

PHD ÉRTEKEZÉS

INHOMOGÉN RENDSZEREK LOKÁLIS KRITIKUS VISELKEDÉSE

Írta: Lajkó Péter

Témavezető: Dr. Iglói Ferenc
egyetemi tanár

JATE ELMÉLETI FIZIKAI TANSZÉK

SZEGED

1998

Tartalom

1	Bevezetés	1
2	Statisztikus fizikai előkészítés	7
2.1	A fázisátalakulások statisztikus fizikai alapjai	7
2.1.1	Bevezetés	7
2.1.2	Fenomenológikus leírás	7
2.1.3	Mikroszkopikus leírás	9
2.1.4	Skálázási invariancia, kritikus exponensek	12
2.1.5	Felületi kritikus viselkedés	14
2.1.6	Renormálási csoportelmélet	16
2.1.7	Konforminvariancia	18
2.2	Az Ising-modell	21
2.2.1	A duális transzformáció	21
2.2.2	A csillag-háromszög transzformáció	23
2.2.3	A transzfermátrix	24
2.2.4	Az anizotróp skálázási határeset	26
2.2.5	Az egydimenziós kvantum Ising-modell	26
2.2.6	A diagonális transzfermátrix	27
2.3	Kvázikristályok és aperiodikus struktúrák	28
2.3.1	Egydimenziós aperiodikus szerkezetek	29
2.3.2	Magasabb dimenziós aperiodikus struktúrák	31
2.3.3	Relevancia-irrelevancia kritérium réteges aperiodikus és rendezetlen rendszerekre	32

3	Eredmények	35
3.1	Inhomogén Ising-modellek kritikus hőmérséklete	35
3.1.1	Bevezetés	35
3.1.2	A kritikus hőmérsékletek analitikus meghatározása	36
3.1.3	Összefoglalás	42
3.2	Felületi mágnesezettség	43
3.2.1	Az iterációs módszer	43
3.2.2	Diagonális transzfermátrix réteges rendszerekre	51
3.2.3	Eredményeink aperiodikus rendszerekre	52
3.2.4	Összefoglalás	59
3.3	A hígított Ising-modell	59
3.3.1	Bevezetés	59
3.3.2	Az iterációs módszer általánosítása	61
3.3.3	A véletlen ferromágneses kötésű Ising-modell felületi viselkedése	67
3.3.4	Összefoglalás	72
3.4	A Potts-modell kritikus viselkedése sarkoknál	73
3.4.1	Bevezetés	73
3.4.2	Potts-modell transzfer operátora	74
3.4.3	Numerikus eredmények	76
3.4.4	Összefoglalás	76
4	Összefoglalás	77
	Irodalomjegyzék	81
	Köszönetnyilvánítás	87
	Angol nyelvű összefoglaló	iii

1. Fejezet

Bevezetés

A fázisátalakulások a legszembeszökőbb, leghétköznapiabb fizikai jelenségek közé tartoznak. Bár a legegyszerűbb fázisátalakulások (fagyás, olvadás, forrás) észlelése körülbelül az emberi tudattal egyidős, rendszeres tudományos vizsgálatuk mégis csak a múlt század első felében kezdődött el. Latour¹, Herschel¹, Andrews¹ úttörő munkássága tette lehetővé van der Waals [7] számára a folyadék-gáz fázisátalakulás klasszikus elméletének megalkotását. A múlt század végén, e század elején Hopkins¹, Cuire¹, Weiss¹, Smolúchowski¹, Einstein¹ munkái adtak új, eredeti irányokat a kutatásoknak. A '30-as években az átlagtér-elméletek alkalmazása (Bragg-Williams [1], Bethe [2], Peirels [3], Nix és Schokley [4], Landau [9, 10]) a klasszikus elméletek csúcspontját jelentette.

A klasszikus elméletek hiányosságaira analitikus és kísérleti vizsgálatok mutattak rá. Ezen elméletek jellegét tekintve jól visszaadták a fázisátalakulások különböző tulajdonságait, azonban kvantitatív jóslataik sorra ellentmondásba kerültek a kísérleti és analitikus eredményekkel, mely eredmények nem illettek a klasszikus elmélet keretei közé.

Az elméleti megközelítés első lépése a fenomenológikus skálázási elmélet megalkotása volt a '60-as években. Ennek mikroszkopikus jellegű magyarázata a '70-es években megszületett renormálási csoport elmélet, melyet Wilson dolgozott ki [62]. Ez az eljárás a '70-es évek fizikájának egyik legnagyobb eredménye, melyért Wilsont Nobel-díjjal tüntették ki, és melyet nemcsak a fázisátalakulásoknál alkalmaztak sikerrel, hanem a részecske fizikában, a turbulencia elméletben és sok más területen is. Ezen elmélet, mely a végtelen szá-

¹A referenciákkal kapcsolatos információk megtalálhatóak J.S. Rowlinson van der Waals téziseihez írt előszavában [7].

badtsági fokokkal kapcsolatos rendkívül nehéz matematikai probléma elegáns tárgyalását nyújtja, mind a speciális modellekre kapott elméleti, mind a kísérleti eredményekkel egyező jóslatokat ad.

A fázisátalakulások vizsgálatának alapvető és izgalmas kérdésköre az univerzalitási hipotézis, mely szerint a rendszer fázisátalakulásainál megfigyelhető kritikus exponensek a rendszer mikroszkopikus részleteitől nagyrészt függetlenek. Az előzőekben említett klasszikus átlagtérelméletek hiperuniverzális viselkedést jósolnak, miszerint a kritikus exponensek értéke nem függ a rendszer dimenziószámától és egyéb mikroszkopikus részletektől. Az átlagtérelmélet azonban csak négynél magasabb dimenzióban ad helyes eredményt [69]. A kritikus jelenségek modern elmélete szerint, - mely a renormálási csoport transzformációra épül - a rendszert jellemző exponensek a rendszer néhány jellemzőjétől függnnek, melyek a következők: a rendszer és a rendparaméter dimenziója, illetve a kölcsönhatás hatótávolsága. Azok a rendszerek, melyek fenti tulajdonságai megegyeznek, azonos exponensekkel rendelkeznek, azonos univerzalitási osztályba tartoznak.

Az alapvető tömbi kritikus viselkedés részletes, többirányú vizsgálata után előtérbe került a felületek, sarkok, élek, különböző rácshibák, röviden inhomogén rendszerekben megfigyelhető fázisátalakulások vizsgálata. Az inhomogén rendszerek kutatásának területén újabb impulzusokat adott a hagyományos szilárdtestfizikai elméleteknek ellentmondó kvázikristályos anyagok felfedezése [5], melyek lokálisan ötfogású szimmetriát mutatnak. A rohamléptekkel fejlődő kísérleti technika egy másik nagy eredménye az atomi vastagságú rétegek leválasztása párologtatási technikával [6]. Ezen technikával réteges aperiodikus szerkezetek előállítása, ezáltal behatóbb tanulmányozása vált lehetővé. A kísérleti eredmények intenzív elméleti kutatásokat indítottak be. A kvázikristályos, valamint a rétegesen aperiodikus anyagok a szokásostól eltérő szerkezettel rendelkeznek. Rövid távon vizsgálva a szerkezetet determinisztikus rend jellemzi, hosszú távon azonban rendezetlenség figyelhető meg. A rendet és rendezetlenséget ötvöző kettős jelleg teszi ezen szerkezeteket igazán érdekessé, mivel ilyen szerkezetű anyagokat vizsgálva lehetőség van a rend és rendezetlenség különböző fizikai jelenségekre gyakorolt hatásának mélyebb megértésére. A kristályos anyagokra kifejlesztett elméletek (például a translációs szim-

metriára épülő Bloch-tétel) ilyen rendszerekben érvényüket veszítik, ezek újrafogalmazása, módosítása alkalmazásuk előtt elkerülhetetlen.

Az azonos építőelemekből, cellákból periodikusan felépülő rendszerek fázisátalakulása a skálázási hipotézis szerint megegyezik a tiszta rendszer fázisátalakulásával. Rendezetlen, kvázikristályos, aperiodikus rendszerek esetén formálisan a cella mérete végtelen, ezért új típusú fázisátalakulásra is számítani lehet, hiszen a skálázási meggondolás ebben az esetben nem alkalmazható. A mintákba befagyott rendezetlenség néhány esetben a kritikus exponensek módosulásához vezethet. Ebben az esetben a Harris által megfogalmazott érveléssel lehet a perturbáció releváns-irreleváns jellegét meghatározni [13]. Felmerült a kérdés, hogy a kvázikristályos anyagok ugyanabba az univerzalitási osztályba tartoznak-e, mint a hasonló periodikus anyagok. Különböző kvázikristályos rendszerek tanulmányozása során próbálták megállapítani, hogy milyen típusú fázisátalakulás megy végbe ezekben, megváltozik-e a rendszer univerzalitási osztálya az ilyen típusú inhomogenitás hatására. Néhány eset, például a Penrose-rácson levő Ising-modell [14, 15, 16], a perkolációs-probléma [17, 18], illetve az önelkerülő bolyongás [19] viselkedése nem mutatott változást a tiszta rendszerhez képest. Számos más esetben, például a felületi durvulás jelenségénél az aperiodikus szerkezet nem univerzális kritikus viselkedést eredményezett [20, 21]. Hasonló nem univerzális viselkedést a rétegesen aperiodikus kétdimenziós Ising-modellben, erősen anizotróp határesetben is kimutattak [22, 23, 24, 25, 26, 27]. Itt a kötési paraméterek egy determinisztikus módon képzett aperiodikus sorozatot követtek.

Mi a közvetlen kapcsolat az aperiodikus sorozat szerkezete és a rendszer kritikus viselkedése között? Erre a kérdésre először Tracy talált választ [27], aki több különböző rétegesen aperiodikus kötési paraméter kiosztású, kétdimenziós Ising-modell fázisátalakulására gyakorolt hatását vizsgálva megállapította, hogy ha a kötési paraméterek fluktuációja állandó vagy korlátos, akkor a rendszer fázisátalakulása Onsager-típusú marad, ha azonban nem korlátos a fluktuáció, akkor megváltozik a kritikus viselkedés. Általános rendszer esetén Luck adta meg a választ [28], aki a rövid hatótávolságú kölcsönhatással bíró, rendezetlen rendszerekre vonatkozó Harris-kritériumot általánosította aperiodikusan modulált rendszerekre. A kritérium - melynek helyességét numerikus és analitikus

eredmények egyöntetűen támogatják - az aperiodikus sorozatot jellemző ω vándorlási exponensből, illetve a tiszta rendszer ν exponenséből képzett Φ 'crossover' exponens előjele alapján képes meghatározni, hogy az adott aperiodicitás a vizsgált rendszerben megváltoztatja-e a kritikus exponenseket. Ezen kritériumot alkalmazva egyszerűen magyarázhatóak az előbbi eredmények. A kritériumot az egytengelyű aperiodikus rendszerre alkalmazva megmagyarázhatóak a felületi durvulással kapcsolatos eredmények [29], melyek összhangban vannak a Luck-kritérium d -dimenziós anizotróp réteges rendszerekre vonatkozó változatával.

Rendezetlen rendszerek között a kétdimenziós Ising-modell speciális helyet foglal el, ugyanis ez a rendszer a Harris-kritérium marginális esete, ahol nem képes megjósolni a rendezetlen rendszer kritikus viselkedésének jellegét. Térelméleti és numerikus eredmények szerint a fázisátalakulás itt is a tiszta rendszer exponenseivel írható le, logaritmikus korrekciókkal kiegészítve [30, 31].

Dolgozatom alapvető célkitűzése az inhomogén rendszerek kritikus viselkedésének tanulmányozása. Vizsgálataim objektumai közt különböző inhomogén rendszerek szerepeltek, a kétdimenziós Ising-modell kötési paramétereiben megjelenő aperiodicitás hatásának vizsgálatával kezdődően, a véletlen ferromágneses kötésű Ising-modell felületi kritikus viselkedésének vizsgálatán át, a geometria inhomogenitás okozta sarokmenti kritikus viselkedésével bezárólag. Célunk a rétegesen aperiodikus Ising-modell kritikus összefüggésének analitikus meghatározása, mely a tervezett numerikus vizsgálatokhoz fontos ismeret. Ezen kritikus összefüggés ismeretében vizsgálható numerikusan a különböző aperiodikus sorozatokat követő réteges háromszögrácson értelmezett, kétdimenziós Ising-modell felületi kritikus viselkedése. Tanulmányozni tervezzük a kétdimenziós, véletlen ferromágneses kötésű Ising-modell felületi fázisátalakulását, amelyet eddig még senki nem vizsgált. Végül a geometriai inhomogenitást, a sarokmenti kritikus exponensek és a sarok nyílásszöge közti kapcsolatot tanulmányozzuk a kétdimenziós q -állapotú Potts-modell esetén.

A dolgozat négy fejezetre tagolódik. Ezen rövid bevezetést követő második fejezet első alfejezetében áttekintjük a statisztikus fizika fázisátalakulásokkal kapcsolatos általános eredményeit. Rövid fenomenológikus bevezetés után ismertetjük, hogy a szabadener-

gia szinguláris részének skálázásából hogyan következik a kritikus pontbeli skálázás. A Kadanoff-féle renormálási csoport transzformációt ismertetve megmutatjuk, hogyan következik az elméletből a szabadenergia skálázása, illetve hogyan magyarázható egyszerűen az univerzalitási osztályok léte. Ezek után bemutatjuk a konform térelmélet néhány aspektusát, például megmutatjuk, hogyan magyarázható meg az a tény, hogy csak bizonyos racionális értékeket vehetnek fel a kritikus exponensek. A **2.2** alfejezetben a kétdimenziós Ising-modell vizsgálatára alkalmazható néhány módszert mutatunk be, azokat, amelyeket később használunk: a duális transzformációt, a csillag-háromszög transzformációt, illetve a transzfermátrix technikát. A **2.3** alfejezetben néhány aperiodikus sorozatot mutatunk be, melyeket vizsgálataink során konkrétan fel is használunk.

A harmadik fejezetben közöljük az aperiodikus és rendezetlen Ising-moddellel kapcsolatos eredményeinket. Réteges szerkezetű, aperiodikus kötési struktúrát mutató, illetve véletlen ferromágneses kötésű, kétdimenziós Ising-modellen végzett számításainkat mutatjuk be. Végül a kétdimenziós Potts-modell sarokmenti kritikus viselkedésre vonatkozó eredményeinket ismertetjük.

A csillag-háromszög transzformáción alapuló numerikus módszerünkkel a felületi mágnesezettséget, korrelációs függvényt tanulmányoztuk numerikusan egzaktul. Háromszög-, hatszög- és diagonális rácsokra, rétegesen modulált kötési paraméterek mellett meghatároztuk analitikus és numerikus módszerekkel a rendszer kritikus pontját tetszőleges aperiodicitásra. Ezen eredmény - **3.1** alfejezet - ismerete alapvető volt minden további numerikus vizsgálatunkhoz. A diagonálisan réteges rács felületi mágnesezettségére olyan numerikus eredményeket kaptunk, melyek nagyon pontosan megfeleltethetőek az egydimenziós kvantum Ising-lánc esetén kapottakkal. Egzakt módon megmutatható a két rendszer szoros kapcsolata - **3.2** alfejezet. A diagonális rácson értelmezett Ising-modell felületi kritikus viselkedésére marginális típusú perturbációt jelentő sorozatok esetén azt találtuk, hogy a kritikus exponensek az inhomogenitási paraméter folytonos függvényei, és a rendszer a kritikus pont közelében anizotróp módon skálázódik. Ugyanilyen réteges rácson vizsgáltam az önhasználó szerkezetű hierarchikus perturbáció hatását a felületi kritikus viselkedésre. Mivel itt a Luck-kritérium közvetlenül nem alkalmazható, numeriku-

san vizsgáltam a kritikus viselkedést - **3.3** alfejezet, - itt marginális típusú viselkedést figyeltünk meg, folytonosan változó exponensekkel.

A **3.4** alfejezetben egy olyan rendszert tanulmányozunk, amely esetén a kutatók között még nem alakult ki teljes konszenzus a kritikus viselkedés jellegét illetően. A véletlen ferromágneses kötésű, kétdimenziós Ising-modell esetén a perturbáció a Harris kritérium szerint marginális hatású, mely azonban a ma elfogadott térelméleti jóslatok és numerikus eredmények szerint nem befolyásolja a kritikus viselkedést. Itt vizsgálati módszerként a korábban alkalmazott csillag-háromszög transzformációra épülő eljárás általánosított változatát használjuk. Eredményeink szerint a felületi kritikus viselkedés a rendezetlenség hatására csekély mértékben módosul, analóg módon a tömbi kritikus viselkedésre kapott eredményekkel. A módosult exponensek jól magyarázhatóak a tiszta rendszer exponensei mellett megjelenő logaritmikus korrekciók figyelembevételével.

A felületi exponensek értéke nemcsak a kötési paraméterekben megfigyelhető rendezetlenség hatására módosulhat, befolyásolhatja azt a 'felület nyílásszöge' is. A saroktranszfermátrix módszert alkalmazva meghatározzuk a kétdimenziós q -állapotú Potts-modell sarokmenti kritikus exponenseit több különböző saroknyílásszög esetén - **3.5** alfejezet. Nagypontosságú numerikus eredményeinket konform térelméleti jóslatokkal vetjük össze.

Az utolsó, **4.** fejezetben rövid áttekintést adunk a dolgozat eredményeiről, illetve a dolgozat témájához, eredményeihez szorosan kapcsolódó további problémákról, melyek megoldása jelenleg van folyamatban.

2. Fejezet

Statisztikus fizikai előkészítés

2.1 A fázisátalakulások statisztikus fizikai alapjai

2.1.1 Bevezetés

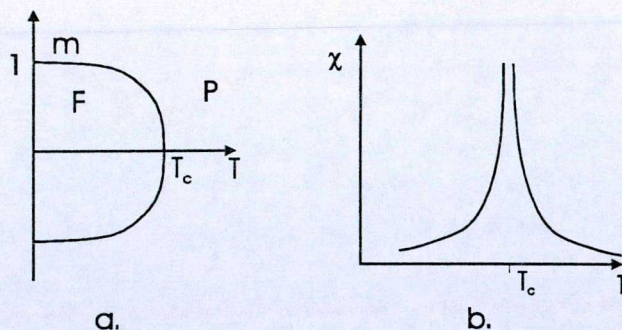
Az alábbiakban röviden bemutatjuk a mágneses anyagok fázisátalakulásainak alapfogalmait, az Ising-modellt, a skálázási jelenséget, az univerzalitási hipotézist, majd ezek elméleti keretét szolgáló renormálási csoportelméletet és konform térelméletet.

2.1.2 Fenomenológikus leírás

Egy rendszer termodinamikai értelemben vett fázisátalakulási pontjában a termodinamikai potenciál (például szabadenergia), vagy annak deriváltjának szingularitása, szakadása van. Ekkor a termodinamikai potenciál sorbafejthetőségére vonatkozó általános feltételezés nem teljesül [42], a fázisátalakulás során a rendszer valamilyen tulajdonsága ugrásszerűen élesen megváltozik. A leghétköznapiabb példa a fázisátalakulásra a folyadék-gáz fázisátalakulás, itt a folyadék és gáz fázis sűrűsége az, ami élesen különbözik a két fázisban egymástól [43, 44].

A mágneses anyagokban is megfigyelhető fázisátalakulás. Az egyszerű egytengelyű ferromágneses anyagok fázis diagramja [45] az 1. ábrán látható. A T_c kritikus hőmérséklet felett a mágnesezettség zérus (paramágneses fázis), T_c alatt a mágnesezettség véges (ferromágneses fázis), az anyagot alkotó mágneses momentumok rendeződésének következményeként. A kritikus pontban, T_c -ben a szuszeptibilitás szinguláris [44].

A fázisátalakulások osztályozása aszerint történik, hogy a termodinamikai potenciál hányadik deriváltjában figyelhető meg a szingularitás. Ha a termodinamikai potenciál első deriváltjában már megjelenik a szingularitás, akkor azt elsőrendű fázisátalakulásnak



2.1. ábra: Egytengelyű ferromágneses anyagok mágnesezettsége (a), illetve a szuszceptibilitása a kritikus pont közelében (b).

nevezzük. A második, illetve magasabb rendű deriváltak szingularitása esetén folytonos fázisátalakulásról szokás beszélni [48]. (Korábban Ehrenfest terminológiája volt használatos. Ő első-, másod-, harmadrendűnek akkor nevezte a fázisátalakulást, ha a termodinamikai potenciál első, második, harmadik deriváltjában van szakadás.) Folytonos fázisátalakulások során megfigyelhető jelenségeket kritikus jelenségeknek szokás nevezni. A folytonos fázisátalakulások általános jellemzője a rendszer szimmetriájának csökkenése, mely velejárója a rendezetlen állapotból rendezettbe történő átmenetnek. A rendszerben kialakuló rendezettséget az ún. rendparaméter jellemzi, mely lehet valós (például a mágnesezettség paramágneses-ferromágneses átalakulásnál), de lehet több komponensű fizikai mennyiség is.

Azért, hogy részletesen is megismerhessük a mágneses rendszerekben megfigyelhető kritikus jelenségeket, áttekintjük a legfontosabb statisztikus fizikai fogalmakat. Kanonikus leírást használva, az állapotösszeg mint a hőmérséklet és mágneses tér függvénye a

$$\mathcal{Z}(T, H) = \sum_r e^{-\beta E_r(T, H)} \quad (2.1)$$

összefüggéssel adott. A $\mathcal{Z}$ állapotösszezből képezhető minden termodinamikai mennyiség, így a rendszer szabadenergiája:

$$F = -kT \ln \mathcal{Z}, \quad (2.2)$$

a mágnesezettség és az állandó hőmérséklet melletti szuszceptibilitás:

$$M = - \left(\frac{\partial F}{\partial H} \right)_T \rightarrow \chi_T = \left(\frac{\partial M}{\partial H} \right)_T, \quad (2.3)$$

az entrópia és az állandó mágnesezettség melletti fajhő:

$$S = - \left(\frac{\partial F}{\partial T} \right)_T = \frac{U - F}{T} \rightarrow C_M = T \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_T. \quad (2.4)$$

2.1.3 Mikroszkopikus leírás

A kritikus jelenségek mélyebb megismeréséhez vizsgáljuk meg, milyen következménye van a mágneses fázisátalakulásnál látott szuszeptibilitás divergenciájának. A ferromágneses anyagokat a mikroszkopikus elmélet szerint mágneses momentumok, spinek sokasága alkotja, a spinek közötti kölcsönhatás legegyszerűbb formájára az Ising-modell nyújt példát.

2.1.3.1 Ising-modell

Az Ising-modell az anizotróp, egytengelyű mágneses anyagok modelljéül szolgál [48]. Az egyik legegyszerűbb statisztikus fizikai modell, mely népszerűségét nemcsak egyszerűségének köszönheti, hanem annak is, hogy először ebben a modellben írtak le analitikusan fázisátalakulást [72]. Ising-spinnek nevezzük azt a spint, amelynek két egymással ellentétes iránya, mágneses momentuma lehet: $\sigma = \pm 1$. Az Ising-spinek, hasonlóan az anyagban megtalálható mágneses momentumokhoz, egymással kölcsönhatnak. Két Ising-spin kölcsönhatási energiája: $-J\sigma_1\sigma_2$. Ha $J > 0$ ferromágneses, ha $J < 0$ anti-ferromágneses a kölcsönhatás, az első esetben alacsony hőmérsékleten a spinek azonos, a második esetben a spinek ellentétes beállása a kedvező. Külső mágneses tér jelenléte esetén minden spin $-\hbar\sigma_j$ mágneses energiával bír, ekkor a rendszer Hamilton-operátora:

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j - \hbar \sum_j \sigma_j. \quad (2.5)$$

Első szomszéd kölcsönhatás esetén csak a közvetlen rácsszomszédokra kell az első tagban összegezni, ezt a $\langle i, j \rangle$ módon jelöljük. A rendszer fizikai viselkedését kanonikus közelítésben a partíciós függvény határozza meg, amely $N-1$ Ising spint tartalmazó periodikus lánc esetén:

$$\mathcal{Z} = \sum_{\{\sigma\}} \exp[\beta J(\sigma_0\sigma_1 + \sigma_1\sigma_2 + \dots + \sigma_{N-1}\sigma_0) + \beta \hbar(\sigma_0 + \dots + \sigma_{N-1})] = \text{Tr} e^{-\beta H(\sigma)}, \quad (2.6)$$

ahol $\sigma_N = \sigma_0$.

Az Ising-modellnek a mágnesességen kívül más jelentése is van. A modell egyben az úgynevezett rácsgáz fizikai tulajdonságait adja vissza. Ennek keretein belül a gázrészecskék a rácspontok által meghatározott helyeket foglalhatják el. Ha az i -edik rácspont a gáz által be van töltve, akkor a "spin" értéke $\sigma_i = 1$, amennyiben nincs betöltve $\sigma_i = -1$. A rácson

található molekulák száma: $N = \sum_i \frac{1}{2}(\sigma_i + 1)$. További lehetséges alkalmazása a modellnek a bináris ötvözetek [98], illetve a folyadék-gáz fázisátalakulás területén lehetséges [44].

A valóságos mágnesek döntő többségében, ha van is anizotrópia, az nem annyira szélsőséges, hogy a spinek beállása csak egy irányba lenne lehetséges. Ezért a természetben megtalálható mágneses anyagok modellezésére alkalmasabb az X-Y-modell [49], illetve a Heisenberg-modell [50]. Az előbbiben a spinek beállása az X-Y síkra korlátozott, így a rendszer Hamilton-operátora:

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} [\sigma_i^x \sigma_j^x + \sigma_i^y \sigma_j^y]. \quad (2.7)$$

A Heisenberg-modell esetén a spin iránya tetszőleges a térben, így a Hamilton-operátor a spinek z komponenseinek szorzatát is tartalmazza.

Az Ising-modell egy másik általánosítási lehetősége a Potts-modellhez vezet el [51]. Két szomszédos spin szorzatát írjuk a $\sigma_i \sigma_j = 2\delta_{\sigma_i \sigma_j} - 1$ alakba, így a Hamilton-operátor konstansoktól eltekintve $\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \delta_{\sigma_i, \sigma_j}$. Ha a spineknek nemcsak két, hanem $q = 3, 4, \dots$ beállási iránya is lehetséges, akkor beszélünk q -állapotú Potts-modellről. Két szomszédos spin kötési energiája $-J$, ha azonos spinállásban vannak, különben 0. A q -állapotú Potts-modellnek alacsony hőmérsékleten q darab egyenértékű alapállapota van, melyek a hőmérséklet növekedésével paramágneses állapotba mennek át. Kétdimenzióban az átmenet $q \leq 4$ esetén folytonos, míg $q > 4$ esetén elsőrendű [90].

2.1.3.2 Korrelációs függvény, korrelációs hossz

A spinek viselkedésének jellemzésére használatos egyik mennyiség a spin-spin korrelációs függvény. Legyen az $\bar{r}_i$ helyen a spin értéke σ_i , az $\bar{r}_j$ helyen σ_j . A két spin közötti korrelációt (ettől a ponttól kezdve Ising-spineket értünk spinek alatt, de más esetben is megismételhető a gondolatmenet) a

$$G(\bar{r}_i, \bar{r}_j) = \langle (\sigma_i - \langle \sigma_i \rangle)(\sigma_j - \langle \sigma_j \rangle) \rangle \quad (2.8)$$

korrelációs függvény írja le (a $\langle . \rangle$ zárójelek sokaság átlagot jelölnek). Gyakran előforduló eset, hogy a rendszer translációs-szimmetrikus, ekkor $\langle \sigma_i \rangle = \langle \sigma_j \rangle$, tehát a korrelációs függvény alakja:

$$G(\bar{r}_i - \bar{r}_j) = G_{ij} = \langle \sigma_i \sigma_j \rangle - \langle \sigma_i \rangle^2. \quad (2.9)$$

Spinrendszerek esetén a korrelációs függvény alakja :

$$G(r) \sim r^{-\tau} \exp(-r/\xi), \quad (2.10)$$

τ a lecsengési exponens, ξ a korrelációs hossz, amely azt a tipikus hosszúságot méri, amelyen belül a spinek még korrelálnak számítanak [52, 53].

A mágnesezettségnek a mágneses tértől való függését a mágnesezettség mágneses tér szerinti első deriváltja, a szuszeptibilitás jellemzi. A szuszeptibilitás ugyanakkor

$$\chi_T = kT \frac{\partial^2 \ln \mathcal{Z}}{\partial^2 H}. \quad (2.11)$$

Ezt összevetve a (2.3) egyenlettel következik, hogy: $\Delta M = \langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2 = kT \chi_T$. A fenti különbség viszont a korrelációs függvények összege, hiszen

$$\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2 = \langle \sum_i (\sigma_i - \langle \sigma_i \rangle) \sum_j (\sigma_j - \langle \sigma_j \rangle) \rangle = \sum_{ij} G_{ij}. \quad (2.12)$$

Transzlációs-szimmetrikus rendszer esetén: $\sum_{i,j} G_{ij} = N G_{i0} \sim N \int G(r) r^{d-1} dr$, vagyis a szuszeptibilitás:

$$\chi_T \sim N \int G(r) r^{d-1} dr. \quad (2.13)$$

Korábban megállapítottuk, hogy $\chi \rightarrow \infty$ a kritikus pontban. E tényből és az előző egyenletből következik, hogy a korrelációs függvény alakja a kritikus pontban:

$$G(r) \sim r^{-\tau}, \quad (2.14)$$

vagyis a korrelációs hossznak végtelennek kell lennie. Ezekután állíthatjuk, hogy a szuszeptibilitás divergenciája a korrelációs hossz divergenciájával jár együtt, vagyis a fázisátalakulási pontban a spin korrelációk minden határon túl nőnek. (Hogy mégsem veszi fel a mágnesezettség a lehetséges maximális értéket, az annak a következménye, hogy az egymással korrelációban lévő spinek alkotta végtelen nagy spinklaszter ellentétes beállású végtelen nagy spinklasztert tartalmaz és így tovább, végeredményben a két lehetséges spinállásban azonos számú spin lesz.)

A fentiekhez hasonlóan megállapítható a rendparaméter (mágnesezettség) fluktuációjának divergenciája, illetve a fajhő divergenciája, mely nemcsak a mágneses, hanem általában a folytonos fázisátalakulások jellemzője.

2.1. táblázat: A kritikus exponensek definíciója

α	a fajhő hőmérsékleti exponense	$c \sim t ^{-\alpha}$
β	a mágnesezettség hőmérsékleti exponense	$m \sim t ^\beta$
δ	a mágnesezettség H-tér exponense	$m \sim H^{1/\delta}$
γ	a szuszceptibilás hőmérsékleti exponense	$\chi \sim t ^{-\gamma}$
ν	a korrelációs hossz hőmérsékleti exponense	$\xi \sim t ^{-\nu}$
η	a korrelációs függvény lecsengési exponense	$G(r) \sim r^{-d+2-\eta}$

2.1.4 Skálázási invariancia, kritikus exponensek

Az ismert elméletek és kísérleti eredmények¹ szerint a kritikus pont körül hatványfüggvényyszerűen viselkednek a különböző fizikai mennyiségek [54], hasonlóan, mint a korábban látott szuszceptibilitás, a fajhő divergáló viselkedése, illetve a rendparaméter (mágnesezettség) viselkedése a kritikus pont közvetlen környezetében. A hatványfüggvényyszerű viselkedést leíró exponenszt nevezzük kritikus exponensnek. Példaként tekintsünk egy F fizikai mennyiség viselkedését a kritikus pont környezetében, ahol a redukált hőmérséklet: $t = \frac{T-T_c}{T_c}$; a kritikus ponttól mért relatív távolságot méri. Az F fizikai mennyiség kritikus exponense ϕ , ha

$$\phi = \lim_{t \rightarrow 0} \frac{\ln |F|}{\ln |t|}. \quad (2.15)$$

Az exponens vezető rendben írja le a fizikai mennyiség viselkedését, elegendően kicsi $|t|$ esetén, írhatjuk F jellemzésére:

$$F(t) \sim A |t|^\phi. \quad (2.16)$$

Külön kell beszélni a kritikus hőmérséklet alatti, illetve feletti exponensekről. A kísérleti, illetve analitikus számolások eredményei együtt támogatják azt a feltevést, hogy ezen exponensek értéke megegyezik, az A konstansok különbözhetnek. Az 2.1. táblázat 6 mennyiségének exponensével szokás jellemezni egy-egy univerzalitási osztályt. A kritikus exponensek értékeit a kétdimenziós Ising-modell és Potts-modell esetén 2.2. táblázat tartalmazza.

