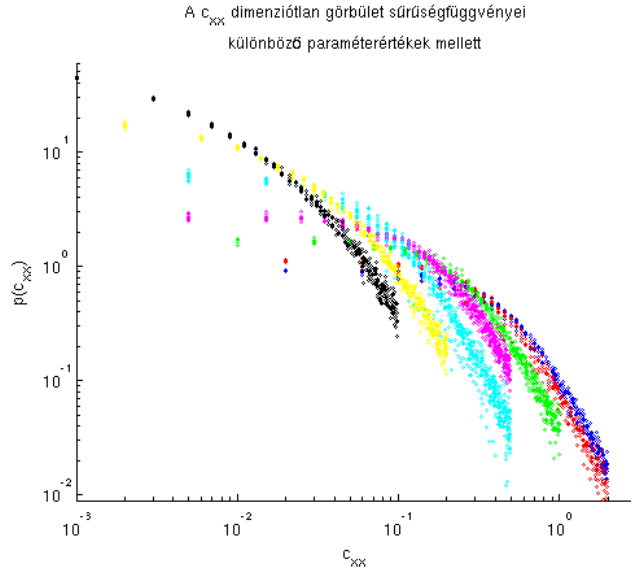
5. ábra. β_c -függvény a c dimenziótlan görbületre. A különböző színek különböző méretű és rendezetlenségű rendszerekből számolt értéket jelölnek. A vizsgált rendszerméretek $L = 12, 15, 21$ és 30 , a rendezetlenségek pedig $W = 4, 5, 6, 8$ és 10 voltak. Az energiaspektrumot mintánként 100 intervallumra osztottam. Összesen tehát 18 különböző görbe 1800 pontja rajzolja ki az univerzális $\beta_c(c)$ függvényt.

Az első célom a $\beta_c(c)$ -függvény meghatározása volt, melyet numerikus deriválással nyertem:

$$\beta \left(\frac{c(L_1, W, E) + c(L_2, W, E)}{2} \right) \approx \frac{\ln(c(L_2, W, E)) - \ln(c(L_1, W, E))}{\ln(L_2) - \ln(L_1)}. \quad (3.7)$$

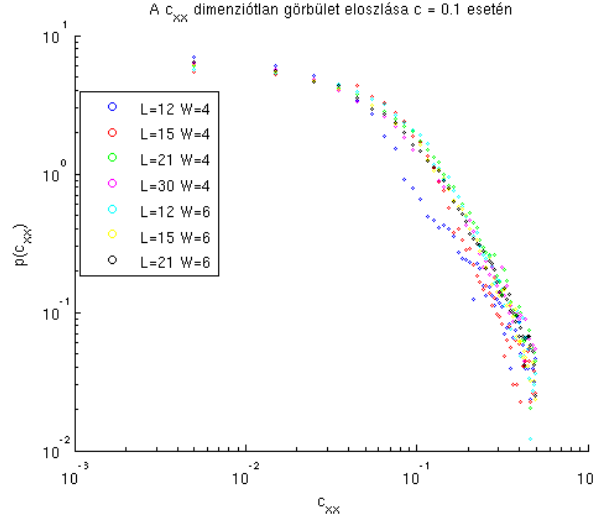
Az 5. ábrán jól látszik, hogy eltekintve a pontok statisztikai szórásától az egyparaméteres viselkedés jól teljesül, az irodalomban leírtak megfelelően viselkedik. A β_c -függvénynek leginkább az erősen lokalizált tartományban várt $\sim \ln(c)$ ágát látjuk, a 0-hoz símuló rész a korábban említett nem univerzális (véges-méret-) effektusok miatt számunkra csak kevésbé volt elérhető.

Azt láthattuk tehát, hogy a görbuletekből számolt c mennyiség, melyet egy π prefaktortól eltekintve Thouless a dimenziótlan vezetőképességgel azonosított, a várt egyparaméteres viselkedést mutatja. Ennél azonban erősebb állítást is megfogalmazhatunk a c_{xx} és c_{xy} dimenziótlan görbuletek eloszlásáról.

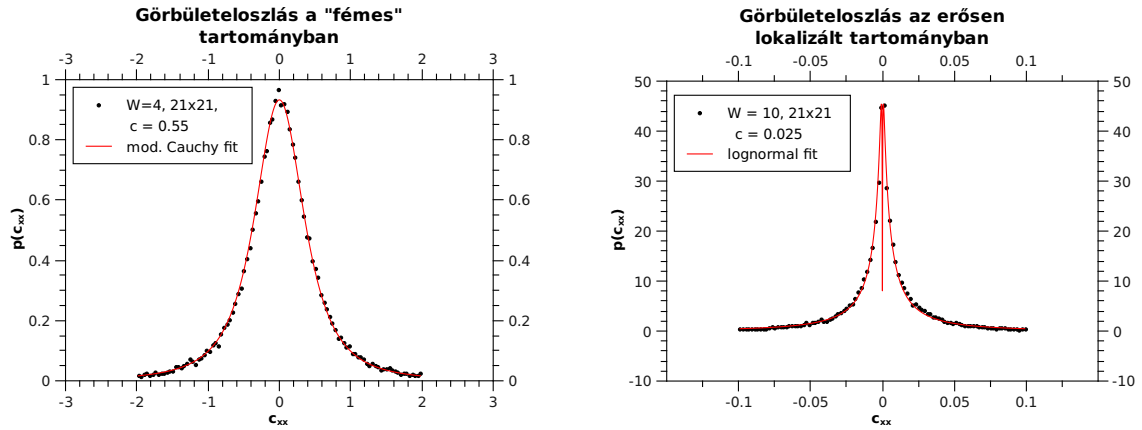


6. ábra. A c_{xx} eloszlása különböző paraméterértékek mellett, logaritmikus skálán. Kék: $c = 0.55$, piros: 0.45, zöld: 0.3, magenta: 0.2, cián: 0.1, sárga: 0.05, fekete: 0.025

