

B3596

PHD ÉRTEKEZÉS TÉZISEI



# HIERARCHIKUS ÉS RENDEZETLEN RENDSZEREK KRITIKUS VISELKEDÉSE

Szalma Ferenc

JATE ELMÉLETI FIZIKAI TANSZÉK

SZEGED

1998

A dolgozat különböző inhomogenitások kritikus viselkedésre gyakorolt hatását vizsgálja a statisztikus fizika modern eszközeivel.

## 1 Előzmények

Kritikus viselkedést (másodrendű fázisátalakulást) már a múlt században észleltek  $CO_2$  és más gázok cseppfolyósításának illetve fázisdiagramjának vizsgálata kapcsán. A jelenséget — mint ahogy a folyadék és gáz állapotot egyaránt — a van der Waals-egyenlet írta le jól. Hasonló fázisátalakulás figyelhető meg a ferromágneses anyagok hevítésekor, melynek során az anyag elveszíti spontán mágnesezettségét és paramágnesessé válik. A paramágneses-ferromágneses fázisátalakulást a Weiss-féle molekula tér elmélet magyarázta meg, amely képes volt például a mágneses szuszceptibilitás empirikus Curie-féle törvény szerinti hőmérsékletfüggését elméletileg alátámasztani.

Mindkét elmélet a kritikus pont körüli tartomány leírásánál implicit módon feltételezte, hogy itt a rendszer szabadenergiája az ún. rendparaméter szerint sorbafejthető. Ez az alapgondolata a Landau-elméletnek, amely egységes keretek között tárgyalja a fenti két jelenséget, bevezeti a rendparaméter fogalmát és lehetőséget ad további rendszerek vizsgálatára, mint pl. a szupravezetés a Ginzburg-Landau-egyenleten keresztül. A kísérleti eredmények és a különböző hőmérsékleti sorfejtések, illetve a kétdimenziós Ising modell Onsager-féle megoldása rámutatott az elmélet korlátaira. Ez a megközelítés — ahogy jelenleg már tudjuk — valójában csak a kritikus ponttól távolabb ad korrekt információt, a kritikus pont közvetlen közelében csak kvalitatív képet ad a fázisátalakulás jellegéről hiszen ott a korrelációs hossz divergálása miatt fellépő hosszútávú fluktuációkat nem tudta figyelembe venni.

A másodrendű fázisátalakulások területén az áttörést a térelméletekben már korábban is ismert renormálás alkalmazása jelentette, amely a rendszert a renormálási csoport transzformáció során — decimálással — egy kevesebb szabadsági fokkal, de

azonos tulajdonságokkal (pl. azonos szimmetriájú Hamilton-operátorral) rendelkező rendszerre képezi le. A Hamilton-operátorban fellépő paraméterek a leképezések során a kritikus pont körül skálatulajdonságot mutatnak, és az azokat jellemző skáladimenziókból meghatározhatóak a különböző fizikai tulajdonságok kritikus exponensei. A fentiek továbbgondolásával, a renormálási csoport transzformáció magyarázatot adott arra is, hogy miért léteznek univerzalitási osztályok, azaz akár teljesen különböző fizikai rendszerek (akár különböző rendparaméterekkel) is azonos kritikus exponensekkel bírnak. Magyarázatot adott továbbá a kritikus exponensek közötti összefüggésekre, az ún. skálatörvényekre és arra a megfigyelésre, hogy a mikroszkopikus paraméterek konkrét értékei miért nem befolyásolják az univerzalitási osztályokat.

A dolgozatban vizsgált Ising-modell a kooperatív jelenségeket leíró egyik legalapvetőbb modell az egyszerűsége folytán is, hiszen minden rácspontban a spinváltózó egy skalár, amely két különböző értéket vehet fel. Míg korábban a spinek közötti (intermolekuláris) kölcsönhatás meglehetősen túlegyszerűsítettnek tűnt, és így valós rendszerek leírására alkalmatlannak gondolták a modellt, ma a renormálási csoport transzformáció ismeretében világos, hogy ezekben a rövidtávú kölcsönhatásokban fellépő mikroszkopikus részletek a kooperatív tulajdonságokat, különösen a kritikus viselkedést nem befolyásolják. Az évek során az Ising-modell a leggyakrabban vizsgált statisztikus fizikai modellek közé került, mely az univerzalitás folytán egyaránt leírja a folyadék-gáz fázisátalakulást, a már említett mágneses fázisátalakulást, az ötvözetekben létrejövő rend-rendezetlenségi átalakulást vagy a folyadékkeverékekben a fázisszeparációt.