A fenti hat exponens egymástól nem teljesen független, az úgynevezett skálatörvények kapcsolják össze őket. Az 2.3. táblázat négy skálatörvényt tartalmaz, az elfogadott nevükkel [55]. Így a hat exponens közül valójában két exponens (általában ν, η) elegendő

¹A skálázási viselkedés nemcsak egyszerű természeti jelenségeknél (például a polimerek különböző körülmények közötti viselkedésében, lsd. [138], összefoglaló tanulmányok:[12, 65]), de például tőzsdei folyamatoknál [122], komplex gazdasági szervezetekben [123], a városok növekedési tulajdonságaiiban [124], sőt a tudományos folyóiratokban citációs adataiban is megfigyelhető [125].

2.2. táblázat: Az Ising-modell és Potts-modell kritikus exponensei kétdimenzióban

exponens	Ising	Potts(q=3)	Potts(q=4)
β	1/8	1/9	1/12
α	0	1/3	2/3
γ	7/4	13/9	7/6
δ	15	14	15
ν	1	5/6	2/3
η	1/4	4/15	1/2

2.3. táblázat: Az exponens összefüggések

Rushbrooke-törvény	$\alpha + 2\beta + \gamma = 2$
Widom-törvény	$\gamma = \beta(\delta - 1)$
Fisher-törvény	$\gamma = \nu(2 - \eta)$
Josephson-törvény	$\nu d = 2 - \alpha$

az univerzalitási osztály jellemzésére, az összes exponens megadására.

A kritikus exponensek értéke független a rendszer különböző paramétereitől, a mikroszkopikus részletektől, csak néhány lényeges paramétertől függ, melyek a következők: a rendszert leíró rendparaméter dimenziószáma, a rendszer dimenziószáma, illetve a kölcsönhatás hatótávolsága. Ezt a jelenséget szokás röviden univerzalitásnak nevezni. Az univerzalitási hipotézis szerint azonos kritikus exponensekkel rendelkeznek a legkülönbözőbb mikroszkopikus tulajdonsággal rendelkező rendszerek, ha a fent említett néhány lényeges paraméterük megegyezik [56, 57].

Tekintsünk egy végtelen mágneses rendszert. A rendszer egy részecskéjére jutó szabadenergia szinguláris (a fázisátalakulás jelenségéhez kapcsolódó) része a térfogat belsejében a hőmérséklet és a mágneses tér függvénye. A rendszer l lineáris méretét egy $b > 1$ faktossal újraszkalázva, úgy, hogy $l \rightarrow l/b$, a szabadenergia az alábbi módon viselkedik [58]:

$$f(t, h) = b^{-d} f(b^{\frac{1}{\nu}} t, b^{d-x} h). \quad (2.17)$$

A mágnesezettség a szabadenergiából kapható meg a mágneses tér szerint differenciálva: $m(t, h) = b^{-x} m(b^{\frac{1}{\nu}} t, b^{d-x} h)$. Ezen összefüggésből $b = t^{-\nu}$ választással, feltételezve, hogy $m \sim |t|^\beta$ adódik a

$$\beta = \nu x \quad (2.18)$$

összefüggés. A mágnesezettség mágneses tér szerinti deriváltja a mágneses szuszcepti-

bilitás:

$$\chi(t, h) = b^{d-2x} \chi(b_\nu^{\frac{1}{\nu}} t, b^{d-x} h), \quad (2.19)$$

ahonnan ismét $b = t^{-\nu}$ választással, $\chi \sim |t|^{-\gamma}$ viselkedést feltételezve adódik

$$\gamma = \nu(d - 2x). \quad (2.20)$$

A mágnesezettség mellett a másik fizikai mennyiség, amelyet vizsgálni fogunk, a korrelációs függvény. A korrelációs függvény a szabadenergia mágneses tér szerinti második funkcionálderiváltja:

$$G(r, t) \equiv \langle m(0)m(r) \rangle = \frac{\delta^2 F}{\delta h(0)\delta h(r)}. \quad (2.21)$$

E definícióból következik a korrelációs függvény skálázása:

$$G(r, t) = b^{-2x} G\left(\frac{r}{b}, b_\nu^{\frac{1}{\nu}} t\right). \quad (2.22)$$

A kritikus pontban

$$G(r, t = 0) \sim r^{-2x}, \quad (2.23)$$

vagyis $2x = d - 2 + \eta$. Ezt összevetve a (2.20) egyenlettel megkapjuk a Fisher-törvényt, 2.3. táblázat. A kritikus ponttól távol a korrelációs függvény exponenciális lecsengést mutat, a lecsengés sebessége határozza meg a korrelációs hosszt $G(r, t) \sim r^{-2x} \exp(r/\xi)$.

2.1.5 Felületi kritikus viselkedés

A fázisátalakulásokat vizsgáló elméleti számolások nagyrészt végtelen, ideális kristályokra vonatkoznak, hiszen az ilyen rendszerek magasabb szimmetriája az elméleti megközelítést lényegesen megkönnyíti. A kísérletek azonban véges méretű mintákon folynak, ezért fontos a felület által okozott hatások figyelembevétele. A rendszert alkotó N részecske nagyságrendileg $N^{\frac{1}{d}}$ része a felülethez közel helyezkedik el. Igazán nagy N esetében a részecskéknek ez a hányada elhanyagolható. Azonban egy másodrendű fázisátalakulási pont közelében - ahol a korrelációs hossz és a rendparaméter fluktuációi a végtelenbe tartanak - a felület jelenléte fontos lehet. A véges méret okozta effektusok a rendszer belsejében a kritikus hőmérséklet eltolódását, a kritikus szingularitások lekerekedését, véges méret effektusokat okoznak. A felületi mágneses jelenségekre vonatkozó Gingzburg-Landau-féle renormálási csoportelmélet szerint négy különböző osztályt lehet megkülönböztetni a rendszerben megfigyelhető fázisátalakulási hőmérséklet, illetve extrapolációs

hossz értékeit figyelembevéve. Ezen típusok: ordinárius, speciális, felületi és extraordinárius [59, 60].

A felület az egyik legegyszerűbb inhomogenitási forma (a felületi részecskéknek egy irányból nincs kölcsönható szomszédja), itt a fizikai mennyiségek különböznek a rendszer belsejében lévő tömbi (bulk) fizikai mennyiségektől [59, 60]. A felület által létrehozott translációinvariancia sérülés hatására a kritikus viselkedés nemcsak közvetlenül a felületen, hanem egy felületi rétegben is módosul, melynek szélessége a korrelációs hosszal összemérhető. Például a szabadenergia felületi járuléka, vagy a mágnesezettség más a felületen, mint a tömbben. Ezen jelenség következménye az, hogy a felületi kritikus exponensek $(\alpha_f, \beta_f \dots)$ lényegesen különböznek a tömbi $(\alpha, \beta \dots)$ exponensektől [59, 60].

Tekintsünk egy végtelen mágneses rendszert, egy felülettel, mely $(d-1)$ dimenziós. A rendszerben az egy részecskére jutó szabadenergia vagy szabadenergiasűrűség természetesen más a térfogat belsejében és más a felületen. A szabadenergia felületi járulékának skálázási viselkedése hasonló a térfogati járulékhoz, de a kritikus exponensek különbözőek:

$$f_f(t, h_f) = b^{-(d-1)} f_f(b^{\frac{1}{\nu_f}} t, b^{d-1-x_f} h_f). \quad (2.24)$$

(Itt a h_f a felületi mágneses tér erősségét jelzi.) A szabadenergia skálázási viselkedéséből a mágnesezettség skálázása is meghatározható hasonlóan, mint a térfogat belsejében, így adódik az exponensek közötti összefüggés:

$$\beta_f = x_f \nu_f. \quad (2.25)$$

A szabadenergia következő deriváltjára a mágneses szuszceptibilitásra a tömbivel teljesen analóg módon írhatjuk:

$$\gamma_f = \nu_f(d-1-2x_f). \quad (2.26)$$

A kritikus pontban a korrelációs függvény a rendszer belsejében a $G(r, t=0) \sim r^{-2x}$ összefüggést követi. A felülettel párhuzamos irányban, vagyis felületi spinek korrelációját vizsgálva, a fenti skálázás alakja hasonló marad, de egyszerűen megmutatható, hogy a tömbi exponens helyett a felületi exponens jelenik meg:

$$G_{\parallel}(r) \sim r^{-2x_f}. \quad (2.27)$$

Ha csak az egyik spin felületi, a másik attól a felületre merőleges irányban a rendszer belsejében van, akkor a skálázást leíró exponens a felületi és tömbi exponens kombinációja:

$$G_{\perp}(r) \sim r^{-(x+x_f)}. \quad (2.28)$$

2.4. táblázat: A kétdimenziós q -állapotú Potts-modell térfogati és felületi exponensei

$q =$	1	2	3	4
$\beta =$	5/36	1/8	1/3	1/12
$\beta_f =$	4/9	1/2	5/9	2/3

Összességében megállapíthatjuk, hogy a felületi kritikus viselkedést más exponensekkel kell leírni, mint a tömbi viselkedést. A mágnesezettség (rendparaméter) exponense kétdimenziós Potts-modell esetén összevethető a térfogatban, illetve a felületen (2.4. táblázat), q minden értéke mellett különbözik a két exponens. További részletek a felület fázisátalakulásra gyakorolt hatásáról a következő helyeken találhatóak: [58, 59, 60].

2.1.6 Renormálási csoportelmélet

A skálázási viselkedés, illetve az univerzalitási hipotézis általában jól megmagyarázható a renormálási csoportelmélet keretein belül [61, 62, 63, 64, 66]. A renormálási transzformáció célja a rendszer szabadsági fokainak csökkentése, anélkül, hogy a rendszer lényeges tulajdonságait megváltoztatnánk. A kritikus pont közelében a korrelációs hossz végtelenbe tart, itt a hosszútávú fluktuációk mellett a rövidtávúak elhanyagolhatóak, ezért a rövidtávú szabadsági fokokat egybevonhatjuk, együtt kezelhetjük, lényegesen csökkentve ezáltal a szabadsági fokok számát. A transzformációt iteratív módon kezelve, feltételezve a transzformáció fixpontjának létét, belátható, hogy azon rendszerek, melyek Hamilton-operátorai csak irreleváns változóiban különböznek, azonos fixponttal rendelkeznek, tehát azonos kritikus exponensekkel skáláznak.

A következőekben az általánosan is használható Kadanoff-féle blokk-spin renormálási transzformációt az Ising-spin rendszeren mutatjuk be. Tekintsünk egy d dimenziós végtelen köbös rácsot, melynek minden rácspontján ($\vec{r}_i$) egy klasszikus spin ül (σ_i), ennek lehetséges értéke ± 1 . A spinek között ható homogén kölcsönhatás a $\bar{K}$ paraméterekkel jellemezhető. Jelöljük ki rácspontokat egymástól la távolságra az a ráczállandójú rácson, amelyek így szintén egy d dimenziós, az eredetihez teljesen hasonló, $a' = la$ ráczállandójú köbös rácsot alkotnak. Az egyes kijelölt rácspontokhoz tartozó spinek értéke legyen ± 1 , annak megfelelően, hogy a kijelölt spinhez legközelebb eső l^d darab spin közül a többség milyen értékű. Kadanoff szerint létezik egy olyan Hamilton-operátor, amely az eredetivel azonos szerkezetű. A kapott új rács spinjei közt ható kölcsönhatás $\bar{K}'$ paraméterekkel jellemezhető, melyek értékeit azt feltételezve lehet meghatározni, hogy az eredeti és az

új blokk-spin rendszer állapotösszege megegyezik. Általános esetben egy elsőszomszéd kölcsönhatásokat tartalmazó rendszerben a blokk-spin transzformáció után távolabbi kölcsönhatások megjelenésére is számítani kell. Az elmélet alapvető feltételezése az, hogy akárhányszor ismétlődik a transzformáció, a domináló kölcsönhatások rövid hatótávolságúak maradnak, a rendszer Hamilton-operátorának szerkezete változatlan marad.

Ezután újraskálázzuk a távolságot, illetve az új spinek közti távolságot választjuk hosszegységnek. Az új blokk-spin rendszer és a régi rendszer állapotösszege megegyezik, tehát a két rendszer szabadenergiája megegyezik. A spinek száma eközben b^d részére csökken, tehát az egy spinre jutó szabadenergia b^d -szeresére nő. Ebből a transzformációs viselkedésből kövkezik a fizikai mennyiségek skálázása, például a szabadenergia skálázása (2.17-2.24).

Ha a kritikus ponttól távoli állapotban volt az eredeti rendszer, akárhányszor nem ismételtethetjük meg a transzformációt, mivel az eredetileg véges korrelációs hossz minden lépésben $1/l$ arányban csökken, így néhány transzformáció után ennek nagysága már nem lehet nagyobb a szabadsági fokok legkisebb jellemző távolságánál. Ekkor a transzformációs sorozatot abba kell hagyni, hogy a rendszer lényeges tulajdonságait ne változtassuk meg. A kritikus ponthoz közelítve a korrelációs hossz egyre nagyobb, végtelenbe tart. Ha a kritikus pontban végezzük a fenti transzformációt, a hosszak újraskálázásánál a korrelációs hossz is $1/l$ arányban csökken, de mivel végtelen volt, az is marad, vagyis a korrelációs hossz skálainvariáns mennyiség a kritikus pontban. Ha éppen a kritikus pontból indulunk ki eredetileg, akkor a transzformáció akárhányszori alkalmazásával sem változnak meg a rendszert jellemző $\bar{K}$ paraméterek, matematikailag ez megfelel annak, hogy a $\bar{K}$ paraméterek sokszori transzformáció után egy olyan $\bar{K}^*$ értéket vesznek fel, amely fixpontja a transzformációnak, abból a transzformáció nem vezethet ki.

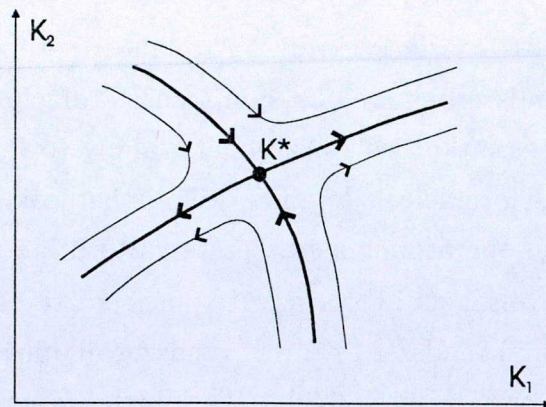
A fixponttól nem túl távoli pontban igaz $\bar{K}$ tetszőleges komponensére:

$$\bar{K}_\alpha = \bar{K}_\alpha^* + h_\alpha \bar{e}_\alpha. \quad (2.29)$$

A transzformáció után a paraméterek értéke $\bar{K}' = \mathcal{R}(\bar{K})$, mely paraméterekre:

$$\bar{K}'_\alpha = \bar{K}_\alpha^* + h'_\alpha \bar{e}_\alpha. \quad (2.30)$$

A transzformáció során a kritikus ponttól mért távolságot a h_α paraméter méri. Ennek megváltozását (diagonizált alakban) a b_β paraméterekkel írhatjuk le: $h'_\beta = b_\beta h_\beta$. Defináljuk az y_β exponenst, amely az l kinormált távolság és a b_β paraméterek közti



2.2. ábra: Egy kétdimenziós példa a renormálásra. Az ábrán nyomon követhető a rendszert jellemző K kötési paraméterek renormálás során történő megváltozása a K^* fixpont környékén.

kapcsolatot írja le:

$$b_\beta = l^{y_\beta}. \quad (2.31)$$

A renormálás n -szeri alkalmazásával a kritikus ponttól mért távolságra igaz $h'_\beta = (l^{y_\beta})^n h_\beta$. Az y_β érték mutatja meg a h_β paraméter fontosságát a rendszerre nézve. Ha $y_\beta > 0$, akkor a transzformációt alkalmazva a h_β értéke minden határon túl nő, a h_β változót releváns paraméternek nevezzük. Ha $y_\beta < 0$, akkor a h_β értéke a transzformáció alkalmazásával 0-ba tart, a h_β kezdeti értékétől függetlenül. Ez a változó irreleváns típusú. Ha $y_\beta = 0$, akkor a kezdeti h_β értéke nem változik meg, marginális típusú a h_β változó. A mágneses rendszereknél releváns típusú változó például a redukált hőmérséklet, vagy a külső mágneses tér. Irreleváns típusú változó a másod-, harmad- stb. szomszéd kölcsönhatások értéke. Azok a rendszerek, melyek csak irreleváns típusú változóiban különböznek egymástól, azonos fixponttal, azonos kritikus exponensekkel rendelkeznek, azonos univerzalitási osztályba tartoznak.

2.1.7 Konforminvariancia

A fázisátalakulások kutatása során sokáig hiányzott a lehetséges univerzalitási osztályok szisztematikus áttekintése, az exponensek elmélete. Egy olyan elmélet, amely például azt a tényt magyarázza, hogy majdnem minden megoldható kétdimenziós rendszer exponense egyszerű racionális szám. Végül is a konforminvariancia vált az exponenseket rendező elméletté. A 1970-es években részecskefizikai kutatásokban alkalmazták az elméletet. Ekkor derült ki, hogy a konforminvariancia a fázisátalakulások fizikájában is szerepet

játszhat [67, 68, 69, 70], és azóta számos új eredmény született alkalmazásával a statisztikus fizikában [71].

A konforminvariancia közelebbi megértésének céljából vegyünk egy kétdimenziós, végtelen, izotróp ferromágnest. Az egyszerűség kedvéért legyen Ising-típusú, vagyis a mágneses momentumoknak van egy kitüntetett iránya és a rendparaméter skalár. A kritikus pontban a spinek (a spin mágneses momentumát itt a későbbi általánosítás miatt $\Phi(\mathbf{r})$ jelöljük) korrelációs függvényének alakja nagy távolságok esetén:

$$\langle \Phi(\mathbf{r}_1)\Phi(\mathbf{r}_2) \rangle = a|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|^{-\eta}, \quad (2.32)$$

itt a konstans, $\eta = 2x$ a korrelációs függvényhez tartozó exponens. Mi történik konform transzformációnál? Transzlációnál vagy rotációnál nem változik meg ez a függvény, mivel izotróp és homogén a rendszer. Nyújtásnál ($\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{r}' = \lambda^{-1}\mathbf{r}$) csupán egy faktorial szorozódik meg a függvény: λ^{-2x} , ami kiemelhető a függvény elé:

$$\langle \Phi(\mathbf{r}_1)\Phi(\mathbf{r}_2) \rangle = \lambda^{-2x} \langle \Phi(\lambda\mathbf{r}_1)\Phi(\lambda\mathbf{r}_2) \rangle. \quad (2.33)$$

Még érdekesebb az, ami az R sugarú körre való tükrözésnél ($r \rightarrow r' = rR^2/r^2$) történik. Ennél a transzformációnál a hosszúságok helyről-helyre különbözően változnak meg. Mivel $|d\mathbf{r}'| = \lambda^{-1}(\mathbf{r}) |d\mathbf{r}|$, ezért:

$$\langle \Phi(\mathbf{r}_1)\Phi(\mathbf{r}_2) \rangle = \lambda(\mathbf{r}_1)^{-x}\lambda(\mathbf{r}_2)^{-x'} \langle \Phi(\lambda\mathbf{r}_1)\Phi(\lambda\mathbf{r}_2) \rangle. \quad (2.34)$$

Tehát ebben az esetben minden pont behozza a saját skálafaktorát, míg a korábbi esetben a nyújtásnál csak egy skálafaktor volt. Ugyanakkor a nyújtás esetét is magában foglalja a (2.34) egyenlet. Sejtethető, hogy a magasabbrendű korrelációs függvények, illetve más fizikai mennyiségek is, mint például az energiasűrűség függvény, a kritikus pontban a (2.34) egyenletnek megfelelően transzformálódnak. Ha valóban ez az eset áll fenn, akkor beszélünk konforminvarianciáról.

Kétdimenzióban a konformális transzformációk gazdagsága sokkal többet tesz lehetővé, mint magasabb dimenziókban. Néhány esetben megfelelő transzformációkkal megkaphatunk egy bizonyos geometriának megfelelő korrelációs függvényt egy másik geometriájú rendszer korrelációs függvényéből. Például a $z \rightarrow z' = \left(\frac{L}{2\pi}\right) \ln(z)$ leképezés [73] a végtelen nagy (z) síkot egy csíkra $0 \leq \text{Im}(z') \leq L$ képezi le. Megmutatható a (2.34) egyenletből, hogy itt a korrelációs függvény exponenciális lecsengése $\xi = L/\pi\eta$ hosszúsággal írható le, tehát a lecsengési exponens az eredeti rendszer η exponense határozza meg. Hasonló jelenséget már korábban néhány speciális rendszerre vonatkozó numerikus számolás során észrevettek. Tulajdonképpen ezen kapcsolat megjósolása jelentette az első sikert a konforminvariancia számára. Ezen η exponens kiszámolása már 10–20 spin széles csík esetén

is lehetséges, az úgynevezett transzfermátrix² segítségével. Ebből nemcsak az exponensek, hanem minden termodinamikai mennyiség, így a korrelációs függvény is meghatározható. Ezen eredmények néhány megoldható modellnél, mint például az Ising-modellnél analitikus eredményekkel összevethetőek és teljes megegyezést mutatnak. A konform transzformációk elméletének másik jóslata a véges rendszerek mágnesezettségének profiljára vonatkozik [76, 77], illetve a sarkok mágnesezettségének viselkedésére véges rendszerekben [74, 75]. A fenti példák bár nagyon érdekesek és hasznosak, de a konforminvariancia elméletének egyszerűbb következményei közé tartoznak. Például az exponensek konkrét értékeiről ezek a példák semmit nem mondanak.

Az alábbiakban röviden megmagyarázzuk, miért csak bizonyos racionális értékeket vehetnek fel a statisztikus fizikai rendszerek kritikus exponensei. A konformális transzformációk kvantum generátoraira L_n teljesülnek az alábbi felcserélési relációk:

$$\begin{aligned} [L_n, L_m] &= (n - m)L_{n+m} + \frac{c}{12}n(n^2 - 1)\delta_{n+m,0} \\ [L_n, \bar{L}_m] &= 0 \\ [\bar{L}_n, \bar{L}_m] &= (n - m)\bar{L}_{n+m} + \frac{c}{12}n(n^2 - 1)\delta_{n+m,0} \end{aligned} \quad (2.35)$$

az $-\infty < n, m < \infty$ indexek esetén. Ezek a generátorok alkotják az úgynevezett Virasoro algebrát [55]. Statisztikus fizikai rendszer esetében leginkább az úgynevezett unitér ábrázolások a fontosak, amelyeknél a felcserélési szabályban fellépő konstans $c \geq 0$. Ezek esetében megmutatták, hogy a $c > 1$ tartományon tetszőleges, míg a $0 < c < 1$ tartományban c csak diszkrét értékeket vehet fel, mégpedig csak

$$c = 1 - \frac{6}{m(m+1)}; \quad \text{ahol } m = 3, 4, 5, \dots \quad (2.36)$$

értékeket. A második tartomány ($0 < c < 1$) foglalja magába a legtöbb statisztikus fizika által vizsgált modellt. Egy bizonyos rögzített c érték (centrális töltés) esetében a kritikus exponens alakja $x = h + \bar{h}$, itt $h, \bar{h}$ skálázási dimenziók (ismét csak diszkrét értéket vehetnek fel), melyek a Kac-formula által rögzítettek:

$$h_{p,q} = \frac{[(m+1)p - mq]^2 - 1}{4m(m+1)}, \quad \text{ahol } 1 \leq q \leq p \leq m-1. \quad (2.37)$$

Tehát megállapíthatjuk, hogy a kritikus exponensek ebben a c tartományban csak diszkrét, racionális értéket vehetnek fel, illetve hogy végtelen sok univerzalitási osztály van.

²A konforminvariancia elmélete több megállapítást tesz erre a mátrixra, például rögzíti a legnagyobb sajátértékeit.

Illusztrációképpen vizsgáljuk meg az $m = 3$ esetet, m legkisebb értékét, amely $c = 1/2$ -nél adódik. Az $\eta = 2x$ exponens lehetséges értékei $0; 2; 0.25$. Az első a triviális exponens, második az energiasűrűség exponense, az utolsó a spinkorrelációk exponense az Ising-modellben. Más megoldható modellt is lehet így utólag azonosítani. Például az $m = 4$ esetnek a trikritikus Ising-modell, az $m=5$ a $q = 3$ Potts-modellnek felel meg. A fordított út is járható, c adott értékeiből is meg lehet határozni az exponenseket egy tetszőleges rendszer esetén a fent vázolt séma szerint, c konstansnak ugyanis egyszerű fizikai jelentése is van: az L szélességű csík rendszer esetén a szabadenergia viselkedése: $F \sim \frac{c}{L}$, tehát a csíkon végzett számolások segítségével a c értéke meghatározható.

Az itt leírt néhány gondolat természetesen nem ad teljes képet a konform térelmélet által elért eredményekről, csupán a kritikus exponensek, az univerzalitási osztály mélyebb jelentésének megértéséhez segít hozzá.

2.2 Az Ising-modell

Ebben a fejezetben néhány olyan módszert mutatunk be, melyek felhasználásával leírható a kétdimenziós Ising-modell (2.1.3.1 alfejezet) fázisátalakulása. Először a duális transzformációt, majd a csillag-háromszög transzformációt mutatjuk be. Ezen transzformációk alkalmazásával a rendszer állapotösszegének változása nyomonkövethető. Az alfejezet második részében a transzfermátrix módszert mutatjuk be, illetve ehhez kapcsolódóan a kvantum Ising-lánc néhány tulajdonságát.

2.2.1 A duális transzformáció

A duális transzformációt először Kramers és Wannier alkalmazták [79] a klasszikus kétdimenziós négyzetrácsen értelmezett Ising-modell fázisátalakulási pontjának lokalizálására. Gondolatmenetük a következő volt: tekintsünk egy klasszikus Ising-rendszert négyzetrácsen, első szomszéd kölcsönhatással, külső mágneses tér nélkül. Ennek állapotösszege:

$$\mathcal{Z} = \sum_{\sigma_N=\pm 1} \cdots \sum_{\sigma_1=\pm 1} \exp K \left(\sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j \right). \quad (2.38)$$

Itt felhasználhatjuk az exponenciális függvény sorfejtését:

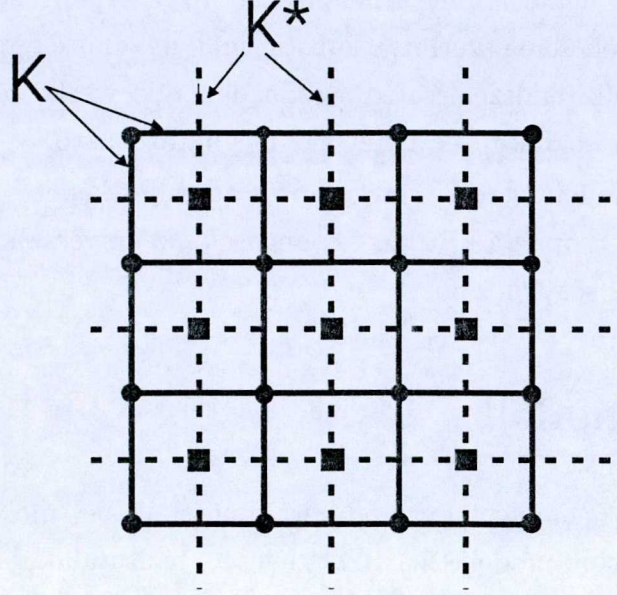
$$\exp(K \sigma_i \sigma_j) = \cosh(K) + \sigma_i \sigma_j \sinh(K) = \left(\frac{\sinh(2K)}{2} \right)^{\frac{1}{2}} (e^{K^*} + e^{-K^*} \sigma_i \sigma_j). \quad (2.39)$$



Az előző képletben már az úgynevezett duális összefüggést is felhasználtuk, a két kötési K, K^* paraméter egymás duálisai, ha fennáll köztük az összefüggés:

$$\sinh(2K) = \frac{1}{\sinh(2K^*)}. \quad (2.40)$$

Az állapotösszeg alakja, az előbbieket felhasználva:



2.3. ábra: A négyzetrács és duális rácsa, mely szintén négyzetrács. A folytonos vonalak és a teli körök az eredeti rács és spinek, a szaggatott vonal és teli négyzetek a duális rács spineket jelöli. K duális kötése K^* .

$$\mathcal{Z}(K) = \left(\frac{\sinh(K)}{2} \right)^{S/2} \sum_{\sigma_N = \pm 1} \cdots \sum_{\sigma_1 = \pm 1} \prod_{\langle i,j \rangle} (e^{K^*} + e^{-K^*} \sigma_i \sigma_j), \quad (2.41)$$

ahol K^* és K között fennáll (2.40) egyenlet. A duális transzformációt alkalmazva minden rácshoz definiálható egy úgynevezett duális rács. Ezt úgy kaphatjuk meg, hogy az eredeti rács minden polygonjának középpontjába egy spint rakunk, ezek lesznek a új rács pontjai (2.3. ábra). A spinek közötti kölcsönhatást pedig a duális összefüggés adja meg (2.40). Duális rács duálisa az eredeti rács. (A négyzetrács duális rácsa is négyzetrács, a háromszögrács duális rácsa a hatszögrács. A háromdimenziós köbös rács duális rácsa az oktaéderrács.)

Gráfelméleti megfontolások alapján állítható, hogy a (2.38)-ban felírt állapotösszeg és a duális rács állapotösszege között fennáll:

$$\mathcal{Z}(K) = \left(\frac{\sinh 2K}{2} \right)^{S/2} 2^{N-1} \mathcal{Z}^*(K^*). \quad (2.42)$$

Itt a $\mathcal{Z}^*$ az eredeti rács duális rácsának az állapotösszegét jelöli, S a duális rácsban található összes kötések száma. Felhasználva az úgynevezett Euler-relációt, amely a polygonok oldalainak és csúcspontjainak száma közötti összefüggést írja le, $N + N^* = S + 2$, tehát az állapotösszeg és a duális rács állapotösszege közötti összefüggés $N \rightarrow \infty$ határesetben:

$$\frac{\mathcal{Z}}{2^{N/2}(\sinh(2K))^{N/2}} = \frac{\mathcal{Z}^*(K^*)}{2^{N^*/2}(\sinh(2K^*))^{N^*/2}}. \quad (2.43)$$

Négyzetrács esetében a $N = N^*$, és mivel a négyzetrács duális rácsa is négyzetrács, tehát fázisátalakulási pontjuk azonos helyen van $\mathcal{Z}(K_c) = \mathcal{Z}^*(K_c^*)$, ezért (2.43)-ból következően

$$\sinh(2K_c) = \sinh(2K_c^*) = 1, \quad (2.44)$$

tehát

$$K_c = K_c^* = 0.440686794... \quad (2.45)$$

Ezzel Kramers és Wannier gondolatmenetét használva valóban meghatároztuk a négyzetrács Ising-modell fázisátalakulási pontját, miközben bemutattuk a duális transzformációt.