Amennyiben c jó dimenziótlan paraméter, úgy a görbuletek eloszlása csak ettől a paramétertől függhet, azaz a $p_{xx}(c_{xx})$ és $p_{xy}(c_{xy})$ sűrűségfüggvények a c paraméter függvényében egyparaméteres görbesereget kell, hogy adjanak. Ennek tesztelésére különböző méretű és rendezetlenségű rendszereken, kikeresve azokat az energiákat, ahol a c paraméter értéke egy adott érték, ezen energiák ΔE környezetében numerikusan meghatároztam a valószínűségi sűrűségfüggvényeket. A kapott eredmény a 6. ábrán látható. Az egyes színek az egyes paraméterértékeket jelölik, ezen görbék különböző méretű és rendezetlenségű rendszerekben számolt eloszlásfüggvények összességei. Láthatóan a különböző színek szignifikánsan elkülönülnek egymástól, az azonos színek az adatok szórásán belül viszont egy görbére esnek, ahogy ezt a 7. ábrán külön megvizsgáltam. Ez egybeesik az egyparaméteres skálázás jóslatával.



7. ábra. A c_{xx} eloszlása $c = 0.1$ esetén. A különböző színek a különböző méretű és rendezetlenségű mintákat jelölnék. $W = 4$ és $L = 12$ esetén (kék pöttyök) a korábban tárgyalt nem univerzális effektusok miatt eltérést tapasztalunk a többi görbétől.



(a) $c = 0.55$ esetén az eloszlás a véletlen-mátrix-elméletből kapott (3.8)-nak megfelelő

(b) $c = 0.025$ esetén, az erősen lokalizált tartományban a (3.9) lognormális eloszlás a megfelelő.

8. ábra.

A különböző paraméterekhez tartozó eloszlásgörbék alakja eltérő. A „fémes” és az erősen lokalizált határesetben az eloszlások alakja ismert [12, 13]. Ahogy a 8a. ábrán látható, a „fémes” tartományban jól illeszkedik a véletlen-mátrix elméletből kapott módosított Cauchy-eloszlás:

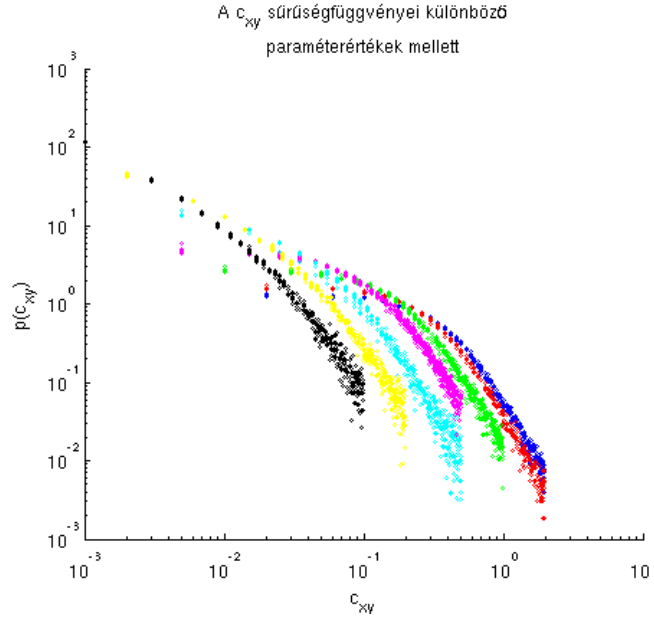
$$p_{RMT,GOE}(x) = \frac{a^2}{2(x^2 + a^2)^{3/2}}. \quad (3.8)$$

Az erősen lokalizált tartományban pedig a log-normális eloszlás közelíti jól az eloszlásfüggvényt (8b. ábra):

$$p_{\lognormal}(x) = \frac{e^{-(1-N)^2 C}}{4\sqrt{\pi C}} e^{-\frac{1}{4C}(\ln|x|)^2 - N \ln|x|}. \quad (3.9)$$

Sajnos a köztes tartományban nem találtam olyan analitikus formulát, mely jól illeszkedik. Amennyiben találnánk ilyen egyetlen illesztési paraméterrel jellemzett görbesereget, az nagyon erős érv lenne az egyparaméteres skálázás mellett.

Megvizsgáltam a c paraméter függvényében a c_{xy} eloszlását is (9. ábra). A $p(c_{xy})$ eloszlás is egy csak a c paramétertől függő görbesereg: a különböző c -hez tartozó színek szignifikánsan eltérő görbéket adnak, az egyes színek pedig az adatok szórásán belül egybeesnek. Ismét fontos hangsúlyozni, hogy egyetlen görbe pontjai különféle rendszer-méretű, rendezetlenségű és energiájú szintekhez tartoznak, melyekre a $c = \overline{c_{xx}(W, L, E)}$ azonos. Ez a megfigyelés is az egyparaméteres skálahipotézist erősíti.



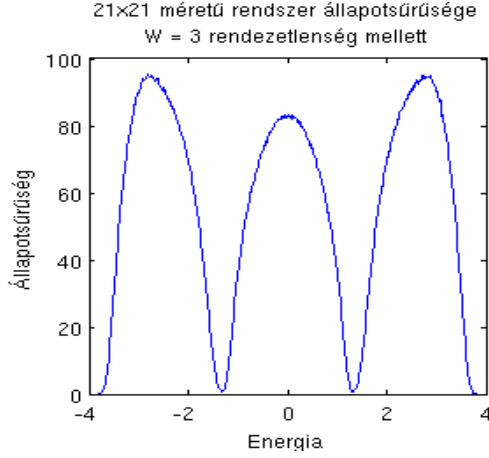
9. ábra. Egyparaméteres viselkedés a c_{xy} eloszlásában. Láthatóan ugyanaz a paraméter, ami a c_{xx} eloszlásgörbéit paraméterezte, ebben az esetben is megfelelő. A színezés a 6. ábrának megfelelő

