



AVERTISSEMENT

Ce document est le fruit d'un long travail approuvé par le jury de soutenance et mis à disposition de l'ensemble de la communauté universitaire élargie.

Il est soumis à la propriété intellectuelle de l'auteur. Ceci implique une obligation de citation et de référencement lors de l'utilisation de ce document.

D'autre part, toute contrefaçon, plagiat, reproduction illicite encourt une poursuite pénale.

Contact : ddoc-theses-contact@univ-lorraine.fr

LIENS

Code de la Propriété Intellectuelle. articles L 122. 4

Code de la Propriété Intellectuelle. articles L 335.2- L 335.10

http://www.cfcopies.com/V2/leg/leg_droi.php

<http://www.culture.gouv.fr/culture/infos-pratiques/droits/protection.htm>



SCD UHP NANCY 1
Bibliothèque des Sciences
Rue du Jardin Botanique - CS 20110
54601 VILLERS LES NANCY CEDEX

FACULTE DES SCIENCES

U.F.R. Sciences et Techniques de la Matière et des Procédés
École doctorale Énergie Mécanique Matériaux
Groupe de Formation Doctorale Physique et Chimie de la Matière et des Matériaux

Thèse de Doctorat d'Université en Physique Statistique

Comportement critique de modèles bidimensionnels en présence de perturbations inhomogènes

Farkas Ádam Bagaméry

Institute of Theoretical Physics, University of Szeged, Hungary
Université Henri Poincaré, Nancy 1, France

Soutenue publiquement devant la Commission d'Examen le 27 juin 2006
à Szeged (Hongrie)

Membres du jury :

Pr. L. Fehér (président)	<i>Department of Theoretical Physics, University of Szeged</i>
Pr. G.Ódor (rapporteur)	<i>Research Institute for Technical Physics and Materials Science, Budapest</i>
Dr. J.-Ch. Anglès d'Auriac (rapporteur)	<i>Directeur de Recherche, CNRS-CRTBT, Grenoble</i>
Dr. I. Gyémánt (examineur)	<i>Department of Theoretical Physics, University of Szeged</i>
Dr. D. Karevski (examineur)	<i>LPM, Université Henri Poincaré, Nancy 1</i>
Pr. F. Iglói (co-directeur de thèse)	<i>Department of Theoretical Physics, University of Szeged</i>
Pr. L. Turban (co-directeur de thèse)	<i>LPM, Université Henri Poincaré, Nancy 1</i>

Laboratoire de Physique des Matériaux
Faculté des Sciences - 54500 Vandœuvre les Nancy

Kétdimenziós modellek kritikus viselkedése inhomogén perturbációk esetén

PhD Értekezés

Írta: Bagaméry Farkas Ádám

Témavezető: Prof. Dr. Iglói Ferenc
Prof. Dr. Loïc Turban

SZTE ELMÉLETI FIZIKA TANSZÉK

2006

Tartalomjegyzék

1. Bevezetés	5
2. Fázisátalakulások statisztikus fizikája	9
2.1. Modellek	9
2.1.1. Ising modell	9
2.1.2. Potts modell	10
2.1.3. Egyéb spinmodellek	11
2.2. Elméleti leírás	12
2.2.1. Átlagtér elmélet	15
2.2.2. Fluktuációk, homogenitás	16
2.2.3. Renormálási csoport	18
2.2.4. Konform invariancia	21
2.3. Rendezetlen rendszerek	23
2.3.1. Rendezetlenség típusai	23
2.3.2. Felületek viselkedése	25
2.3.3. Relevancia-irrelevencia kritériumok	28
3. Monte Carlo módszer	29
3.1. Monte Carlo szimuláció alapelvei	29
3.1.1. Fontossági mintavételezés	30
3.1.2. Elfogadási arány	32
3.2. Algoritmusok	33
3.2.1. Metropolis algoritmus	34
3.2.2. Wolff algoritmus	36
3.2.3. Swendsen-Wang algoritmus	38
4. Ising modell véletlen felületi tér jelenlétében	41
4.1. Bevezetés	41
4.2. A modell	42
4.3. Effektív exponensek	44
4.4. Kritikus profilok	48
4.5. Összefoglalás	50

5. Korrelált rendezetlenség Ising modellben	53
5.1. Bevezetés	53
5.2. Önduális korrelált kéttengelyű rendezetlenség	55
5.2.1. Véletlen kötésű Ising modellek	55
5.2.2. Kéttengelyű korrelált rendezetlenség	57
5.2.3. Relevancia-irrelevancia kritérium	58
5.3. Véges méret skálázás a kritikus pontban	59
5.3.1. A mérés menete	59
5.3.2. Szimulációk eredményei	61
5.4. Kritikus profilok	64
5.4.1. Sűrűségek konform transzformációja	65
5.4.2. A mérés eredménye	66
5.5. Összefoglalás	68
6. Csatolt modellek határfelülete	71
6.1. Bevezetés	71
6.2. Átlagtér elmélet	72
6.2.1. A φ^k modell tulajdonságai	72
6.2.2. Felületek kritikus viselkedése	75
6.2.3. Határfelületek kritikus viselkedése	78
6.3. Skálázási összefüggések	85
6.3.1. Rendparaméter profilok	85
6.3.2. Határfelületek kritikus tulajdonságai	85
6.4. Numerikus vizsgálatok	89
6.4.1. A $q = 3 - 4$ határfelület	91
6.4.2. A $q = 2 - 3$ határfelület	92
6.4.3. Az Ising Baxter-Wu határfelület	93
6.5. Összefoglalás	95
7. Befejezés	97

1. fejezet

Bevezetés

Fizikai rendszerek széles körében lehetünk tanúi kritikus jelenségeknek. Legismertebb példa erre a folyadék-gáz vagy a paramágneses-ferromágneses átalakulás. Több komponensű folyadékok és ötvözetek, szupravezetők, polimerek viselkedései és számos más a természetben előforduló anyagok és folyamatok szolgáltatnak további példákat fázisátalakulásra.

A kezdeti elméletek az adott problémában szereplő szabadsági fokok redukálásával próbálkoztak. Így kialakuló átlagtér elmélet segítségével van der Waals [108] a folyadék-gáz átalakulást magyarázta. Az átlagtér elmélet a kritikus jelenségek leírására Landau munkássága során csúcsosodott ki [71, 70]. A másodrendű fázisátalakulásokkor a különböző fizikai mennyiségek szingularitását a rendparaméter szerinti sorfejtésükből határozta meg. Az átlagtér elmélet azonban elhanyagolja a rendszerben lévő fluktuációkat.

A kritikus pontban a korrelációs hossz végtelenbe tart, és a megjelenő fluktuációk minden skálán ugyanolyan arculatot mutatnak. Azaz a rendszer invariánsan viselkedik a skála megváltoztatásával szemben. Ez a felismerés vezetett a kritikus jelenségek skálázási elméletéhez [112], valamint a Wilson által kidolgozott renormálási csoporthoz [114], mely segítségével a fázisátalakulásra jósolt viselkedés többnyire összecseng a kísérleti eredményekkel. A renormálási csoport általános keretet szolgáltat a kritikus exponensek kiszámításához, továbbá az azonos kritikus tulajdonsággal bíró rendszerek eltérő univerzális osztályainak értelmezéséhez.

A konform invariancia jelentősen megnövelte a kritikus pont természetéről alkotott ismereteinket. Kettőnél magasabb dimenziókban az első eredmények Polyakov nevéhez fűződnek [91]. Kétdimenzióban a konform leképezések csoportja izomorf a komplex analitikus függvények csoportjával [54, 14]. A skála invariancia segítségével a rendszert néhány tulajdonsága alapján, úgymint a teljes szimmetriája, a rendparaméter komponenseinek száma és a tér dimenziója, adott univerzális osztályba sorolhatjuk. Ugyanakkor kétdimenzióban a konform invariancia elméletét használva a kritikus pont partíciós függvényeit is osztályozhatjuk, mely által pontosan meghatározhatjuk a különböző kritikus exponensek értékeit. Ugyanezen elmélet keretein belül egy konform transzformáció esetén a rendparaméterhez tartozó több pontú korrelációs függvény pontos alakja is kiszámítható.

Az analitikus eredményekkel párhuzamosan fejlődtek a numerikus számolási technikák is. Közülük mindenképpen meg kell említeni a Monte Carlo módszert [83], mellyel nagy

szabadsági fokkal rendelkező rendszerek vizsgálata vált lehetségessé. Az eljárás numerikusan generált valószínűségi eloszlásokat használ statisztikai fluktuációk szimulálására. Az első publikált algoritmus Metropolis és munkatársai nevéhez kötődik [80]. Mára a számítástechnika rohamos fejlődésével az alkalmazási területe lényegesen kiszélesedett.

A fizika minden területén a homogén rendszerek egyszerű tulajdonsággal bírnak, emiatt sajátos szerepet töltenek be. Ugyanakkor a valós rendszerekben valamilyen mértékben megjelenik az inhomogenitás. Szokásos példa erre a kristályokban megfigyelhető atomi szennyeződések, valamint a rácshibák [119]. A valós rendszerek ezen tulajdonsága indította el a rendezetlenséget tartalmazó modellek vizsgálatát.

A rendezetlen rendszereken belül nagy hangsúly helyeződik a fázisátalakulással bíró modellekre. Ezen rendszereknél elsősorban azt a kérdéskört járják körül, hogy a homogén rendszerhez képest milyen mértékben változik meg a modell viselkedése inhomogén perturbációk hatására. Előfordulhat, hogy a fázisátalakulási pont megszűnik, vagy a fázisátalakulás rendje megváltozik, esetleg a modell viselkedését új univerzális osztály határozza meg.

Harris fogalmazott meg először hígított rendszerekre egy heuresztikus kritériumot a rendezetlenség stabilitására vonatkozólag [53]. A rendezetlenség releváns voltát a megfelelő tiszta rendszer fajhőjének exponenciális növekedése hozta kapcsolatba. Gondolatmenetét azóta számos folytonos fázisátalakulással bíró modell különböző típusú rendezetlenségére általánosították. Ezen eredmények nyomán intenzív numerikus és analitikus vizsgálatok kezdődtek meg az egyes véletlen modellek univerzális osztályainak vizsgálatára.

Az inhomogenitásra talán az egyik legegyszerűbb példa a szabad határfelület. Ezt a homogén rendszerből úgy kaphatjuk meg, hogy végtelen sok kötést kettévágunk. Egy sík mentén elhelyezkedő felület hatását a tömbi fázisátalakulásra először a kétdimenziós Ising modellnél vizsgálták [17, 38]. Megállapították, hogy a felülethez kapcsolódó kritikus exponensek értékei különböznek a rendszer belsejében megfigyelhető tömbi értékektől.

A kötésekben meglévő perturbáció is eredményezheti, hogy a rendezetlen rendszer kritikus viselkedése eltér a tiszta rendszerétől. Ekkor többnyire feltételezik, hogy az adott problémát leíró paraméterek független azonos eloszlású véletlen változók, melyek között nincs korreláció. Ugyanakkor léteznek olyan rendszerek, ahol a véletlen változók között fellépő korrelációk megváltoztatják a korrelálatlan rendezetlenséghez képest a fázisátalakulás univerzális osztályát [76, 77].

Az előbbiekhöz képest másfajta rendezetlenséggel van dolgunk, ha két különböző tömbi illetve felületi kritikus tulajdonsággal bíró modell összekapcsolásakor kialakuló határfelületet vizsgálunk. Az ilyen fajta inhomogenitás hatására kialakuló lokális viselkedés eléggé összetett lehet amennyiben a két alrendszer kritikus hőmérséklete megegyezik, vagy csak kismértékben tér el egymástól. Ebben az esetben a határfelület viselkedését a két különböző univerzális osztályba tartozó alrendszer közötti kölcsönhatás vagy versengés határozza meg.

A dolgozat a fent említett három különböző fajta rendezetlenség egy-egy speciális esetét vizsgálja diszkrét spinrendszerek esetén. A 2. fejezetben rövid betekintést nyerünk a kritikus jelenségek elméletébe. Ezen belül először ismertetünk néhány, a statisztikus fizikában használt modellt. Majd röviden bemutatjuk az átlagtér elmélet, a renormálási csoport valamint a konform invariancia mögött meghúzódó alapvető gondolatokat. A

fejezetet a későbbiek során többször is használt, a rendezetlenség releváns voltát eldöntő, Harris kritérium ismertetésével zárjuk.

A 3. fejezetben összefoglaljuk a Monte Carlo eljárások alapelveit. Spin rendszerekre vonatkozóan részletesen ismertetünk három algoritmust, melyeket a modellekben jelentkező inhomogenitások vizsgálatára használunk. Közülük az első a Metropolis algoritmus, mely egy egyszerű spin flip algoritmus. Éppen ezért többnyire a kritikus ponttól távolabb lejátszódó jelenségek szimulációjára alkalmas. A másik két algoritmussal (Wolff, Swendsen-Wang) azonos irányba mutató, klasztert alkotó spineket lehet egyszerre átfordítani. Emiatt elsősorban ezeket a kritikus pont körüli folyamatok analizálására használják.

A 4. fejezetben a kétdimenziós Ising modellt vizsgáljuk. A szabad határfelületéhez zérus várható értékkel rendelkező véletlen felületi teret kapcsolunk [88]. A Harris kritérium értelmében ez marginálisan irreleváns perturbációt okoz. Következésképpen a rendezetlen modell felületének kritikus tulajdonságait a tiszta modell logaritmikus korrekciókat tartalmazó exponensei határozzák meg. Ennek ellenőrzését tűzzük ki célul. Ehhez Monte Carlo szimulációk segítségével mérjük a hőmérséklet függő effektív felületi mágnesezettségi exponensét. Ugyanakkor a véges méret okozta korlátok csökkentésére magában a kritikus pontban is meghatározzuk a rendparaméter profilját. A korrelációs hossz és a redukált hőmérséklet között fennálló relációval kapcsolatot teremtünk a két mérési eredmény között.

Az 5. fejezetben kéttengelyű korrelált rendezetlenség hatását vizsgáljuk kétdimenziós Ising modell esetén [5]. Az általunk bevezetett inhomogenitás a Harris kritérium értelmében releváns perturbációt okoz. Mivel a kötésekben jelentkező rendezetlenség parametrizálását úgy választottuk meg, hogy a rendszer önduális lett, így az egzaktul meghatározható kritikus pontban különböző fizikai mennyiségek szingularitását vizsgáljuk. Skálatörvények felhasználásával pontosan meghatározzuk a modell kritikus exponenseit. A mágnesezettségi és energia sűrűségi profilok konform tulajdonságát is tanulmányozzuk.

A 6. fejezetben két különböző univerzális osztályba tartozó, de azonos fázisátalakulási hőmérséklettel rendelkező félvégtelen alrendszer összekapcsolásakor keletkező határfelület kritikus viselkedését analizáljuk [6]. A problémát először analitikusan, az átlagtér elmélet segítségével oldjuk meg. Majd az így kapott eredményeket felhasználjuk a fenomenológiai skálázáshoz. A határfelület eltérő kritikus viselkedését numerikusan is ellenőrizzük. Ehhez a kétdimenziós q állapotú Potts modellt használjuk, ahol $2 \leq q \leq 4$. A határfelületen az alrendszerek különböző erősségű összeecsatolása hatására változó rendparaméter profiljának simaságát is vizsgáljuk.

2. fejezet

Fázisátalakulások statisztikus fizikája

2.1. Modellek

2.1.1. Ising modell

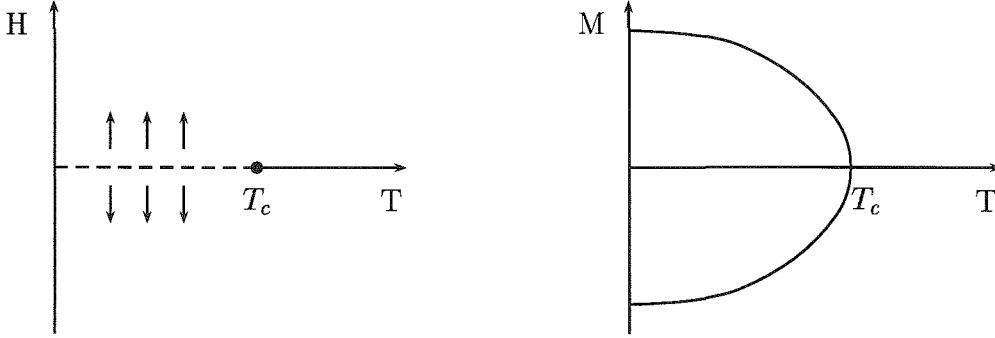
A statisztikus fizika egyik legalapvetőbb és legtöbbet vizsgált modellje az Ising modell [62]. Leggyakrabban egytengelyű, anizotrop mágneses anyagok jellemzésére használják. Jelenlétése abban rejlik, hogy először ebben a modellben írtak le analitikusan fázisátalakulást [85].

Az Ising modell egy tetszőleges d -dimenziós rácson értelmezett. A rácspontokban Ising spinek helyezkednek el, amelyek két különböző értéket vehetnek fel. Az Ising spinek, hasonlóan a mágneses anyagokban megtalálható dipólusokhoz, egymással kölcsönhatnak. A legegyszerűbb esetben ez a kölcsönhatás csak a legközelebbi szomszédokra terjed ki, és mindig azonos nagyságú. A modell Hamilton operátora ekkor a következő alakot ölti

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i, j \rangle} \sigma_i \sigma_j - H \sum_i \sigma_i, \quad (2.1)$$

ahol H a külső mágneses teret, σ_i az i -edik rácsponton elhelyezkedő Ising spint jelöli, $\sigma_i = \pm 1$. Első szomszéd kölcsönhatás esetén csak a közvetlen rácsszomszédokra kell az első tagban összegezni, ezt a $\langle i, j \rangle$ módon jelölik. A spinek közötti kicserélődési energiát J szimbolizálja, amennyiben pozitív $J > 0$, a spinek arra törekszenek, hogy azonos irányba álljanak. Ekkor a modell ferromágneses anyagok jellemzésére szolgál. Negatív J esetén a rendszer a spinek ellentétes irányba történő beállítását favorizálja. Ez esetben az anti-ferromágnesességet modellezi. Amennyiben a kicserélődési energia zérus, $J = 0$, akkor a paramágnesességet kapjuk vissza.

A modell fázisdiagramja pozitív J esetén egynél magasabb dimenzióban a 2.1.1 ábrán szemléltetjük. Alacsony hőmérsékleten, külső mágneses tér hiányában két rendezett ferromágneses fázis létezik. Az azonos irányába álló spinek makroszkopikusan is megfigyelhető M teljes mágnesezettséget eredményeznek. A rendszerben hosszú távú rend uralkodik. Ezen a hőmérsékleti tartományban elsőrendű fázisátalakulást figyelhetünk meg, amikor gyenge külső mágneses tér hatására M megváltoztatja előjelét. Magas hőmérsékleten egy rendezetlen fázis létezik $H = 0$ esetén. A spinek már véletlenszerűen veszik fel a



2.1. ábra. Az Ising modell fázis diagramja. A bal oldali ábrán a szaggatott vonalat keresztezve elsőrendű fázisátalakulásonak lehetünk tanúi, míg T_c -ben az átalakulás folytonos. A jobb oldali ábrán külső tér hiányában a kritikus hőmérséklet alatt megjelenő $\pm M(T)$ spontán mágnesezettség hőmérséklet függését követhetjük nyomon.

két különböző lehetséges értéküket, melynek következtében a rendszer teljes mágnesezettsége eltűnik. A modellben ezen hőmérsékleti tartományon rövid távú rend uralkodik. A rendezett és a rendezetlen fázist a kritikus pont köti össze.

Az egydimenziós Ising modellben véges hőmérsékleten nem jelenik meg spontán mágnesezettség, így módon nincs ferromágneses fázis sem. Ennek következménye, hogy $T \neq 0$ esetben nem zajlik le fázisátalakulás. A kétdimenziós Ising modell egzakt megoldását külső mágneses tér hiányában először Onsager szolgáltatta 1944-ben [85]. A modell ekkor a kritikus pontjában másodrendű fázisátalakulással bír. A háromdimenziós Ising modell külső tér jelenlétében, illetve annak hiányában még megoldatlan probléma [117, 63], habár jöllehet számos numerikus eljárás ismert a kritikus jelenségeket leíró exponensek meghatározására.

2.1.2. Potts modell

Az Ising modell egyfajta általánosításának tekinthető a Potts modell [92, 116]. Domb javasolta doktori témaként diákjának. Hasonlóan az Ising modellhez a q -állapotú Potts modell is egy rácson értelmezett. A rácspontokban elhelyezkedő σ_i spinek diszkrét változók, amelyek q különböző értéket vehetnek fel, $\sigma_i = 0, 1, \dots, q-1$. A modell Hamilton operátora a következő:

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} (q\delta_{\sigma_i, \sigma_j} - 1) - H \sum_i (q\delta_{\sigma_i, 0} - 1), \quad (2.2)$$

ahol δ a Kronecker delta, $\delta_{\sigma_i, \sigma_j}$ eggyel egyenlő amennyiben $\sigma_i = \sigma_j$, és nulla különben. Az első összegzést ismét csak a szomszédos spinekre kell elvégezni.

Ferromágneses kölcsönhatás esetén, $J > 0$, a Hamilton operátor első tagja egy olyan állapotot tüntet ki, ahol minden spin azonos értéket vesz fel. Ez az állapot q szorosan degenerált. Pozitív H esetén a spinek arra törekszenek, hogy a külső térrel azonos irányba álljanak, azaz minden spin a 0 értéket akarja felvenni.

Akárcsak az Ising modell, a Potts modell is külső mágneses tér hiányában magas hőmérsékleten rendezetlen, míg alacsony hőmérsékleten rendezett fázissal bír. A mágneszettséget, mint 0 és 1 közötti értéket felvevő rendparamétert egy N spinből álló rendszer esetén a következőképpen definiálhatjuk:

$$\langle m \rangle = \frac{q \langle \rho_\sigma \rangle - 1}{q - 1}, \quad \langle \rho_\sigma \rangle = \frac{1}{N} \sum_i \delta_{\sigma_i, \sigma}, \quad (2.3)$$

ahol σ az az érték, amellyel a legtöbb spin rendelkezik.

A Potts modellben a fázisátalakulás függ a q értékétől. Kétdimenzióban az alacsony hőmérsékleten meglévő ferromágneses fázisból a kritikus hőmérséklet feletti paramágneses fázisba az átmenet elsőrendű $q > 4$, továbbá másodrendű $q \leq 4$ esetén. Abban a speciális esetben, amikor $q = 2$ a Potts modell megfelel az Ising modellnek.

2.1.3. Egyéb spinmodellek

A statisztikus fizika keretein belül vizsgált számos modell közül az alábbiakban néhány rövid ismertetésre kerül sor. Közülük az első a perkoláció [104]. A modell a korábbiakhoz hasonlóan egy tetszőleges dimenziós rácson értelmezett. A rácspontok p valószínűséggel vannak betöltve. Kérdésként merül fel, hogy mekkora a $P(p)$ valószínűsége annak, hogy egy végtelen, összefüggő klaszter alakul ki. Megmutatható, hogy a rács szerkezetétől függően egy kritikus p_c alatt $P(p)$ értéke zérus, míg $p > p_c$ esetén ez az érték nem tűnik el, vagyis kialakulhat a kívánt összefüggő alrác. Ily módon $P(p)$ a mágneses modelleknél bevezetett rendparaméter szerepét tölti be ebben a rendszerben.

A fentebb definiált modell a csúcs perkoláció, melyhez teljesen hasonlóan értelmezhető az él perkoláció is. Ez esetben minden rácspont be van töltve, és az első szomszédok között p valószínűséggel létesül kötés, ugyanakkor $1 - p$ valószínűséggel nem alakul ki közöttük kapcsolat. Formálisan megmutatható, hogy a q állapotú Potts modell $q \rightarrow 1$ határesetben az él perkolációval egyezik meg [116]. Meglehet a csúcs és az él perkolációhoz tartozó p_c érték általában különböző, mindazonáltal a modellekben lévő kritikus jelenségeket leíró exponensek megegyeznek.

A Baxter-Wu modell [12], mely a kétdimenziós háromszögrácson értelmezett, az eddig említett modellekhez hasonlóan diszkrét spin modell. Az i -edik rácspontban elhelyezkedő spin az Ising modellnek megfelelően két értéket vehet fel, $\sigma_i = \pm 1$. A rendszer Hamilton operátora a H külső mágneses tér jelenlétében az alábbiak szerint definált:

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j,k \rangle} \sigma_i \sigma_j \sigma_k - H \sum_i \sigma_i, \quad (2.4)$$

ahol az első tagban az összegzést a rácsot alkotó háromszögekre kell elvégezni, valamint a kölcsönhatási energia nem negatív, $J > 0$.

A háromszögrács három, egymással ekvivalens alrácra bontható úgy, hogy tetszőleges háromszög minden csúcsa pontosan az egyik alrácba tartozik. Így külső tér hiányában a spinek bármely konfigurációjához további három, energetikailag teljesen azonos konfiguráció rendelhető hozzá. Hiszen valamely két alrácson egyszerre megváltoztatva a spinek értéket (2.4) változatlan marad, jóllehet a rendszer teljes mágneszettsége megváltozik.

A Baxter-Wu modell fázis diagramja hasonlít az Ising modelléhez, vagyis alacsony hőmérsékleten ferromágneses fázis létezik, amely négyszeresen degenerált. Azonban a mágnesezettség a fentebb elmondottak miatt nem páros függvénye a külső térnek. Magas hőmérsékleten a rendszer paramágneses fázissal bír. A kritikus hőmérsékleten, mely megegyezik az Ising modell kritikus hőmérsékletével, a fázisátalakulás másodrendű [13].

Akárcsak a négyzetrácson értelmezett Ising modell a Baxter-Wu modell is önduális a kritikus pontjában. Kritikus exponensei [12] megegyeznek a kétdimenziós négy állapotú Potts modell kritikus exponenseivel [116, 39]. Emiatt, valamint azt a tényt is felhasználva, hogy mindkét modell alapállapota négyszeresen degenerált, adódik, hogy egyazon univerzális osztályba tartoznak. Jóllehet numerikus vizsgálatok esetén a fázisátalakulási pont környékén a Potts modellnél logaritmikus korrekciók lépnek fel [26, 3], ami azonban nem tapasztalható a Baxter-Wu modellnél.

Mivel az Ising modellben a spinek csak két értéket vehetnek fel, ezért az általa leírt mágnesek erősen anizotrop szerkezetűek. A valós rendszerek ennél bonyolultabb összetételűek, ezért azok jellemzésére sokkal alkalmasabb az alábbi Hamilton operátor [117]:

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{\sigma}_i \vec{\sigma}_j - \vec{H} \sum_i \vec{\sigma}_i \quad (2.5)$$

Ez esetben a rácspontokban elhelyezkedő spinek n dimenziós normálvektorok. A szupravezetők kritikus viselkedését leíró XY modellt kapjuk $n = 2$ -re, míg $n = 3$ esetén az izotróp mágneseket jellemző klasszikus Heisenberg modellhez jutunk. Amennyiben $n \rightarrow \infty$ az egzaktúl megoldható szférikus modell adódik vissza [103]. Ugyanakkor $n = 1$ -re az Ising modell esetén a (2.1)-ben megfogalmazott Hamilton operátor jelenik meg.

A (2.5)-tel jellemzett modellekben $n > 2$ esetén kétdimenzióban a Mermin-Wagner elmélet értelmében [79] nem alakul ki hosszú távú rend véges hőmérsékleten. Ugyanakkor az XY modell egy speciális, úgynevezett Kosterlitz-Thouless [68] fázisátalakulással bír, mely során a korrelációs függvény lecsengése megváltozik.

2.2. Elméleti leírás

A továbbiakban áttekintjük a legfontosabb statisztikus fizikai fogalmakat, hogy ezáltal részletesen megismerhessük a mágneses rendszerekben megfigyelhető kritikus jelenségeket.

Kanonikus leírást használva egy N pontú rács T hőmérséklettől és H külső mágneses tértől függő állapotösszege a következő:

$$\mathcal{Z}_N(T, H) = \sum_{\mu} \exp(-\beta E_{\mu}), \quad (2.6)$$

ahol $\beta = 1/kT$, k a Boltzmann-állandó. Az összegzés az összes lehetséges μ mikroállapotra történik, spinrendszerek esetén ez az összes lehetséges spin konfigurációt jelenti. A rendszerhez tartozó szabadenergia

$$F = -kT \ln \mathcal{Z}_N, \quad (2.7)$$

melyből minden termodinamikai mennyiség levezethető [102]. Így kapjuk meg a rendszer teljes M mágnesezettséget és χ_T szuszceptibilitást egy állandó hőmérsékleten:

$$M = - \left(\frac{\partial F}{\partial H} \right)_T, \quad \chi_T = \left(\frac{\partial M}{\partial H} \right)_T, \quad (2.8)$$

valamint az állandó mágnesezettséghez tartozó teljes S entrópiát és C fajhőt:

$$S = - \left(\frac{\partial F}{\partial T} \right)_M, \quad C = T \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_M. \quad (2.9)$$

Ha a szabadenergiát a rácok számával normáljuk, akkor a szabadenergia sűrűségfüggvényéhez jutunk:

$$f(T, H) = -kT \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln \mathcal{Z}_N \quad (2.10)$$

Ebből a fenti definíciókat figyelembevéve meghatározhatjuk az egy spinre eső fizikai mennyiségeket.

Egy tetszőleges X fizikai mennyisége átlagát a következőképpen értelmezzük:

$$\langle X \rangle = \frac{1}{\mathcal{Z}_N} \sum_{\mu} X_{\mu} \exp(-\beta E_{\mu}), \quad (2.11)$$

ahol X_{μ} az adott μ spinkonfiguráció esetén mért X mennyiséget jelenti.

Spinrendszerek esetén a spinek viselkedésére használt fontos mennyiség az összekapcsolt korrelációs függvény. Ising modell tekintve jelöljük az $\mathbf{r}_i$ -edik rácsponton elhelyezkedő spint σ_i -vel, míg az $\mathbf{r}_j$ -edik rácsponton megtalálható σ_j -vel. Ekkor a $G(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j)$ összekapcsolt korrelációs függvény a spinek közötti fluktuációk korrelációját méri. Abban az esetben, ha a távolság növekedésével gyors lecsengést mutat, akkor a távolabbi spinek korrelálatlanok, a rendszerben rövid távú rend uralkodik. Ugyanakkor a lassú lecsengés azt jelenti, hogy az egymástól távolabb elhelyezked spinek nagy mértékben korreláltak.

$$G(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) = \langle (\sigma_i - \langle \sigma_i \rangle) (\sigma_j - \langle \sigma_j \rangle) \rangle \quad (2.12)$$

Amennyiben a rendszer transláció invariáns, azaz $\langle \sigma_i \rangle = \langle \sigma_j \rangle = \langle \sigma \rangle$, és rotáció invariáns az összekapcsolt korrelációs függvény nem a két spin helyétől, hanem a két spin $r = |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|$ távolságától függ,

$$G(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) = G(r) = \langle \sigma_i \sigma_j \rangle - \langle \sigma \rangle^2. \quad (2.13)$$

A kritikus ponttól távolabb a spinek korrelálatlanná válnak és a függvény nullába tart, ha $r \rightarrow \infty$. Ekkor az a ráczállandónál nagyobb távolságok esetén, $r/a \gg 1$, $G(r)$ a következő alakot ölti:

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

ahol $\xi = \xi(T, H)$ a korrelációs hossz, amely a korrelált, azonos irányba mutató spinek által létrehozott klaszterek átlagos méretét jellemezi [117]. A τ lecsengési exponens függhet attól, hogy a hőmérséklet alacsonyabb vagy magasabb a kritikus hőmérsékletnél.

2.1. táblázat. Az alapvető kritikus exponensek

mágnesezettség	$m \sim t ^\beta, \quad m \sim h ^{1/\delta}$
szuszeptibilitás	$\chi \sim t ^{-\gamma}$
fajhő	$C \sim t ^{-\alpha}$
korrelációs hossz	$\xi \sim t ^{-\nu}, \quad \xi \sim h ^{-\nu_h}$
korrelációs függvény	$G(r) \sim r^{-(d-2+\eta)}$

Ezek után hasonló módon történik tetszőleges modellben a $\phi(\mathbf{r})$ rendparaméter sűrűségfüggvényéhez tartozó $G(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ összekapcsolt korrelációs függvény definiálása:

$$G(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \langle \phi(\mathbf{r}_1) \phi(\mathbf{r}_2) \rangle - \langle \phi(\mathbf{r}_1) \rangle \langle \phi(\mathbf{r}_2) \rangle. \quad (2.15)$$

A kritikus ponttól való távolságot a skálamezőkkel mérjük. Mágneses rendszerek esetén ez a t redukált hőmérséklet és a h redukált mágneses tér. Az első a belső energia, a második pedig a rendparaméter konjugáltja. A következőképpen definiáljuk őket:

$$t = \frac{T - T_c}{T_c}, \quad h = \frac{H}{kT_c}, \quad (2.16)$$

ahol T_c a kritikus hőmérsékletet jelöli. Inhomogén esetben más skálamezőket is be kell vezetni, melyek az adott perturbációtól függenek.

A kritikus pont körül a megfigyelt fizikai mennyiségek hatványfüggvényszerűen viselkednek [65]. Ezen tulajdonságokat leíró exponenseket kritikus exponenseknek nevezzük. Egy $X(t)$ fizikai mennyiség kritikus exponense ω , ha

$$\omega = \lim_{t \rightarrow 0} \frac{\ln X(t)}{\ln |t|} \quad (2.17)$$

határérték létezik és véges. Ekkor $X(t)$ kritikus viselkedését az $X(t) \sim |t|^\omega$ kifejezéssel jellemezhetjük, ami azonban ritkán teljesül. Helyette egy sokkal általánosabb formulát kell tekintenünk:

$$X(t) \sim A |t|^\omega (1 + B |t|^\epsilon + \dots), \quad (2.18)$$

ahol a korrekciós tagok nem változtatják meg a kritikus exponens értékét.

A kísérleti és az analitikus eredmények együttesen azt a feltevést támasztják alá, hogy a kritikus hőmérséklet feletti és alatti exponensek értéke megegyezik. A (2.18) kifejezésben a két különböző hőmérsékleti tartományban általában csak az együttható térnek el egymástól. Elég közel a kritikus ponthoz a sorfejtésben a legnagyobb tag dominál, így log-log skálán ábrázolva a mérési adatokat a kritikus exponens meghatározható anélkül, hogy magát a fizikai mennyiséget leíró függvény konkrét alakját ismernénk.

A különböző fizikai mennyiségek és a hozzájuk tartozó kritikus exponenseket a 2.1 táblázat foglalja össze. A kritikus exponensek nem teljesen függetlenek egymástól, számos reláció van köztük, lásd 2.2 táblázat.

2.2.1. Átlagtér elmélet

Fázisátalakulások kvalitatív megértésében egyik alapvető eszköz az átlagtér elmélet. Eredetileg az az elv húzódik meg benne [33, 111], hogy a részecskék közötti bonyolult kölcsönhatásokat minden egyes részecske esetén egyetlen kölcsönhatással helyettesítik, mely a többi részecske együttes hatását hivatott képviselni. Ezáltal lényegesen leegyszerűsödik az adott probléma, és így viszonylag kisebb erőfeszítések árán nyerhetünk betekintést a rendszer viselkedésébe.

Az átlagtér elmélet nagy hiányossága is ugyanebből fakad, hiszen azáltal, hogy egy effektív teret használ, elhanyagolja a rendszerben lévő fluktuációkat. Éppen ezért csak magasabb dimenziókban, illetve olyan modellek esetén ad helyes becslést a rendszer viselkedésére, ahol a fluktuációk nem jelentősek.

Landau elméletében a fázisátalakulások fenomenológiai megközelítését a rendszer szimmetriájára alapozva javasolta [71, 70]. A szabadenergiát vizsgálva feltételezte, hogy az a lokális rendparaméter függvénye, $F = F(\phi(\mathbf{r}))$. A kritikus pont közelében, egyensúly esetén $\phi(\mathbf{r})$ függhet a helyvektortól, $\mathbf{r}$ -től, ha a rendszer inhomogén, például felület vagy szennyeződés jelenlétében. A szabadenergia ismeretében már meghatározhatóak a rendszer termodinamikai tulajdonságai.

Miként a Hamilton operátornak, a szabad energiának is meg kell őrizni a rendszer szimmetriáját. Landau F -et a lokális szabadenergia sűrűségfüggvényének, $f(\phi(\mathbf{r}))$ -nek az integráljaként írta fel.

Homogén esetben a rendparaméter konstans, $\phi = \phi(\mathbf{r})$. Inhomogén esetben, az ebből származó energiaváltozás miatt, az integrál egy $(\nabla\phi(\mathbf{r}))^2$ taggal is bővül. Mágneses rendszerek esetén a rendparaméter az egy spinre eső mágnesezettség, $\phi(\mathbf{r}) = m(\mathbf{r})$, így ilyen rendszereknél a szabadenergia a következőképpen néz ki:

$$F(m(\mathbf{r})) = \int \left(\frac{C}{2} (\nabla m(\mathbf{r}))^2 + f(m(\mathbf{r})) - H(\mathbf{r}) m(\mathbf{r}) \right) d\mathbf{r}, \quad (2.19)$$

ahol C egy pozitív konstans, $H(\mathbf{r})$ pedig a külső mágneses tér. A kritikus pont környékén a mágnesezettség kicsi, ezért f -et a rendparaméter szerint Taylor sorba fejthetjük.

Ferromágneses modellek esetén a sorfejtésben nem jelenik meg a lineáris tag, ugyanis $H = \frac{\partial f}{\partial m}$, és a kritikus pont felett külső tér hiányában a rendszer mágnesezettsége eltűnik. Mivel a Taylor sorban szereplő összes tagnak tükröznie kell a rendszer Hamilton operátorának szimmetriáját, ezért Ising modell esetén a páratlan kitevőjű hatványok nem jelenhetnek meg. Hiszen a rendszer Hamilton operátora invariánsan viselkedik azzal szemben, ha a modell összes spinjét egyszerre ellentettjére változtatjuk. Ekkor a szabadenergia sűrűségfüggvénye:

$$f(m(\mathbf{r})) = f(0) + \frac{A}{2} m^2(\mathbf{r}) + \frac{B}{4} m^4(\mathbf{r}) + \dots \quad (2.20)$$

A különböző együtthatók függhetnek a hőmérséklettől és az adott problémában szereplő egyéb paraméterektől.

Homogén esetben a negyedik hatványig kell figyelembe venni a sorfejtést. Ekkor $A = -at$ ($a > 0$, $t = T_c - T$) negatív, feltételezve $T < T_c$, és a kritikus ponttól mért távolságot hivatott kifejezni. A pozitív együtthatóval, $B > 0$, rendelkező utolsó tag biztosítja a rendszer stabilitását a rendezett fázisban. Az együtthatók pontos ismerete nélkül

is jól leírható a modell kritikus viselkedése. Ez jól tükröződik a 6 fejezetben, ahol először az átlagtér elméletet használjuk két különböző rendszer összekapcsolásakor keletkező határfelület kritikus viselkedésének analizálásához.

2.2.2. Fluktuációk, homogenitás

A kritikus pont megközelítése fluktuációk megjelenésében nyilvánul meg, mely a rendszerben levő tipikus méretig, azaz a ξ korrelációs hossz nagyságáig terjednek. A fluktuációk hierarchikusak, azaz fluktuációk vannak a fluktuációkon belül, valamint önhasznók. Az önhasznóság azt jelenti, hogy a rendszer ugyanúgy néz ki az a rácsállandója és a ξ korrelációs hossz között választott bármely skálán. Magában a kritikus pontban ξ divergál, ezért a rendszer invariánsan viselkedik a benne lévő skála megváltoztatásával szemben, vagyis minden skálán ugyanazt az arcát mutatja. Ez a tulajdonság jellemzi a fraktálokat is [74].

A másodrendű átalakulási pont környékén a mágnesezettség fluktuációi fraktál struktúrát mutatnak. Egy d dimenziós rendszer esetén a korrelációs hossznál kisebb sugarú R gömbön belül a teljes mágnesezettség R -rel az alábbiak szerint változik:

$$M(R) \sim R^{y_h}, \quad (2.21)$$

ahol y_h a mágnesezettség fraktál dimenziója, $y_h < d$. A kritikus fluktuációk ugyanis a ξ^d térfogaton belül szétrombolják a rendszer extenzivitását.

Azon rendszer, amelynek L lineáris mérete nagyobb a korrelációs hosszánál, ξ^d térfogatú részrendszerekre bontható. Az így képzett blokkok már fraktál struktúrát mutatnak, azaz mindegyik ξ^{y_h} mágnesezettséggel bír. A kritikus pont felett a különböző részrendszerek korrelálatlanok, melynek következménye, hogy a rendszer teljes mágnesezettsége eltűnik. A kritikus pont alatt azonban a blokkok azonos irányba mutatnak, a rendszerben megjelenik egy spontán mágnesezettség. A részrendszerek n számának segítségével, $n = L^d/\xi^d$, meghatározhatjuk a teljes mágnesezettséget

$$M(L) = n\xi^{y_h} = L^d\xi^{y_h-d}, \quad (2.22)$$

ahonnan a mágnesezettség sűrűségére a következő adódik:

$$m = \frac{M(L)}{L^d} = \xi^{y_h-d}. \quad (2.23)$$

A belsőenergia fluktuációi is teljesen hasonlóan viselkednek. Ezen fizikai mennyiség egy szinguláris és egy reguláris részre bontható. A szinguláris rész a kritikus pont környékén a ξ korrelációs hosszánál kisebb R sugarú gömbön belül fraktál struktúrát mutat

$$E_{sing}(R) \sim R^{y_t}, \quad (2.24)$$

ahol y_t a belsőenergia fraktál dimenziója. Az előzőekhez analóg módon egy L lineáris méretű rendszer belsőenergia sűrűségére a következőt kapjuk

$$e_{sing} = \frac{E_{sing}(L)}{L^d} = \xi^{y_t-d}. \quad (2.25)$$

Tekintsünk egy a rácscsálódójú rácsot, ahol a -t egységnyiinek választjuk. Ekkor az L hosszú rendszer mérete $L = La$. Növeljük meg az a rácscsálódót egy $b > 1$ tágítási faktorról oly módon, hogy a köztes rácsponthokt elemínáljuk. A művelet végrehajtása során a rendszer hossza L' lesz, $L'a' = La$. Ezek után az új $a' = ab$ rácscsálódót egységnek választva a rendszer mérete a b -vel fordítottan arányosan csökken $L' = L/b$.

A kezdetben V térfogaton elhelyezkedő F szabadenergia a transzformáció után $V' = V/b^d$ térfogathoz fog tartozni. A rendszer szabadenergia sűrűsége emiatt a következőképpen változik:

$$f' = \frac{F}{V'} = b^d \frac{F}{V} = b^d f \quad (2.26)$$

A fenti művelet során tetszőleges x hosszúság b -vel arányosan csökken, $x' = x/b$. Speciálisan ez a korrelációs hosszról is elmondható, $\xi' = \xi/b$. Emiatt egy olyan rendszer, amely nem a kritikus pontjában volt, $t \neq 0, h \neq 0$, egyre jobban távolodni fog attól.

Magában a kritikus pontban a korrelációs hossz végtelen, és ez nem is változik meg a transzformáció során, vagyis ξ invariáns a skála megváltoztatásával szemben. A korrelációs hossz ezen tulajdonságából meghatározható a skálamezők viselkedése, ugyanis

$$\xi' = \xi(t') = \frac{\xi(t)}{b} \quad \xi' = \xi(h') = \frac{\xi(h)}{b}. \quad (2.27)$$

A 2.1 táblázat adatai szerint tudjuk, hogy $\xi \sim t^{-\nu}$ illetve $\xi \sim h^{-\nu_h}$. Ezeket a (2.27) egyenletbe behelyettesítve adódik, hogy

$$t' = b^{1/\nu} t \quad h' = b^{1/\nu_h} h \quad (2.28)$$

A kritikus pont környékén a szabadenergia sűrűségfüggvénye két részre bontható:

$$f(T, H) = f_{reg}(T, H) + f_{sing}(T, H), \quad (2.29)$$

ahol az első tag reguláris, míg a második szinguláris. A reguláris rész analitikus a másodrendű átalakulás során, és hatása nem jelentős. A szinguláris rész az, amely ekkor meghatározza a különböző fizikai mennyiségek viselkedését. Figyelembe véve a (2.26) egyenletet, valamint azt, hogy $f'_{sing} = f_{sing}(t', h')$ és a skálamezőre fentebb kapott eredményt, a következő adódik:

$$f_{sing}(t, h) = b^{-d} f_{sing}(b^{1/\nu} t, b^{1/\nu_h} h). \quad (2.30)$$

Azaz a művelet során a szabadenergia sűrűségének szinguláris része homogén függvényként viselkedik. A megfelelő deriváltakból a különböző termodinamikai mennyiségeket, mint a skálamezők homogén függvényét lehet meghatározni.

Ha a (2.30) egyenletet t szerint deriváljuk, akkor a belső energia sűrűségére a következőt kapjuk:

$$e_{sing}(t, h) = b^{-d+1/\nu} e_{sing}(b^{1/\nu} t, b^{1/\nu_h} h). \quad (2.31)$$

A h -t nullának, b -t $t^{-\nu}$ -nek választva

$$e_{sing}(t, h) = t^{\nu d-1} e_{sing}(1, 0) \sim t^{\nu(d-y_t)}, \quad (2.32)$$

2.2. táblázat. A kritikus exponensek közötti skálatörvények

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

ahol az utolsó részben a (2.25) egyenletben kapott eredményt használtuk. Mindezekből az adódik, hogy

$$\nu = \frac{1}{y_t} \quad (2.33)$$

A szabadenergia sűrűségének szinguláris részét h szerint deriválva a mágneszettségre az alábbi összefüggést kapjuk:

$$m(t, h) = b^{-d+1/\nu} m(b^{1/\nu} t, b^{1/\nu} h). \quad (2.34)$$

A $t = 0$ és a $b = h^{-\nu_h} \sim \xi(h)$ választás esetén az adódik, hogy

$$m(0, h) = h^{\nu_h d - 1} m(0, 1) \sim h^{\nu_h(d - y_h)}, \quad (2.35)$$

ahol felhasználtuk a (2.23) egyenletet, és így

$$\nu_h = \frac{1}{y_h}. \quad (2.36)$$

Végülis minden kritikus exponens kifejezhető a d dimenzió, valamint y_t és y_h segítségével.

$$\alpha = 2 - \frac{d}{y_t}, \quad \beta = \frac{d - y_h}{y_t}, \quad \delta = \frac{y_h}{d - y_h}, \quad \gamma = \frac{2y_h - d}{y_t}, \quad \eta = d + 2 - 2y_h. \quad (2.37)$$

A kritikus exponensek között számos reláció áll fent, melyek egy része a (2.37)-ből kifejezhető. Ezeket skálatörvényeknek nevezik. A legismertebb skálatörvényeket a 2.2 táblázatban foglaltuk össze. Josephson törvényében megjelenik a tér dimenziója. Ezt a törvényt hiper skálázási törvénynek is nevezik, érvényessége azon dimenziókra terjed ki, ahol az átlagtér elmélet keretén belül jól leírhatók a jelenségek, azaz a kritikus dimenzióban és a felett.

2.2.3. Renormálási csoport

A relativisztikus térelméletre alapuló renormálási csoport elmélet [64, 113, 114, 73] a statisztikus fizikában számos korábban felmerült kérdésre adott választ. Többek között jó magyarázatot szolgáltat arra, hogy a másodrendű átalakulások kritikus pontja környékén a különböző termodinamikai mennyiségek miért viselkednek homogén függvényként.

Tekintsünk egy a paraméterű rácson elhelyezkedő rendszert, melynek Hamilton operátorát a következő alakban írhatjuk:

$$-\beta\mathcal{H} = \sum_{\alpha} K_{\alpha} O_{\alpha} \quad (2.38)$$

ahol K_{α} -k a kezdő kötések, O_{α} -k az ezekhez tartozó konjugált operátorok.