A homogén rendszerek kritikus viselkedésének vizsgálatában elért eredményekre alapozva a rendezetlen és különböző típusú inhomogenitásokat (felületek, hibavonalak, stb.) tartalmazó rendszerek vizsgálata is megkezdődött. Az első ilyen vizsgálatok közé tartozott a periodikusan és a véletlenszerűen réteges kétdimenziós Ising-modell (McCoy-Wu-modell), illetve az inhomogén vagy véletlenszerű közegbe helyezett írá-

nyitott bolyongó kritikus viselkedésének vizsgálata.

Az inhomogenitások hatásainak vizsgálata alapvető fontosságú, hiszen a természetben általában nem található tökéletesen tiszta rendszer, tökéletesen periodikus kristályrács diszlokációk, ponthibák stb. nélkül.

A dolgozat egyik fő témája a rendezetlen (kötés-hígított) Ising-modell kritikus viselkedésének vizsgálata. A hígítás okozta perturbáció relevanciája-irrelevanciája a Harris által kidolgozott kritérium szerint a homogén rendszer fajhő exponensétől függ. Ez a kétdimenziós Ising-rendszer esetében zérus, mely így a kritérium marginális esetét jelenti. Ebben az esetben a hígított rendszer kritikus viselkedését csak részletes vizsgálatokkal lehet meghatározni.

A tiszta (periodikus) és a rendezetlen (hígított) rendszerek közötti átmenetet képviselnek az 1984-ben felfedezett kvázikristályok. Ezek olyan determinisztikus, de nem periodikus struktúrák, melyek Fourier-spektruma diszkrét, véges számú, egymással irracionális viszonyban álló csúcs szuperpozíciójaként írható le, azaz semmilyen periodikus struktúra pontszimmetriájának nem felelnek meg. A kvázikristályok felfedezése mellett a mesterségesen előállítható aperiodikus struktúrájú multirétegek előállítása is újabb lökést adott az inhomogén rendszerek kutatásának. Ugyanis a molekulasugár epitaxia révén olyan kváziperiodikus vagy általánosabban aperiodikus struktúrákat állítottak elő — amelyek elméleti vizsgálata is rendkívül érdekes —, mint pl. a Fibonacci-féle szuperrács szerkezet  $GaAs - AlAs$  alternáló rétegekből. A struktúra Röntgen- és Raman-szórásos vizsgálata bizonyította, hogy az új fajta anyagok különleges tulajdonságokkal rendelkeznek.

A fenti anyagokkal rokon szerkezet a disszertációban is vizsgált hierarchikus rendszer, amelyben a spinek közötti csatolási állandók mutatnak önhasonló struktúrát. Több mesterséges vagy természetes rendszerben figyeltek, illetve vizsgáltak meg ilyen típusú szerveződést az utóbbi években, mint például rendezetlen rendszerek (spinűvegek) vagy proteinek relaxációs folyamataiban. Távolsági példaként megemlíthetők

a számítógép architektúrákban, nagy földrengések előtti geológiai folyamatokban, illetve — a hétköznapi életből véve — különböző gazdasági szerveződésekben, illetve tőzsdei árfolyamváltozásokban megfigyelhető tendenciák. Különböző numerikus és egzakt eredmények szerint a hierarchikus „potenciálban” történő diffúzió anomális jellegű is lehet, amit ultradiffúciónak neveznek.

A Harris-kritériumhoz hasonló relevancia-irrelevancia kritériumot lehet felállítani az általános aperiodikus struktúrák fázisátalakulásaira (Luck-kritérium) is. Ebben az esetben a tiszta rendszer korrelációs hossz exponenséből és az aperiodikus sorozat ún. vándorlási exponenséből képzett ún. „crossover” exponens előjele dönti el az inhomogén rendszer fázisátalakulásának jellegét. A crossover exponens zérus értéke esetén a perturbáció marginális. Ekkor számos rendszerben — amelyekben egzakt eredmények is ismertek — a csatolás értékével folytonosan változó kritikus exponenseket és anizotróp skálázást figyeltek meg, azaz a rétegekre merőlegesen és azokkal párhuzamosan mért korrelációs hosszak különböző exponensekkel divergálnak a kritikus pontban. Ezen különleges tulajdonságú rendszerek közé tartozik — ahogy vizsgálataink megmutatták — a hierarchikus csatolású réteges Ising-modell is.