3.3. Kvantum-Hall rendszer vizsgálata

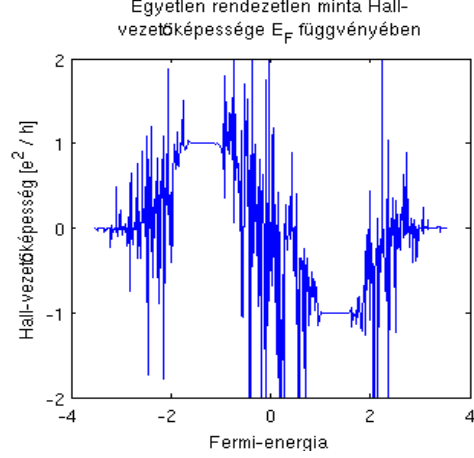
3.3.1. Kvantum-Hall effektus numerikus megfigyelése kétdimenziós rácson

Külső mágneses tér bekapcsolása drasztikusan megváltoztatja egy végtelen kiterjedésű kétdimenziós rendszer viselkedését. A tér nélküli esetben folytonosan elhelyezkedő energiaszintek szabad elektrongáz esetén Landau-nívókba, szoros kötésű közelítésben viszont alsávokba rendeződnek. Mint a 2.3. alfejezetben láttuk, Landau mértékben csak $\Phi = \frac{p}{q}\Phi_0$ fluxust fűzhetünk át egy elemi cellán, ahol q osztója a rendszer L oldalhosszának. Az irodalomból az is ismert, hogy ekkor az energiaszintek q alsávba rendeződnek [4]. Ezt mutatja a 10a. ábra, ahol egy $W = 3$ rendezetlenségű rendszer sokaságátlagolt állapot-sűrűségét láthatjuk $\Phi = \Phi_0/3$ -nak megfelelő mágneses térnél. q ekkor 3, tehát 3 alsáv jelenik meg.

Ha egy rendezetlenség-realizációra kiszámítjuk a rendszer Hall-vezetőképességét a Fermi-energia függvényében úgy a 10b. ábrán látható érdekes viselkedést kapjuk. Azt láthatjuk, hogy az egyes alsávok egész Hall-vezetőképességet hordoznak, mely az alsávok



(a) A rendszer állapotsűrűsége $W = 3$ esetben, $\Phi = \frac{1}{3}\Phi_0$ fluxussal elemi cellánként.



(b) Rendeztelen rendszer Hall-vezetőképessége a Fermi-energia függvényében. A mágneses tér értéke $\frac{1}{3}\Phi_0$ fluxus elemi cellánként. Láthatóan a sávszéleken 0-t kapunk, a két plató pedig $\pm \frac{e^2}{h}$ -nál van.

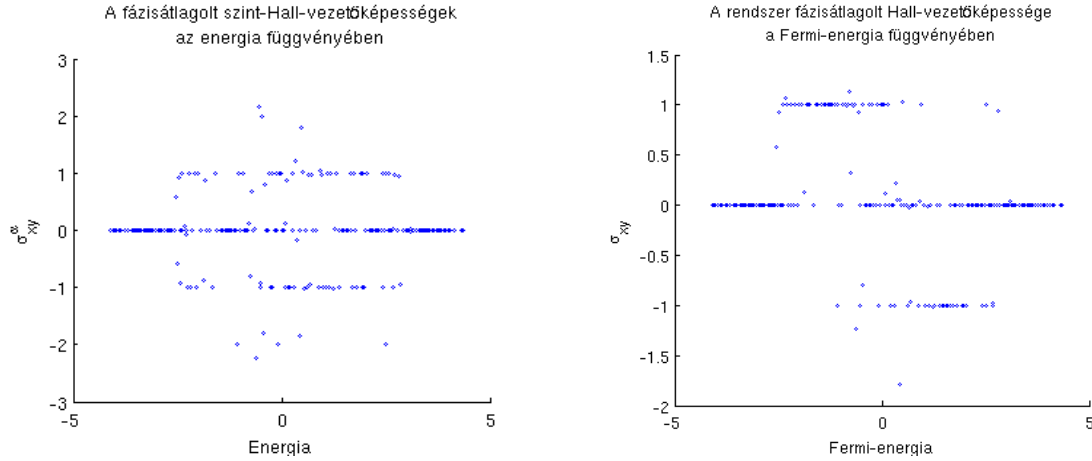
10. ábra.

közepén látható nagy fluktuációk eredőjeként adódik. Ez a kvantum-Hall effektus szokásos magyarázatának megfelelő eredmény. Az alsáv közepén ugyanis a lokalizációs hossz a rendszerméretnél nagyobb, így a hullámfüggvények az egész rendszerre kiterjednek. Egy szint Hall-vezetőképessége (2.49) akkor lehet nagy, ha a hullámfüggvény kiterjedt, ez okozza az alsávok közepén a nagy fluktuációt. Az alsávok szélén a hullámfüggvények erősen lokalizáltak, így gyakorlatilag zérus Hall-vezetőképességet hordoznak (lásd (2.49) egyenlet), ez okozza a teljes Hall-vezetőképességben látott platókat.

A 2.6. fejezetben azt láttuk, hogy ha a szint Hall-vezetőképességét átlagoljuk a $\varphi_x - \varphi_y$ síkon, úgy a vezetékquantum egészszámszorosát kell kapjunk. Ezen állítást numerikusan ellenőriztem. Egy 15×15 méretű realizáció esetén a $\varphi_x - \varphi_y$ síkon a $[0, 2\pi] \times [0, 2\pi]$ tartományt 81×81 ponton véve kiszámítottam az egyes szintek Hall-vezetőképességét (2.49), és numerikus integrállal kiszámítottam az átlagos vezetőképességet (2.53). Mint a 11. ábrán látható, az egyes szintek fázisátlagolt Hall-vezetőképességei (2.53), és így a felösszegzett Hall-vezetőképesség is csak a vezetékquantum egészszámszorosai lehetnek. Néhány esetben látunk kiszóró pontot, ezt azonban a numerikus integrálás hibájának tudhatjuk be, ugyanis az integrálandó függvényekben éles csúcsok találhatók, így pontos számításhoz az alkalmazottnál finomabb rácson kellene számolni, ami időigényes feladat.