2.2.2 A csillag-háromszög transzformáció

A csillag-háromszög transzformáció során négy, csillag alakban elhelyezkedő klasszikus Ising-pint helyettesítünk három háromszög alakban elhelyezkedő spinnel, úgy (2.4. ábra), hogy az állapotösszeghez való járulékok a helyettesítés során nem változik meg [72, 80], $\mathcal{Z}_* = \mathcal{Z}_\Delta$. Az állapotösszegekre vonatkozó egyenlőség részletesen kiírva:

$$\sum_{\sigma_4=\pm 1} \exp[\sigma_4(p_1\sigma_1 + p_2\sigma_2 + p_3\sigma_3)] = A \exp(K_1\sigma_2\sigma_3 + K_2\sigma_1\sigma_3 + K_3\sigma_1\sigma_2), \quad (2.46)$$

ahol A konstans értéket definiáló egyenletek:

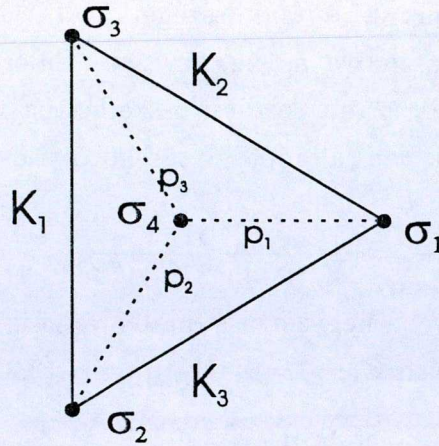
$$A^4 = 4(S_1^2 + S_2^2 + S_3^2 + 2C_1C_2C_3 + 2), \quad (2.47)$$

$$S_i = \sinh(2p_i), \quad C_i = \cosh(2p_i). \quad (2.48)$$

A (2.46) egyenletből bármelyik K_i paraméter meghatározható:

$$K_i = \frac{1}{4} \ln \left[\frac{\cosh(p_i + p_j + p_k) \cosh(-p_i + p_j + p_k)}{\cosh(p_i - p_j + p_k) \cosh(p_i + p_j - p_k)} \right], \quad (2.49)$$

$i; j; k$ indexek 1; 2; 3 ciklikus permutációi. Az inverz transzformáció is elvégezhető, vagyis a háromszög csillaggá alakítása, ezt fogjuk felhasználni a későbbiekben a iterációs eljárásunkban. Fel fogjuk még használni azt is, hogy az eredeti háromszögrács hatszögrácsba vihető át a csillag-háromszög transzformációval. Ezt felhasználva például az egyik rácson



2.4. ábra: A csillag-háromszög transzformáció során három $\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$ spin-nel helyettesítünk néggyet, $\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3, \sigma_4$ spineket, úgy megválasztva a kötési paramétereket, hogy a két részrendszer állapotösszege azonos legyen.

értelmezett Ising-modell kritikussági összefüggéséből meghatározható a másik rácson levő Ising-modell kritikussági összefüggése (3.1 alfejezet).

Ezen csillag-háromszög transzformációs sémára épített fel Hilhorst és van Leeuwen egzakt renormálást a kétdimenziós, háromszögrácson értelmezett, klasszikus Ising-modell megoldására [81].

2.2.3 A transzfermátrix

A transzfermátrix módszer egzakt és numerikus vizsgálatokra széleskörben alkalmazott eljárás a statisztikus fizikában [82]. A következő részben a transzfermátrix módszert mutatjuk be, az egyik legegyszerűbb alkalmazási lehetőségén, mégpedig a kétdimenziós Ising-modell megoldásának néhány lépésén.

A módszer alapötlete az, hogy az állapotösszeg a transzfermátrix nyomával fejezhető ki, a termodinamikai mennyiségeket pedig a mátrix legnagyobb néhány sajátértéke határozza meg. Ezzel lényegesen egyszerűsödött a problémánk, a Frobenius-Perron elmélet szerint a transzfermátrix nem degenerált, legnagyobb sajátértéke mindig pozitív.

Más módon is felhasználható a transzfermátrix technika fizikai problémák megoldására: az ún. sor-sor transzfermátrixot felhasználva a kétdimenziós, klasszikus Ising-modell állapot-összege az egydimenziós kvantum Ising-lánc Hamilton-operátorára vezethető vissza. Ebből következik például, hogy az ún. anizotróp skálázási határesetben a kétdimenziós, klasszikus rendszer felületi mágneses tulajdonságai pontosan megegyeznek az egydimenziós

kvantum rendszer felületi mágnesezettségével. Tekintsük a kétdimenziós, klasszikus Ising-modell Hamilton-operátorát négyzetrácson [83]:

$$-\beta H = \sum_{k,l} (K_1 \sigma_{k,l} \sigma_{k,l+1} + K_2 \sigma_{k,l} \sigma_{k+1,l}). \quad (2.50)$$

A kifejezésben szereplő tagokat természetesen csoportosíthatjuk soronként is:

$$H = \sum_l H(l, l+1). \quad (2.51)$$

Az állapotösszegben is megtartva a soronkénti csoportosítást:

$$\mathcal{Z} = \sum_{\text{konf.}} \prod_{l=1}^L \exp[-\beta H(l, l+1)] = \text{Tr}(\mathbf{T}^L). \quad (2.52)$$

A $\mathbf{T}$ transzfermátrix explicit alakja:

$$\mathbf{T}_{l,l+1} = \exp\left[\sum_{l=1}^L (K_1 \sigma_l \sigma'_l + K_2 \sigma_l \sigma_{l+1})\right], \quad (2.53)$$

itt csak a soron belüli indexet tüntettük fel, a σ'_l a szomszédos sor megfelelő helyen levő spinjét jelöli. Az $\mathbf{T}$ mátrix kifejezhető a Pauli-féle spinoperátorokkal, melyek a spinállapotokra hatnak. A horizontális, soron belüli kötéseket leíró második tag (2.53)-ben egyszerűen felírható :

$$\mathbf{V}_2 = \exp\left(\sum K_2 \sigma_1^z \sigma_{1+1}^z\right). \quad (2.54)$$

A szomszédos sorok közötti kölcsönhatást leíró első tag (2.53)-ban részletesebb levezetést igényel. Csak egy kötést vizsgálva:

$$\exp(K_1 \sigma \sigma') = \langle \sigma | e^{K_1} (1 + e^{-K_1} \sigma^x) | \sigma' \rangle. \quad (2.55)$$

Itt felhasználva a Pauli-operátorok ismert összefüggését, miszerint

$$\exp(a \sigma^z) = \cosh(a) (1) + \sigma^z \sinh(a), \quad (2.56)$$

illetve definiálva a duális K_1^* kötést: $e^{-K_1^*} = \tanh(K_1)$; megállapítható, hogy

$$\exp(K_1 \sigma \sigma') = \langle \sigma | (2 \sinh(2K_1))^{\frac{1}{2}} \exp(K_1^* \sigma^x) | \sigma' \rangle. \quad (2.57)$$

Tehát a sorok közötti kölcsönhatásokat leíró második tag (2.53)-ban:

$$\mathbf{V}_1 = \exp\left(\sum_l K_1^* \sigma_l^x\right). \quad (2.58)$$

Ezekután írható fel a rendszerre jellemző állapotösszeg, itt már sorindextől függő kötési paraméterekkel:

$$\mathcal{Z} = \prod_l (2 \sinh(2K_1(l)))^{\frac{1}{2}} \text{Tr}(\mathcal{T})^L, \quad (2.59)$$

itt a $\mathcal{T}$ transzferoperátor jelentése:

$$\mathcal{T} = (\mathbf{V}_1 \mathbf{V}_2) = \exp \left(\sum_l K_1^*(l) \sigma_l^x \right) \exp \left(\sum_l K_2(l) \sigma_l^z \sigma_{l+1}^z \right). \quad (2.60)$$

2.2.4 Az anizotróp skálázási határeset

Tekintsük a fentiekben leírt kétdimenziós klasszikus Ising-modellt végtelen négyzetláncra. Legyenek a kötési paraméterek rétegesek, $K_1(l)$ a felülettel párhuzamos, $K_2(l)$ a felületre merőleges paraméterek az l -edik rétegben, illetve az l -edik és $(l+1)$ -edik réteg között. Anizotróp skálázási határesetnek azt a határesetet nevezzük [84, 85, 86], ha $K_1(l) \rightarrow \infty$, $K_2(l) \rightarrow 0$, de az arányuk,

$$\lambda_l = K_2(l)/K_1^*(l) \quad (2.61)$$

állandó, ahol $K_1^*(l) = -\frac{1}{2} \ln[\tanh(K_1(l))]$, a duális kötés. A korábban már definiált módon bevezetve egy konstans referencia kötet K_1^* , a duális kötés így írható $K_1^*(l) = K_1^* h_l$, a h_l paraméter a transzverzmező. A (2.60)-beli transzferoperátor ezek után $\mathcal{T} = \exp(-2K_1^* \mathcal{H})$ alakba írható, ahol $\mathcal{H}$ az egydimenziós kvantum Ising-lánc Hamilton-operátora ($J_l = h_l \lambda_l$ jelölést használva):

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2} \sum_{l=1}^{\infty} [h_l \sigma_l^x + J_l \sigma_l^z \sigma_{l+1}^z]. \quad (2.62)$$

A transzferoperátor úgy tekinthető, mint egy diszkrét evolúciós operátor, a $\tau = 2K_1^*$ mennyiség az imaginárius vagy Euklideszi-idő irány rácsegysége.

2.2.5 Az egydimenziós kvantum Ising-modell

A (2.62) rendszer Hamilton-operátora Jordan-Wigner [87] és Boguljubov-transzformáció [88, 89] alkalmazásával szabad fermion rendszer alakját veszi fel, amikor is a Hamilton-operátor alakja:

$$\mathcal{H} = \sum_{\nu} \epsilon_{\nu} (\eta_{\nu}^{\dagger} \eta_{\nu} - \frac{1}{2}). \quad (2.63)$$

A fermion rendszer gerjesztési spektruma (ϵ_{ν}) a következő sajátérték probléma megoldásával adódik:

$$\epsilon_{\alpha} \Psi_{\alpha}(k) = -k_k \Phi_{\alpha}(k) - J_k \Phi_{\alpha}(k+1)$$

$$\begin{aligned}\epsilon_\alpha \Phi_\alpha(k) &= -J_{k-1} \Psi_\alpha(k-1) - h_k \Psi_\alpha(k) \\ h_0 &= J_0 = 0,\end{aligned}\tag{2.64}$$

ahol $\Phi_\alpha(k)$ és $\Psi_\alpha(k)$ normalizált saját vektorok páros és páratlan részei.

A felületi mágnesezettség m_f a $G_\parallel(\tau)$ korrelációs függvény felhasználásával kapható meg, a $\tau \rightarrow \infty$ határesetben, hiszen ekkor $G_\parallel(\tau) = \langle \sigma_1^x(0) \sigma_1^x(\tau) \rangle = (m_f)^2$; itt τ az ún. imaginárius idő. A korrelációs függvényben szereplő operátorok Heisenberg-képben vannak megadva: $\sigma_1^x(\tau) = \exp(\tau \mathcal{H}) \sigma_1^x \exp(-\tau \mathcal{H})$. Ezt beírva a korrelációs függvénybe, illetve a fermionrendszer állapotaival kifejezve:

$$G_\parallel(\tau) = \sum_{i>0} | \langle i | \sigma_1^x | 0 \rangle |^2 e^{-\tau(E_i - E_0)} = \sum_{\alpha} \Phi_\alpha^2(1) e^{-\tau \epsilon_\alpha}.\tag{2.65}$$

Itt E_i, E_0 jelöli az i -edik gerjesztett, illetve az alapállapot energiáját. Rendezett állapotban csak az alapállapottal degenerált $< 1 |$ állapot ad nem eltűnő járulékot a $\tau \rightarrow \infty$ határesetben. Tehát a felületi mágnesezettség:

$$m_f = \langle 1 | \sigma_1^x | 0 \rangle,\tag{2.66}$$

amely (2.65)-ből következően a $\Phi_1(1)$ -vel egyezik meg. Ebből felhasználva, hogy $\epsilon_\alpha = 0$, az (2.64) egyenletek egy rekurziós formulát adnak a $\Phi_1(1)$ meghatározására:

$$\Phi_1(k+1) = -\frac{h_k}{J_k} \Phi_1(k) = -\lambda_k^{-1} \Phi_1(k).\tag{2.67}$$

Ezen rekurziós eljárás során kapott sajátvektort normálva [32]:

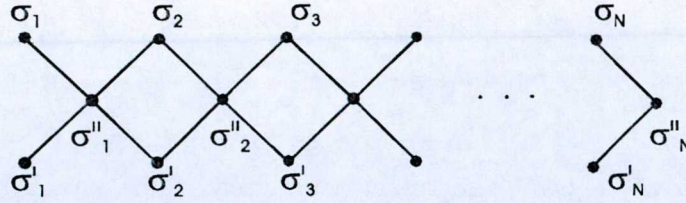
$$m_f = \left(1 + \sum_{j=1}^{\infty} \prod_{k=1}^j \lambda_k^{-2} \right)^{-1/2}\tag{2.68}$$

kifejezést kapjuk a felületi mágnesezettségre. Ebben a kifejezésben csak a kvantum Ising-láncot leíró kötési paraméterek vannak jelen, így tetszőleges kötési paraméter kiosztás mellett lehetőség van a felületi mágnesezettség meghatározására.

2.2.6 A diagonális transzfermátrix

A későbbiekben az eredmények között felhasználásra kerül a diagonális rácson értelmezett Ising-modell transzfermátrix, melyet most mutatunk be. A diagonális rácspan két egymást követő sor ad egy eltolásszimmetrikus egységet, melyből felépíthető a rács, ezért célszerű a két sort együtt kezelni [91, 92, 93]. Ezen két sor transzfermátrixát jelöljük T^2 -el.

$$(T^2)_{\sigma, \sigma'} = \sum_{\sigma''=\pm 1} \prod_{i=1}^{N-1} e^{\sigma_i'' [K_{2i-1}(\sigma_i + \sigma_i') + K_{2i}(\sigma_{i+1} + \sigma_{i+1}')]} e^{\sigma_N'' K_{2N-1}(\sigma_N + \sigma_N')}\tag{2.69}$$



2.5. ábra: A diagonálisrács eltolás szimmetrikus egysége

A σ'' változók szerint kiösszegezve az előző egyenletet, olyan kifejezést kapunk, amely csak σ, σ' változóktól függ:

$$(\mathbf{T}^2)_{\sigma, \sigma'} = 2^N \cosh(K_{2N-1}(\sigma_N + \sigma'_N)) \prod_{i=1}^{N-1} \cosh[K_{2i-1}(\sigma_i + \sigma'_i) + K_{2i}(\sigma_{i+1} + \sigma'_{i+1})]. \quad (2.70)$$

Homogén rendszer esetén ismert [91], hogy ez felcserélhető a kvantum Ising-lánc Hamilton-operátorával: $[\mathbf{T}^2, \mathcal{H}] = 0$, tehát közös sajátrendszerük van. A két operátor felcserélhetőségét fogjuk felhasználni réteges rendszerek esetén a 3.3.2 alfejezetben.

2.3 Kvázikristályok és aperiodikus struktúrák

A kvázikristályok³ általános jellemzője, hogy nincs elemi cellájuk, melynek ismétlődésével szerkezetük felépíthető lenne, ez a tulajdonság az üveggel és az amorf anyagokkal közös. Rövid távon vizsgálva determinisztikus szabályszerűség, hosszú távon üvegszerű rendezetlenség jellemzi a kvázikristályokat. Ez a kettős jelleg teszi a kvázikristályokat igazán érdekessé.

A kvázikristályok felfedezése [5] alapjaiban rázta meg a kristályfizikát, hiszen ilyen kristályok - melyek például ötfogású szimmetriával rendelkeznek - stabil állapotban való létezését korábban nem tartották lehetségesnek. Ezen felfedezéssel egy új, termékeny tudományterület nyílt meg a fázisátalakulások elméletében, mivel e szerkezetek köztes szerepet játszanak a periodikus (kristályok) és a rendezetlen szerkezetű anyagok (üvegek) között, új lehetőséget adva a rendezetlenség és a fázisátalakulás kapcsolatának vizsgálatára.

A dolgozatban a determinisztikus rendezetlenség két fő típusát különböztetjük meg: a kvázikristályos és az aperiodikus szerkezetet. A különbség a szerkezet Fourier-spektrumában keresendő. A kvázikristályos anyagok Fourier-spektruma véges sok diszkrét csúcsból áll, mely csúcsok távolságainak aránya irracionális. Az aperiodikus struktúrák a kvázikristályok általánosítása, itt már végtelen sok csúcs található a spektrumban.

³Először Levin és Steinhardt [126] használta ezt a terminológiát.

2.3.1 Egydimenziós aperiodikus szerkezetek

Egydimenzióban aperiodikus szerkezetet helyettesítési szabályokkal lehet előállítani, így determinisztikus, nem translációs-szimmetrikus sorozatot kapunk. Az így kapott sorozatnak megfelelően modulált szerkezettel rendelkező rendszer tekinthető egydimenziós kvázikristálynak. Az egyik legelőször vizsgált ilyen sorozat a Fibonacci-sorozat. Képzési szabálya S két jelet használ: 0-t, 1-t. A sorozat rekurziós módon adható meg, $S(0) = 01$, $S(1) = 0$ szabályt alkalmazva az egyes szavakat alkotó betűkre külön-külön:

$$0 \rightarrow 01 \rightarrow 010 \rightarrow 01000 \rightarrow \dots \quad (2.71)$$

Ezzel egy végtelen sorozatot, majd ezen sorozatnak megfelelően a rendszer paramétereit, egy aperiodikus szerkezetet kapunk. A sorozatról alapvető információkat tartalmaz az úgynevezett helyettesítési mátrix [94, 95], melynek alakja ebben az esetben:

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} n_0^{S\{0\}} & n_0^{S\{1\}} \\ n_1^{S\{0\}} & n_1^{S\{1\}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.72)$$

Az $n_0^{S\{0\}}$ azon 0 jelek száma, amelyeket a helyettesítési szabály szerint a 0 helyére írunk, és így tovább. A 0 és 1 jelek száma n iteráció után L_n^0 és L_n^1 , melyek $\mathbf{M}^n$ mátrix megfelelő elemeivel egyenlők. Megmutatható, hogy a $L_n^0, L_n^1, L_n (= L_n^0 + L_n^1)$ arányos $\mathbf{M}$ mátrix legnagyobb sajátértékével, Λ_1^n -el, amely pozitív, és mindig létezik a Frobenius-Perron elmélet szerint. A helyettesítési szabály csak a sorozat szerkezetét adja meg, a kötési paraméterek konkrét értékét a $\lambda_k = \lambda r^{f_k}$ kifejezés adja, ahol $f_k = 0$ vagy 1 az aperiodikus sorozat szerint. Az f_k mennyiség fluktuációja L_n hosszúságon

$$\sum_{k=1}^{L_n} f_k \simeq \rho_\infty L_n + |\Lambda_2|^n F[\ln(L_n)/\ln(\Lambda_1)], \quad (2.73)$$

az F függvény periodikus fraktálfüggvény. Az f_k mennyiség aszimptotikus sűrűsége: $\rho_\infty = \lim_{L \rightarrow \infty} n_L/L$. A kötési paraméterek sűrűségét a helyettesítési mátrix legnagyobb sajátértékéhez tartozó sajátvektor komponensei határozzák meg:

$$\rho_{\infty,i} = \frac{V_1(i)}{\sum_j V_1(j)}. \quad (2.74)$$

Egy L_n hosszúságú sorozatban a kummulált átlagtól való eltérés:

$$\Delta(L_n) = \sum_{k=1}^{L_n} (\lambda_k - \bar{\lambda}) \sim \delta \Lambda_2^n \sim \delta L_n^\omega. \quad (2.75)$$

Az előző egyenlet egyben az úgynevezett vándorlási exponens definíciójának is tekinthető, vagyis:

$$\omega = \frac{\ln |\Lambda_2|}{\ln(\Lambda_1)}, \quad (2.76)$$

ez az ω exponens írja le a fluktuációkat a sorozatban.

A Fibonacci-sorozat esetében $\Lambda_1 = (1 + \sqrt{5})/2$, $|\Lambda_2| = \Lambda_1 - 1$, így (2.76)-ból $\omega = -1$. Véletlen sorozat esetén, ahol semmilyen korreláció, szabályszerűség nincs $\omega = 1/2$.

Ezekután néhány aperiodikus sorozatot mutatunk be, megadva a helyettesítési szabályukat és az ω exponenst, sorrendben a Thue-Morse-, Rudin-Shapiro-, Fredholm-, periódus-kettőző és papírhajtogató sorozatot [96], azokat, amelyeket eredményeink között is használtunk.

A bináris (két jelet tartalmazó) Thu-Morse-sorozat rekurziós képzési szabálya $0 \rightarrow 01$, $1 \rightarrow 10$. Így a 0-val kezdve a sorozatot:

$$\begin{array}{ll} n=0 & 0 \\ n=1 & 01 \\ n=2 & 0110 \\ \vdots & \vdots \end{array}$$

A helyettesítési mátrix sajátértékeiből (2.76) a vándorlási exponens: $\omega = -\infty$. A két jel (0,1) sűrűsége: $\rho_{0,1} = \frac{1}{2}$.

A Rudin-Shapiro-sorozat rekurziós szabálya betűpáros helyettesítési szabályokat igényel: $00 \rightarrow 0001$, $01 \rightarrow 0010$, $10 \rightarrow 1101$, $11 \rightarrow 1110$. A 00-val kezdődő sorozat:

$$\begin{array}{ll} n=0 & 00 \\ n=1 & 0001 \\ n=2 & 00010010 \\ \vdots & \vdots \end{array}$$

A sorozat vándorlási exponens (2.76)-ból $\omega = 1/2$, a két jel (0,1) sűrűsége: $\rho_{0,1} = \frac{1}{2}$.

A Fredholm-sorozat hárombetűs helyettesítési szabállyal képezhető: $1 \rightarrow 10$, $0 \rightarrow 02$, $2 \rightarrow 22$. 0-val kezdődő sorozatot képezve:

$$\begin{array}{ll} n=0 & 1 \\ n=1 & 10 \\ n=2 & 1002 \\ \vdots & \vdots \end{array}$$

majd a három jel közül kettőt 1, 2-öt ugyanazzal jellel, 1-gyel helyettesítve ($n = 3$ esetén 01101000) két jelből álló sorozatot kapunk. A sorozat vándorlási exponense: $\omega = 0$. A két jel (0,1) sűrűsége: $\rho_0 = 1, \rho_1 = 0$.

A periódus-kettőző sorozat képzési szabálya: $0 \rightarrow 11$, $1 \rightarrow 10$. 1-gyel kezdve a rekurziós sorozat:

$$\begin{array}{ll} n=0 & 1 \\ n=1 & 10 \\ n=2 & 1011 \\ \vdots & \vdots \end{array} \quad (2.77)$$

A két jelet tartalmazó periódus-kettőző sorozat rekurziós szabálya egyszerűbben: az aktuális sorból úgy kapjuk a következőt, hogy kétszer egymás után leírjuk a kiindulási sort, majd a legutolsó jelet kicseréljük a másik jelre. A vándorlási exponense: $\omega = 0$, a jelek sűrűsége: $\rho_1 = \frac{2}{3}$, $\rho_0 = \frac{1}{3}$.

A papírhajtogató sorozatot a papír hajtogatása közben létrejövő fel (1) és le (0) mutató élek sorozatáról nevezték el. A sorozat képzési szabályai: $00 \rightarrow 1000$, $01 \rightarrow 1001$, $10 \rightarrow 1100$, $11 \rightarrow 1101$. Az 11 jelekből kiindulva:

$$\begin{array}{ll} n=0 & 11 \\ n=1 & 1101 \\ n=2 & 11011001 \\ \vdots & \vdots \end{array} \quad (2.78)$$

sorozat képezhető. A sorozat vándorlási exponense: $\omega = 0$, a jelek sűrűsége: $\rho_{0,1} = \frac{1}{2}$.

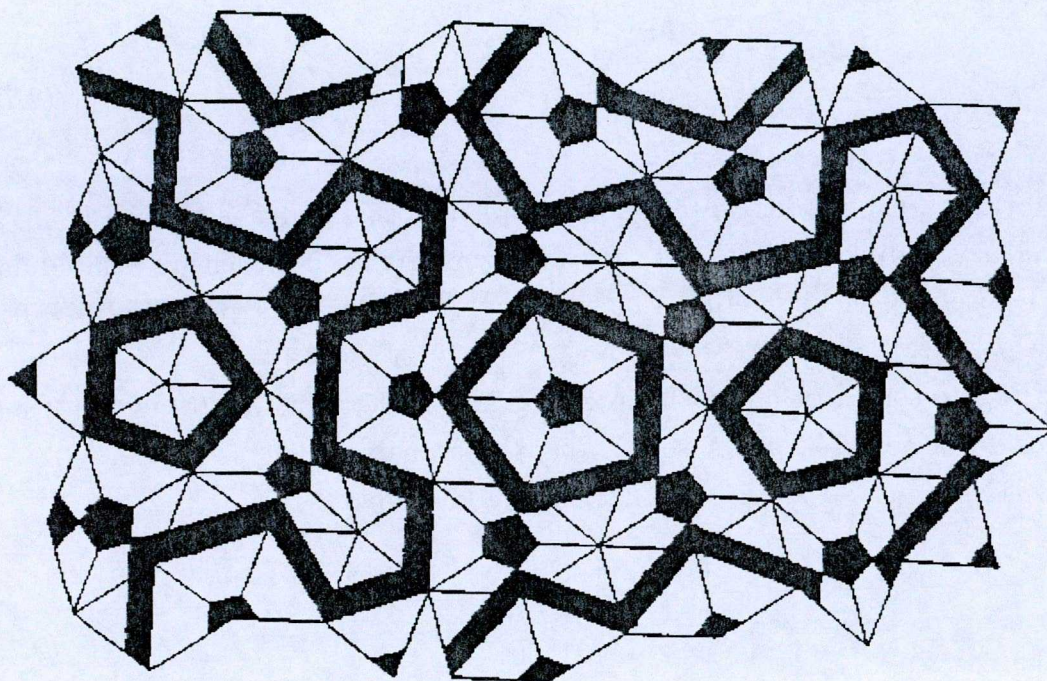
2.3.2 Magasabb dimenziós aperiodikus struktúrák

Magasabb dimenziós rácsokon kétféle aperiodikusságot szokás megkülönböztetni. Az első csoport a modulált szerkezetű rácsokat foglalja magába, a második csoport a topológikusan inhomogén rácsokat.

Az első esetben az aperiodikus rácsot szabályos rácsból kapjuk, annak megfelelő helyen történő folytonos megváltoztatásával, modulálásával. Itt az aperiodikusság mértéke folytonosan változtatható, a moduláció tetszőleges infinitézimális értéket vehet fel.

A második esetben a rácsszerkezet eleve magában hordozza az aperiodikus jelleget. Ezekben a rácsokban a koordinációs szám helyről-helyre változhat, a rendezetlenség mértéke nem lehet akármilyen kicsi, mivel ez a rács alapvető, rögzített tulajdonsága. Ilyen kvázikristály például a kétdimenziós Penrose-rács [97]. Ezek a rácsok általában egy magasabb dimenziós szabályos rácsból kaphatóak meg, a rácspontok egy megfelelő síkra történő levetítésével. A szabályos rács a Penrose-rács esetében a hatdimenziós köbös rács. A Penrose-rácsban lokális ötfogású szimmetria található (2.6. ábra), mely a szabályos, elemi cella ismétlődésével felépülő kristály esetében elképzelhetetlen.

A fizikai kezelhetőség érdekében feltesszük, hogy az aperiodikus rendszerek elegendően



2.6. ábra: A kvázikristályos Penrose-rács.

nagy skála választása esetén homogénként kezelhetőek, ebből következően a fizikai mennyiségek skálázási törvényeknek tesznek eleget.

2.3.3 Relevancia-irrelevancia kritérium réteges aperiodikus és rendezetlen rendszerekre

Harris perturbatív érvelését aperiodikus rendszerekre alkalmazva osztályozhatóak az aperiodikus sorozatok abból a szempontból, hogy megváltozik-e a rendszer kritikus exponense, ha az addig homogén, izotróp rendszerben megjelenik az aperiodicitás. Az aperiodikus sorozat irreleváns perturbációt jelent a tiszta rendszeren, ha ezen aperiodicitást követő rendszerben a kritikus exponensek megegyeznek a tiszta rendszer exponenseivel. Releváns perturbációt képvisel a sorozat, ha a fázisátalakulás jellege megváltozik.

Az alábbiakban ismertetjük Luck gondolatmenetét [30, 31], ami tulajdonképpen a Harris-kritérium általánosítása [13] aperiodikus rendszerekre. Vizsgálatunk tárgya legyen

egy nagyjából gömb alakú d dimenziós térfogatrész a d dimenziós aperiodikus rácson levő rövid hatótávosságú kölcsönhatással rendelkező Ising-rendszerben. Az aperiodicitás a kötési paraméterekben figyelhető meg. A rendszer állapota legyen a kritikus pont közelében, az Ω térfogatot jellemző hossz legyen éppen fluktuációs hossznyi: $L \sim \xi$. A kiszemelt térfogatrészben levő kötések száma $B(\Omega)$. Ezen kötések értékeinek összege: $\Sigma(\Omega) = \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij}$. E két mennyiség hányadosa megadja a kötés átlagos értékét: $\frac{\Sigma(\Omega)}{B(\Omega)} \sim J_0$; egyenlőség a termodinamikai határesetben áll fenn. Véges, de elég nagy térfogatrész esetén igaz:

$$\Sigma(\Omega) \sim J_0 B(\Omega) \sim L^{d\omega}, \quad (2.79)$$

ahol $0 \leq \omega < 1$ vándorlási vagy geometriai fluktuációs exponens. Megbecsülhetjük ebben a vizsgált térfogatban az átlagos kötésektől való eltérés átlagát, a vándorlási exponens felhasználásával:

$$\langle (J_{i,j} - J_0)/J_0 \rangle_{\Omega} \sim \xi^{-d(1-\omega)} \Delta. \quad (2.80)$$

Ez a kötésfluktuáció a kritikus hőmérséklet fluktuációját okozza. Ha ezen fluktuáció nagyobb, mint a kritikus ponttól mért távolság (felhasználva a $\xi \sim t^{-\nu}$ összefüggést):

$$\delta t \sim |t|^{d\nu(1-\omega)} \gg |t|, \quad (2.81)$$

akkor a rendszer egyes részeire már a kritikus hőmérséklet alatti rendezettség, míg más részeire a kritikus hőmérséklet feletti rendezetlenség lesz jellemző, vagyis megváltozik az átalakulás jellege. Ellenkező esetben, amikor a fluktuáció sokkal kisebb, mint a kritikus ponttól mért távolság, a fázisátalakulás jellege változatlan marad. Abban az esetben, ha a két mennyiség éppen megegyezik, akkor nem lehet megjósolni a fenti gondolatmenettel, hogy megváltozik-e a kritikus viselkedés, itt további konkrét analízis szükséges. Ebből megállapítható, hogy ha az aperiodikusságot jellemző vándorlási exponens meghalad egy, a rendszer kritikus exponensei által meghatározott értéket (ω_c), akkor releváns, ha az aperiodikusságot jellemző vándorlási exponens kisebb, mint ω_c , akkor irreleváns az aperiodikus sorozat a fázisátalakulás tulajdonságaira nézve. A határesethez tartozó ω_c :

$$\omega_c = 1 - 1/(d\nu) = (1 - \alpha)/(2 - \alpha). \quad (2.82)$$

Ezzel megkaptuk az ún. Harris-kritériumot [13], ugyanis ha a rendezetlenség izotróp, rövid hatótávosságú, a rendezetlenség vándorlási exponens $\omega = \frac{1}{2}$. Ebben az esetben (2.81) alakja, $|t|$ -vel leosztva és felhasználva a Josepshon-törvényt (2.3 táblázat):

$$|t|^{d\nu/2-1} = |t|^{-\alpha/2} \gg 1. \quad (2.83)$$

Itt egyszerűen a rendszerre jellemző α exponens előjele dönti el, hogy releváns, irreleváns vagy marginális perturbációt jelent-e a rendezetlenség. Ha $\alpha < 0$, teljesül a (2.83) egyenlőtlenség, vagyis rendezetlenséget bevezetve megváltozik a kritikus viselkedés. Ha azonban $\alpha > 0$, a kritikus viselkedés változatlan marad.

A fent leírt gondolatmenet megismételhető akkor is, ha a rendezetlenség nem terjed ki a rendszer összes dimenziójára, csak d_m dimenzióra, a többi $(d - d_m)$ dimenzióban pedig rendezett a rendszer. Ekkor hasonló kritériumot kapunk a vándorlási exponenssel kapcsolatban, mint korábban, de itt a kritériumban d_m dimenziószám szerepel a d helyett:

$$\omega_c = 1 - 1/(d_m \nu). \quad (2.84)$$

Ezzel megkaptuk az úgynevezett rétegesen aperiodikus rendszerek relevancia-irrelevancia kritériumát. A kritériumot egydimenziós réteges aperiodikus rendszerre alkalmazva megállapítható, hogy a

$$\Phi = 1 + \nu(\omega - 1) \quad (2.85)$$

'crossover' exponens [31, 37] előjele határozza meg az aperiodikus rendszer releváns-irreleváns jellegét. $\Phi > 0$ releváns ($\Phi < 0$ irreleváns) perturbációt jelent a tiszta rendszer fázisátalakulásán. Az Ising-modell esetében, ahol $\nu = 1$, az ω előjele határozza meg az aperiodikus sorozat releváns-irreleváns jellegét.