## 2 Vizsgálati módszerek

### TRANSZFERMÁTRIX MÓDSZER

Először az Ising-modell vizsgálatára 1941-ben Kramers és Wannier használta ezt a módszert, amelynek segítségével a rendszer állapotösszege mátrixok hatványának „nyoma”-ként írható fel. A transzfermátrix a translációs szimmetria irányában az egymásután következő rétegek állapotát kapcsolja össze. A vizsgált rendszer szabade energiájának, illetve korrelációs hosszának kiszámításában a transzfermátrix két legnagyobb sajátértéke szükséges (termodinamikai határesetben). Ekkor a kétdimenziós  $N$ -rétegű klasszikus Ising-modell esetén egy  $2^N \times 2^N$ -es mátrix sajátértékproblémáját kell

megoldani, mely az extrém anizotróp határesetben egy egydimenziós kvantum Ising-lánc Hamilton-operátorának sajátértékproblémájával ekvivalens. A hamiltoni probléma megoldásához először a spinoperátorokat Jordan-Wigner-transzformációval fermion operátorokká alakítjuk, majd az ezeken végrehajtott Bogoljubov-transzformációval szabad fermion rendszert nyerünk. Ez utóbbi lépésben egy  $N \times N$ -es mátrix sajátértékproblémájának megoldása szükségeltetik. A kvantum probléma első gerjesztései egyértelmű kapcsolatban vannak a kétdimenziós probléma korrelációs hosszával, így annak vizsgálata a kétdimenziós rendszer fázisátalakulásának vizsgálatát is lehetővé teszi.

A határfelületi fluktuációs probléma szintén eredményesen vizsgálható a transzfermátrix módszerrel. Ebben az esetben a probléma az Ising-moddal összehasonlítva kevésbé komplex, ekkor a transzfermátrix dimenziója  $N$ . Megmutatható, hogy ez a transzfermátrix formailag megfelel az Ising-moddal a Bogoljubov-transzformációval kapott mátrixszal.

#### RENORMÁLÁSI CSOPORT TRANSZFORMÁCIÓ

A transzformáció, melynek segítségével a skála- és univerzalitási hipotézisre lehet igazolást adni egyúttal fontos (numerikus) számolási módszer is. A renormálást a hosszúságskála megváltoztatása révén általában az állapotösszegben fellépő Hamilton-operátoron végezzük el. A disszertációban tárgyalt hierarchikus rendszer önhasonlósága természetes módon ad lehetőséget a renormálás használatára. Ebben az esetben nem a Hamilton-operátorokon, hanem a problémákban fellépő mátrixok elemein és sajátértékeiken végezzük el a transzformációt. A spinrendszer és a határfelületi fluktuáció együttes tárgyalását a sajátértékproblémájukban fellépő mátrixok azonossága teszi lehetővé. A két probléma a megfelelő renormálási csoport transzformáció két különböző nemtriviális fixpontjához kapcsolódik. A fixpontok közül a spektrum alsó szélét leíró az Ising modell, míg a spektrum felső szélét jellemző a határfelületi fluktuációk kritikus viselkedését kontrollálja.

## MONTE CARLO-MÓDSZEREK

A disszertációban különböző klasszikus (Metropolis-algoritmus) és modern (Swendsen-Wang-algoritmus, Wolff-algoritmus) számítógépes módszereket alkalmaztam. Ezek közül a Metropolis-algoritmust elsősorban a kritikus ponttól távolabbi tartományban alkalmaztam, mivel ez a módszer, miként általában az egy-spinflip módszerek, a kritikus állapothoz közeli hőmérsékleteken — a kritikus lelassulás jelensége miatt — nem alkalmazható hatékonyan. A '80-as évek végének nagy eredménye volt a klaszter-spinflip algoritmusok kidolgozása, amelyekben a kritikus lelassulás gyakorlatilag eltűnik, így csak a korrelációs hossz divergálása miatt szükséges egyre nagyobb rendszer-méretek okoznak már nehézséget a numerikus számításokban. A Swendsen-Wang és a Wolff-féle klaszterflip algoritmusok ráadásul a különböző hígított rendszerekben még kevesebb gépidőt igényelnek, mint a homogén esetben, hiszen a perkolációs határesetben a leggyorsabbak.