3.3.2. A Thouless-formula általánosíthatóságának vizsgálata

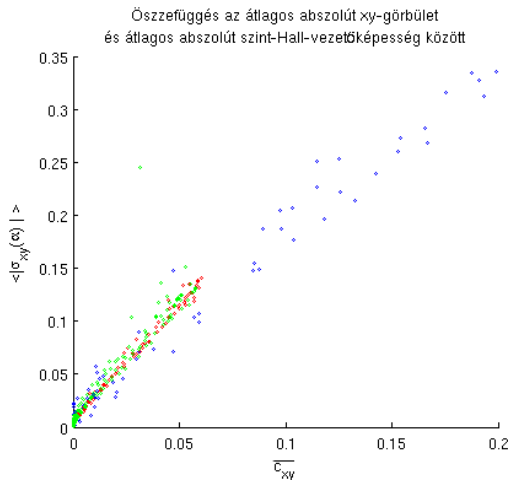
Thouless eredeti formuláját numerikusan igazolták igen széles rendezetlenség-tartományra. Kérdés az, hogy lehetséges-e a formulát általánosítani a Hall-vezetőképességre? Ha a vezetőképesség-tenzor diagonális elemeit a szintek energiáinak φ_x ill. φ_y szerinti második deriváltjaival hozhatjuk összefüggésbe, úgy könnyen arra a következtetésre juthatunk, hogy az offdiagonális vezetőképességnek a szintek φ_x és φ_y szerinti vegyes deriváltjával kell kapcsolatban lennie. Ezen kérdést numerikusan vizsgáltam.



(a) Az egyes szintek fázisátlagolt Hall-vezetőképességei egy rendezetlen rendszerben

(b) A felösszegzett, fázisátlagolt Hall-vezetőképesség az energia függvényében egy rendezetlen rendszerben

11. ábra.



12. ábra. A $\overline{c_{xy}}$ és $<|\sigma_{xy}(\alpha)|>$ összefüggése az alsó Landau-alsávra. A különböző színek különféle mágneses terekhez tartoznak.

A Thouless-formula legkézenfekvőbb módosítása, ha a (3.3)-ban definiált $\overline{c_{xy}}$ mennyiséget tekintjük. Ez a mennyiség szigorúan pozitív, míg a rendszerek Hall-vezetőképessége felvehet negatív értéket is, ami a két mennyiség azonosíthatósága ellen szól. Megvizsgálva c_{xy} eloszlását mágneses térben, az a 0-körül szimmetrikus, így belőle előjeles mennyiséget számolni közvetlenül nem tudunk.

Ezért inkább a Hall-vezetőképességből definiáltam egy szigorúan pozitív mennyiséget, az egy adott energiához tartozó a szintek átlagos abszolút Hall-vezetőképességét:

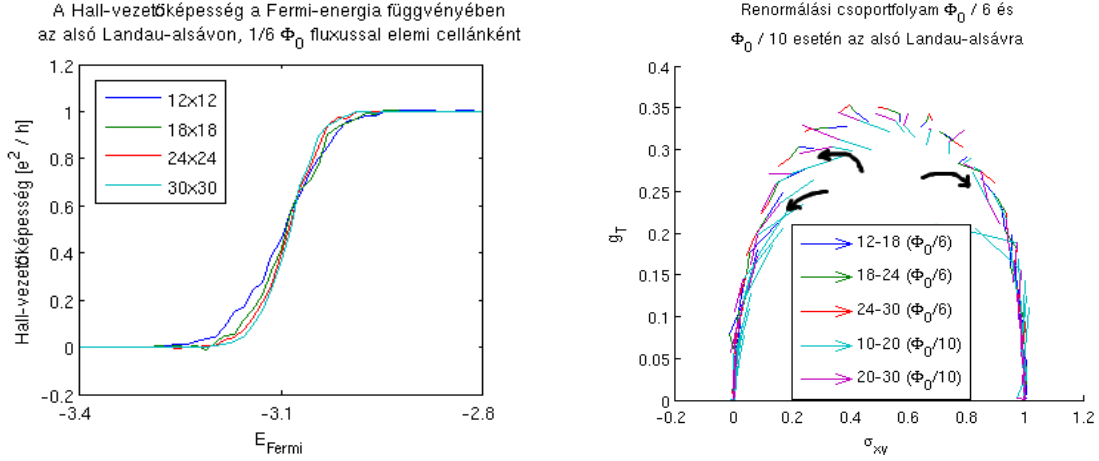
$$\overline{\sigma_{xy}(\alpha)} = \langle |\sigma_{xy}(\alpha)| \rangle_{E_{\alpha}=E} . \quad (3.10)$$

Ez a mennyiség nyilván kapcsolatban áll a tényleges Hall-vezetőképességgel, mégis pozitív, és energiafüggő, ugyanúgy, ahogy $\overline{c_{xy}}$. Azt vizsgáltam, hogy egy-egyértelmű összefüggés van-e a két mennyiség között. A 12. ábrán látható, hogy különböző mágneses tér értékek mellett a két mennyiség egymás függvényének tűnik, bár a pontok szórása igen nagy. Problémát okoz viszont, hogy $B = 0$ esetén $\overline{c_{xy}}$ továbbra is véges marad, míg $\overline{\sigma_{xy}(\alpha)}$ egzaktul nulla. Ezt az ellentmondást egyelőre nem sikerült feloldani, így továbbra is csupán azt állíthatjuk, hogy a két mennyiség között létezik valamilyen összefüggés.