Ising modell esetén K_{α} -k a külső mágneses teret, valamint a spinek közötti kicserélődési energiát reprezentálják. A hozzájuk tartozó konjugált operátorok az első esetben a $\sum_i \sigma_i$, míg a másodikban $\sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j$.

Transzformáljuk át a rendszert egy új $a' = ab$ rácsállandójú hálóra az előző fejezetben leírtak alapján. Ennek következtében kiküszöböljük az a' -ig terjedő fluktuációkat. A leképezéssel szemben az alábbi elvárásokat tesszük [49].

A transzformáció hatására a rendszerben lévő adott x hosszúság

$$x' = \frac{x}{b}, \quad b > 1 \quad (2.39)$$

módon változik, miközben csökken a rendszer szabadsági fokainak száma

$$N' = \frac{N}{b^d}, \quad (2.40)$$

ahol d az euklideszi dimenziót jelöli. A renormálási transzformáció során a kezdeti és a vég állapothoz tartozó állapotösszeg változatlan marad:

$$\mathcal{Z}_{N'}(\mathcal{H}') = \mathcal{Z}_N(\mathcal{H}). \quad (2.41)$$

A renormálási csoport egy lépésének végrehajtásakor keletkezett új rendszer $\mathcal{H}'$ Hamilton operátorának kötései függenek az előző rendszer kötéseitől:

$$\{K'_{\alpha}\} = R_b[\{K_{\alpha}\}]. \quad (2.42)$$

Általában új tagok jelennek meg, melyeket a kiindulási rendszerben értelemszerűen nullának választjuk, azaz $\{K'_{\alpha}\}$ és $\{K_{\alpha}\}$ azonos dimenziójú vektorok. Ha figyelembe vesszük a (2.40)-t és a (2.41)-t, akkor azt kapjuk, hogy a szabadenergia sűrűsége a renormálási transzformáció hatására a (2.26) egyenlettel összhangban a következőképpen változik:

$$f(\{K'_{\alpha}\}) = b^d f(\{K_{\alpha}\}). \quad (2.43)$$

Amennyiben egy rendszer eredetileg nem a kritikus pontjában volt, akkor a renormálási eljárás folyamán távolodni fog attól, hiszen mint minden hosszúság, a korrelációs hossz is csökken egy lépés végrehajtása során. A kritikus pontjában lévő rendszer viszont invariánsan viselkedik a skála megváltoztatásával szemben. Ez megfelel annak, hogy a kötések által meghatározott térben a renormálási transzformációnak van egy $\{K_{\alpha}^*\}$ fixpontja:

$$\{K_{\alpha}^*\} = R_b[\{K_{\alpha}^*\}]. \quad (2.44)$$

A renormálási transzformációt egymás után ismételve a kötések terében különböző fixpontokhoz juthatunk. Ezek egy része triviális, mely általában az adott probléma valamely paraméterének szélsőértékeihez (például nulla vagy végtelen hőmérséklet) fűződik. A nem triviális fixpontok más-más univerzális osztályt jellemeznek.

A fixpont közelében a rendszer Hamilton operátorát az alábbi formában írhatjuk le:

$$-\beta\mathcal{H}(\{K_\alpha\}) = -\beta\mathcal{H}(\{K_\alpha^*\}) + \sum_\alpha \Delta K_\alpha O_\alpha, \quad (2.45)$$

ahol

$$\Delta K_\alpha = K_\alpha - K_\alpha^*. \quad (2.46)$$

A renormálási transzformáció végrehajtása után a következő adódik:

$$\Delta K'_\alpha = K'_\alpha - K_\alpha^*. \quad (2.47)$$

Amennyiben az eredeti és a renormált rendszernek a fixponttól való távolsága kicsi, akkor (2.46) és (2.47) összekapcsolhatók a renormálási csoport transzformációjának linearizálásával.

$$\Delta K'_\alpha = \sum_\beta T_{\alpha\beta}(b) \Delta K_\beta \quad (2.48)$$

$$T_{\alpha\beta}(b) = \left(\frac{\partial K'_\alpha}{\partial K_\beta} \right)_{\{K^*\}} \quad (2.49)$$

Mivel két egymást követő b_1 és b_2 tágitási faktorról rendelkező renormálás helyettesíthető egyetlen transzformációval $R_{b_1} R_{b_2} = R_{b_1 b_2}$, ezért a T mátrix i -edik sajátvektorához tartozó λ_i sajátértéke, $i = 1, 2, \dots$, szükségképpen a következő módon viselkedik:

$$\lambda_i(b_1) \lambda_i(b_2) = \lambda_i(b_1 b_2), \quad (2.50)$$

amiből az adódik, hogy

$$\lambda_i(b) = b^{y_i}, \quad (2.51)$$

ahol y_i már függetlenek a b tágitási faktor értékétől. A (2.46) egyenlőséget a T mátrix $\{e^i\}$ sajátvektoraival is kifejezhetjük:

$$\Delta K_\alpha = \sum_i g_i e_\alpha^{(i)}, \quad (2.52)$$

ahol g_i az i -edik skálamezőt jelöli. Figyelembe véve (2.48)-t valamint a sajátértékekre a (2.51)-ben megfogalmazott tulajdonságot a renormálási transzformáció után a következő adódik:

$$\Delta K'_\alpha = \sum_i g_i b^{y_i} e_\alpha^{(i)}. \quad (2.53)$$

Vagyis a fixpont környékén az $e^{(i)}$ irányhoz tartozó g_i skálamező az alábbi módon változik a leképezés hatására:

$$g'_i = b^{y_i} g_i, \quad (2.54)$$

y_i az i -edik skálamező fraktál dimenziója.

Ha $y_i > 0$, akkor t_i növekszik a renormálás hatására, és a rendszer távolodni fog a fixponttól. Ebben az esetben releváns skálamezőről beszélünk.

Ha $y_i < 0$, akkor a skálamező irreleváns. Az egymást követő renormálási transzformációk során a rendszer a fixpont felé halad.

Amennyiben $y_i = 0$, a fixpont környékén a rendszer első megközelítésben nem változik, a lineáris tagokon kívül más tagokat is figyelembe kell venni. Ilyen esetben marginális skálamezőről beszélünk, amelyet további vizsgálódások alapján marginálisan releváns, illetve marginálisan irreleváns skálamezőre bonthatunk. Az utóbbi esetben a rendszer viselkedését a tiszta rendszer logaritmikus korrekciókat tartalmazó exponensei határozzák meg.

A renormálási transzformáció fixpontja környékén a szabadenergia szinguláris részét a g_i skálamezőkkel is kifejezhetjük. Figyelembe véve a (2.43)-t, valamint a (2.54)-t az f_{sing} viselkedésére a renormálás hatására a következő adódik:

$$f_{sing}(g_1, g_2, \dots) \sim b^{-d} f_{sing}(b^{y_1} g_1, b^{y_2} g_2, \dots) \quad (2.55)$$

Mágneses rendszerek esetén mindig releváns skálamező a redukált hőmérséklet és a külső mágneses tér, vö. (2.30). Ugyanakkor irrelevánsak a távolabbi szomszédok közötti kölcsönhatások. Azok a rendszerek, amelyek csupán irreleváns skálamezőkben különböznek egymástól azonos fixponttal bírnak, ezért a kritikus exponenseik értéke megegyezik, vagyis ugyanazon univerzális osztályba tartoznak.

2.2.4. Konform invariancia

Tudjuk, hogy a kritikus pontjában lévő rendszer invariánsan viselkedik a dilatációval szemben ($\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{r}' = \mathbf{r}/b$). Ezen tulajdonság alapjául szolgál a renormálási csoport elméletének, mely fontos állomás a kritikus jelenségek megértésében.

A konform elmélet a rendszer skálával szembeni invarianciájának általánosítása [54, 29], mely azon nyugszik, hogy a kritikus pontban a rendszer invariánsan viselkedik a konform transzformációkkal szemben. Meg kell azonban jegyeznünk, hogy egy rendszer skálainvarianciájából nem minden esetben következik, hogy konform invarianciával is rendelkezik [96].

Konform transzformációban $\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{r}'(\mathbf{r})$ a rács lokális struktúrája nem változik meg, míg a hosszúság újraskálázó faktora $b(\mathbf{r})$ a hely sima függvénye. Geometriailag azon leképezések tartoznak ide, ahol az $\mathbf{r}$ és az $\mathbf{r}'$ által meghatározott $\cos(\theta) = \mathbf{r} \cdot \mathbf{r}' / (r^2 r'^2)^{1/2}$ szög változatlan marad. A konform transzformációk csoportot alkotnak. Abban az esetben, amikor $d > 2$ (d a rendszer euklideszi dimenziója), ez a csoport véges dimenziós. Rotációk, translációk, dilatációk, inverzók és speciális transzformációk

$$\frac{\mathbf{r}'}{(r')^2} = \frac{\mathbf{r}}{r^2} + \mathbf{a} \quad (2.56)$$

által generált, mely utóbbi egy inverzióból, egy eltolásból és egy újabb inverzióból tevődik össze.

Kétdimenzióban, $d = 2$, a konform csoport sokkal gazdagabb [14]. Izomorf a végtelen dimenziós komplex analitikus függvények csoportjával. Éppen ezért természetes a

komplex koordináták használata. Ismert eredmény [29, 54], hogy egy $z \rightarrow w(z)$ konform leképezés esetén a $\phi_i(z_i, \bar{z}_i)$ operátorokhoz tartozó korrelációs függvény az alábbi módon transzformálódik:

$$\langle \phi_1(z_1, \bar{z}_1) \phi_2(z_2, \bar{z}_2) \dots \rangle = \left[\prod_i |w'(z_i)|^{\Delta_i} |w'(\bar{z}_i)|^{\bar{\Delta}_i} \right] \times \langle \phi_1(w(z_1), \bar{w}(\bar{z}_1)) \phi_2(w(z_2), \bar{w}(\bar{z}_2)) \dots \rangle \quad (2.57)$$

ahol a hosszúság lokális újraszkalázási faktora $|w'(z)|^{-1}$, továbbá $x_i = \Delta_i + \bar{\Delta}_i$ a $\phi_i(z_i, \bar{z}_i)$ operátor skálázási dimenziója.

Logaritmikus transzformáció

Igen gyakran használt konform leképezés kétdimenzióban a logaritmikus transzformáció

$$w(z) = u + iv = \frac{L}{2\pi} \ln(z), \quad (2.58)$$

mely a teljes komplex síkot egy L széles periodikus csíkra képezi le, $(u, v) \in (-\infty; \infty) \times [0; L]$. Alkalmazva a (2.57)-ban ismertetett összefüggést, a kétpont korrelációs függvény az új rendszerben

$$\langle \phi(u_1, v_1) \phi(u_2, v_2) \rangle = \frac{(2\pi/L)^{2x_\phi}}{\left(2 \cosh\left(\frac{2\pi}{L}(u_1 - u_2)\right) - \cos\left(\frac{2\pi}{L}(v_1 - v_2)\right)\right)^{x_\phi}}, \quad (2.59)$$

amely nagy távolságokban, $|u_1 - u_2| \gg L$, exponenciális lecsengést mutat

$$\langle \phi(u_1, v_1) \phi(u_2, v_2 = v_1) \rangle \sim \left(\frac{2\pi}{L}\right)^{2x_\phi} e^{-\frac{2\pi x_\phi}{L}(u_1 - u_2)}. \quad (2.60)$$

Ebből következik a ξ korrelációs hossz és a csík L szélessége között megfogalmazott egyszerű összefüggés [25]:

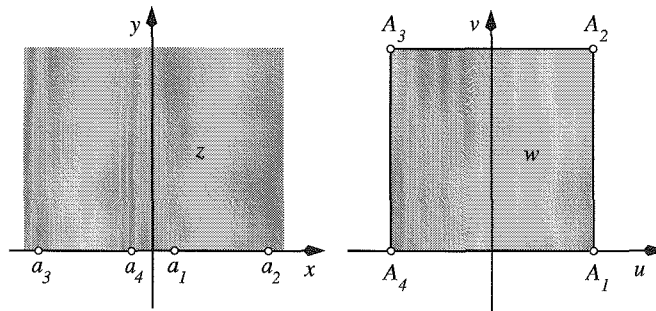
$$\xi = \frac{L}{2\pi x_\phi}. \quad (2.61)$$

Schwarz-Christoffel transzformáció

Itt kell említést tennünk az 5. fejezetben használt Schwarz-Christoffel leképezésről. Ez a komplex transzformáció a felső félsíkot képezi le egy tetszőleges poligon belsejébe. Mindent oly módon teszi, hogy a vízszintes tengelyen elhelyezkedő pontok a poligon határára kerülnek.

Az általános formulától eltekintve, csak azt az esetet tárgyaljuk, amikor a $z = x + iy$ felső félsíkot a 2.2 ábrán látható módon egy négyzetre képezzük le. Ez az alábbi transzformáció végrehajtásával valósítható meg:

$$w(z) = \frac{L}{2K(k)} F(z, k), \quad z = \operatorname{sn}\left(\frac{2Kw}{L}\right), \quad (2.62)$$



2.2. ábra. A felső félsík konform leképezése egy négyzetbe. A határfeltételek (szabad, rögzített) mind a két rendszerben megegyeznek.

ahol $w(z) = u + iv$ és

$$F(z, k) = \int_0^z \frac{dt}{\sqrt{(1-t^2)(1-k^2t^2)}} \quad (2.63)$$

a k együtthatójú elsőrendű elliptikus integrál, továbbá $K(k) = F(1, k)$ a k együtthatójú komplett elsőrendű elliptikus integrál, valamint sn a Jakobi-féle elliptikus szinusz függvény. A (2.62) konform leképezés az $y = \Im(z) \geq 0$ félsíkot a $-L/2 \leq u \leq L/2$, $0 \leq v \leq L$ négyzetre képezi, amennyiben $K(k)/K(\sqrt{1-k^2}) = 1/2$ teljesül [51].

2.3. Rendezetlen rendszerek

2.3.1. Rendezetlenség típusai

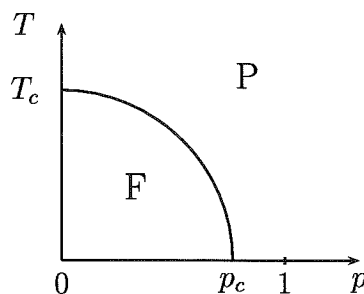
Fizikai rendszerek esetén rend alatt valamely szabályosságot például kristályos szerkezetet, atomi összetevők rendjét értjük. A rendezetlenséget a rend gyengülésével mérjük [119]. Mágneses rendszerek esetén a szerkezete adott. Klasszikus rendszereknél $T = 0$, $\hbar = 0$ feltételek mellett az energia minimum meghatározza a mágneses momentumok kapcsolódását. Ettől a rendtől való eltérésnek alapján véve két forrása van, az egyik a termikus fluktuációk, a másik a kvantum ingadozások.

Klasszikus spinrendszerek esetén a hőmérséklet okozta ingadozások mellett más rendezetlenséget is bevezethetünk [105]. Ennek az egyik legegyszerűbb realizációi a hígított modellek. Az Ising modellnek a (2.1)-ben szereplő Hamilton operátora ekkor a következő alakot ölti:

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{i,j} (\sigma_i \epsilon_i) (\sigma_j \epsilon_j), \quad (2.64)$$

ahol kötési hígítás esetén minden ϵ_i azonosan eggyel egyenlő, míg p valószínűséggel $J_{i,j} = 0$, és $1-p$ a valószínűséggel annak, hogy $J_{i,j} = J > 0$. Betöltési hígítás esetén $J_{i,j}$ és ϵ_i szerepe felcserélődik, azaz $J_{i,j} = J$, és p valószínűséggel $\epsilon_i = 0$, valamint $1-p$ valószínűséggel $\epsilon_i = 1$.

Mindkét esetben a rendszer két releváns változója a T hőmérséklet és a hígítás p koncentrációja. A modell fázisdiagramja ezen változók függvényében a 2.3 ábrán látható. A



2.3. ábra. A hígított ferromágneses modell fázisdiagramja. F a ferromágneses, míg P a paramágneses fázist jelöli.

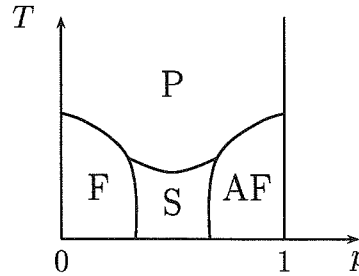
$T = 0$ esetben a perkoláció problémája adódik vissza, azaz p értékét egyről csökkentve egy bizonyos p_c koncentráció esetén jelenik meg először egy végtelen, összekapcsolt spinekből álló klaszter. Ez a szinguláris pont a folytonos fázisátalakulások geometriai analógója.

A p_c alatti koncentrációknál kellően alacsony hőmérsékleten a rendszerben hosszú távú rend uralkodik, azaz itt ferromágneses fázis van. Mindazonáltal magasabb hőmérsékleten ez a rend megszűnik, és a rendszer paramágnesként viselkedik. A két fázist keresztezve fázisátalakulásnak lehetünk tanúi, mely különböző univerzális osztályokba tartozik, $T = 0$ a perkoláció, a $p = 0$ a tiszta ferromágneses rendszer osztályát szolgáltatja. A köztes régióban $0 < p < p_c$ a kritikus exponensek konstansok. Amennyiben a hígítás irreleváns a tiszta rendszer kritikus pontja határozza meg az átalakulás voltát. Ellenkező esetben, mint például a háromdimenziós Ising modell, a fázistérben új fixpont jelenik meg, mely az eddigiektől különböző kritikus exponenseket eredményez.

A kötési hígítás tovább általánosítható a véletlen ferromágneses modellre. Ekkor a $J_{i,j} \geq 0$ kötések független, azonos eloszlású, pozitív várható értékkel rendelkező véletlen változók. A hőmérséklet mellett a rendszer másik releváns paramétere az eloszlás Δ szélessége. Spinváltozókat tartalmazó modellek esetében az is előfordulhat, hogy megváltozik a ferro- és a paramágneses fázis közötti átmenet [8], nevezetesen elsőrendű átalakulás releváns hígítás esetén másodrendűvé válik.

A rendezetlenség azonban nem csak a kritikus pontban alakíthatja át lényegesen a rendszer viselkedését. Griffiths kötési hígítással rendelkező Ising modellt vizsgált abban az esetben, amikor a (2.64) Hamilton operátorban szereplő $J_{i,j}$ kicserélődési energia p valószínűséggel vette fel a J_1 illetve $1 - p$ valószínűséggel a J_2 értéket, ahol $J_1 > J_2 > 0$. Azt tapasztalta, hogy néhány fizikai mennyiség nemcsak a kritikus pontban, hanem a kritikus hőmérséklet körül egy kiterjedt tartományban is szinguláris. Ezt a Griffiths fázist azon ritka domének okozzák, amelyek lokálisan a kritikus pont túloldalán lévő fázisban vannak. A kizárólag rendezetlen rendszerekben megfigyelhető Griffiths-McCoy szingularitások a klasszikus modellekkel szemben lényegesen nagyobb hangsúllyal jelentkeznek kvantummechanikai rendszerekben, ahol a dinamika és a sztatika összekapcsolódik.

A rendezetlenség egy másik fajtáját a spinüvegek [47] szolgáltatják. A spinüveg átalakulás során a relaxációs idő jelentősen megnő, mely igen nehézé teszi laboratóriumi keretek között az egyensúlyi állapot vizsgálatát. Az Ising spinüvegek Hamilton operátora abban különbözik a kötési hígítás (2.64) Hamilton operátorától, hogy $J_{i,j}$ kicserélődési en-



2.4. ábra. A háromdimenziós Ising spinüveg fázisdiagramja. A ferromágneses (F) és az antiferromágneses (AF) között jelenik meg a spinüveg fázis (S), ahol a mágnesezettség második momentuma nem tűnik el. P a paramágneses fázist jelöli.

regiák között egyaránt megjelennek pozitív és negatív értékek. Abban az esetben, amikor p illetve $1 - p$ valószínűséggel $J_{i,j} = \pm J$, a modell fázisdiagramja a 2.4 ábrán látható.

A rendszer fázisdiagramja gazdagabb a hígított modell fázisdiagramjánál. A paramágneses és a ferromágneses fázis mellett kellően alacsony hőmérsékleten megjelenik a spinüveg fázis is. Itt a kötések véletlenszerűségéből, valamint az ebből adódó frusztrációból következik, hogy lokális ferromágneses szigetek alakulnak ki. Mindemellett hosszú távú rend nem jelenik meg. A rendszer teljes mágnesezettsége ugyanúgy zérus, mint a paramágneses fázisban, azonban a rendparaméter második momentum nem tűnik el.

Említést kell tennünk a véletlen terű modellekről is. Ising rendszer esetén a következő Hamilton operátort kell tekintenünk:

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j - \sum_i h_i \sigma_i, \quad (2.65)$$

ahol spinenként változó, külső mágneses teret reprezentáló h_i -k független, azonos eloszlású véletlen változók, zérus várható értékkel. A hőmérséklet mellett a külső tér h szórása a másik releváns változó a modellben. Amennyiben h alacsony, akkor a spinek $T = 0$ esetén változatlanul azonos irányba állnak. Míg erős véletlen tér jelenlétében ezen hőmérsékleti tartományban is megszűnik a rend. A rendszer fázisdiagramja hasonlít a hígított modellnél látottakhoz (p -t h -re kell felcserélni), vagyis itt is paramágneses és ferromágneses fázis van jelen.

A rendezetlen rendszerek elméleti leírása során külön kezelendők azon rendszerek, ahol a rendezetlenséghez tartozó relaxációs idő lényegesen nagyobb a termikus szabadsági fokokhoz tartozó relaxáció időhöz képest. Az ilyen rendszereket úgynevezett "befagyott" rendezetlenségű modelleknek nevezzük. Bennük a különböző fizikai mennyiségek termikus várható értéke függ a rendezetlenség konkrét realizációjától. Ilyen modellekben előfordulhat, hogy bizonyos mennyiségek nem önátlagolóak, azaz az átlagos és tipikus értékek különböznek. Ezen mennyiségek jellemzésére a teljes eloszlásuk ismerete szükséges.

2.3.2. Felületek viselkedése

Amikor elméleti úton közelítjük meg a fázisátalakulásokat, először mindig homogén modelleket tekintünk. Elhanyagoljuk a felületek jelenlétét, és csupán a tömbi tulajdonságokra

fogalmazunk meg állításokat. Mindez első közelítésben jogos is, hiszen egy N részecskéből álló d dimenziós rendszer esetén a felületen elhelyezkedő részecskék relatív aránya $N^{-1/d}$, mely nagy N esetén igen kicsi.

Másodrendű fázisátalakulások során a korrelációs hossz végtelenbe tart, így a felületek hatása a rendszer tömbi tulajdonságára sokkal jelentősebb. A véges méretből adódóan eltolódhat a rendszer kritikus hőmérséklete. Magában a kritikus pontban pedig új, a tömbtől különböző, a felületet jellemző lokális kritikus exponensek jelenhetnek meg.

A felületek jelenlétére a legegyszerűbb példa a szabad határfelület, amelyet egy d dimenziós rendszerből azáltal kapunk meg, hogy egy $d-1$ dimenziós hipersíkkal kettévágjuk. Először a kétdimenziós Ising modell esetén vizsgálták a szabad határfelületet [78, 17, 38].

A rendszer szabadenergiája a szabad határfelület miatt egy új taggal módosul [48, 24]. Landau-féle átlagtér megközelítésben ez a következőt jelenti:

$$F(m(\mathbf{r})) = \int_V f_b(m(\mathbf{r})) dV + \int_S f_s(m(\mathbf{r})) dS \quad (2.66)$$

ahol $m(\mathbf{r})$ a rendparaméter, mely a rendezett fázisban nem tűnik el. A jobb oldalon álló első tag a rendszer V térfogatára vonatkozó integrál, ez az Ising modell esetén megegyezik a (2.19) és (2.20)-ben megfogalmazottakkal.

$$f_b(m(\mathbf{r})) = f_b(0) + \frac{1}{2}C(\nabla m(\mathbf{r}))^2 + \frac{1}{2}Am^2(\mathbf{r}) + \frac{1}{4}Bm^4(\mathbf{r}) - H(\mathbf{r})m(\mathbf{r}), \quad (2.67)$$

ahol H a rendszer összes spinjére ható külső mágneses tér. A (2.66)-ben szereplő második integrál, mely az S felületre vonatkozik, határozza meg a felület viselkedését. Az ehhez kapcsolódó f_s felületi szabadenergia sűrűség ismét a rendparaméter sorfejtéséből adódik:

$$f_s(m(\mathbf{r})) = f_s(0) + \frac{1}{2}C_s \frac{m^2(\mathbf{r})}{\Lambda} - H_s m(\mathbf{r}), \quad (2.68)$$

itt H_s csak a felületen elhelyezkedő spinekre hat, így ezekre együttesen a $H + H_s$ külső mágneses tér fejti ki hatását. A hosszúság dimenziójú Λ az extrapolációs hossz.

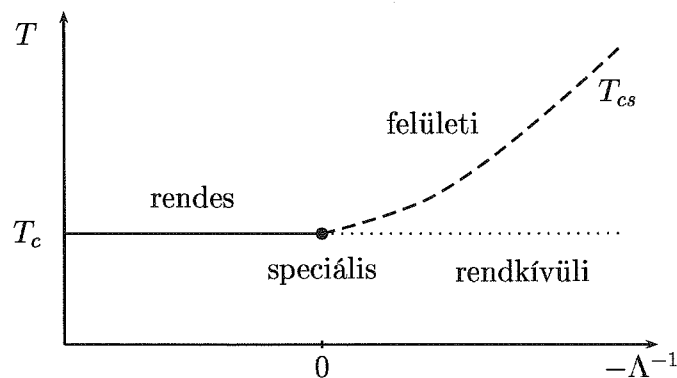
A rendparaméter egyensúlyi értéke minimalizálja a (2.66)-ben leírt szabadenergia értékét. Ez a felületre vonatkozóan a következő Ginzburg-Landau egyenletet jelenti [17]:

$$\mathbf{n} \cdot \nabla m(\mathbf{r}) = \frac{m(\mathbf{r})}{\Lambda} - \frac{H_s}{C_s}, \quad (2.69)$$

ahol $\vec{n}$ a felület normál egységvektor, mely a rendszer belseje felé mutat. Ebből a differenciálegyenletből kiindulva lehet a Landau-féle átlagtér elmélet keretein belül a felületre vonatkozó különböző kritikus exponenseket megkapni, továbbá a rendszer mágnesezettségi profilját meghatározni, részletes lásd a 6.2.2 szakaszt.

Abban az esetben, amikor az Ising modellben a spinek között mindenhol azonos erősségű kötések szerepelnek, a mágnesezettség csak a felülettől mért z távolságtól függ, $m(\mathbf{r}) = m(z)$. Ekkor a (2.69) egyenlet az alábbira egyszerűsödik:

$$\frac{\partial m(z)}{\partial z} = \frac{m(z)}{\Lambda} - \frac{H_s}{C_s}. \quad (2.70)$$



2.5. ábra. A Λ extrapolációs hossz különböző értékei mellett a félvégtesen rendszer felületi fázis átalakulásai [17].

Azt feltételezve, hogy nincs jelen külső mágneses tér, $H = H_s = 0$, az extrapolációs hossz előjelétől függően különbözőféle mágnesezettségi profilokat kapunk. A felület fázisdiagramját a 2.5 ábrán tüntettük fel.

Pozitív extrapolációs hossz esetén alacsony hőmérsékleten a felület közelében a mágnesezettség mindaddig növekszik, míg el nem éri a tömbi mágnesezettség értékét. Ilyenkor a felületnek a rendezetlen fázisból a rendezett fázisba való átmenete ugyanazon T_c kritikus hőmérsékleten történik, mint a rendszer belsejében, ezt rendes felületi átalakulásnak nevezzük, *ordinary transition*.

Negatív extrapolációs hossz esetén magas hőmérsékleten mind a felület, mind a rendszer belseje rendezetlen. A felülethez tartozó fázisátalakulás, *surface transition*, a tömbi kritikus hőmérsékletnél magasabban megy végbe, $T_{cs} > T_c$. A T_{cs} és T_c közötti hőmérsékleti tartományon a felület már rendezett, ugyanakkor a felülettől távol még nincs rend. Amikor a rendszer eléri a tömbi kritikus hőmérsékletet, a belsejében megjelenik a rend, a korrelációs hossz végtelenbe tart, mely a felületi mennyiségek viselkedésében szingularitásokat eredményez, ezt rendkívüli felületi átalakulásnak nevezik, *extraordinary transition*. A T_{cs} alatti hőmérsékleteken a magasabb felületi mágnesezettségről indulva a mágnesezettség monoton csökken mindaddig, amíg el nem éri a tömbi mágnesezettség értékét.

A fentebb említett három felülethez tartozó fázisátalakulás mindazonáltal egyetlen pontban találkozik. Itt az extrapolációs hossz végtelen, a felülethez tartozó mágnesezettség megegyezik a tömbi mágnesezettség értékével és a profilban mindenhol ez az érték szerepel. A felület ugyanazon kritikus hőmérsékleten rendeződik, mint a rendszer belseje, ez a speciális felületi átalakulás, *special transition*.

A szabad határfelülettel rendelkező rendszer részletesebb fázisdiagramja függ H és H_s értékétől, azaz a külső mágneses tértől [82]. Mindemellett a felület okozta inhomogenitás lehet más geometriai jellegű, vagyis a felületet nem egy hipersík, hanem más görbe határozza meg [58]. Ugyanakkor a kötések erőssége is különböző módon változhat a felülettől távolodva, melynek hatása hasonló a korábban vázoltakhoz.

2.3.3. Relevancia-irrelevencia kritériumok

A homogén rendszer viselkedése megváltozik a perturbációk hatására. Az ilyen rendszereket a renormálási csoport keretein belül vizsgálva megállapíthatjuk, hogy kellően erős rendezetlenség következtében a modell kritikus viselkedését új fixpont határozza meg. Ennek következménye, hogy a tiszta rendszerhez tartozó kritikus exponensek értékei megváltoznak.

A tiszta rendszer fixpontjának stabilitását először Harris [53] vizsgálta hígított modellek esetén. Mindazonáltal maga az elv másodrendű átalakulással rendelkező modellek esetén a kötésekben meglévő tetszőleges rendezetlenségre általánosítható.

Annak a tartománynak a nagysága, ahol a spinek korreláltak, d dimenziós modell esetén megegyezik ξ^d -val. Ekkor egy Δ szórással bíró rendezetlenség hatására az átlag kötéstől való eltérés $\xi^{d/2}\Delta$ -val változik. Ezért a kötések számával normalizálva ezt a mennyiséget megkaphatjuk, hogy a lokális csatolási állandók milyen mértékben térítik el ezt a tartományt az átlag hőmérséklettől:

$$\delta t(\xi) \sim \frac{\xi^{d/2}\Delta}{\xi^d} \sim \xi^{-d/2}\Delta \sim t^{\nu d/2}\Delta. \quad (2.71)$$

Ezt kell a kritikus ponttól való távolsággal összevetni

$$\frac{\delta t}{t} \sim t^{\nu d/2-1} \sim t^{-\alpha/2}, \quad (2.72)$$

ahol az utolsó átalakítás során a 2.2 táblázatban szereplő Josephson törvényt használtuk. A Harris kritérium értelmében a rendezetlenség releváns, amennyiben a fajhő kritikus exponense pozitív. Ekkor a rendszer egy új fixpont felé halad a paramétertérben. Amennyiben α negatív a rendezetlenség hatására a kritikus viselkedés nem változik meg, a perturbáció irreleváns. Míg marginális esetben, $\alpha = 0$, további vizsgálódásra van szükség.

A Harris kritérium mellett meg kell említenünk Imry és Ma eredményét is [61], mely véletlen tér okozta inhomogenitások hatásának vizsgálatára vonatkozik. Tekintsük az Ising modellt alacsony hőmérsékleten. Feltételezzük azt, hogy rendelkezünk két, szomszédos, L lineáris méretű, különböző irányba mutató spineket tartalmazó doménnel. Ekkor a rendszer energia vesztesége a doménfalak határán lévő kötésekben származik és $E_{fal} \sim 2JL^{d-1}$ -vel arányos. Ugyanakkor a zéró várható értékkel, h szórással rendelkező véletlen térnek egy domén méretein belüli fluktuációjából származó energia nyereség $E_{rf} \sim hL^{d/2}$ -vel arányos. Ezt a két mennyiséget összevetve

$$\frac{E_{fal}}{E_{rf}} \sim \frac{J}{h} L^{d/2-1} \quad (2.73)$$

megállapítható, hogy amennyiben L végtelenbe tart, kettőnél alacsonyabb dimenzió esetén, zérus hőmérsékleten is megszűnik a ferromágneses alapállapot.

Amennyiben a tiszta rendszer elsőrendű fázisátalakulással bír, a helyzet sokkal bonyolultabb. Ekkor nem létezik a fentiekhez hasonló relevancia kritérium. Bár kétdimenzióban megmutatható [2], hogy a rendezetlenséghez tartozó konjugált sűrűség a termodinamikai paraméterek folytonos függvényévé válik. Betöltési hígítás esetén a konjugált sűrűség az energia, míg véletlen tér jelenlétében ez a mennyiség a mágnesezettség.

3. fejezet

Monte Carlo módszer

3.1. Monte Carlo szimuláció alapelvei

Statisztikus fizikai rendszerek esetén a Monte Carlo eljárások szokásos célja, hogy valamely X fizikai mennyiség $\langle X \rangle$ várható értékét számolják ki [18]. Ferromágneses rendszereknél ez általában a rendparaméter, azaz az egy spinre eső mágnesezettség, továbbá a belső energia, valamint az ezekből származó egyéb termodinamikai mennyiségek.

Az adott mennyiség várható értékét a rendszer minden lehetséges μ állapotára vett átlagból kapjuk meg a (2.11) formula felhasználásával. Ez azonban csak kisméretű rendszerek esetén könnyen kivitelezhető. Nagyobb rendszereknél az átlagolást csak a lehetséges állapotok egy részére végezhetjük el, ami szükségképpen pontatlanná teszi a várható értéket.

A Monte Carlo szimulációk véletlenszerűen választják a lehetséges állapotok egy részét az általunk előírt p_μ valószínűségi eloszlással. Abban az esetben, ha mintául a $\mu_1, \dots, \mu_M$ állapotokat tekintettük a szimuláció során, akkor az X mennyiségre a következő becslést kapjuk:

$$X_M = \frac{\sum_{i=1}^M X_{\mu_i} p_{\mu_i}^{-1} e^{-\beta E_{\mu_i}}}{\sum_{i=1}^M p_{\mu_i}^{-1} e^{-\beta E_{\mu_i}}}. \quad (3.1)$$

Nyilvánvaló, ha növeljük a mintául vett állapotok M számát, akkor így egyre pontosabb becslést kapjuk az $\langle X \rangle$ várható értékének.

Mindazonáltal a p_μ valószínűségi eloszlás meghatározása fontos kérdés, hiszen ez lényegesen befolyásolja a (3.1)-ben szereplő szumma értékét. Amennyiben p_μ minden μ -re azonos, akkor a fenti becslés a következőkre redukálódik:

$$X_M = \frac{\sum_{i=1}^M X_{\mu_i} e^{-\beta E_{\mu_i}}}{\sum_{i=1}^M e^{-\beta E_{\mu_i}}}. \quad (3.2)$$

Ez a választás általában nem túl hatékony. Példának vegyük az Ising-modellt egy háromdimenziós rácson, amelynek a mérete $10 \times 10 \times 10$. Így a rendszer összes lehetséges állapotainak a száma $2^{1000} \sim 10^{300}$, azaz ennyi az összes lehetséges spin kiosztás az adott rácson. Ekkor egy gyors számítógépen futatott, 10^8 darab állapotot mintául vett numerikus számolás néhány óráig tart. A számunkra oly soknak tűnő minták száma viszont csak

azt jelenti, hogy minden 10^{298} állapotot vennénk bele a minták sorozatába. Ez arányait tekintve roppant kevés, és ha ezek az állapotok nem a rendszerre tipikus állapotai, akkor a fenti becslés igen gyenge közelítése az $\langle X \rangle$ várható értéknek.

A (3.2) képlet mégis jól helyettesíti az eredeti (2.11) formulát, hiszen a (2.11) szummájában csak nagyon kevés tag dominál, az összes többi elhanyagolható módon járul hozzá a végösszeghez. Ennek megértéséhez tekintsük az előző rendszert igen alacsony hőmérsékleten. Nyilvánvaló, hogy minél közelebb kerülünk a zérus hőmérséklethez, annál nagyobb szerepet tölt be a Hamilton-operátorban a kicserélődési energia, így majdnem minden spin ugyanabba az irányba fog mutatni. A várható értéket csak néhány száz, vagy még ennél is kevesebb tag határozza meg. Hiszen nincs elég energia a rendszerben, hogy átmenjen magasabb gerjesztett állapotokba. Ebből az adódik, hogy csak az alapállapotban, vagy a legalacsonyabb gerjesztett állapotok egyikében lehet.

Amennyiben tudjuk, hogy mely állapotok határozzák meg a (2.11) szummáját, és csak ezekből választjuk ki a mintáinkat, az összes többit figyelmen kívül hagyjuk, akkor a $\langle X \rangle$ várhatóértéknek egy igen jó közelítését kapjuk. Pontosan ez húzódik meg vezérelvként a Monte Carlo eljárások mögött. Magát azt a technikát, amikor a sok lehetséges állapot közül csak a leglényegesebbeket választjuk ki, fontossági mintavételezésnek (*importance sampling*) nevezzük [83].

3.1.1. Fontossági mintavételezés

Az a tartomány, amelyben egy átlagos rendszer energiája változik, egyensúly esetén nagyon kicsi a teljes energiájához képest. Ugyanezt mondhatjuk el a rendszer más fizikai mennyiségeiről. Ennek oka, hogy a rendszer a rendelkezésére álló összes lehetséges állapotot nem egyenlő valószínűséggel veszi fel, hanem az állapotok kiválasztása a Boltzmann eloszlással van összhangban. Amennyiben ezt az effektust beépítjük a szimulációnkba, akkor az energia és más fizikai mennyiségek egy szűk tartományban fognak változni, ezáltal pontosabbá válik várható értékük meghatározása.

Éppen ezért, amikor egy rendszerről mintákat veszünk valamely fizikai mennyiség várható értékének meghatározásához, akkor a becsléshez mintául vett M állapotot $p_\mu = \frac{e^{-\beta E_\mu}}{Z_N}$ valószínűségekkel kell megválasztanunk. Ezt behelyettesítve a (3.1) képletbe a várható értékre a következő formula adódik:

$$X_M = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M X_{\mu_i}. \quad (3.3)$$

Ezáltal a Boltzmann faktorok mind a számlálóból, mind a nevezőből eltűnnek. Ennek hatékonysága különösen akkor tükröződik, ha a rendszer idejének nagy részében csak kevés számú állapotban lehet, minthogy ezek pontosan azok az állapotok, amelyekből a legtöbbször akarjuk a mintákat vételezni.

Markov folyamatok

A legnehezebb része a Monte Carlo szimulációknak, hogy a Boltzmann eloszlással összhangban véletlenszerűen válasszuk ki az állapotok egy részét. Ha csak találomra tekinte-

nénk egy μ állapotot, és azt $e^{-\beta E_\mu}$ arányban vennénk be a minták sorozatába, akkor nem sokra mennénk, hiszen ez az arány exponenciálisan kicsi.

Maga a Markov folyamat egy mechanizmus, amely az adott rendszert egy μ állapotból véletlenszerűen átviszi egy ν állapotba. Így az állapotok egy sorozatát kapjuk, amelyben nem feltétlenül kell mindig ugyanannak az állapotnak szerepelnie.

Annak a valószínűségét, hogy a rendszer μ állapotban van és átmegy ν állapotba $P(\mu \rightarrow \nu)$ átmeneti valószínűségnek nevezzük. Egy folyamat akkor válik Markov folyamattá, ha eleget tesz a következő két feltételnek: egyrészt a $P(\mu \rightarrow \nu)$ átmeneti valószínűség nem függ az időtől, másrészt nincs hiszterézis, azaz annak a valószínűsége, hogy a rendszer μ állapotból átmegy ν állapotba nem függ attól, hogy korábban milyen állapotokban volt.

Az átmeneti valószínűségeknek szükségszerűen ki kell elégíteniük a következő egyenlőséget:

$$\sum_{\nu} P(\mu \rightarrow \nu) = 1, \quad (3.4)$$

ahol az összegzést az összes lehetséges állapotra végezzük. Meg kell jegyezni, hogy annak a valószínűsége, hogy a rendszer ugyanabban az állapotban maradt, mint amiben volt, nem feltétlenül nulla.

Markov láncnak nevezzük a Markov folyamat által generált állapotok sorozatát, ha a rendszer már elérte az egyensúlyt. Azaz a Markov lánc a Markov folyamat azon része, ahol az állapotok már Boltzmann eloszlásúak. Magát a Markov folyamatot úgy kell megválasztani, hogy a μ_0 kiindulási állapottól függetlenül elérje az egyensúlyt, és ezután Boltzmann eloszlású állapotokat generáljon. A Markov láncba lévő állapotok Boltzmann eloszlását két feltétellel biztosítjuk: az egyik az ergodicitás, a másik a részletes egyensúly.

Ergodicitás

Egy rendszer akkor ergodikus, ha bármely μ kiindulási állapotból tetszőleges ν végállapotba előbb vagy utóbb eljut a Markov folyamat segítségével. Ez a kritérium csak szükséges, de nem elegendő feltétele annak, hogy biztosítsuk Markov folyamatunkban a Boltzmann eloszlást. A Boltzmann eloszlásban ugyanis minden ν állapot nullától különböző p_ν valószínűséggel szerepel.

Az ergodicitás nem azt jelenti, ha a $P(\mu \rightarrow \nu)$ átmeneti valószínűség nulla, akkor μ állapotból ν állapotba való átmenet nem létezik. Valós rendszereknél a legtöbb μ, ν állapotpárra a $P(\mu \rightarrow \nu) = 0$, mégis van az állapotoknak egy olyan sorozata, amelyben a kezdő állapot a μ , a végállapot ν , és közben a megfelelő átmeneti valószínűségek nem nullák.

Részletes egyensúly

A részletes egyensúly azt biztosítja, hogy a rendszer egyensúlyi állapotának elérése után a Monte Carlo szimulációk a Boltzmann eloszlásnak megfelelően generálják az új állapotokat.

Egy rendszer akkor van egyensúlyban, ha minden állapotáról elmondható, hogy ugyanakkora arányban kerül bele, mint amekkora arányban elhagyja azt. Matematikailag ezt a következőképpen fogalmazhatjuk meg:

$$\sum_{\nu} p_{\mu} P(\mu \rightarrow \nu) = \sum_{\nu} p_{\nu} P(\nu \rightarrow \mu). \quad (3.5)$$

Az átmeneti valószínűségekre megfogalmazott (3.4) egyenlőséget figyelembe véve a fenti képlet a következőre egyszerűsödik:

$$p_{\mu} = \sum_{\nu} p_{\nu} P(\nu \rightarrow \mu). \quad (3.6)$$

Mindez azonban nem biztosítja, hogy tetszőleges állapotból indulva elérjük az egyensúlyt. Ezért a következő feltételt követeljük meg a Markov folyamatunkkal szemben:

$$p_{\mu} P(\mu \rightarrow \nu) = p_{\nu} P(\nu \rightarrow \mu), \quad (3.7)$$

és ezt nevezzük részletes egyensúlynak, *detailed balance*. Szemléletesen ez azt jelenti, hogy a rendszer átlagosan olyan sűrűn kerül μ állapotból a ν állapotba, mint amilyen gyakran a ν -ből átmegy a μ -be. Valós rendszerek mindig eleget tesznek a részletes egyensúly feltételének. Nyilvánvaló, ha átmeneti valószínűségek tetszőleges sorozata kielégíti a (3.7) egyenletet, akkor eleget tesz az egyensúlyt kifejező (3.6) egyenletnek is.

Mivel a Markov folyamatunkban megköveteljük, hogy az állapotok p_{μ} valószínűségi eloszlása kielégítse a részletes egyensúly feltételét, továbbá azt szeretnénk, hogy egyensúly elérése után ez az eloszlás a Boltzmann eloszlással legyen összhangban, így a (3.7) egyenletet átrendezve az átmeneti valószínűségekre a következő adódik:

$$\frac{P(\mu \rightarrow \nu)}{P(\nu \rightarrow \mu)} = \frac{p_{\nu}}{p_{\mu}} = e^{-\beta(E_{\nu} - E_{\mu})}. \quad (3.8)$$

A fenti formula, valamint a Markov folyamatokkal szemben támasztott (3.4) egyenletünk korlátozzák valamilyen mértékben az átmeneti valószínűségeket. Ha kielégítjük ezen feltételeket, és a rendszerünk ergodikus, akkor Markov folyamatunk egyensúlyi eloszlása már biztosan Boltzmann eloszlású lesz.

3.1.2. Elfogadási arány

Az általunk vizsgált probléma minnél hatékonyabb megoldása végett az átmeneti valószínűségeket további tényezők szorzatára szokás bontani.

$$P(\nu \rightarrow \mu) = g(\nu \rightarrow \mu) A(\nu \rightarrow \mu) \quad (3.9)$$

A $g(\nu \rightarrow \mu)$ tényezőt kiválasztási valószínűségnek nevezzük, és azt mutatja meg, ha a rendszer a μ állapotban van, akkor mennyi annak a valószínűsége, hogy az algoritmusunk a ν állapotot fogja generálni. Az $A(\mu \rightarrow \nu)$ tényező az elfogadási arány. Azt demonstrálja, hogy ha a μ állapotból indulva a ν állapotot állítottuk elő, akkor mekkora arányban fogadjuk azt el a következő állapotnak.

A részletes egyensúly feltételének átalakításával kapott (3.8) egyenlet a kiválasztási valószínűség és az elfogadási arány segítségével a következőképpen néz ki:

$$\frac{P(\nu \rightarrow \mu)}{P(\mu \rightarrow \nu)} = \frac{g(\nu \rightarrow \mu)A(\nu \rightarrow \mu)}{g(\mu \rightarrow \nu)A(\mu \rightarrow \nu)} = e^{-\beta(E_\nu - E_\mu)} \quad (3.10)$$

A fenti formulában vagy a kiválasztási valószínűségek vagy az elfogadási valószínűségek arányait szabadon választhatjuk nulla és végtelen között, a másikat csak hozzá kell igazítani.

Ha az elfogadási arány nagyon alacsony, akkor a szimulációnk során a rendszer nagyon sok ideig van ugyanabban az állapotban. Ez hatalmas idővesztést okozhat, sőt az is előfordulhat, hogy mintavételezés során a rendszer nem kerül ki egy adott állapotból. Ezáltal csak arról veszünk mintát, holott mi pont azt szeretnénk, ha az algoritmusunk gyorsan végigmenne az állapottéren, és minél több, különböző állapotot vehetnénk be a kívánt fizikai mennyiség várható értékének becslésébe.

A fenti problémát elkerülhetjük, ha az elfogadási arányokat minél közelebb választjuk egyhez. A legegyszerűbb módszer erre, ha csak az $\frac{A(\nu \rightarrow \mu)}{A(\mu \rightarrow \nu)}$ arányt rögzítjük bármely két állapot közötti átmenet esetén. Ezek után a számlálót és a nevezőt is ugyanazzal a számmal megszorozva elegendően nagy valószínűségi értékeket kaphatunk. Általában a nagyobb elfogadási valószínűséget egynek választják, a másikat pedig ehhez igazítják. Így továbbra is teljesülnek az előírt feltételek, és maga a szimuláció is elég hatékonyvá válik.