3. Fejezet

Eredmények

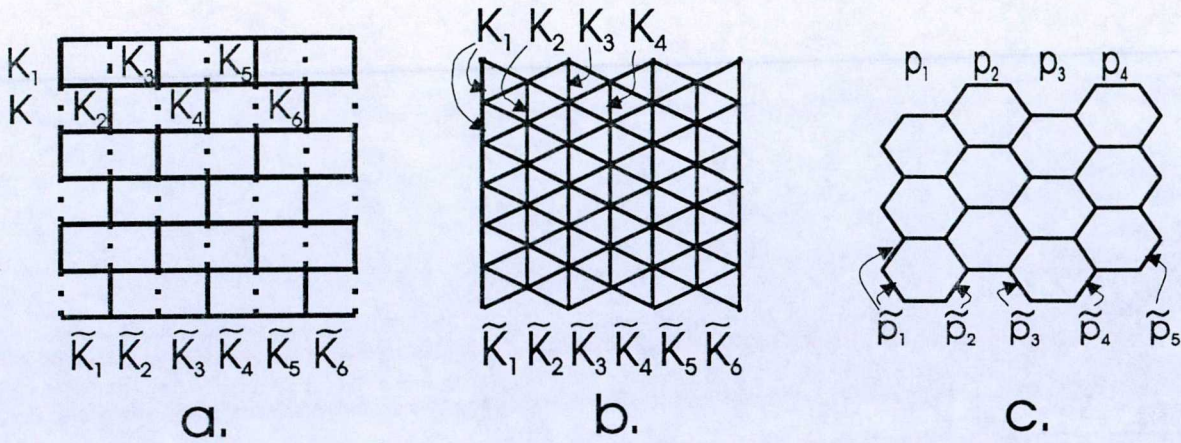
3.1 Inhomogén Ising-modellek kritikus hőmérséklete

3.1.1 Bevezetés

Aperiodikus és véletlen kötési paraméter kiosztással rendelkező Ising-rendszerek numerikus vizsgálatának lényeges pontja az ilyen rendszerek kritikus hőmérsékletének vagy másképpen kritikussági feltételének ismerete. Ez mutatja meg, hogy a kötési paraméterek milyen értéke mellett kritikus a rendszer, a hőmérséklet csökkentésével itt megy át a rendszer a paramágneses fázisból ferromágneses fázisba. Az összefüggés ismeretében a numerikus módszerek lényegesen nagyobb pontossággal képesek a rendszer különböző termodinamikai jellemzőinek leírására. Ezen összefüggést fogjuk analitikusan meghatározni ebben az alfejezetben (3.1) a rétegesen rendezetlen háromszög- és hatszögrácson levő Ising-modell esetében. Az összefüggést numerikus módszerünkkel a csillag-háromszög transzformációra épülő iterációs eljárással fogjuk ellenőrizni.

A négyzetrács esetében a kritikus hőmérséklet az úgynevezett duális transzformációt felhasználva kapható meg [79], 2.2.2 alfejezet. Ugyancsak a duális transzformáció alkalmazásával lehet meghatározni a négyzetrácson levő véletlen ferromágneses kötésű Ising-rendszer kritikus hőmérsékletét [100], 3.3.1 alfejezet.

Periodikus négyzetrács esetében az úgynevezett Pfaffian-módszer [100] vagy a Zittartz és munkatársai által kifejlesztett transzfermátrix technika alkalmas a kritikus feltétel levezetésére [101, 102]. Ezen módszerek egy $m \times n$ egységcellájú periodikus Ising-rendszer kritikus hőmérsékletét egy olyan mátrix egyenlettel adják meg, amelynek egyik oldala $2^{m-1} \times 2^{m-1}$ méretű mátrixok szorzatát tartalmazza. Ez azt jelenti, hogy a nemperiodikus határesetben csak $m = 1, 2$ esetben lehet a paraméterek közötti összefüggést explicit módon megadni.



3.1. ábra: Négyszögrács (a), melyből $K = \infty$ választással háromszögrács (b), illetve $K = 0$ választással hatszögrács keletkezik (c).

A homogén hatszög- és háromszögrács kritikus hőmérsékletei szintén jól ismertek [103]. E két rácsra vonatkozó kritikussági összefüggések egymásból levezethetők, hiszen a hatszög- és háromszögrács egymásba átvihető a csillag-háromszög transzformációval. Pontosabban a két rács megfeleltethető egymásnak, kölcsönösen egyértelmű módon úgy, hogy a két rács állapotösszege azonos legyen (2.2.2 alfejezet). Ezt is felhasználjuk az alábbiakban.

3.1.2 A kritikus hőmérsékletek analitikus meghatározása

A rétegesen inhomogén hatszög- és háromszögrácsokon levő kétdimenziós Ising-modell kritikus hőmérsékletét mi határoztuk meg először, erről fogok a következőekben írni bővebben. Az összefüggés levezetése során felhasználjuk azt, hogy egy bizonyos paraméter kiosztása mellett a négyzetrács átmegy háromszögrácsba, illetve egy másik jól meghatározott paraméter kiosztás mellett hatszögrácsba. Tekintsük az $(M) \times (N)$ négyzetrácson levő klasszikus Ising-rendszert. A rendszer $(m \times 2)$ -es egységcellából épül fel, amely M/m -szer ismétlődik horizontális, $N/2$ -szer vertikális irányban. A termodinamikai határesetben $M, N \rightarrow \infty$ jelent.

A rácson alapvetően két különböző típusú kötési paraméter található, függőleges és vízszintes kötési paraméterek. A vízszintes kötési paraméterek értéke oszloponként azonos $\tilde{K}_j$, (3.1.a ábra). A függőleges típusú kötési paraméterek egy oszlop mentén vagy sor mentén haladva váltakozva a K és K_j értéket veszik fel (3.1.a ábra). Ezt az alternáló viselkedést a következő formulával írhatjuk le:

$$K_{k,j} = \begin{cases} K; & \text{ha } k+j = \text{páratlan} \\ K_j; & \text{ha } k+j = \text{páros} \end{cases} \quad (3.1)$$

A első index jelöli a sort, a második index az oszlop index. Vízszintes irányban a rendszer periodikus m hosszúságú periódussal, azaz: $\tilde{K}_{j+m} = \tilde{K}_j$ és $K_{j+m} = K_j$. Tekintsük a $K \rightarrow \infty$ határesetet. Ekkor azok a spinpárok, melyeket ezen végtelen erősségű csatolások (az 3.1.a ábrán a pontokkal jelölt kötés) kötnek össze, a végtelen erős csatolások miatt egy spinnek tekinthetők, ezáltal a négyzetrács struktúra háromszögrács szerkezetűvé válik (3.1.b ábra). Ha az előbbi K paramétereket 0 -nak választjuk, akkor ezen spinpárok közötti csatolás megszűnik, a négyzetrács a hatszögrács szerkezetét veszi fel (3.1.c ábra). A rendszer állapotösszege:

$$\mathcal{Z} = \sum_{\{\sigma\}} e^{-\beta H(\sigma)} = \text{Tr} e^{-\beta H(\sigma)}, \quad (3.2)$$

itt az összegzés az összes spinkonfigurációra vonatkozik, H Hamilton-operátor a spin konfigurációk függvénye.

Felhasználva a 2.2.3 alfejezetben bevezett transzfermátrix technikát és a következő jelölést: $\tilde{x}_j = \sinh(2\tilde{K}_j) = (\sinh(2L_j))^{-1}$, az állapotösszegre írható a (2.59) egyenlettel analóg módon :

$$\mathcal{Z} = \prod_{j=1}^m (2\tilde{x}_j)^{\frac{MN}{2m}} \text{Tr}[\mathbf{T}], \quad (3.3)$$

ahol $\mathbf{T}$ mátrix alakja [102, 103]:

$$\mathbf{T} = \prod_{j=1}^m \mathbf{T}(j); \quad \mathbf{T}(j) = \mathbf{T}_1(j) \cdot \mathbf{T}_2(j). \quad (3.4)$$

$\mathbf{T}_1$ és $\mathbf{T}_2$ alakja:

$$\mathbf{T}_1(j) = e^{L_j \sum_{k=1}^N \sigma_k^x} \quad (3.5)$$

$$\mathbf{T}_2(2l-1) = \exp \left[\sum_{k=1}^{N/2} K_{2l-1} \sigma_{2k-1}^z \sigma_{2k}^z + K \sum_{k=1}^{N/2} \sigma_{2k}^z \sigma_{2k-1}^z \right] \quad (3.6)$$

$$\mathbf{T}_2(2l) = \exp \left[K \sum_{k=1}^{N/2} \sigma_{2k-1}^z \sigma_{2k}^z + \sum_{k=1}^{N/2} K_{2l} \sigma_{2k}^z \sigma_{2k-1}^z \right], \quad (3.7)$$

$\mathbf{T}_2$ értékei különbözőek páros és páratlan helyeken, ez a paraméterek speciális alternáló viselkedéséből következik.

Követve Zittartz és munkatársai gondolatmenetét, Jordan-Wigner-transzformációt hajtva végre a spin változókon, majd Fourier-transzformációt, az állapotösszegben lévő transzfermátrix alakja:

$$\mathbf{T} = \prod_{0 \leq q < \pi/2} \mathbf{T}(q), \quad \mathbf{T}(q) = \prod_{j=1}^m \mathbf{T}_j(q), \quad (3.8)$$

a q különböző értékei a 0 és $\pi/2$ között találhatók, értékei $2\pi/M$ -nek többszörösei. Ismert, hogy transzfermátrix legnagyobb sajátértéke határozza meg vezető rendben a rendszer szabadenergiáját és ezáltal a rendszer viselkedését. Ha a $\mathbf{T}(q)$ mátrix legnagyobb sajátértékét $\exp(\lambda(q))$ -val jelöljük, az egy spinre jutó szabadenergia $f, \mathcal{Z}$ -ből az alábbi módon írható fel :

$$-\beta f = \lim_{N, M \rightarrow \infty} \frac{1}{NM} \ln \mathcal{Z} = \frac{1}{2m} \sum_{j=1}^m \ln(2\tilde{x}_j) + \frac{1}{2\pi m} \int_0^{\pi/2} dq \lambda(q). \quad (3.9)$$

A fázisátalakulási pontban a szabadenergia, f szinguláris, ez a $\lambda(q)$ mennyiségnek a Brillouin-zóna határán található szingularitásának következménye. A következőekben megmutatjuk, hogy a Brillouin-zóna határa valóban szinguláris pont. Bár ez egzaktul nem bizonyított, feltételezhetjük, hogy nincs több szingularitás a rendszerben, tehát ez valóban a fázisátalakulásnak megfelelő pont. Ezen szinguláris ponthoz tartozó hőmérséklet a kritikus hőmérséklet, ennek meghatározása a cél. Vezessük be a paritásoperátort [102] $\mathbf{P} = \sigma_1^x \sigma_2^x$, melynek sajátértékei ± 1 . Ez az operátor kommutál a transzferoperátorral, $\mathbf{T}(q)$ -val, $[\mathbf{T}, \mathbf{P}] = 0$. Ebből következően a fázistér két altérre szeparálódik, $\mathbf{T}(q)$ operátor nem vezet ki a $+1$ vagy -1 sajátértékű altérből. Magas hőmérsékletek esetén, amikor $T \rightarrow \infty$ a $\mathbf{P}_{s.é.} = 1$ sajátértékű altér a domináns, a $T \rightarrow 0$ határesetben pedig a $\mathbf{P}_{s.é.} = -1$ altérben találhatók a rendszert leíró állapotok. Ennek megfelelően a legnagyobb sajátérték alacsony hőmérséklet esetén a -1 , magas hőmérséklet esetén a $+1$ sajátértékkel jellemzett altérben található meg. A két tartomány határpontján található a fázisátalakulási hőmérséklet, ebben a pontban a két különböző sajátérték meg kell egyezzen ($+$, $-$ jellel jelölve a $+1$ és -1 altérhez tartozó sajátértékeket): $\lambda^+(q_c, T_c) = \lambda^-(q_c, T_c)$.

3.1.2.1. Homogén rendszer esete

A részletes tárgyalás első lépéseként írjuk fel a transzfermátrixot általános alakban, majd vizsgáljuk meg ezt a legegyszerűbb homogén esetben, ezekután lépésenként növelve az inhomogenitást végül eljuthatunk egy olyan réteges háromszögrácsig, amelyben m rácsegységnyi periodicitás figyelhető meg. A transzfermátrix alakja általános esetben (P index a paritás operátor sajátértéke):

$$\mathbf{T}^P(q) = \prod_{j=1}^m \mathbf{T}_j^P = \prod_{j=1}^m \exp(A_{1,j}(P)) \exp(A_{2,j}(P, q)), \quad (3.10)$$

itt az A_1 és A_2 értékei a Pauli-operátorokkal kifejezve, ha $q = 0$ vagy $q = \pi/2$:

$$A_{1,j}(P) = L_j^1 \sigma_j^1 + L_j^2 \cdot P \sigma_j^1; \quad A_{2,j}(P, q) = K_j^1 \sigma_j^3 - K_j^2 \cdot S \sigma_j^3, \quad (3.11)$$

ahol

$$S = \cos(q) = \begin{cases} 1; & \text{ha } q = 0 \\ -1; & \text{ha } q = \pi/2 \end{cases} \quad (3.12)$$

A zóna határán a $\mathbf{T}_j^P(q)$ operátor egyszerűen megadható egy 2×2 -es mátrix formájában. Tekintsük az egyik legegyszerűbb esetet, a szabályos háromszögrácsot. Ekkor csak két $j = 1, 2$ indexet kell figyelembe venni:

$$\mathbf{T}_1^P(q) = \begin{pmatrix} C_1 E_1 & S_1 E_1 \\ S_1 E_1^{-1} & C_1 E_1^{-1} \end{pmatrix}; \quad \mathbf{T}_2^P(q) = \begin{pmatrix} C_2 E_2 & S_2 E_2 \\ S_2 E_2^{-1} & C_2 E_2^{-1} \end{pmatrix}. \quad (3.13)$$

Az előző formulában a következő jelölést alkalmaztuk:

$$C_j = \cosh(L_j(1 + P)), \quad S_j = \sinh(L_j(1 + P)) \quad (3.14)$$

és

$$E_1 = \exp((K_1 - KSP)), \quad E_2 = \exp((K - K_1SP)). \quad (3.15)$$

Most, miután általános alakban felírtuk a transzfermátrixot, először a legegyszerűbb esetet tekintjük, amikor homogén a rendszer, itt két különböző paraméter van K, L (ez a homogén négyzetrács esete). Keressük meg a fázisátalakulási pontot. Ekkor nyilván $\mathbf{T}_1^P = \mathbf{T}_2^P$, a sajátértékeket a

$$\lambda^2 - \lambda C(E + E^{-1}) + 1 = 0 \quad (3.16)$$

egyenletből határozhatjuk meg. Schultz és munkatársai [83], akik a homogén négyzetrácsot vizsgálták, meghatározták a λ -val jellemzett sajátérték állapotához rendelhető energiát:

$$\cosh(\epsilon) = \frac{\lambda + \lambda^{-1}}{2}. \quad (3.17)$$

Az ϵ energiát az egyenlet pozitív gyöke adja. Ezen egyenletből következik, hogy a Brillouin-zóna tetszőleges pontjára igaz :

$$\cosh(\epsilon) = \cosh(2K) \cosh(2L) - \sinh(2K) \sinh(2L) \cos(q) \quad (3.18)$$

Ugyanakkor a (3.16) egyenletből $(\lambda + \lambda^{-1})/2$ -öt kifejezve:

$$\cosh(\epsilon) = \cosh(L(1 + P)) \cosh(K(1 - PS)). \quad (3.19)$$

A két egyenletet (3.18-3.19) összevetve látható, hogy $q = \pi/2$ a $P = 1$ és $S = -1$ esetnek felel meg. A $q = 0$ esetet nem kaphatjuk meg a (3.19)-ből semmilyen P, S értékre, hiszen a $q = 0$ esetben (3.19) egyenletből:

$$\cosh \epsilon_0 = \cosh(2(L - K)) \quad \Rightarrow \quad \epsilon_0 = 2(L - K), \quad (3.20)$$

míg $q = \pi$ esetén:

$$\cosh \epsilon_\pi = \cosh(2(L + K)) \quad \Rightarrow \quad \epsilon_\pi = 2(L + K). \quad (3.21)$$

A Brillouin-zóna $q = 0$ -nak megfelelő állapota keveredik a $q = \pi$ -nek megfelelő állapottal, a két állapot keverékéből állítható elő a $P = 1$; $S = 1$ paramétereknek megfelelő állapot. Részletesen kiírva:

$$\cosh \epsilon_0^{P=1} = \cosh(2L) \quad \Rightarrow \quad \epsilon_0^{P=1} = 2L = \frac{\epsilon_0 + \epsilon_\pi}{2}. \quad (3.22)$$

Hasonló igaz a $P = -1$, $S = 1$ állapotra:

$$\cosh \epsilon_0^{P=-1} = \cosh(2L) \quad \Rightarrow \quad \epsilon_0^{P=-1} = 2K = \frac{\epsilon_\pi - \epsilon_0}{2}. \quad (3.23)$$

A fázisátalakulási pont ott van, ahol $S = 1$ mellett a két ($P = 1$ és $P = -1$) altérhez tartozó sajátérték megegyezik, vagyis teljesül $\epsilon_0^{P=1} = \epsilon_0^{P=-1}$, ebből rögtön adódik az izotróp, de nem feltétlenül homogén négyzetrácson értelmezett Ising-modell kritikusságára vonatkozó feltétel: $L = K$ [83].

Tekintsük ezekután a legegyszerűbb háromszögrácsot. Itt próbáljuk meg a kritikussági feltételt megállapítani az előbbi gondolatmenet megismétlésével, $q_c = 0$ feltétellel a fázisátalakulási pontot feltételezve. A háromszögrácsnak megfelelő négyzetrácsban két különböző függőleges K_1 és $K_2 = K \rightarrow \infty$, illetve egy vízszintes paraméter van $\tilde{K}$. $\mathbf{T}_1$, $\mathbf{T}_2$ mátrixok szorzata (mivel $K \rightarrow \infty$) az alábbi alakra egyszerűsödik:

$$\mathbf{T}_1 \mathbf{T}_2^{P=-1}(q_c) = \begin{pmatrix} e^{2(K_1+K)} & 0 \\ 0 & e^{-2(K_1+K)} \end{pmatrix} \quad (3.24)$$

és

$$\mathbf{T}_1 \mathbf{T}_2^{P=1}(q_c) = \begin{pmatrix} \cosh^2(2L) & \cosh(2L) \sinh(2L) e^{2(K_1-K)} \\ \cosh(2L) \sinh(2L) e^{2(K-K_1)} & \sinh^2(2L) e^{2(K-K_1)} \end{pmatrix}. \quad (3.25)$$

A két altérhez tartozó sajátértékek, melyeknek a kritikus pontban meg kell egyezniük, (3.24-3.25) egyenletekből:

$$\lambda^{P=-1} = e^{2(K_1+K)}; \quad \lambda^{P=1} = \cosh^2(2L) + \sinh^2(2L) e^{2(K-K_1)}. \quad (3.26)$$

A két sajátérték egyenlősége adja meg a kritikussági feltételt:

$$1 = \sinh(2\tilde{K}) e^{2K_1}. \quad (3.27)$$

Ezzel megkaptuk a legegyszerűbb homogén háromszögrácsra vonatkozó kritikussági feltételt [103].

3.1.2.2. Réteges rendszerek

Bonyolultsági sorrendben haladva tekintsünk most egy olyan háromszögrácsot, ahol már két fajta vízszintes kötési paraméter van a rácsban, $\tilde{K}_1, \tilde{K}_2$ váltakozó módon elhelyezve.

A $\mathbf{T}_1 \mathbf{T}_2^P$ mátrixok a $K \rightarrow \infty$ határesetben itt is jelentősen egyszerűsödnek, ezek alakja a kritikus pontban:

$$\mathbf{T}_1 \mathbf{T}_2^{P=1} = \sinh(2L_1) e^{2(K-K_1)} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ \cosh(2L_2) & \sinh(2L_2) \end{pmatrix} \quad (3.28)$$

$$\mathbf{T}_1 \mathbf{T}_2^{P=-1} = \begin{pmatrix} e^{2(K+K_1)} & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.29)$$

A sajátértékek egyenlősége ismét megadja a kritikussági feltételt:

$$\lambda^{P=-1} = \lambda^{P=1} \implies (\sinh^2(2L_1) \sinh^2(2L_2))^{\frac{1}{2}} = e^{2K_1} \quad (3.30)$$

$$1 = (\sinh(2\tilde{K}_1) \sinh(2\tilde{K}_2))^{\frac{1}{2}} e^{2K_1}. \quad (3.31)$$

A (3.28-3.29) mátrixok szerkezete tetszőleges m számú periodikusan ismétlődő vízszintes kötési paraméter esetén is hasonló marad². A (3.28) mátrix nyoma ebben az esetben : $\prod_{j=1}^m \sinh(2L_j) e^{(K-K_1)}$, míg a (3.29) mátrix nyoma : $\prod_{j=1}^m e^{K+K_1}$. A (3.28-3.29) mátrixok szerkezetéből következően a nyomok egyúttal a mátrix sajátértékei is. Vagyis a kritikus feltétel:

$$1 = \left[\prod_{j=1}^m \sinh(2\tilde{K}_j) \right]^{\frac{1}{m}} e^{2K_1}. \quad (3.32)$$

Egy lépéssel ismét tovább haladva, ha a függőleges paraméterekből is m darab van, akkor a (3.28-3.29) mátrixnak megfelelő mátrixok sajátértékei:

$$\lambda^{P=1} = \prod_{j=1}^{r_2} \sinh(2L_j) e^{K-K_j} \quad (3.33)$$

$$\lambda^{P=-1} = \prod_{j=1}^{r_2} e^{K+K_j}. \quad (3.34)$$

Ezen a ponton már fel tudjuk írni egy olyan réteges háromszögrács kritikussági feltételét, amelynek periodikusan ismétlődő egysége m egységcellából épül fel. Ezen egységcellában

²Ekkor nem kettő, hanem m különböző $\mathbf{T}_i$ mátrix szorzatát kell képezni, valójában ezeknek a sajátértékeit kellene vizsgálni.

található kötési paraméterek sorrendjétől függetlenül az alábbi kifejezés határozza meg a kritikusságot:

$$1 = \prod_{j=1}^m [\sinh(2\tilde{K}_j) e^{2K_j}]. \quad (3.35)$$

Ez a legáltalánosabb feltétel nyilvánvalóan magában foglalja a korábban levezetett homogén rács kritikus pontját meghatározó feltételt is (3.27).

3.1.2.3. A réteges hatszögrács kritikus feltétele

A háromszögrács részletes tárgyalása után áttérhetünk a hatszögrács problémájára. A fentiekben a háromszögrácsra alkalmazott gondolatmenet itt is megismételhető, azt figyelembe véve, hogy a $K \rightarrow \infty$ határeset helyett itt a $K = 0$ határesetet kell tekintenünk. Ezekután fokozatosan növelve az egységcella nagyságát eljuthatunk végül az m méretű celláig.

Egy egyszerűbb út is járható, a háromszögrácsra kapott eredmény ismertetében megkapjuk a hatszögrácsra vonatkozó hasonló típusú kritikus feltételt, egy csillag-háromszög transzformációval (2.2.2 alfejezet). A hatszögrácsban két típusú kötési paraméter van $\tilde{p}$, és p (3.1.c ábra). A két rács paraméterei között az alábbi összefüggésnek kell teljesülnie (2.49):

$$e^{4K_j} = \frac{\cosh(p_j - 2\tilde{p}_j) \cosh(p_j + 2\tilde{p}_j)}{\cosh^2(p_j)}; \quad e^{4\tilde{K}_j} = \frac{\cosh(p_j + 2\tilde{p}_j)}{\cosh(p_j - 2\tilde{p}_j)}. \quad (3.36)$$

Ezen egyenleteket és a hiperbolikus függvények addíciós összefüggéseit felhasználva, (3.35) egyenletet átalakítva, egyszerűen megkapható a hatszögrácsra vonatkozó feltétel:

$$1 = \prod_{j=1}^m \sinh(2\tilde{p}_j) \tanh(p_j). \quad (3.37)$$

Ezen összefüggés is természetesen visszaadja a homogén hatszögrács kritikussági feltételét [103], mely $1 = \sinh(2\tilde{p}) \tanh(p)$.

3.1.3 Összefoglalás

Analitikusan meghatároztuk a kétdimenziós, rétegesen inhomogén háromszög- és hatszögrács kritikus hőmérsékletét. Zárt alakban felírható kifejezést kaptunk egy m periódusú cella esetén mindkét rács kritikussági feltételére. A csillag-háromszög transzformációra épülő módszerünkkel (3.2 fejezet) a meghatározott kritikus összefüggést nagy pontossággal

ellenőriztük. A fenti kritikus összefüggések nemcsak determinisztikusan ismétlődő sorozatokra érvényesek, azok hasonló formában igazak rétegesen véletlen rács esetén is, ahol a különböző rétegek véletlenszerűen követik egymást.

Ezen kritikussági feltétel ismeretében vizsgáltuk meg a kétdimenziós, rétegesen aperiodikus Ising-modell felületi viselkedését különböző aperiodikus sorozatok esetén (3.2.3 alfejezet).

3.2 Felületi mágnesezettség

Ebben az alfejezetben a kétdimenziós, diagonálisan réteges Ising-modell felületi mágnesezettségét tanulmányozzuk két különböző megközelítést használva. Numerikusan a csillag-háromszög transzformációra épülő iterációval, analitikusan a diagonális rács transzfermátrixának segítségével vizsgálható a probléma.

Ezen módszerekkel arra a kérdésre szeretnénk választ adni, hogy a kötési paraméterekben fellépő aperiodicitás, rendezetlenség milyen hatással van a felületi mágnesezettségre, illetve a felületi spin-spin korrelációs függvényre. A módosított Harris-kritérium szerinti marginális típusú sorozatokat részletesen tanulmányozzuk, itt folytonosan változó exponensekre lehet számítani. Végül vizsgálni tervezzük azt a kérdést, hogy milyen párhuzam vonható a kvantum Ising-lánc és a kétdimenziós, klasszikus, diagonális négyzetrácson értelmezett Ising-modell felületi kritikus viselkedése között.

Az 3.2.1 alfejezetben bemutatjuk a csillag-háromszög transzformációra épülő numerikus módszerünket. A 3.2.2 alfejezetben bemutatjuk, hogyan használható a diagonális transzfermátrix a diagonálisan réteges négyzetrács felületi mágnesezettségének meghatározására. A 3.2.3 alfejezetben a rétegesen aperiodikus kötési paraméterű Ising-modell felületi fázisátalakulásának numerikus vizsgálatáról számolunk be, itt ismertetjük az önhasznószerű hierarchikus sorozatnak megfelelő kötési paraméterekkel rendelkező rendszer esetén kapott eredményeinket.

3.2.1 Az iterációs módszer

Először a numerikus módszert, a Hilhorst és van Leeuwen által [81, 104, 105] kifejlesztett csillag-háromszög transzformációra épülő iterációs módszert mutatjuk be részletesen. A csillag-háromszög transzformáció sorozatos ismétlésével meghatározható a félvégtelen homogén háromszögrács Ising-rendszer felületi mágnesezettsége és korrelációs függvénye. A módszer eredeti formájában csak réteges rácsra alkalmazható. Ebben a részben az iterációs módszer egy lépését mutatjuk be, hogyan adható meg egzakt kapcsolat az

eredeti és az ebből képzett háromszögrács paraméterei között. A 3.2.1.1 részben az eredeti rács és az új rács felületi mágnesezettsége közti kapcsolatot, a 3.2.1.2 részben a felületi korrelációs függvények közötti kapcsolatot határozzuk meg.

A réteges diagonális rács tanulmányozására is alkalmas a módszer, ha megfelelően választjuk meg a kötési paramétereket. Az összes K típusú kötési paramétert 0-nak választva (3.2. ábra), csak a $\tilde{K}$ paraméterek különböznek 0-tól, megkapjuk a diagonális rácsot (3.3. ábra). A módszer röviden a következő: kettős csillag-háromszög transzformációval az eredeti háromszögrácsból egy új háromszögrácsot kapunk. A két rács felületi mágnesezettségét ismert szorzótényező köti össze. Végtelen sokszor ismételve a transzformációt, az eredeti rendszer mágnesezettségét a tényezők szorzata adja. Az előző gondolatmenetet megismételve a korrelációs függvényre is egyszerűen kezelhető kifejezést kapunk.

Részletesen is kövessük nyomon, hogyan épül fel az iterációs módszer egy lépése. A csillag-háromszög transzformáció alkalmazásával a háromszögrács minden háromszögéből egy csillagot kapunk, melyek egy hatszögrácsot alkotnak (3.2. ábra, szaggatott vonal). A hatszögrácson újból végrehajtva egy csillag-háromszög transzformációt, de úgy, hogy más pontokban jelöljük meg a csillagok középpontját, ismét egy háromszögrácsot kapunk (3.2. ábra, pontokból álló hatszögrács).