Amennyiben feltételezem, hogy a rendszer viselkedését két paraméteres skálázás írja le, és feltételezem, hogy $\overline{c_{xy}}$ a $\overline{c_{xx}}$ -hez hasonlóan releváns dimenziótlan paraméter, úgy a kétparaméteres viselkedést a görbületek terén is látnunk kell.

3.3.3. Kétparaméteres skálázás kvantum-Hall rendszerben

A Pruisken-féle folyam numerikus reprodukálása: Pruisken és Khmelnitskii által a $\sigma_{xx} - \sigma_{xy}$ síkon jóslott renormálási csoport-folyamot numerikusan próbáltam reprodukálni az általam vizsgált rács-modellen. A diagonális vezetőképességet a (2.47) Thouless-féle vezetőképességgel ($\tilde{g}_T$) azonosítottam, a (teljes) Hall-vezetőképességet pedig lineáris válaszméletből kapott képlettel számoltam (2.48). Ezeket a mennyiségeket a Fermi-energia környezetében átlagoltam, sokezer realizációt véve.



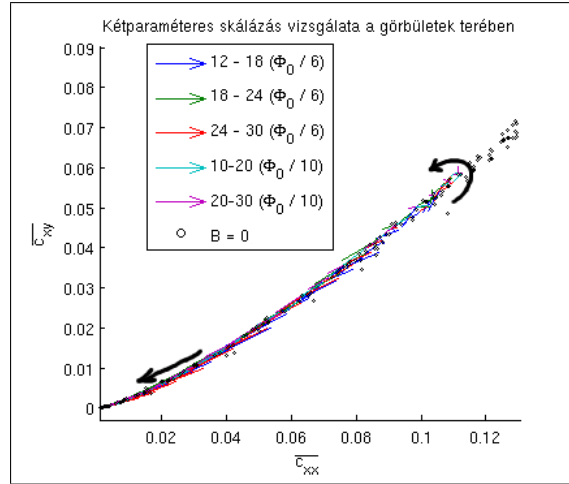
(a) A Hall-vezetőképesség a Fermi-energia függvényében, különböző méretű rendszerek esetén $\Phi = \frac{\Phi_0}{6}$ fluxussal elemi cellánként.

(b) Renormálási csoportfolyam a vezetőképesség és Hall-vezetőképesség síkján $\Phi = \frac{\Phi_0}{6}$ és $\Phi = \frac{\Phi_0}{10}$ fluxussal elemi cellánként.

13. ábra.

A jóslott folyam megjelenésének egyik jele, hogy a rendszerméret növelésével a kvantum-Hall lépcső egyre élesebbé válik. Amennyiben a mágneses teret túl nagyra választottam (pl. $\Phi = \Phi_0/3$), úgy az átlagolt Hall-vezetőképesség hibája nagyobb, mint a Hall-lépcső változása, így azt nem láthatjuk. Kisebb mágneses térnél ($\Phi = \Phi_0/6$) az alsó Landau-nívón már sokkal tisztábban látszik a lépcső méretfüggése. Még kisebb mágneses teret véve, ($\Phi = \Phi_0/10$ esetén) az alsó Landau-nívón az állapotok száma nem volt elégséges, így a köztes $\Phi = \Phi_0/6$ mágneses térnél kaptam a legjobb minőségű adatsort, mely a 13a. ábrán látható.

$\frac{\Phi_0}{6}$ és $\frac{\Phi_0}{10}$ -hez tartozó mágneses tereknel közös ábrán vizsgáltam az alsó Landau-alsávon a Thouless vezetőképesség és Hall-vezetőképesség kétparaméteres folyamát. A kapott ábra a Pruisken és Khmelnitskii által jóslottnak kvalitatíve megfelelő. Ugyanakkor nem sikerült a teljes paramétertartományt bejárni numerikusan, az adatok mind a fordított „U”-n belüli részről származnak, és annak közelében rajzolják ki a trajektóriákat. Ennek oka, hogy valószínűleg kisebb L/ξ volna szükséges, azonban a rendezetlenség csökkentésével a 4a. ábrán látott nem univerzális viselkedést kapjuk, melynek elkerüléséhez nagyobb rendszerméret volna szükséges. A kvalitatív viselkedés azonban jól látható: a σ_{xy} -tengelyen 0-nál és 1-nél vonzó fixpontokat látunk, melyeket egy instabil „rendezetlenség”-fixpont választ el. Az adatok minősége a kritikus exponensek meghatározását nem tette lehetővé. Azt azonban láthatjuk, hogy a különböző mágneses tereknel kapott töröttvonalak ugyanazt az univerzális folyamatot követik.



14. ábra. Renormálási csoport-folyam a görbületek síkján $\Phi = \frac{\Phi_0}{6}$ és $\Phi = \frac{\Phi_0}{10}$ fluxussal elemi cellánként.

Kétparaméteres skálázás a $\overline{c_{xx}} - \overline{c_{xy}}$ síkon: Megvizsgáltam a renormálási csoport-folyamot a $\overline{c}$ -k síkján is (14. ábra). Itt azonban lényegében egyparaméteres viselkedést látunk: $\overline{c_{xy}}$ és $\overline{c_{xx}}$ értékek szinte egymás függvényei, függetlenül a mágneses tér jelenlététől. Ettől csak csekély eltérést látunk, és az eltérés nagysága nem nagyobb, mint a mágneses tér nélküli $\overline{c_{xy}(\overline{c_{xx}})}_{B=0}$ függvény adatpontjainak a szórása. $\overline{c_{xy}}$ tehát nem tud különbséget tenni a 13b. ábrán látható fordított „U” két ága között. Azt azonban meg kell jegyeznünk, hogy míg mágneses tér nélkül a $\overline{c_{xx}(\overline{c_{xy}})}$ görbén a folyam szigorúan az origó felé folyik, addig mágneses tér mellett először növekedést látunk, majd a trajektoriák megfordulnak, és így vezetnek az origóba. Ez az egyparaméteres skálázás ellen szól, azt várjuk, hogy kell lennie egy másik releváns paraméternek, viszont $\overline{c_{xy}}$ nem megfelelő. Mint a mágneses tér nélküli egyparaméteres skálázás vizsgálatánál láttuk, kisebb rendszerméretet, vagy kisebb rendezetlenséget véve az univerzális viselkedést elveszítjük, így ha ebben az esetben eltérést látunk a 14. ábrán látott görbéhez képest, az valószínűleg a nem univerzális viselkedésnek tulajdonítható.