3.2. Algoritmusok

Mielőtt hozzákezdénénk a különböző algoritmusok részletes tárgyalásához, a Monte Carlo eljárás során végrehajtott mérés egyéb feltételeiről kell beszélnünk. Legelőször definiálni kell azt az N méretű rácsot, amelynek minden egyes pontját egy spin foglalja el. Ezt a programozás folyamán egy tömbbel lehet megvalósítani. Ising modell esetén a tömböt két fajta egész számmal töltjük fel, mely azt jelképezi, hogy az adott spin melyik irányba mutat.

Mivel N szükségképpen véges, ezért nekünk kell meghatározni, hogy mi történjen a határokon. Amennyiben minden egyes határon elhelyezkedő spin a rácson vele szemben lévő spinnel is kölcsönhatásban van, akkor periódikus határfeltételről beszélünk. Ez azt biztosítja, hogy geometriailag nincsenek kitüntetett spinek, mindegyiknek ugyanannyi szomszédja van. Ezáltal a rendszer teljesen transláció invariáns. Ha a széleken elhelyezkedő spineket nem kapcsoljuk össze, akkor szabad határfeltételről beszélünk.

Fontos dolog a spinek kezdeti értékének megadása. Bár tudjuk, hogy minden egyes kezdő állapotból előbb vagy utóbb eljutunk az egyensúlyi állapotba. A ferromágneses Ising-modell esetén alacsony hőmérsékleten érdekesebb az egyik alapállapotból indítanunk a szimulációt. Ugyanakkor magasabb hőmérsékleten végrehajtott vizsgálatok során hatékonyabb a rendszert úgy inicializálni, hogy a spinek véletlenszerűen mutatnak valamelyik irányba.

Ebben a részben elsősorban az Ising modellre fogalmazzuk meg állításainkat, de meg kell jegyeznünk, hogy az itt leírtak átvihetők más spin rendszerekre is [11].

Termikus egyensúly esetén a rendszer energiája egy szűk sávban ingadozik, azaz az egymást követő állapotok energetikailag alig különböznek egymástól. Az Ising modell esetén ennek a legegyszerűbb módja, ha az újonnan kiválasztott állapot csak egy megfordított spinben különbözik a régitől. Azokat az algoritmusokat, amelyek ezen az elven működnek, mint például a Metropolis algoritmus [80], egyszerű spin flip algoritmusoknak nevezzük.

A fázisátalakulás közelében a rendszerben a korrelációs hossz végtelenné válik, hatalmas klaszterek alakulnak ki. Ha ezen a hőmérsékleti tartományon egy spint szeretnénk átfordítani, akkor azt tapasztaljuk, hogy az többnyire egy klaszteren belül helyezkedik el, ezért a Metropolis algoritmusban az elfogadási arány roppant kicsivé válik amiatt, hogy az adott spin minden szomszédja vele megegyező irányba mutat. Annak sokkal nagyobb az esélye, hogy egy klaszter határán elhelyezkedő spint fordítunk át, hiszen ez kisebb energia ugrást okoz a rendszerben.

Egy egyszerű spin-flip algoritmus esetén az előbb vázolt okok miatt egy teljes klaszter átfordítása rengeteg időt vesz igénybe. Ebből adódik a kritikus jelenségek Monte Carlo módszerrel történő vizsgálata során tapasztalt kritikus lelassulás. Ahogy a kritikus pont-hoz közeledünk, a ξ végtelenbe tartása miatt egyre több spint kell átforgatnunk, hogy független mintákat kapjunk. Az ezt jellemző τ korrelációs idő a következőképpen divergál

$$\tau \sim \xi^z, \quad (3.11)$$

ahol a z dinamikai exponens értéke függ az adott algoritmustól, lásd 3.1 táblázat. Mivel egy szimuláció során mindig véges rendszereket vizsgálhatunk, ezért ξ a rendszer L lineáris méretével arányos. Vagyis a rendszer méretének növelésével megnő az a τ időintervallum, amelyen belül a Markov-láncban levő minták korreláltak.

A kritikus lelassulás okozta problémát a klaszter algoritmusok, mint például a Swendsen-Wang [106], a Wolff algoritmus [115] megjelenés tompította. Ezek során a kritikus pont környékén kialakult klaszterek egy részét nem spinenként, hanem egyszerre fordítják át.

dimenzió	Metropolis	Wolff	Swendsen-Wang
2	2.167 ± 0.001	0.25 ± 0.01	0.25 ± 0.01
3	2.02 ± 0.02	0.33 ± 0.01	0.54 ± 0.02
4	-	0.25 ± 0.01	0.86 ± 0.02

3.1. táblázat. Monte Carlo algoritmusok dinamikai exponensei különböző dimenziókban

3.2.1. Metropolis algoritmus

Az egyik legismertebb és legtöbb területen használt Monte Carlo szimuláció a Metropolis algoritmus [80]. Folyadékok modellezésére használták először, de spinrácsok, polimerek, rendezetlen rendszerek statisztikus fizikai tulajdonságainak meghatározására is alkalmasnak bizonyult.

A Metropolis algoritmus esetén egymás után fordíthatjuk át a spineket. A $g(\mu \rightarrow \nu)$ kiválasztási valószínűségeket azonos nagyságúnak választjuk, ha a két állapot csak egy spin elforgatásában különbözik egymástól, ellenkező esetben értékük zérus. Ha a modellünket egy N pontból álló rácson értelmezzük, akkor egy μ állapotról indulva egy spin átforgatásával csak N különböző állapotba juthatunk. Így a nullától különböző kiválasztási valószínűségek száma N , értékük:

$$g(\mu \rightarrow \nu) = \frac{1}{N}. \quad (3.12)$$

Ezen választás esetén a (3.10) valamelyest egyszerűsödik is.

$$\frac{P(\nu \rightarrow \mu)}{P(\mu \rightarrow \nu)} = \frac{g(\nu \rightarrow \mu)A(\nu \rightarrow \mu)}{g(\mu \rightarrow \nu)A(\mu \rightarrow \nu)} = \frac{A(\nu \rightarrow \mu)}{A(\mu \rightarrow \nu)} = e^{-\beta(E_\nu - E_\mu)} \quad (3.13)$$

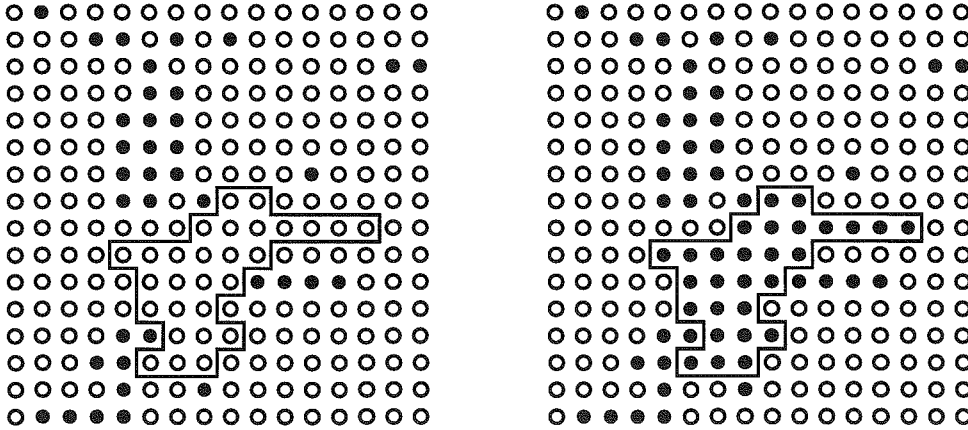
Ahogy korábban említettük az elfogadási valószínűségek leghatékonyabb megválasztása, ha a két elfogadási arány közül a nagyobbát egynek választjuk, a kisebbet pedig ehhez igazítjuk úgy, hogy arányuk kielégítse a részletes egyensúly feltételét. Az elfogadási arány Metropolis algoritmus esetén a következőképpen néz ki:

$$A(\mu \rightarrow \nu) = \begin{cases} e^{-\beta(E_\nu - E_\mu)} & \text{ha } E_\nu - E_\mu > 0 \\ 1 & \text{különben} \end{cases} \quad (3.14)$$

Szemléletesen ez azt jelenti, hogy minden olyan átmenetet elfogadunk, amely a rendszer energiáját csökkenti. Ellenkező esetben az elfogadás valószínűsége megegyezik a fentebb megemlített értékkel. Ezek után a Metropolis algoritmussal megvalósított Markov folyamat a következő lépések ismétléséből tevődik össze.

1. Kiválasztunk egy spint. Kiszámoljuk, hogy az adott spin átfordítása esetén mennyivel változna meg a rendszer energiája, legyen ez ΔE . Ezek után meghatározzuk a következő értéket: $r = e^{-\beta \Delta E}$
2. Generálunk egy z véletlen számot, és ezt összehasonlítjuk r -rel.
3. Ha $r > z$, akkor az adott spint átfordítjuk.
4. A rendszernek az így kapott új állapotát alapul véve kiszámoljuk a kívánt termodinamikai mennyiséget, és feljegyezzük annak értékét.

A spin kiválasztása történhet akár véletlenszerűen akár egy előre meghatározott szisztéma alapján. Meg kell jegyeznünk, hogy az energiakülönbség kiszámolásánál nem célszerű minden egyes lépésben külön-külön kiszámolni a rendszer energiáját. Hiszen a kezdeti és a végállapot csak egy átforgatott spinben különbözik egymástól. Így elegendő azt vizsgálni, hogy az egyes spinek milyen szomszédokkal rendelkeznek. Ugyanis a Hamilton operátorban a kölcsönhatási energia csak a legközelebbi szomszédokra vonatkozik, emiatt a vizsgált spintől távol levő spinek által behozott tagok mind a kezdeti, mind a végállapotban azonosak, ezért az energiakülönbség meghatározásánál kiesnek. Metropolis algoritmus esetén



3.1. ábra. Egy klaszter átfordítása a kétdimenziós Ising modellben. Az üres karikák a felfelé, a teli karikák a lefelé mutató spineket szimbolizálják [83].

egy Monte Carlo lépésnek azt az esetet tekintjük, amikor az összes spinnek adtunk esélyt az átfordulásra.

A rendszer temodinamikai egyensúlyának elérése után érdemes csak mintákat venni. Azonban itt is figyelni kell arra, hogy ezek az állapotok függetlenek legyenek egymástól. A Markov láncunkból kivett minták átlagából kapjuk meg a kívánt fizikai mennyiség várható értékét.

3.2.2. Wolff algoritmus

A Wolff [115] algoritmus egy klaszter algoritmus, mely egy Monte Carlo lépés keretein belül egy klaszterbe tartozó spineket fordít át. Ezáltal csökken az egyszerű spin-flip algoritmusok esetén a kritikus pontban tapasztalt kritikus lelassulás.

A rendszer egy adott állapotán belül viszonylag könnyen találhatunk klasztereket. Hiszen kiválasztunk egy kezdő spint, megnézzük a szomszédját, ha az vele azonos irányba mutat, akkor ugyanazon klaszteren belül helyezkednek el. Majd megvizsgáljuk annak a spinnek a szomszédját, és így tovább. Le kell szögeznünk, hogy a Wolff algoritmus nem akarjuk az összes, a kezdő spinnel azonos irányba mutató spint átfordítani. Azt szeretnénk, hogy az átfordítandó klaszterek mérete a hőmérséklet csökkenésével növekedne, mivel ez van összhangban az Ising modellel.

Tekintsük a rendszer két állapotát μ -t és ν -t, melyek csak egy azonos irányba mutató spinekből álló klaszter átfordításában különbözzenek egymástól, (3.1 ábra). Mindkét állapotban előfordulhat, hogy néhány spin a klaszter külső határán a klaszter spinjeivel azonos irányba mutat. Ha átfordítjuk a klasztert, akkor ezen spinek és a klaszter spinjei közötti kötések megszűnnek. Nyilvánvaló, hogy a klaszter határain lévő kötések vagy μ -ból ν -be való átmenetkor, vagy a klaszter visszafordítása esetén szűnnek meg.

Tegyük fel, hogy μ -ból ν -be való átmenetkor a klaszter átfordításával m kötés bomlik fel. Ez azt jelenti, hogy a klaszter kiválasztása során m darab olyan spint nem vettünk hozzá a klaszterhez, amelyek a klaszter spinjeivel azonos irányúak. Annak a valószínűsége, hogy egy spint nem adunk hozzá az átfordítandó klaszterhez, éppen $1 - P_{add}$. Vagyis a

$g(\mu \rightarrow \nu)$ kiválasztási valószínűség arányos $(1 - P_{add})^m$ -mel. Tegyük fel, hogy a klaszter visszafordításával n darab kötés szűnik meg. A fentebb elmondott érvek értelmében ekkor a $g(\nu \rightarrow \mu)$ kiválasztási valószínűség $(1 - P_{add})^n$ -nel arányos. Ezek alapján a részletes egyensúlyra megfogalmazott (3.10) egyenlet a következőképpen néz ki:

$$\frac{g(\mu \rightarrow \nu)A(\mu \rightarrow \nu)}{g(\nu \rightarrow \mu)A(\nu \rightarrow \mu)} = (1 - P_{add})^{m-n} \frac{A(\mu \rightarrow \nu)}{A(\nu \rightarrow \mu)} = e^{-\beta(E_\nu - E_\mu)}, \quad (3.15)$$

ahol $A(\mu \rightarrow \nu)$ és $A(\nu \rightarrow \mu)$ a két átfordítás elfogadási valószínűsége. A két állapot közötti energiakülönbség szintén csak a klaszter határán lévő spinektől függ. Azok a kötések, amik a μ -ból ν -be való átmenetkor szűnnek meg $+2J$, amelyek ekkor keletkeznek $-2J$ energiaváltozást okoznak:

$$E_\nu - E_\mu = 2J(m - n) \quad (3.16)$$

Ezt figyelembe véve, és az előző formulát átrendezve a következő feltétel adódik:

$$\frac{A(\mu \rightarrow \nu)}{A(\nu \rightarrow \mu)} = [e^{2\beta J}(1 - P_{add})]^{n-m}. \quad (3.17)$$

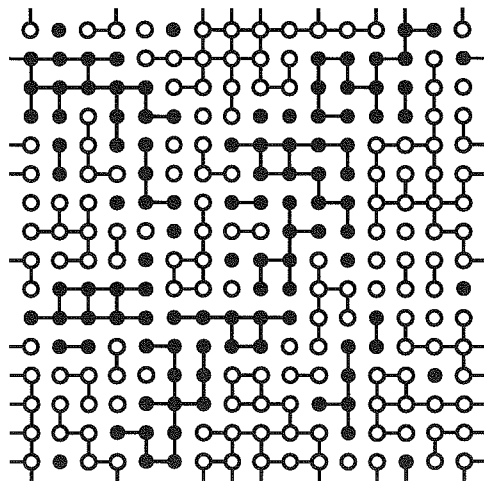
Ha most P_{add} hozzáadási valószínűséget a következőképpen választjuk:

$$P_{add} = 1 - e^{-2\beta J}, \quad (3.18)$$

akkor az előző egyenlet jobb oldala mindig 1, függetlenül a μ, ν állapotoktól, a hőmérséklettől, vagy bármilyen mástól. Így választhatjuk mindkét irányú átmenetre az elfogadási valószínűséget egynek, amely azt jelenti, hogy minden lépést elfogadunk. Az Ising modellre alkalmazott Wolff-algoritmus a következő lépések ismétléséből áll:

1. Válasszunk ki a rácson egy kezdeti spint.
2. Vizsgáljuk meg sorra ennek a spinnek a szomszédjait. Ha ugyanabba az irányba mutatnak, akkor $P_{add} = 1 - e^{-2\beta J}$ valószínűséggel adjuk őket a klaszterhez.
3. Vizsgáljuk meg az előző lépésben a klaszterhez adott spinek szomszédjait, ha ugyanabba az irányba mutatnak, akkor ugyanazzal a P_{add} valószínűséggel adjuk őket a klaszterhez. Ezt a lépést addig ismételjük, amíg nem marad olyan spin a klaszterben, amelynek a szomszédjait nem vizsgáltuk meg.
4. Fordítsuk át a klaszteren belül kiválasztott spineket.

Érdeemes észrevennünk, hogy P_{add} növekszik a hőmérséklet csökkenésével. Így a Wolff algoritmussal magas hőmérsékleten a kiválasztott klaszterek csak egy-két spinből állnak. Alacsony hőmérsékleten, mivel a rendszerben a spinek többnyire azonos irányba mutatnak, és a hozzáadási valószínűség viszonylag magas, ezért egy lépésen belül majdnem minden spin átfordul. Ezekben az esetekben a többi algoritmussal hasonló hatékonyságú. Az igazi jelentősége viszont a kritikus pont körül mutatkozik, amikor sokkal gyorsabb az egyszerű spin flip algoritmusoknál. Wolff algoritmus esetén egy Monte Carlo lépés alatt egyetlen klaszter átfordítását értjük.



3.2. ábra. A teljes spinmezőn klaszterek kialakítása [11].

3.2.3. Swendsen-Wang algoritmus

A Metropolis és a Wolff algoritmusok után talán a legjelentősebb a Swendsen és Wang [106] által 1987-ben megalkotott algoritmus. Ez is egy klaszter algoritmus, mely hamarabb jelent meg mint a Wolff algoritmus. Valójában Wolff az algoritmusában szereplő ötletet innen merítette.

A Swendsen-Wang algoritmus során általában több klasztert fordítunk át egyidejűleg. Egy adott spinkonfigurációból kiindulva először az azonos irányba mutató, szomszédos spinek között alakítunk ki kapcsolatokat. Ez teljesen hasonló a módon működik, mint ahogy a Wolff algoritmus esetén egy klaszter kialakítását elvégeztük. Azaz itt is ugyanazzal a $P_{add} = 1 - e^{-2\beta J}$ hozzáadási valószínűséggel teremtünk kapcsolatot a szomszédos, azonos irányba álló spinek között. Az egész a perkolációhoz hasonlít. Miután a teljes spinmezőt ily módon felosztottuk, végigmegyünk az összes kialakított klaszteren és $\frac{1}{2}$ valószínűséggel átfordítjuk őket. Swendsen-Wang algoritmusnál egy Monte carlo lépésnek tekintjük, ha minden klaszternek adtunk esélyt az átfordulásra.

A Wolff algoritmus során mindig teljesül a részletes egyensúly feltétele, hiszen ahhoz igazítottuk az elfogadási arányt és a P_{add} hozzáadási valószínűséget. Ugyanez mondható el a Swendsen-Wang algoritmusról is, ugyanis azáltal, hogy minden klasztert $\frac{1}{2}$ arányba fordítunk át, a (3.17) egyenlet bal oldalán továbbra is egy szerepel. Az ergodicitás is megvalósul mindkét algoritmus esetén, mert minden lépésen belül van annak esélye, hogy egy spint hozzávegyünk egy adott klaszterhez, majd átfordítsuk. Így alkalmas sorozatot választva, véges lépésen belül eljuthatunk bármely állapotból egy tetszőleges másik állapotba.

A két algoritmus között a nagy különbséget a dinamikai exponens jelenti, mely alapján magasabb dimenziókban a Wolff algoritmus használata preferált. Mindazonáltal meg kell jegyeznünk, hogy kétdimenzióban bármely jellegű külső tér esetén a Swendsen-Wang algoritmus hatékonyabb. Ekkor a külső mágneses térrel való kölcsönhatásból származó ΔE_k energiaváltozást mindkét metódusnál az elfogadási arányokba lehet beépíteni a Metropo-

lis algoritmusnál látottak szerint. Mivel itt egy exponenciális tag szerepel, ezért nagyon lecsökken annak az esélye, hogy egy klasztert átfordítsunk. Emiatt a Wolff algoritmus több lépésen keresztül lehet ugyanabban az állapotban. Ugyanakkor a Swendsen-Wang algoritmussal egy lépés keretein belül egyszerre több klaszter is átfordulhat, ami által megnő a valószínűsége, hogy új spinkonfiguráció alakul ki.

4. fejezet

Ising modell véletlen felületi tér jelenlétében

4.1. Bevezetés

A véletlen felületi tér okozta inhomogenitás relevanciáját a 2.3.3 részben leírt Harris kritérium [53] segítségével lehet elemezni. A $d-1$ dimenziós hipersíkon jelenlévő perturbáció irreleváns voltát ez esetben a tiszta rendszerhez tartozó rendparaméter korrelációs függvényének a felülettel párhuzamos $\eta_{\parallel}$ kritikus exponensével lehet kifejezni [37]. A véletlen tér irreleváns amennyiben

$$\eta_{\parallel} \geq 1. \quad (4.1)$$

Számos esetben, mint például a kétdimenziós Ising modell, ahol $\eta = 1/4$, a rendszer belsejében elhelyezkedő véletlen tér releváns perturbációt okoz. Ennek következtében új fixpont jelenik meg, amely a rendszer kritikus viselkedését kontrollálja. Az várható, hogy ez az új fixpont felületi jellegű, hiszen a véletlen tér szétrombolja a lokális rendet, és ezáltal a rendszer belsejében végrehajtott effektív vágást eredményez.

A felületen elhelyezkedő véletlen tér irreleváns a háromdimenziós Ising modell esetén. Ezt Monte Carlo szimulációk segítségével végrehajtott vizsgálatokkal erősítették meg [81]. Különös a helyzet a folytonos szimmetriával rendelkező modelleknél, melyre jó példát szolgáltat a háromdimenziós Heisenberg modell. Itt a véletlen felületi tér Imry és Ma érveit figyelembe véve [61] megszünteti a rendszer belsejében meglevő hosszú távú rendet [45]. Ugyanakkor a perturbáció a (4.1) alapján irreleváns a felületi fázisátalakulás során.

A kétdimenziós Ising modellnél a korrelációs függvénynek a felülettel párhuzamos lecsengési exponense eggyel egyezik meg, $\eta_{\parallel} = 1$, [78]. Ez esetben térelméleti vizsgálódások [27, 59] azt jósolják, hogy a véletlen felületi tér marginálisan irreleváns perturbációt eredményez. Ennek következménye, hogy a felület fázisátalakulását leíró kritikus exponenseket a tiszta rendszerhez tartozó, logaritmikus korrekciókat tartalmazó kritikus exponensek szolgáltatják.

Ezen elméleti jóslat numerikus számolásokkal történő ellenőrzését tűztük ki célul ebben a fejezetben. Mindazonáltal meg kell jegyeznünk, hogy logaritmikus korrekciók vizsgálata igen nehéz feladat. Mint ahogy azt a hígított kétdimenziós Ising ferromágnes példája is mutatja, ahol a szingularitás pontos alakja sokáig vitatott volt [41, 99, 109, 69, 87, 97].

4.2. A modell

Az általunk vizsgált kétdimenziós Ising modell egy $L \times M$ négyzetrácson van értelmezve. A rendszer Hamilton operátora a következő:

$$\mathcal{H} = -J \sum_{i=1}^{L-1} \sum_{j=1}^M (\sigma_{i,j} \sigma_{i+1,j} + \sigma_{i,j} \sigma_{i,j+1}) - \sum_{j=1}^M (h_1(j) \sigma_{1,j} + h_L(j) \sigma_{L,j}). \quad (4.2)$$

ahol $\sigma_{i,j} = \pm 1$ az Ising spineket, J az első szomszédokra vonatkozó kicserélődési energiát jelöli. A véletlen tér a felületen, vagyis az első, $i=1$, és az utolsó, $i=L$, oszlopban elhelyezkedő spinekkel áll kölcsönhatásban, h_s várható értékkel és h szórással rendelkezik.

$$h_i(j) = \begin{cases} h_s + h & 1/2 \text{ valószínűséggel} \\ h_s - h & 1/2 \text{ valószínűséggel} \end{cases} \quad (4.3)$$

Periodikus határfeltételt alkalmaztunk a függőleges irányban, azaz $\sigma_{i,M+1} = \sigma_{i,1}$. A szimulációk során az egy oszlopra eső m_i átlagmágnesezettséget tekintettük.

A felülethez tartozó mágnesezettség értéke, $m_s = m_1 = m_L$, tiszta rendszer esetén, azaz $h_s = h = 0$, pontosan ismert [78]. Ez termodinamikai határesetben ($L, M \rightarrow \infty$) az alábbi módon változik:

$$m_{s,tiszta} = \left[\coth(2K) \frac{\sinh(2K) - 1}{\cosh(2K) - 1} \right]^{1/2}, \quad (4.4)$$

ahol $K = J/k_B T$, T a hőmérséklet. A kritikus pont K segítségével is kifejezhető, $\sinh(2K_c) = 1$. Itt a felületi mágnesezettség a következőképpen tűnik el:

$$m_{s,tiszta} \approx m_0 t^{1/2}, \quad (4.5)$$

ahol t a (2.16) egyenletben megfogalmazott redukált hőmérséklet, továbbá $m_0^2 = 4(\sqrt{2} + 1)K_c \ln(2K_c)$. Ahogy korábban már említettük, a kritikus tartományban az egyetlen releváns hosszúság a tömbi korrelációs hossz. Ennek pontos alakja is kifejezhető K segítségével [12], amennyiben $t > 0$,

$$\xi = [2 \ln(\sinh(2K))]^{-1}. \quad (4.6)$$

A korrelációs hossz a kritikus pontban a végtelenbe tart. Ezt a divergenciát a redukált hőmérséklet segítségével jellemezve kapjuk, hogy $\xi \approx [2\sqrt{2}K_c t]^{-1}$. Ebből leolvasható a korrelációs hossz és a redukált hőmérséklet között fennálló reláció:

$$-\ln t \simeq .913 + \ln \xi. \quad (4.7)$$

Véletlen felületi tér jelenlétében azonban nincs egzakt eredmény. Ez esetben a replika trükköt szokták alkalmazni. Ekkor n darab félsíkon értelmezett Ising modellt tekintenek, ahol a különböző felületeken elhelyezkedő spinek között első szomszéd kölcsönhatás van. A határokon a csatolások Gauss eloszlást követnek, és erősségük arányos h^2 -tel. Az egymással ekvivalens félvégtelen modellek esetén a particiók függvények átlagát kell vizsgálni.

Ugyanis a $\langle \ln \mathcal{Z} \rangle = \lim_{n \rightarrow 0} \frac{\langle \mathcal{Z}^n \rangle - 1}{n}$ azonosság miatt a véletlen felületi térrel rendelkező modell szabad energiáját az $n \rightarrow 0$ határesetben kapjuk vissza [59].

A rendszer felületi viselkedését két különböző eljárás keretein belül vizsgálták. Mindkét módszer a renormálási csoporton alapszik. A rendszerben lévő hosszúságokat a $b = e^l$ faktorial skálázzák újra. A renormálás során az n darab félsík között meglévő felületi kötések az alábbi módon változnak:

$$h^2(l) = \frac{h^2}{1 + \kappa h^2 l} . \quad (4.8)$$

Az első megközelítés során [59] a véletlen tér homogén részét zérusnak tekintették, $h_s = 0$. Magában a kritikus pontban a (2.58)-ben lévő konform leképezést hajtottak végre, amelynek hatására az n félsíkot n darab végtelen hosszúságú, L szélességű csíkba transzformálták. A csíkok mindkét felületükön h^2 -tel arányos kötésekkel kapcsolódtak. A korrelációs hossz inverzének viselkedését vizsgálták a csíkokon. Az $e^l = L$ faktorial újraszkalázva, $n = 0$ esetben, a gap exponens relációt használva [25], a korrelációs hossz $\eta_{||}$ lecsengési exponensére egy L -t logaritmikus korrekcióként tartalmazó kifejezés adódik

$$\eta_{||} = 1 + \frac{1}{\ln L} . \quad (4.9)$$

A másik megközelítés [27] a felületi tér homogén részének viselkedését vizsgálta. Ez az újraszkalázás során az alábbi módon változik

$$h_s(l) = \frac{h_s e^{l/2}}{(1 + \kappa h^2 l)^{1/2}} . \quad (4.10)$$

Mindeközben a felülethez tartozó szabadenergia sűrűség a (2.55) egyenlet értelmében a következők szerint transzformálódik:

$$f_s(t, h_s, h^2) = e^{-l} f_s[e^{l/\nu} t, h_s(l), h^2(l)] , \quad (4.11)$$

ahol ν a korrelációs hossz exponense. Innen a (4.10)-t kihasználva a felületi mágnesezettségre azt kapjuk, hogy

$$m_s(t, h^2) = \left. \frac{\partial f_s}{\partial h_s} \right|_{h_s=0} = \frac{e^{-l/2}}{(1 + \kappa h^2 l)^{1/2}} m_s[e^{l/\nu} t, h^2(l)] . \quad (4.12)$$

Az újraszkalázás faktorának a korrelációs hosszt választva, $e^l = \xi \sim t^{-\nu}$, ahol a (4.6) alapján $\nu = 1$, továbbá a magasabb rendű korrekciókat elhanyagolva

$$m_s(t, h^2) \sim \frac{t^{1/2}}{(1 - \kappa_1 h^2 \ln t)^{1/2}} , \quad 0 < t \ll 1 . \quad (4.13)$$

Vagyis a véletlen felületi tér jelenlétében a felületi mágnesezettség kritikus viselkedése a tiszta rendszer kritikus viselkedéséből logaritmikus korrekció figyelembe vételével adódik.

Mivel a szimulációnk során csupán diszkrét hőmérsékleteken hajthatunk végre méréseket, ezért bevezetjük a hőmérséklettől függő effektív exponenst

$$\beta_s(t) = \frac{\ln[m_s(t(1+\delta))/m_s(t(1-\delta))]}{\ln[(1+\delta)/(1-\delta)]}. \quad (4.14)$$

Amennyiben $\delta \rightarrow 0$, a (4.14) tartalmazza a (4.13) megfogalmazott logaritmikus korrekciót.

$$\beta_s = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{1}{|\ln t|} + \dots \right). \quad (4.15)$$

Figyelembe véve a kritikus exponensek között meglévő azonosságot, vagyis $\eta_{\parallel} = 2\beta_s/\nu$, azt kapjuk, hogy a (4.15)-ban és a (4.9)-ban szereplő effektív exponensek összhangban vannak. Hiszen a két rendszerben meglévő releváns hosszúság között a $L \rightarrow \xi \sim t^{-1}$ reláció áll fent.

4.3. Effektív exponensek

A felülethez tartozó effektív exponenseket az egy oszlopra eső átlagmágnesezettség hőmérsékletfüggéséből határoztuk meg [89]. A véletlen felületi tér két részből tevődött össze. A homogén részét a szimulációk során mindig zérusnak választottuk, $h_s = 0$. Ugyanakkor a véletlen tér erősségét $h = 0.6$ és $h = 1.5$ között változtattuk. Különböző értékek mellett hajtottunk végre mérési sorozatokat pozitív redukált hőmérsékleteken, $t > 0$.

Olyan négyzetrácson értelmezve a modellt ahol a rendszer vízszintes kiterjedése nagyobb a függőleges kiterjedésével szemben, $M < L$, elkerülhetjük a véges méretből adódó mérési hibákat. Ekkor azonban a felületi spinek aránya sokkal kisebb, amiből következik, hogy lényegesen több futtatásra van szükség. Ezért mindvégig olyan négyzetrácson értelmezett modellt tekintettünk, ahol a rendszer függőleges és vízszintes kiterjedése egybeesett, $M = L$. A mérés során az L lineáris mérete 50 és 1000 között változott.

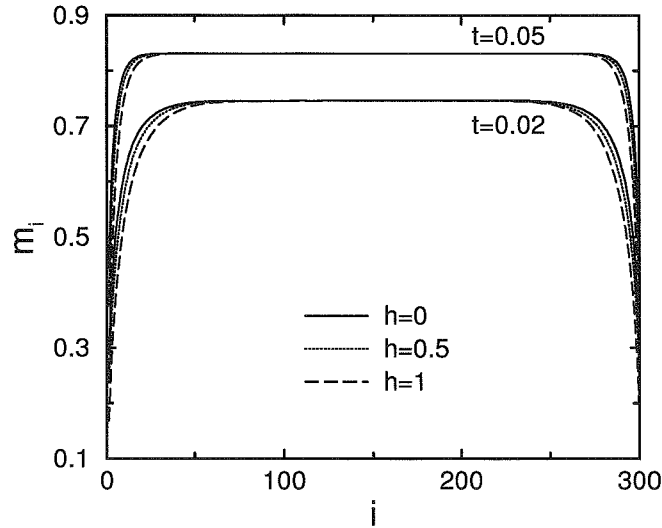
A szimulációk során Metropolis algoritmust használtunk, lásd 3.2.1 szakasz. Rögzített hőmérséklet mellett a véletlen felületi tér egy adott s mintájára, az egyensúlyi állapot elérése után, több mint $\tau = 10^4$ Monte Carlo lépésre végeztünk termikus átlagolást

$$\langle m_i^{(s)} \rangle = \frac{1}{\tau} \sum_{k=1}^{\tau} m_i^{(s)}(k), \quad m_i^{(s)}(k) = \frac{1}{M} \left| \sum_{j=1}^M \sigma_{i,j}^{(s)}(k) \right|, \quad (4.16)$$

ahol $\sigma_{i,j}^{(s)}(k)$ az s minta esetén az (i, j) rácsponton elhelyezkedő spin értékét jelöli a k -adik lépésben. Az oszlopokhoz tartozó m_i átlagmágnesezettség értékét a véletlen tér legalább $n_s = 1000$ realizációjához tartozó $\langle m_i^{(s)} \rangle$ termikus átlagok átlagolásából határoztuk meg

$$m_i = \frac{1}{n_s} \sum_{s=1}^{n_s} \langle m_i^{(s)} \rangle. \quad (4.17)$$

A mérés során a rendszer mindkét végére a véletlen tér ugyanazon realizációja került. Ezek után a felülethez tartozó effektív exponensek az $i = 1$, illetve az $i = L$ oszlopra eső átlagmágnesezettség hőmérsékletfüggéséből kapjuk a (4.14) formula felhasználásával.



4.1. ábra. A véletlen felületi tér különböző erősségeihez tartozó mágnesezettségi profilok $t = 0.05$ és $t = 0.02$ redukált hőmérséklet esetén. Az adatok 300×300 rendszerből származnak.

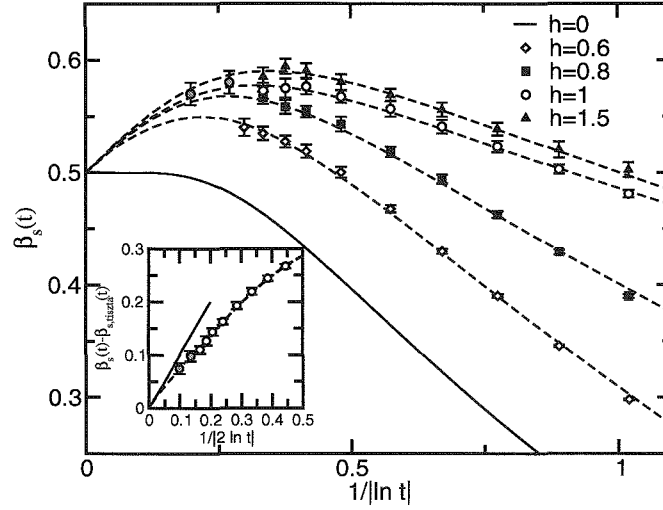
A 4.1 ábrán a rendszer mágnesezettségi profilja látható $t = 0.05$ és $t = 0.02$ esetén. A véletlen tér különböző erőssége mellett feltüntettük a tiszta rendszerhez, $h_s = h = 0$, tartozó profilt is. Elég nagy rendszerméret esetén az adott t redukált hőmérsékleten, h értékétől függetlenül, $i = L/2$ körül egy széles plató alakul ki. Itt a mágnesezettség értéke megegyezik a tiszta rendszernek a termodinamikai határesetben meghatározható m_b tömbi mágnesezettség értékével. A felület felé közeledve, $i, L - i < \xi$ elérünk a felületi régióba, ahol a mágnesezettség értéke az m_b értékről hirtelen csökkenve felveszi a felületi mágnesezettség m_s értékét. Jól látható az ábrán, hogy a véletlen tér h erősségének növelésével csökken m_s értéke, és nő a felületi régió kiterjedése.

A kritikus pont közelében nagy rendszerek esetén, a felületi mágnesezettség az alábbiak szerint viselkedik a véges méret skálázás értelmében:

$$m_s(t) \sim t^{\beta_s} f(\xi/L), \quad (4.18)$$

ahol az $f(x)$ skálafüggvény kis x mellett konstans értéket vesz fel. Az általunk végzett szimulációk során csak olyan hőmérsékleti tartományban végeztünk méréseket, ahol a véges méretből adódó hibákat ki tudtuk kerülni. Ekkor az effektív felületi exponenst a (4.14) formula felhasználásával határozhatjuk meg.

A véges méret okozta hibák elkerülése érdekében egy adott hőmérsékleten egyszerre két rendszerméretre vonatkozóan is méréseket végeztünk, majd az így kapott adatokat összehasonlítottuk. Ezek a kritikus ponttól távol mindaddig megegyeztek, amíg a korrelációs hossz kisebb volt a kisebbik rendszerméretnél. A kritikus ponthoz közeledve azonban a ξ korrelációs hossz növekszik, és valamelyik t hőmérsékleten a kisebbik rendszer L lineáris kiterjedésével összemérhetővé válik. Ebből következik, hogy a fázisátalakulási ponthoz



4.2. ábra. Az effektív felületi exponensek a véletlen felületi tér különböző erősségei mellett. A szaggatott vonalak a (4.19) szereplő formula illesztéséből származó adatok, míg az egyenes vonal a tiszta rendszer effektív exponensének hőmérsékletfüggését jelöli. A $h = 1$ esetben az első két pontot a 4.4 részben leírtak alapján kaptuk meg. A belső ábrán a tiszta és a véletlen felületi térhez tartozó effektív exponensek különbsége látható $h = 1$ esetén, az egyenes vonal az elméleti úton meghatározott vezető logaritmikus korrekciót mutatja.

közeledve a véges méretből származó hibák hatására az effektív exponens hirtelen elkezdene csökkenni [90]. Ezért a kisebbik rendszerre vonatkozóan abbahagyjuk a mérést, és az előzőeknél nagyobb rendszerméretet kezdünk el vizsgálni. Ezt mindaddig folytatjuk, míg a két különböző rendszerméret esetén azonos effektív exponensekhez jutunk. Bár úgy tűnik, hogy ezen eljárás hosszadalmas, mégis megéri a fáradozást, hisz a mérés végére biztosak lehetünk, hogy az adataink nem tartalmazzák a véges méretből adódó hibákat.

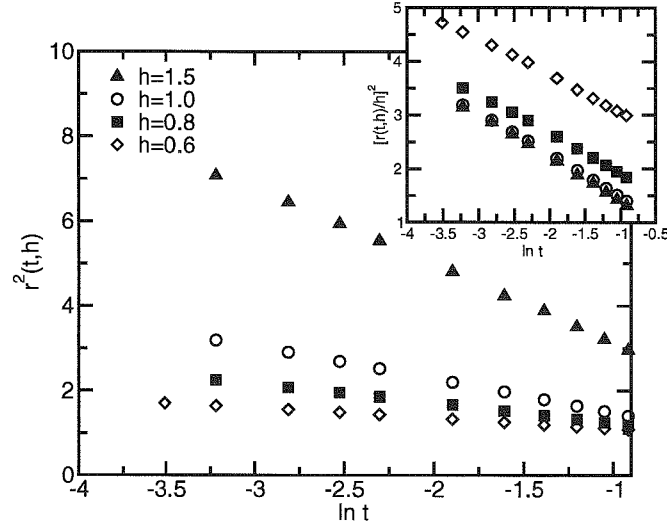
A véletlen tér különböző erősségei mellett a 4.2 ábrán tüntettük fel az általunk mért effektív felületi exponenseket. Hogy a (4.9) és a (4.13) kifejezésekben megfogalmazott logaritmikus korrekciót ellenőrizzük, a β_s értékeit $1/|\ln(t)|$ függvényében ábrázoltuk. Mivel az várható egy adott redukált hőmérsékleten nagyobb h hatására az effektív exponens növekszik, hiszen az erősebb véletlen tér sokkal jobban csökkenti a lokális rendet.

Adott h esetén $\beta_s(t)$ először monoton növekszik a redukált hőmérséklet csökkenésével. Egy bizonyos ponton túlhalad a tiszta rendszer felületi exponensének $1/2$ értékénél, majd eléri maximumát. Ez a telítődés a legerősebb véletlen felületi tér esetén jól látható. Ezek után az várható, hogy a redukált hőmérséklet további csökkenésével az effektív exponens is monoton csökkenni kezd, mígnem a kritikus pontban, $t = 0$, felveszi az $1/2$ értéket. Sajnos a méretből adódó korlátok miatt ezen hőmérsékleti tartományban nem tudtunk méréseket végezni.

Az elméleti jóslatok és numerikus adatok összehasonlítása, valamint mért adatainknak

4.3. EFFEKTÍV EXPONENSEK

47



4.3. ábra. A tiszta rendszer és a véletlen térrel rendelkező modell felületi mágnesezettségeinek (4.20) egyenletben megfogalmazott $r(t, h)$ hányadosának négyzete $\ln(t)$ függvényében. A meredekségek h^2 -tel arányosak, ami a belsőábrán látható

a $t \rightarrow 0$ való extrapolálása végett a következő illesztést használtuk:

$$m_s(t) = m_0 t^{1/2} \frac{1 + a t}{(1 + b \ln t)^{1/2}}. \quad (4.19)$$

A fenti formula egyaránt tartalmazza a (4.4)-ben szereplő analitikus korrekciót és a fix-pont szingularitásához tartozó, (4.13) megfogalmazott logaritmikus korrekciót. Fontos megjegyezni, hogy a két korrekció különböző előjelű, melynek köszönhetően együttesen azt eredményezik, hogy a β_s effektív felületi exponens hőmérséklettől való függése nem monoton.

A véletlen tér adott erőssége esetén a mért felületi mágnesezettségekre illesztettük a (4.19) formulát, ahol a és b szabad paraméterek voltak. Az így kapott görbékből a (4.14) képletet felhasználva kaptuk meg a hőmérséklet függő effektív felületi exponenseket, $\beta_s(t)$. Ezek a (4.2) ábrán szaggatott vonallal vannak feltüntetve. Jól látható, hogy az illesztésből származó adatok egy túllövési effektus után a tiszta rendszerhez tartozó felületi exponens értékéhez extrapolálnak, $\beta_{s,tiszta} = 1/2$. Teljesen hasonló a helyzet, mint a kétdimenziós véletlen kötésű Ising modell tömbi mágnesezettségi exponensének vizsgálatánál [109]. A mi mérésünkben $h \geq 1$ esetén azonban eljutottunk a maximum értékhez, ami a véletlen kötésű modellnél nem történt meg.

A vezető logaritmikus korrekció ellenőrzése végett az alábbi elemzést hajtottuk végre. Először meghatároztuk $\beta_{s,tiszta}(t)$ -t, a tiszta rendszer felületi exponensének hőmérséklet függését. Ehhez a (4.14) formulát használtuk, ahol a felületi mágnesezettség értékei a (4.4) képlet felhasználásával adódtak. Majd a mérési adatokból, illetve az illesztésből származó effektív exponensek és $\beta_{s,tiszta}(t)$ különbségét tekintettük. Mivel ez már nem tartalmaz analitikus korrekciókat, ezért azt várjuk, hogy a (4.15)-ben megfogalmazott

logaritmus korrekció kimutatható. A $\beta_s(t) - \beta_{s,tiszta}(t)$ különbséget így $1/2|\ln(t)|$ függvényében ábrázoltuk. A $h = 1$ esetben a 4.2 ábra a belsejében vannak feltüntetve az adatok. Jól látható, hogy a korrekciók összhangban állnak az elmélettel, noha sokkal kisebb hőmérsékleten kellene mérést végezni ahhoz, hogy az aszimptotikus tartományt elérjük.

A logaritmus korrekciók vizsgálatát egy másik analízis segítségével is elvégeztük. A tiszta rendszer és a véletlen térrel rendelkező modell felületi mágnesezettségének hányadosát tekintettük

$$r(t, h) = \frac{m_{s,tiszta}}{m_s} \sim (1 + b \ln t)^{1/2}, \quad (4.20)$$

ahol $m_{s,tiszta}$ a (4.4) formulából adódik, m_s pedig a mért adatok. Ily módon a vezetõanalitikus korrekciót elimináljuk. A (4.3) ábrán látható, hogy $r(t, h)$ négyzete aszimptotikusan lineáris függést mutat $\ln t$ -től. A görbék meredeksége véletlen tér erősségének négyzetével arányos. Éppen ezért az $r(t, h)/h$ négyzete különböző h -k esetén azonos meredekséget kell rendelkeznie, ahogy ez a 4.3 ábra belsején is látható. Mindez teljesen összhangban van a (4.13) formulában megfogalmazott elméleti állítással.

4.4. Kritikus profilok

Ebben a részben magában a kritikus pontban, $t = 0$, végrehajtott méréseket elemezzük. A véletlen felületi tér homogén részét zérustól különbözőnek választottuk, $h_s \neq 0$, ám értéke mindvégig kisebb maradt a véletlen tér erősségénél, $h_s \ll h$. Megváltoztattuk a rendszer geometriáját is, vagyis olyan négyzetrácson vizsgálódtunk, ahol a vízszintes irányú kiterjedés nagyobb függőleges irányúnál, $M \ll L$. A rendszer mágnesezettségi profiljának meghatározásakor a (4.16)-ben szereplő termikus átlagolás során eltekintettünk az abszolút érték használatától, hiszen a véletlen tér várható értéke zérustól különbözik.

Hogy elkerüljük a kritikus lelassulást a szimulációk során a Swendsen-Wang klaszter algoritmust használtuk, lásd 3.2.3 szakasz. Minden rendszerméret esetén a véletlen tér legalább 1000 realizációját tekintettük. Egy adott minta esetén az egyensúly elérése után körülbelül $3 \cdot 10^5$ Monte Carlo lépésre végeztük el a termikus átlagolást. A modell egy tipikus mágnesezettségi profilja a 4.4 ábra belsejében látható.

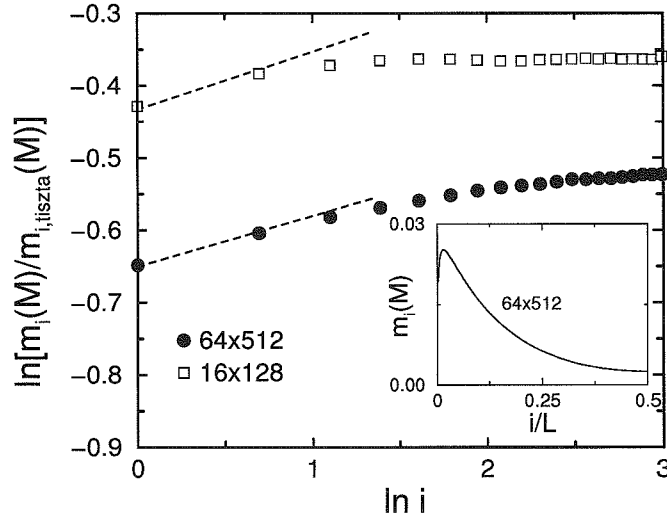
Abban az esetben, amikor csupán homogén felületi tér van jelen, $h = 0$, a mágnesezettségi profil alakja jól ismert [34]. Először a felülethez közeli tartományban monoton növekszik, majd a maximumának elérése után a mágnesezettség $x_m = 1/8$ skálázási dimenziójával kezd el csökkenni. Maga a mágnesezettség az újra skálázás során az alábbiak szerint viselkedik:

$$m(M, h_s) = b^{-x_m} m(b/M, b^{y_{h_s}} h_s), \quad (4.21)$$

ahol y_{h_s} a homogén felületi tér fraktál dimenziója. Abban az esetben, ha a b tágítási faktort i -nek választjuk, $b = i$, ahol i a felülettől mért távolságot jelöli, az alábbiakhoz jutunk:

$$m_i(M, h_s) = i^{-x_m} m_i(i/M, i^{1-x_m^s} h_s). \quad (4.22)$$

Itt x_m^s a felületi mágnesezettség skálázási dimenziója, és azt használtuk ki, hogy $x_m^s + y_{h_s} = d_s$, ahol d_s a felület dimenziója. A (4.22)-ből adódik, hogy a nem eltűnő h_s felületi tér



4.4. ábra. A véletlen és a homogén felületi térhez tartozó mágnesezettségi profilok hányadosa, $h_s = 0.01$, $h = 1$. A kezdő meredekség az effektív exponensek különbségét szolgáltatja. A belső ábrán a véletlen felületi tér esetén a mágnesezettségi profil első fele látható.

egy új, kizárólag a felülethez kapcsolódó l_s hosszúságot vezet be, hiszen

$$i^{1-x_m^s} h_s = \left(\frac{i}{h_s^{-1/(1-x_m^s)}} \right)^{1-x_m^s} = \left(\frac{i}{l_s} \right)^{1-x_m^s}. \quad (4.23)$$

Vagyis a kétdimenziós Ising modell esetén az l_s felületi hosszúság h_s^{-2} arányosan skálázódik, hiszen $x_m^s = \beta_s/\nu = 1/2$. Az l_s pontosan azon részéhez tartozik a mágnesezettségi profilnak, ahol mágnesezettség értéke monoton nő.