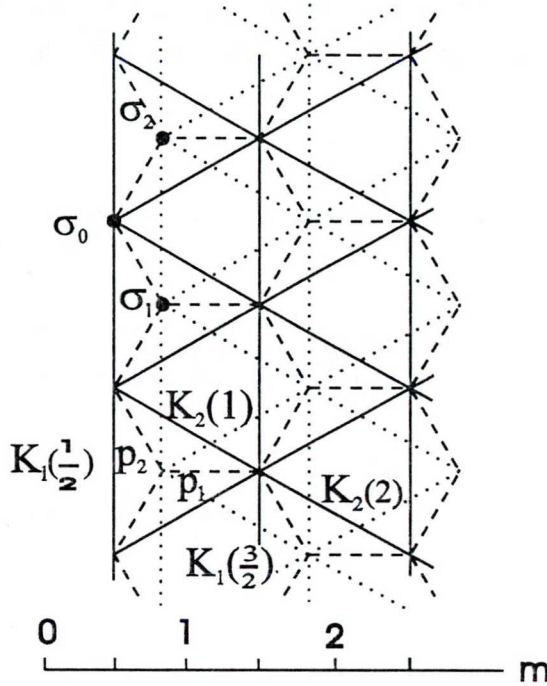
A két rács kötési paraméterei egzaktul meghatározható kapcsolatban vannak. Vizsgáljuk meg, hogyan transzformálódnak az eredeti háromszögrács rendszer kötési paraméterei ezen két lépés során [105]. A 2.2.2 alfejezetben már megmutattuk, hogy a csillag-háromszög transzformációval a háromszög- és hatszögrács között egy megfeleltetés létesíthető. A leképezés során a rendszer állapotösszege változatlan marad, a rácsparaméterek közti kapcsolatot a (2.49) egyenletek írják le. Réteges esetben a háromszögekben két fajta kötési paraméter van $K_1(m)$ és $K_2(m) = K_3(m)$, melyek értékei csak a réteg indexével együtt - m - változnak. A szóbanforgó egyenletek (2.49) alakja ekkor:

$$K_i = F_i(p_1, p_2), \quad i = 1, 2 \quad (3.38)$$

$$F_1(p_1, p_2) = \frac{1}{4} \ln \left[\frac{\cosh(p_1 + 2p_2) \cosh(p_1 - 2p_2)}{\cosh^2(p_1)} \right] \quad (3.39)$$

$$F_2(p_1, p_2) = \frac{1}{4} \ln \left[\frac{\cosh(p_1 + 2p_2)}{\cosh^2(p_1 - 2p_2)} \right] \quad (3.40)$$

Alkalmazva az 3.2. ábrán látható jelölést (K_1, p_2 -nek feles hely(réteg) indexei vannak, a K_2, p_1 -nek egész számok a hely(réteg) indexei), m, n a hely(réteg), illetve az iterációs szám indexei, az előbbi a rács felületétől való távolságot, az utóbbi pedig azt mutatja meg, hogy



3.2. ábra: Folytonos vonal: az eredeti háromszögrács, $K_1; K_2$ kötési paraméterekkel. Szaggatott vonal: a háromszögrácsból képzett hatszögrács, $p_1; p_2$ kötési paraméterekkel. Pontokból álló vonal: az új a háromszögrács. A K_1, K_2 paraméterek csak m függvényében változnak. (K_1 a felülettel párhuzamos, K_2 a felülettel $60^\circ, 120^\circ$ -os szöget bezáró kötések.)

az iteráció hányadik lépéséről van szó. Ezen paramétereket használva az előbbi egyenletek alakja:

$$K_1(m, n) = F_1(p_1(m + \frac{1}{2}, n), p_2(m, n)), \quad m = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \dots \quad (3.41)$$

$$K_2(m, n) = F_2(p_1(m, n), p_2(m - \frac{1}{2}, n)), \quad m = 1, 2, \dots \quad (3.42)$$

A következő lépésben, amikor is a balra mutató csillagokon végezzük a transzformációt, formailag ugyanezeket az egyenleteket kapjuk, de más indexekkel:

$$K_1(\frac{1}{2}, n+1) = F_1(0, p_2(\frac{1}{2}, n)) \quad (3.43)$$

$$K_1(m, n+1) = F_1(p_1(m - \frac{1}{2}, n), p_2(m, n)), \quad m = \frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \dots \quad (3.44)$$

$$K_2(m, n+1) = F_2(p_1(m, n), p_2(m + \frac{1}{2}, n)), \quad m = 1, 2, \dots \quad (3.45)$$

Az eredeti rács $K_1(m, n), K_2(m + \frac{1}{2}, n)$ paraméterei a hatszögrács p_1, p_2 paraméterein keresztül határozzák meg a kettős csillag-háromszög transzformáció után kapott új háromszögrács $K_1(m, n+1), K_2(m + \frac{1}{2}, n+1)$ paramétereit. A p_1, p_2 változók konkrét kiszámításai

elvileg kihagyhatóak a transzformációs sorozatból, ugyanis közvetlen összefüggést kaphatunk a régi és az új rács paraméterei között. Vezessük be a következő jelölést:

$$X = \exp(-4K_1), \quad Y = \sinh^2(2K_2), \quad C_1 = \cosh^2(p_1), \quad C_2 = \cosh^2(2p_2), \quad (3.46)$$

ezekkel a változókkal is felírhatóak természetesen a (3.41-3.42) egyenletek:

$$X = \frac{C_1}{C_1 + C_2 + C_3}, \quad Y = \frac{C_1 C_2 - C_1 - C_2 + 1}{C_1 + C_2 - 1}. \quad (3.47)$$

Az inverz transzformációk, amelyek tulajdonképpen a p változók K változókkal történő kifejezését jelentik:

$$C_1 = \frac{1 - X + Y}{1 - X}, \quad C_2 = \frac{1 + Y}{X}. \quad (3.48)$$

A fenti egyenletekkel már egyszerűen meghatározható a régi és új háromszögrács paramétereinek közvetlen kapcsolata :

$$X\left(\frac{1}{2}, n+1\right) = \frac{X\left(\frac{1}{2}, n\right)}{1 + Y(1, n)} \quad (3.49)$$

$$X(m, n+1) = \frac{(1 - X(m-1, n) + Y(m - \frac{1}{2}, n))X(m, n)}{D(m, n)}, \quad m = \frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \dots \quad (3.50)$$

$$Y(m, n+1) = \frac{(1 - X(m + \frac{1}{2}, n) + Y(m+1, n))Y(m, n)}{D(m + \frac{1}{2}, n)}, \quad m = 1, 2, \dots \quad (3.51)$$

ahol

$$D(m, n) = 1 - X(m-1, n) + Y(m + \frac{1}{2}, n) + X(m, n)Y(m - \frac{1}{2}, n) - X(m-1, n)Y(m + \frac{1}{2}, n) \quad (3.52)$$

Miután közvetlen kapcsolat van a régi és új paraméterek között, egy iterációs séma képezhető, amellyel egzaktul meghatározható a felületi mágnesezettség, illetve korrelációs függvény.

A mágnesezettség és korrelációs függvény szokásos definíciója a felületen:

$$m_f(n) = \langle \sigma_0 \rangle_n \quad (3.53)$$

$$G_{||}(r, n) = \langle \sigma_0 \sigma_r \rangle_n - \langle \sigma_0 \rangle \langle \sigma_r \rangle_n \quad (3.54)$$

a $\langle . \rangle_n$ a sokaságra vonatkozó átlagolást jelenti, az n -edik iterációs lépésben.

3.2.1.1 A felületi mágnesezettség transzformációja

Szemeljünk ki egy felületi spint, hogy nyomon követhessük, hogyan transzformálódik az iteráció során a felületi mágnesezettség. A 3.2. ábrán látható σ_0 spin helye a felületen tetszőleges, hiszen a felülettel párhuzamos irányban, rétegenként a rács paraméterei nem változnak. A transzformáció során köztes szerepet játszó hatszögrácsban a $\sigma_0, \sigma_1, \sigma_2$ spinek is a felületen vannak, de a háromszögrácsok szempontjából a σ_0 az eredeti rács, míg σ_1, σ_2 az új rács felület spinjei közé tartozik.

Itt a mágnesezettségek közötti kapcsolatot keressük, feltételezzük tehát, hogy az új rács felületi mágnesezettségét ismerjük, ezt felhasználva szeretnénk az eredeti rács mágnesezettségét megkapni, ezzel iteratív módon visszavezetni a felületi spin mágnesezettségét a felülettől végtelen távoli belső pont mágnesezettségére.

Meg fogjuk mutatni, hogy a spin várható értéke hogyan függ a szomszédos σ_1 , illetve σ_2 spinek átlagértékeitől. Kanonikus leírást választva írjuk fel annak a valószínűségét, hogy a σ_0 éppen valamelyik értékét veszi fel, feltételezve, hogy a szomszédos spinek σ_1, σ_2 állapotai rögzítettek:

$$P(\sigma_0|\sigma_1, \sigma_2) = \frac{e^{-\beta E'(\sigma_0)}}{e^{-\beta E'(\sigma_0)} + e^{-\beta E'(\sigma'_0)}}. \quad (3.55)$$

Itt az E' csak a σ_0 spinhez tartozó kötéspár energiája, azon konfigurációk esetén, ahol a kiszemelt spin épp az adott σ_0 értéket veszi fel: $-\beta E'(\sigma_0) = p_2\sigma_0\sigma_1 + p_2\sigma_0\sigma_2$. A (3.55)-ben szereplő valószínűség ezzel:

$$P(\sigma_0|\sigma_1, \sigma_2) = \frac{e^{p_2\sigma_0\sigma_1 + p_2\sigma_0\sigma_2}}{\sum_{\sigma_0=\pm 1} e^{p_2\sigma_0\sigma_1 + p_2\sigma_0\sigma_2}}. \quad (3.56)$$

Így a spin várható értéke:

$$\langle \sigma_0 \rangle = \frac{\sum_{\sigma_0} \sigma_0 e^{p_2\sigma_0\sigma_1 + p_2\sigma_0\sigma_2}}{\sum_{\sigma_0} e^{p_2\sigma_0\sigma_1 + p_2\sigma_0\sigma_2}} = \frac{e^{p_2\sigma_1 + p_2\sigma_2} - e^{-p_2\sigma_1 - p_2\sigma_2}}{e^{p_2\sigma_1 + p_2\sigma_2} + e^{-p_2\sigma_1 - p_2\sigma_2}}, \quad (3.57)$$

rögtön látható, hogy ez a várható érték tanh függvény alakú. További lépésekkel egyszerűsíthető (3.57) egyenlet a tanh függvény addíciós tulajdonságait és szimmetriáját felhasználva, majd $(1 - \sigma_1\sigma_2 \tanh(p_2)^2)$ -vel beszorozva, egyszerűsítve:

$$\langle \sigma_0 \rangle = \tanh(p_2\sigma_1 + p_2\sigma_2) = \frac{\sigma_1 \tanh(p_2) + \sigma_2 \tanh(p_2)}{1 + \sigma_1\sigma_2 \tanh^2(p_2)} = (\sigma_1 + \sigma_2) \frac{\tanh(p_2)}{1 + \tanh^2(p_2)}. \quad (3.58)$$

Mivel σ_1, σ_2 értékeire semmilyen megkötést nem alkalmaztunk, így a várható értékekre is igaz kell hogy legyen az előbbi egyenlet, illetve mivel a rendszer réteges jellege miatt $\langle \sigma_1 \rangle$ és $\langle \sigma_2 \rangle$ értéke azonos, így:

$$\langle \sigma_0 \rangle = 2 \langle \sigma_1 \rangle \frac{\tanh(p_2)}{1 + \tanh^2(p_2)}. \quad (3.59)$$

Vagyis az σ_0 -es és σ_1 -es spin mágnesezettsége között közvetlen összefüggés van, egy tényezővel beszorozva megkaphatjuk egyiket a másiktól. A transzformációs sorozat jellege miatt a $\langle \sigma_1 \rangle$ és $\langle \sigma_0 \rangle$ közötti kapcsolat tulajdonképpen az új és régi felületi mágnesezettség közötti kapcsolat. Ezért az iterációs szám indexeit használva az előbbi egyenlet:

$$\langle \sigma \rangle_n = \langle \sigma \rangle_{n+1} \frac{2 \tanh(p_2)}{1 + \tanh^2(p_2)} = \langle \sigma \rangle_{n+1} \frac{\sinh(2p_2)}{\cosh(2p_2)}. \quad (3.60)$$

Célszerű kifejezni a háromszögrács paramétereivel is a $\frac{\sinh(2p_2)}{\cosh(2p_2)}$ transzformációs tényezőt. Ezen tényező csak a p_2 paramétertől függ, így a (3.46)-ben már definiált C_2 változóval a tényező :

$$\frac{\sinh(2p_2)}{\cosh(2p_2)} = [1 - C_2^{-1}]^{\frac{1}{2}}. \quad (3.61)$$

A C_2 változót pedig mint az X, Y változókkal kifejezve és felhasználva a (3.46-3.48) egyenleteket:

$$\frac{\sinh(2p_1)}{\cosh(2p_1)} = [1 - X(\frac{1}{2}, n+1)]^{\frac{1}{2}} = [1 - e^{-4K_1(\frac{1}{2}, n+1)}]^{\frac{1}{2}}. \quad (3.62)$$

A fentiekből következően az iterációs szám függő felületi mágnesezettség mint az iterációs szám függvénye az alábbi rekurziós összefüggéssel határozható meg tetszőleges iterációs szám esetén:

$$m_f(n) = [1 - X(\frac{1}{2}, n+1)]^{\frac{1}{2}} m_f(n+1). \quad (3.63)$$

Az $n \rightarrow \infty$ határesetben megkaphatjuk a tényleges felületi mágnesezettséget, $m_1(0)$ -et, ha $m_f(\infty) = \pm 1$ választjuk, vagyis rögzítjük a végtelen távoli spineket. Ha nem rögzítenénk ezeket, kezelhetetlen lenne a probléma.

$$m_f(0) = \lim_{n \rightarrow \infty} [f(n)]^{1/2} m_f(n) = \pm [f(\infty)]^{1/2}, \quad (3.64)$$

ahol

$$f(n) = \prod_{j=1}^n [1 - X(\frac{1}{2}, j)]. \quad (3.65)$$

Ezzel egy numerikusan egyszerűen kezelhető kifejezést kaptunk a felületi mágnesezettségre. A módszer jellegénél fogva véges méret effektusok nélkül adja meg a felületi mágnesezettséget. Hasonló megállapítható a korrelációs függvény transzformációjára is.

3.2.1.2 A felületi spin-spin korrelációs függvény transzformációja

A felületi korrelációs függvény $G_{||}(r) = \langle \sigma_0 \sigma_r \rangle - \langle \sigma_0 \rangle \langle \sigma_r \rangle$ transzformációjának vizsgálatakor a mágnesezettség transzformációs szabályának levezetésénél látott

módon járhatuk el. Először is írjuk fel, mi annak a valószínűsége, hogy a $\sigma_0\sigma_r$ egy adott értéket vesz fel ($\sigma'_0, \sigma'_1, \sigma'_r, \sigma'_{r+1}$ az új felületen levő spinek):

$$P(\sigma_0, \sigma_r | \sigma'_0, \sigma'_1, \sigma'_r, \sigma'_{r+1}) = \frac{e^{-\beta E'(\sigma_0, \sigma_r)}}{\sum_{\sigma_0, \sigma_r} e^{-\beta E'(\sigma_0, \sigma_r)}} = \frac{e^{p_2(\sigma_0\sigma'_0 + \sigma_0\sigma'_1 + \sigma_r\sigma'_r + \sigma_r\sigma'_{r+1})}}{\sum_{\sigma_0=\pm 1} e^{p_2(\sigma_0\sigma'_0 + \sigma_0\sigma'_1 + \sigma_r\sigma'_r + \sigma_r\sigma'_{r+1})}} \quad (3.66)$$

A korrelációs függvény első tagja:

$$\langle \sigma_0\sigma_r \rangle = \frac{\sum_{\sigma_0, \sigma_r} \sigma_0\sigma_r e^{p_2(\sigma_0\sigma'_0 + \sigma_0\sigma'_1 + \sigma_r\sigma'_r + \sigma_r\sigma'_{r+1})}}{\sum_{\sigma_0, \sigma_r} e^{p_2(\sigma_0\sigma'_0 + \sigma_0\sigma'_1 + \sigma_r\sigma'_r + \sigma_r\sigma'_{r+1})}} = \tanh(p_2(\sigma'_0 + \sigma'_1)) \tanh(p_2(\sigma'_r + \sigma'_{r+1})) \quad (3.67)$$

A mágnesezettség transzformációjánál látott átalakításokat lépésről lépésre megismételve, az előző egyenletre adódik:

$$\langle \sigma_0\sigma_r \rangle = \frac{(\langle \sigma'_0\sigma'_r \rangle + \langle \sigma'_0\sigma'_{r+1} \rangle + \langle \sigma'_1\sigma'_r \rangle + \langle \sigma'_1\sigma'_{r+1} \rangle)}{4} [1 - X(\frac{1}{2}, n)]. \quad (3.68)$$

A $\langle \sigma_0 \rangle \langle \sigma_r \rangle$ transzformációja a mágnesezettség transzformációjából egyszerűen adódik:

$$\langle \sigma_0 \rangle \langle \sigma_r \rangle = \langle \sigma_0 \rangle^2 = [1 - X(\frac{1}{2}, n)] \langle \sigma'_0 \rangle^2. \quad (3.69)$$

A korrelációs függvény mindkét tagjának transzformációja ismert, maga a korrelációs függvény transzformációja pedig:

$$G_{||}(r, n) = \frac{1 - X(\frac{1}{2}, n)}{4} [G_{||}(r+1, n+1) + 2G_{||}(r, n+1) + G_{||}(r-1, n+1)]. \quad (3.70)$$

Az $n \rightarrow \infty$ határesetben keressük a felületi korrelációs függvényt, a $G_{||}(r, 0)$ -t:

$$G_{||}(r, 0) = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{4} \sum_{j=1}^n p(1, j-1 | r, 0) f(j) G_{||}(0, j) + \sum_{s=1}^{\infty} p(s, n | r, 0) f(n) G_{||}(s, n) \quad (3.71)$$

Az első tag az iteráció során keletkező olyan tagokat tartalmazza, amelyek $G_{||}(0, r)$ típusúak, a második az $G_{||}(s \neq 0, j)$ típusú tagok, ezek a valódi korrelációs függvény típusú tagok.

Először a második összeg határértékét állapítjuk meg Hilhorst és van Leeuwen gondolatmenetét követve. A $p(s, n | r, 0)$ valószínűsége az iterációs folyamat tulajdonságaiból következően igaz az alábbi összefüggés:

$$p(s, n+1 | r, 0) = \frac{1}{4} [p(s+1, n | r, 0) + 2p(s, n | r, 0) + p(s-1, n | r, 0)], \quad s \geq 1. \quad (3.72)$$

Továbbá fennállnak még a p valószínűségek: $p(s, 0 | r, 0) = \delta_{rs}$, illetve $p(0, n | r, 0) = 0$, mivel itt $s > 1$ eset lehetséges csak. A $p(s \geq 1, n | r, 0)$ valószínűség kiszámításánál azt az analógiát használhatjuk fel, hogy ezen valószínűség tulajdonképpen az egydimenziós, r koordinátájú pontból induló n lépést megtevő bolyongó s pontba való jutásának valószínűsége

úgy, hogy lépésenként $p = \frac{1}{4}$ valószínűséggel vagy $+1$ -et, $p = \frac{1}{4}$ -1 -et lép, míg $p = \frac{1}{2}$ valószínűséggel nem változtatja meg a koordinátáját. A problémát részletesen nem oldjuk meg, csak Pathria eredményére hivatkozunk [106]:

$$p(s, n | r, 0) = \frac{1}{4^n} \left[\binom{2n}{n+r+s} - \binom{2n}{n+r-s} \right]. \quad (3.73)$$

Jelöljük $Q(r, n)$ -nel a $p(s, n|r, 0)$ valószínűségek s szerinti végtelen összegét $Q(r, n) = \sum_{s=1}^{\infty} p(s, n|r, 0)$. A $p(s, n|r, 0)$ $+$, $-$ előjelű tagok összege, amelyek csak az s változóban különböznek, az s szerinti végtelen összeget képezve így lesznek olyan tagok, amelyek kétszer is előfordulnak különböző előjellel, ezek kiesnek az összegzés során, illetve lesznek olyanok, amelyeknek nincs ellentétes előjelű párjuk az összegben:

$$Q(n, r) = \frac{1}{4^n} \left(\sum_{s=1}^{n+r} \binom{2n}{n+r-s} - \sum_{s=1}^{n-r} \binom{2n}{n+r+s} \right) = \frac{1}{4^n} \sum_{k=n-r+1}^{n+r} \binom{2n}{k}. \quad (3.74)$$

Azt szeretnénk bizonyítani, hogy (3.71) egyenletben a második tag $n \rightarrow \infty$ határesetben 0 járulékot ad. Ehhez elegendő megmutatni, hogy a $Q(n, r) \rightarrow 0$, mivel a $G_{||}$ és $f(n)$ korlátos. A (3.74) egyenletből nyilvánvaló, hogy: $Q(r, n) \leq (2r-1)4^{-n} \binom{2n}{n}$, mivel $\binom{2n}{n} \geq \binom{2n}{k}$. A faktoriálisok becslésére a Stirling-formulát használva:

$$Q(r, n) \leq (2r-1)[\pi n]^{-1/2} \quad (3.75)$$

látható, hogy tetszőleges kicsiny szám alá csökken a $Q(r, n)$, ha megfelelően nagy n . Tehát (3.71) egyenletben valóban csak az első tag ad nem 0 járulékot a $n \rightarrow \infty$ határesetben, ezt és a (3.73) egyenletet, illetve a binomiális együtthatók alapvető tulajdonságait felhasználva $n \rightarrow \infty$ határesetben a (3.71) egyenlet alakja:

$$G_{||}(r, 0) = \frac{1}{4} \sum_{n=1}^{\infty} 4^{-n} \frac{r}{n} \binom{2n}{n+r} f(n) G_{||}(0, n). \quad (3.76)$$

Ezzel a korrelációs függvényre is olyan rekurzív kifejezést kaptunk, mely numerikusan egyszerűen kezelhető, számítógépes futtatásra alkalmas lehet tetszőleges réteges kötési paraméter kiosztás esetén. A mágnesezettséghez hasonlóan itt sem lépnek fel véges méret effektusok.

3.2.1.3 Az iterációs módszer és a kritikus exponensek

A mágnesezettség (3.64) és a korrelációs függvény (3.76) kifejezése az $X(\frac{1}{2}, n)$ aszimptotikus értékét helyettesítve ezekbe az alábbiak szerint módosul:

$$m_f = [f(n_0)]^{\frac{1}{2}} \exp \left[-\frac{1}{2} \int_{n_0}^{\infty} X(\frac{1}{2}, n) dn \right] \quad (3.77)$$

$$G_{\parallel}(r) \sim r \int_r^{\infty} n^{3/2} e^{-r^{2/n}} F(n, n_0) (1 - F(\infty, n)) dn, \quad (3.78)$$

ahol $F(n, n_0) = \exp(-\int_{n_1}^{n_2} X(\frac{1}{2}, j) dj)$. Egyszerűen megmutatható, hogy az $X(\frac{1}{2}, n)$ aszimptotikus viselkedése határozza meg az exponenseket. Homogén Ising-modell esetében a kritikus pontban:

$$X(\frac{1}{2}, n) \simeq \frac{1}{2n}, \quad (3.79)$$

ezt beírva a (3.77) egyenletbe következik, hogy: $m_1(0) = 0$ és $f(n) \sim n^{-1/2}$. A felületi korrelációs függvény skálázása pedig (3.78)-ból:

$$G_{\parallel}(r) \sim r^{\eta_{\parallel}}, \quad \text{ahol} \quad \eta_{\parallel} = 1. \quad (3.80)$$

Egy tetszőleges rétegesen inhomogén rendszer esetén az $\eta_{\parallel}$ exponenst meghatározó összefüggés [106]:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} 2nX(\frac{1}{2}, n) = \eta_{\parallel}, \quad (3.81)$$

ha létezik a fenti kifejezés határértéke. A módszerrel a mágneszettség nemcsak a kritikus pontban, hanem tetszőleges véges t hőmérsékleten meghatározható az $X(\frac{1}{2}, n)$ mennyiség szorzatából (3.65), a véges hőmérsékletekre vonatkozó mágneszettségi adatokból meghatározható β_f exponens is. Ismert a felületi korrelációs függvény lecsengési exponense és a mágneszettség felületi exponense, valamint a felületi korrelációs hossz hőmérsékleti exponense között az alábbi összefüggés, melyből két exponenst meghatároztunk módszerünkkel:

$$\eta_{\parallel} = \frac{2\beta_f}{\nu_{\parallel}}. \quad (3.82)$$

Megmutattuk, hogy az $X(\frac{1}{2}, n)$ paraméter aszimptotikus viselkedése egyértelműen meghatározza a rendszer mágneszettségének és korrelációs függvényének kritikus exponenseit réteges inhomogén rendszer esetén.

3.2.2 Diagonális transzfermátrix réteges rendszerekre

Korábban ismertettük a transzfermátrix technikát és annak néhány alkalmazását. A transzfermátrix technika ebben az esetben analitikus megközelítést tesz lehetővé. A főbb lépéseket tekintjük át ebben a részben, részletes bizonyítások nélkül. A diagonális négyzetrács transzfermátrixát felírtuk a 2.2.6 alfejezetben. A rács felületi mágneszettségét a transzfermátrix $|0 \rangle; |1 \rangle$ állapotai határozzák meg, $m_f = \langle 0 | \sigma_1^x | 1 \rangle$ kifejezéssel, hasonlóan, mint (2.66)-ben a kvantum Ising-láncre vonatkozólag. Amennyiben megmutatnánk, hogy a klasszikus, réteges diagonális rácson értelmezett Ising-modell

transzfermátrixa (2.70) és a kvantum Ising-lánc Hamilton-operátora (2.62) felcserélhető $[\mathbf{T}^2, \mathcal{H}] = 0$, akkor mivel a két mátrix sajátvektorainak meg kell egyeznie, a két rendszer felületi mágnesezettsége közötti azonosságnak is fenn kell állnia. További részletes számolás nélkül közöljük, hogy a kvantum Ising-lánc Hamilton-operátora, amely³

$$\mathcal{H} = - \sum_{i=1}^{N-1} J_i \sigma_i^x \sigma_{i+1}^x - \sum_{i=1}^N h_i \sigma_i^z \quad (3.83)$$

felcserélhető a réteges paraméter kiosztású diagonális négyzetrács transzfermátrixával [133], ha teljesül a diagonális rácsot és a kvantum Ising-láncot jellemző kötési paraméterek között:

$$h_i \frac{C_{2i-2}}{C_{2i}} = h_{i+1} \frac{C_{2i+1}}{C_{2i-1}}, \quad \text{és} \quad J_i = h_i S_{2i} S_{2i-1} \frac{C_{2i-2}}{C_{2i}}. \quad (3.84)$$

Korábban megmutattuk (2.68), hogy a fenti módon megadott Ising-lánc felületi mágnesezettsége

$$m_f = \left[1 + \sum_{i=1}^{\infty} \prod_{j=1}^i \left(\frac{h_j}{J_j} \right)^2 \right]^{-\frac{1}{2}} = \left[1 + \sum_{i=1}^{\infty} \prod_{j=1}^i S_j^{-2} \right]^{-\frac{1}{2}}. \quad (3.85)$$

Itt már kihasználtuk azt, hogy $C_i = \cosh(2K_i)$; $S_i = \sinh(2K_i)$, illetve a (3.84) összefüggést a két rendszer kötési paraméterei között. Az (3.85) kifejezéssel azonos módon határozható meg a kvantum Ising-lánc és a diagonális rács felületi mágnesezettsége.

Összefoglalásképpen: a diagonális négyzetrácson értelmezett Ising-modell transzfermátrixa és a kvantum Ising-lánc Hamilton-operátora felcserélhető bizonyos feltételekkel. Ekkor a két rendszer felületi mágnesezettsége hasonló módon határozható meg.

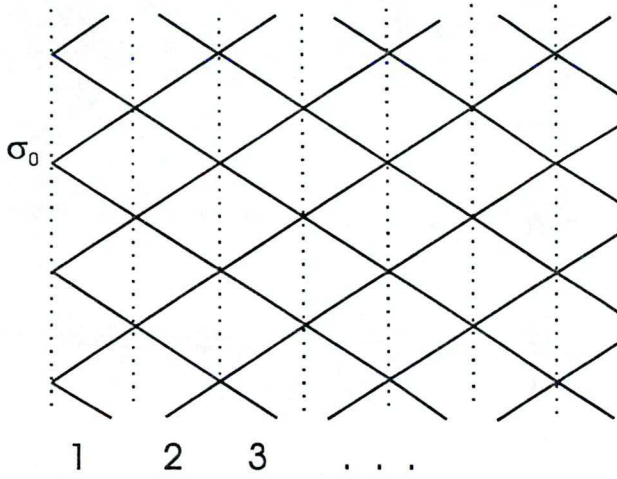
3.2.3 Eredményeink aperiodikus rendszerekre

Diagonálisan réteges, aperiodikus négyzetrácson levő Ising-modell felületi fázisátalakulására kapott eredményeinket foglaljuk össze ebben a részben. (Aperiodikus rendszerekben a felületi viselkedés mellett a tömbi kritikus viselkedés is eltérő lehet a tiszta rendszer viselkedésétől. Az aperiodikus sorozat szerkezeti tulajdonsága miatt itt fraktálfüggvényyszerűen a felületre merőleges irányban helyről-helyre változó exponensek megjelenésére lehet számítani.) A rendszer kritikus feltételét meghatároztuk a (3.35) egyenletben. Diagonális négyzetrács esetében, ahol $K_j = 0$, a feltétel alakja⁴:

$$1 = \lim_{L \rightarrow \infty} \prod_{j=1}^L \sinh(2\tilde{K}_j). \quad (3.86)$$

³A (2.62) egyenletben felírt operátorhoz képest itt az x,z tengelyeket felcseréltük.

⁴Ez formailag hasonlít a kvantum Ising-lánc kritikus feltételére [121].



3.3. ábra: A háromszögrácsban a szaggatott vonallal jelzett kötési paramétereket 0-nak választva megkapjuk a diagonális rácsot (folytonos vonal), az egymást követő rétegeket megszámoztuk.

Ezt átírhatjuk olyan alakba, amelyből könnyebben meghatározható a különböző kötési paraméterek közötti összefüggés:

$$\lim_{L \rightarrow \infty} \sum_{j=1}^L \ln(S_j) = 0, \quad \text{ahol} \quad S_i = \sinh(2\tilde{K}_j). \quad (3.87)$$

$S_i = S r^{f_i}$, ahol f_i az aperiodikus sorozatnak megfelelően 0 vagy 1 (2.3.1 alfejezet). Aperiodikus sorozat esetében nem lehet cellákra szabdalni a rácsot, ezért kell végtelenig összegezni a (3.86) kifejezésben. A sorozatot alkotó jelek sűrűségét ismerve a fenti kifejezés egyszerűen kiértékelhető, a kötési paraméterek kritikus értékére a $S_c = r^{-\rho_1}$ adódik. A jelek sűrűsége pedig a helyettesítési mátrixból számolható ki. Homogén rendszer esetén $S_c = 1$.

A relevancia-irrelevancia kritérium szerinti különböző típusú aperiodikus sorozatokra vonatkozó eredményeinket tekintjük át a következőekben. Először az irreleváns ($\omega < 0$), majd releváns sorozatokra ($\omega > 0$) vonatkozó eredményeinket közöljük, ezek után a hosszabb tárgyalást igénylő eredményeinket ismertetjük a marginális sorozatokra ($\omega = 0$) vonatkozólag. Végül az úgynevezett hierarchikus sorozatokra vonatkozó eredményeinket mutatjuk be. A klasszikus, diagonális Ising-modell esetén kapott eredményeinket a kvantum Ising-láncre ismert egzakt eredményekkel vetjük össze.

3.2.3.1 Irreleváns perturbáció: Thu-Morse sorozat

A sorozatra jellemző vándorlási exponens: $\omega = -\infty$. A két jel 0,1 sűrűségéből következik, hogy $S_c = r^{-1/2}$, felhasználva (3.86) egyenletet. Numerikus eredményeink szerint teljesül a

$$\lim_{n \rightarrow \infty} 2nX\left(\frac{1}{2}, n\right) = \eta_{||} = 1 \quad (3.88)$$

nagy pontossággal (10^{-5}), ahogyan irreleváns perturbáció esetén lennie kell. Hasonló pontossággal igaz $\beta_f = 1/2$, ez a mágnesezettség hőmérséklet függéséből állapítható meg. A felületi mágnesezettség kvantum Ising-lánc esetén felhasználva a (3.85) egyenletet [34]:

$$m_f = \frac{2t^{1/2}}{r^{1/2} + r^{-1/2}} \left[1 + \frac{1}{4} \left(\frac{r-1}{r+1} \right)^2 t + O(t^2) \right], \quad (3.89)$$

ahol $t = 1 - (S_c/S)^2$, a felületi mágnesezettség exponense $\beta_f = \frac{1}{2}$. A két rendszer felületi kritikus viselkedése valóban azonos és ez megegyezik a tiszta rendszer viselkedésével, ahogyan irreleváns sorozat esetében várható.

3.2.3.2. Releváns perturbáció: Rudin-Shapiro sorozat

A sorozat vándorlási exponense: $\omega = 1/2$. A jelsűrűségből a kritikus paraméter meghatározható a (3.86) egyenlettel: $S_c = r^{-1/2}$; ez megegyezik a Thu-Morse sorozat kritikus paraméterével. A felületi mágnesezettség egzaktul meghatározható a kritikus pontban a (3.85) egyenletből, mint az r függvénye. Numerikusan eredményeinkkel nagy pontossággal (10^{-2}) visszakaptuk a kvantum Ising-láncre ismert egzakt eredményt [108], miszerint:

$$m_{f,c} = \frac{1-r}{\sqrt{1-r+r^2}}, \quad \text{ha } r \leq 1. \quad (3.90)$$

A kritikus pontban megmaradó mágnesezettség elsőrendű fázisátalakulást jelez. Az $r > 1$ tartományban a felületi spinek lokálisan gyengébben vannak kötve a többi spinhez, ekkor a felületi mágnesezettség egy más típusú viselkedése figyelhető meg. Az $r > 1$ tartományban a $\lim_{n \rightarrow \infty} 2nX(\frac{1}{2}, n) \rightarrow \infty$, vagyis a felületi korrelációs függvény gyorsabban cseng le, mint bármilyen hatvány függvény, nyújtott exponenciális függvény alakú. A kvantum Ising-láncre vonatkozó egzakt eredmény erre a tartományra [108]:

$$m_f \sim \exp \left[(-a(r-1)^2 t^{-1}) \right], \quad (3.91)$$

ami összhangban van a numerikus eredményekkel, másrészt egzakt eredmény a megváltozott kritikus viselkedésre, analitikusan is kimutatva Rudin-Shapiro sorozat releváns jellegét.

3.2.3.2 Marginális perturbációk

3.2.3.2.A. A Fredholm-sorozat

A sorozat vándorlási exponense: $\omega = 0$. A kritikus összefüggés a jelsűrűségből és (3.86)-ból $S_c = 1$, vagyis nem változik meg a homogén esethez képest. A sorozat szerkezetéből következően a perturbáció a felület közelére korlátozódik, attól távolodva az aperiodicitás hatványfüggvényszerűen lecseng. Numerikus eredményeink szerint felületi viselkedés két tartományra osztható. Az $r \leq \sqrt{2}$ tartományon megmaradó felületi mágneszettség van a kritikus pontban:

$$m_{f,c} = \sqrt{\frac{r^2 - 2}{2r^2 - 3}}. \quad (3.92)$$

Ezen a tartományon a fázisátalakulás elsőrendű, a mágneszettség ugrik a fázisátalakulási pontban 0-ról a fenti értékre.