Azt találtam tehát, hogy két dimenzióban a $\overline{c_{xy}}$ paraméter valószínűleg nem megfelelő a kétparaméteres skálázás $\overline{c_{xx}}$ -t kiegészítő második paraméterének, ugyanis ezen mennyiségek gyakorlatilag egymás függvényei. A lineáris válasz elméletből kapott Hall-vezetőképességet véve második paraméternek viszont szépen látszik a kétparaméteres viselkedés.

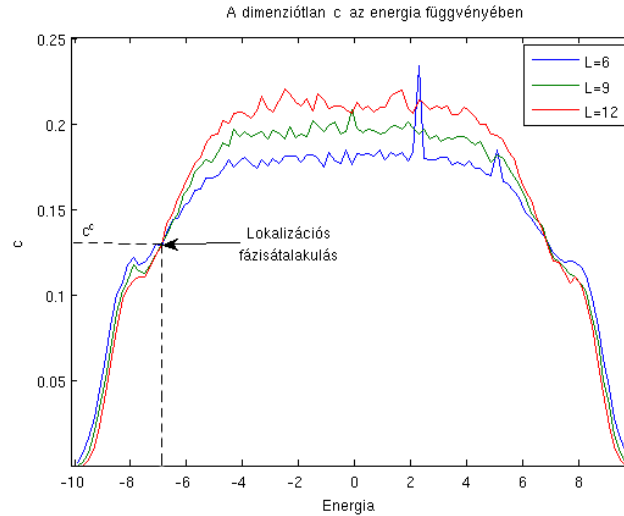
3.4. Eredmények háromdimenziós köbös rácson

Háromdimenziós rendezetlen nemkölcönható elektronrendszerekben a rendezetlenség növelésekor fázisátalakulást láthatunk [2]. Mint a 2.1 alfejezetben tárgyaltuk, minden energiához tartozik egy $W_c(E)$ kritikus rendezetlenség ahol a lokalizációs hossz ill. a fémes fázisban a koherenciahossz hatványfüggvény szerint divergál. A fázisátalakulás köbös rácson, izotrop elsőszomszéd hopping esetén a sáv közepén, azaz $E = 0$ energian $\frac{W_c(E=0)}{t} \approx 16.5$ rendezetlenségnél következik be [2]. Ettől eltérő energiákon a kritikus rendezetlenség kisebb.

Háromdimenziós esetben a Hamilton-operátort reprezentáló mátrix dimenziója az oldalhossz harmadik hatványával növekszik, így a kétdimenziós esethez képest csak kisebb rendszerméretetek érhetők el. Én maximálisan $L = 12$ oldalhosszúságú kockákat vizsgáltam. A kétdimenziós esethez képest viszont előny, hogy a fázisátalakulás igen nagy rendezetlenségen történik, így az állapotsűrűségben a kétdimenziós esetben látott hullámzó viselkedés (4b. ábra) elkerülhető.

3.4.1. Egyparaméteres viselkedés mágneses tér nélkül

Elsőként mágneses tér nélkül vizsgáltam a rendszert. Ezt az esetet az irodalomban már részletesen tárgyalták [2, 10]. $W = 15$ rendezetlenség mellett, $L = 6, 9$, és 12 rendszerméretetek mellett kiszámítottam a (3.3) formula alapján a $c = \overline{c_{xx}}$ dimenziótlán átlagos abszolút görbületet (15. ábra). A (3.7) formulával numerikusan meghatároztam a β -függvényt, mely előjelet vált a 2.1. fejezetben tárgyaltaknak megfelelően, ez az előjelváltás jelzi a lokalizációs fázisátalakulást (16. ábra).



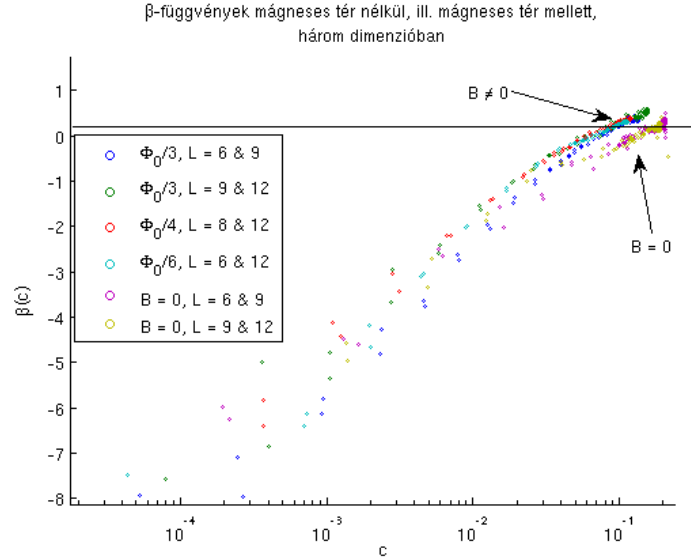
15. ábra. A dimenziótlán átlagos abszolút görbület energiasfüggése $L = 6, 9$, és 12 oldalhosszúságú rendszerekben. Láthatóan $E_c^\pm = \pm 7$ környékén található a mobilitási küszöb, $E \in [E_c^-, E_c^+]$ esetén az állapotok kiterjedtek, a többi állapot pedig lokalizált.