A profil kezdő része, $i \ll M, l_s$, ezek után a véges méret skálázás elmélete alapján az alábbiak szerint viselkedik

$$m_i(M, l_s) = i^{-x_m} g(i/M, i/l_s). \quad (4.24)$$

Amennyiben a g skálafüggvény argumentumaiban kis értékek szerepelnek, faktorizálható

$$g(i/M, i/l_s) \sim g_0(i/M) g_s(i/l_s). \quad (4.25)$$

A csupán homogén felületi teret tartalmazó kétdimenziós Ising modell esetén a második tag logaritmikus jellegű [10]

$$g_s(i/l_s) \sim h_s \ln(i/l_s) \sim h_s \ln(i h_s^2). \quad (4.26)$$

Ugyanakkor a véletlen felületi tér jelenlétében az első tag a következők szerint írható fel

$$g_0(y) \sim \frac{y^{1/2}}{(1 + \kappa h^2 \ln y)^{1/2}}. \quad (4.27)$$

Ez a formula tartalmazza a felületi mágnesezettségre a (4.13) kifejezésben megfogalmazott logaritmikus korrekciót. A (4.14) formulához hasonlóan definiálhatjuk az effektív felületi exponenst

$$\frac{\beta_s(y)}{\nu} = \frac{\ln[g_0(y(1-\delta))/g_0(y(1+\delta))]}{\ln[(1+\delta)/(1-\delta)]}, \quad (4.28)$$

mely abban az esetben, ha $y \ll 1$ a $\beta_s(M)$ függvénye lesz, ahol a modell függőleges kiterjedése a rendszerben lévő korrelációs hosszal arányos, $M \sim \xi$.

Feltételezhetjük, hogy $g_s(i/l_s)$ mind a homogén, mind a véletlen felületi tér esetén ugyanazon logaritmikus korrekciót tartalmazza. Ezért a két modellhez tartozó mágnesezettségi profilok hányadosát tekintettük. Így nemcsak a véletlen felületi térre vonatkozóan kellett $m_i(M)$ -t meghatározni, hanem a homogén tér esetén is el kellett végezni a mérést, hogy $m_{i,tiszta}(M)$ -t megkapjuk. Az utóbbi esetben sincs egzakt formula. Mivel $m_i(M)/m_{i,tiszta}$ már nem tartalmazza g_s -t, ezért a hányados a véletlen felületi térhez, valamint a homogén felületi térhez tartozó effektív exponensek különbsége szerint skálázódik, $\Delta\beta_s(M) = \beta_s(M) - \beta_{s,tiszta}(M)$.

A szimulációk során azt az esetet tekintettük, amikor a $h_s = 0.01$, és a véletlen tér erőssége eggyel egyenlő, $h = 1$. A rendszer függőleges irányba való M kiterjedése 16 és 64 volt. Az L lineáris méretet az $\alpha = L/M$ különböző egész értékei mellett változtattuk. A profilok kezdeti része $\alpha = 4$ és $\alpha = 8$ esetén megegyeztek. A véletlen és a homogén felületi térhez tartozó mágnesezettségek hányadosának meghatározása során mindig a nagyobbik α -t tekintettük. Az adatokat logaritmikus skálán a (4.4) ábrán tüntettük fel. A hányados kezdő meredekségéből származó effektív exponensek különbsége a következő értékeket szolgáltatatta:

$$\begin{aligned} \Delta\beta_s(16) &= 0.08(1) \\ \Delta\beta_s(64) &= 0.07(1). \end{aligned} \quad (4.29)$$

Azért, hogy az ily módon meghatározott adatainkat összehasonlítsuk az előző fejezet mérési eredményeivel a (4.7) egyenletet használtuk. A rendszer függőleges méretéből, mely a korrelációs hosszt szolgáltatja, $M \sim \xi$, egy pozitív redukált hőmérséklet adódik. Mivel ezen a hőmérsékleten a tiszta rendszer effektív exponense pontosan ismert, így a $\Delta\beta_s$ különbség méréséből a véletlen térhez tartozó effektív felületi mágnesezettségi exponens számolható. Ezek azok a pontok, amelyek a (4.3) ábrán szürkén vannak feltüntetve. Ahogy látható igen jól illeszkednek az illesztésből származó görbére. Továbbá azon hőmérsékleti tartományban helyezkednek el, ahol a véges méretből származó korlátok miatt mi már nem tudtunk méréseket végezni.

4.5. Összefoglalás

Marginálisan irreleváns operátorok logaritmikus korrekciókat okoznak, melynek alakját gyakran térelméleti számításokkal és konform invariancia felhasználásával lehet meghatározni. A másodrendű perturbáció elmélet értelmében a kétdimenziós Ising modell felületi fixpontjánál a véletlen felületi tér marginálisan irreleváns operátor. Ezt a replika trükkön

alapuló sejtést vizsgáltuk Monte Carlo szimulációk segítségével változó erősségű rendezetlenség esetén.

A felületi mágnesezettség effektív exponensének analitikus és logaritmikus korrekciói ellenkező előjelűek. Ezért a redukált hőmérséklettől nem monoton módon függ, t csökkenésével először növekszik, majd csökkenést mutat. Méréseink során a legerősebb felületi tér esetén sikerült a telítődést elérnünk. Majd többféleképpen is kimutattuk a vezető logaritmikus korrekciót.

Magában a kritikus pontban is megvizsgáltuk a modellt. Itt a mágnesezettségi profil a felülettől távolodva először növekszik, majd maximumát elérve monoton csökkenve tart a tömbi értékéhez. A kezdeti növekedést meghatározó effektív felületi exponens függ a véges rendszer méretétől. Kihasználva a korrelációs hossz és a redukált hőmérséklet között fennálló kapcsolatot a kritikus pontban adott mérethez tartozó felületi exponensből adott hőmérséklethez tartozó effektív felületi mágnesezettségi exponenshez jutunk. Az ily módon nyert eredményeink abba a kritikus ponthoz közeli tartományba szolgáltatnak adatokat és illeszkednek jól az elméleti uton meghatározott görbére, ahol a véges méretből adódó korlátok miatt nem tudtunk hőmérséklettől függő effektív felületi exponenst mérni. Az eredmények a [88] cikkben lettek közölve.

5. fejezet

Korrelált rendezetlenség Ising modellben

5.1. Bevezetés

A valós mágnesek elkerülhetetlen velejárója a befagyott rendezetlenség valamely formája. A különböző modellekben a véletlen perturbáció drasztikusan megváltoztathatja a rendszer fizikai tulajdonságait. Különösen jelentős változás állhat be a kritikus pont környékén, ahol előfordulhat, hogy a perturbált rendszer fázisátalakulását leíró kritikus exponensek eltérhetnek a tiszta rendszer exponenseitől. Mindez azt jelenti, hogy a rendezetlenség a Harris kritérium értelmében, releváns perturbációt okoz, lásd 2.3.3 szakasz.

A rendezetlen rendszerek vizsgálata során többnyire feltételezik, hogy az adott problémát leíró paraméterek (kötések, külső tér) független, azonos eloszlású véletlen változók, melyek között nincs korreláció. Mindazonáltal léteznek olyan rendszerek, ahol a véletlen változók között valamely mértékben korreláció áll fenn. Ennek következménye lehet, hogy a korrelált rendezetlenséggel bíró rendszer univerzális osztálya megváltozik a korrelálatlan perturbációhoz képest.

Erősen korrelált rendezetlenségre kvantum mágnesek szolgáltatnak példát $T = 0$ hőmérsékleten, ahol a rendezetlenség az idő koordinátában szigorúan korrelált. Az ilyen rendszerek kritikus viselkedése meglehetősen szokatlan képet mutat [56]. Ezen kvantum modellek klasszikus megfelelőjében a rendezetlenség egy térbeli irányban korrelált, amely a McCoy és Wu által bevezetett és részben egzaktul megoldott modellhez vezet [76, 77, 75]. A későbbi általánosításokban a rendezetlenség szigorúan egy $d' < d$ dimenziós altérben korrelált, ahol d a rendszer dimenzióját jelöli [40, 21, 72, 20, 101].

A véletlen változók közötti korreláció lehet izotróp. Erre jó példa található a [107, 55]-ben, ahol a kísérleti megfigyelések azzal a feltevessel magyarázhatók [4], hogy a mintában véletlen vonalak mentén van jelen a rendezetlenség. Ugyancsak néhány kvantum mágnesben [95] és az f -elektron ötvözetek nem Fermi folyadék viselkedésében [31, 36] a hosszú távú Ruderman-Kittel-Kasuya-Yoshida kölcsönhatás miatt izotróp korrelált rendezetlenség megjelenése várható. Az ilyen típusú perturbációk esetén a kötéserősségekben meglévő rendezetlenséget, $\Delta K(\mathbf{r}) = K(\mathbf{r}) - \overline{K(\mathbf{r})}$, a korrelációs függvény jellemzi, $G(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \overline{\Delta K(\mathbf{r})\Delta K(\mathbf{r}')}$, mely feltételezhetően izotóp, $G(\mathbf{r}) = G(|\mathbf{r}|)$, és nagy értékek

esetén algebrai lecsengést mutat, $G(r) \sim r^{-a}$. Abban az esetben például, amikor a rendezetlenség véletlen irányú egyenesek mentén jelentkezik az a korrelációs exponens értéke $d - 1$.

Az n komponensű vektor modell kritikus viselkedését vizsgálta Weinrib és Halperin Gauss-féle rendezetlenség esetén [110]. Azt az esetet tárgyalták, amikor a korrelációs függvény hatvány függvény szrű lecsengést mutat, $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^{-a}$. Az $\epsilon = 4 - d$ és $\delta = 4 - a$ változók szerint, ahol d a rendszer dimenziója, térelméleti eljárások keretein belül kettős sorfejtést alkalmazva kiterjesztették a Harris kritériumot. Amennyiben $a \geq d$ a korrelált rendezetlenség valójában a rövid távú perturbációt okoz, és csak abban az esetben releváns, ha a tiszta rendszer fajhőjének kritikus exponense pozitív [53]. Ekkor a modell kritikus viselkedését a tiszta rendszer fixpontjától különböző rövidtávú rendezetlenségi fixpont írja le. Ha $a < d$ és $n = 1$ (Ising modell), a perturbáció releváns voltának feltétele, hogy a korrelációs függvény lassú lecsengést mutasson:

$$a < \frac{2}{\nu_{\text{short}}}, \quad (5.1)$$

ahol ν_{short} a rövid távú rendezetlenség fixpontjához tartozó korrelációs hossz kritikus exponense. A kritikus jelenséget egy újabb fixpont, a hosszútávú rendezetlenség fixpontja határozza meg. Amennyiben ezen fixpont stabil a korrelációs hossz exponense megváltozik:

$$\nu = 2/a, \quad 2/a > \nu_{\text{short}}. \quad (5.2)$$

Mindemellett a mágnesezettség kritikus exponense, valamint skálázási dimenziója, $x_m = \beta/\nu$ egyaránt függ a -tól és d -től.

Háromdimenziós rendszerek skála függvényének direkt renormalizációs analízise során Pade-Borel szummációs technikát használva meghatározták a különböző értékeihez tartozó kritikus exponenseket. A vizsgálat eredményeként megkérdőjelezték az (5.2)-ben megfogalmazott skálázási összefüggés helyességét [93]. Ugyanakkor számos olyan korrelált rendezetlenséggel bíró rendszer létezik (perkoláció [110], háromdimenziós Ising modell [7], polimerek [19], kvantum Ising modell [95]), ahol numerikus valamint térelméleti számítások igazolják az (5.2) kifejezésben megfogalmazott állítást.

Meg kell azonban jegyeznünk, hogy abban az esetben, amikor az Ising modellben a rács tengelyeivel párhuzamos irányokban, véletlenszerűen meghatározott egyenesek mentén jelentkezik a rendezetlenség [7], mely által a rotációs szimmetria sérül, a rendszer kritikus viselkedése megegyezik az $a = 2$ -höz tartozó Gauss-féle korrelált rendezetlenségű modellel. Ez az eredmény azt mutatja, hogy korrelált rendezetlenség esetén a modell részletei látszólag irrelevánsak. A kritikus viselkedést elsősorban a rendezetlenséghez tartozó korrelációs függvény lecsengése határozza meg. Ugyanakkor a korrelált rendezetlenség miatt maga a kritikus pont nem minden esetben ismert pontosan. Ez erősen behatárolja a numerikus számítások pontosságát.

Ebben a fejezetben a kétdimenziós négyzetrácson értelmezett Ising modellt vizsgáljuk. Benne kéttengelyű korrelált rendezetlenséget vezetünk be oly módon, hogy a rendszer önduális marad. Ennek következménye, hogy a kritikus pont egzaktul meghatározható. Modellünk a Ballesteros és Parisi által bevezetett véletlen diszlokációs modell [7] kétdimenziós, önduális verziójának tekinthető. A kritikus pont környékén a korrelációs hosszak

megfelelő skálán vizsgálhatjuk a modell tulajdonságait. A korrelációs függvény exponensét, $a = 1$, nagy rendszerméret esetén a rendezetlenségnek különböző blokkokra vett integrálásából határozhatjuk meg. Így modellünk ezen a paraméterű Gauss-féle korrelált rendezetlenséggel összehasonlítható.

A kétdimenziós Ising modellnél a lokális energiasűrűségben jelentkező korrelálatlan rendezetlenség, mint például hígítás vagy véletlen ferromágneses kötések, marginálisan irreleváns perturbációt okoznak [42, 43, 100, 98]. Ennek következményeként a kritikus viselkedést a tiszta rendszer logaritmikus korrekciókkal bővülő exponensei határozzák meg. A korrelációs hossz exponense, ν_{short} , azonban megtartja a tiszta rendszerhez tartozó értéket, $\nu_0 = 1$. Ezért a kiterjesztett Harris kritérium (5.1) feltétele teljesül, így modellünkben a korrelált rendezetlenség releváns perturbációt okoz. Az egzaktul ismert kritikus pontban Monte Carlo szimulációkat végzünk, és véges méret skálázással meghatározzuk a rendszer kritikus exponenseit, valamint ellenőrizzük az (5.2) kifejezésben szereplő állítást. A modell mágnesezettségi és energia profilját is vizsgáljuk azon oknál fogva, hogy ellenőrizzük, vajon a konform eljárások igazak maradnak-e a véletlen rendszernél a rendezetlenségre történő átlagolás után.

5.2. Az önduális kéttengelyű korrelált rendezetlenség modellje

5.2.1. Véletlen kötésű Ising modellek

A négyzetrácson értelmezett kétdimenziós Ising modellt vizsgáljuk, melynek Hamilton operátorát az alábbi egyenlet határozza meg:

$$-\beta\mathcal{H} = \sum_{i=1}^L \sum_{j=1}^L (K_{ij}^x \sigma_{i,j} \sigma_{i+1,j} + K_{ij}^y \sigma_{i,j} \sigma_{i,j+1}) , \quad (5.3)$$

ahol $\beta = 1/k_B T$. K_{ij}^x és K_{ij}^y az (i, j) rácsponton elhelyezkedő $\sigma_{i,j}$ spinnek a vízszintes irányban lévő $\sigma_{i+1,j}$, valamint a függőleges irányban található $\sigma_{i,j+1}$ első szomszédai közötti véletlen kötést jelöli. A következő paraméterezést használjuk

$$e^{2K_{ij}^\tau} - 1 = 2^{1/2+u_{ij}^\tau} \quad \tau = x, y. \quad (5.4)$$

A duális transzformáció során [12] a függőleges és a vízszintes tengely felcserélődik, melynek következtében az alábbi egyszerű reláció áll fent a u_{ij}^x és u_{ij}^y változók között

$$u_{ij}^x \longrightarrow u_{ij}^{y*} = -u_{ij}^x, \quad u_{ij}^y \longrightarrow u_{ij}^{x*} = -u_{ij}^y, \quad (5.5)$$

ahol $*$ a duális változót jelöli. Az u_{ij}^τ különböző eloszlásaihoz más-más modellek tartoznak.

Abban az esetben, amikor $u_{ij}^x = u^x$ és $u_{ij}^y = u^y$, a véletlen perturbációt nem tartalmazó modellhez jutunk. Ennek kritikus pontjában az (5.5) egyenlet értelmében $u^x = -u^y$. Izotrópia esetén a kritikus pontot az $u^x = u^y = 0$ egyenlőség szolgáltatja. Ekkor a kritikus exponensek jól ismertek [12], $\nu = 1$ és $x_m = \beta/\nu = 1/8$.

Véletlen modell korrelálatlan rendezetlenséggel

Amennyiben u_{ij}^T paraméterek független, azonos eloszlású valószínűségi változók, a rendszer korrelálatlan rendezetlenséggel bír. A kritikus pontban az eloszlás $P(u)$ sűrűség függvénye szimmetrikus [67], $P(u) = P(-u)$, mely egyben az öndualitást kifejező (5.5) egyenlet következménye is. A rendezetlenség erősségét Δ -val jelöljük, $\Delta^2 = \overline{u^2}$. Amennyiben a rendszer mérete elég nagy, úgy azt L lineáris méretű cellákra bonthatjuk. Ezen blokkokhoz új változót rendelhetünk, $u' = L^{-d} \sum u_{ij}$, ahol az összegzés a cella L^d térfogatára vonatkozik. Az új változók esetén a rendezetlenség erőssége: $\Delta' = \Delta L^{-d/2}$. Ahhoz, hogy eldöntsük a perturbáció releváns voltát, Harris gondolat menetét követve, lásd 2.3.3 szakasz, az $L = \xi \sim t^{-\nu}$ skálán Δ'/t hányadost kell vizsgálnunk, ahol t a redukált hőmérséklet, a kritikus ponttól mért távolságot méri. Az elvégzett analízis szerint a kétdimenziós Ising modellnél ezen rendezetlenség marginálisan irreleváns perturbációt okoz. Ennek következménye, hogy a kritikus viselkedést a tiszta rendszer logaritmikus korrekciókkal bővülő exponensei határozzák meg [42, 43, 100, 98].

Véletlen modell izotróp korrelált rendezetlenséggel

Ebben az esetben az u_{ij}^T paraméterek olyan véletlen változók, amelyek a különböző rácspontokban korreláltak. A köztük lévő korreláció nagy térbeli távolság esetén a következő módon cseng le:

$$\overline{u_{ij}u_{i'j'}} \sim [(i - i')^2 + (j - j')^2]^{-a/2} . \quad (5.6)$$

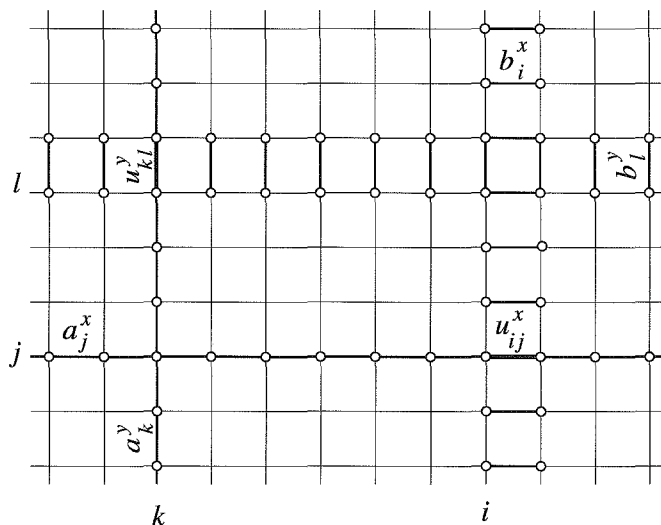
Ha nagy kiterjedésű rendszert vizsgálunk, akkor azt cellákra bonthatjuk, és ez esetben a rendezetlenség erősségét a korrelálatlan modellhez képest a $\Delta'_c = \Delta_c L^{-\omega}$, egyenlet határozza meg [110], ahol $\omega = \min(d, a)/2$. Ekkor a rendezetlenségben lévő hosszú távú korrelációk csak $a < d$ esetben okoznak releváns perturbációt. Így a kétdimenziós Ising modellnél $a < 2$ lecsengésű korreláció releváns, és ekkor a modell ν kritikus exponensét az (5.2) egyenlet határozza meg. Mindazonáltal az izotróp korrelált rendezetlenség esetén maga a kritikus pont nem ismert egzaktul, ami nehezíti a numerikus számolásokat.

McCoy-Wu modell

A McCoy-Wu modell esetén a rendezetlenség szigorúan csak az oszlopokban (vagy a sorokban) korrelált

$$u_{ij}^x = b_i^x (= a_j^x), \quad u_{ij}^y = a_i^y (= b_j^y), \quad (5.7)$$

ahol a b_i^x, a_i^y (a_j^x, b_j^y) paraméterek független azonos eloszlású véletlen változók. Amennyiben ismét kellően nagy rendszert tekintünk, úgy azt újra L lineáris méretű cellákra bonthatjuk. Ezen blokkokra új változókat bevezetve a rendezetlenség Δ_{MW} erősségét a $\Delta'_{MW} = \Delta_{MW} L^{-1/2}$ egyenlettel jellemezhetjük. A McCoy-Wu modell lévő releváns perturbáció erősen anizotróp skálázási tulajdonsággal bír [46]. Ezért $\ln \xi_{\perp} \sim \sqrt{\xi}$, ahol ξ a nem transláció invariáns, $\xi_{\perp}$ pedig a transláció invariáns irányban jelöli a korrelációs hosszt. A modell kritikus exponensei ismertek [46], a $\nu = 2$ és $x_m = (3 - \sqrt{5})/4$ egyenletekből valamint a skálatörvényekből pontosan meghatározhatók, lásd a 2.2 táblázatot.



5.1. ábra. A kéttengelyű korrelált rendezetlenség parametrizációja

5.2.2. Kéttengelyű korrelált rendezetlenség

Az általunk vizsgált korrelált rendezetlenséggel szemben elvárjuk, hogy az x és y tengely felcserélésére szimmetrikus legyen, öndualitással bírjon, és a véletlen diszlokációs modell [7] kétdimenziós változatát adja vissza. Hogy mindennek eleget tegyünk a következő parametrizálást használjuk

$$u_{ij}^x = b_i^x + a_j^x, \quad u_{ij}^y = a_i^y + b_j^y, \quad (5.8)$$

ahol változóink egy oszlopok és egy sorok mentén rendezetlen McCoy-Wu modell kötéseinek az összege, ahogy az az (5.7) egyenletekből leolvasható. A könnyebb elképzelés érdekében érdemes megtekinteni a 5.1 ábrát. A parametrizáció következménye, hogy a rendezetlenség erőssége a McCoy-Wu modellnél látottak szerint skálázódik $\Delta'_b = \Delta_b L^{-1/2}$. Másfelől az u_{ij}^x változók közötti átlagos korrelációk aszimptotikusan izotróp tulajdonságot mutatnak. Magát a kritikus viselkedést várhatóan a rendezetlenség korrelációs függvényének lecsengése határozza meg. Ahogy azt később látni fogjuk a kéttengelyű korrelált rendezetlenség releváns perturbációt okoz. Modellünkben a korrelációs függvény hasonló típusú, mint a Ballesteros-Parisi féle háromdimenziós diszlokációs modellben, és azon ν kritikus exponenst szolgáltatja, mint amellyel az (5.6) egyenletben, az $a = 1$ paraméterrel leírt izotróp korrelált rendezetlen modell rendelkezik.

Az (5.8)-ben használt parametrizációnak egyik nagy előnye, hogy a kötések kielégítik az (5.5)-ben szereplő duális relációt. Ezért ha az $a_i^y, a_j^x, b_i^x, b_j^y$ véletlen változókat kellő módon választjuk meg, a rendszer önduális lesz. Ezt többféleképpen is elérhetjük, esetünkben mindegyikhez ugyanazon szimmetrikus és uniform valószínűségi sűrűségfüggvény

tartozik:

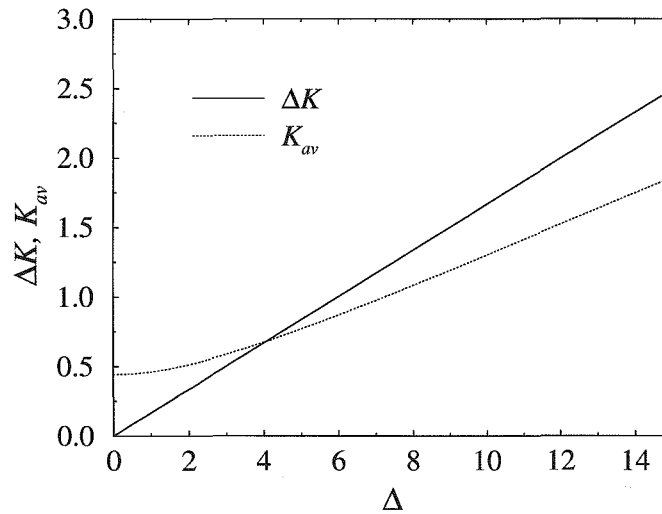
$$P(s) = P(-s) = \begin{cases} \frac{1}{2\Delta} & -\Delta \leq s \leq \Delta \\ 0 & |s| > \Delta \end{cases}$$

$$s = a_i^y, a_j^x, b_i^x, b_j^y. \quad (5.9)$$

Így a kritikus pontban a rács tengelyeihez tartozó két irány statisztikailag egymással ekvivalensé válik. A kötések K_{av} átlagos erősségének, valamint a hozzá tartozó ΔK standard eltérésnek a sűrűségfüggvény Δ félszélessége szerinti változását követhetjük nyomon az 5.2 ábrán.

$$\Delta K = .165764\Delta + .000085\Delta^3 + .000010\Delta^5 + O(\Delta^7), \quad (5.10)$$

Miként a fenti sorfejtésből is látszik a standard eltérés majdnem lineáris Δ -ban. Ennek következménye, hogy a rendezetlenség $\Delta K/K_{av}$ relatív erőssége monoton nő az eloszlásfüggvény szélesedésével.



5.2. ábra. A K_{av} átlag kötéserősség és a hozzá tartozó ΔK standard eltérés a valószínűségi sűrűségfüggvény Δ félszélességének a függvényében. A standard eltérés közel lineáris Δ -ban.

5.2.3. Relevancia-irrelevencia kritérium

Korrelált rendezetlenség esetén a tiszta rendszer fixpontjának stabilitását a Harris kritérium segítségével elemezhetjük, lásd 2.3.3 szakasz. Az adott L nagyságú skálán az átlag kötéstől való eltérés összege tipikusan $\Delta L^{3/2}$ szerint nő, hiszen a $2L$ független változó zérus várható értékkel rendelkezik, valamint az L oszlop és az L sor közötti korrelációk miatt mindegyik ΔL mértékben járul hozzá a szummához. Ha ezt az értéket elosztjuk a

kötések számával, akkor megkapjuk az átlagos hőmérséklettől való tipikus eltérést

$$\delta t(L) \simeq \Delta \frac{L^{3/2}}{L^2} \simeq \Delta L^{-1/2}. \quad (5.11)$$

Ezek után, ha a perturbáció releváns voltát akarjuk eldönteni, akkor a következő hányados viselkedését kell elemeznünk abban az esetben, amikor megközelítjük a kritikus pontot, $t \rightarrow 0$.

$$\frac{\delta t(\xi_0)}{t} \propto t^{-1+\nu_0/2}, \quad \xi_0 \propto t^{-\nu_0}, \quad (5.12)$$

A fenti formulában ξ_0 a korrelációs hosszt, míg ν_0 a tiszta rendszerhez tartozó kritikus exponenst jelöli. A perturbáció akkor releváns, ha a $t^{-1+\nu_0/2}$ hányados divergál a kritikus pontban, azaz ha $\nu_0 < 2$. Ezért a kétdimenziós Ising modellnél, ahol $\nu_0 = 1$, a kéttengelyű korrelált rendezetlenség releváns perturbációt okoz.

Ugyanezen eredményhez jutunk, ha Δ skálázási dimenzióját vizsgáljuk. Kiindulásnak tekintjük az (5.11) kifejezést. Amennyiben a hosszúsági skálát egy b tágítási faktorról növeljük, akkor a δt a következőképpen transzformálódik

$$\delta t' = \Delta' L'^{-1/2} = b^{1/\nu_0} \delta t = b^{1/\nu_0} \Delta L^{-1/2}. \quad (5.13)$$

ahol δt -hez az $y_{t0} = 1/\nu_0$ skálázási dimenzió tartozik. Az L' helyére L/b -t helyettesítve adódik, hogy

$$\Delta' = b^{y_\Delta} \Delta, \quad y_\Delta = \frac{2 - \nu_0}{2\nu_0}, \quad (5.14)$$

azaz a újra skálázás során a rendezetlenség erőssége csak abban az esetben nő, ha $\nu_0 < 2$.

A Gauss-féle korrelált rendezetlenség fixpontjának stabilitására $a = 1$ esetén ugyanaz az eredmény adódik az (5.1) egyenletben, mint amit a modellünkre vonatkozóan az imént kétféleképpen is megállapítottunk. Ez abból következik, hogy mindkét modell esetén egy L hosszú skálán a rendezetlenség korrelációs függvénye hasonló módon viselkedik. Ezért a kéttengelyű korrelált rendezetlenséget úgyis prezentálhatnánk, mintha egy effektív $a = 1$ paraméterű korrelációs exponenssel rendelkezne. A továbbiakban azt is megvizsgáljuk, hogy vajon a két modell között szorosabb kapcsolat is található. Azaz az (5.2) egyenletben a ν kritikus exponensre vonatkozó állítás teljesül-e a kéttengelyű korrelált rendezetlenség esetén is.

5.3. Véges méret skálázás a kritikus pontban

5.3.1. A mérés menete

Különböző fizikai mennyiségekhez tartozó kritikus exponenseket határoztunk meg azáltal, hogy kihasználtuk az adott mennyiségnek a kritikus pontban jelenlevő véges méretből származó skálázási tulajdonságát. A mérés során egyre növekvő $L \times L$ méretű négyzetrácsot tekintettünk, és minden irányban periodikus határfeltétellel éltünk.

A Wolff algoritmust használtuk, lásd 3.2.2 szakasz, hogy ezáltal is csökkentsük a kritikus pontban tapasztalható lelassulást. Minden rendszerméret esetén megvizsgáltuk a τ_e

equilibrációs időt. Ehhez a rendszert két lényegesen különböző állapotból indítottuk. Az első esetben minden spin azonos irányba mutatott, amely megfelel a $T = 0$ hőmérsékletnek, majd a spinek véletlenszerűen vettek fel értékeket, amely a végtelen hőmérsékletnek megfelelő állapotot szolgáltatja. Az equilibrációs időt azon Monte Carlo lépések száma szolgáltatja, amely a két különböző állapotból indulva az egyensúly elérésének megtételéhez szükséges. Mind a mágnesezettségre, mind az energiára vonatkozóan meghatároztuk τ_e -t. Ugyanezen mennyiségek esetén mértük az autokorrelációs időt is, hogy egy adott minta esetén az időre vett átlagolás statisztikus hibáját meghatározhassuk.

A szimulációk során minden mintánál először $10\tau_e$ időt vártunk. Ez rendszermérettől függően 10^3 Monte Carlo lépéstől egészen 5×10^4 lépésig terjedhetett. Ezután az adott minta esetén a különböző fizikai mennyiségeknek meghatároztuk a termikus átlagát. Itt a megtett lépések száma ismét csak mérettől függően $\tau = 10^5$ -től $\tau = 2.5 \times 10^5$ Monte Carlo lépésig terjedt. Nagyságrendileg a rendezetlenség $n_s \approx 10^4$ mintáját tekintettünk. Ez az érték úgy lett meghatározva, hogy az eltérő mennyiségek mérési hibája 1% körüli legyen.

A fluktuáció-disszipáció relációt használtuk, hogy meghatározzuk a fajhőt és a mágneses szuszeptibilitást. Az X mennyiség várható értékét a termikus átlagoknak a rendezetlenség n_s számú mintájára vett átlaga szolgáltatja.

$$\overline{\langle X \rangle} = \frac{1}{n_s} \sum_{s=1}^{n_s} \langle X^{(s)} \rangle, \quad \langle X^{(s)} \rangle = \frac{1}{\tau} \sum_{i=1}^{\tau} X_i^{(s)}. \quad (5.15)$$

A rendszer teljes M mágnesezettségét és teljes E energiáját az alábbiak szerint definiáljuk:

$$M = \sum_{i,j=1}^L \sigma_{i,j}, \quad E = - \sum_{i,j=1}^L (\sigma_{i,j} \sigma_{i+1,j} + \sigma_{i,j} \sigma_{i,j+1}). \quad (5.16)$$

A szimulációk során a következő mennyiségeket mértük:

- Az egy spinre jutó p -edik mágneses momentum, ($p = 1, 2, 3, 4$):

$$m_p = \frac{\overline{\langle |M|^p \rangle}}{L^{2p}}, \quad m_1 = m. \quad (5.17)$$

- Az egy spinre jutó szuszeptibilitás:

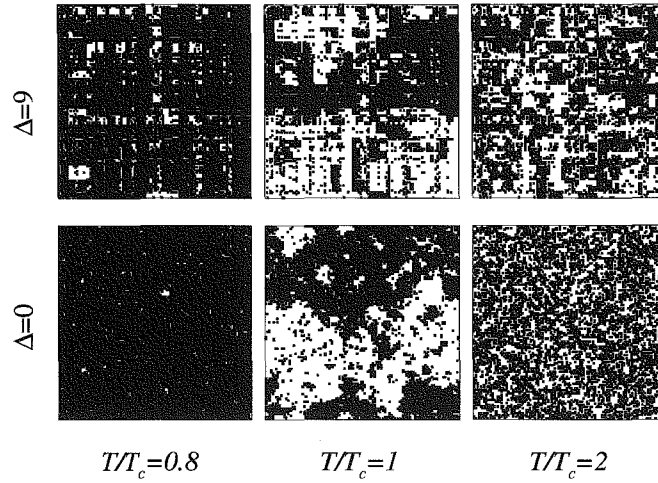
$$\chi = \frac{\overline{\langle \Delta M^2 \rangle}}{L^2}, \quad \Delta M^2 = (M - \langle M \rangle)^2. \quad (5.18)$$

- Az egy spinre jutó fajhő:

$$C = \frac{\overline{\langle \Delta E^2 \rangle}}{L^2}, \quad \Delta E^2 = (E - \langle E \rangle)^2. \quad (5.19)$$

- A szuszeptibilitás logaritmusának hőmérséklet szerinti deriváltja:

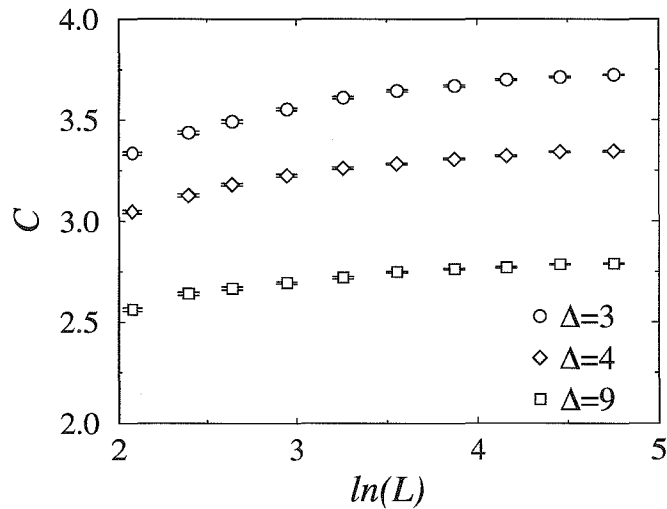
$$\Psi = \frac{\overline{\langle \Delta E \Delta M^2 \rangle}}{\overline{\langle \Delta M^2 \rangle}}, \quad \Delta E = E - \langle E \rangle. \quad (5.20)$$



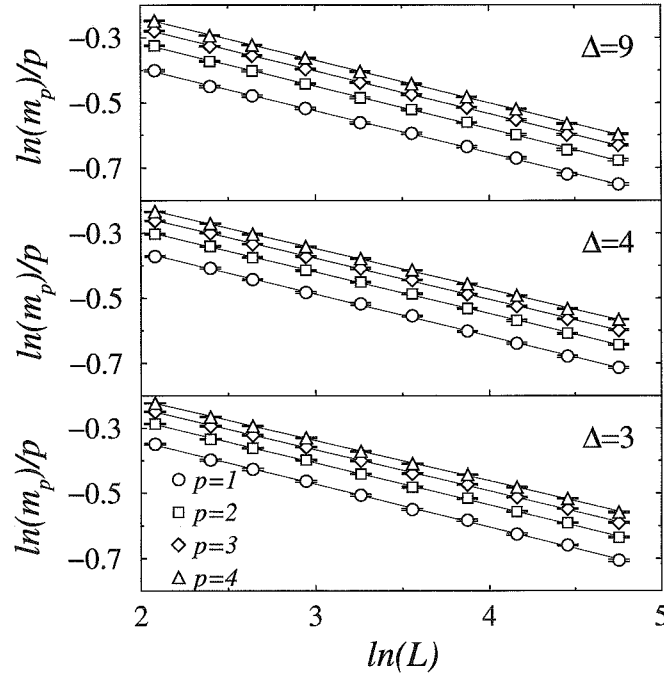
5.3. ábra. Pillanatfelvétel az egyensúlyi spin konfigurációról a perturbált ($\Delta = 9$) és a tiszta rendszer ($\Delta = 0$) esetén a rendezett fázisban ($T = 0.8T_c$), a kritikus pontban, valamint a paramágneses fázisban ($T = 2T_c$).

5.3.2. Szimulációk eredményei

Az 5.3 ábrán a kéttengelyű korrelált rendezetlenség egyensúlyi spinkonfigurációját hasonlítjuk össze a tiszta rendszerével. Három különböző hőmérsékleti tartományt tekintünk. A rendszer méret mind a $\Delta = 9$ erősségű rendezetlen, mind a tiszta modell esetén 116×116 .



5.4. ábra. Az egy spinre eső fajhő véges méret viselkedése a kritikus pontban semi-logaritmikus skálán ábrázolva. A fajhő α kritikus exponense negatív, ezért a C viselkedését nagy L rendszerméret esetén a reguláris része határozza meg.



5.5. ábra. Az egy spinre jutó mágneses momentumok véges méret skálázása a kritikus pontban. Az egyenesek a lineáris illesztésből származnak.

Jól látható, hogy az alacsony és magas hőmérsékleti fázisban a perturbált modellben a klaszter méretek nagyobbak. Másfelől a kritikus pontban hozzávetőleg ugyanazon hosszú távú rend van jelen.

A fajhőnek, a mágnesezettség sűrűségének különböző momentumainak, a szuszceptibilitásnak, az $\ln \chi$ hőmérséklet szerinti deriváltjának kritikus pontban jelenlevő véges méret tulajdonságát figyelhetjük meg az 5.4–5.7 ábrákon. Egyre nagyobb rendezetlenség mellett $\Delta = 3, 4, 9$, a rendszer lineáris méretét $L = 8$ -tól $L = 116$ -ig változtattuk.

A fajhő nagyobb rendszerméret estén telítődik, amely azt mutatja, hogy a reguláris része dominál a szingulárisval szemben. Tudjuk, hogy a szinguláris rész $L^{\alpha/\nu}$ szerint skálázódik. Ezért a telítődés azt jelenti, hogy a fajhő α kritikus exponense negatív. Tulajdonképpen ez az oka annak, hogy a szuszceptibilitás logaritmusának hőmérséklet szerinti deriváltját vizsgáltuk.

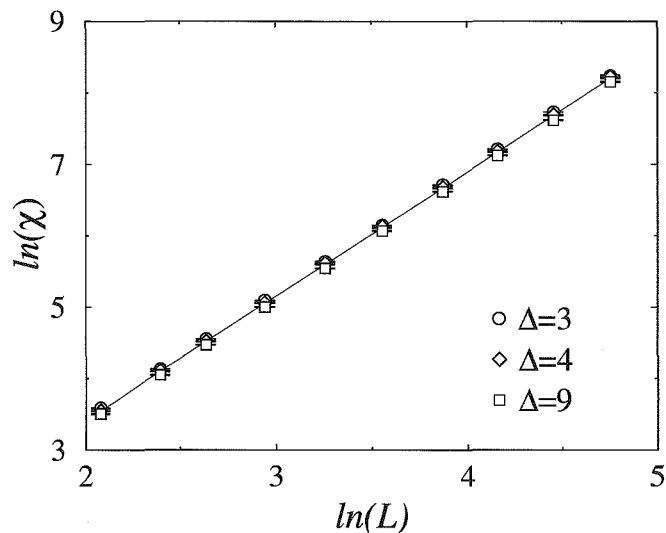
A véges méret skálázás szerint a rendszer L lineáris méretével az alábbi mennyiségek a kritikus pontban a következőképpen viselkednek:

$$\begin{aligned} m_p &\propto L^{-px_m^{(p)}}, & x_m^{(1)} = x_m = \beta/\nu, \\ \chi &\propto L^{\gamma/\nu}, & \gamma/\nu = d - 2x_m = 2(1 - x_m), \\ \Psi &\propto L^{1/\nu}, & 1/\nu = y_t. \end{aligned} \quad (5.21)$$

A log-log skálán valóban megfigyelhető az elvárt lineáris tulajdonság, jól lehet Ψ esetén kis rendszerméreteknél észrevehetően eltér ettől, valamint a meredekség enyhén függ Δ

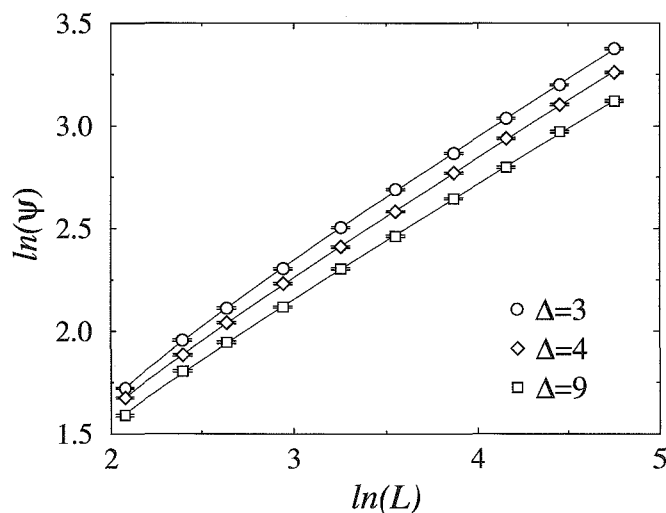
5.3. VÉGES MÉRET SKÁLÁZÁS A KRITIKUS PONTBAN

63

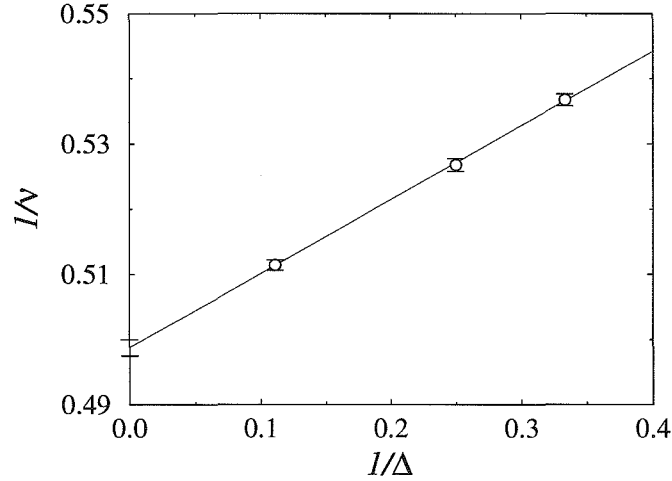


5.6. ábra. Az egy spinre jutó szuszceptibilitás véges méret skálázása a kritikus pontban. Mivel az adatok Δ -val alig változnak, így az egyenes az összes pontra vett lineáris illesztésből származik.

értékétől. Éppen ezért a mágnesezettség és a szuszceptibilitás exponenseinek meghatározásához egyszerű lineáris illesztést alkalmaztunk, ugyanakkor a Ψ -hez tartozó mérési



5.7. ábra. Az (5.20)-ben definiált Ψ véges méret skálázása a kritikus pontban. A görbék a (5.22) egyenlettel meghatározott illesztésből származnak.



5.8. ábra. A végtelen rendezetlenséghez tartozó $1/\nu$ meghatározása lineáris extrapolációval.

adatokra az alábbi görbét illesztettük

$$\ln(\Psi) = A + \frac{1}{\nu} \ln(L) + \ln(1 + BL^{-\omega}) . \quad (5.22)$$

Az 5.1 táblázat tartalmazza a rendezetlenség különböző erősségeihez tartozó kritikus exponenseket. Mivel Δ növelésével nincs jelentős eltérés β/ν és γ/ν értékében, ezért ezek átlagát tekintettük, mely az alábbi értékeket szolgáltatta:

$$\frac{\beta}{\nu} = x_m = 0.1299(12), \quad \frac{\gamma}{\nu} = 1.7419(20) . \quad (5.23)$$

Az azonban nem teljesen világos, hogy a mágnesezettség $x_m^{(p)}$ momentumai miért csökkennek p növekedésével. Valószínűsíthetően crossover hatás, hiszen mindez kellően erős rendezetlenségénél, $\Delta = 9$, eltűnik.

A Ψ -hez tartozó $1/\nu$ exponens is változik a rendezetlenség különböző értékeinél. Mivel az az 5.8 ábrán is látható a csökkenés lineáris $1/\Delta$ -ban. Innen extrapolációval meghatározható a végtelen nagy rendezetlenséghez tartozó érték:

$$\frac{1}{\nu} = y_t = 0.4988(13) . \quad (5.24)$$

5.4. Kritikus profilok

A kritikus pontba Monte Carlo eljárással meghatározott profilokból konform leképezések segítségével megkaphatjuk a modellhez tartozó felületi és tömbi exponenseket [32, 94, 15]. A kéttengelyű korrelált rendezetlenséggel rendelkező modellre a replika trükköt alkalmazva

5.1. táblázat. Az 5.5–5.7 ábrákon látható véges méret skálázási adatokra történő illesztésből származó effektív kritikus exponensek. Az utolsó sorban a Ψ -re illesztett (5.22) görbében szereplő korrekciós kitevő értékei szerepelnek.

	$\Delta = 3$	$\Delta = 4$	$\Delta = 9$
β/ν	0.1312(13)	0.1292(10)	0.1294(14)
$x_m^{(2)}$	0.1283(10)	0.1279(8)	0.1309(11)
$x_m^{(3)}$	0.1259(8)	0.1264(8)	0.1310(9)
$x_m^{(4)}$	0.1238(7)	0.1249(7)	0.1305(8)
γ/ν	1.7435(21)	1.7442(17)	1.7381(22)
$1/\nu$	0.5368(9)	0.5268(10)	0.5115(8)
ω	0.737(7)	0.573(6)	0.569(7)

olyan effektív Hamilton operátorhoz jutunk, ahol hosszú távú kölcsönhatások lépnek fel az egyes replikák között. Ebből adódóan, szemben a korrelált rendezetlenséggel [32], nem várjuk, hogy az általunk vizsgált rendszer konform invarianciával bírjon a fázisátalakulási pontban. Mindazonáltal feltételezzük, hogy modellünk kritikus profiljai mégis rendelkeznek ezen tulajdonsággal. Hasonló esetre jó példát szolgáltat a külső térrel rendelkező véletlen Ising lánc, ahol a kritikus pontban a profilok majdnem pontosan követik a konform elmélet által meghatározott görbéket [57], noha a rendszer erős anizotróp skálázási tulajdonsága miatt nem konform invariáns [46, 118].