Az $r > \sqrt{2}$ tartományban már nincs megmaradó mágneszettség, a fázisátalakulás másodrendű, a mágneszettség exponense függ r -től:

$$\beta_f = \frac{1}{2} - \frac{\ln(r)}{\ln(2)}, \quad \text{ha} \quad r < 2. \quad (3.93)$$

$10^{-2} - 10^{-3}$ pontossággal kaptuk meg az exponens r függését. A kvantum Ising-láncre vonatkozó egzakt számolások teljes összhangban vannak a fenti eredményekkel [36]. A korrelációs függvény exponense $\eta_{||} = 1$ és a mágneszettség exponense között nagy pontossággal valóban fennáll a (3.82) összefüggés.

3.2.3.2.B. A periódus-kettőző sorozat

A sorozat vándorlási exponens $\omega = 0$. A sorozatot alkotó jelek sűrűségéből $S_c = r^{-2/3}$. Numerikus eredményeink az r inhomogenitási paraméter szerint folytonosan változó mágneszettségi exponenst adtak a korábban látott nagy pontossággal ($10^{-2} - 10^{-3}$):

$$\beta_f = \frac{\ln[(1 + r^{2/3})(1 + r^{-2/3})]}{4 \ln(2)}. \quad (3.94)$$

Megfigyelhető (2.77)-ben, hogy a sorozat az utolsó jeltől eltekintve középpontosan szimmetrikus. Ennek a következménye az, hogy a felületi mágneszettség exponense a sorozat mindkét végéről számolva ugyanannyi, hasonlóan, mint a kvantum Ising-lánc esetében [34].

A lecsengési exponenssel kapcsolatban két megjegyzést írunk le röviden, a magyarázatukat pedig a következő részben írjuk le. Egyrészt $\eta_{||}$ numerikus meghatározása során a $2nX(\frac{1}{2}, n)$ mennyiség periodikus viselkedést mutatott $\ln(n)$ függvényében (3.4.a ábra). Az oszcillációkat kiátlagolva $\eta_{||} = 1$ exponens értéket kapunk, ami ellentmond (3.82)-nak.

3.2.3.2.C. A papírhajtogató sorozat

Ezen sorozat esetén is $\omega = 0$, a kritikus pontban $S_c = r^{1/2}$. A felületi mágnesezettség exponense különböző volt attól függően, hogy a sorozat mely vége volt a felületen. Eredményeink szerint a sorozat bal oldalán a mágnesezettségi exponensek:

$$\beta_f = \frac{\ln(1 + r^{-1})}{2 \ln 2}. \quad (3.95)$$

A sorozat másik végén (jobb oldalán) pedig:

$$\bar{\beta}_f = \frac{\ln(1 + r)}{2 \ln 2}. \quad (3.96)$$

Az $r \rightarrow r^{-1}$ cserével megkaphatjuk β_f -ból $\bar{\beta}_f$ -át. Ez annak a következménye, hogy a sorozat nem középpontosan szimmetrikus, de r és r^{-1} felcserélése - a legutolsó jeltől eltekintve - a jobb és bal oldalak felcserélésének felel meg, jól látható ez (2.78)-ben. A sorozat két végén különböző korrelációs függvény exponenszt találtunk:

$$\eta_{||} = \frac{2\beta_f}{\beta_f + \bar{\beta}_f}; \quad \bar{\eta}_{||} = \frac{2\bar{\beta}_f}{\beta_f + \bar{\beta}_f}. \quad (3.97)$$

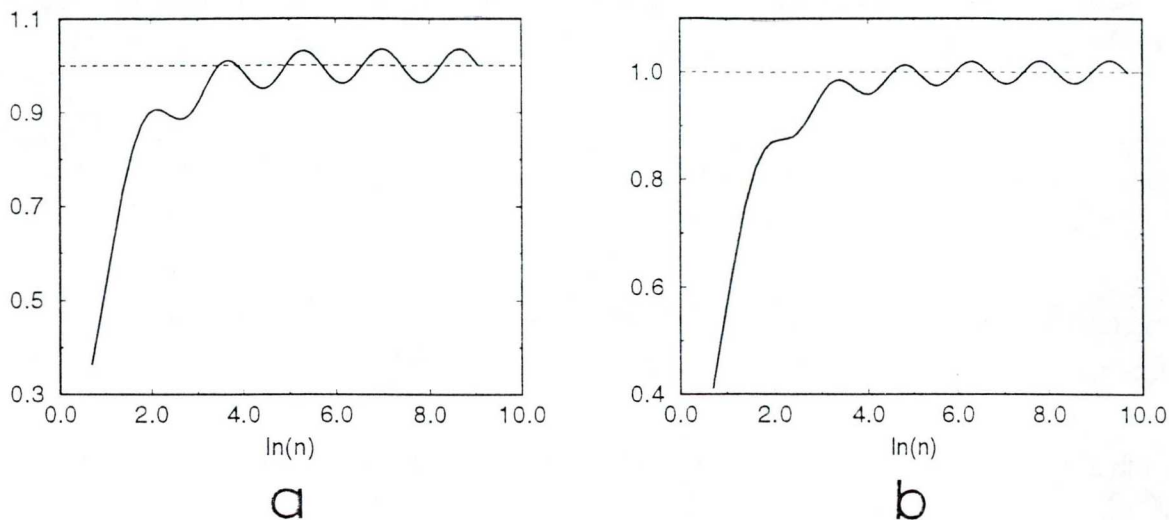
Az $\bar{\eta}_{||}$ exponenszt is megkaphatjuk $\eta_{||}$ -ból az $r \rightarrow r^{-1}$ cserével. Ezek az eredmények teljes egyezésben vannak a kvantum Ising-láncre kapott analitikus eredményekkel [109].

Az $\eta_{||}$ -t aszimptotikusan megadó kifejezés itt is oszcillál egy érték körül $\ln(n)$ függvényében (3.4.b ábra) és az oszcillációkat kiátlagolva itt sem teljesül a (3.82) exponens reláció. A kvantum Ising-láncre vonatkozó eredményeknek teljesen megfelelnek a fenti eredmények, ott sem teljesül a (3.82) reláció, mint ahogyan a periódus-kettőző sorozatnál sem teljesült. Az ellentmondás feloldása az anizotróp skálázásban rejlik. Abban az esetben, ha a felülettel párhuzamos és arra merőleges irányban a korrelációs függvény különböző exponenssel divergál $\xi_{||} \sim \xi_{\perp}^z$, az l, t függő korrelációs függvény viselkedése:

$$G_{||}(l, t) = b^{-2\beta_f/\nu} G_{||}(l/b^z, b^{1/\nu} t), \quad (3.98)$$

a $t = 0$, $l = b^z$ választással rögtön adódik:

$$G_{||} \sim l^{2\beta_f/z\nu}. \quad (3.99)$$



3.4. ábra: Logperiodikus oszcilláció $\ln(n)$ függvényében. Az a görbe a periódus-kettőző sorozathoz tartozó $2nX(\frac{1}{2}, n)$ mennyiség. A b görbe a papírhajtogatósorozathoz tartozó $\frac{\beta_f + \bar{\beta}_f}{\beta_f} X(\frac{1}{2}, n)n$ mennyiség. Mindkét sorozatot $r = 1/4$ inhomogenitási paraméter mellett vizsgáltuk.

A z anizotrópia exponens az adott sorozat két különböző végéről számolt mágnesezettségi exponens összege:

$$z = \beta_f + \bar{\beta}_f. \quad (3.100)$$

A felülettel párhuzamos irányban más a korrelációs függvény skálázása, itt a $\nu_{\parallel} = z\nu$ exponenssel írható le [132, 133]. Anizotróp skálázást feltételezve megmagyarázhatóak az előbbi ellentmondó eredmények. A periódus-kettőző sorozat esetében, amely szimmetrikus, a két mágnesezettségi exponens megegyezik $\beta_f = \bar{\beta}_f$, így egyszerűen adódik (3.99)-ből a $\eta_{\parallel} = 2\beta_f/2\beta_f = 1$, de a $\nu_{\parallel} = z\nu$ exponenssel teljesül a (3.82) reláció. A papírhajtogatósorozat esetében a két végről számolt mágnesezettségi exponens nem egyezik meg, de az anizotróp skálázásból következő $\nu_{\parallel}$ exponens figyelembevételével teljesül a (3.82) reláció. Az $\eta_{\parallel}$ exponens közelítésére szolgáló (3.81) kifejezés oszcillációja a jel sűrűség oszcillációjának a következménye. A (2.73)-ban szereplő F periodikus fraktálfüggvény argumentumában $\ln(L)/\ln(\Lambda_1)$ szerepel, tehát amennyiben $\ln(\Lambda_1)$ véges, akkor oszcilláló viselkedést mutatnak a fizikai mennyiségek $\ln(L)$ függvényében (és a mi esetünkben $\ln(n)$ függvényében). Amennyiben $\ln(\Lambda_1)$ nem véges, például a Fredholm sorozatnál, ott nem figyelhető meg az oszcilláció.

Figyelembe véve az anizotróp skálázásra, illetve a logaritmikus oszcillációkra vonatkozó észrevételeinket, a marginális típusú sorozatok esetén az inhomogenitással folytonosan változó exponenseket kaptunk, melyek teljesítik a (3.82) exponens relációt.

3.2.3.3 A hierarchikus sorozatot követő réteges rendszer

Ebben az alfejezetben írunk röviden a majdnem-periodikus szerkezettel rendelkező hierarchikus sorozatokkal [110] kapcsolatos eredményeinkről [134]. A hierarchikus sorozatot Huberman és Kerszberg vezette be [111]. Ezen sorozat esetén a kötési paraméterek bizonyos helyeken tetszőlegesen nagy értéket vehetnek fel, ezért az aperiodikus rendszerekre vonatkozó Luck-kritérium nem alkalmazható közvetlenül, mivel például e sorozat esetén nem definiálható a vándorlási exponens, illetve a kötések átlagértéke is divergál. A sorozat definíciója: $S_k = Sr^{f_k}$, ez megegyezik a korábban alkalmazott aperiodikus sorozatok definíciójával (2.3.1 alfejezet), de itt f_k értéke tetszőlegesen nagy természetes szám lehet, melyre igaz rögzített m természetes szám esetén:

$$k = m^{f_k}(ml + \mu), \quad (3.101)$$

ahol $0 \leq l$ és $1 < \mu < m$ is természetes számok. A definíció általánosítható, f_k kitevő helyett, $g(f_k)$ analitikus függvényt használva [134]: $S_k = Sr^{g(f_k)}$. Vizsgálataink során $g(x) = x^h$ hatványfüggvényszerű viselkedést feltételeztünk. A csillag-háromszög transzformációra épülő módszerünkkel numerikusan elemeztük h kitevő hatását a fázisátalakulásra. Megmutattuk, hogy $h > 1$ esetén marginálisan releváns, míg a $h < 1$ marginálisan irreleváns, a $h = 1$ exponens esetén (eredeti definíció) marginális perturbációt jelent a sorozat a réteges diagonális rácson levő Ising-modell esetén. Ez utóbbi esetben részletes megvizsgáltuk a korrelációs függvény $\eta_{||}$ exponensét. Nagy pontosságánál fogva módszerünk alkalmas volt az $\eta_{||}$ exponens alakjának megsejtésére:

$$\eta_{||} = \frac{2\beta_f}{\beta_f + \bar{\beta}_f}, \quad \bar{\eta}_{||} = \frac{2\bar{\beta}_f}{\beta_f + \bar{\beta}_f}, \quad (3.102)$$

attól függően melyik végén vizsgáljuk a sorozatot. Az $\beta_f, \bar{\beta}_f$ exponens a felületi mágneszettség exponensei, a sorozat jobb, illetve bal végén, melyekre igaz $\beta_f(S_c) = \bar{\beta}_f(S_c^{-1})$. Ezek numerikusan meghatározott alakja (S_c értékét is numerikusan határoztuk meg):

$$\beta_f = \frac{\ln[(1 - S_c^{2m})/(1 - S_c^2)]}{2 \ln(m)}. \quad (3.103)$$

Szerzőtársaink ezen eredményeket analitikusan is kimutták, ezek levezetése, illetve további részletezése megtalálható [134]-ban. Továbbá itt található meg a Harris-kritérium általánosított változata, amely alkalmazható hierarchikus sorozatokra is.

3.2.4 Összefoglalás

Áttekintettük Hilhorst és van Leeuwen által alkalmazott csillag-háromszög transzformációra épülő iterációs eljárást, majd ezt felhasználtuk a rétegesen aperiodikus diagonális rács felületi mágnesezettségének vizsgálatára, eredményeinket a kvantum Ising-láncre vonatkozó analitikus eredményekkel vetettük össze. Analitikusan megfeleltethető a réteges diagonális négyzetrácson értelmezett, klasszikus Ising-rendszer és kvantum Ising-lánc mágnesezettsége. Numerikusan megmutattuk [133], hogy a megfeleltetés nagy pontossággal igaz a Luck-kritérium szerint különböző perturbációt képviselő sorozatok esetén⁵. Bizonyos marginális típusú sorozatok esetén anizotróp skálázás, illetve logaritmikus oszcilláció felléptét állapítottuk meg [132]. Végül megvizsgáltuk az önhasznós szerkezetű hierarchikus aperiodicitás hatását a rétegesen aperiodikus diagonális rácson értelmezett Ising-modell felületén. Kimutattuk, hogy az ilyen rendezetlenség marginális perturbációt jelent, folytonosan változó exponensekkel, melyeket numerikusan meghatároztunk [134].

3.3 A hígított Ising-modell

Ebben a részben a hígított Ising-modellek családjába tartozó véletlen ferromágneses kötésű Ising-rendszer vizsgálatáról számolunk be. A téma rövid áttekintése után a **3.3.2** alfejezetben az általánosított iterációs módszert mutatjuk be, a **3.3.3** alfejezetben a véletlen ferromágneses kötésű Ising-modell felületi viselkedésére kapott eredményeinket közöljük.

3.3.1 Bevezetés

A rendezetlen rendszerek között a kétdimenziós Ising-modell különleges helyet foglal el. Ezen homogén rendszerben ugyanis a fajhő exponens $\alpha=0$, a Harris-kritérium - amely az általánosan alkalmazott eszköz annak eldöntésére, hogy a folytonos fázisátalakulással bíró rendszerekben megjelenő gyenge rendezetlenség megváltoztatja-e a rendszer kritikus exponenseit - ebben az esetben nem képes megjósolni a rendezetlenség fázisátalakulásra gyakorolt hatását. A kétdimenziós Ising-modellben csak részletes vizsgálattal dönthető el, hogy a rendezetlenség megváltoztatja-e az univerzalitási osztályt. A tiszta rendszer kritikus feltételét, az öndualitást felhasználva határozhatjuk meg (**2.2.1** alfejezet). Ugyan-

⁵Bár ezt külön nem hangsúlyoztuk, a kétdimenziós, rétegesen aperiodikus Ising-modell esetén ordinárius felületi fázisátalakulás figyelhető meg.

csak a duális összefüggés alkalmazásával lehet meghatározni a kétdimenziós, véletlen ferromágneses kötésű négyzetrácson értelmezett Ising-modell kritikus összefüggését [99]. Véletlen ferromágneses kötésű Ising-rendszernek azt tekintjük, amelyben két különböző kötési paraméter ($J_1; J_2$) eloszlása véletlenszerű, minden kötési paraméter $p_1 = \frac{1}{2}$ valószínűséggel a J_1 , illetve $p_2 = \frac{1}{2}$ valószínűséggel a J_2 értéket veszi fel. Ezen rendszer önduális, ennek felhasználásával határozható meg a kétdimenziós rendszer kritikus összefüggése:

$$\tanh\left(\frac{J_1}{kT_c}\right) = \exp\left(-\frac{2J_2}{kT_c}\right). \quad (3.104)$$

A két kötés hányadosa adja meg a rendezetlenség mértékét leíró inhomogenitási paramétert:

$$r = \frac{J_1}{J_2}. \quad (3.105)$$

Ha a két paraméter nem egyenlő valószínűséggel van jelen a rendszerben, illetve ha nem kettő, hanem több különböző kötési paraméter van a rácspan, akkor a kritikus hőmérséklet analitikus kiszámítása rendkívül bonyolult, eddig még megoldhatatlan feladatnak bizonyult.

A véletlen ferromágneses kötésű, kétdimenziós Ising-rendszer felületi viselkedését korábban sem analitikusan, sem numerikusan nem vizsgálták, ezért a sokak által vizsgált tömbi kritikus viselkedést mutatjuk be, mely feltételezhetően analóg viselkedést mutat a felületi viselkedéssel.

A véletlen kötési paraméterek hatása a tömbi viselkedésre térelméleti számítások szerint [112, 113] marginálisan irreleváns, a tiszta rendszerben megfigyelhető kritikus exponensekkel, de logaritmikus korrekciók figyelembevételével lehet a kritikus viselkedést leírni. A mágnesezettség, illetve a korrelációs hossz viselkedésében a logaritmikus korrekciók az alábbi módon lépnek fel:

$$m \sim t^{1/8} |\ln(t)|^{-1/16}, \quad \xi \sim t^{-1} |\ln(t)|^{1/2}. \quad (3.106)$$

Hasonlóan viselkedik a többi fizikai mennyiség is, például a tipikus korrelációs függvény:

$$G(r) \sim r^{-1/4} (\ln(r))^{-1/8}, \quad (3.107)$$

a konfigurációkra átlagolt korrelációs függvény:

$$G(r) \sim r^{1/4} [\mathcal{A} + \mathcal{B}(\ln(r))^{-1/2}]. \quad (3.108)$$

A numerikus eredmények szinte egyöntetűen támogatják az itt leírt térelméleti eredményeket [114, 127, 128, 129, 130, 115], bár a teljes körű konszenzus még nem alakult ki a kutatók között, hiszen megjelentek olyan publikációk, amelyek hasonló típusú rendszerben a hígítás mértékével folytonosan változó exponenseket jósolnak [116, 117]. Az egyre szélesebb körben teret nyerő vélemény szerint ezen eredmények valójában véges méret növekedésével nagyon lassan csökkenő logaritmikus korrekciók következményei, gondos adatelemzéssel ez megmutatható. A véletlen ferromágneses kötések mellett a rendezetlenség más típusát is megvizsgálták a kétdimenziós Ising-modellben. Például az úgynevezett spin-hígított rácsot, illetve kötés-hígított rácsot [114].

Ebben az alfejezetben a véletlen ferromágneses kötésű Ising-modell fázisátalakulását tanulmányozzuk a kétdimenziós négyzetrács $(1, 1)$ felületén, amely a diagonális rács felületének felel meg (3.3. ábra). (Remény van arra, hogy a rendezetlenség által okozott effektusok a felületen egyszerűbben vizsgálhatóak, mint a rendszer belsejében.) A 3.2.1 alfejezetben bemutatott iterációs eljárást általánosítjuk, majd részletesen bemutatjuk a módszer alkalmazásával kapott eredményeinket. Arra a kérdésre keressük a választ, hogy a rendezetlenséget bevezetve hogyan változik meg a rendszer felületi kritikus viselkedése.

3.3.2 Az iterációs módszer általánosítása

A réteges rácsra alkalmazott iterációs módszer levezetése során - abból a célból, hogy minél egyszerűbb numerikus eljárást kapjunk - kihasználtuk a rács réteges voltát, azt, hogy a felülettel párhuzamos irányban a kötési paraméterek nem változnak. Ismételjük meg az iterációs eljárás levezetését a réteges tulajdonság felhasználása nélkül, hogy egy olyan numerikus módszert kapjunk, mely tetszőleges kötési paraméter kiosztás mellett, így a véletlen kötési paraméter kiosztás mellett is alkalmazható. A 3.2.1.1 részben követett gondolatmenet alapján megállapítható, hogy egy, a felületen kiszemelt spin mágnesezettsége hogyan transzformálódik az iteráció egyes lépései során. A felületi spin transzformációjának levezetése során a (3.58) egyenletben használtuk fel először a rács réteges tulajdonságát, tehát ettől a lépéstől kezdve kell megismételni a gondolatmenetet az általánosított módszer levezetéséhez. A (3.58) egyenlet általános kötési paraméterekkel:

$$\langle \sigma_0 \rangle = \tanh(p_2 \sigma_1 + p_3 \sigma_2) = \frac{\tanh(p_2 \sigma_1) + \tanh(p_3 \sigma_2)}{1 + \tanh(p_2 \sigma_1) \tanh(p_3 \sigma_2)}. \quad (3.109)$$

Ennek alakja, ha a paraméterek és a spinek nem azonosak, a $\tanh$ függvény addíciós összefüggéseit felhasználva:

$$\langle \sigma_0 \rangle = \langle \sigma_1 \rangle = \frac{\tanh(p_2)[1 - \tanh^2(p_3)]}{1 - \tanh^2(p_2)\tanh^2(p_3)} + \langle \sigma_2 \rangle = \frac{\tanh(p_3)[1 - \tanh^2(p_2)]}{1 - \tanh^2(p_2)\tanh^2(p_3)}. \quad (3.110)$$

Általános jelölést alkalmazva, tetszőleges iterációs szám esetén a 3.5. ábrán megjelölt módon a σ_l spinnel szomszédos spineket, illetve az ezekhez vezető kötéseket $p_{l+}^{(n)}, p_{l-}^{(n)}$ jelekkel jelölve:

$$\langle \sigma_l^{(n)} \rangle = a_{l+}^{(n+1)} \langle \sigma_{l+}^{(n+1)} \rangle + a_{l-}^{(n+1)} \langle \sigma_{l-}^{(n+1)} \rangle, \quad (3.111)$$

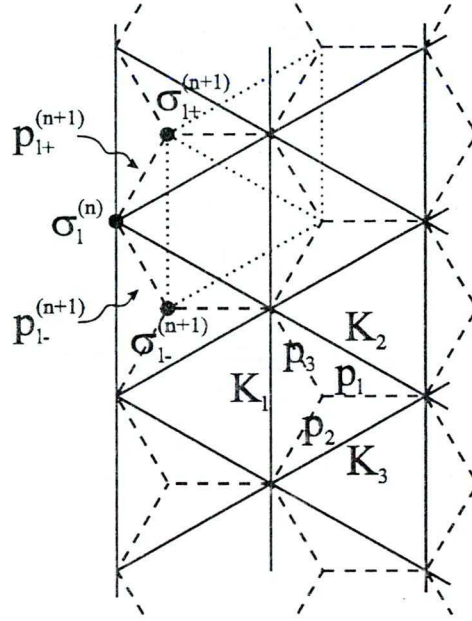
ahol az $a_{l\pm}^{(n+1)}$ tényezők csak a $p_{l\pm}^{n+1}$ paraméterek függvényei, melyek az iterációs lépésben köztes hatszögrács (3.5. ábra) kötési paraméterei:

$$a_{l+}^{(n)} = \tanh(p_{l+}^{(n)}) \frac{1 - \tanh^2(p_{l-}^{(n)})}{1 - \tanh^2(p_{l-}^{(n)})\tanh^2(p_{l+}^{(n)})}. \quad (3.112)$$

Az $a_{l-}^{(n)}$ paramétert az előbbi kifejezésből $p_{l+}^{(n+1)}$ és $p_{l-}^{(n+1)}$ felcserélésével kaphatjuk meg. A $p_{l-}^{(n+1)}$ kötési paraméter a $\sigma_l^{(n)}$ spint a $\sigma_{l-}^{(n+1)}$ spinnek közötti kötési paraméter (3.5.). Hasonló a viszony $p_{l+}^{(n+1)}$ és $\sigma_l^{(n)}, \sigma_{l+}^{(n+1)}$ spinek között (3.5. ábra).

Ha a paraméterek réteges tulajdonsággal rendelkeznek, akkor a (3.111) egyenletben a két tag megegyezik, az épp most vizsgált általános esetben azonban külön kell kezelni a két tagot. Egy iterációs lépés során tehát az eredetileg a felületen kiszemelt spin mágnesezettsége az iterációs lépés során keletkező új felületen levő két spin mágnesezettsége, és az ezekhez vezető $p_{l+}^{(n)}, p_{l-}^{(n)}$ kötési paraméterek által van kifejezve. Könnyen belátható, hogy a második iterációs lépés után három új felületi spin fogja az eredeti spin mágnesezettségét meghatározni. Az irányított bolyongás fogalmait felhasználva: az eredeti és új spinek közötti (az iteráció során köztes szerepet játszó hatszögrács felületi kötési paramétereiből összerakott diagonális rácson végzett) irányított bolyongás által kijelölt útvonalhoz tartozó $a_{l\pm}^{(n)}$ faktorok és az útvonal végpontjához tartozó spin várhatóértékének szorzatát összegezve az összes lehetséges bolyongásra megkapjuk az eredeti spin mágnesezettségét. Ha n iterációs lépésen át követjük nyomon a felületi spin mágnesezettségének transzformációját, akkor n lépésből álló irányított bolyongásokat kell figyelembe venni. Ezek alapján írható n iteráció lépésig nyomonkövetve a felületi mágnesezettséget:

$$\langle \sigma^0 \rangle_n = \sum_{boly.} W(n, i) \langle \sigma^{(n)}(i) \rangle, \quad (3.113)$$



3.5. ábra: A háromszögrács (folytonos vonal) leképezése a hatszögrácsra (szaggatott vonal), majd annak leképezése ismét háromszögrácsra (pontokból álló vonal). A $\sigma_l^{(n)}$ felületi spin az n , $\sigma_{l-}^{(n+1)}$, $\sigma_{l+}^{(n+1)}$ felületi spin $(n+1)$ iteráció után.

ahol i index jelöli a különböző bolyongásokat, $\langle \sigma^{(n)}(i) \rangle$ az i -edik bolyongás végpontjához tartozó n -edik rétegbeli spin mágnesezettsége és $W(n, i) = \prod_{j=1}^n a(k(j, i), j)$. Az a faktorokra új jelölést alkalmazunk az egyszerűség kedvéért:

$$a(k(j, i), j) = \frac{\tanh(p_k(j, i)) [1 - \tanh^2(p_k(j, i))]}{1 - \tanh^2(p_k(j, i)) \tanh^2(p_k(j, i))}. \quad (3.114)$$

Itt i a bolyongás indexe, j a réteg indexe, $k(j, i)$ pedig az i -edik bolyongás során a j -edik rétegben érintett p paraméter indexe. Rögzített határfeltételt alkalmazhatunk, miszerint $\lim_{n \rightarrow \infty} \langle \sigma^{(n)}(i) \rangle = 1$, így a felületi mágnesezettség kifejezésére egy, csak a transzformáció során keletkező paraméterektől függő kifejezést kapunk, $\langle \sigma^{(0)} \rangle_n = \lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{boly.} W(n, i)$, amely már numerikusan kezelhető kifejezés. Ez az egyenlet, mely formailag az irányított bolyongás állapotösszegének felel meg, fejezi ki legjobban azt a tényt, hogy az irányított bolyongás és a felületi mágnesezettség problémája formailag azonosan kezelhető, ezt a korrelációs függvény vizsgálatánál is ki fogjuk használni.

Vezessünk be egy vektort, melynek komponensei az n -edik transzformáció utáni felületi spinek mágnesezettségének várható értéke. A $\bar{\sigma}^{(n)}$ vektor $\bar{\sigma}_l^{(n)}$ komponense a mágnesezettség várható értéke az l -edik rácspontban n iteráció után. Ezen vektor egy iterációs lépés utáni értéke és egy $\mathbf{A}$ mátrix (mely az $a_{l\pm}^{(n)}$ paramétereket tartalmazza a megfelelő helyeken)

szorzata adja meg az eredeti mágnesezettségi vektort:

$$\vec{\sigma}^{(n)} = \mathbf{A}^{(n+1)} \vec{\sigma}^{(n+1)} = \mathbf{A}^{(n+1)} \mathbf{A}^{(n+2)} \vec{\sigma}^{(n+2)} = \dots \quad (3.115)$$

A felületi mágnesezettség definíciója véletlen ferromágneses kötésű Ising-modell esetén a felületen lévő spinek mágnesezettségének átlaga, végtelen nagy rácstra átlagolva:

$$m_f = \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{L} \sum_{l=1}^L \langle \sigma_l^{(0)} \rangle. \quad (3.116)$$

A $\vec{\sigma}^{(0)}$ vektorra alkalmazva a (3.115) egyenletet, illetve felhasználva, hogy a spinek a felülettől végtelen távol rögzítettek:

$$m_f = \lim_{n \rightarrow \infty} f(n) = \lim_{n \rightarrow \infty} \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{L} \sum_{i,j=1}^L \left[\prod_{k=1}^n \mathbf{A}^{(k)} \right]_{i,j}. \quad (3.117)$$

Ezzel numerikusan meghatározható kifejezést kaptunk a felületi mágnesezettségre: iterációs lépésként képezve az $\mathbf{A}$ mátrixot, majd azokat lépésként összeszorozva, a szorzat mátrix elemeiből képezhető $f(n)$, mely aszimptotikusan a felületi mágnesezettséget adja meg. A réteges esettel ellentétben itt már véges méret effektusok felléptére is számítani lehet.

A mágnesezettség után a felületi korrelációs függvény transzformációját is meg kell határozni általános (nem réteges) rendszerre. Véletlen rendszer esetén egy átlagolt korrelációs függvény jellemzi a rendszert:

$$G_{\parallel}(l) = \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{L} \sum_{i=1}^L [\langle \sigma_{i+l}^{(0)} \sigma_i^{(0)} \rangle - \langle \sigma_{i+l}^{(0)} \rangle \langle \sigma_i^{(0)} \rangle]. \quad (3.118)$$

Ennek transzformációját a réteges rácsnál látottakkal analóg módon kell meghatározni.