A fázisátalakulásnál a kritikus c értéket a 15. ábra alapján határoztam meg, megkeresve azt a pontot, ahol a görbék metszik egymást:

$$c^c \approx 0.13. \quad (3.11)$$

3.4.2. Viselkedés mágneses térben

Külső mágneses tér mellett is vizsgáltam a rendszert. A kétdimenziós esettől eltérően itt a kvantum-Hall effektus nem jelenik meg, hiszen három dimenzióban nem alakulnak ki diszkrét Landau-nívók, a rendszernek azonban van Hall-vezetőképessége, ami nem kvantált.



16. ábra. A numerikusan meghatározott β -függvények mágneses tér melletti, ill. mágneses tér nélküli esetben. A mágneses tér nélküli esetben a görbét $W = 15$ rendezetlenség mellett $L = 6, 9$ és 12 méretű rendszerekből számoltam. Mágneses tér esetén a rendezetlenség $W = 16$ volt, a mágneses tér nagysága $\Phi_0/3, \Phi_0/4$ és $\Phi_0/6$ volt, a rendszerméretet a (2.23)-nek megfelelően lettek megválasztva: $L = 4, 6, 8, 9$ és 12 . A két esetben szignifikánsan eltérő görbét kapunk, de mind a mágneses tér nélküli, mind a mágneses tér melletti adatok egy-egy univerzális görbét rajzlonak ki.

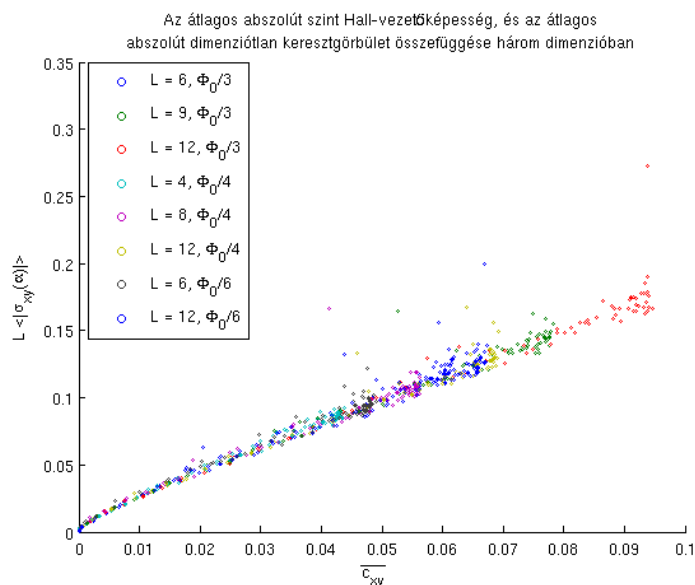
Megvizsgálva a dimenziótlan c paramétert, a lokalizációs fázisátalakulást ebben az esetben is látjuk. A számításokat $W = 16$ rendezetlenség mellett elemi cellánként $\Phi = \Phi_0/3, \Phi_0/4$ és $\Phi_0/6$ mágneses fluxus mellett végeztem, különböző $L \leq 12$ oldalhosszúságú rendszereken. A $c^c(B \neq 0)$ kritikus paraméter a mágneses tér nélküli (3.11) értéktől eltérő, a 15. ábrán láthatóhoz hasonló módon meghatározhatjuk a mobilitási küszöböt, és a hozzá tartozó kritikus görbületet:

$$c_{(B \neq 0)}^c \approx 0.07. \quad (3.12)$$

A különböző nagyságú mágneses terekben ez gyakorlatilag azonos volt. Ez alapján megvizsgáltam, hogy mágneses tér mellett látok-e egyparaméteres skálázást. A $\overline{c_{xx}}$ dimenziótlan átlagos abszolút görbületre β -függvényt számoltam, az eredmény a 16. ábrán látható, a mágneses tér nélküli esettel együtt. A mágneses térbeli adatok gyakorlatilag egy görbére skáláznak, mely szignifikánsan eltér a mágneses tér nélküli esettől. Az adataim tehát mágneses tér mellett egy, a mágneses tér nélküli esettől szignifikánsan eltérő, de az egyparaméteres skálahipotézisnek megfelelő viselkedést mutatnak. Ez valószínűleg azzal

magyarázható, hogy az általunk használt mágneses terek rendkívül nagyok. Amennyiben $B > B_c \sim \Phi_0/\xi^2$, akkor azt várjuk, hogy a rendszer az úgynevezett unitér univerzalitási osztályba tartozik, és az ennek megfelelő egyparaméteres skálázást teljesíti.

Ábrázoltam egymás függvényében a $\overline{c_{xy}}$ dimenziótlan átlagos abszolút keresztgörbületet és az $L \langle |\sigma_{xy}(\alpha)| \rangle$ átlagos abszolút szint Hall-vezetőképességet. Az oldalhosszal azért kell szorozni, mert három dimenzióban, $\left[\frac{e^2}{h}\right]$ egységekben mérve a fajlagos vezetőképesség 1/hossz dimenziójú míg a vezetőképesség dimenziótlan. A 17. ábrán láthatóan a két mennyiség egymás függvénye különböző mágneses tér, és rendszerméret mellett.



17. ábra. A $\overline{c_{xy}}$ és az $L \langle |\sigma_{xy}(\alpha)| \rangle$ egymás függvényében $W = 16$ esetén, különböző mágneses tér és rendszerméret esetén. Az egyes színek a különböző (B, L) -értékpárokhöz tartoznak.

4. Összefoglalás

Dolgozatomban a Thouless-formula, valamint a lokalizáció skálaelméletének kapcsolatát vizsgáltam 2 ill. 3 dimenziós rácsmodellek esetében.