5.4.1. Sűrűségek konform transzformációja

Rögzített határfelülettel rendelkező félvégtelen kritikus rendszer mágnesezettségi profilja jól ismert. A felülettől y távolságra az alábbi lecsengést mutatja [50]

$$\overline{\langle m(y) \rangle}_{\text{fixed}} = A_m y^{-x_m}, \quad x_m = \beta/\nu, \quad (5.25)$$

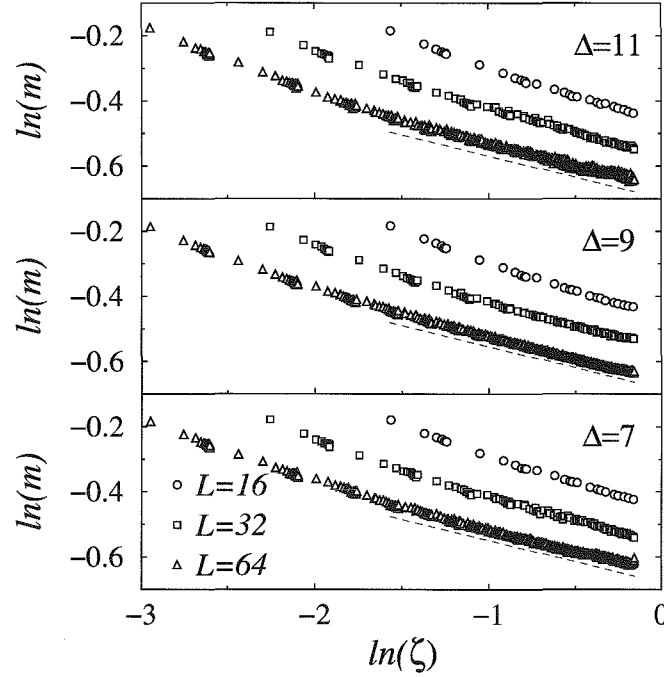
ahol x_m a tömbi mágnesezettségi sűrűség skálázási dimenziója.

A felső komplex félsíkot a (2.62)-ben leírt Schwarz-Christoffel transzformáció segítségével konform módon leképezhetjük egy négyzetre, lásd 2.2 ábra. A megváltozott geometriában a mágnesezettség sűrűsége a (2.57) egyenlet értelmében, a 2.2.4 rész jelöléseit használva, az alábbiak szerint viselkedik:

$$\begin{aligned} \overline{\langle m(w) \rangle}_{\text{fixed}} &= b(z)^{x_m} \overline{\langle m(z) \rangle}_{\text{fixed}}, \quad b(z) = |w'(z)|^{-1} \\ w'(z) &= \frac{L}{2K(k)\sqrt{(1-z^2)(1-k^2z^2)}}. \end{aligned} \quad (5.26)$$

Bevezetve egy új, redukált változót

$$\zeta(w) = \frac{\Im[z(w)]}{\left| \sqrt{(1-z^2)(1-k^2z^2)} \right|}, \quad (5.27)$$



5.9. ábra. A mágnesezettségi sűrűség konform profiljai különböző L rendszerméretés Δ rendezetlenség esetén. A szaggatott vonalak $-\beta/\nu$ meredekségei a véges méret skálázásból származnak.

a mágnesezettségi sűrűsége ζ hatványaként változik

$$m = \overline{\langle m(\zeta) \rangle}_{\text{fixed}} \propto \zeta^{-x_m}. \quad (5.28)$$

Hasonló lecsengést kapunk az energiasűrűség szinguláris részének viselkedésére

$$\overline{\langle e(\zeta) \rangle}_{\text{sing}} \propto \zeta^{-x_e}, \quad x_e = 2 - 1/\nu. \quad (5.29)$$

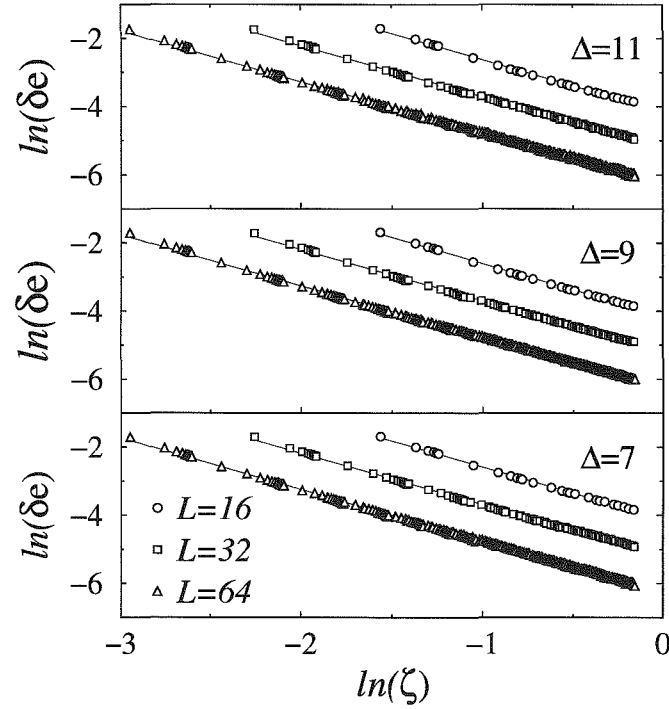
Ekkor azonban eleminálni kell az energiasűrűség reguláris részét. Ezt úgy valósíthatjuk meg, hogy megváltoztatott a peremfeltételekhez tartozó energiasűrűségek δe különbségét tekintjük. Nevezetesen a szabad határfelület esetén mért $e_{\text{free}}(w)$ értékből kivonjuk a rögzített határfeltétel során kapott $e_{\text{fixed}}(w)$ értéket, mely az alábbiak szerint viselkedik

$$\delta e = \overline{\langle e_{\text{free}}(\zeta) \rangle} - \overline{\langle e_{\text{fixed}}(\zeta) \rangle} \propto \zeta^{-x_e}. \quad (5.30)$$

Ugyanis a két határfeltételnél a szinguláris rész együtthatója ellentétes előjelű [66, 15], míg a tömbi reguláris része együtthatója változatlan, ezért a különbség képzésekor ezen utóbbi tag kiesik.

5.4.2. A mérés eredménye

A Monte Carlo technikával végrehajtott mérés során különböző határfeltételekkel rendelkező négyzetrácsot tekintettünk. A Swendsen-Wang algoritmust használtuk, lásd 3.2.3



5.10. ábra. Az energiasűrűség konform profiljai különböző L rendszerméretés Δ rendezetlenség esetén. Az egyenesek az adatokra való lineáris illesztésből származnak.

szakasz, mivel ez sokkal hatékonyabbnak bizonyult rögzített határu modell estén a Wolff algoritmussal szemben. Három különböző rácsméreten ($L = 16, 32, 64$) vizsgáltunk három különböző erősséghez tartozó rendezetlenséget ($\Delta = 7, 9, 11$). Minden minta esetén $\tau_e = 5 \cdot 10^3$ Monte Carlo lépés megtétele után $\tau = 6 \cdot 10^4$ lépésre határoztuk meg a termikus átlagot. A vizsgált minták n_s száma mérettől függően változott, a legkisebb rendszernél $n_s = 2 \cdot 10^4$, a legnagyobbbanál $n_s = 2 \cdot 10^3$ volt.

A mágnesezettség profiljának mérésekor a felületi spineket $+1$ értékkel rögzítettünk. Az energiasűrűség szinguláris részének meghatározásához az (5.30) kifejezést használtuk oly módon, hogy ugyanazon mintákra tekintettük a két különböző határfeltételhez tartozó

5.2. táblázat. Az energiasűrűség x_e skálázási dimenziója, az 5.10 ábrán szereplő adatokra történő lineáris illesztés meredekségéből meghatározva.

L	$\Delta = 7$	$\Delta = 9$	$\Delta = 11$
16	1.5435(9)	1.5377(9)	1.5177(10)
32	1.5241(9)	1.5207(6)	1.5110(9)
64	1.5209(6)	1.5182(4)	1.5002(8)

5.3. táblázat. A modell mágnesezettség és az energia skálázási dimenziói, valamint a kritikus exponensei a skálatörvények felhasználásával, ahol β/ν , γ/ν az (5.23) míg $1/\nu$ az (5.24) egyenlet határozza meg.

x_m	0.1294(7)
x_e	1.5012(13)
α	-2.01(1)
β	0.2604(31)
γ	3.492(13)
δ	14.46(8)
ν	2.005(5)
η	0.2588(14)

profilokat.

A mérés eredményeként kapott görbék ζ függvényében log-log skálán az 5.9–5.10 ábrákon láthatók. A mágnesezettség sűrűség profiljainál erős korrekciók lépnek fel, azonban a redukált változó kis értékei miatt nem találtunk megbízható nem lineáris illesztés. A szaggatott vonallal jelzett görbe meredeksége a véges méret skálázás során az (5.23) egyenletben szereplő β/ν értéke. Ez azt mutatja, hogy aszimptotikusan a két eredmény összeér.

Az 5.10 ábrán látható energia profilok esetén gyenge korrekciók lépnek fel, így itt alkalmazható a lineáris illesztés x_e meghatározására. Az a pár pont, mely nem az egyenesen helyezkedik el kis ζ esetén jelentkezik. Ezek kizárólag a felülethez kapcsolódnak, és nem nagy súllyal bírnak az illesztéskor. Az 5.2 táblázatban az egyre nagyobb L rendszerméret és az egyre erősebb Δ rendezetlenség során meghatározott x_e értékeket tüntettük fel. Jól látható, hogy mind L , mind Δ növekedésével az energia skálázási dimenziója fokozatosan csökken.

5.5. Összefoglalás

Az általunk vizsgált kéttengelyű korrelált rendezetlenséggel bíró modell kritikus exponenseit az 5.3 táblázatban foglaltuk össze. A mágnesezettség skálázási dimenziója közvetlenül adódik a (5.23) egyenletből. Azonban γ/ν ismeretében a $\gamma/\nu = d - 2x_m$ skála törvény segítségével is kifejezhető, ekkor $x_m = 0.1291(10)$. A táblázatban a két érték közös konfidencia intervallumának közepe szerepel. Mivel ez közel van a tiszta kétdimenziós Ising modellhez tartozó $x_m = 1/8$ értékhez, így elmondható, hogy a két modellben a mágnesezettség majdnem ugyanolyan fraktáldimenzióval rendelkezik. Ez az oka annak, hogy az 5.3 a kritikus pontban az egyensúlyi állapotok azonos képet mutatnak. A mágnesezettség skálázási dimenziójából a skálatörvények segítségével kapjuk, hogy $\eta = 2x_m + 2 - d = 2x_m$ és $\delta = -1 + d/x_m$.

A korrelációs hossz ν kritikus exponensének értékét az (5.24) egyenlet segítségével határozhatjuk meg. Jól látható, hogy a numerikus becslés a hibahatáron belül összhangban van az $a = 1$ -hez tartozó Gauss-féle izotróp rendezetlenségre vonatkozóan az (5.2)

egyenletben leírtakkal. A fajhő α kritikus exponensét a Josephson törvény segítségével határozhatjuk meg, lásd a 2.2 táblázat. A rendezetlen és a tiszta rendszer ν exponense közötti különbség magyarázza, hogy az 5.3 ábrán a kritikus ponton kívüli tartományokban a kéttengelyű korrelált rendezetlenséghez tartozó klaszterméretek nagyobbak.

Az energiasűrűség x_e skálázási dimenziója az $x_e = d - 1/\nu$ egyenlet felhasználásával adódik. Összevetve az 5.2 táblázat eredményivel látható, hogy konform transzformáció után a kritikus profilok vizsgálatából hasonló eredményre jutottunk.

Összegezve eredményeinket, mely a [5] cikkben található meg, a négyzet rácson értelmezett Ising modellt vizsgáltuk kéttengelyű korrelált rendezetlenség jelenlétében. Az általunk választott parametrizáció miatt a rendszer önduális, így a kritikus pontja egzaktul meghatározható. A Harris kritérium értelmében az Ising modellbe bevezetett perturbáció releváns. A kritikus pontban kiterjedt Monte Carlo szimulációk segítségével meghatároztuk a rendszer kritikus exponenseit, melyek konzisztensek voltak egymással. A korrelációs hossz ν exponense megegyezik a Gauss féle izotróp korrelált rendezetlenség esetén vártnak, ugyanakkor a mágneszettség x_m skálázási dimenziója nincs messze a tiszta és a korrelálatlan rendezetlen rendszerhez tartozó értéktől.

6. fejezet

Csatolt modellek határfelülete

6.1. Bevezetés

Másodrendű átalakításoknál a korrelációs hossz végtelenbe tart. Emiatt mikroszkopikus inhomogenitások és véges méretű defektusok nem változtatják meg a rendszer kritikus viselkedését [23]. Más a helyzet amennyiben a rendezetlenség végtelen kiterjedésű, mint például felület jelenléte [17, 38, 89] vagy esetleg egy altéren végighúzódó defektus [22] esetén. Ekkor a rendszer lokális kritikus viselkedése a korrelációs hosszal karakterizált tartományban megváltozhat. Szokásos példa erre a mágnesezettség, amely a rendszer belsejében a fázisátalakulási pont felé haladva $m \sim (T_c - T)^\beta$ lecsengést követ, ugyanakkor a felületen $m_1 \sim (T_c - T)^{\beta_1}$ szerint változik, ahol a két kritikus exponens, β és β_1 , általában különböző.

Az inhomogenitásoknak több általános formája is van, úgymint sarkok [30, 9, 35, 1], szegélyek, parabolikus alakzatok [86] stb., melyek gyakran különleges kritikus viselkedést okoznak [58]. Előfordulhat, hogy a lokális exponensek néhány paramétertől függően folytonosan változnak, vagyis a lokális kritikus viselkedés nem univerzális.

Két különböző tömbi illetve felületi kritikus exponensekkel bíró rendszer összekapcsolása is inhomogenitást eredményez a határfelületen. Amennyiben a két alrendszer kritikus hőmérséklete lényegesen különbözik, akkor a határon a fázisátalakulása hasonlít a felületek viselkedéséhez [16]. Az alacsonyabb kritikus hőmérsékleten a határfelület rendezett marad, mivel az egyik alrendszer felülete még rendezett. Elérkezve a nagyobb kritikus hőmérsékletre mint ahogy az egész rendszerben, úgy a határon is megszűnik a rend. A jelenség a rendezett felületi átalakuláshoz hasonlít. Ugyanakkor kettőnél magasabb dimenzióban és elég erős kapcsolat esetén lehetséges egy határfelületi átalakulás. Ennek a kritikus viselkedése attól függ, hogy az összekapcsolt modellek mely univerzális osztályba tartoznak.

Kétdimenzióban a határfelület viselkedése sokkal összetettebb, ha a két alrendszer kritikus hőmérséklete egybeesik, vagy csak kis mértékben tér el. Ebben az esetben a két különböző alrendszer tömbi, illetve felületi kritikus tulajdonságainak versengése vagy kölcsönhatása a határfelület teljesen új típusú viselkedését eredményezheti. Ebben a fejezetben analitikusan és numerikusan is tanulmányozzuk az utóbb említett inhomogenitást.

6.2. Átlagtér elmélet

6.2.1. A φ^k modell tulajdonságai

Szabad energia

A Landau-féle átlagtér elmélet keretein belül, lásd 2.2.1 rész, a V térfogattal és az S felülettel rendelkező rendszert vizsgálunk. A teljes szabad energia a skalár mennyiségű $\varphi(\mathbf{r})$ rendparaméter függvénye, mely tömbi és felületi részre bontható [17, 38, 89]:

$$F[\varphi] = \int_{(V)} f_b[\varphi] dV + \int_{(S)} f_s[\varphi] dS. \quad (6.1)$$

A másodrendű fázisátalakulási pont környékén a rendparaméter értéke kicsi, ezért az $f_b[\varphi]$ tömbi szabadenergia sűrűségfüggvénye sorba fejthető. A sorfejtésben a rendparaméter gradiense mellett a következő tagokra szorítkozunk:

$$f_b[\varphi] = f_b[0] + \frac{C}{2}(\nabla\varphi)^2 + \frac{A}{2}\varphi^2 + \frac{B}{k}\varphi^k - h\varphi. \quad (6.2)$$

A pozitív együtthatójú, $C > 0$, második tag a rendparaméter térbeli változása miatt lép fel. A kritikus pont alatt, $T < T_c$, a negatív A a kritikus ponttól való távolságot méri, $A = -at$ ($a > 0$, $t = T_c - T$). A következő tag, $B > 0$ feltétel mellett biztosítja a rendszer stabilitását a rendezett fázisban. Az utolsó tag a külső mágneses teret jelöli. Amennyiben k páratlan a rendparaméter csak nem negatív értéket vehet fel, különben a rendszer instabillá válik.

A fentiekhez hasonló módon a felülethez tartozó szabadenergia sűrűségfüggvénye az alábbiak szerint írható

$$f_s[\varphi] = f_s[0] + \frac{C_s}{2} \frac{\varphi^2}{\Lambda}, \quad (6.3)$$

ahol φ a rendparaméter értéke az S felületen, lásd 2.3.2 szakasz. A C_s konstans pozitív, a Λ az extrapolációs hossz, mely a rendszer mikroszkopikus Hamilton operátorában a tömbi és felületi kötéseikkel áll kapcsolatban [17].

Ginzburg-Landau egyenlet

Az átlagtér elméletben a rendparaméter egyensúlyi értéke, $\varphi(\mathbf{r})$, minimalizálja a (6.1) egyenlettel kifejezett teljes szabadenergiát. Emiatt a szabadenergia $\delta F[\varphi]$ változása nullát eredményez, amennyiben a rendparamétert az egyensúlyi értékétől egy kis $\delta\varphi(\mathbf{r})$ értékkel eltérítjük és ezen változó szerint első hatványig sorba fejtjük. A (6.1–6.3) egyenleteket használva a következő adódik:

$$\delta F[\varphi] = \int_{(V)} [C\nabla\varphi \cdot \nabla\delta\varphi + (A\varphi + B\varphi^{k-1} - h)\delta\varphi] dV + \int_{(S)} \left(C_s \frac{\varphi}{\Lambda}\right) \delta\varphi dS. \quad (6.4)$$

A térfogat integrálban az első tagot a következő azonosság szerint átalakíthatjuk

$$C\nabla\varphi \cdot \nabla\delta\varphi = \nabla \cdot (C\delta\varphi\nabla\varphi) - C\delta\varphi\nabla^2\varphi \quad (6.5)$$

és Gauss tételét alkalmazva az első részt felületi integrálként írhatjuk fel. Ekkor a szabadenergia változása

$$\delta F[\varphi] = \int_{(V)} (-C\nabla^2\varphi + A\varphi + B\varphi^{k-1} - h)\delta\varphi dV + \int_{(S)} \left(-C\mathbf{n} \cdot \nabla\varphi + C_s \frac{\varphi}{\Lambda}\right) \delta\varphi dS, \quad (6.6)$$

ahol $\mathbf{n}$ a felülettől a rendszer belseje felé mutató egységvektor. Egyensúly esetén a teljes szabadenergia elsőrendű változása eltűnik, ezért a fenti egyenletben a térfogatintegrál az alábbi Ginzburg-Landau egyenlethez vezet

$$-C\nabla^2\varphi(\mathbf{r}) + A\varphi(\mathbf{r}) + B\varphi^{k-1}(\mathbf{r}) = h(\mathbf{r}), \quad (6.7)$$

amely a rendparaméter tömbi viselkedését határozza meg. A felületi integrál az alábbi peremfeltételt szolgáltatja a rendparaméter határon lévő profiljára:

$$C\mathbf{n} \cdot \nabla\varphi(\mathbf{r})|_{(S)} = C_s \frac{\varphi(\mathbf{r})}{\Lambda} \Big|_{(S)}. \quad (6.8)$$

Tömbi kritikus viselkedés

Mivel a felülettől távol a rendszert homogénnek tekintjük, ezért a (6.7) egyenlet első tagja nem jelenik meg amennyiben a tömbi viselkedést analizáljuk. A kritikus pont felett, külső tér hiányában a mágnesezettség eltűnik, ugyanakkor a rendezett fázisban, ($T \leq T_c$, $h = 0$), az alábbiak szerint változik

$$\varphi_b = \left(\frac{at}{B}\right)^\beta = \varphi_0 t^\beta, \quad \beta = \frac{1}{k-2}. \quad (6.9)$$

A tömbi viselkedéshez tartozó Ginzburg-Landau egyenletet megoldva határozhatjuk meg a összekapcsolt korrelációs függvényt

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = k_B T \frac{\delta\varphi(\mathbf{r})}{\delta h(\mathbf{r}')} \quad (6.10)$$

ahol $\varphi(\mathbf{r})$ a rendparaméter egyensúlyi értéke. A 6.7 egyenlet funkcionális deriváltját tekintve a következőt kapjuk

$$-C\nabla_{\mathbf{r}}^2 G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') + [A + (k-1)B\varphi_b^{k-2}]G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = k_B T \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (6.11)$$

Átrendezve adódik, hogy

$$(-\nabla_{\mathbf{r}}^2 + \xi^{-2})G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{k_B T}{C} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad (6.12)$$

ahol a ξ tömbi korrelációs hosszt a rendezett fázisban a (6.9) és (6.11) egyenletek felhasználásával fejezhetjük ki

$$\xi = \left[(k-2)\frac{at}{C}\right]^{-\nu} = \xi_0 t^{-\nu}, \quad \nu = \frac{1}{2}, \quad (6.13)$$

Rendparaméter profilok

A továbbiakban fésíkokat vizsgálunk, azaz számításaink során mindig feltételezzük, hogy a rendszerhez tartozó felület a $z = 0$ helyen található. A profilokat a $\varphi = \varphi(z)$ koordinátázással írjuk le. A $\hat{\varphi} = \varphi/\varphi_b$ normálást bevezetve a (6.7), (6.9) és (6.13) egyenleteket használva a rendparaméter profilját a következő differenciál egyenlet megoldásából határozhatjuk meg

$$\frac{d^2 \hat{\varphi}}{dz^2} = \frac{A}{C} \hat{\varphi} + \frac{B}{C} \varphi_b^{k-2} \hat{\varphi}^{k-1} = \frac{\hat{\varphi}^{k-1} - \hat{\varphi}}{(k-2) \xi^2}. \quad (6.14)$$

Mindkét oldalt $2d\hat{\varphi}/dz$ szorozva és figyelembevéve, hogy a rendszer belsejében $d\hat{\varphi}/dz \rightarrow 0$, amennyiben $\hat{\varphi} \rightarrow 1$, fenti differenciál egyenlet első integrálja az alábbi egyenlethez vezet

$$\left(\frac{d\hat{\varphi}}{dz} \right)^2 = \frac{2\hat{\varphi}^k - k\hat{\varphi}^2 + k - 2}{k(k-2) \xi^2}. \quad (6.15)$$

A továbblépésnél már számításba kell venni k konkrét értékét. Nem szabad elfelejtkezni a felület által meghatározott peremfeltételről sem. Hiszen a felület lehet rendezettebb, ($\hat{\varphi}(0) > 1$), vagy kevésbé rendezettebb, ($\hat{\varphi}(0) < 1$), mint a rendszer belseje. Az alábbiakban felsoroljuk a (6.15) egyenlet különböző megoldásait, amelyekre a későbbiek során lesz szükségünk. A $\hat{\varphi}_+(z)$ ($\hat{\varphi}_-(z)$) jelölést használjuk abban az esetben, amikor a rendszer a $z > 0$ ($z < 0$) koordinátákkal jellemzett fésíkban helyezkedik el. Az l_+ (l_-) integrációs konstans a $z = 0$ peremfeltétel segítségével határozhatjuk meg.

- φ^3 model, $\hat{\varphi}(0) > 1$:

$$\begin{aligned} \hat{\varphi}_{\pm}(z) &= \frac{1}{2} \left[3 \coth^2 \left(\frac{z \pm l_{\pm}}{2\xi_{\pm}} \right) - 1 \right], \\ \frac{d\hat{\varphi}_{\pm}}{dz} \Big|_0 &= \mp \frac{3}{2\xi_{\pm}} \cosh \left(\frac{l_{\pm}}{2\xi_{\pm}} \right) \sinh^{-3} \left(\frac{l_{\pm}}{2\xi_{\pm}} \right). \end{aligned} \quad (6.16)$$

- φ^3 model, $\hat{\varphi}(0) < 1$:

$$\begin{aligned} \hat{\varphi}_{\pm}(z) &= \frac{1}{2} \left[3 \tanh^2 \left(\frac{z \pm l_{\pm}}{2\xi_{\pm}} \right) - 1 \right], \\ \frac{d\hat{\varphi}_{\pm}}{dz} \Big|_0 &= \pm \frac{3}{2\xi_{\pm}} \sinh \left(\frac{l_{\pm}}{2\xi_{\pm}} \right) \cosh^{-3} \left(\frac{l_{\pm}}{2\xi_{\pm}} \right). \end{aligned} \quad (6.17)$$

- φ^4 model, $\hat{\varphi}(0) > 1$:

$$\begin{aligned} \hat{\varphi}_{\pm}(z) &= \pm \coth \left(\frac{z \pm l_{\pm}}{2\xi_{\pm}} \right), \\ \frac{d\hat{\varphi}_{\pm}}{dz} \Big|_0 &= \mp \frac{1}{2\xi_{\pm}} \sinh^{-2} \left(\frac{l_{\pm}}{2\xi_{\pm}} \right). \end{aligned} \quad (6.18)$$

- φ^4 model, $\hat{\varphi}(0) < 1$:

$$\begin{aligned}\hat{\varphi}_{\pm}(z) &= \pm \tanh\left(\frac{z \pm l_{\pm}}{2\xi_{\pm}}\right), \\ \frac{d\hat{\varphi}_{\pm}}{dz}\Big|_0 &= \pm \frac{1}{2\xi_{\pm}} \cosh^{-2}\left(\frac{l_{\pm}}{2\xi_{\pm}}\right).\end{aligned}\quad (6.19)$$

- φ^6 model, $\hat{\varphi}(0) > 1$:

$$\begin{aligned}\hat{\varphi}_{\pm}(z) &= \sqrt{2} \left[3 \tanh^2\left(\frac{z \pm l_{\pm}}{2\xi_{\pm}}\right) - 1 \right]^{-1/2}, \\ \frac{d\hat{\varphi}_{\pm}}{dz}\Big|_0 &= \mp \frac{3\sqrt{2}}{2\xi_{\pm}} \sinh\left(\frac{l_{\pm}}{2\xi_{\pm}}\right) \cosh^{-3}\left(\frac{l_{\pm}}{2\xi_{\pm}}\right) \\ &\quad \times \left[3 \tanh^2\left(\frac{l_{\pm}}{2\xi_{\pm}}\right) - 1 \right]^{-3/2}.\end{aligned}\quad (6.20)$$

- φ^6 model, $\hat{\varphi}(0) < 1$:

$$\begin{aligned}\hat{\varphi}_{\pm}(z) &= \pm \sinh\left(\frac{z \pm l_{\pm}}{2\xi_{\pm}}\right) \left[\sinh^2\left(\frac{z \pm l_{\pm}}{2\xi_{\pm}}\right) + \frac{3}{2} \right]^{-1/2}, \\ \frac{d\hat{\varphi}_{\pm}}{dz}\Big|_0 &= \pm \frac{3}{4\xi_{\pm}} \cosh\left(\frac{l_{\pm}}{2\xi_{\pm}}\right) \left[\sinh^2\left(\frac{l_{\pm}}{2\xi_{\pm}}\right) + \frac{3}{2} \right]^{-3/2}.\end{aligned}\quad (6.21)$$

6.2.2. Felületek kritikus viselkedése

A továbbiakban áttekintjük a felület kritikus viselkedését, vö 2.3.2 szakasz. Mindvégig feltételezzük, hogy a rendszer a rendezet fázisában van, ($T \leq T_c$), és a pozitív félsíkban helyezkedik el, $z > 0$. Ezért itt nem alkalmazunk a korábban bevezetett kettős jelölést, elhagyjuk a $+$ indexet, azaz például $\varphi(z)$ -t használunk $\varphi_+(z)$ helyett. Ezen geometria esetén a (6.8) peremfeltétel egyszerűsödik

$$C_s \frac{\hat{\varphi}(0)}{\Lambda} = C \frac{d\hat{\varphi}}{dz}\Big|_0. \quad (6.22)$$

Az alábbiakban ismertetjük az l integrációs konstanst, valamint a rendparaméter $\varphi(0)$ értékét.

A φ^3 modellhez tartozó felület

- $\Lambda < 0$:

Ekkor rendkívüli felületi átalakulásnak lehetünk tanúi, azaz a felület rendezett marad a tömbi kritikus pontban. A rendparaméter profilját a (6.16) egyenlet írja le. Mivel a korrelációs hossz a kritikus pontba végtelenbe tart, ezért $l/\xi \ll 1$. Az l

integrációs konstans a (6.22) egyenlet mindkét oldalának l/ξ szerinti sorfejtéséből határozható meg, a vezető rendig tekintve adódik, hogy

$$l = 2 \frac{C}{C_s} |\Lambda| \quad (6.23)$$

és

$$\varphi(0) = \frac{3}{2} \left(\frac{C_s \xi_0}{C |\Lambda|} \right)^2 \varphi_0. \quad (6.24)$$

- $\Lambda > 0$:

Ebben az esetben a rendparaméter értéke kisebb a felületen, mint a rendszer belsejében. Mindamellett ugyanazon T_c hőmérsékleten jelenik meg a rend az egész rendszerben, vagyis rendes felületi átalakulással van dolgunk. A profilt a (6.17) egyenlettel jellemezhetjük, ahol azzal a feltevessel éltünk, hogy l/ξ konstans. A részletes számolások megtalálhatók a [6] cikkben. A (6.22) egyenletben megfogalmazott peremfeltétel teljesül, amennyiben

$$l = 2 \tanh^{-1} \left(\frac{1}{\sqrt{3}} \right) \xi_0 t^{-1/2} \quad (6.25)$$

és így:

$$\varphi(0) = \frac{1}{\sqrt{3}} \frac{C \Lambda}{C_s \xi_0} \varphi_0 t^{3/2}. \quad (6.26)$$

A rendparaméter felületi exponense, $\beta_1 = 3/2$, nagyobb a tömbi exponensnél, $\beta = 1$.

- $\Lambda \rightarrow \infty$:

Ekkor a profilt az $l \rightarrow \infty$ feltétel mellett egyaránt meghatározza a (6.16) és a (6.17) egyenlet. A rendparaméter konstans, azaz értéke a rendszer belsejétől haladva a felületig változatlan, $\varphi(0) = \varphi_b = \varphi_0 t$. Ezen a speciális felületi átalakuláson egyazon hőmérsékleten jelenik meg a rend mindenhol a rendszerben, továbbá a rendparaméter felületi és tömbi kritikus exponense is megegyezik.

A φ^4 modellhez tartozó felület

- $\Lambda < 0$:

Ahogy az előző részben már láttuk, ekkor a felület rendezettebb, és fázisátalakuláshoz tartozó kritikus hőmérséklet magasabb a tömbinél. A rendparaméter profilját a (6.22) egyenlet határozza meg. Az integrációs konstansra a (6.22) egyenlet által megkövetelt $l/\xi \ll 1$ feltételt figyelembevéve adódik, hogy

$$l = \frac{C}{C_s} |\Lambda|. \quad (6.27)$$

A rendparaméter felülethez kapcsolódó vezető részére az alábbiakat kapjuk

$$\varphi(0) = 2 \frac{C_s \xi_0}{C |\Lambda|} \varphi_0. \quad (6.28)$$

- $\Lambda > 0$:

Ekkor a rendes felületi átalakulásnál a rendszer profilját a (6.19) egyenlettel írhatjuk le. Amennyiben $l/\xi \ll 1$ a peremfeltétel teljesül, és így

$$l = \frac{C}{C_s} \Lambda. \quad (6.29)$$

A felületen a rendparaméter a kritikus pont közelében az alábbiak szerint viselkedik

$$\varphi(0) = \frac{1}{2} \frac{C\Lambda}{C_s \xi_0} \varphi_0 t. \quad (6.30)$$

Ebből megint az adódik, hogy a felületi exponens, $\beta_1 = 1$, nagyobb a tömbi exponensnek a (6.14) egyenletben meghatározott értéknél, $\beta = 1/2$.

- $\Lambda \rightarrow \infty$:

Itt a (6.22) határfeltétel miatt az integrációs konstans a végtelenbe tart, $l \rightarrow \infty$. A speciális átalakulás során mind a felületen, mind a rendszer belsejében ugyanakkora a rendparaméter értéke, $\varphi(0) = \varphi_0 t^{1/2}$.

A φ^6 modellhez tartozó felület

- $\Lambda < 0$:

A rendkívüli felületi átalakulás során a profilt a (6.20) egyenlet írja le. Ebben az esetben a (6.22) határfeltétel akkor teljesül, ha az l/ξ hányados konstans értéket vesz fel, ami a következőkhöz vezet

$$l = 2 \tanh^{-1} \left(\frac{1}{\sqrt{3}} \right) \xi_0 t^{-1/2} \quad (6.31)$$

Ebből meghatározhatjuk a rendparaméter felületi viselkedését

$$\varphi(0) = \left(2\sqrt{3} \frac{C_s \xi_0}{C|\Lambda|} \right)^{1/2} \varphi_0. \quad (6.32)$$

- $\Lambda > 0$:

Miként a korábbi esetekben is láttuk rendes felületi átalakulás zajlik le. A rendparaméter profilját (6.21) határozza meg. A peremfeltétel abban az esetben teljesül, amennyiben $l/\xi \ll 1$. Ekkor az adódik, hogy

$$l = \frac{C}{C_s} \Lambda. \quad (6.33)$$

A felületen a kritikus pont közelében a rendparaméter a tömbi $\beta = 1/4$ exponenshez képest $\beta_1 = 3/4$ exponenssel változik,

$$\varphi(0) = \frac{1}{\sqrt{6}} \frac{C\Lambda}{C_s \xi_0} \varphi_0 t^{3/4}. \quad (6.34)$$

- $\Lambda \rightarrow \infty$:

Ahogy a többi modellnél, itt is speciális átalakulás van, l végtelen, valamint a felület ugyanúgy viselkedik, mind a rendszer belseje, $\varphi(0) = \varphi_0 t^{1/4}$.

Jól látható, hogy a karakterisztikus hossz különböző értékei mellett a rendparaméter β_1 felületi és β tömbi kritikus exponensei között az alábbi összefüggések lépnek fel:

$$\beta_1 = \beta + \nu \quad (\text{rendes átalakulás}), \quad (6.35)$$

$$\beta_1 = \beta \quad (\text{speciális átalakulás}). \quad (6.36)$$

Ezen skálázási relációk azonban csak az átlagtér elmélet keretein belül maradnak igazak [17].

6.2.3. Határfelületek kritikus viselkedése

Ebben a részben két különböző univerzális osztályba tartozó rendszer összekapcsolása során létrejövő határfelület kritikus viselkedését analizáljuk a rendezett fázisban, $T \leq T_c$. Éppen ezért a két alrendszer szabadenergia sűrűségét a (6.2) egyenletben más-más k határozza meg. Maga a határfelület a $z = 0$ koordinátán valósul meg, és az összekapcsolás az alábbi tagot jeleni az szabadenergia sűrűségfüggvényében:

$$f_i[\varphi] = f_i[0] + \frac{C_i \varphi^2}{2 \Lambda}. \quad (6.37)$$

Számításaink során azzal a feltevéssel élünk, hogy a pozitív féltérben azon alrendszer helyezkedik el, amely belsejében a kritikus pont alatt nagyobb rend uralkodik, azaz $\beta^+ < \beta^-$. A rendparaméter profiloknak, $z > 0$ esetén $\varphi_+(z)$ -nek valamint $z < 0$ esetén $\varphi_-(z)$ -nek, eleget kell tenniük az alábbi egyenleteknek:

$$\begin{aligned} \varphi(0) &= \varphi_+(0) = \varphi_-(0), \\ C_i \frac{\varphi(0)}{\Lambda} &= C_+ \left. \frac{d\varphi_+}{dz} \right|_0 - C_- \left. \frac{d\varphi_-}{dz} \right|_0. \end{aligned} \quad (6.38)$$

A fenti határfeltételek a (6.22) egyenletnek az összekapcsolásra vonatkozó általánosításai. A megfelelő deriváltak az adott alrendszer felületi integráljához kapcsolódnak.

Amikor két alrendszert összekapcsolunk a (6.38) egyenletben szereplő határfeltételek határozzák meg az $l_{\pm}$ integrációs konstansok értékét, és ezáltal a teljes rendparaméter profilját. A továbbiakban különböző univerzális osztályok mellett ismertetjük az integrációs konstansokat valamint a rendparaméter határfelülethez tartozó értékét. A számítások technikai részletei megtalálható a [6] cikkben.

Ahogy a felületeknél is láttuk a Λ karakterisztikus hossz értéke határozza meg a kritikus viselkedését. Amennyiben Λ negatív a határfelület rendezett marad a tömbi kritikus pont elérésekor, ekkor rendkívüli határfelületi átalakulásról beszélünk. Ha kettőnél magasabb dimenziójú rendszert tekintünk, $d > 2$, akkor a tömbi kritikus hőmérséklet felett a felületen jelenlévő rend egy Λ -tól függő hőmérsékletig megmarad. Ezen átalakulást, mely

mindig megjelenik az átlagtér elmélet keretein belül, azonban nem vizsgáljuk. Amennyiben Λ pozitív a határfelületen a rend a tömbi kritikus pontban t hatványa szerint tűnik el, ezt az esetet rendes határfelületi átalakulásnak nevezzük. A fentebb említett két átalakulás a $(T, 1/\Lambda)$ fázisdiagramban a $T = T_c$, $1/\Lambda = 0$ pontban találkozhat össze, ekkor speciális határfelületi átalakulásról beszélünk, lásd 2.5 ábra.

A $\varphi^3 - \varphi^4$ határfelület

- $\Lambda < 0$:

Ekkor a két alrendszer erős csatolással kapcsolódik össze. Mindkét alrendszerben a rendparaméter növekszik a határfelület felé haladva, így a $\varphi_-(z)$ -t a (6.16), míg $\varphi_+(z)$ -t a (6.18) egyenlet jellemzi. Az integrációs konstansokra az alábbiakat kapjuk

$$\begin{aligned} l_- &= f \frac{C_-}{C_i} |\Lambda|, \\ l_+ &= \frac{1}{3} \frac{\varphi_0^+}{\varphi_0^-} \left(f \frac{C_- \Lambda}{C_i \xi_0^-} \right)^2 \xi_0^+, \end{aligned} \quad (6.39)$$

ahol

$$f = 1 + \sqrt{1 + 3 \frac{\Lambda^*}{|\Lambda|}}, \quad \Lambda^* = \frac{C_+ C_i \varphi_0^- (\xi_0^-)^2}{C_-^2 \varphi_0^+ \xi_0^+}. \quad (6.40)$$

A rendparaméter domináns része a határfelületen

$$\varphi(0) = 6 \left(\frac{1}{f} \frac{C_i \xi_0^-}{C_- \Lambda} \right)^2 \varphi_0^-, \quad (6.41)$$

nem tartalmazza a t redukált hőmérsékletet, így a határfelület rendezett marad a tömbi kritikus pontban. A (6.40) és (6.41) formulák felhasználásával meghatározhatjuk a $|\Lambda|$ -ban való aszimptotikus viselkedést

$$\varphi(0) \propto \begin{cases} |\Lambda|^{-2} & |\Lambda| \gg \Lambda^* \\ |\Lambda|^{-1} & |\Lambda| \ll \Lambda^* \end{cases} \quad (6.42)$$

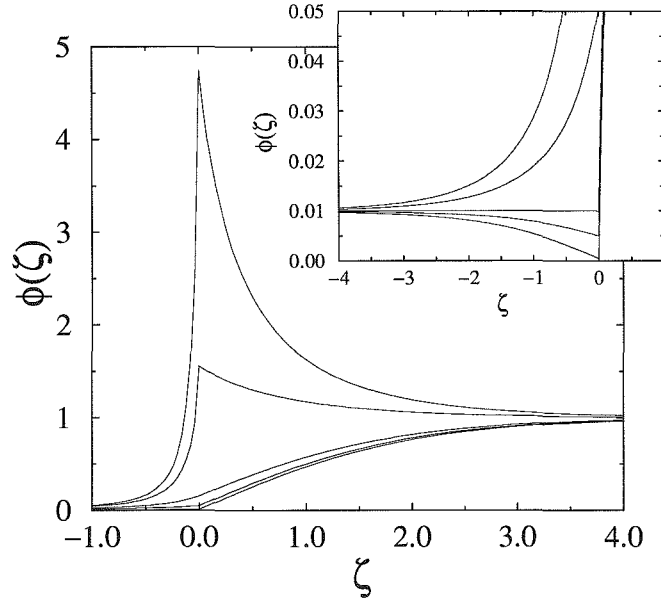
- $\Lambda > 0$:

Ebben az esetben a két alrendszer gyengén kapcsolódik össze. Amennyiben

$$0 < \Lambda < \Lambda_c = 2 \frac{C_i \varphi_0^-}{C_+ \varphi_0^+} \xi_0^+, \quad (6.43)$$

a rendparaméter a határfelület felé haladva fokozatosan csökken, és így $\varphi_-(z)$ -t a (6.17), míg $\varphi_+(z)$ -t a (6.19) egyenlet írja le, ahol

$$\begin{aligned} l_- &= 2 \tanh^{-1} \left(\sqrt{\frac{1 + 2\Lambda/\Lambda_c}{3}} \right) \xi_0^- t^{-1/2}, \\ l_+ &= \frac{C_+}{C_i} \Lambda. \end{aligned} \quad (6.44)$$



6.1. ábra. A $\varphi^3 - \varphi^4$ határfelületen a $\phi = \varphi(z)/\varphi_b^+$ redukált rendparaméter profilja $\zeta = z/\xi_+$ függvényében különböző $\lambda = \Lambda/\xi_0^+$ értékeknél, ahol fentről lefelé haladva $1/\lambda = -0.2, -0.1, 0, 0.1, 0.5$. A belső ábrában a $\lambda \geq 0$ és $\zeta < 0$ eset van kinagyítva, ismét csak fentről lefelé haladva $1/\lambda = 0, 0.1, 0.5, 1$ és 10 . Mindkét alrendszerben minden más paraméter ugyanaz: $C_+ = C_- = C_i$, $\varphi_0^+ = \varphi_0^-$, $\xi_0^+ = \xi_0^-$ valamint $t = 10^{-4}$.

Ha $\Lambda = \Lambda_c$, akkor l_- divergál, aminek következményeként $\varphi_-(z)$ konstans és minden $z \leq 0$ -ra a tömbi értéket veszi fel.

Amennyiben $\Lambda_c < \Lambda < \infty$, $\varphi_+(z)$ -t még mindig a (6.19) egyenlet határozza meg, és l_+ is tartja a (6.44)-ben leírt értékét. Azonban $\varphi_-(z)$ a határfelület felé haladva növekszik és így (6.16) egyenlettel jellemezhetjük, ahol

$$l_- = 2 \coth^{-1} \left(\sqrt{\frac{1 + 2\Lambda/\Lambda_c}{3}} \right) \xi_0^- t^{-1/2}. \quad (6.45)$$

A rendparaméter a határon $0 < \Lambda < \infty$ esetben egyazon egyenlet írja le

$$\varphi(0) = \frac{1}{2} \frac{C_+ \Lambda}{C_i \xi_0^+} \varphi_0^+ t. \quad (6.46)$$

- $\Lambda \rightarrow \infty$:

A profil monoton módon növekszik, és ugyanazon egyenletekkel jellemezhető, mint

az előbb $\Lambda > \Lambda_c$ esetben, noha most az integrációs konstansok értéke változik

$$\begin{aligned} l_- &= 2 \left(3 \frac{C_- \varphi_0^-}{C_+ \varphi_0^+} \xi_0^+ \right)^{1/3} (\xi_0^-)^{2/3} t^{-1/3}, \\ l_+ &= \left(3 \frac{\varphi_0^-}{\varphi_0^+} \xi_0^+ \right)^{1/3} \left(\frac{C_+}{C_-} \xi_0^- \right)^{2/3} t^{-1/3}, \end{aligned} \quad (6.47)$$

és így:

$$\varphi(0) = \frac{1}{2} (3\varphi_0^-)^{1/3} \left(\frac{C_+ \xi_0^-}{C_- \xi_0^+} \varphi_0^+ \right)^{2/3} t^{2/3}. \quad (6.48)$$

A $\varphi^4 - \varphi^6$ határfelület

- $\Lambda < 0$:

A határfelület sokkal rendezettebb mint az alrendszerek belseje, ezért $\varphi_-(z)$ -t a (6.18), míg $\varphi_+(z)$ -t a (6.20) kifejezésekkel jellemezhetjük. Ezekben az integrációs konstansok a következőképpen néznek ki

$$\begin{aligned} l_- &= \frac{f C_-}{2 C_i} |\Lambda|, \\ l_+ &= 2 \left[\tanh^{-1} \left(\frac{1}{\sqrt{3}} \right) + h(t) \right] \xi_0^+ t^{-1/2}, \\ h(t) &= \frac{\sqrt{3}}{32} \left(\frac{C_- \varphi_0^+ |\Lambda|}{C_i \varphi_0^- \xi_0^-} f \right)^2 t^{1/2}, \end{aligned} \quad (6.49)$$

ahol

$$f = 1 + \sqrt{1 + \frac{8}{\sqrt{3}} \frac{\Lambda^*}{|\Lambda|}}, \quad \Lambda^* = \frac{C_i C_+ (\varphi_0^- \xi_0^-)^2}{(C_- \varphi_0^+)^2 \xi_0^+} \quad (6.50)$$

Itt és a későbbiekben a (6.57) formula esetén $h(t)$ a második vezető hatványig tekintettük l_+ -ban. Erre azért van szükség, hogy a határon a profil formáját meg tudjuk határozni $z = \text{környékén}$. A határon a rendparaméter domináns része konstans

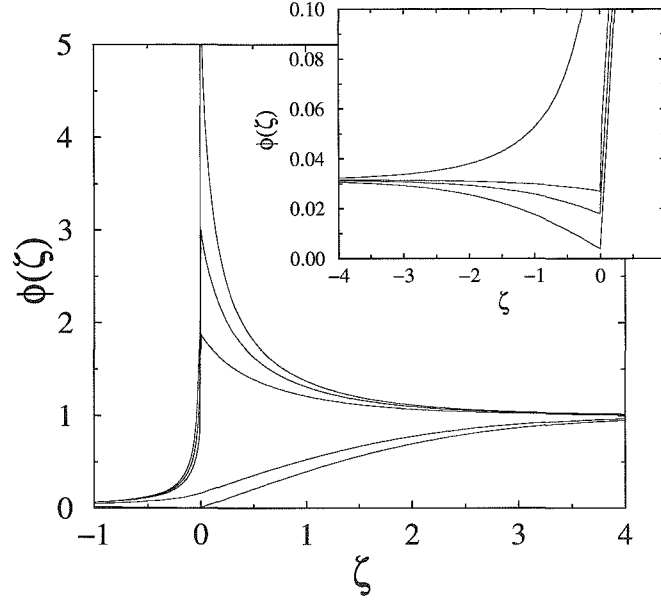
$$\varphi(0) = \frac{4}{f} \frac{C_i \xi_0^-}{C_- |\Lambda|} \varphi_0^-. \quad (6.51)$$

Λ -ban az aszimptotikus tulajdonságát a (6.50) és a (6.51) egyenletek segítségével határozhatjuk meg

$$\varphi(0) \propto \begin{cases} |\Lambda|^{-1} & |\Lambda| \gg \Lambda^* \\ |\Lambda|^{-1/2} & |\Lambda| \ll \Lambda^* \end{cases}, \quad (6.52)$$

- $\Lambda > 0$:

A rendparaméter értéke bármelyik alrendszer felől közelítve is meg a határfelületet csökkenést mutat. Ezért a profil $\varphi_-(z)$ részét a (6.19), $\varphi_+(z)$ szakaszát pedig a



6.2. ábra. A $\varphi^4 - \varphi^6$ határfelületen a $\phi = \varphi(z)/\varphi_b^+$ redukált rendparaméter profilja $\zeta = z/\xi_+$ függvényében különböző $\lambda = \Lambda/\xi_0^+$ értékeknél, ahol fentről lefelé haladva $1/\lambda = -0.1, -0.05, -0.03, 0, 0.1$. A belső ábrában a $\lambda \geq 0$ és $\zeta < 0$ eset van kinagyítva, ismét csak fentről lefelé haladva $1/\lambda = 0, 0.01, 0.02$, valamint 0.1 . Mindkét alrendszerben minden más paraméter ugyanaz és a redukált hőmérséklet $t = 10^{-6}$.