A (3.70) kifejezés ebben az esetben általános a tényezőkkel:

$$\begin{aligned} G_{\parallel}^{(n)}(i+l, i) &= a_{(i+l)+}^{(n+1)} a_{i+}^{(n+1)} G_{\parallel}^{(n+1)}(i+l+1, i+1) + a_{(i+l)+}^{(n+1)} a_{i-}^{(n+1)} G_{\parallel}^{(n+1)}(i+l+1, i-1) \\ &+ a_{(i+l)-}^{(n+1)} a_{i+}^{(n+1)} G_{\parallel}^{(n+1)}(i+l-1, i+1) + a_{(i+l)-}^{(n+1)} a_{i-}^{(n+1)} G_{\parallel}^{(n+1)}(i+l-1, i-1) \end{aligned} \quad (3.119)$$

Ezen egyenlet négy tagját nem lehet összevonni, azokat külön-külön kell tovább transzformálni. A fenti kifejezés iterációjával megkaphatjuk a $G_{\parallel}^0(i+l, i)$ -t. Ekkor olyan $G_{\parallel}^{(n)}(i, i')$ tagokat kapunk, melyek argumentumai különbözőek $i \neq i'$, illetve olyanokat, ahol az argumentum azonos $i = i'$. Ez utóbbi ad csak $n \rightarrow \infty$ határesetben nem eltűnő

járulékot a korrelációs függvényhez, hasonló indokok alapján, mint azt a réteges esetben láttuk (3.72-3.76). Irányított bolyongók segítségével megfogalmazva, az iteráció során fellépő tényezők olyanok, mint az $(i+l)$ és i pontokból induló két véletlen bolyongó által kijelölt útvonalhoz tartozó $a_{l\pm}^{(n)}$ faktorok szorzata. A bolyongók a hatszögrácsok felületi kötési paramétereiből rétegenként képzett diagonális négyzetrácson végzik irányított bolyongásukat, minden lépésben egy újabb rétegre lép a 3.5. ábrának megfelelő $+$ vagy $-$ irányba. Csak azon bolyongások adnak nem 0 járulékot, melyek azonos pontba érkeznek, ezek járuléka: $G_{||}^{(n)}(j, j) = 1 - \langle \sigma_j^{(n)} \rangle^2$. Ezt felhasználva a transzformációnál az átlagolt korrelációs függvény:

$$G_{||}(l) = \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{L} \sum_{i=1}^L \sum_{n=0}^{\infty} \left[\prod_{m=1}^n \mathbf{A}^{(m)} \right]_{i+l,j} \left[\prod_{k=1}^n \mathbf{A}^{(k)} \right]_{i,j} [1 - \langle \sigma_j^{(n)} \rangle^2]. \quad (3.120)$$

A második összegzést azokra a bolyongásokra kell végezni, amelyek $(i+l)$, illetve i rácspontból indulva ugyanazon a j pontra lépnek az n -edik lépésben. Ennek a kifejezésnek az aszimptotikus kiértékelésénél figyelembe kell venni, hogy két tényezője, melyek a (3.117) egyenletben meghatározott $f(n)$ -et közelítik, illetve ezeknek és $\langle \sigma_j^{(n)} \rangle^2$ szorzata $f(\infty)$ -et eredményez. Továbbá az irányított bolyongás Gauss-viselkedését felhasználva (bővebben [136]-ban), olyan kifejezést kapunk, ahol ismét a mágnesezettség meghatározásánál fellépő $f(n)$ mennyiség használható:

$$G_{||}(l) \sim \sum_{n=0}^{\infty} P_n(l) [f^2(n) - f^2(\infty)]. \quad (3.121)$$

$P_n(l)$ annak a valószínűsége, hogy két irányított bolyongó l távolságból indulva n lépés után találkozik. Ezen valószínűség ismeretében a korrelációs függvényre vonatkozó aszimptotikus függvény alakja (amelynek numerikus meghatározása során véges méret effektusok felléptére is számolni kell):

$$G_{||}(l) \sim \int_0^{\infty} \frac{l}{n^{3/2}} \exp\left(-\frac{l^2}{n}\right) [f^2(n) - f^2(\infty)]. \quad (3.122)$$

Hasonló módon, mint a réteges rendszernél $X(\frac{1}{2}, n)$ aszimptotikus viselkedése határozta meg a korrelációs függvény exponensét stb; a véletlen rendszerben az $f(n)$ aszimptotikus viselkedése a meghatározó. Numerikusan megvizsgáltuk $f(n)$ -et [136], azt tapasztaltuk homogén, illetve véletlen ferromágneses Ising-rendszer esetén, hogy különböző hőmérsékletek esetén különbözően viselkedik $f(n)$. Három lényegesen eltérő tartományról lehet

beszélni, melyek megfelelnek a különböző termodinamikai fázisoknak: kritikus pont alatti, feletti, illetve kritikus pontbeli. A kritikus pont alatt az $f(n)$ exponenciálisan közelít a felületi mágnesezettséghez,

$$f(n) = m_f(T) + \mathcal{A} \exp(-n/\xi_{\parallel}^2), \quad T < T_c. \quad (3.123)$$

A kritikus pont felett a fentihez teljesen hasonló a viselkedés, de itt természetesen a mágnesezettség 0:

$$f(n) = \mathcal{A}' \exp(-n/\xi_{\parallel}^2), \quad T > T_c. \quad (3.124)$$

A $\xi_{\parallel}$ a felületi korrelációs hosszal arányos, hiszen a (3.122) integrál viselkedése a fenti típusú $f(n)$ lecsengő mennyiségekkel [107]:

$$G_{\parallel}(l) \sim \exp(-8l/\xi_{\parallel}). \quad (3.125)$$

A kritikus pontban:

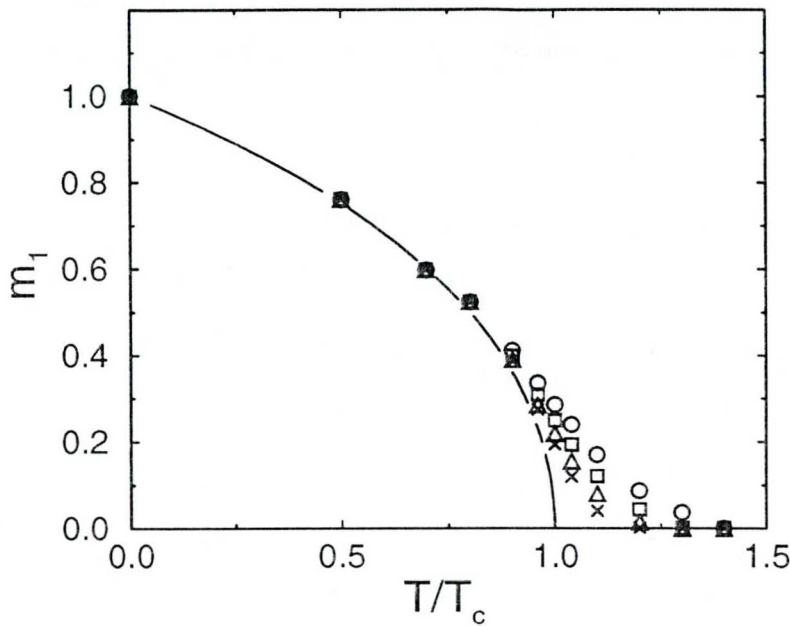
$$f(n) \sim n^{-\gamma}, \quad T = T_c, \quad (3.126)$$

amelyből a korrelációs függvény hatványfüggvényszerű viselkedése következik [107]: $G_{\parallel}(l) \sim l^{-4\gamma}$, így rögtön adódik az exponensek kapcsolata:

$$\eta_{\parallel} = 4\gamma. \quad (3.127)$$

Az általánosított módszer alkalmas a felületi mágnesezettség megállapítására különböző hőmérsékletek mellett, ebből numerikusan meghatározható a β_f exponens. A felületi mágnesezettség lecsengéséből megállapítható a korrelációs hossz, abból a $\nu_{\parallel}$ exponens. Legvégül a felületi mágnesezettség kritikus pontbeli viselkedéséből az $\eta_{\parallel}$ exponens határozható meg. Ezzel megkaptuk a (3.82) exponens összefüggés mindhárom exponensét, a három exponenst egyidejűleg meghatározva ellenőrizhető a módszer helyessége.

Itt kell megemlíteni egy lényeges különbséget a réteges rendszerre és az általános rendszerre alkalmazott iterációs eljárás között. Réteges rendszer esetén az iterációs lépések során a köztes hatszögrács paramétereinek tényleges kiszámolására nem volt szükség, ebben az esetben közvetlen kapcsolat adható meg a háromszögrács paramétereire között. Általános esetben már szükség van a hatszögrács paramétereire, a korábban leírt $\mathbf{A}^{(n)}$ mátrixok ezeket tartalmazzák. Ezen paraméterek meghatározása egy lépésben nem lehetséges a (2.49) egyenletekből. Itt kell felhasználnunk a 2.2.1 alfejezetben leírt duális transz-



3.6. ábra: Felületi mágnesezettséget közelítő $f(n)$ a redukált hőmérséklet függvényében $r=10$ mellett, különböző iterációs számok esetén (kör - $n=128$; négyzet - $n=256$; háromszög - $n=512$; kereszt - $n=1024$).

formációt, majd a háromszög-csillag transzformációt és végül ismét egy duális transzformációt alkalmazva kapjuk meg a hatszögrács kötési paramétereit. A hatszögrács paramétereiből már egy lépésben meghatározhatóak a háromszögrács paraméterei. Összességében négy közvetett lépést igényel az eredeti háromszögrács paramétereiből az új rács paramétereinek meghatározása, ez lényegesen megnehezíti a probléma numerikus kezelését.

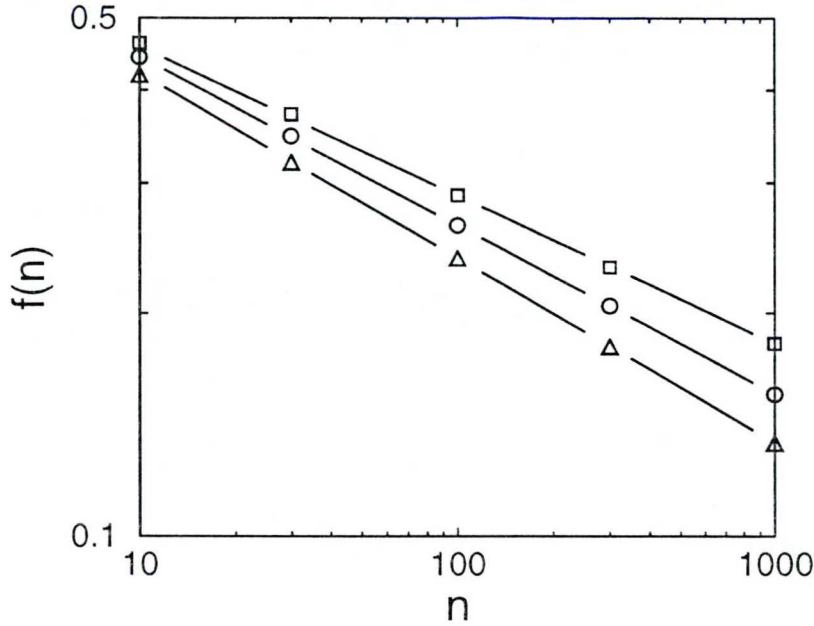
3.3.3 A véletlen ferromágneses kötésű Ising-modell felületi viselkedése

A modell felületi kritikus viselkedését korábban senki nem vizsgálta sem numerikusan, sem analitikusan. Vizsgálataink előtt a kritikus viselkedés két lehetséges változatának fellépését valószínűsítettük, a két különböző viselkedés gyakran nehezen megkülönböztethető. Az első lehetőség szerint a felületi kritikus viselkedés a tömbi viselkedéssel analóg módon, a tiszta rendszerben megfigyelhető exponensekkel, de logaritmikus korrekciók figyelembevételével írható le. A második lehetőség szerint az inhomogenitási paraméterrel

folytonosan változó nem univerzális kritikus viselkedés jön létre a hígítás hatására. Vizsgálataink célja eldönteni, ha lehetséges, hogy melyik valósul meg a két lehetséges elképzelés közül.

Az előző 3.3.2 alfejezetben általánosított csillag-háromszög transzformációra épülő módszert alkalmazva vizsgáltuk a diagonális négyzetrács felületi viselkedését. A vizsgált legszélesebb rács $L = 2048$ (ez L felületi spint jelent, a felülettel párhuzamos irányban periodikus határfeltételt alkalmazva), de ezt csak tesztelési jelleggel használtuk. Az $L = 1024; 512; 256; 128$ széles rácson számolt eredményeinket ismertetjük részletesen a továbbiakban. Ezen rácsméretre vonatkozó eredményeinket hasonlítva össze egymással, azt tapasztaltuk, hogy a vizsgált hőmérsékleti tartomány, szélesség és iteráció szám ($n = 2000$) mellett nem figyelhető meg véges méret effektus, illetve az abból származó hiba kisebb, mint a különböző konfigurációkra való átlagolásból származó hiba. A véges méret effektus, illetve az ebből származó hiba leküzdése miatt a lehető legszélesebb és legtöbb iterációs lépést végezve kellene a futtatásokat végezni. Ennek az elérhető számítógépes kapacitás (memória, futási idő) szab határt. Futtatásaink során több ezer óra CPU időt használtunk fel POWER PC-n, SUN és IBM munkaállomásokon. A fent leírt rendszerméreteket mellett még lehetőség volt megfelelő számú konfigurációra való átlagolást végezni, de további rendszerméret növelés már irracionálisan nagy időt vett volna igénybe ugyanilyen számú konfigurációra való számolás esetén az általunk elérhető számítógépekkel.

Futtatásainkat különböző inhomogenitási paraméterek mellett végeztük, főként $r = 1/4; 1/10$ és összehasonlítási, tesztelési céllal a tiszta rendszerre $r = 1$ értékek mellett. Először a felületi mágnesezettségre vonatkozó eredményeinket ismertetjük nagyon röviden. Eredményeinket Monte Carlo-szimulációval kapott eredményekkel vetettük össze, a módszer pontosságának, sebességének tesztelése miatt. A transzformációs eljárással kapott felületi mágnesezettségi értékek nagyon jól megegyeznek a Monte Carlo-módszerrel kapott eredményekkel, ezzel megnyugtató módon ellenőriztük módszerünk számítógépes adaptálásának helyességét. Egyfajta munkamegosztás miatt Monte Carlo-módszerrel részletesebben határoztuk meg (illetve a társszerzők határozták meg) a mágnesezettségi exponenst, mint az iterációs módszerrel. A felületi mágnesezettség exponensére β_f vonatkozó numerikus becslést itt nem mutatjuk be részletesen, ez megtalálható [135]-ban, de bemutatjuk, hogyan változik a felületi mágnesezettség a hőmérséklet függvényében (3.6. ábra). (Ez a viselkedés jellegét tekintve megegyezik a 2.1. ábrával.) Megállapítható,

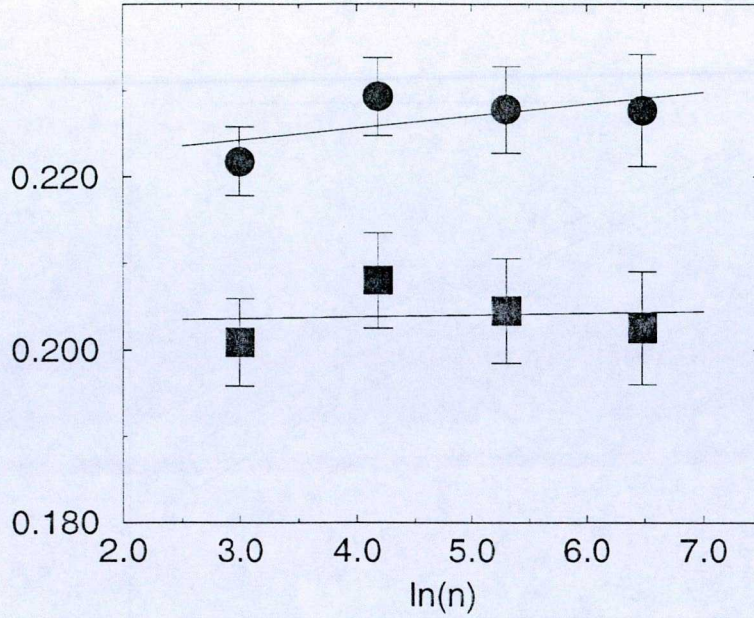


3.7. ábra: Az átlagolt $f(n)$ mennyiség a kritikus pontban mint az n függvénye log-log ábrán. A tiszta rendszerre (háromszög) vonatkozó értékek összehasonlítva az $r=1/4$ (kör); $r=1/10$ (négyzet) hígított rendszer adataival.

hogy véletlen ferromágneses kötések esetén a rendszer felületén ordinárius fázisátalakulás figyelhető meg.

A következőekben az $f(n)$ függvény lecsengését, illetve a γ exponensre vonatkozó eredményeinket írjuk le. Az $f(n)$ függvény numerikus eredményeink szerint valóban exponenciális lecsengést mutat $n \rightarrow \infty$ esetben. A 3.7. ábrán $\ln(f(n))$ mennyiséget ábrázoltuk $\ln(n)$ függvényében. Jól kivehető a lineáris viselkedés, tehát valóban hatványfüggvény $f(n)$, a 3.7. ábrán látható egyenesek meredeksége adja meg $\gamma_{\text{átl.}}$ értékét. Az exponens értéke $r = 1/4$ mellett $\gamma_{\text{átl.}} = 0.228$, ($\eta_{\parallel} = 0.912$), illetve $r = 1/10$ mellett $\gamma_{\text{átl.}} = 0.207$, ($\eta_{\parallel} = 0.828$).

A 3.8. ábrán $\gamma_{\text{eff.}}(n)$ értékeit (melyek számtani közepe adja $\gamma_{\text{átl.}}$ értékét) ábrázoltuk. Az $n = 10 - 30, 30 - 100, 100 - 300, 300 - 1000$ iterációs számoknak megfelelő $f(n)$ értékpárokból számolt γ_{eff} exponenseket tüntettük fel $L = 1024$ rácsszélesség mellett (100 különböző konfiguráció $f(n)$ értékeit átlagolva). Enyhe exponens növekedés állapítható meg n függvényében, ez a növekedés persze a számolás hibájánál nem nagyobb (3.8. ábrán az egyenes vonal, a numerikusan meghatározott exponens értékekre illesztett egyenes).

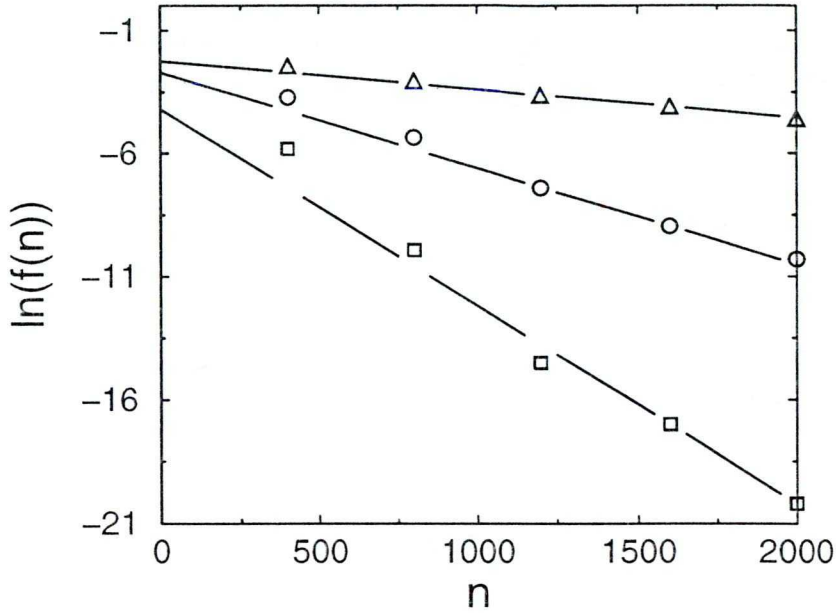


3.8. ábra: A γ_{atl} értékei mint az iterációs szám logaritmusának függvénye. Az egyenesek a numerikusan meghatározott exponens értékekre legkisebb négyzetek módszerével illesztett egyenesek.

Végül a $\nu_{||}$ exponens értékeire vonatkozó eredményeinket írjuk le. Mint korábban leírtuk, véges $T \neq T_c$ hőmérsékleten $f(n)$ a korrelációs hossz szerinti lecsengést mutat. A 3.9. ábrán $\ln(f(n))$ értékét, mint n függvényét ábrázoltuk, különböző t hőmérsékleten. Az ábrán szaggatott vonallal jelölt egyenesek meredeksége adja $\xi_{||}^{-2}$ arányos tagot. A $\xi_{||}^{-2}(t)$ -ből egyszerűen meghatározható a $\xi_{||}(t) \sim t^{-\nu_{||}}$ összefüggést feltételezve a $\nu_{||}(t)$ exponens.

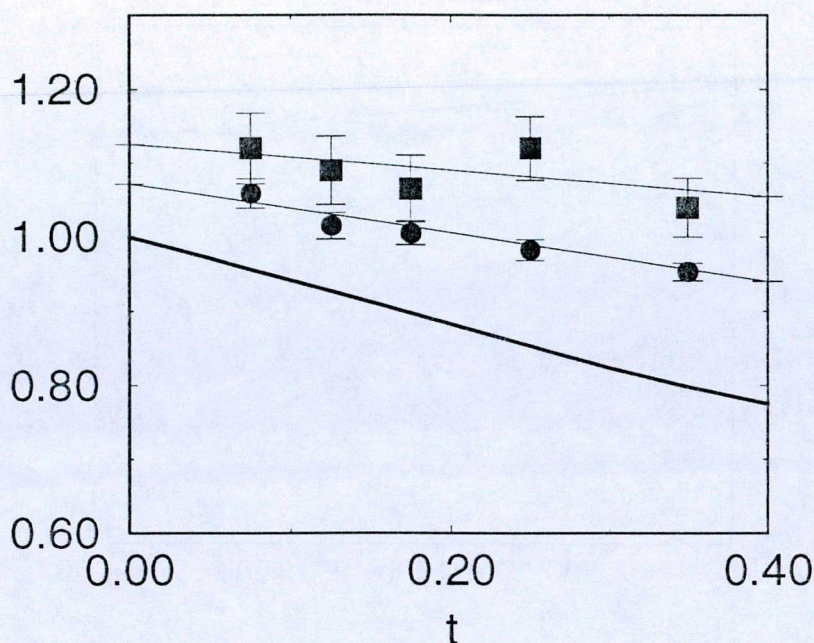
Ezekután részletes és hosszadalmas számolásaink eredményeit közöljük a $\nu_{||}$ exponensre vonatkozólag. Különböző $t \neq 0$ értékeknél határoztuk meg a $\nu_{||}(t)$ exponens értékeit $L = 256$ széles rácson ($r = 1/10$ inhomogenitási paraméter mellett), majd ezekből állapítottuk meg a $\nu_{||}(t = 0)$ aszimptotikus értékét a $t \neq 0$ értékekből egyenes illesztéssel. Ezzel a módszerrel a tiszta rendszer exponenseitől eltérő exponenseket kaptunk. $r=1/4$ mellett $\nu_{||} = 1.07(3)$, míg $r=1/10$ mellett $\nu_{||} = 1.13(6)$, 3.10. ábra.

Három különböző exponenst határoztunk meg numerikus módszerünkkel, a felületi $\beta_f, \eta_{||}, \nu_{||}$ exponenseket. E három közül kettőt a tiszta rendszer exponenseitől különbözőnek találtunk, az eltérés mértéke olyan volt, hogy hibahatáron belül teljesül a numerikusan meghatározott exponensekre a $\eta_{||} = 2\beta_f/\nu_{||}$ összefüggés. A kritikus exponensek e csekély, de határozott eltérését két módon lehet magyarázni. Egyrészt feltételezhetjük, hogy a hígítás nem univerzális kritikus viselkedést hoz létre, az inhomogenitási paraméterekkel



3.9. ábra: Az $\ln(f(n))$ mennyiség mint az iterációs szám függvénye, véges t hőmérsékleten ($t=0.1$ -háromszög; $t=0.2$ - kör; $t=0.3$ - négyzet)

folytonosan változó exponensekkel. A másik lehetséges magyarázat szerint az általunk meghatározott exponensek a tiszta rendszer exponensei mellett megjelenő logaritmikus korrekciók miatt fellépő effektív exponensek. Egyértelműen ez utóbbi magyarázat mellett döntöttünk több okból kifolyólag. Egyrészt feltételezhető, hogy a felületi viselkedés a tömbi kritikus viselkedéssel analóg módon valósul meg, és az egyre inkább elfogadott vélemény szerint a tömbi kritikus viselkedés a tiszta rendszer exponenseivel, de logaritmikus korrekciókkal kiegészítve írható le. Másrészt, ha feltételezzük a logaritmikus korrekciók létét, a kritikus korrelációs függvényre egy olyan alakot kapunk, mely a tömbi kritikus korrelációs függvényvel formailag egyezésben van [136]. Harmadszor: az általunk meghatározott $\nu_{||}$ exponens nagyon jó egyezésben van a de Quirez és társai [115] által tranzfermátrix technikával ugyanezen rendszerben meghatározott tömbi ν exponensekkel, melyek logaritmikus korrekciók miatt fellépő effektív exponensek. Negyedszer: bár numerikus eredményeink megállapításánál nem a logaritmikus korrekciók létének vagy nem létének megállapítására fektettük a hangsúlyt, de például a γ exponens iteráció szám függő numerikus értékeire illesztett egyenes megfelel egy logaritmikus korrekciók miatt lassan növekedő effektív exponens viselkedésnek (3.8. ábra).



3.10. ábra: A $\nu_{||}(t)$ exponensek, különböző hőmérsékleten. Ezen adatokból egyenes illesztéssel határoztuk meg az exponens $t = 0$ értékét ($r = 1/4$ kör, $r = 1/10$ négyzet).

A logaritmikus korrekcióból származó tag lényeges csökkentéséhez, a tényleges aszimptotikus exponensek meghatározásához a kritikus pontokhoz jóval közelebbi adatok lennének szükségesek, illetve jóval nagyobb iterációszámmal kellene alkalmazni a csillag-háromszög transzformációs sorozatot. Becsléseink szerint legalább 1 – 2 nagyságrenddel kellene közelebb menni a kritikus ponthoz, illetve 1 – 2 nagyságrenddel nagyobb iterációs szám értékig kellene végezni az iterálást. Ehhez 2 – 4 nagyságrenddel nagyobb gépidő szükséges, ezzel lehetne teljes bizonyossággal eldönteni a kérdést, hogy a fentiekben numerikusan meghatározott exponensek valóban aszimptotikus értékek-e, vagy azok egy lassan eltűnő logaritmikus korrekció következményei. Ilyen nagyságrendben megnövelt futtatásokra a jelenleg elérhető számítógépes kapacitással nincs lehetőség.

3.3.4 Összefoglalás

Általánosítottuk Hilhorst és van Leeuwen módszerét, mellyel ezekután tetszőleges kötési paraméter kiosztással rendelkező kétdimenziós Ising-modell felületi mágneszettsége, korrelációs függvénye és korrelációs hossza tanulmányozható. Ezen módszert alkalmazva vizsgáltuk meg a véletlen ferromágneses kötésű diagonális rácson értelmezett Ising-modell

felületi viselkedését. Eredményeink [135, 136] egyezésben vannak a Monte Carlo-módszerrel kapott eredményekkel, miszerint a kritikus exponensek csak csekély mértékben függnak az inhomogenitási paramétertől. A numerikusan meghatározott exponensekre hibahatáron belül teljesül a $\eta_{\parallel} = 2\beta_f/\nu_{\parallel}$ összefüggés. A tiszta rendszer exponenseitől való csekély eltérést logaritmikus korrekciók felléptével magyaráztuk. Míg a felületi mágnesezettség viselkedésében a logaritmikus korrekciók elhanyagolhatóak voltak, addig a felületi korrelációs függvény és korrelációs hossz exponensét már lényegesen befolyásolták a korrekciók.

3.4 A Potts-modell kritikus viselkedése sarkoknál

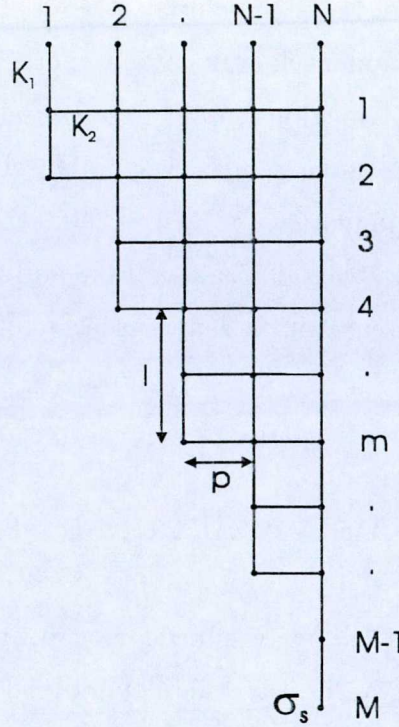
Az előzőekben azt vizsgáltuk meg, hogy a felületi viselkedés hogyan módosul a kötési paraméterekben megfigyelhető rendezetlenség hatására. A felület eddigiekben a kétdimenziós rendszer egyenes vonal által kijelölt felülete volt. Az alábbiakban azt fogjuk tanulmányozni [137], milyen formában befolyásolja a kritikus viselkedést a felület nyílásszögének változtatása a kötési paraméterek szabályosságát megtartva.

3.4.1 Bevezetés

Konform térelméleti számítások szerint kétdimenziós izotróp rendszer sarok exponensei a sarok nyílásszögének folytonos függvényei. Ez belátható, ha a $w = z^{\theta/\pi}$ leképezést a félvégtelen sík rendszerre alkalmazzuk, egy θ nyílásszögű sarok rendszert kapunk [74, 75]. A korrelációs függvény lecsengéséből megállapíthatóak a sarok exponensek és a nyílásszögek kapcsolata:

$$x_s(\theta) = \frac{\pi}{\theta} x_f. \quad (3.128)$$

A sarok exponens értéke, x_s fordítva arányos a sarok nyílásszögével. Ez az eredmény azonban csak izotróp rendszerre vonatkozik. A következőkben a fenti konform térelméleti eredményt ellenőrizzük a $q=2,3$ Potts-modell sarok exponensein a különböző nyílásszögek esetén. Vizsgálni fogjuk továbbá, hogyan módosul a fenti exponens összefüggés anizotróp rendszerek esetében.



3.11. ábra: A sarok geometria, a transzferoperátor a függőleges irányban egymást követő sorok állapotai közt adja meg a kapcsolatot. A σ_s spin a sarok spin. A nyílásszöget a $\tan(\theta) = p/l$ összefüggésből kaphatjuk meg.

3.4.2 Potts-modell transzfer operátora

A 2.1.3.1 alfejezetben írtunk a q -állapotú Potts-modellről ($q=2$ -re Ising-modell). A kétdimenziós q -állapotú Potts-modell Hamilton-operátora külső mágneses tér nélkül:

$$-\beta\mathcal{H} = \sum_{i,j} [K_1(q\delta_{\sigma(i,j),\sigma(i+1,j)} - 1) + K_2(q\delta_{\sigma(i,j),\sigma(i,j+1)} - 1)]. \quad (3.129)$$

A korábban bemutatott (2.2.3 alfejezet) sor-sor-transzfermátrix technika némi változtatással itt is alkalmazható [118],:

$$\mathbf{T}_{m,m-1} = \langle m | \mathbf{T}_m | m-1 \rangle = \exp \left[K_1 \sum_{j=n(m)}^{N(m)} (q\delta_{\sigma_j, \sigma'_j} - 1) \right] \exp \left[K_2 \sum_{j=n(m)}^{N(m)-1} (q\delta_{\sigma_j, \sigma_{j+1}} - 1) \right] \quad (3.130)$$

Az m sorindex határozza meg az összegzést, ez tulajdonképpen már a sarok-transzfermátrix technika [120] alkalmazását jelenti. A második tényező a soron belüli, az első a sorok közötti kölcsönhatásokat foglalja magába, a vesszős spin a szomszédos sor megfelelő spinjét

jelöli. Bevezetve a lokális transzferoperátorokat [118], $\mathbf{t}_1(j)$, $\mathbf{t}_2(j)$ a transzfermátrix konstansoktól eltekintve kifejezhető ezekkel:

$$\mathbf{T}_m = \prod_{j=n(m)}^{N(m)-1} \mathbf{t}_2(j) \prod_{j=n(m)}^{N(m)-1} \mathbf{t}_1(j). \quad (3.131)$$

A lokális transzferoperátorok a C_j és R_j operátorokkal fejezhetőek ki:

$$\mathbf{t}_1(j) = x_1 + \sum_{p=0}^{q-1} (R_j)^p, \quad \mathbf{t}_2(j) = 1 + \frac{x_2}{q} \sum_{p=0}^{q-1} (C_j^\dagger C_{j+1})^p. \quad (3.132)$$

Ezen C_j , R_j operátorok a Potts-bázison diagonális operátor, illetve a flipoperátor szerepét töltik be.

$$C_j |\sigma_j\rangle = \exp\left(i \frac{2\pi}{q} \sigma_j\right) |\sigma_j\rangle, \quad (R_j)^p = |\sigma_j\rangle = |\sigma_j + p\rangle \pmod{q} \quad (3.133)$$

Fenti lokális transzferoperátorokkal kifejezett $\mathbf{T}_m$ mátrix alakja a sor index függvényében változhat, a 3.11. ábra egy, a rendszer m sorindexének függvényében változó szélességű sarok rendszert mutat be. Ezen transzferoperátor időevolúciós operátorként kezelhető, egy adott $|k\rangle$ kezdeti állapotból m diszkrét lépéssel $|v\rangle$ végállapotba fejleszti a rendszert:

$$|v\rangle = \mathbf{T}_m \mathbf{T}_{m-1} \dots \mathbf{T}_2 \mathbf{T}_1 |k\rangle \quad (3.134)$$

A kezdeti állapot lehet fixált vagy szabad, ez a rendszer felső szélén levő felületi spinjeinek rögzítését vagy szabadon hagyását jelenti. Ezzel a technikával numerikusan meghatározható a sarokhoz rendelhető spin állapota, elvileg tetszőleges méretű rendszer esetén, melyből spin mágnesezettsége, illetve ebből a mágnesezettség véges méret skálázása állapítható meg.

$$m_s^{krit.} = A_m(\theta) N^{-x_s^m} \quad (3.135)$$

Hasonlóan határozható meg numerikusan a sarkon vertikális és horizontális irányokhoz tartozó energiasűrűség skálázása, illetve az ezeket leíró exponensek:

$$e_{s,v/h}^{krit.}(N) = e_{s,v/h}^{krit.}(\infty) + A_{e,v/h}(\theta) N^{-x_{s,v/h}^e}. \quad (3.136)$$

Azonos θ nyílásszögek, de különböző N méretek mellett meghatározva a sarok mágnesezettséget, illetve a vertikális és horizontális energiát, az x_s^m , $x_{s,v/h}^e$ exponensek ezekből meghatározhatóak.