A mágneses tér nélküli esetben, két ill. három dimenzióban is az egyparaméteres skálahipotézisnek megfelelő eredményeket kaptam. Megmutattam, hogy magasabb dimenzióban is megfelelő univerzális paraméternek bizonyul a (3.3) egyenletben definiált $c = \overline{c_{xx}}$ átlagos abszolút dimenziótlan görbület. Ez azzal áll kapcsolatban, hogy a görbület a rendszer hosszú-hullámhosszú viselkedését méri, ahol a mikroszkópikus paraméterek irrelevánssá válnak. Azt találtam, hogy a c paraméter értéke meghatározza a (3.3)-ban definiált $\overline{c_{xy}}$ átlagos abszolút dimenziótlan keresztgörbület értéket, sőt a dimenziótlan görbületek $p(c_{xx})$ és $p(c_{xy})$ eloszlása is csak ezen paraméter függvénye. Meghatároztam továbbá a c -hez tartozó β -függvényt is.

Mágneses tér bekapcsolása esetén, két dimenzióban eltéréseket tapasztaltam az egyparaméteres skálahipotézistől. Numerikusan bizonyítottam (tudomásunk szerint először az irodalomban) Pruisken 2-paraméteres skálahipotézisét a görbületből definiált $(g_T)_{xx} = \pi \overline{c_{xx}}$ Thouless-vezetőképességet, ill. a $\overline{\sigma_{xy}}$ átlagos Hall-vezetőképességet választva paraméterként. Numerikusan számos mennyiség azonban mégis egyparaméteres skálázást mutat. Ez valószínűleg azzal függ össze, hogy a Pruisken-folyam reprodukálásakor a trajektóriák a fordított „U”-hoz nagyon közel indulnak, és szinte azonnal el is érik azt, ahol már kvázi egyparaméteres viselkedést láthatunk. Ez az oka annak is, hogy $\langle |\sigma_{xy}(\alpha)| \rangle$ átlagos abszolút szint Hall-vezetőképesség különböző mágneses-tér értékek mellett is a $\overline{c_{xy}}$ egy-egy-értelmű függvényének tűnik, holott $B = 0$ esetén $\sigma_{xy}(\alpha) = 0$ minden szintre, szemben a keresztgörbülettel. Ezt a kvázi-egyparaméteres viselkedést feltehetőleg az okozta, hogy túlságosan nagy mágneses tér értékeket használtam. Azonban a (2.23) egyenletben szereplő feltétel miatt kis mágneses terek csak nagyon nagy rendszereken érhetők el. Az egyparaméteres skálázást kizárja az is, hogy mint láthattuk, a c paraméter a Landau-alsávokon a kritikus energia közelében először növekszik, majd megfordul és 0-hoz tart, így hozzá egy csak c -től függő β -függvény biztosan nem tartozhat.

Három dimenzióban, mágneses tér esetén egyparaméteres viselkedést láttam, azonban a „kritikus” c^c értéke mágneses térben egyértelműen eltér a mágneses tér nélküli értéktől, a két viselkedés nem esik egybe, a rendszerek β -függvénye is eltérő. A látott viselkedést ismét a túlságosan nagy mágneses terek felelősek, melyek miatt már a mágneses tér melletti, ún. unitér univerzalitási osztálynak megfelelő viselkedést láttam. A kisebb mágneses terek elérése, hasonlóan a kétdimenziós esethez, nagyon nagy rendszerméretet igényel.

A dimenziótlan $\overline{c_{xy}}$ paraméter mind $B = 0$, mind $B \neq 0$ esetén $\overline{c_{xx}}$ -nek egyazon függvénye, így nem megfelelő egy, a $\overline{c_{xx}}$ -től független második dimenziótlan paraméternek. Kapcsolatát a Hall-vezetőképességgel eddig még nem sikerült kimerítően tisztáznunk.

A jövőben kutatásom egyik célja találni egy releváns dimenziótlan paramétert, amelynek segítségével a mágneses térben való kétparaméteres viselkedés megfigyelhető. Sejtésünk szerint, spin bevezetésével és a spinforgatási szimmetriát sértő modell bevezetésével új, az ún. szimplektikus univerzalitási osztályt vizsgálhatjuk. Céлом ilyen rendszerek esetleges univerzális viselkedésének feltérképezése, ill. az ezek közötti univerzális átcsapás vizsgálata.

5. Köszönetnyilvánítás

Köszönettel tartozom elsősorban témavezetőmnek, Dr. Zaránd Gergelynek kutatómunkámhoz adott nagy támogatásáért, segítségéért. Köszönettel tartozom továbbá a berlini Freie Universität Fizikai Intézetének, a biztosított kutatási lehetőségért.

Hivatkozások

- [1] E. Abrahams, P.W. Anderson, D.C. Licciardello and T.V. Ramakrishnan, Phys. Rev. Lett. **42**, 673 (1979)
- [2] A. MacKinnon and B. Kramer, Phys. Rev. Lett. **47**, 1546 (1981)
- [3] D.R. Hofstadter, Phys. Rev. B. **14**, 2239 (1976)
- [4] Kun Yang, R. N. Bhatt, Phys. Rev. B. **59**, 8144 (1999)
- [5] B. Huckestein, B. Kramer, Phys. Rev. Lett. **64**, 1437 (1990)
- [6] A. M. M. Pruisken, Phys. Rev. Lett. **61**, 1297 (1988)
- [7] D.E. Khmelnitskii, JETP Letters **38**, 552(1983)
- [8] Solyom Jenő, A modern szilárdtestfizika alapjai III, I. függelék (ELTE Eötvös Kiadó - 2003)
- [9] J. T. Edwards and D. J. Thouless, J. Phys. C **5**, 807 (1972)
- [10] D. Braun, E. Hofstetter, A. MacKinnon and G. Montambaux, Phys. Rev. B **55**, 7557 (1997)
- [11] D.J. Thouless, Topological quantum numbers in nonrelativistic physics, (World Scientific - 1998)
- [12] Felix von Oppen, Phys. Rev. Lett. **73**, 798 (1994)
- [13] M. Titov, D. Braun and Y. V. Fyodorov, J. Phys. A. **30**, 339