## 3 Eredmények

1. A kötéhígított kétdimenziós Ising-modell tömbi mágnesezettségét vizsgáltam a Wolff-féle klaszterflip Monte Carlo-módszerrel. Megállapítottam, hogy a mágnesezettség effektív exponense a hőmérséklet egy tartományában fölé nő a térelmélet által jószolt aszimptotikus értéknek, mely az irodalomban vitatott „overshooting”-nak nevezett jelenség a hígítás mértékével erősödik [1].
2. Meghatároztam a hígított Ising-modell felületi mágnesezettségének kritikus exponenseit különböző hígítások mellett, mind az (11) és az (10) felületeken. Megállapítottam, hogy mindkét esetben megegyezik a hígított modellek felületi kritikus exponense a tiszta rendszer azonos exponensével, azaz a hígítás (marginálisan) irreleváns jellegű. A felületi exponensek effektív értéke a hígítás növekedésekor csak kis mértékben változik meg, azaz robusztusabb mint a hasonló tömbi exponensek, ahol a korrekció

viselkedés erős, logaritmikus jellegű [1][2].

3. Diagonális rácson elkészítettem a mágnesezettségi profilokat és a hozzájuk tartozó effektív exponens profilokat, és tanulmányoztam a tömbi és a felületi exponensek közötti „crossover” viselkedést. A felületi réteg vastagságának vizsgálatával meghatároztam a korrelációs hossz hígítás hatására történő megváltozását [1][2].

4. Vizsgáltam a kétdimenziós hierarchikus kötéselosztású Ising-modell és az ennek — az extrém anizotóp határesetben — megfelelő egydimenziós kvantum Ising-lánc felületi kritikus viselkedését. Analitikus összefüggést találtam a felületi mágnesezettség exponensének a hierarchikus paramétertől való függésére különböző hierarchikus szerkezetek esetén. Megállapítottam, hogy az általánosított hierarchikus sorozat a kötések fluktuációjának gyengítésekor marginálisan irreleváns perturbációt jelent, azaz csak logaritmikus korrekciók lépnek fel. Ugyanakkor a fluktuációk erősítésekor a perturbáció marginálisan releváns: a hierarchikus paramétertől függően a felületi fázisátalakulás vagy elsőrendű vagy a mágnesezettség minden hatványfüggvényénél gyorsabban cseng le [3].

5. A kétdimenziós hierarchikusan réteges Ising-modell két távoli párhuzamos felületen levő spinjeit ellentétes állapotban rögzítve vizsgáltam a fázisokat elválasztó határfelület fluktuációs tulajdonságait. Megállapítottam, hogy a határfelületi fluktuációk anomálisan viselkednek, a vándorlási (fluktuációs) exponens a hierarchikus paraméter folytonosan változó függvénye, melyet transzfermátrix módszerrel numerikusan meghatároztam [4].

6. A hierarchikus csatolású rendszerre alkalmaztam az aperiodikus rendszerekre korábban kidolgozott egzakt renormálási csoport transzformációt, amely a kétdimenziós Ising-rács határfelületi fluktuációját és a kvantum Ising-lánc kritikus problémáját azonos keretek között, egyazon renormálási csoport keretében tárgyalja. A megkonstruált renormálási csoport transzformáció két nemtriviális fixpontja a határfelületi fluktuációknak, illetve az Ising-modellnek felel meg. A fixponti transzformáció analiziséből a

két modell kritikus tulajdonságait egzaktul meghatároztam [4][5].

## 4 Publikációk

- [1] SELKE W., SZALMA F., LAJKÓ P., IGLÓI F.: Surface Critical Behavior of Two-Dimensional Dilute Ising Models, *J. Stat. Phys.* **89**, 1079-1085 (1997)
- [2] IGLÓI F., LAJKÓ P., SELKE W., SZALMA F.: Boundary critical behaviour of two-dimensional random Ising models, *J. Phys. A* **31**, 2801-2813 (1998)
- [3] IGLÓI F., LAJKÓ P., SZALMA F.: Critical behavior of hierarchical Ising models, *Phys. Rev. B* **52**, 7159-7165 (1995)
- [4] IGLÓI F., SZALMA F.: Interface fluctuations on a hierarchical lattice, *Phys. Rev. E* **54**, 1106-1110 (1996)
- [5] IGLÓI F., TURBAN L., KAREVSKI D., SZALMA F.: Exact renormalization group study of aperiodic Ising quantum chains and directed walks, *Phys. Rev. B* **56**, 11031-11050 (1997)