3.4.3 Numerikus eredmények

A rendszer kritikus feltétele $(e^{qK_1} - 1)(e^{qK_2} - 1) = q$. Ebből izotróp és anizotróp esetre meghatározható a kritikus kötési paramétere (izotróp esetben: $K_c = \frac{1}{q} \ln(1 + \sqrt{q})$). A fent leírt transzferoperátor módszerrel meghatároztuk a θ nyílásszöggel jellemezhető sarok kritikus viselkedését több különböző nyílásszög esetén, ezek: 360° ; 270° ; 225° ; 180° ; 90° ; $53,13^\circ$; 45° ; 36° ; 87° ; $28,07^\circ$; $22,62^\circ$; $11,42^\circ$. Az eredményekről további részletek találhatóak [137]-ban. Mind $q = 2$, mind a $q = 3$ modell esetén olyan sarok exponenseket kaptunk, amelyek a konform térelméleti jóslattal nagy pontossággal (3-4 jegy pontosan) megegyeznek, minden vizsgált nyílásszög esetén.

A továbbiakban megvizsgáltuk az anizotróp esetet, hogyan módosulnak ekkor az exponensek. Anizotróp esetben a négyzetrács vertikális és horizontális irányában különböző korrelációs hossz van a kritikus pontban ξ_v, ξ_h . Átskálázva a rendszert [120, 75], megváltoztatva a horizontális és vertikális irányok rácsméretét a korrelációs hosszak azonosakká válnak $\xi_h a_h = \xi_v a_v$, erre pedig érvényes kell legyen a konform jóslat, megváltozott, effektív nyílásszöggel. Az effektív nyílásszög, az anizotrópia faktor és az eredeti nyílásszög közti kapcsolat:

$$\tan(\theta_{eff}) = \frac{\xi_h}{\xi_v} \tan(\theta). \quad (3.137)$$

Az anizotrópia faktor ξ_h/ξ_v Potts-modellre ismert, az alábbi összefüggésekkel határozható meg:

$$\frac{\xi_h}{\xi_v} = \tan\left(\frac{\pi u}{2\lambda}\right), \quad \frac{\sin(u)}{\sin(\lambda - u)} = \frac{x_1}{\sqrt{q}}, \quad ahol \quad 2 \cos(\lambda) = \sqrt{q}. \quad (3.138)$$

A sarok mágnesezettség, illetve energiasűrűség exponensét határoztuk meg numerikusan $\theta = 45^\circ$ nyílásszögnél, több különböző anizotrópia faktor mellett. Minden esetben olyan exponenst kaptunk, mely a θ_{eff} , átskálázott effektív nyílásszöget figyelembe véve pontosan megegyezett a konform térelméleti eredményekkel.

3.4.4 Összefoglalás

A kétdimenziós q -állapotú Potts-modell sarokmenti kritikus viselkedését vizsgáltam meg különböző nyílásszögek esetén [137]. A sarok-transzfermátrix technikát alkalmazva nagy pontossággal meghatároztam a sarokpont lokális mágnesezettség és a horizontális és vertikális energiasűrűség kritikus exponensét. Megmutattam, hogy a modell sarokmenti kritikus viselkedése teljes összhangban van a konform térelméleti jóslatokkal.

4. Fejezet

Összefoglalás

A hagyományos szilárdtest fizikai képnek ellentmondó kvázikristályos anyagok felfedezése, illetve a párologtatási technikával atomi vastagságú rétegek létrehozásának lehetősége új, intenzíven kutatott területet nyitott meg a kísérleti fizikában, mely számos újabb kérdés feltevéséhez és érdekes jelenség felismeréséhez vezetett. Az elméleti fizikusoknak nagy kihívást jelentettek ezen eredmények, hiszen az eddigi hagyományos elméletek, technikák érvényüket veszítik ilyen anyagok esetén, csak továbbfejlesztett, módosított változatuk alkalmazható. Az elméleti problémák közül kiemelkedik a kooperatív jelenségek köre, ezen belül a fázisátalakulások elmélete.

A gyengén rendezetlen, illetve kvázikristályos anyagok fázisátalakulására, a periodikus rendszerekre alkalmazott skálázási kép nem alkalmazható, ezen rendszerekben új típusú kritikus viselkedés megjelenésével is számolhatunk. A rendezetlen rendszerekre Harris által kidolgozott relevancia-irrelevancia kritérium a tiszta rendszer fajhő exponensének ismeretében képes meghatározni a rendezetlenségnek a folytonos fázisátalakulásra gyakorolt releváns-irreleváns jellegét. Ezen lineáris stabilitás elméletre épülő kritériumot Luck általánosította kvázikristályos anyagokra. A fenti kritériumok néhány esetben, az ún. marginális esetekben nem képesek megjósolni a kritikus viselkedés jellegét, ebben az esetben a rendszerek tulajdonságai csak további részletes vizsgálattal állapíthatóak meg.

Dolgozatom alapvető célkitűzése a kétdimenziós, inhomogén rendszerek kritikus viselkedésének tanulmányozása. Vizsgálataim objektumai között különböző inhomogén rend-

szerek vizsgálata szerepelt, a kétdimenziós Ising-modell kötési paramétereiben megjelenő réteges aperiodicitás hatásának vizsgálatával kezdődően, a véletlen ferromágneses kötésű kétdimenziós Ising-modell felületi kritikus viselkedésének vizsgálatán át, a kétdimenziós q -állapotú Potts-modell geometria inhomogenitása okozta sarokmenti kritikus viselkedésével bezárólag.

Az alábbiakban pontokba foglalva felsoroljuk a dolgozatban leírt új eredményeket.

1. Réteges háromszög- és hatszögrács szerkezetű Ising-modell kritikus hőmérsékletét határoztuk meg transzfermátrix technikát alkalmazva. A sor-sor-transzfermátrix alacsony és magas hőmérsékletű sajátértékeinek összehasonlításából a kritikusság feltételére egy olyan kifejezést kaptunk, melyben az egyes rétegeket jellemző kötési paraméterek szerepelnek, sorrendtől függetlenül, így ezen összefüggés nemcsak aperiodikus sorozatok esetében, hanem véletlen módon rétegzett rendszerekre is alkalmazható. Ezt az eredményt numerikusan ellenőriztük csillag-háromszög transzformáción alapuló iterációs módszerrel [131].

2. Réteges háromszög- és hatszögrácsokon értelmezett Ising-modell felületi mágnesezettségét, korrelációs függvényét a csillag-háromszög transzformáción alapuló numerikus módszerrel vizsgáltuk meg. Marginális perturbációt jelentő sorozatok esetén nem univerzális kritikus viselkedést, az inhomogenitási paraméterrel folytonosan változó kritikus exponenseket kaptunk. Ezen rendszerek a kritikus pont közelében anizotróp skálázási jelenséget mutatnak: a korrelációs hossz különböző exponensekkel divergál a rétegekkel azonos, illetve rájuk merőleges irányban. Megállapítottuk, hogy az anizotrópiát jellemző z exponens az aperiodikus sorozat két végét jellemző mágneses exponensek összegeként áll elő [131, 132].

3. A diagonálisan rétegzett négyzetrácsra értelmezett Ising-modell felületi kritikus viselkedését egy ekvivalens kvantum Ising-lánc felületi mágnesezettségével hoztuk kapcsolatba. A megfeleltetést nagy pontossággal numerikusan kimutattuk [133].

4. A hierarchikus sorozatot követő kötési paraméterekkel rendelkező réteges, diagonális rácson értelmezett Ising-modell felületi mágnesezettségét és korrelációs függvényét vizsgáltuk meg a csillag-háromszög transzformációra alapuló módszerrel. A kritikus exponensekre analitikus összefüggéseket írtunk fel, melyeket numerikusan nagy pontossággal ellenőriztünk. Megállapítottuk, hogy a felületi kritikus exponensek a csatolási paraméterek folytonos függvényeként adódnak, továbbá a rendszer a kritikus pont közelében anizotróp skálázási viselkedést mutat [134].

5. A háromszögrácson értelmezett Ising-modell tetszőleges ferromágneses kötési paraméter kiosztása esetén alkalmazható csillag-háromszög transzformációra épülő módszert dolgoztunk ki, mellyel a rendszer felületi mágnesezettsége, illetve felületi korrelációi numerikusan tanulmányozhatóak. A módszer egy adott paraméter kiosztás esetén numerikusan egzakt eredményt ad [136].

6. Az 5. pontban leírt módszer számítógépes adaptációját végeztük el a véletlen ferromágneses kötésű kétdimenziós Ising-modell esetén. A fenti hígított kötésű Ising-modell esetén elsőként határoztuk meg a felületi mágnesezettség kritikus exponenseinek értékét. Megmutattuk, hogy a felületi mágnesezettség kritikus exponense a hígítással gyakorlatilag nem változik, értéke a tiszta rendszer exponensével egyezik meg. A kritikus korrelációs függvény exponense esetén logaritmikus korrekciók feltételezésével igazoltuk, hogy a rendszer és a tiszta rendszer azonos univerzalitási osztályba tartoznak. Míg a felületi mágnesezettség esetén a korrelációk elhanyagolhatóak, a korrelációs függvénynél már számottevő eltérést okoznak [135, 136].

7. A sarok-transzfermátrix technikát alkalmazva nagy pontossággal meghatároztuk a kétdimenziós q -állapotú Potts-modell lokális mágnesezettségének és kötési energiájának exponensét. Megmutattuk, hogy a modell sarokmenti kritikus viselkedése teljes összhangban van a konform térelméleti jóslatokkal [137].

A felsorolt eredményeink után megemlítünk néhány problémát, melyek szorosan kapcsos-

lódnak a dolgozat témájához, illetve melyek numerikus vizsgálatát a csillag-háromszög transzformációs módszer általánosított változatával tervezzük. A dolgozatban eddig tárgyalt rétegesen aperiodikus rendszereken kívül az általánosított módszerrel egzaktul vizsgálható a valódi kétdimenziós aperiodikus rácsok felületi kritikus viselkedése. Az ilyen rendezetlenség a kétdimenziós kvázikristályos rendezetlenség közvetlen általánosítása. Véges szélességű, hígított Ising-csíkrendszer korrelációs hosszának meghatározásával lehetőség nyílik a kritikus exponensek és konform térelméleti aspektusok vizsgálatára. Ezek az új kérdések e munkában leírt problémák vizsgálata során merültek fel, illetve szorosan kapcsolódnak az itt megvizsgált kérdésekhez.

Irodalomjegyzék

- [1] W.L. Bragg, E.J. Williams, Proc. Roy. Soc. A **145**, 699 (1934)
- [2] H.A. Bethe, Proc. Roy. Soc. A **150**, 552 (1935)
- [3] R. Peirels, Proc. Roy. Soc. A **154**, 207 (1936)
- [4] F.C. Nix, W. Shockley, Rev. Mod. Phys. **10**, 1 (1938)
- [5] D.Schechtman, I. Blech, D. Gratias, J.W. Cahn, Phys. Rev. Lett. **53**, 1951 (1984)
- [6] C. F. Majkrazak, J. Kwo, M.Hong, Y. Yafet, D. Gibbs, C. L. Chien, J. Bohr, Adv. Phys. **40**, 99 (1991)
- [7] J.D. van der Waals, On the continuity of gaseous and liquid states. (North Holland, Amsterdam, 1988)
- [8] P. Weiss, Competus Rendus **143**, 1136 (1905), J.Phys.(France) **6**, 661 (1907)
- [9] L.D. Landau, Nature **138**, 840-841 (1936)
- [10] L.D. Landau, On the theory of phase transitions. In: Collected papers of L.D. Landau 193-216. (New York, Pergamon Press, 1965)
- [11] V.L. Ginzburg, L.D. Landau, On theory of superconductivity. In: Collected papers of L.D. Landau. 546-568. (New York, Pergamon Press, 1965)
- [12] B.B. Mandelbrot, The fractal geometry of Nature (Freeman, New York, 1983)
- [13] A.B. Harris, J. Phys. C **7**, 1671 (1974)
- [14] C. Godreche, J. M. Luck, et H.J. Orlet, J. Stat. Phys. **45**, 777 (1986)
- [15] Y. Okabe, K.J. Niizeki, Phys. Soc. Japan **57**, 1536 (1988)
- [16] S. Sorenson, M.V. Jarić M. Ronchetti, Phys. Rev **B 44**, 9271 (1991)
- [17] S. Sakamoto, F. Yonezawa, K. Aoki, S. Nosé, M. Hori, J. Phys. A: Math. Gen. **22**, L705 (1989)
- [18] C. Zhang, K.De' Bell, Phys. Rev. B **47**, 8558 (1993)
- [19] G. Langie, F. Iglói, J. Phys.A: Math. Gen. **25**, L487 (1992)

- [20] C.L. Henley, R. Lipowsky, Phys. Rev. Lett. **59**, 1679 (1987)
- [21] A. Garg, D. Levine, Phys. Rev. Lett. **59**, 1683 (1987)
- [22] F. Iglói, J. Phys. A: Math. Gen. **21**, L911 (1988)
- [23] M.M. Doria, I.I. Satija, Phys. Rev. Lett. **60**, 444 (1988)
- [24] G.V. Benza, Europhys. Lett. **8**, 321 (1989)
- [25] M. Henkel, A. Patkós, J. Phys. A: Math. Gen. **25**, 5223 (1992)
- [26] Z. Lin, R. Tao, J. Phys. A: Math. Gen. **25**, 2483 (1992)
- [27] L. Turban, B. Berche, Z. Phys. **B 92**, 307 (1993)
- [28] C.A. Tracy, J. Stat. Phys. **51**, 481 (1988)
- [29] V.G. Benza, M. Kolár, M.K. Ali, Phys. Rev. **B 41**, 9578 (1990)
- [30] J.M. Luck, Europhys. Lett. **24**, 359 (1993)
- [31] J.M. Luck, J. Stat. Phys. **72**, 417 (1993)
- [32] I. Peschel, Phys. Rev. **B 30**, 6783 (1984)
- [33] F. Iglói, L. Turban, Phys. Rev. **47**, 3404 (1993)
- [34] L. Turban, F. Iglói, B. Berche, Phys. Rev. **49**, 12695 (1994)
- [35] L. Turban, P.-E. Berche, B. Berche, J. Phys.A: Math. Gen. **27**, 6349 (1994)
- [36] D. Karevski, G. Palágyi, L. Turban, J. Phys. A: Math. Gen. **28**, 45 (1995)
- [37] F. Iglói, J. Phys. A: Math. Gen. **26** L703 (1993)
- [38] Vik.S. Dotsenko, Vlad.S. Dotsenko, Adv. Phys. **32**, 129 (1983)
- [39] V. Dotsenko, Usp. Fiz. Nauk. **165**, 481 (1995)
- [40] B.N. Shalaev, Phys. Rep. **237**, 129 (1994)
- [41] W. Selke, L.N. Shchur, A. Talapov, Annual Reviews of Computational Physics vol. 1, p.17 ed. D. Stauffer (Singapore, World Scientific, 1994)
- [42] L.D. Landau-E.M. Lifsic, Elméleti Fizika V. Statisztikus fizika I. (Budapest, Tankönyvkiadó, 1981)
- [43] C. Kittel, Inroduction to solid state physics (New York, Wiley, 1971)
- [44] H.E. Stanley, Introduction to phase transitions and critical phenomena (Oxford, University Press, 1971)
- [45] M.E. Fisher, Journal of Math. Physics, **5**, 944 (1964)
- [46] M.E. Fisher, Reports on Progress in Physics, **30**, 615 (1967)

- [47] F. Reif, Fundamentals of statistical and thermal physics (Singapore, McGraw-Hill, 1985)
- [48] E. Ising, Z. Phys, **31**, 253-258 (1925)
- [49] P.M. Chaikin, T.C. Lubennsky: Principles of condensed matter physics (Cambridge, University Press, 1995)
- [50] W. Heisenberg, Z. Physik **49**, 619 (1928)
- [51] R. B. Potts, Proc. Camb. Phil. Soc. **48**, 106 (1952)
- [52] J. M. Yeomans, Statistical Mechanics of Phase Transitions (Oxford, Calderon Press, 1992)
- [53] J. Cardy, Scaling and Renormalization in Statistical Physics (Cambridge, University Press, 1997)
- [54] L.P. Kadanoff, 'Scaling at critical points' in Phase Transitions and critical phenomena, vol. **5A**, C. Domb, M.S. Green (London, Academic Press, 1976)
- [55] P. di Francesco, P. Mattheiu, D. Senechal, Conformal Field Theory (Springer, Berlin, 1997)
- [56] M.E. Fisher, Phys. Rev. Lett. **16**, 11-14 (1966)
- [57] L.P. Kadanoff and al., Rev. Mod. Phys. **39**, 395-431 (1967)
- [58] F. Iglói, I. Peschel, L. Turban, Adv. Phys. **42**, 683 (1993)
- [59] K. Binder, 'Critical behaviour at surfaces.' in Phase transitions and critical phenomena vol. 8. 1-144 ed. Domb, J.L. Lebowitz (London, Academic Press, 1983)
- [60] H.W. Diehl, 'Field theoretic approach to critical behaviour at surfaces' in phase transitions and critical phenomena. ed. C. Domb, J.L. Lebowitz. vol. 10. 75-267. (London, Academic Press, 1986)
- [61] L.P. Kadanoff, Proc. Intern. School of Physics Enrico Fermi Course **LI** ed. M. Green (New York, Academic Press, 1971)
- [62] K.G. Wilson, Phys. Rev. B, **4**, 3174-3205 (1971)
- [63] S.K. Ma, Rev. Mod. Phys. **45**, 589-614 (1973)
- [64] M.E. Fisher, Rev. Mod. Phys. **46**, 597-616, (1974)
- [65] B. Dubrulle, F. Garner, D. Sornette, Scale invariance and beyond, (Springer, Berlin, 1997)
- [66] K.G. Wilson J.B. Kogut, Phys. Rev. C **12**, 75-200 (1974)
- [67] A.M. Polyakov, Soc. Phys. JETP, **12**, 381-383 (1970)
- [68] M.E. Fisher, Collective Properties of critical systems, (London, Academic Press, 1973)

- [69] F.J. Wegner, 'The critical state, general aspects' in: Phase transition and critical phenomena, vol.6. ed. C. Domb, M.S. Green (London, Academic Press, 1976)
- [70] A.Z. Patashinskii, V.L. Pokrovskii, Fluctuation theory of phase transitions (Oxford, Pergamon Press, 1979)
- [71] J. Cardy, 'Conformal invariance' in Phase transitions and critical Phenomena p. 55-126, vol.11. ed. C. Domb, J.L. Lebowitz (London, Academic Press, 1987)
- [72] L. Onsager, Phys. Rev. **65**, 117-149 (1944)
- [73] J.L. Cardy, J. Phys. A: Math. Gen. **17**, L385-L387 (1984)
- [74] J.L. Cardy, Nuc. Phys. **B270**, [FS17], 200-218 (1986)
- [75] M.N. Barber, I. Peschel, P.A. Pearce, J. Stat. Phys. **37**, 497-527 (1984)
- [76] T.W. Burkhardt, I. Guim, Phys. Rev. B **36**, 2080 (1987)
- [77] T.W. Burkhardt, T. Xue, Nucl. Phys. **B**, **354**, 653 (1990)
- [78] J.L. Pichard, G. Sarma, J. Phys. C **14**, L127-L132, L617-L625; B. Derrida, L. de Seeze, J. Physique, **43**, 475-483; J.M. Luck, J. Phys. A: Math. Gen. **15**, L169-L176; M.P. Nightingale, H.W.J. Blöte, J. Phys. A: **16** L657-L664; K.A. Penson, M. Kolb, Phys. Rev. B, **49**, 2854-2856
- [79] H.A. Kramer, G.H. Wannier, Phys. Rev. **60**, 252 (1941)
- [80] G.H. Wannier, Rev. Mod. Phys. **17**, 50 (1945)
- [81] H.J. Hilhorst, J.M.J. van Leeuwen, Phys. Rev. B, **47**, 1188 (1981)
- [82] R.J. Baxter, Exactly solved models in statistical mechanics (Academic Press, New York, 1982)
- [83] T.D. Schultz, C. Mattis, E.H. Lieb, Rev. Mod. Phys. **36**, 856, (1964)
- [84] J.B. Kogut, Rev. Mod. Phys. **51**, 659 (1979)
- [85] E. Fradkin, L. Susskind, Phys. Rev. D **17**, 2637 (1978)
- [86] M. Suzuki, Prog. Theor. Phys. **46**, 1337 (1971)
- [87] P. Jordan, E. Wigner, Z. Phys. **47**, 631 (1928)
- [88] N.N. Bogoliubov, Nuov. Cimen. **7**, 794 (1958)
- [89] E.H. Lieb, T.D. Schultz. C. Mattis, Ann. Phys NY **16**, 406 (1961)
- [90] F.Y. Wu: Rev. Mod. Phys. **54**, 235 (1982)
- [91] L. Onsager, Critical Phenomena in Alloys, Magnets and Superconductors ed. R.E. Mills, E. Ascher, R.I. Jaffee (New York, McGraw-Hill, 1971)
- [92] M. J. Stephen, L. Mittag, J. Math. Phys. **13**, 1944 (1972)

- [93] W.F. Wolff, J. Zittartz, Z. Phys. B **44**, 109 (1981)
- [94] M. Queefélec, Substitutional dynamical Systems, Lecture Notes in Mathematics vol. **1294** 97. (Springer, Berlin, 1997)
- [95] J.M. Dumont, In Number Theory nad Physics, Springer Proceedings in Physics, vol. **47** ed. J.M. Luck, P. Moussa, and M. Waldschmidt (Springer, Berlin, 1990)
- [96] M. Dekking, M. Mendés-France and A. van der Poorten, Math. Intelligencer **4**, 130 (1983)
- [97] R. Penrose, Bull. Ins. Math. Appl. **10**, 266 (1974)
- [98] N. E. Cusack, The physics of structurally disordered matter (Bristol, Adam Hilger, 1990)
- [99] R. Fish, J. Stat. Phys. **18**, 111 (1978)
- [100] J.R. Hamm, Phys. Rev. B **15**, 5391 (1977)
- [101] P. Hoever, Z. Phys. B **48**, 137 (1982)
- [102] W.F. Wolff, P. Hoever, J. Zittartz, Z. Phys. B **42**, 259 (1981)
- [103] R.M.F. Houtappel, Physica **16**, 425 (1950)
- [104] H.J. Hilhorst, M. Schick, J.M.J. Leeuwen, Phys. Rev. Lett. **40**, 1605 (1978)
- [105] T.W. Burkhardt, I. Guim, H.J. Hilhorst, M. Schick, J.M.J. Leeuwen, Phys. Rev. **B30**, 1486 (1984)
- [106] R.K. Pathria, Statistical Mechanics, 451 (Pergamon, Oxford, 1972)
- [107] I.S. Gradshteyn, I.M. Ryzsik, Table of Integrals, Series and Products (Academic Press, London, 1994)
- [108] F.Iglói, L.Turban, Europhysics Lett. **27**, 91 (1994)
- [109] P.-E. Berche, B. Berche, L. Turban, J. Phys. **6**, 621 (1996)
- [110] H.A. Simon, A. Ando, Econometria, **29**, 111 (1961)
- [111] A. Huberman, M. Kerszberg, J.Phys. A: **18**, L331 (1985)
- [112] Vik.S. Dotsenko, Vl.S. Dotsenko, Adv. Phys. **32**, 129 (1983)
- [113] N.B. Shalaev, Phys. Rep. **237**, 129 (1994)
- [114] W. Selke, I.N. Shchur, A.I. Talapov, Annual Reviews of Computational Physics, p.17. vol 1. ed. D. Stauffer (Singapore, World Scientific, 1994)
- [115] F.D.A. Aarao Reis, S.L.A. de Quirez, R.R. dos Santos, Phys. Rev. B **56**, 6013 (1997)
- [116] J.-K. Kim, A. Patrascioiu, Phys. Rev. Lett. **72**, 2785 (1994)

- [117] R. Kühn, Phys. Rev. Lett. **73**, 2268 (1994)
- [118] L. Mittag, M.J. Stephen, J. Math. Phys. **12**, 441 (1971)
- [119] B. Davies, I. Peschel, J. Phys. A **24** 1293 (1991)
- [120] J. Cardy, J. Phys. A **16**, 3617 (1983)
- [121] P. Pfeuty, Phys. Lett. **72 A**, 245 (1979)
- [122] D. Sornette, A. Johansen, J.P. Bouchaud, J. Physique **6**, 167 (1996), J.A. Feigenbaum, P.G.O. Freund, Int. J. Mod. Phys. **10**, 3737 (1996)
- [123] Y. Lee, L.A.N. Amaral, D. Canning, M. Meyer, H.E. Stanley, cond-mat/9804100
- [124] G.K. Zipf, Human behaviour an the principal of least effort (Cambridge, Addison-Wesley, 1949); D. Zanette, S. Manrubia, Phys. Rev. Lett. **79**, 523 (1997)
- [125] S. Redner, cond-mat/9804163
- [126] D.I. Levine, P.J. Steinhardt, Phys. Rev. Lett. **53**, 2477 (1984)
- [127] J.S. Wang, W. Selke, V.I.S. Dotsenko, V.B. Adreichenko, Physica A, **164**, 221 (1990)
- [128] H.G. Ballestros, L.A. Fernandez, V. Martín-Mayor, A. Munoz Sudupe, G. Parisi and J.J. Ruiz-Lorenzo, J. Phys. A: Math. Gen. **30**, 8379 (1997)
- [129] S.L.A. de Quirez, R.B. Stinchcombe, Phys. Rev. E **54**, 190, (1996)
- [130] D. Stauffer, F.D.A. Aarao Reis, S.L.A. de Quirez, R.R. dos Santos, Int. J. Mod. Phys. C. in print
- [131] F. Iglói, P. Lajkó, Zeitschrift für Physik B, **99**, 281-283 (1996)
- [132] B. Berche, P.-E. Berche, M. Henkel, F. Iglói, P. Lajkó, S. Morgan, J. Phys. A: Math. Gen. **28**, L165-L171 (1995)
- [133] F. Iglói, P. Lajkó, J. Phys. A: Math. Gen. **29**, 4803-4814 (1996)
- [134] F. Iglói, P. Lajkó, F. Szalma, Phys. Rev. B **52**, 7159-7165 (1995)
- [135] W. Selke, F. Szalma, P. Lajkó, F. Iglói, J. Stat. Phys. **89**, 1079 (1997)
- [136] F. Iglói, P. Lajkó, W. Selke, F. Szalma, J. Phys. A: Math. Gen. **31**, 2801 (1998)
- [137] D. Karevski, P. Lajkó, L. Turban, J. Stat. Phys. **86**, 1153-1163 (1997)
- [138] F. Iglói, P. Lajkó, Polymer in gravitational field, Physica A, **206**, 486 (1994)

Köszönetnyilvánítás

Ezúton szeretnék köszönetet mondani témavezetőmnek, Dr. Iglói Ferenc professzornak hogy bepillantást nyerhettem, majd elmélyedhettem a statisztikus fizikába, a fázisátalakulások elméletébe. Köszönet illeti Öt a több éves közös munkában nyújtott segítségért, a folytonos figyelemért, a szerencsés témaválasztásért, a sok ötletért, amelyekre tulajdonképpen ezen dolgozat alapozódott.

Hálával tartozom az Elméleti Fizikai Tanszék összes dolgozójának, akik tanácsaikkal nélkülözhetetlen segítséget nyújtottak a szinte naponta felmerülő számítástechnikai és egyéb problémák megoldásában. Köszönetet szeretnék mondani Dr. Fehér László professzornak, Szalma Ferencnek a dolgozat korai változatának elolvasásáért.

Végül szeretném megköszönni családomnak - különösen feleségemnek, Zitának - az intenzív segítséget, a fáradhatatlan támogatást melyet munkám során kaptam.

Angol nyelvű összefoglaló

Local critical behaviour of inhomogeneous systems

Phase transitions are perhaps the most common physical phenomena in nature, but their scientific investigation began only in the last century. After the first years of pioneering research van der Waals [7] achieved the first theoretical result, namely he established the classical mean field theory of liquid-gas transition. In the first decades of this century the application of the classical theory was continued, resulting for example the Landau theory of phase transitions [9,10] or the Ginzburg-Landau theory of superconductivity [11].

During the forties and fifties such theoretical and experimental results were appearing, which did not fit in the frame of classical theory, which theory was very successful to that point. The scaling theory gave the phenomenological while the renormalization group theory the microscopic explanation of these controversing results. The renormalization group theory[62] became a general approach which was used in high energy physics and in many different fields of physics. Wilson got the Nobel-prize for this theoretical achievement.

The concept of the universality is one of the main result of the modern physics. According to the modern theory of phase transitions the critical exponents are depending on only some basic features of the system such as: dimension of the system, dimension of the order parameter and the length

of the interaction in the system. Those systems which have the same above mentioned features are in the same universality class with exactly the same exponents. Universality classes are well known in the case of homogeneous systems, but real systems are inhomogeneous, and inhomogeneity can also effect phase transitions. The discovery of quasicrystals [5,6] gave new impulses to the investigations of the phase transitions in inhomogeneous systems. It was an open question which properties of quasicrystals govern the critical exponents.

Quasicrystals have controversing features: in short distance they are regular, on long distance they are disordered. This controversing property makes the quasicrystals interesting, while the investigation of quasicrystals offers a good opportunity to understand the effect of order-disorder on the phase transitions and critical exponents.

Weak randomness can also effect phase transitions. The perturbative Harris criterion[13] is able to perdict the relevance or irrelevance of randomness on continous phase transition of the system. The sign of the pure system specific heat exponent α decides about the relevance-irrelevance of the randomness. The two-dimensional Ising model plays a special role among the random systems: it is a marginal case of Harris criterion, here one need detailed analysis to explore the critical properties.

In this work we consider the critical behaviour of different kind of two-dimensional systems, starting from the investigation of surface phase transitions of the layered two-dimensional aperiodical Ising models through the investigation of surface critical behaviour of two-dimensional random-bond Ising model, to the corner critical behaviour of two-dimensional Potts models.

We use analytical and numerical statistical physical methods parallely where it is possible. Also in the numerical calculations analytical consider-

ations are involved, and we compare our numerical results to analytical results when it is possible. When not we compare our numerical results to results of other numerical methods.

Next we summarize in 7 points our main results:

1. Using transfer matrix methods we determined analytically the critical temperature of two-dimensional Ising models on layered triangular and hexagonal lattices. Our results are in a simple form for general distribution of the couplings and randomly layered systems. For several distributions of coupling we have checked numerically our result [131].

2. We investigated the surface critical behaviour of layered triangular and hexagonal lattice Ising models by an iterative method based on the star-triangle (ST) transformation. In the case of aperiodic sequences, which are marginal according to the modified Harris criterion, we found nonuniversal critical properties with continuously varying critical exponents. These systems are found to obey anisotropic scaling, i.e. the correlation lengths parallel with and perpendicular to the layers diverge with different critical exponents. The value of the corresponding anisotropy exponent is connected with the surface magnetization exponents of the systems [132,133].

3. Using the ST iterative technique we observed exact connection between the surface critical behaviour of classical Ising models on the square lattice on the (1,1) surface and the surface critical behaviour of a related quantum Ising chain. For several distributions of the couplings we showed this connection numerically with high accuracy [133].

4. We investigated the hierarchically layered classical Ising model on the surface of diagonal square lattice. We used the ST technique to determine the

surface correlations and the surface magnetizations. We conjectured analytical expressions for the critical exponents, which have been later proved analytically. We found that the critical exponent are continuously changing with the coupling constant [134].

5. We have generalized the iterative ST method for general, non-layered distributions of the coupling constants. With this method one can calculate the surface magnetization and surface correlations of the corresponding two-dimensional Ising models [136].

6. We adapted the generalized ST method described in 5. for the random-bond Ising model. We showed that the surface magnetisation is robust against dilution. The other exponents show effective variations, which are explained by the assumption of strong logarithmic corrections [135,136].

7. Using the corner transfer matrix method we determined with great numerical accuracy the corner exponents of q -state Potts model for different opening angles. Our numerical results are in perfect agreement with predictions of conformal field theory in isotropic and also in anisotropic systems [137].

Finally we would like to mention some open problems which are closely connected to the results and methods of this work and which are under consideration. With our generalized ST method we can study two-dimensional aperiodic Ising systems which are the generalization of the quasicrystals. This method is also suitable for studying the correlation length of the random-bond Ising model in the finite strip geometry and in this way to check the conformal concept for random systems.