(6.21) formula segítségével jellemezhetjük, ahol az integrációs konstansokra az alábbi értékek adódnak:

$$\begin{aligned} l_- &= \sqrt{\frac{2}{3}} \frac{C_+ \varphi_0^+ \xi_0^-}{C_i \varphi_0^- \xi_0^+} \Lambda t^{-1/4}, \\ l_+ &= \frac{C_+}{C_i} \Lambda. \end{aligned} \quad (6.53)$$

Az összekapcsolásnál a rendparaméter a következő egyenlet szerint viselkedik

$$\varphi(0) = \frac{1}{\sqrt{6}} \frac{C_+ \Lambda}{C_i \xi_0^+} \varphi_0^+ t^{3/4}. \quad (6.54)$$

• $\Lambda \rightarrow \infty$:

Ebben az esetben, ahogy már korábban is láttuk, a profil monoton növekedést mutat. Az alábbi konstansokat figyelembevéve $\varphi_-(z)$ -t a (6.18), míg $\varphi_+(z)$ -t a (6.21) egyenletekkel írhatjuk le.

$$\begin{aligned} l_- &= \left(2\sqrt{6} \frac{C_- \varphi_0^-}{C_+ \varphi_0^+} \xi_0^- \xi_0^+ \right)^{1/2} t^{-3/8}, \\ l_+ &= \left(2\sqrt{6} \frac{C_+ \varphi_0^-}{C_- \varphi_0^+} \xi_0^- \xi_0^+ \right)^{1/2} t^{-3/8} \end{aligned} \quad (6.55)$$

A határon a rendparaméter az alábbiak szerint tűnik el

$$\varphi(0) = \left(\sqrt{\frac{2}{3}} \frac{C_+ \xi_0^-}{C_- \xi_0^+} \varphi_0^- \varphi_0^+ \right)^{1/2} t^{3/8}. \quad (6.56)$$

A $\varphi^3 - \varphi^6$ határfelület

- $\Lambda < 0$:

Szokásos módon ebben az esetben a határ rendezett marad az alrendszerek tömbi kritikus pontjában. Éppen ezért a teljes profilt a $\varphi_-(z)$ -t jellemző (6.16) és a $\varphi_+(z)$ -t determináló (6.20) egyenletek segítségével kapjuk meg (6.20). Az l_- meghatározásához egy negyedfokú egyenletet kell vizsgálni. Az alábbiakban csak Λ határeseiteiben közöljük a megoldást

$$\begin{aligned} l_- &\sim 2 \frac{C_-}{C_i} |\Lambda|, & |\Lambda| \gg \Lambda^*, \\ l_- &\sim \left(2\sqrt{27} \frac{C_+ |\Lambda|}{C_i \xi_0^+} \right)^{1/4} \left(\frac{\varphi_0^-}{\varphi_0^+} \right)^{1/2} \xi_0^-, & |\Lambda| \ll \Lambda^*, \\ l_+ &= 2 \left[\tanh^{-1} \left(\frac{1}{\sqrt{3}} \right) + h(t) \right] \xi_0^+ t^{-1/2}, \\ h(t) &= \frac{2\sqrt{3}}{9} \left(\frac{C_- |\Lambda|}{C_i \xi_0^-} \right)^4 \left(\frac{\varphi_0^+}{\varphi_0^-} \right)^2 t^{1/2}, & |\Lambda| \gg \Lambda^*, \\ h(t) &= \frac{1}{4} \frac{C_+ |\Lambda|}{C_i \xi_0^+} t^{1/2}, & |\Lambda| \ll \Lambda^*. \end{aligned} \quad (6.57)$$

A crossover a következő értéknél zajlik le

$$\Lambda^* = C_i \left(\frac{\varphi_0^-}{\varphi_0^+} \right)^{2/3} \left(\frac{C_+}{\xi_0^+} \right)^{1/3} \left(\frac{\xi_0^-}{C_-} \right)^{4/3}. \quad (6.58)$$

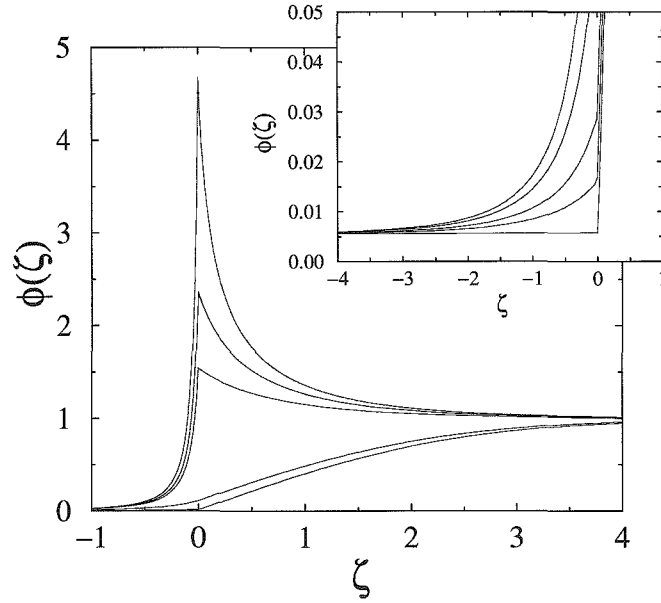
A két határesetben a felületi rendparaméter viselkedés:

$$\begin{aligned} \varphi(0) &\sim \frac{3}{2} \left(\frac{C_i \xi_0^-}{C_- \Lambda} \right)^2 \varphi_0^-, & |\Lambda| \gg \Lambda^*, \\ \varphi(0) &\sim \left(2\sqrt{3} \frac{C_i \xi_0^+}{C_+ |\Lambda|} \right)^{1/2} \varphi_0^+, & |\Lambda| \ll \Lambda^*, \end{aligned} \quad (6.59)$$

- $\Lambda > 0$:

A rendparaméter profilja monoton növekedést mutat, $\varphi_-(z)$ -t és $\varphi_+(z)$ -t a (6.16) és a (6.21) egyenletek határozzák meg a következő integrációs konstansokkal

$$\begin{aligned} l_- &= \left(6\sqrt{6} \frac{C_i \varphi_0^- \xi_0^+}{C_+ \varphi_0^+ \Lambda} \right)^{1/2} \xi_0^- t^{-3/8}, \\ l_+ &= \frac{C_+}{C_i} \Lambda. \end{aligned} \quad (6.60)$$



6.3. ábra. A $\varphi^3 - \varphi^6$ határfelületen a $\phi = \varphi(z)/\varphi_b^+$ redukált rendparaméter profilja $\zeta = z/\xi_+$ függvényében különböző $\lambda = \Lambda/\xi_0^+$ értékeknél, ahol fentről lefelé haladva $1/\lambda = -0.2, -0.05, -0.02, 0, 1$. A belső ábrában a $\lambda \geq 0$ és $\zeta < 0$ eset van kinagyítva, ismét csak fentről lefelé haladva $1/\lambda = 0, 0.2, 0.5, 1, 10$. Mindkét alrendszerben minden más paraméter megegyezik és a redukált hőmérséklet $t = 10^{-6}$.

A kritikus pontban a rendparaméter az alábbiak szerint változik

$$\varphi(0) = \frac{1}{\sqrt{6}} \frac{C_+ \Lambda}{C_i \xi_0^+} \varphi_0^+ t^{3/4}. \quad (6.61)$$

- $\Lambda \rightarrow \infty$:

A profilt továbbra is a (6.16) és a (6.21) egyenlet írja le, ám ez esetben a konstansok értéke

$$\begin{aligned} l_- &= \left[12\sqrt{6} \frac{C_- \varphi_0^-}{C_+ \varphi_0^+} (\xi_0^-)^2 \xi_0^+ \right]^{1/3} t^{-1/4}, \\ l_+ &= \sqrt{6} \left(\frac{1}{2} \frac{C_+}{C_-} \right)^{2/3} \left[\frac{\varphi_0^-}{\varphi_0^+} (\xi_0^-)^2 \xi_0^+ \right]^{1/3} t^{-1/4}. \end{aligned} \quad (6.62)$$

A határfelületen a kritikus viselkedés

$$\varphi(0) = \left(\frac{1}{2} \frac{C_+ \xi_0^-}{C_- \xi_0^+} \varphi_0^+ \right)^{2/3} (\varphi_0^-)^{1/3} t^{1/2}. \quad (6.63)$$

6.3. Skálázási összefüggések

Az továbbiakban általánosítjuk az átlagtér elmélet keretein belül kapott eredményeket. Először egy félsíkban elhelyezkedő rendszer paraméter profilját vizsgáljuk szabad és rögzített határfeltétel esetén. Majd az így kapott eredményeket használjuk fel két összekapcsolt alrendszer határfelületén fellépő jelenségek skálázási tulajdonságának megállapítására.

6.3.1. Rendparaméter profilok

Az általunk vizsgált rendszerről feltételezzük, hogy a pozitív félsíkban helyezkedik el, $z > 0$, valamint a rendszer belseje a rendezett fázisban van, $T \leq T_c$. Ahogy az átlagtér elméletnél is láttuk a rendparaméter $\varphi(z)$ értéke függ a felülettől mért z távolságtól. Minél beljebb vagyunk a rendszerben, $z/\xi \gg 1$, annál inkább közelíti meg a tömbi értéket, mely a kritikus pont közelében $\varphi_b \sim t^\beta$ szerint változik. Ugyanekkor tudjuk, hogy a tömbi korrelációs hossz aszimptotikusan $\xi \sim |t|^{-\nu}$ szerint viselkedik.

Szabad határfeltétel

Szabad határfeltétel esetén a felületen hiányzó kötések miatt a lokális rend kisebb, mint a rendszer belsejében. Az egész rendszerben ugyanazon hőmérsékleten zajlik le a fázisátalakulás, azaz rendes felületi átalakulással van dolgunk. A felületen a rendparaméter ekkor $\varphi(0) \sim t^{\beta_1}$ szerint változik, ahol általában $\beta_1 > \beta$. A rendszer belseje és a felület között a rendparaméter az alábbi skálázási tulajdonsággal bír [17, 38, 89]

$$\varphi(z) = \varphi_b f_{\text{ord}} \left(\frac{z+l}{\xi} \right), \quad (6.64)$$

ahol a $f_{\text{ord}}(y)$ skálafüggvény $y^{(\beta_1-\beta)/\nu}$ szerint változik kis értékek esetén, $y \ll 1$.

Rögzített határfeltétel

Rögzített határfeltétel esetén a felület rendkívüli fázisátalakulással bír, vagyis a felületi régió rendezett marad a tömbi kritikus pont elérésekor. Mindez azt jelenti, hogy amennyiben $z \ll \xi$ és $t \rightarrow 0_+$ a rendparaméter $\varphi(z) = O(1)$ szerint változik. Formálisan ez megfelel annak, hogy felületi exponens zérus, $\beta_1 = 0$. A rendparaméter profilját a következő egyenlettel jellemezhetjük [17, 38, 89]

$$\varphi(z) = \varphi_b f_{\text{ext}} \left(\frac{z+l}{\xi} \right), \quad (6.65)$$

itt a $f_{\text{ext}}(y)$ skálafüggvény aszimptotikus viselkedése $y \ll 1$ esetben az előzőhöz képes megváltozik, $f_{\text{ext}}(y) \sim y^{-\beta/\nu}$ szerint cseng le [50].

6.3.2. Határfelületek kritikus tulajdonságai

A továbbiakban két félvégteleen alrendszert kapcsolunk össze. A határfelületen vizsgáljuk a rendparaméter kritikus viselkedését. Általánosságban azt várjuk, hogy a határon lévő

kötések erősségétől függően a tömbi kritikus hőmérséklet közelében más-más jelenséget figyelhetünk meg. Amennyiben a két alrendszer gyenge kötésekkel kapcsoljuk össze, akkor a határfelület rendezetlen lesz a tömbi kritikus pontban. Ez megfelel az átlagtér elméletnél a pozitív Λ során látottakkal. Erős kapcsolódásnál a határfelület rendezett marad, miként $\Lambda < 0$ esetén. A határfelület ezen két kritikus viselkedését szeparálja a speciális átmenet, mely az átlagtér elméletben a $\Lambda \rightarrow \infty$ esetben tapasztaltunk.

Az összekapcsolt rendszereknél a rendparaméter vizsgálata során a két alrendszer profiljából indulunk ki. Megköveteljük, hogy a határon, $z = 0$, a teljes rendszer profilja folytonos legyen, és az alrendszerek profiljainak $z = 0$ -ra vonatkozó deriváltjai az átlagtér elméletnél használt (6.38) egyenlethez analóg feltételeket elégítsenek ki. Amikor a két alrendszert gyenge illetve erős kötésekkel kapcsoljuk össze, akkor feltételezzük, hogy a (6.38) bal oldala véges. Ebből következik, hogy a teljes rendszer profiljához tartozó derivált függvényvénynek szakadása van $z = 0$ -ban, és így a két extrapolációs hossz közül, $l_{\pm}$, legalább az egyik $O(1)$ viselkedést mutat. Másfelől a speciális átmenetnél a (6.38) egyenlet baloldala zérus, és így az extrapolációs hosszakat az alrendszerek derivált profiljainak egyenlőségéből határozhatjuk meg. Mindamellet a kritikus pont közelében $l_{\pm} \sim t^{-\nu_{\pm}\omega_{\pm}}$, ahol $0 \leq \omega_{\pm} \leq 1$.

Amikor az egyik alrendszer, $z > 0$, a tömbi kritikus pontban teljesen rendezetlené válik, a határfelületen a rendparaméter kritikus viselkedését a (6.64) és a (6.9) egyenletek segítségével határozhatjuk meg

$$\varphi(0) \sim t^{\beta_i}, \quad \beta_i = (1 - \omega_+) \beta_1^+ + \omega_+ \beta_+, \quad (6.66)$$

ahol $\beta_+ \leq \beta_i \leq \beta_1^+$. Ezen kritikus viselkedés azonban megváltozik, ha az egyik alrendszer, $z < 0$, határa rendezett marad a tömbi fázisátalakulásnál. Ekkor az összekapcsolásnál a rendparaméter a skálázását a (6.65) és a (6.9) egyenletek felhasználásával kapjuk

$$\beta_i = \omega_- \beta_- . \quad (6.67)$$

Nyilvánvaló, hogy a határfelülethez tartozó β_i kritikus exponens mindkét alrendszerre vonatkozóan ugyanazon értéket jelenti. A fenti konstrukció következménye, hogy az összekapcsolásnál a rendparaméter profilja sima lesz, valamint az alrendszerekhez tartozó extrapolációs hosszak legfeljebb a korrelációs hossz nagyságrendéig növekedhetnek, $\max(l_+, l_-) \lesssim \min(\xi_+, \xi_-)$, melyből adódik, hogy

$$\max(\omega_+ \nu_+, \omega_- \nu_-) \leq \min(\nu_+, \nu_-) . \quad (6.68)$$

Ellenkező esetben a teljes rendszer profiljában $\min(\xi_+, \xi_-)$ hosszúság skálán tekintve a kritikus pont felé haladva szakadás lép fel. Meg kell jegyeznünk, hogy az átlagtér elméletben $\nu_+ = \nu_-$ és $\omega_{\pm} \leq 1$, valamint a profil mindig sima.

Relevancia-irrelevancia kritériumok

A rendszer belsejében egy altér mentén elhelyezkedő gyengébb kötések hatására létrejövő defektus analízisa során használt relevancia kritériumot [22] általánosítjuk. Amennyiben a két különböző kritikus rendszer gyengén van összekötve, akkor a csatoláshoz kapcsolódó operátor a két felületi mágnesezettség operátorának szorzata. Ebből adódik,

hogy az x_i anomális dimenziója a két felületi operátor anomális dimenziójának összege, $x_i = x_1^- + x_1^+$, ahol $x_1^\pm = \beta_1^\pm/\nu_\pm$. A d dimenziós rendszerben a defektus y_i skálázási exponense

$$y_i = d_i - x_i = d - 1 - \frac{\beta_1^+}{\nu_+} - \frac{\beta_1^-}{\nu_-}. \quad (6.69)$$

ahol $d_i = d - 1$ a határfelület dimenziója.

Amennyiben $y_i < 0$ a gyengén összekapcsolt alrendszerek irreleváns perturbációt okoznak, és ezen defektus a teljes rendszerben egy effektív vágást eredményez. Ebből következik, hogy a határfelületen a rendparaméter viselkedése ugyanaz, mintha felsíkban elhejezkedő rendszereket tekintenénk. A mágnesezettség β_i kritikus exponensét a lokálisan nagyobb rendet biztosító alrendszer exponense határozza meg, azaz $\beta_i = \min(\beta_1^\pm)$. Amennyiben $y_i > 0$ az összekapcsolásnál lévő kötések releváns perturbációt okoznak, és a határfelület kritikus viselkedését egy új fixpont határozza meg.

Meg kell jegyeznünk, hogy a kétdimenziós q -állapotú Potts modell esetén, ahol $2 \leq q \leq 4$, a felülethez tartozó anomális dimenzióra mindig teljesül, hogy $x_1 \geq 1/2$ [28]. Azaz a két különböző univerzális osztályba tartozó modell gyenge erősségű kötésekkel történő összezsátolásakor keletkező perturbáció a (6.69) egyenlet szerint irreleváns.

Az átlagtér elméletben amennyiben egy skálázási relációban megjelenik a d dimenzió, akkor azt a Josephson-féle hiperskálázási törvényt, lásd 2.2 táblázat, kielégítő d_c felső kritikus dimenzióval kell helyettesíteni. Jóllehet esetünkben ezen d_c alrendszerenként eltér, így a (6.69) egyenlet kétértelmű. Mindamellet a korábbi analitikus eredmények azt mutatják, hogy a határfelületen lévő gyenge kötések irrelevánsak az átlagtér elmélet keretein belül általunk vizsgált esetekben.

Gyengén kapcsolt rendszerek

Amikor a két alrendszert gyenge kötésekkel kapcsoljuk össze, akkor azt várjuk, hogy a rendparaméter a határfelületen nem veszi fel a maximumát. A β_+ , β_- , β_1^+ , β_1^- kritikus exponensek relatív nagyságától függően a mágnesezettség elérheti minimumát, vagy a profil monoton növekedést mutathat. A korábban bevezetett jelölésekkel élünk, azaz a pozitív féltérben azon alrendszer helyezkedik el, amely belsejében a kritikus pont alatt nagyobb rend uralkodik, $\beta^+ < \beta^-$. Ekkor a következő lehetséges esetek alakulhatnak ki.

- $\beta_+ < \beta_- < \beta_1^+ < \beta_1^-$:

Ebben az esetben a teljes rendszer mágnesezettségi profilját megkaphatjuk a két szabad határfeltétellel rendelkező alrendszer (6.64) egyenlettel leírt profiljának összekapcsolásából. A gyenge csatolás a rendezettebb alrendszer, $z > 0$, aszimptotikus tulajdonságát nem változtatja meg. Ezért $\varphi(0) \sim \varphi_1^+$, $l_+ = O(1)$ és $\omega_+ = 0$. Következésképpen $\beta_i = \beta_1^+$, valamint a (6.66) egyenletben leírt exponensek közötti összefüggést használva

$$\omega_- = \frac{\beta_1^- - \beta_1^+}{\beta_1^- - \beta_-}. \quad (6.70)$$

A fenti eredményeket figyelembevéve, amennyiben a (6.68) szerint $\omega_- \nu_- < \nu_+$ teljesül, akkor a rendparaméter profilja sima lesz a határfelületen. Ezt a fajta viselkedést kapjuk vissza átlagtér elméletben a $\varphi^4 - \varphi^6$ határfelületnél $\Lambda > 0$ esetén.

- $\beta_+ < \beta_- < \beta_1^- < \beta_1^+$:

Ekkor is a határon feszi fel a minimumát a rendparaméter, ám a viselkedését már a $z < 0$ alrendszer határozza meg. Hiszen ennél a határon nagyobb a lokális rend. Következésképpen $\varphi(0) \sim \varphi_1^-$, $l_- = O(1)$ és $\omega_- = 0$, valamint $\beta_i = \beta_1^-$. Ismét a (6.66) összefüggést használva kapjuk, hogy

$$\omega_+ = \frac{\beta_1^+ - \beta_1^-}{\beta_1^+ - \beta_+}. \quad (6.71)$$

A rendparaméter profilja akkor lesz sima, ha $\omega_+ \nu_+ < \nu_-$. Ez az eset azonban sosem lehetséges az átlagtér elmélet keretein belül.

- $\beta_+ < \beta_1^+ < \beta_- < \beta_1^-$:

Ekkor a rendparaméter monoton növekszik és a teljes rendszer profilját úgy kaphatjuk, hogy arendkívüli felületi átalakulással bíró alrendszer, $z < 0$, (6.65) egyenlettel leírt profiljához hozzákapcsoljuk a rendes átalakulással rendelkező alrendszer, $z > 0$, (6.64) skálafüggvénnyel jellemzett profilját. A határfelületen a mágnesezettség kritikus viselkedését a rendezettebb rendszer határozza meg. Ezért $\varphi(0) \sim \varphi_1^+$, $l_+ = O(1)$ és $\omega_+ = 0$, amiből következik, hogy $\beta_i = \beta_1^+$. A (6.66)-ból kapjuk, hogy $\omega_- = \beta_1^+/\beta_-$. Az átlagtér elmélet során ezt a viselkedést a $\varphi^3 - \varphi^6$ határfelületénél pozitív Λ esetén kapjuk vissza.

Speciális átmenet

A rendparaméter profilja ebben az esetben monoton növekedést mutat. A kevésbé rendezett alrendszer, $z < 0$, mágnesezettségét a (6.65) egyenlettel írhatjuk le. Ehhez kapcsolódik a rendezettebb alrendszer, $z > 0$, (6.64) egyenlettel meghatározott rendparaméter profilja oly módon, hogy a teljes rendszerre vonatkozóan a monotonitás megmaradjon. Miként már korábban említettük az extrapolációs hossz és az ebből adódó kritikus exponenst azon igényünk határozza meg, hogy a határon, $z = 0$, nemcsak a profil, hanem annak deriváltja is folytonos. Következésképpen $l_+ \sim l_-$, és így

$$\nu_i = \omega_+ \nu_+ = \omega_- \nu_- . \quad (6.72)$$

A felületi exponenst a fenti elvárások miatt a (6.66) és (6.67) egyenlőségéből kapjuk

$$\beta_i = \beta_- \omega_- = (1 - \omega_+) \beta_1^+ + \beta_+ \omega_+ , \quad (6.73)$$

A (6.73) és (6.72) egyenleteket megoldva a kritikus exponensekre adódik, hogy

$$\nu_i = \frac{\beta_1^+}{\frac{\beta_1^+ - \beta_+}{\nu_+} + \frac{\beta_-}{\nu_-}}, \quad \beta_i = \frac{\beta_-}{\nu_-} \nu_i . \quad (6.74)$$

A fenti eredmények birtokában a (6.68) egyenlet segítségével analizálhatjuk a határfelületen a profil viselkedését

- $\nu_- \geq \nu_+$:

A profil simasági feltétele ekkor a $\beta_-/\nu_- > \beta_+/\nu_+$ kifejezésre egyszerűsödik. Ahogy azt a következő fejezetben is látjuk kétdimenzióban a 3 és 4 állapotú Potts modell összekapcsolásakor ezen feltétel teljesül, ezért a profil várhatóan sima lesz. Ugyanakkor az Ising és a 3 állapotú Potts modell összekapcsolásánál a feltétel nem áll, így a kritikus pontban a profilban szakadás lép fel. Végezetül az Ising és a Baxter-Wu (4 állapotú Potts) modell esetén a (6.68) kifejezésben csak egyenlőség van, ami a marginális esetnek felel meg.

- $\nu_- < \nu_+$:

Ebben az esetben a (6.68) kifejezést a fenti eredmények birtokában átalakítva profil simasági feltételére az alábbi egyenlőtlenség adódik

$$\beta_1^+ < \frac{\frac{\beta_-}{\nu_-} - \frac{\beta_+}{\nu_+}}{\frac{1}{\nu_-} - \frac{1}{\nu_+}}. \quad (6.75)$$

Azonban ez kevésbé gyakori a valós anyagokban.

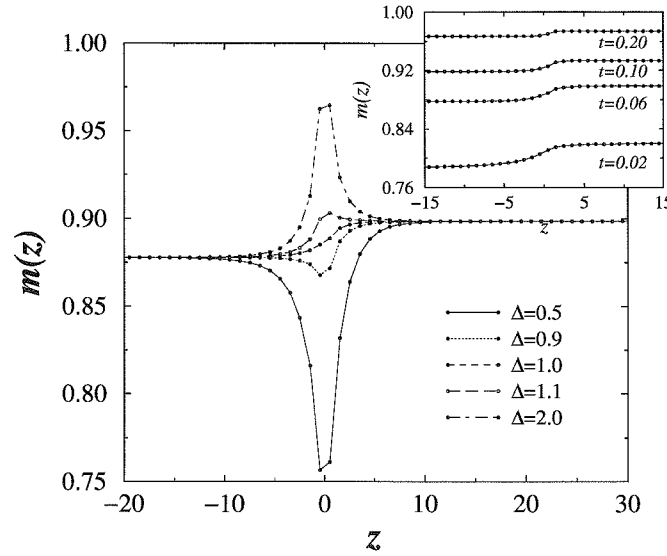
Erősen kapcsolt rendszerek

Az erős csatolás miatt a határfelület rendezett marad a tömbi kritikus hőmérsékleten. Ezért a teljes rendszerre vonatkozóan a rendparaméter profilját úgy kaphatjuk meg, hogy két, a (6.65) egyenlettel leírt profilt összekapcsolunk. A határfelület kritikus viselkedése, tehát megegyezik két független rendkívüli felületi fázisátalakulással rendelkező rendszer kritikus viselkedésével.

6.4. Numerikus vizsgálatok

A továbbiakban numerikusan analizáljuk a különböző állapotú Potts modellek összekapcsolásakor kialakuló határfelület kritikus viselkedését. Az egyes alrendszerek mindig négyzet rácson helyezkednek el. Elsősorban a $q = 2$ állapotú Potts modellre, mely az Ising modellnek felel meg, valamint a $q = 3$ és a $q = 4$ Potts modellekre koncentrálnak [116]. Ezen modellek kétdimenzióban másodrendű fázisátalakulással bírnak kritikus pontjukban, mely pontos érétke az önduálítás ismeretében határozható meg, $e^{qK_c} = 1 + \sqrt{q}$.

Az elemzéshez szükséges kritikus exponensek $q = 2$ ($\beta = 1/8$, $\nu = 1$, $\beta_1 = 1/2$) esetén egzaktak [12], míg $q = 3$ ($\beta = 1/9$, $\nu = 5/6$, $\beta_1 = 5/9$) és $q = 4$ ($\beta = 1/12$, $\nu = 2/3$, $\beta_1 = 2/3$) esetben a Coulomb-gáz leképezés [84] és konform invariancia [29] felhasználásával állapíthatók meg. Mindamellet a Baxter-Wu modellel is foglalkoztunk [13]. A háromszögrácson értelmezett három spin kölcsönhatással rendelkező modell is önduális, és másodrendű fázisátalakulása az Ising modell kritikus hőmérsékletén zajlik le. Az egzaktul megoldott modell [12] ugyanazon univerzális osztályba tartozik, mint a 4 állapotú Potts modell, azonban skálázás során nem lépnek fel logaritmikus korrekciók, mely megkönnyíti a numerikus analízist.

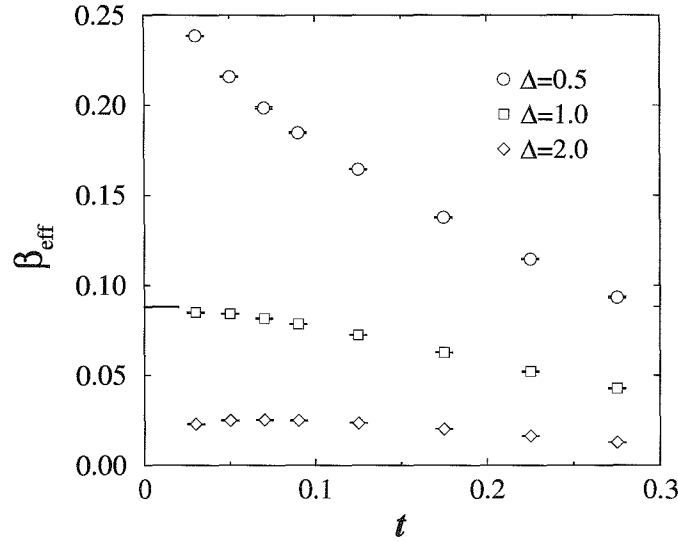


6.4. ábra. A $q = 3 - 4$ határfelületen a különböző erősségű felületi kötések esetén a rendparaméter profiljai $t = 0.06$ redukált hőmérsékletnél. Fentről lefelé haladva $\Delta = 2.0, 1.1, 1.0, 0.9, 0.5$ értékeket vesz fel. A belső ábrán a speciális átmenetnél, $\Delta = 1$, a mágnesezettség hőmérséklet függését követhetjük nyomon, ami azt sejteti, hogy az fázisátalakulásnál a profil sima marad.

Monte Carlo szimulációink során az alrendszerek egy-egy $L \times L$ kétdimenziós négyzet-rácson voltak értelmezve. A határfelületen lévő spinek közötti kölcsönhatás K_i erősségét Δ -val mértük, ahol $K_i/K_+ = \Delta$. Itt K_+ a nagyobb tömbi mágnesezettséggel bíró alrendszer spinjei közötti kötést jelöli. Esetünkben ez mindig a nagyobb q állapotú Potts modellnek felel meg. A korábbi jelölésekkel konzisztens módon ezen alrendszer helyezkedik el a pozitív félsíkban.

Mindkét irányba periodikus határfeltételt alkalmazva az alrendszerek mágnesezettségi profilját mértük. A szimulációk során a Swendsen-Wang klaszter algoritmust használtuk, lásd 3.2.3 szakasz. A t redukált hőmérséklettől valamint Δ értékétől függően egészen $L = 300$ -ig növeltük az alrendszerek lineáris méretét. Az egyensúlyi állapot eléréséhez $5 - 20 \times 10^4$ Monte Carlo lépést tettünk meg. Az adott hőmérséklettel és rendszermérettel változva a mágnesezettségi profil meghatározásához $6 - 20 \times 10^6$ lépést használtunk.

Minden egyes redukált hőmérsékleten ellenőriztük, hogy a profil nem tartalmaz véges méret effektust. A határfelület mágnesezettségi adatit valamint a (4.14) formulát használtuk fel az effektív exponens mérésére. Az Ising és Baxter-Wu modell összekapcsolásakor magában a kritikus pontban is végeztünk méréseket. Ennek célja a véges méretű profilok összekapcsolásának vizsgálata. A továbbiakban a $q = 2 - 3$, $q = 3 - 4$ állapotú Potts modell valamint az Ising és a Baxter-Wu modell összekapcsolása során kapott szimulációs eredményeinket ismertetjük. Mindegyik esetben a határfelület Δ értékétől függően más-más kritikus viselkedést mutat.



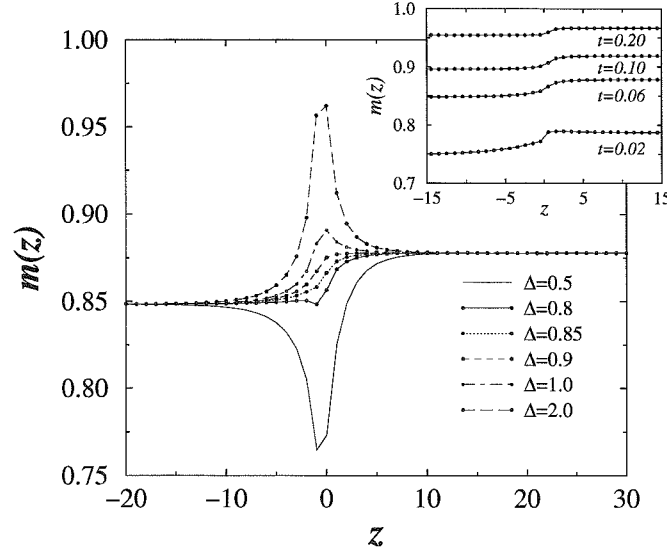
6.5. ábra. A $q = 3 - 4$ határfelületnél a mágnesezettség effektív exponense három lényegesen különböző csatolás esetén. A speciális átmenetnél, $\Delta \approx 1$, a (6.74) kifejezés szerint meghatározott érték egy vonallal van feltüntetve.

6.4.1. A $q = 3 - 4$ határfelület

A 6.4 ábrán a tömbi kritikus pont közelében a határfelület mágnesezettségi profilja figyelhető meg különböző Δ esetén a kétdimenziós 3 és 4 állapotú Potts modell összekapcsolásakor. Jól látható, hogy amennyiben az összecsatolásnál gyenge kötések vannak, akkor a határon a rendparaméter gyorsabban tűnik el, mint az alrendszer belsejében, vagyis rendes határfelületi átalakulás zajlik le. Ugyanakkor erős csatolás során a kritikus pontban a határon a mágnesezettség véges marad, azaz redkívvüli átalakulásnak lehetünk tanúi. Ezt a két kritikus viselkedést szeparálja a $\Delta \approx 1$. körüli értéknél lévő speciális átmenet.

A 6.4 ábra belsejében a speciális átmenethez tartozó mágnesezettségi profil változását követhetjük nyomon a tömbi kritikus pont felé haladva. A 3 és 4 állapotú Potts modell összekapcsolásakor $\beta_-/\nu_- = 2/15 > \beta_+/\nu_+ = 1/8$. Mindez a numerikus vizsgálatainkkal összhangban azt jelenti, hogy a profil sima marad.

A hőmérséklettel függő effektív exponens három különböző Δ esetén a 6.5 ábrán látható. Ezek a fentebb leírt három felületi viselkedésre vonatkoznak. Láthatóan erős crossover hatás tapasztalható kis t esetén, hiszen a skálázás értelmében az effektív exponens értéke gyenge csatolásnál, $\Delta < 1$, $\beta_i = \beta_1(q = 3) = 5/9$, erős csatolásnál, $\Delta > 1$, pedig $\beta_i = 0$. Sajnálatosan a véges méret gátolt meg minket abban, hogy a kritikus ponthoz közelebbi hőmérsékleten is méréseket végezzünk. Ugyanakkor a speciális átmenetnél a crossover hatás enyhébb, és az effektív exponens közel van a (6.74) egyenletben jósolt elméleti értékhez, $\beta_i = 32/363 = 0.088$.



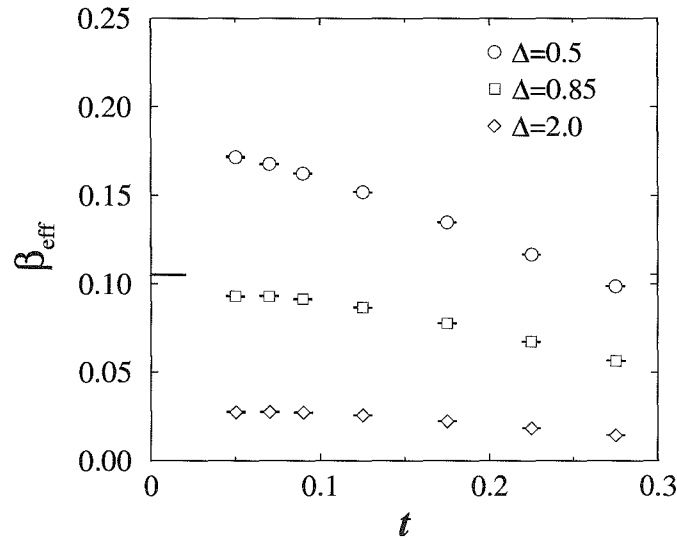
6.6. ábra. A $q = 2 - 3$ határfelületen a különböző erősségű felületi kötések esetén a rendparaméter profiljai $t = 0.06$ redukált hőmérsékletnél. Fentről lefelé haladva $\Delta = 2.0, 1.0, 0.9, 0.85, 0.8$ értékeket vesz fel. A belső ábrán a speciális átmenetnél, $\Delta \approx 0.85$, a mágnesezettség hőmérséklet függését követhetjük nyomon, ami azt sejteti, hogy a kritikus pont elérésekor a profilban szakadás lép fel.

6.4.2. A $q = 2 - 3$ határfelület

A 2 és 3 állapotú Potts modell összekapcsolásakor a határfelület az előző részben leírtakhoz hasonlít. Az eredmények a 6.6 és 6.7 ábrákon vannak összegezve. A mágnesezettségi profilban itt is három különböző viselkedés figyelhető meg. A speciális átmenet azonban kisebb, $\Delta \approx 0.85$ értékhez tartozik.

A 6.6 ábra belsejében a speciális átmenet során a rendparaméter profiljában a hőmérséklet hatására bekövetkező változásokat érzékeltetjük. Jól látható, hogy az előző részhez képest sokkal összetettebb esettel állunk szembe. A profil fejlődése azt sugallja, hogy a tömbi kritikus pontban szakadás keletkezik. Mindez összhangban van a skálázási eredményeinkkel, hiszen (6.68) kifejezésnek erre az esetre vonatkozó simasági feltétele nem teljesül, mert $\beta_-/\nu_- = 1/8 < \beta_+/\nu_+ = 2/15$.

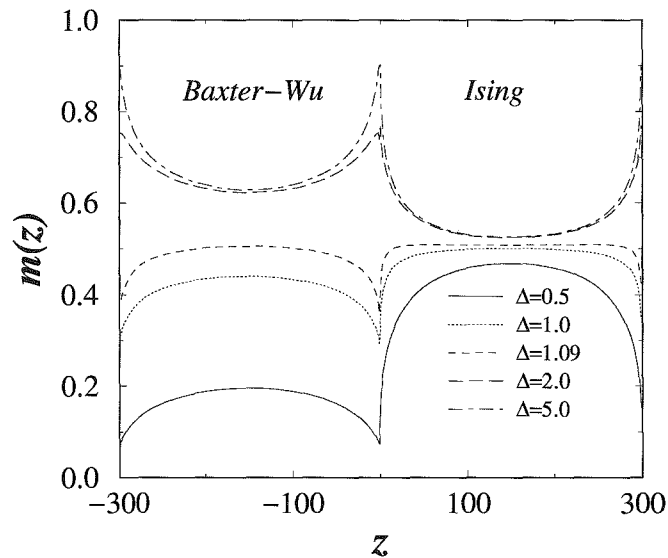
A profilban fellépő szakadás egyúttal azt is magával vonja, hogy nehéz pontosan meghatározni azon Δ értéket, melyhez a speciális átmenet tartozik. Emiatt β_i mérése is pontatlanná válik. A 6.7 ábrán a három különböző felületi fixponthoz tartozó effektív exponens van feltüntetve. Noha a crossover hatás ismét erős, a speciális átmenethez tartozó mért érték kompatibilis a (6.74) egyenletben meghatározott felületi exponenssel, $\beta_i = 25/237 = 0.105$.



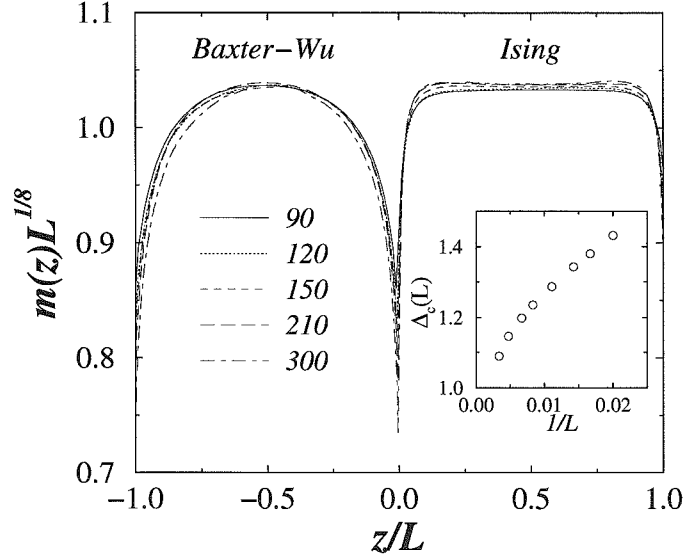
6.7. ábra. A $q = 2 - 3$ határfelületnél a mágneszettség effektív exponense három lényegesen különböző csatolás esetén. A speciális átmenetnél, $\Delta \approx 0.85$, a (6.74) kifejezés szerint meghatározott érték egy vonallal van feltüntetve.

6.4.3. Az Ising Baxter-Wu határfelület

Az Ising és a Baxter-Wu modell összekapcsolása igen sajátos arculatot mutat. Ez többnyire annak tulajdonítható, hogy a két alrendszer tömbi mágneszettsége ugyanazon ano-



6.8. ábra. Az Ising és a Baxter-Wu modell összekapcsolásakor a mágneszettségi profil a kritikus pontban két szimmetrikusan elhelyezkedő határfelület esetén különböző Δ értékeknél.



6.9. ábra. Az Ising és a Baxter-Wu modell összekapcsolásakor a kritikus pontban a különböző rendszermérethez tartozó, $L = 90, 120, 150, 210, 300$, összeskálázott mágnesezettségi profilok. A két alrendszerben a rendparaméterek maximumának egyenlősége határozza meg a speciális átmenethez tartozó $\Delta_c(L)$ értéket. A belső ábrán ezen értékeket ábrázoltuk a rendszerméret inverzének függvényeként.

mális dimenzióval rendelkezik, $\beta_-/\nu_- = \beta_+/\nu_+ = 1/8$. Következésképpen a kritikus pontban a rendparaméter profiljának véges mérettől való függését lehet tanulmányozni. Az feltételezhető, hogy ez $m(z, L) = L^{-1/8}f(z/L)$ szerint viselkedik. Az $f(y)$ skálafüggvény a határfelületen lévő kötések erősségétől függhet.

A 6.8 ábrán Δ különböző értékeihez tartozó mágnesezettségi profilok láthatók a kritikus pontban. A görbék alakzatja és az alrendszerekben a profilok relatív magassága változik a határfelületen lévő kötés erősségével. Amennyiben $\Delta < \Delta_c \approx 1$, a határ rendezetlen, és a kritikus viselkedését az Ising modellhez tartozó felületi exponens határozza meg, hiszen a két alrendszer közül ennek nagyobb a belsejében a rend. Amennyiben $\Delta > \Delta_c$ a határfelület rendezett marad a tömbi kritikus pontban. Ekkor a mágnesezettség értéke fokozatosan csökken az alrendszerek belseje felé haladva.

A speciális átmenetnél, $\Delta = \Delta_c$, a rendparaméter az $L^{1/8}m(z/L)$ függvény segítségével tudjuk összeskálázni. Ez látható a 6.9 ábrán, ahol az adott méretre vonatkozó $\Delta_c(L)$ értéket abból a feltételből határoztuk meg, hogy a két alrendszerben a mágnesezettség maximuma megegyezik. Az ábra belsejében a rendszer méretétől függő $\Delta_c(L)$ értékek vannak feltüntetve. Úgy tűnik, hogy határesetben $\Delta_c \approx 1$. Az összeskálázott mágnesezettségek a két különböző alrendszerben más-más képet mutatnak. A Baxter-Wu modell esetén a kisebb korrelációs hossz miatt a profil egyenletesen változik. Ezzel ellentétben az Ising modellnél a határfelületen mintha szakadás lépne fel, mely valószínűleg kapcsolatban van azzal, hogy a (6.68) feltételben egyenlőség áll fent.

6.5. Összefoglalás

Ebben a fejezetben két másodrendű fázisátalakulással bíró modell összekapcsolásánál kialakuló határfelület kritikus viselkedését tanulmányoztuk. Feltételeztük, hogy az alrendszerek belsejében ugyanazon hőmérsékleten jelenik meg a rend, ám kritikus exponenseik különbözőek, ezért eltérő univerzális osztályba tartoznak. A határfelületen a kötések erősségét változtatva a rendparaméter profilját analizáltuk a kritikus pont közelében. Először az átlagtér elmélet keretein belül analitikusan vizsgáltuk a problémát. A két félvégtelen alrendszer rendparaméter profiljainak összekapcsolása az extrapolációs hosszön keresztül történt. Hasonló módszert követtünk a fenomenológiai skálázás során is. Eredményül a határfelület három különböző kritikus viselkedése adódott.

Amennyiben a két alrendszert gyenge kötésekkel kapcsoljuk össze, akkor a renormalizációs folyamatban a határfelület egy effektív vágásként hat. Következésképpen a rendparaméter a kritikus pontban gyorsabban tűnik el a határon. Erős csatolás esetén a renormalizációs folyamat végtelenül nagy lokális kötések eredményez, és így a határfelület rendezett marad a tömbi fázisátalakulás során. Ezt a két esetet szeparálja a speciális átmenet, amikor is a rendparaméter monoton növekedést mutat. A határfelülethez kapcsolódóan új fixpont jelenik meg. Az ehhez tartozó kritikus exponenseket a skálázási elmélet szerint a félvégtelen alrendszerek tömbi és felületi exponenseinek segítségével tudjuk kifejezni.

A fenti eredményeket Monte Carlo szimulációk segítségével ellenőriztük. Vizsgálatainkhoz a kétdimenziós Ising, Potts és Baxter-Wu modell használtuk. A szimulációs eredmények összhangban álltak az analitikus elvárásokkal.

7. fejezet

Befejezés

Jelen dolgozatban kétdimenziós rendezetlen rendszereket tanulmányoztunk. A vizsgált perturbációk releváns voltát a Harris kritérium segítségével analizáltuk. A különböző analitikus eredményeket széles körű Monte Carlo szimulációkkal igazoltuk.

Először a kétdimenziós Ising modellt vizsgáltuk. A szabad határfelületéhez zérus várható értékkel rendelkező véletlen felületi teret kapcsoltunk. A kétdimenziós Ising modell esetén ezen perturbáció marginálisan irreleváns, emiatt az inhomogén rendszer felületi viselkedését a tiszta rendszer logaritmikus korrekciókkal bővülő kritikus exponensei határozzák meg. A rendezetlenség erősségét a felületi tér szórásával mértük.

Replika trükköt használva, majd a renormálási csoportelméletet segítségül hívva meghatározzuk a felületi mágnesezettség kritikus exponensének a vezető logaritmikus korrekciót is tartalmazó alakját. Széles körű Monte Carlo szimulációkkal tanulmányoztuk az elméleti becslést.

Mivel az analitikus és logaritmikus korrekciók ellenkező előjelűek, ezért a bevezetett, hőmérséklettől függő effektív exponens nem monoton. A kritikus pont felé haladva először monoton növekszik, majd maximumán túlhaladva csökkenve tart a tiszta rendszer felületi exponensének értékéhez. Méréseink során a legerősebb rendezetlenség mellett sikerült a telítődést elérnünk. A különböző nagyságú felületi terek esetén többféleképpen is kimutattuk a vezető logaritmikus korrekciót.

Magában a kritikus pontban is megvizsgáltuk a modellt. Itt a mágnesezettség profilja a felülettől távolodva először növekszik, majd maximumát elérve monoton csökkenve tart a tömbi értékéhez. A kezdeti növekedést meghatározó effektív felületi exponens függ a véges rendszer méretétől. Kihhasználva a korrelációs hossz és a redukált hőmérséklet között fennálló kapcsolatot a kritikus pontban adott mérethez tartozó felületi exponensből adott hőmérséklethez tartozó effektív felületi mágnesezettségi exponenshez jutunk. Az ily módon nyert eredményeink abba a kritikus ponthoz közeli tartományba szolgáltatnak adatokat és illeszkednek jól az elméleti úton meghatározott görbére, ahol a véges méretből adódó korlátok miatt nem tudtunk hőmérséklettől függő effektív felületi exponenst mérni.

A második általunk vizsgált inhomogén perturbáció is az Ising modellre vonatkozott. Kéttengelyű korrelált rendezetlenséget vezettünk be a spinek közötti kötésekbe. A korábbi eredmények alapján tudjuk, hogy a kétdimenziós Ising modellnél a lokális energiasűrűségben jelentkező korrelálatlan rendezetlenség marginálisan irreleváns perturbációt

okoz. Ilyen esetekben a korrelációs hossz exponense megtartja a tiszta rendszerhez tartozó értékét. Emiatt a kiterjesztett Harris kritérium értelmében a kéttengelyű korrelált rendezetlenség releváns perturbációt eredményez.

A vizsgált inhomogenitás során olyan parametrizálást használtunk, ami miatt a modell önduális volt. Ennek köszönhetően a rendezetlenség minden egyes realizációja esetén egzaktul meghatározható a fázisátalakulási pont.

A négyzetrácson értelmezett kéttengelyű korrelált rendezetlenséggel bíró Ising modell kritikus pontjában széles körű Monte Carlo szimulációkat végeztünk. Ennek során az egy spinre jutó mágneses momentumokat, szuszeptibilitást, fajhőt, valamint a szuszeptibilitás logaritmusának hőmérséklet szerinti deriváltját mértük. Véges méret skálázással meghatároztuk az adott fizikai mennyiségek kritikus exponensét. Mérési adataink konzisztensek voltak, így a skálatörvények segítségével kifejeztük a modell többi kritikus exponensét.

Bár előzőleg nem vártuk, mégis a kéttengelyű korrelált rendezetlenséggel bíró Ising modell konform invariáns. A kritikus pontban mért energia profilból a Schwarz-Christoffel transzformáció segítségével meghatároztuk az energiasűrűség skálázási dimenzióját. Az így kapott érték összhangban volt a véges méret skálázás során kapott eredménnyel.

Végezetül két különböző kritikus exponensekkel rendelkező félvégtelen rendszer összekapcsolásakor kialakuló határfelület viselkedését tanulmányoztuk. Amennyiben a két alrendszer kritikus hőmérséklete lényegesen különbözik, akkor a határon a fázisátalakulás hasonlít a felületekéhez. Kétdimenzióban a határfelület a rendparaméter viselkedése összetett, ha a két alrendszer kritikus hőmérséklete egybeesik.

A problémát először a ϕ^k modellt használva az átlagtér elmélet keretein belül analizáltuk. A két félvégtelen alrendszer rendparaméter profiljainak összekapcsolása az extrapolációs hosszön keresztül történt. Az itt nyert eredményeket felhasználtuk a fenomenológiai skálázás során is. A határfelület fázis átalakulásához tartozó mágnesezettségi exponens a két félvégtelen alrendszer tömbi és felületi exponenseinek segítségével fejeztük ki. A profil simaságára is megfogalmaztunk feltételeket. Elméleti úton három lényegesen különböző kritikus viselkedés adódott.

Amennyiben a két alrendszert gyenge kötésekkel kapcsoljuk össze, akkor a határfelület egy effektív vágásként hat. Következésképpen a rendparaméter a kritikus pontban gyorsabban tűnik el a határon, azaz rendes határfelületi átalakulásnak lehetünk tanúi. Erős csatolás esetén a határ rendezett marad a tömbi fázisátalakulás során, ekkor rendkívüli átalakulást tapasztalhatunk. A rend egy magasabb hőmérsékleten tűnik el. Ezt a két esetet szeparálja a speciális átmenet, amikor is a rendparaméter monoton növekedést mutat.

A fenti eredményeket Monte Carlo szimulációk segítségével ellenőriztük. Vizsgálatainkhoz a kétdimenziós Ising, Potts és Baxter-Wu modell használtuk. A szimulációk során a hőmérséklet függő effektív határfelületi exponens mértük. A különböző erősségű csatolások mellett kapott értékek konzisztensek voltak a skálázás során meghatározott értékekkel. Mindamellet a rendparaméter profiljának simasági feltételét is ellenőriztük.

Irodalomjegyzék

- [1] D. B. Abraham and F. T. Latrémoière, Phys. Rev. E **50**, R9 (1994); J. Stat. Phys. **81**, 539 (1995).
- [2] M. Aizenmann, J. Wehr, Phys. Lett. **62**, 2503 (1989).
- [3] F. C. Alcaraz, M. N. Barber, M. T. Batchelor, Phys. Rev. Lett. **58** 771, (1987).
- [4] M. Altarelli, M. D. Núñez-Regueiro, M. Papoular, Phys. Rev. Lett. **74**, 3840 (1995).
- [5] F. Á. Bagaméry, L. Turban, F. Iglói, Phys. Rev. B **72** 094202 (2005).
- [6] F. Á. Bagaméry, L. Turban, F. Iglói, Phys. Rev. B **73** 144419 (2006).
- [7] H. G. Ballesteros, G. Parisi, Phys. Rev. B **60**, 12912 (1999).
- [8] H. G. Ballesteros et al., Phys. Rev. B **61**, 3215 (2000).
- [9] M. N. Barber, I. Peschel, P. A. Pearce, J. Stat. Phys. **37**, 497 (1984).
- [10] R. Z. Bariev, Theo. Math. Phys. **77**, 1090 (1988).
- [11] G. T. Barkema, M. E. J. Newman, *Monte Carlo Methods in Chemical Physics*, ed. D. Ferguson, J. I. Siepmann, D. G. Truhlar (Wiley, New York, 1999).
- [12] R. J. Baxter, *Exactly Solved Models in Statistical Mechanics* (Academic Press, London, 1982).
- [13] R. J. Baxter, F. Y. Wu, Phys. Rev. Lett. **31**, 1294 (1973); Aust. J. Phys. **27**, 357 (1974).
- [14] A. A. Belavin, A. M. Polyakov, A. B. Zamolodchikov, Nucl. Phys. B **241**, 333 (1984).
- [15] B. Berche, J. Phys. A **36**, 585 (2003).
- [16] B. Berche, L. Turban, J. Phys. A **24**, 245 (1991).
- [17] K. Binder, *Phase Transitions and Critical Phenomena*, vol. 8, ed. C. Domb, J. L. Lebowitz (Academic Press, London, 1983).

- [18] K. Binder, *Monte Carlo Methods in Statistical Physics* (Springer, Berlin, 1986).
- [19] V. Blavats'ka, C. von Ferber, Yu. Holovatch, Phys. Rev. E **64**, 041102 (2001).
- [20] V. Blavats'ka, C. von Ferber, Yu. Holovatch, Phys. Rev. B **67**, 094404 (2003).
- [21] D. Boyanovsky, J. L. Cardy, Phys. Rev. B **26**, 154 (1982).
- [22] T. W. Burkhardt, E. Eisenriegler, Phys. Rev. B **24**, 1236 (1981).
- [23] T. W. Burkhardt, *Proceedings of the XXth Winter School, Karpacz, Poland, 1984*, Lecture Notes in Physics, vol. 206, p. 169, ed. A. Pekalski, J. Sznajd (Springer, Berlin, 1984).
- [24] G. Caginalp, M. E. Fisher, Commun. Math. Phys. **65**, 247 (1979).
- [25] J. L. Cardy, J. Phys. A **17**, L385 (1984).
- [26] J. L. Cardy, J. Phys. A **19** L1093 (1986).
- [27] J. L. Cardy, J. Phys. A **24** L1315 (1991).
- [28] J. L. Cardy, Nucl. Phys. B **240** [FS12] 514 (1984).
- [29] J. L. Cardy, *Phase Transitions and Critical Phenomena*, vol. 11, ed. C. Domb, J. L. Lebowitz (Academic Press, London, 1987).
- [30] J. L. Cardy, J. Phys. A **16**, 3617 (1983).
- [31] A. H. Castro Neto, G. Castilla, B. A. Jones, Phys. Rev. Lett. **81**, 3531 (1998).
- [32] C. Chatelain, B. Berche, Phys. Rev. E **60**, 3853 (1999).
- [33] P. Curie, Ann. de Chimie et Physique **5**, 289 (1885).
- [34] P. Czerner, U. Ritschel, Int. J. Mod. Phys. B **11**, 2075 (1997).
- [35] B. Davies, I. Peschel, J. Phys. A **24**, 1293 (1991).
- [36] M. C. de Andrade, R. Chau, R. P. Dickey, N. R. Dilley, E. J. Freeman, D. A. Gajewski, M. B. Maple, R. Movshovich, A. H. Castro Neto, G. Castilla, and B. A. Jones, Phys. Rev. Lett. **81**, 5620 (1998).
- [37] H. W. Diehl, A. Nüsser, Z. Phys. B **79**, 69 (1990).
- [38] H. W. Diehl, *Phase Transitions and Critical Phenomena*, vol. 10, ed. C. Domb, J. L. Lebowitz (Academic Press, London, 1986).
- [39] E. Domany, E. K. Riedel, J. Appl. Phys. **49**, 1315 (1978).
- [40] S. N. Dorogovtsev, Fiz. Tverd. Tela (Leningrad) **22**, 321 (1980) [Sov. Phys. Solid State **22**, 188 (1980)]; Phys. Lett. **76A**, 169 (1980).

- [41] V. S. Dotsenko, V. S. Dotsenko, Sov. Phys.-JETP **33**, 37 (1981).
- [42] V. S. Dotsenko, V. S. Dotsenko, Adv. Phys. **32**, 129 (1983).
- [43] V. S. Dotsenko, Usp. Fiz. Nauk **165**, 481 (1995).
- [44] S. F. Edwards, P. W. Anderson, J. Phys. F. **5**, 965 (1975).
- [45] D. E. Feldman, V. M. Vinokur, Phys. Rev. Lett. **89** 227204 (2002).
- [46] D. S. Fisher, Phys. Rev. Lett. **69**, 534 (1992); Phys. Rev. B **51**, 6411 (1995).
- [47] K. H. Fisher, J. A. Hertz, *Spin Glasses* (University Press, Cambridge, 1991).
- [48] M. E. Fisher, G. Caginalp, Commun. Math. Phys. **56**, 11 (1977).
- [49] M. E. Fisher, Rev. Mod. Phys. **46**, 597 (1974).
- [50] M. E. Fisher, P. G. de Gennes, C. R. Acad. Sci. Paris B **287**, 207 (1978).
- [51] B. A. Fuchs, B. V. Shabat, *Functions of a complex variable* (Pergamon, Oxford, 1964).
- [52] R. B. Griffiths, Phys. Rev. Lett. **23**, 17 (1969).
- [53] A. B. Harris, J. Phys. C **7**, 1671 (1974).
- [54] M. Henkel, *Conformal Invariance and Critical Phenomena* (Springer, Berlin Heidelberg, 1999).
- [55] K. Hirota, G. Shirane, P. M. Gehring, C. F. Majkrzak, Phys. Rev. B **49**, 11967 (1994).
- [56] F. Iglói, C. Monthus, Phys. Rep. **412**, 277 (2005).
- [57] F. Iglói, H. Rieger, Phys. Rev. B **57**, 11404 (1998).
- [58] F. Iglói, I. Peschel, L. Turban, Adv. Phys. **42**, 683 (1993).
- [59] F. Iglói, L. Turban, B. Berche, J. Phys. A **24** L1031 (1991).
- [60] F. Iglói, L. Turban, Phys. Rev. B **47**, 3404 (1993).
- [61] Y. Imry, S. K. Ma, Phys. Rev. Lett. **35**, 1399 (1975).
- [62] E. Ising, Z. Phys. **31**, 253 (1925).
- [63] S. Istrail, *Proceedings of the 32nd Symposium on the Theory of Computing (STOC00)* (ACM Press, p. 87-96, Portland, Oregon, 2000).
- [64] L. P. Kadanoff, Physics (N. Y.) **2**, 263 (1966).

- [65] L. P. Kadanoff, *Phase Transition and Critical Phenomena* vol. 5A, ed. C. Domb, M. S. Green (Academic Press, London, 1976)
- [66] D. Karevski, P. Lajkó, L. Turban, J. Stat. Phys. **86**, 1153 (1996).
- [67] W. Kinzel, E. Domany, Phys. Rev. B **23**, 3421 (1981).
- [68] J. M. Kosterlitz, D. J. Thouless, J. Phys. C **6**, 118 (1973).
- [69] R. Kühn, Phys. Rev. Lett. **73** 2268 (1994).
- [70] L. D. Landau, *Collected papers of L. D. Landau*, p.193-216 (Pergamon Press, New York, 1965).
- [71] L. D. Landau, Nature **138**, 840 (1936).
- [72] J. C. Lee, R. L. Gibbs, Phys. Rev. B **45**, 2217 (1992).
- [73] S. K. Ma, Rev. Mod. Phys. **45**, 589 (1973).
- [74] B. Mandelbrot, *The Fractal Geometry of Nature* (Freeman and Co., New York, 1983).
- [75] B. M. McCoy, Phys. Rev. **188**, 1014 (1969).
- [76] B. M. McCoy, T. T. Wu, Phys. Rev. **176**, 631 (1968).
- [77] B. M. McCoy, T. T. Wu, Phys. Rev. **188**, 982 (1969).
- [78] B. M. McCoy, T. T. Wu, *The Two-Dimensional Ising Model* (Harvard University Press, Cambridge, 1973).
- [79] N. D. Mermin, H. Wagner, Phys. Rev. Lett. **17**, 1133 (1966).
- [80] N. Metropolis, A. W. Rosenbluth, M. N. Rosenbluth, A. H. Teller, E. Teller, J. Chem. Phys. **21**, 1087 (1953).
- [81] K. K. Mon, M. P. Nightingale, Phys. Rev. B **37**, 3815 (1988).
- [82] H. Nakanishi, M. E. Fisher, Phys. Rev. Lett. **49**, 1565 (1982).
- [83] M. E. J. Newman, G. T. Barkema, *Monte Carlo Methods in Statistical Physics* (Clarendon Press, Oxford, 1999).
- [84] B. Nienhuis, *Phase Transitions and Critical Phenomena*, vol. 11, ed. C. Domb and J. L. Lebowitz (Academic Press, London, 1987).
- [85] L. Onsager, Phys. Rev. **65**, 117 (1944).
- [86] I. Peschel, L. Turban, F. Igloi, J. Phys. A **24**, L1229 (1991).

- [87] V. N. Plechko, Phys. Lett. A **239**, 289 (1998).
- [88] M. Pleimling, F. A. Bagaméry, L. Turban, F. Iglói, J. Phys. A **37** 8801, (2004).
- [89] M. Pleimling, J. Phys. A **37** R97 (2004).
- [90] M. Pleimling, W. Selke, Eur. Phys. J. B **1**, 135 (1998).
- [91] A. M. Polyakov, Zh. Eksp. Teor. Fiz. **63** 24, (Soviet Phys. JETP, **36**, 12) (1972).
- [92] R. B. Potts, Proc. Camb. Phil. Soc. **48**, 106 (1952).
- [93] V. V. Prudnikov, P. V. Prudnikov, A. A. Fedorenko, Phys. Rev. B **62**, 8777 (2000).
- [94] I. Reš, P. Straley, Phys. Rev. B **61**, 14425 (2000).
- [95] H. Rieger, F. Iglói, Phys. Rev. Lett. **83**, 3741 (1999).
- [96] V. Riva, J. Card, Phys. Lett. B **622**, 339 (2005).
- [97] L. N. Schur, Phys. Rev. E **65**, 016107 (2002).
- [98] W. Selke, L. N. Shchur, A. L. Talapov, *Annual Reviews of Computational Physics*, vol. 1, ed. D. Stauffer (World Scientific, Singapore, 1994).
- [99] B. N. Shalaev, Sov. Phys. Solid State **26**, 1811 (1984).
- [100] B. N. Shalaev, Phys. Rep. **237**, 129 (1994).
- [101] R. Sknepnek, T. Vojta, Phys. Rev. B **69**, 174410 (2004).
- [102] H. E. Stanley, *Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena* (Clarendon Press, Oxford, 1971).
- [103] H. E. Stanley, Phys. Rev. **176**, 718 (1968).
- [104] D. Stauffer, A. Aharony, *Introduction to Percolation Theory* (Taylor and Francis, London, 1991).
- [105] R. B. Stinchcombe, *Phase Transition and Critical Phenomena*, vol. 7, ed. C. Domb and J. L. Lebowitz (Academic Press, New York, 1983).
- [106] R. H. Swendsen, J. S. Wang, Phys. Rev. Lett. **58** 86 (1987).
- [107] T. R. Thurston, G. Helgesen, J. P. Hill, D. Gibbs, B. D. Gaulin, P. J. Simpson, Phys. Rev. B **49**, 15730 (1994).
- [108] J. D. van der Waals, *On the continuity of gaseous and liquid states* (North Holland, Amsterdam, 1988).
- [109] J. S. Wang, W. Selke, V. S. Dotsenko, V. B. Andreichenko, Physica A **164**, 221 (1990).

- [110] A. Weinrib, Phys. Rev. B **29**, 387 (1984).
- [111] P. Weiss, J. de Phys. **6**, 660 (1907).
- [112] B. Widom, J. Chem. Phys. **43**, 3892 (1965).
- [113] K. G. Wilson, J. B. Kogut, Phys. Rev. C **12**, 75 (1974).
- [114] K. G. Wilson, Phys. Rev. B **4**, 3174 (1971).
- [115] U. Wolff, Phys. Rev. Lett. **62**, 361 (1989).
- [116] F. Y. Wu, Rev. Mod. Phys. **54**, 235 (1982).
- [117] J. M. Yeomans, *Statistical Mechanics of Phase Transitions* (Clarendon Press, Oxford, 1992).
- [118] A. P. Young, H. Rieger, Phys. Rev. B **53**, 8486 (1996).
- [119] J. M. Ziman, *Models of disorder* (University Press, Cambridge, 1979).

Köszönetnyilvánítás

Mindenekelőtt szeretném megköszönni két témavezetőmnek a doktori tanulmányaim alatt nyújtott segítséget. Köszönöm Dr. Iglói Ferenc professzornak a belém vetett bizalmat, közös munkánk során nyújtott támogatást, mely által betekintést nyerhettem a modern statisztikus fizikába. Szeretném hálámat kifejezni Loïc Turban professzornak, aki nélkül nem jöhetett volna létre a franciaországi tanulmányaim. Kitartó türelme által sajátítottam el a Monte Carlo módszer apró fortélyait.

Szeretném megköszönni Dr. Gyémánt Iván tanszékvezetőnek, hogy biztosította a kutatásaimhoz szükséges feltételeket, továbbá Dr. Lajkó Péternek, hogy mindvégig bátorított. Köszönet illeti az Elméleti Fizika Tanszék összes többi alkalmazottját is.

Ezúton szeretnék köszönetet mondani az Henri Poincaré Egyetem Laboratoire de Physique des Matériaux dolgozóinak, különösképpen Dr. Christophe Chatelainnek a külföldi tanulmányom alatt nyújtott segítségért.

Végezetül szeretném hálámat kifejezni családomnak, akik mindvégig figyelemmel követték munkámat, valamint feleségemnek, Johának a kimeríthetetlen támogatást.

Kétdimenziós modellek kritikus viselkedése inhomogén perturbációk esetén

Összefoglalás

A fizika minden területén a homogén rendszerek egyszerű tulajdonsággal bírnak, emiatt sajátos szerepet töltenek be. Ugyanakkor a valós rendszerekben valamilyen mértékben megjelenik az inhomogenitás. Szokásos példa erre a kristályokban megfigyelhető atomi szennyeződések, valamint a rácshibák. A valós rendszerek ezen tulajdonsága indította el a rendezetlenséget tartalmazó modellek vizsgálatát.

A rendezetlen rendszereken belül nagy hangsúly helyeződik a fázisátalakulással bíró modellekre. Ezen rendszereknél elsősorban azt a kérdéskört járják körül, hogy a homogén rendszerhez képest milyen mértékben változik meg a modell viselkedése inhomogén perturbációk hatására. Előfordulhat, hogy a fázisátalakulási pont megszűnik, vagy a fázisátalakulás rendje megváltozik, esetleg a modell viselkedését új univerzális osztály határozza meg.

Harris fogalmazott meg először hígított rendszerekre egy heuresztikus kritériumot a rendezetlenség stabilitására vonatkozólag. A rendezetlenség releváns voltát a megfelelő tiszta rendszer fajhőjének exponensével hozta kapcsolatba. Gondolatmenetét azóta számos folytonos fázisátalakulással bíró modell különböző típusú rendezetlenségére általánosították. Ezen eredmények nyomán intenzív numerikus és analitikus vizsgálatok kezdődtek meg az egyes véletlen modellek univerzális osztályainak vizsgálatára.

Az inhomogenitásra talán az egyik legegyszerűbb példa a szabad határfelület. Ezt a homogén rendszerből úgy kaphatjuk meg, hogy végtelen sok kötést kettévágunk. Egy sík mentén elhelyezkedő felület hatását a tömbi fázisátalakulásra először a kétdimenziós Ising modellnél vizsgálták. Megállapították, hogy a felülethez kapcsolódó kritikus exponensek értékei különböznek a rendszer belsejében megfigyelhető tömbi értékektől.

Egy altéren végighúzó véletlen tér is inhomogenitást eredményez. A rendszer belsejében ez többnyire releváns perturbációt okoz, ahogy az a kétdimenziós Ising modell esetén ismert. Új fixpont jelenik meg, amely felületi jellegű. Hiszen a véletlen tér szétrombolja a lokális rendet, és ezáltal a rendszer belsejében végrehajtott effektív vágást jelent. Másfelől a véletlen tér nemcsak a rendszer belsejében, hanem a szabad határfelületen is jelentkezhet. Ekkor a perturbáció releváns voltát a tiszta rendszerhez tartozó lokális rendparaméter korrelációs függvényének felülettel párhuzamos kritikus exponense határozza meg.

A kötésekben meglévő perturbáció is eredményezheti, hogy a rendezetlen rendszer kritikus viselkedése eltér a tiszta rendszerétől. Ekkor többnyire feltételezik, hogy az adott

problémát leíró paraméterek független azonos eloszlású véletlen változók, melyek között nincs korreláció. Ugyanakkor léteznek olyan rendszerek, ahol a véletlen változók között fellépő korrelációk megváltoztatják a korrelálatlan rendezetlenséghez képest a fázisátalakulás univerzális osztályát.

Az előbbiekhöz képest másfajta rendezetlenséggel van dolgunk, ha két különböző tömbi illetve felületi kritikus tulajdonsággal bíró modell összekapcsolásakor kialakuló határfelületet vizsgálunk. Amennyiben a két alrendszer kritikus hőmérséklete lényegesen különbözik egymástól, akkor a határon a fázisátalakulás felületi jellegű. Ugyanakkor az ilyen fajta inhomogenitás hatására kialakuló lokális viselkedés eléggé összetett lehet, ha a két alrendszer kritikus hőmérséklete megegyezik, vagy csak kismértékben tér el egymástól. Ebben az esetben a határfelület viselkedését a két különböző univerzális osztályba tartozó alrendszer közötti kölcsönhatás vagy versengés határozza meg.

Jelen dolgozatban a fent említett inhomogenitásokat tanulmányoztuk kétdimenziós modellek esetén. Vizsgálataink során az alábbi eredményeket értük el.

- A/1 A kétdimenziós Ising modell szabad határfelületéhez zérus várható értékkel rendelkező véletlen felületi teret kapcsoltunk. Ezen marginálisan irreleváns perturbáció esetén meghatároztuk a felületi mágnesezettség kritikus exponensének vezető logaritmikus korrekciókat is tartalmazó alakját. Hőmérsékletfüggő effektív felületi exponens bevezetésével széles körű Monte Carlo szimulációkon keresztül tanulmányoztuk az elméleti becslést. A különböző erősségű felületi terek esetén többféleképpen is kimutattuk a vezető logaritmikus korrekciót.
- A/2 A fenti modellt a kritikus pontjában is megvizsgáltuk. A mágnesezettségi profil kezdeti növekedést meghatározó effektív felületi exponens függ a véges rendszer méretétől. Kihasználva a korrelációs hossz és a redukált hőmérséklet között fennálló kapcsolatot a kritikus pontban adott mérethez tartozó felületi exponensből adott hőmérséklethez tartozó effektív felületi mágnesezettségi exponenshez jutunk. Az ily módon nyert eredményeink abba a kritikus ponthoz közeli tartományba szolgáltatnak adatokat és illeszkednek jól az elméleti úton meghatározott görbére, ahol a véges méretből adódó korlátok miatt nem tudtunk hőmérséklettől függő effektív felületi exponenst mérni.
- B/1 Kéttengelyű korrelált rendezetlenséggel bíró Ising modellt vizsgáltuk. A parametrizálás következményeképpen a rendszer önduális maradt. A modell egzaktul meghatározható kritikus pontjában Monte Carlo szimulációkat hajtottunk végre. Ezek során az egy spinre jutó mágneses momentumokat, szuszceptibilitást, fajhőt, valamint a szuszceptibilitás logaritmusának hőmérséklet szerinti deriváltját mértük. Véges méret skálázással meghatároztuk az adott fizikai mennyiségek kritikus exponensét. Mérési adataink konzisztensek voltak, így a skálatörvények segítségével kifejeztük a modell többi kritikus exponensét.
- B/2 A kéttengelyű korrelált rendezetlenséggel rendelkező Ising modell konform invarianciáját tanulmányoztuk. A kritikus pontban mért energia profilból a Schwarz-Christoffel transzformáció segítségével meghatároztuk az energiasűrűség skálázási

dimenzióját. Az így kapott érték összhangban volt a véges méret skálázás során kapott eredménnyel. Hasonló megállapításra jutottunk a mágnesezettségi profil vizsgálatakor.

- C/1 Végezetül két, másodrendű fázisátalakulással bíró modell összekapcsolásánál kialakuló határfelület kritikus viselkedését tanulmányoztuk. Feltételeztük, hogy az alrendszerek belsejében ugyanazon hőmérsékleten jelenik meg a rend, ám eltérő univerzális osztályba tartoznak. A határfelületen a kötések erősségét változtatva a rendparaméter profilját analizáltuk a kritikus pont közelében. A ϕ^k modellt használva az átlagtér elmélet keretein belül analitikusan vizsgáltuk a problémát. A két félvégtelen alrendszer rendparaméter profiljainak összekapcsolása az extrapolációs hosszön keresztül történt. Három, lényegesen különböző kritikus viselkedés adódott.
- C/2 Az analitikus úton nyert eredményeket felhasználtuk a fenomenológiai skálázás során. A határfelület fázis átalakulásához tartozó mágnesezettségi exponenst a két félvégtelen alrendszer tömbi és felületi exponenseinek segítségével fejeztük ki. A profil simaságára is megfogalmaztunk feltételeket. Az elméleti eredményeinket Monte Carlo szimulációk segítségével ellenőriztük. Vizsgálatainkhoz a kétdimenziós Ising, Potts és Baxter-Wu modell használtuk. A szimulációs eredmények összhangban álltak az analitikus elvárásokkal.

Logarithmic corrections in the two-dimensional Ising model in a random surface field

M Pleimling¹, F A Bagaméry^{2,3}, L Turban³ and F Iglói^{2,4}

¹ Institut für Theoretische Physik I, Universität Erlangen-Nürnberg, D-91058 Erlangen, Germany

² Institute of Theoretical Physics, Szeged University, H-6720 Szeged, Hungary

³ Laboratoire de Physique des Matériaux, Université Henri Poincaré (Nancy 1), BP 239, F-54506 Vandœuvre lès Nancy Cedex, France

⁴ Research Institute for Solid State Physics and Optics, H-1525 Budapest, PO Box 49, Hungary

E-mail: turban@lpm.u-nancy.fr

Received 15 June 2004

Published 1 September 2004

Online at stacks.iop.org/JPhysA/37/8801

doi:10.1088/0305-4470/37/37/003

Abstract

In the two-dimensional Ising model weak random surface field is predicted to be a marginally irrelevant perturbation at the critical point. We study this question by extensive Monte Carlo simulations for various strengths of disorder. The calculated effective (temperature or size-dependent) critical exponents fit with the field-theoretical results and can be interpreted in terms of the predicted logarithmic corrections to the pure system's critical behaviour.

PACS numbers: 05.70.Jk, 05.50.+q

1. Introduction

In an inhomogeneous system the local critical behaviour near localized or extended defects may differ considerably from the bulk critical behaviour in the regular lattice (for a review, see [1]). One possible source of inhomogeneity is quenched (i.e., time-independent) randomness, which can be localized at the surface of the system (fluctuating surface coupling constants [2–6], microscopic terraces at the surface [7]) or at a grain boundary in the bulk of the system. It is known experimentally [8–10] that impurities may diffuse from inside the sample and segregate on the surface or at grain boundaries. In adsorbed systems, quenched disorder is naturally present since adatoms may bind randomly on equivalent surface sites [11].

In a theoretical description of the local critical behaviour of these systems, close to the bulk critical point, one can use a coarse-grained picture in which quenched randomness couples to some local operator. The local operator considered in this paper is the surface order parameter, hence the perturbation is described by the introduction of random fields (RFs) localized at the

surface. Usually the RF has zero mean and its variance is used to characterize the strength of disorder.

In the weak-disorder limit, the relevance or irrelevance of the perturbation can be analysed by making use of a Harris-type criterion [12]. The condition for the irrelevance of RFs on a defect with dimension $d - 1$ can be expressed in terms of the decay exponent for the local order parameter correlations in the pure system [2] as

$$\eta_{\parallel} \geq 1. \quad (1)$$

A plane of RFs in the bulk often constitutes a relevant perturbation as it is the case for the two-dimensional (2D) Ising model with $\eta = 1/4$. Thus a new fixed point appears, which controls the local critical behaviour. This fixed point is expected to be a surface one since RFs tend to destroy the local order and the bulk defect then acts as an effective cut.

Surface RFs are irrelevant for the 3D Ising model as noted and demonstrated through Monte Carlo (MC) simulations [13]. Curiously, in the case of a system with continuous symmetry, like the 3D Heisenberg model, surface RFs destroy the bulk long-range order [14] according to Imry–Ma arguments [15], although the perturbation is irrelevant at the ordinary surface transition according to (1). Among 2D systems the Ising model represents the borderline case, since $\eta_{\parallel} = 1$ [16]. For this model, field-theoretical investigations [11, 17] predict that the weak surface RF is a marginally irrelevant perturbation. Consequently, the surface critical properties of the random model are characterized by the critical singularities of the pure model supplemented by logarithmic corrections to scaling.

These theoretical predictions have not yet been confronted with the results of numerical calculations. In general, the observation and characterization of logarithmic corrections to scaling by numerical methods are notoriously difficult tasks, particularly in systems with quenched disorder. In this respect, a well-known example is the diluted 2D ferromagnetic Ising model, for which the accurate form of the singularities was long debated [18–23].

In this paper we present the results of a numerical study of the surface critical behaviour of the 2D Ising model in the presence of random surface fields. In section 2 we present the model and the known results about its critical properties. Then, through intensive Monte Carlo simulations, we determine effective surface magnetization exponents in two different ways. In section 3, they are obtained as a function of the deviation from the critical temperature. In section 4, we use a small homogeneous surface field at the critical point to deduce size-dependent exponents from the magnetization profiles. In section 5 we discuss the agreement between theoretical and numerical results.

2. The model and its predicted surface critical properties

We consider the Ising model on a $L \times M$ square lattice with the Hamiltonian

$$\mathcal{H} = -J \sum_{i=1}^{L-1} \sum_{j=1}^M (s_{i,j} s_{i+1,j} + s_{i,j} s_{i,j+1}) - \sum_{j=1}^M (h_1(j) s_{1,j} + h_L(j) s_{L,j})$$

$$s_{i,M+1} = s_{i,1}, \quad h_i(j) = \begin{cases} h_s + h & \text{with probability } p = 1/2 \\ h_s - h & \text{with probability } p = 1/2, \end{cases} \quad (2)$$

where $s_{i,j} = \pm 1$. J is the first-neighbour exchange interaction. The RF $h_s \pm h$ acts on the surface spins in the columns at $i = 1$ and $i = L$ and periodic boundary conditions are used in the vertical direction. Our main interest is to calculate the averaged magnetization per column, $m_i = \langle |\sum_j s_{i,j}| \rangle / M$.

For the pure system, i.e. with vanishing surface field, the surface magnetization, $m_s = m_1 = m_L$ is exactly known in the thermodynamic limit ($L, M \rightarrow \infty$) [16]:

$$m_{s,\text{pure}} = \left[\coth(2K) \frac{\sinh(2K) - 1}{\cosh(2K) - 1} \right]^{1/2}, \quad (3)$$

in terms of $K = J/k_B T$, where T is the temperature. At the critical point with $\sinh(2K_c) = 1$ the surface magnetization vanishes as

$$m_{s,\text{pure}} \approx m_0 t^{1/2}, \quad (4)$$

in terms of the reduced temperature, $t = (T_c - T)/T_c$, and $m_0^2 = 4(\sqrt{2} + 1)K_c \ln(2K_c)$. The relevant length scale is the bulk correlation length which, for $t > 0$, is given by [24]

$$\xi = [2 \ln(\sinh(2K))]^{-1}, \quad (5)$$

with the lattice constant for unit length. The correlation length diverges at the critical point as $\xi \approx [2\sqrt{2}K_c t]^{-1}$. Thus the reduced temperature and the length scale are related by

$$-\ln t \simeq 0.913 + \ln \xi. \quad (6)$$

In the presence of random surface fields there are no exact results available. In this case one can use the replica trick to transform the semi-infinite system with a random surface field into n semi-infinite replicas, coupled two-by-two through their surface spins, via nearest-neighbour interactions proportional to h^2 . The average properties of the random system are obtained in the limit $n \rightarrow 0$.

The surface critical properties of the system have been studied via two different methods, both using the differential renormalization group (RG) techniques where the lengths are rescaled by a factor e^l . The surface coupling between the replicas transforms as

$$h^2(l) = \frac{h^2}{1 + \kappa h^2 l}. \quad (7)$$

In the first approach [17] a conformal mapping is used at the bulk critical point, with $h_s = 0$, to transform the n semi-infinite replicas into n infinite strips with width L , which are coupled to each other at both surfaces through h^2 . The behaviour of the inverse correlation length is studied using degenerate perturbation theory to second order in h^2 . From the transformation of the inverse correlation length on the strips under rescaling by $e^l = L$, with $n = 0$, and using the gap-exponent relation [25], one can identify the L -dependent, effective decay exponent $\eta_{\parallel}$ which is given by

$$\eta_{\parallel} = 1 + \frac{1}{\ln L}, \quad (8)$$

to leading logarithmic order.

In the second approach [11] the behaviour under rescaling of the homogeneous part of the surface field is determined as

$$h_s(l) = \frac{h_s e^{l/2}}{(1 + \kappa h^2 l)^{1/2}}. \quad (9)$$

The surface free energy density transforms as

$$f_s(t, h_s, h^2) = e^{-l} f_s[e^{l/\nu} t, h_s(l), h^2(l)], \quad (10)$$

where ν is the correlation length exponent. Using (9), the surface magnetization reads

$$m_s(t, h^2) = \left. \frac{\partial f_s}{\partial h_s} \right|_{h_s=0} = \frac{e^{-l/2}}{(1 + \kappa h^2 l)^{1/2}} m_s[e^{l/\nu} t, h^2(l)]. \quad (11)$$

With $e^l = \xi \sim t^{-\nu}$ and $\nu = 1$ according to (5), ignoring higher order correction, one obtains

$$m_s(t, h^2) \sim \frac{t^{1/2}}{(1 - \kappa_1 h^2 \ln t)^{1/2}}, \quad 0 < t \ll 1. \quad (12)$$

Thus the critical singularity of the pure model is supplemented by a logarithmic correction to scaling. From a practical point of view, one can define temperature-dependent effective exponents through

$$\beta_s(t) = \frac{\ln[m_s(t(1+\delta))/m_s(t(1-\delta))]}{\ln[(1+\delta)/(1-\delta)]} = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{1}{|\ln t|} + \dots \right), \quad (13)$$

with $\delta \rightarrow 0$. The last expression gives the leading logarithmic correction following from equation (12).

Taking into account the scaling relation $\eta_{\parallel} = 2\beta_s/\nu$ with $\nu = 1$, the effective exponents in equations (13) and (8) correspond in terms of the relevant length scales, $L \rightarrow \xi \sim 1/t$.

The following two sections are devoted to a numerical test of the validity of these theoretical results.

3. Effective exponents

The surface critical exponents are deduced from the temperature dependence of the magnetization m_i in the surface layers (for a review, see [26]). We set the homogeneous surface field to zero, $h_s = 0$, the strength of the random surface field ranging from $h = 0.6$ to $h = 1.5$, and take a finite reduced temperature, $t > 0$. Systems of square and rectangular shapes containing $L \times M$ spins, with L and M ranging from 50 to 1000, have been studied using the standard single-spin-flip method. Although systems with rectangular shapes ($M < L$) lead to reduced finite-size effects, the fraction of surface spins is smaller than for a square system and more runs are needed to achieve the same accuracy for the surface magnetization which is self-averaging. Thus we worked with square systems to spare computer time. The final data are obtained after averaging over at least 1000 different runs with different realizations of the random surface field. For every run, time average has been taken over a few 10^4 Monte Carlo steps per spin after equilibration.

As an illustration we present m_i at $t = 0.05$ and $t = 0.02$ in figure 1 for different strengths of the RF. The profile of the pure system is shown for comparison. For a given t and different values of h , m_i displays a plateau around $i = L/2$ for large enough systems. It corresponds to the bulk magnetization, m_b , since its height is independent of h . If we approach the surfaces close enough, $i, L-i < \xi$, we enter in the surface region where the value of the magnetization is rapidly decreasing to its surface value, m_s . As seen in figure 1, for a given t the surface magnetization m_s and the inverse size of the surface region are decreasing with increasing disorder strength h .

According to finite-size scaling, in a large but finite system, sufficiently close to its critical point, $m_s(t)$ behaves as $(-t)^{\beta_s} f(\xi/L)$, where the scaling function, $f(x)$, tends to a constant for small values of its argument. In the actual calculations, we approach the transition point only to such a distance that the finite-size effects remain negligible and effective surface exponents are calculated using (13). In practice, finite-size effects have been circumvented by adjusting the size of the sample in a standard approach [4]. For a given value of t , data obtained for different system sizes are compared. Away from the critical point these data agree as long as the correlation length is less than the extent of the smaller system. Closer to T_c the correlation length increases and at some stage it gets comparable to the size of the smaller system. Finite-size effects then show up by a characteristic fast drop of the effective

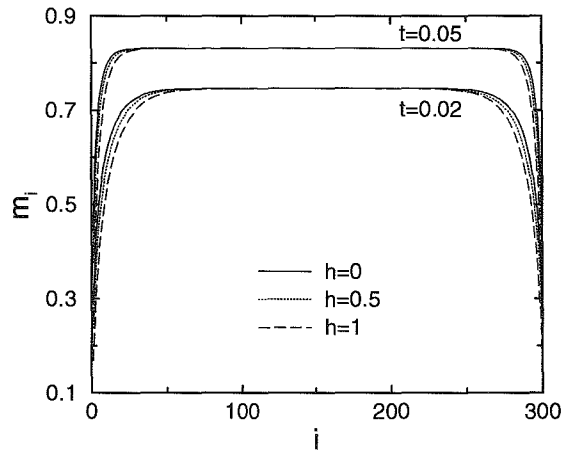


Figure 1. Magnetization profiles with random surface fields $h = 0, 0.5$ and 1 at $t = 0.05$ and $t = 0.02$. The data have been obtained for a system with 300×300 spins.

exponent [4]. The smaller system is then discarded and the procedure is continued with two system sizes which still yield identical data at that temperature. This approach is somehow cumbersome but assures that the final data are essentially free of finite-size effects.

The effective exponents are shown in figure 2 for different values of the strength of the RF. Here, in order to check the form of the logarithmic corrections in equations (8) and (12), β_s is plotted as a function of $1/|\ln t|$. For a given t the effective exponents are increasing with h as expected since RFs decrease local order. On the other hand, for a given h , $\beta_s(t)$ first shows a monotonic increase when t decreases and its value passes over the pure system's surface exponent, $\beta_s = 1/2$. Then, by further decreasing the reduced temperature, $\beta_s(t)$ seems to approach a maximum value. This saturation effect is more evident for large values of h . Unfortunately, the size limitation did not allow us to approach the transition point close enough to follow the predicted decrease of the effective exponent.

Here, in order to compare the numerical results with the theoretical predictions and to extrapolate our data to $t \rightarrow 0$, we use the following expression,

$$m_s(t) = m_0 t^{1/2} \frac{1 + at}{(1 + b \ln t)^{1/2}}, \quad (14)$$

which contains the leading analytic correction which follows from equation (3) and the leading logarithmic corrections to the fixed-point singularity given by (12). Note that the two corrections have different signs and their competing effect results in the non-monotonic temperature dependence of the effective exponent, $\beta_s(t)$. For a given RF, we have fitted the surface magnetization data to the form given in (14) with the amplitudes a and b as free parameters. From this, the effective surface magnetization exponent was calculated and used to extrapolate the data points in figure 2. The data extrapolate to the value of the pure system $\beta_{s,pure} = 1/2$ after an 'overshooting effect'. A quite similar tendency was observed in [20] for the bulk magnetization exponent of the 2D random bond Ising model. In our calculations, however, the maximum value is almost reached for $h \geq 1$, which was not possible for the random bond model.

In order to check the leading logarithmic correction to the effective exponent, we have calculated the difference of $\beta_s(t)$ and its value in the pure system, $\beta_{s,pure}(t)$, as calculated from (3) via equation (13). This difference, which is plotted in the inset of figure 2, no longer

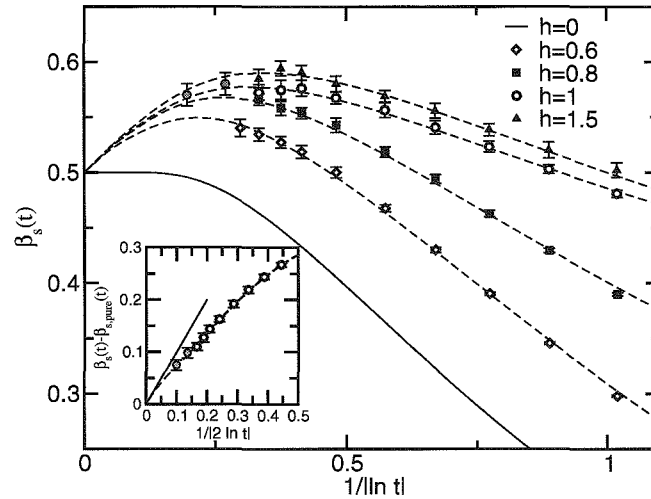


Figure 2. Effective surface exponent for different strengths of the random surface field. The two first points (grey circles) for $h = 1$ were deduced from the short-distance behaviour of the critical profiles discussed in section 4. The broken lines fitting the numerical data correspond to the formula in equation (14), with $a = -0.60$, $b = -0.23$ ($h = 0.6$), $a = -0.53$, $b = -0.40$ ($h = 0.8$), $a = -0.40$, $b = -0.47$ ($h = 1.0$) and $a = -0.47$, $b = -0.72$ ($h = 1.5$). The inset gives the difference between the effective exponents for the random ($h = 1$) and the pure systems. The straight line gives the predicted leading logarithmic correction.

contains the leading analytic correction; therefore, we expect to be able to compare it with the theoretical prediction in equation (13). As seen in the inset for the random surface field, $h = 1$, the corrections are compatible with theory, although much larger systems are needed in order to reach the asymptotic regime.

The form of the logarithmic corrections has been analysed in still another way by forming the ratio, $r(t, h) = m_{s,\text{pure}}/m_s$, of the surface magnetizations in the pure and in the disordered systems. In this way the leading analytic correction to scaling is eliminated. As shown in figure 3, the square of $r(t, h)$ has an asymptotic linear dependence on $\ln t$, the slope of which is proportional to h^2 , as shown in the inset of figure 3. This is in complete agreement with the theoretical prediction in equation (12).

4. Critical profiles

In this section we study the system at the critical point, $t = 0$; however, in the presence of a small homogeneous surface field, $h_s \ll h$. A typical magnetization profile in the system with $M \ll L$ is shown in the inset of figure 4. These data have been obtained with the Swendsen–Wang algorithm with a layer of ghost spins next to the surface [27]. At least 1000 runs with different realizations of the random surface field were performed, the time average of every run resulting from typically 3×10^5 MC updates.

As known from an analysis of the non-random system [27] the profile first increases close to the surface and then decreases in the bulk. The surface critical exponent, β_s , influences the form of the initial part and can be extracted from it. The non-vanishing surface field h_s introduces a new surface length scale, l_s , which in 2D is given by $l_s \sim h_s^{-1/(1-\eta_l/2)}$ and scales as $\sim h_s^{-2}$ for the Ising model.

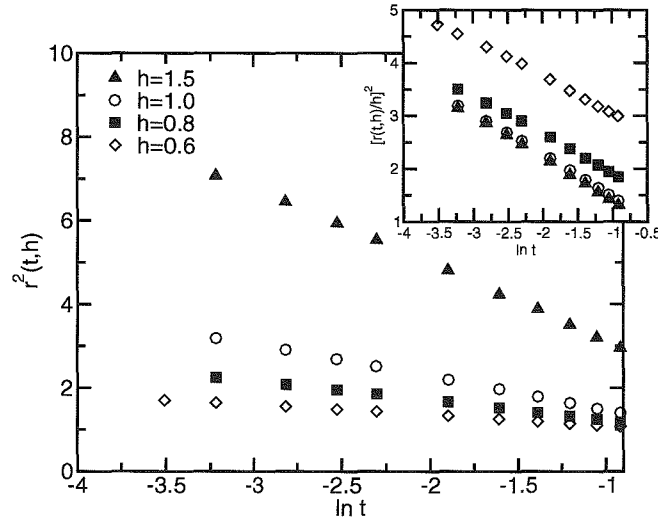


Figure 3. Square of the ratio $r(t, h)$ of the surface magnetizations in the pure and in the disordered Ising model as a function of $\ln t$. The slopes are proportional to h^2 as shown in the inset. Error bars are much smaller than the symbol sizes.

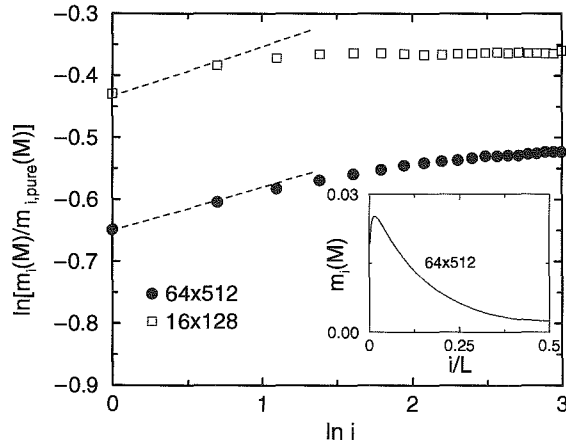


Figure 4. Ratio of the initial part of the critical magnetization profiles calculated in the random and in the pure system in the presence of a small homogeneous magnetic field. The initial slope in the log-log plot corresponds to the difference in the effective magnetization exponents (see the text). Inset: one half of the magnetization profile in the random system.

The initial part of the profile is restricted to $i \ll M, l_s$ and, according to finite-size scaling theory it behaves as

$$m_i(M, l_s) = i^{-x_m} g(i/M, i/l_s), \quad (15)$$

where $x_m = \beta/\nu = 1/8$ is the bulk magnetization scaling dimension. For small values of its arguments the scaling function g is expected to factorize as $g_0(i/M)g_s(i/l_s)$. For the pure 2D Ising model the second term is logarithmic [28], $g_s(i/l_s) \sim \ln(i/l_s) \sim \ln(ih_s^2)$, which makes

the numerical analysis difficult. For the Ising model with RF on the surface, the first term is expected to behave as

$$g_0(y) \sim \frac{y^{1/2}}{(1 + \kappa h^2 \ln y)^{1/2}}. \quad (16)$$

This form incorporates logarithmic corrections which, with $i = 1$ and $M \sim \xi$, are in agreement with the form of the surface magnetization given in equation (12). Now, in analogy with (13), an effective surface magnetization exponent can be defined as

$$\frac{\beta_s(y)}{\nu} = \frac{\ln[g_0(y(1 - \delta))/g_0(y(1 + \delta))]}{\ln[(1 + \delta)/(1 - \delta)]} \quad (17)$$

which, finally when $y \ll 1$, will be a function $\beta_s(M)$ of the characteristic length of the problem.

In order to get rid of the logarithmic factor, $g_s(i/l_s)$, we have calculated the ratio $m_i(M)/m_{i,\text{pure}}(M)$ of the initial profiles in the random and pure systems. Assuming that g_s has the same logarithmic singularity for both, we arrive at the conclusion that the ratio of profiles scales with the difference of the effective exponents, $\Delta\beta_s(M) = \beta_s(M) - \beta_{s,\text{pure}}(M)$.

In the actual calculation we set $h_s = 0.01$ and $h = 1$, and performed MC simulations on systems with sizes $M = 16$ and 64 and different aspect ratios $\alpha = L/M$. For $\alpha = 4$ and 8 , the initial part of the profiles turned out to be indistinguishable. The ratios calculated for the largest α are presented in figure 4 and, from the extrapolated initial slopes in a log-log plot, the differences of the effective exponents take the values $\Delta\beta_s(16) = 0.08(1)$ and $\Delta\beta_s(64) = 0.07(1)$. In order to compare these estimates with the effective exponents obtained in section 3 with a finite t , we use the correspondence of equation (6) with $M = \xi$. The data points obtained in this way are inserted in figure 2. They seem to fit very well with the predicted theoretical curve and are located in the descending part of the curve. Therefore this calculation gives further support to the theoretical results about the form of the logarithmic corrections.

5. Discussion

Marginally irrelevant operators are responsible for logarithmic corrections to scaling, the form of which can often be predicted by field theory and conformal invariance. According to the second-order perturbation theory, the random surface field is expected to be such a marginally irrelevant operator at the surface fixed point of the 2D Ising model. This conjecture, which is made on the basis of the replica trick and in the weak disorder limit, is confronted here with the results of extensive MC simulations for varying strength of the disorder. The calculated effective surface magnetization exponent, which depends either on the distance t from the critical point or on the finite size M of the critical system, varies with these parameters. Since this variation is non-monotonic, a direct extrapolation to the fixed-point values cannot be made from the data available on finite systems. However, the variation of the effective exponents is in good agreement with the theoretical form, which contains the predicted logarithmic correction to scaling to the pure systems critical behaviour. For the largest systems and for the strongest random fields, the numerical results are not too far from that obtained perturbatively in linear order. Therefore we interpret our results as numerical evidence in favour of the validity of the field-theoretical predictions.

Acknowledgments

We thank D E Feldman for bringing the results of [14] to our attention. FAB thanks the French Ministry of Foreign Affairs for a research grant. This work has been supported by the Hungarian National Research Fund under grant no OTKA TO34183, TO37323, MO28418 and M36803, by the Ministry of Education under grant no FKFP 87/2001, by the EC Centre of Excellence (no ICA1-CT-2000-70029). Simulations have been done on the IA32 cluster of the Regionales Rechenzentrum Erlangen and at CINES Montpellier under project pnm2318. The Laboratoire de Physique des Matériaux is Unité Mixte de Recherche CNRS No 7556.

References

- [1] Iglói F, Peschel I and Turban L 1993 *Adv. Phys.* **42** 683
- [2] Diehl H W and Nüsser A 1990 *Z. Phys. B* **79** 69
- [3] Diehl H W and Nüsser A 1990 *Z. Phys. B* **79** 79
- [4] Pleimling M and Selke W 1998 *Eur. Phys. J. B* **1** 385
- [5] Diehl H W 1998 *Eur. Phys. J. B* **1** 401
- [6] Chung M-C, Kaulke M, Peschel I, Pleimling M and Selke W 2000 *Eur. Phys. J. B* **18** 655
- [7] Selke W, Pleimling M, Peschel I, Kaulke M, Chung M-C and Catrein D 2002 *J. Magn. Magn. Mater.* **240** 349
- [8] Weller D, Alvarado S F, Gudat W, Schröder K and Campagna M 1985 *Phys. Rev. Lett.* **54** 1555
- [9] Rau C and Eichner S 1986 *Phys. Rev. B* **34** 6347
- [10] Rau C and Robert M 1987 *Phys. Rev. Lett.* **58** 2714
- [11] Cardy J 1991 *J. Phys. A: Math. Gen.* **24** L1315
- [12] Harris A B 1974 *J. Phys. C: Solid State Phys.* **7** 1671
- [13] Mon K K and Nightingale M P 1988 *Phys. Rev. B* **37** 3815
- [14] Feldman D E and Vinokur V M 2002 *Phys. Rev. Lett.* **89** 227204
- [15] Imry Y and Ma S K 1975 *Phys. Rev. Lett.* **35** 1399
- [16] McCoy B M and Wu T T 1973 *The Two-Dimensional Ising Model* (Cambridge: Harvard University Press) p 132
- [17] Iglói F, Turban L and Berche B 1991 *J. Phys. A: Math. Gen.* **24** L1031
- [18] Dotsenko Vik S and Dotsenko VI S 1981 *Sov. Phys.—JETP* **33** 37
- [19] Shalaev B N 1984 *Sov. Phys. Solid State* **26** 1811
- [20] Wang J-S, Selke W, Dotsenko VI S and Andreichenko V B 1990 *Physica A* **164** 221
- [21] Kühn R 1994 *Phys. Rev. Lett.* **73** 2268
- [22] Plechko V N 1998 *Phys. Lett. A* **239** 289
- [23] Shchur L N 2002 *Phys. Rev. E* **65** 016107
- [24] Baxter R J 1982 *Exactly Solved Models in Statistical Mechanics* (London: Academic) p 118
- [25] Cardy J 1984 *J. Phys. A: Math. Gen.* **17** L385
- [26] Pleimling M 2004 *J. Phys. A: Math. Gen.* **37** R79
- [27] Czerner P and Ritschel U 1997 *Int. J. Mod. Phys. B* **11** 2075
- [28] Bariev R Z 1988 *Theor. Math. Phys.* **77** 1090

Two-dimensional Ising model with self-dual biaxially correlated disorder

Farkas Á. Bagaméry,^{1,2} Loïc Turban,^{2,*} and Ferenc Igloi^{3,1,†}¹*Institute of Theoretical Physics, Szeged University, H-6720 Szeged, Hungary*²*Laboratoire de Physique des Matériaux, Université Henri Poincaré (Nancy 1), BP 239, F-54506 Vandœuvre lès Nancy Cedex, France*³*Research Institute for Solid State Physics and Optics, H-1525 Budapest, P.O. Box 49, Hungary*

(Received 30 March 2005; revised manuscript received 15 July 2005; published 6 September 2005)

We consider the Ising model on the square lattice with biaxially correlated random ferromagnetic couplings, the critical point of which is fixed by self-duality. The disorder, which has a correlator, $G(r) \sim r^{-1}$, represents a relevant perturbation according to the extended Harris criterion. Critical properties of the system are studied by large scale Monte Carlo simulations. The correlation length critical exponent $\nu=2.005(5)$ corresponds to that expected in a system with isotropic correlated long-range disorder, whereas the scaling dimension of the magnetization density $x_m = \beta/\nu = 0.1294(7)$ is somewhat larger than in the pure system. Conformal properties of the magnetization and energy density profiles are also examined numerically.

DOI: 10.1103/PhysRevB.72.094202

PACS number(s): 64.60.Fr, 05.50.+q, 75.10.Nr

I. INTRODUCTION

The presence of quenched disorder of different types is an inevitable feature of real materials. The effect of randomness on the physical properties of systems is often dramatic, in particular in the vicinity of singular points, such as for classical phase transitions at finite temperature or for quantum phase transitions at $T=0$. In a random system the set of critical exponents associated with a phase transition can be completely different from that in the nonrandom system, which means that disorder can be a relevant perturbation in the sense of the Harris criterion.¹ In most of the studies of disordered systems the parameters (couplings, longitudinal or transverse fields, etc.) are expected to be independent and identically distributed random variables among which there is no correlation.

There are, however, systems in which the random variables exhibit some kind of correlations, the effect of which can even change the random universality class of the phase transition. Examples of systems with strongly correlated disorder are random quantum magnets at $T=0$, in which the disorder is strictly correlated in the temporal direction. Indeed the critical properties of such a type of random systems are quite unusual, for a review see Ref. 2. In the classical counterpart of these quantum systems, the disorder is strictly correlated in one direction, which leads to models introduced and partially exactly solved by McCoy and Wu.³ In a further generalization, the disorder can be strictly correlated in a $d' < d$ dimensional subspace, where d is the dimension of the system.⁴⁻⁸

Correlations between random variables can also be isotropic. One example is presented in Ref. 9 in which the experimental observations are explained¹⁰ with the assumption of the presence of randomly oriented dislocation lines in the sample. Also in some random quantum magnets¹¹ and in the non-Fermi liquid behavior of f -electron compounds¹² the disorder is expected to be isotropically correlated due to long-ranged Ruderman-Kittel-Kasuya-Yosida (RKKY) interactions. In a coarse-grained picture, the disorder in some coupling strength $\Delta K(\mathbf{r}) = K(\mathbf{r}) - \bar{K}(\mathbf{r})$ is characterized by its correlator, $G(\mathbf{r}-\mathbf{r}') = \Delta K(\mathbf{r})\Delta K(\mathbf{r}')$, which is expected to be

isotropic, $G(r) = G(|r|)$, and to decay algebraically for large arguments: $G(r) \sim r^{-a}$. For example, randomly oriented straight dislocation lines are associated with a correlator exponent $a = d - 1$.

The influence of Gaussian disorder with power-law correlations on the critical behavior of the m -component vector spin model has been studied in Ref. 13 by field-theoretical methods using a double expansion in $\epsilon = 4 - d$ and $\delta = 4 - a$. Extending the Harris criterion, correlated disorder with $a \geq d$ is found to be effectively short range and thus relevant only when the pure system has a positive specific heat exponent.¹ When $a < d$ and $m = 1$ (Ising model) the correlated disorder is shown to be a relevant perturbation at the short-range-disorder fixed point, provided the correlator decays sufficiently slowly, i.e., when

$$a < \frac{2}{\nu_{\text{short}}}, \quad (1)$$

where ν_{short} is the correlation length exponent of the system with short-range disorder. At the stable long-range-disorder fixed point the correlation length critical exponent is found to be given by

$$\nu = 2/a, \quad 2/a > \nu_{\text{short}}. \quad (2)$$

This result is argued to be exact and thus the extended Harris criterion in Eq. (1) is marginal when the long-range nature of the correlations is relevant. On the other hand the magnetic exponents, such as $x_m = \beta/\nu$, depend on both a and d .

Recently,¹⁴ the validity of the scaling relation (2) has been questioned on the basis of a direct renormalization analysis of the scaling functions for the $3d$ system in the two-loop approximation, using a Pade-Borel summation technique to evaluate the critical exponents for different values of a .

Numerical and field-theoretical calculations on different types of systems with correlated disorder (percolation,¹⁵ three-dimensional (3D) Ising model,¹⁶ polymers,¹⁷ quantum Ising model,¹¹ etc.) seem to be in overall agreement with the prediction of Eq. (2).

Here we should make, however, two remarks. First, in the case of the Ising model with randomly distributed dislocation lines, oriented along the lattice axes,¹⁶ for which rotational symmetry is broken, the critical behavior was found to be the same as for the model with Gaussian correlated disorder when $a=2$. This shows that the details of the model of correlated disorder are seemingly irrelevant, the critical behavior being essentially governed by the decay of the disorder correlations. Our second remark concerns the fact that, in systems with correlated disorder, the location of the critical point is generally not known exactly, which introduces a limitation on the accuracy of the numerical calculations.

In the present paper, our aim is to increase the numerical accuracy of the calculation in a statistical mechanical system with correlated disorder and address also such questions (c.f. critical point density profiles, validity of conformal invariance, etc.) which have not been considered previously. For this purpose, we consider the two-dimensional (2D) square lattice Ising model and introduce a type of biaxially correlated disorder which preserves self-duality, thus the critical point is exactly known. Our model can be considered as a 2D self-dual version of the random dislocation model of Ballesteros and Parisi.¹⁶ In the vicinity of the critical point the properties of the system are explored at the scale of the (diverging) correlation length. A correlator exponent $a=1$ can be deduced from the integral of the disorder correlator inside a large square of linear size L . Thus at a coarse-grained level our model can be compared to a model with Gaussian correlated disorder for the same value of a .

For the 2D Ising model uncorrelated disorder coupled to the local energy density (such as dilution or random ferromagnetic couplings) is a marginally irrelevant perturbation,^{18,19} hence critical singularities of the pure system are supplemented by logarithmic corrections. In particular the correlation length exponent ν_{short} keeps its unperturbed value $\nu_0=1$. As a consequence from Eq. (1) the biaxially correlated disorder of our model is expected to be relevant. In order to explore the critical properties of the system and to check the validity of Eq. (2) we perform large scale Monte Carlo simulations. In particular the critical exponents are deduced from the finite-size scaling behavior of various magnetic and thermal quantities at the critical temperature, which is exactly known. We also determine the critical profiles of the magnetization and energy densities in order to check whether the forms obtained for the profiles through conformal methods remain valid in the random system after averaging over the disorder.

The structure of the paper is the following. The model, its self-duality, and the relevance-irrelevance criterion are described in Sec. II. Finite-size scaling calculations of the critical exponents are presented in Sec. III and the critical profiles are studied by conformal methods in Sec. IV. Our results are discussed in Sec. V.

II. MODEL OF SELF-DUAL BIAXIALLY CORRELATED DISORDER

A. Random-bond Ising models

We study the spin 1/2 2D Ising model on a square lattice with Hamiltonian

$$-\beta\mathcal{H} = \sum_{i=1}^L \sum_{j=1}^L (K_{ij}^x \sigma_{i,j} \sigma_{i+1,j} + K_{ij}^y \sigma_{i,j} \sigma_{i,j+1}), \quad (3)$$

where $\beta=1/k_B T$. The Ising spin $\sigma_{i,j}=\pm 1$ is associated with the site (i,j) , located at the intersection between column i and line j . K_{ij}^x and K_{ij}^y denote the random couplings between $\sigma_{i,j}$ and its first-neighbors $\sigma_{i+1,j}$ in the horizontal direction and $\sigma_{i,j+1}$ in the vertical direction, respectively. In the following we use the parametrization:

$$e^{2K_{ij}^\tau} - 1 = 2^{1/2+u_{ij}^\tau}, \quad (4)$$

with $\tau=x,y$. Under duality transformation²⁰ the horizontal and vertical directions are exchanged and we obtain a simple relation between the u_{ij}^x and u_{ij}^y variables

$$u_{ij}^x \rightarrow u_{ij}^{y*} = -u_{ij}^x, \quad u_{ij}^y \rightarrow u_{ij}^{x*} = -u_{ij}^y. \quad (5)$$

where the superscript $*$ is used to denote dual variables.

With different distributions of u_{ij}^τ and thus K_{ij}^τ different models are defined, which we list below.

1. Nonrandom model

The nonrandom model with $u_{ij}^x=u^x$ and $u_{ij}^y=u^y$ has its critical point at $u^x=-u^y$, which follows from self duality in Eq. (5). For the isotropic model the critical point is at $u^x=u^y=0$. The critical exponents are²⁰ $\nu=1$ and $x_m=\beta/\nu=1/8$.

2. Random model with uncorrelated disorder

In this case the u_{ij}^τ parameters are independent and identically distributed (iid) random variables, which are taken from a distribution $P(u)$. At the critical point of the model the distribution is symmetric,²¹ $P(u)=P(-u)$, which is also a consequence of self-duality, see Eq. (5). The strength of disorder Δ is measured by $\Delta^2=u^2$. In a coarse-grained picture cells, of linear size L , are defined with cell variables $u' = L^{-d} \sum u_{ij}$, where the sum runs over L^d sites, and $d=2$ is the dimension of the system. In the coarse-grained description we have $\Delta' = \Delta L^{-d/2}$. To decide about relevance-irrelevance of a perturbation according to Harris¹ one should consider the ratio Δ'/t at a length-scale, $L=\xi \sim t^{-\nu}$, where t measures the distance from the critical point. For the 2D Ising model this analysis predicts a marginal effect of the disorder, actually a marginally irrelevant one. As a consequence critical singularities of the nonrandom model are supplemented by logarithmic corrections.^{18,19}

3. Random model with isotropically correlated disorder

In this case the u_{ij}^τ parameters are random numbers which are correlated at different sites and we have for large spatial separation

$$\overline{u_{ij} u_{i'j'}} \sim [(i-i')^2 + (j-j')^2]^{-a/2}. \quad (6)$$

The strength of disorder in the coarse-grained picture reads as¹³ $\Delta'_c = \Delta_c L^{-\omega}$, with $\omega = \min(d, a)/2$, thus long-range correlation in the disorder can be relevant for $a < d$. Indeed for the 2D Ising model with $a < 2$ this type of perturbation is relevant, see Eq. (1) and the correlation length critical exponent

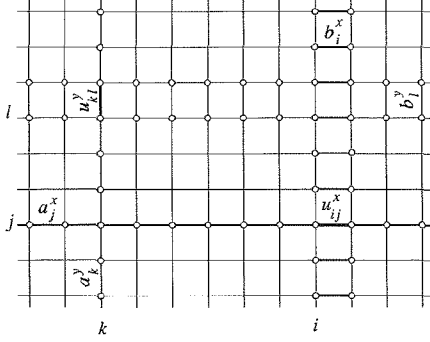


FIG. 1. Parameters entering in the definition of the correlated disorder.

is conjectured to be exactly given by Eq. (2). For isotropic correlated disorder the location of the critical point is not known exactly which makes it difficult to analyze numerical results in the critical regime.

4. McCoy-Wu model

In the McCoy-Wu model³ the disorder is strictly correlated in columns (or lines)

$$u_{ij}^x = b_i^x (= a_j^x), \quad u_{ij}^y = a_i^y (= b_j^y), \quad (7)$$

where the parameters b_i^x , a_i^y (a_j^x , b_j^y) are iid random variables. Now in the coarse-grained description with cells of size L , the disorder strength behaves as $\Delta'_{\text{MW}} = \Delta_{\text{MW}} L^{-1/2}$. This type of disorder represents a relevant perturbation. According to exact and conjectured exact results, this model displays a strongly anisotropic scaling behavior,²² so that $\ln \xi_{\perp} \sim \sqrt{\xi}$, where $\xi(\xi_{\perp})$ is the correlation length in the nontranslationally invariant (translationally invariant) direction. The critical exponents²² are given by: $\nu=2$ and $x_m=(3-\sqrt{5})/4$.

B. Biaxially correlated disorder

Here we introduce a type of correlated disorder which is

- Symmetric, with respect to the interchange of the x and y axis,
- Has a duality symmetry, and
- Represents a 2D version of the random dislocation model.¹⁶

To be concrete we use the parametrization

$$u_{ij}^x = b_i^x + a_j^x, \quad u_{ij}^y = a_i^y + b_j^y, \quad (8)$$

(see Fig. 1), which is the local average (for each bond) of the couplings in two McCoy-Wu models where the disorder is along the x and the y axis, respectively, see Eq. (7). Consequently the strength of disorder is rescaled as in the McCoy-Wu model $\Delta'_b = \Delta_b L^{-1/2}$, but the system has isotropic scaling, as far as the asymptotic behavior of the average correlations is considered. This type of perturbation is relevant (see Sec. II C) and has the same scaling exponent as the isotropically correlated random perturbation with the correlation parameter $a=1$ in Eq. (6). We expect that the critical behavior is dictated by the averaged decay of the disorder

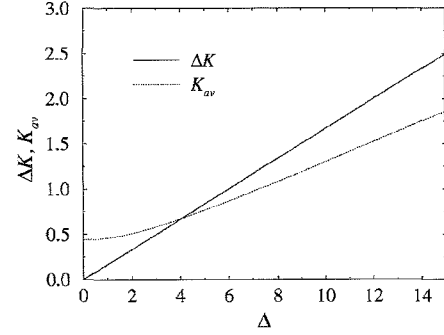


FIG. 2. Variation with Δ of the average value K_{av} and the standard deviation ΔK of the couplings. The standard deviation is almost linear in Δ .

correlations. As for the 3D random dislocation model¹⁶ where the dislocation lines are located along the lattice axes, the breaking of rotational symmetry (before averaging over the quenched disorder) should not change the universality class. The present model, which has the same type of disorder correlations as the Ballesteros-Parisi dislocation model, should also display the same critical behavior as the model with isotropically correlated disorder discussed in Ref. 13.

An important advantage of the parametrization used in Eq. (8) is that the couplings obey the duality relation in Eq. (5) and thus the system is self-dual for an appropriate choice of the coupling parameters a_i^y , a_j^x , b_i^x , and b_j^y . Self-duality can be realized in different ways, leading to a critical system in which both lattice directions are statistically equivalent or not. Here we study the geometry of disorder with the highest symmetry, i.e., with the same symmetric and uniform probability density for all the random variables:

$$P(s) = P(-s) = \begin{cases} \frac{1}{2\Delta} & -\Delta \leq s \leq \Delta \\ 0 & |s| > \Delta \end{cases}$$

$$s = a_i^y, a_j^x, b_i^x, b_j^y. \quad (9)$$

The evolution of the average value K_{av} and the standard deviation ΔK of the coupling as a function of the half-width Δ of the probability density is shown in Fig. 2. The standard deviation, with the expansion

$$\Delta K = 0.165764\Delta + 0.000085\Delta^3 + 0.000010\Delta^5 + O(\Delta^7), \quad (10)$$

is almost linear in Δ . Evidently the relative strength of the disorder $\Delta K/K_{\text{av}}$ is monotonously increasing with Δ .

C. Relevance-irrelevance criterion

The stability of the fixed point governing the critical behavior of the pure 2D system in the presence of correlated disorder can be analyzed as by Harris.^{1,13} At the length scale L , the sum of the deviations from the average coupling grows typically like $\Delta L^{3/2}$ since it contains $2L$ independent random variables with a vanishing average, each variable being of

order ΔL due to the correlations along the L lines and the L columns. Dividing by the number of couplings one defines a typical deviation from the average temperature as

$$\delta t(L) \simeq \Delta \frac{L^{3/2}}{L^2} \simeq \Delta L^{-1/2}. \quad (11)$$

The relevance of the perturbation depends on the behavior of the ratio

$$\frac{\delta t(\xi_0)}{t} \propto t^{-1+\nu_0/2}, \quad \xi_0 \propto t^{-\nu_0}, \quad (12)$$

when one approaches the critical point ($t \rightarrow 0$). Here $t = |T - T_c|/T_c$ is the reduced temperature, ξ_0 the correlation length, and ν_0 the correlation length exponent of the unperturbed system. The perturbation is relevant when this ratio diverges at the critical point, i.e., when $\nu_0 < 2$. Thus the biaxial correlated disorder is a relevant perturbation in the case of the 2D Ising model for which $\nu_0 = 1$.

Alternatively the same conclusion can be drawn from the value of the scaling dimension of Δ following from Eq. (11). Under a change of the length scale by a factor b , δt , which is a thermal perturbation, has a scaling dimension $y_{\delta t} = 1/\nu_0$ and thus transforms as

$$\delta t' = \Delta' L'^{-1/2} = b^{1/\nu_0} \delta t = b^{1/\nu_0} \Delta L^{-1/2}. \quad (13)$$

With $L' = L/b$ one obtains

$$\Delta' = b^{y_\Delta} \Delta, \quad y_\Delta = \frac{2 - \nu_0}{2\nu_0}, \quad (14)$$

so that, in agreement with the previous result, one finds that the strength of the disorder increases under rescaling when $\nu_0 < 2$.

Here we remind that the biaxial correlated disorder, which is considered in this paper, can be represented by an effective correlator exponent $a=1$. Indeed, the stability limit of the fixed point for Gaussian correlated disorder in Eq. (1) with $a=1$ is the same as the one obtained here for biaxial correlations. As mentioned in the Introduction, this result follows from the comparison of the integral of the disorder correlator at a length scale L for both models. The possible universality of the critical properties of the system with respect to the form of correlated disorder, in particular the validity of the result predicted for the correlation length critical exponent in Eq. (2) will be studied in the following sections.

III. FINITE-SIZE SCALING AT THE CRITICAL POINT

A. Monte Carlo technique

We study the finite-size scaling behavior of different magnetic and thermal quantities at the critical point. We work on a square-shaped system with size L and we use periodic boundary conditions in both directions.

In order to limit the effects of the critical slowing down, the Monte Carlo simulations are performed using the Wolff cluster algorithm.²³ In order to estimate the equilibration time τ_e measured in cluster flips units, we compared the evolution of the energy and the magnetization toward equilib-

rium starting either from a random initial state or from an ordered initial state. We have also studied the autocorrelation time for the energy and the magnetization at equilibrium, in order to evaluate the statistical errors on the time averages.

The time averages are calculated during a time $\tau = 10^5$ to 2.5×10^5 Monte Carlo steps (MCS) after a waiting time of the order of $10\tau_e$ (10^3 to 5×10^4 MCS). The disorder averages are taken over $n_s \approx 10^4$ samples. These values were chosen in order to obtain a precision close to 1% for the different quantities studied.

The simulations are performed in a vanishing external field and we use the fluctuation-dissipation relations to evaluate the specific heat and the magnetic susceptibility. The averaged value of a quantity X is the result of a time average for a sample s followed by an average over n_s realizations of the disorder so that:

$$\overline{\langle X \rangle} = \frac{1}{n_s} \sum_{s=1}^{n_s} \langle X^{(s)} \rangle, \quad \langle X^{(s)} \rangle = \frac{1}{\tau} \sum_{i=1}^{\tau} X_i^{(s)}. \quad (15)$$

The total magnetization M and the total energy E are defined as

$$M = \sum_{i,j=1}^L \sigma_{i,j}, \quad E = - \sum_{i,j=1}^L (\sigma_{i,j} \sigma_{i+1,j} + \sigma_{i,j} \sigma_{i,j+1}). \quad (16)$$

The quantities studied are the following:

- The moments of the magnetization per site

$$m_p = \frac{\overline{\langle |M|^p \rangle}}{L^{2p}}, \quad m_1 = m. \quad (17)$$

- The susceptibility per site

$$\chi = \frac{\overline{\langle \Delta M^2 \rangle}}{L^2}, \quad \Delta M^2 = (M - \langle M \rangle)^2. \quad (18)$$

- The specific heat per site

$$C = \frac{\overline{\langle \Delta E^2 \rangle}}{L^2}, \quad \Delta E^2 = (E - \langle E \rangle)^2. \quad (19)$$

- The temperature derivative of the logarithm of the susceptibility

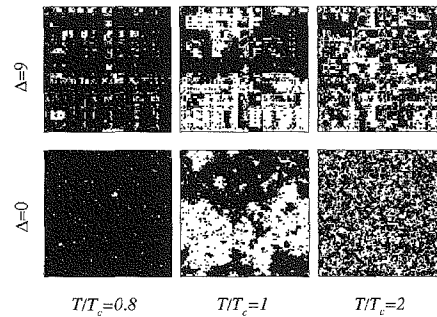


FIG. 3. Snapshots of equilibrium spin configurations for the random system ($\Delta=9$) and the pure system ($\Delta=0$) in the ordered phase ($T=0.8T_c$), at the critical point and in the paramagnetic phase ($T=2T_c$).

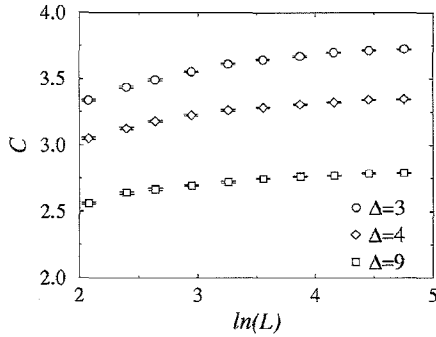


FIG. 4. Semilogarithmic plot of the finite-size behavior of the specific heat per spin at the critical point. The specific heat exponent α is negative and the behavior of C is dominated by its regular contribution for large values of L .

$$\Psi = \frac{\langle \Delta E \Delta M^2 \rangle}{\langle \Delta M^2 \rangle}, \quad \Delta E = E - \langle E \rangle. \quad (20)$$

B. Simulations results

In Fig. 3 equilibrium spin configurations for the system with biaxially correlated disorder at $\Delta=9$ are compared to the corresponding pure system configurations in the low-temperature phase, at the critical point and in the high-temperature phase for a system with size 116×116 with periodic boundary conditions. In the off-critical systems, spin clusters are larger for the disordered system whereas the long-range aspect is roughly the same for both systems at the critical temperature.

The finite-size behaviors at the critical point of the specific heat C , the moments of the magnetization density m_p , the susceptibility χ , and the temperature derivative of $\ln \chi$, Ψ , are shown in Figs. 4–7 for three values of the disorder amplitude $\Delta=3, 4$, and 9 , and for ten sizes ranging from $L=8$ to $L=116$.

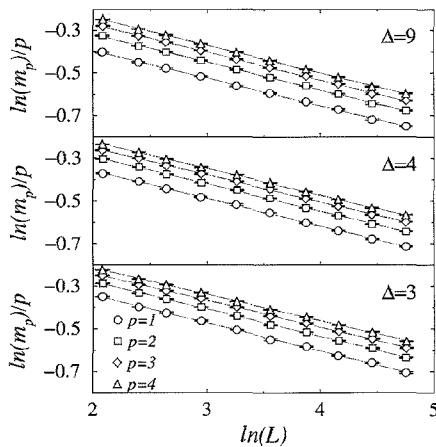


FIG. 5. Finite-size scaling of the moments of the magnetization density at the critical point. The lines correspond to linear fits of the data.

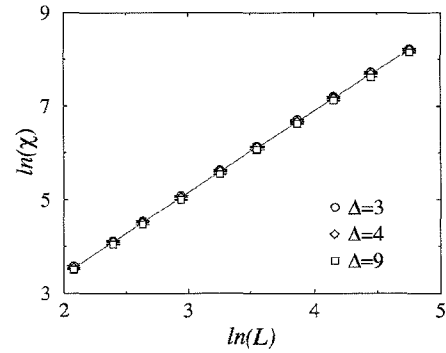


FIG. 6. Finite-size scaling of the magnetic susceptibility per spin at the critical point. The influence of Δ is quite small and the line gives the linear fit of all the data.

The specific heat saturates at large system size, which indicates that the regular contribution dominates the singular one. The singular contribution, behaving as $L^{\alpha/\nu}$, vanishes at large system size, i.e., the specific heat exponent α is negative. This is the reason why we studied the finite-size behavior of Ψ which diverges with the size of the system, thus allowing us to estimate the thermal exponent $1/\nu$.

According to finite-size scaling theory, the following behaviors are expected for a large critical system with size L :

$$m_p \propto L^{-px_m^{(p)}}, \quad x_m^{(1)} = x_m = \beta/\nu,$$

$$\chi \propto L^{\gamma/\nu}, \quad \gamma/\nu = d - 2x_m = 2(1 - x_m),$$

$$\Psi \propto L^{1/\nu}, \quad 1/\nu = y_t. \quad (21)$$

The log-log plots for $(m_p)^{1/p}$, χ , and Ψ display the expected linear behavior, although with noticeable deviations at small size and a slightly Δ -dependent slope for Ψ . Thus the magnetization and susceptibility exponents were simply obtained through linear fits, whereas we used a nonlinear fit of the data for Ψ .

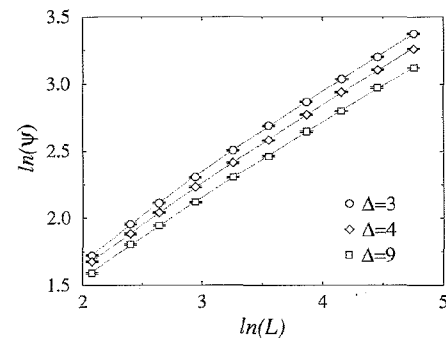


FIG. 7. Finite-size scaling of Ψ , temperature derivative of the magnetic susceptibility at the critical point. The lines are the nonlinear fits of the data as explained in the text.

TABLE I. Effective critical exponents deduced from the fits of the finite-size scaling data in Figs. 5–7. The last line gives the values of the effective correction-to-scaling exponent for Ψ defined in Eq. (22).

	$\Delta=3$	$\Delta=4$	$\Delta=9$
β/ν	0.1312(13)	0.1292(10)	0.1294(14)
$x_m^{(2)}$	0.1283(10)	0.1279(8)	0.1309(11)
$x_m^{(3)}$	0.1259(8)	0.1264(8)	0.1310(9)
$x_m^{(4)}$	0.1238(7)	0.1249(7)	0.1305(8)
γ/ν	1.7435(21)	1.7442(17)	1.7381(22)
$1/\nu$	0.5368(9)	0.5268(10)	0.5115(8)
ω	0.737(7)	0.573(6)	0.569(7)

$$\ln(\Psi) = A + \frac{1}{\nu} \ln(L) + \ln(1 + BL^{-\omega}). \quad (22)$$

The exponents are collected in Table I for the three values of the disorder strength. There is no significant variation of β/ν and γ/ν with Δ . Taking the average of the exponents obtained for the three values of Δ leads to

$$\frac{\beta}{\nu} = x_m = 0.1299(12), \quad \frac{\gamma}{\nu} = 1.7419(20). \quad (23)$$

There is no clear evidence of multiscaling: The slow decay of $x_m^{(p)}$ with increasing p is probably due to a crossover effect since it disappears at $\Delta=9$ when the disorder is sufficiently strong.

The variation of $1/\nu$ with Δ is significant. As shown in Fig. 8 it is linear in $1/\Delta$ and the extrapolation leads to

$$\frac{1}{\nu} = y_i = 0.4988(13), \quad (24)$$

at infinite disorder strength.

IV. CRITICAL PROFILES

The analysis of Monte Carlo data for the critical profiles using the tools of conformal theory provides an efficient method for the determination of bulk and surface critical exponents.^{24–26}

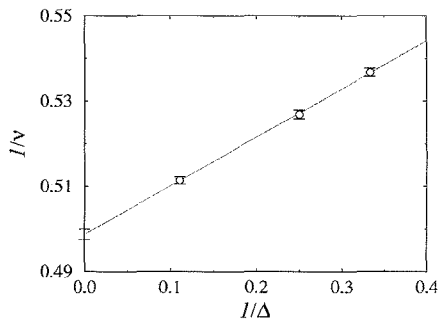


FIG. 8. Linear extrapolation of $1/\nu$ to infinite disorder strength.

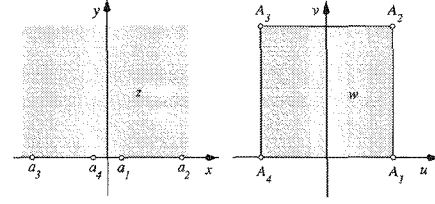


FIG. 9. (Color online) Conformal transformation of the half-plane into a square. The boundary conditions, free or fixed, are the same on both systems.

Using the replica trick for a system with biaxially correlated disorder leads to an effective Hamiltonian with long-range interactions between the replicas. Thus we do not expect our system to be conformally invariant at its new fixed point as it seems to be the case for uncorrelated disorder.²⁴ Nonetheless, in this section we assume that the critical profiles have a leading behavior which is the same as for a conformally invariant system. In both cases the form of the profiles is constrained by covariance under global scale transformations and by the values of surface and bulk exponents. We know of at least one example, the random Ising chain in a transverse field, for which the critical profiles follow quite accurately the conformal predictions,²⁷ although the system cannot be conformally invariant since it displays a strongly anisotropic scaling behavior.^{22,28}

A. Conformal transformation of the densities

On a semi-infinite critical system with fixed boundary conditions, the form of the magnetization profile is fixed, up to a constant amplitude, by translational, rotational, and global scale invariance. It decays as a power of the distance y from the surface²⁹

$$\overline{m(y)}_{\text{fixed}} = A_m y^{-x_m}, \quad x_m = \beta/\nu, \quad (25)$$

where the exponent x_m is the scaling dimension of the bulk magnetization density.

Let us consider the Schwarz-Christoffel transformation of the half-plane $z=x+iy$ such that

$$w(z) = \frac{L}{2K(k)} F(z, k), \quad z = \text{sn}\left(\frac{2Kw}{L}\right), \quad (26)$$

where $w(z)=u+iv$ and

$$F(z, k) = \int_0^z \frac{dt}{\sqrt{(1-t^2)(1-k^2t^2)}} \quad (27)$$

is the elliptic integral of the first kind with modulus k . $K(k)=F(1, k)$ is the complete elliptic integral of the first kind and sn is the Jacobian elliptic sine.

This conformal transformation maps the half-plane $y=\Im(z) \geq 0$ onto the interior of the square with $-L/2 \leq u \leq L/2$, $0 \leq v \leq L$ (see Fig. 9) when the modulus k verifies the relation $K(k)/K(\sqrt{1-k^2})=1/2$ (see, e.g., Ref. 30).

In the new geometry the magnetization density is given by

$$\overline{m(w)}_{\text{fixed}} = b(z)^{x_m} \overline{m(z)}_{\text{fixed}}, \quad b(z) = |w'(z)|^{-1}$$

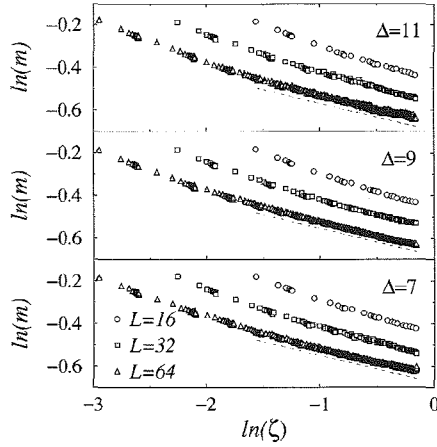


FIG. 10. Conformal profiles of the magnetization density for different system sizes L and disorder strength Δ . The dashed lines indicate the slope $-\beta/\nu$ expected from the finite-size scaling results.

$$w'(z) = \frac{L}{2K(k)\sqrt{(1-z^2)(1-k^2z^2)}}. \quad (28)$$

Finally, introducing the reduced variable

$$\zeta(w) = \frac{\mathcal{I}[z(w)]}{\sqrt{(1-z^2)(1-k^2z^2)}}, \quad (29)$$

the magnetization density varies as a power of ζ

$$m = \overline{m(\zeta)}_{\text{fixed}} \propto \zeta^{-x_m}. \quad (30)$$

The same behavior is obtained for the singular part of the energy density, for which

$$\overline{e(\zeta)}_{\text{sing}} \propto \zeta^{-x_e}, \quad x_e = 2 - 1/\nu. \quad (31)$$

In this case one needs to eliminate the regular contribution to the energy density. The regular part can be canceled by taking the difference δe between the energy density profiles obtained on a system with either free boundary conditions $e_{\text{free}}(w)$ or fixed boundary conditions $e_{\text{fixed}}(w)$ and then

$$\delta e = \overline{e_{\text{free}}(\zeta)} - \overline{e_{\text{fixed}}(\zeta)} \propto \zeta^{-x_e}. \quad (32)$$

The amplitudes of the singular parts have opposite signs with the two types of boundary conditions,^{26,31} thus in the difference the singular contribution is amplified and the bulk regular contribution is eliminated.

B. Monte Carlo simulations

We work on a square lattice with either fixed or free boundary conditions using the Swendsen-Wang cluster algorithm³² which is more efficient than the Wolff algorithm with fixed boundary conditions. The simulations were performed for three lattice sizes ($L=16, 32, 64$) and three values of the couplings ($\Delta=7, 9, 11$). After a waiting time $\tau_c=5 \times 10^3$ MCS, the time averages are taken during a time $\tau=6 \times 10^4$ MCS. The disorder averages are taken over a number of samples ranging from $n_s=2 \times 10^4$ for the smaller systems to $n_s=2 \times 10^3$ for the larger ones.

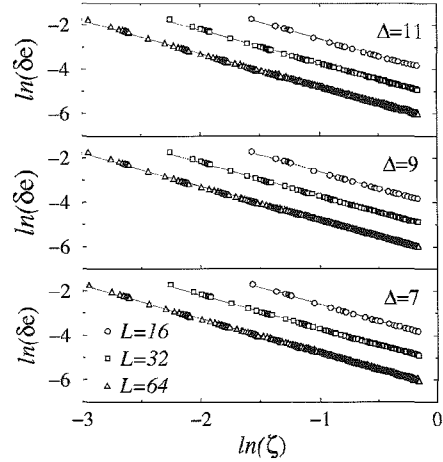


FIG. 11. Conformal profiles of the singular part of the energy density for different system sizes L and disorder strength Δ . The lines correspond to the linear fits of the data.

For the magnetization density profiles all the surface spins are fixed in the $+1$ state. The behavior of the singular part of the energy density is obtained by taking the difference of Eq. (32) between two systems with either free or fixed boundary conditions for the *same* realizations of the disorder, which considerably reduces the statistical noise.

The log-log plots for the magnetization and the energy densities are shown in Figs. 10 and 11 as functions of the reduced conformal variable ζ defined in Eq. (29).

The magnetization density profiles show strong corrections to scaling and due to the small values of ζ we were unable to find a reliable nonlinear fit of our data. Nevertheless, the dashed lines indicate that the asymptotic slopes are in agreement with the value of β/ν obtained by finite-size scaling and given in Eq. (23).

On the contrary, the corrections are very weak for the energy density profiles in Fig. 11 so that the slopes could be obtained with a good accuracy through a linear fit of the data. The small deviations from linearity occur close to the surface for small values of ζ . Only a few points are concerned and their weight in the fit is negligible. The values of x_e are collected in Table II for the different values of L and Δ . They are slowly decreasing when Δ or L increases.

V. DISCUSSION

Our results are collected in Table III. The scaling dimension of the magnetization density x_m is directly given by β/ν

TABLE II. Scaling dimension of the energy density x_e deduced from the linear fits of the conformal profiles in Fig. 11.

L	$\Delta=7$	$\Delta=9$	$\Delta=11$
16	1.5435(9)	1.5377(9)	1.5177(10)
32	1.5241(9)	1.5207(6)	1.5110(9)
64	1.5209(6)	1.5182(4)	1.5002(8)

TABLE III. Critical exponents deduced from the scaling laws using the finite-size scaling results for β/ν , γ/ν in Eq. (23) and $1/\nu$ in Eq. (24) as inputs.

x_m	x_e	α	β	γ	δ	ν	η
0.1294(7)	1.5012(13)	-2.01(1)	0.2604(31)	3.492(13)	14.46(8)	2.005(5)	0.2588(14)

in Eq. (23). Alternatively, it can be estimated using γ/ν together with the scaling law $\gamma/\nu = d - 2x_m$, which gives $x_m = 0.1291(10)$. The value in Table III corresponds to the center of the confidence interval which is common to the two estimates. It is quite close to the value for the pure 2D Ising model $x_m = 1/8$. Thus the magnetization in the random and pure systems have almost the same fractal dimensions. This explains why both systems in Fig. 3 have roughly the same aspect at the critical point. The value of x_m was used to calculate $\eta = 2x_m + 2 - d = 2x_m$ and $\delta = -1 + d/x_m$.

The value of ν following from Eq. (24) is such that, according to Eq. (14), the disorder is irrelevant at the new fixed point, as required for its stability. Furthermore the numerical estimate of ν , within the error of the calculation corresponds to the prediction in Eq. (2) with the effective correlator exponent, $a=1$. The estimate of ν leads to the value of the specific heat exponent through the Josephson scaling law $\alpha = 2 - d\nu$. The correlation length diverges more strongly in the random system with ν close to 2 than in the pure system with $\nu=1$, this might explain the difference in the cluster sizes for the off-critical systems in Fig. 3.

The scaling dimension of the energy density x_e is obtained using the scaling law $x_e = d - 1/\nu$. The values of x_e deduced from the conformal profiles, collected in Table II, are close to this estimate for large sizes and strong enough disorder.

To summarize we have studied the critical behavior of the square lattice Ising model with biaxially correlated disorder by large scale MC simulations. The different estimates of the critical exponents give a consistent picture, in which ν seems to be the same as for isotropic Gaussian correlated disorder,

whereas x_m is not very far from the pure and uncorrelated random systems values.

One important technical simplification of the model is its self-duality property, which is used to locate exactly the critical point. The same type of parametrization, as given in Eq. (8) can be used to preserve self-duality in the q -state Potts model, for any value of q .³³ An investigation of these models could provide further information about the nature of the phase transition in disordered systems. For example, $q=1$ is equivalent to the percolation problem,³⁴ whereas the phase transition in the pure system is of first order for $q > 4$.³⁵ In the latter problem, due to uncorrelated disorder, the transition is softened into a second-order one,³⁶ with a correlation length exponent $\nu_{\text{short}} \approx 1$.³⁷ Consequently, according to the extended Harris criterion in Eq. (1), the phase transition is expected to belong to a q -dependent universality class. If the limiting behavior for large q can be predicted, as for uncorrelated disorder³⁸ remains the subject of a separate study.

ACKNOWLEDGMENTS

We thank Christophe Chatelain for useful discussions and Bertrand Berche for giving us his tabulated values of ζ . F.Á.B. thanks the Ministère Français des Affaires Étrangères for a research grant. This work has been supported by the Hungarian National Research Fund under Grant Nos. OTKA TO34183, TO37323, TO48721, MO45596, and M36803. Intensive simulations have been performed at CINES Montpellier under Project No. pnm2318. The Laboratoire de Physique des Matériaux is Unité Mixte de Recherche CNRS No. 7556.

*Electronic address: turban@lpm.u-nancy.fr

†Electronic address: igloi@szfki.hu

¹A. B. Harris, J. Phys. C **7**, 1671 (1974).

²F. Iglói and C. Monthus, Phys. Rep. **412**, 277 (2005).

³B. M. McCoy and T. T. Wu, Phys. Rev. **176**, 631 (1968); **188**, 982 (1969); B. M. McCoy, *ibid.* **188**, 1014 (1969).

⁴S. N. Dorogovtsev, Fiz. Tverd. Tela (Leningrad) **22**, 321 (1980) [Sov. Phys. Solid State **22**, 188 (1980)]; Phys. Lett. **76A**, 169 (1980).

⁵D. Boyanovsky and J. L. Cardy, Phys. Rev. B **26**, 154 (1982).

⁶J. C. Lee and R. L. Gibbs, Phys. Rev. B **45**, 2217 (1992).

⁷V. Blavats'ka, C. von Ferber, and Yu. Holovatch, Phys. Rev. B **67**, 094404 (2003).

⁸R. Sknepnek and T. Vojta, Phys. Rev. B **69**, 174410 (2004).

⁹T. R. Thurston, G. Helgesen, J. P. Hill, D. Gibbs, B. D. Gaulin, and P. J. Simpson, Phys. Rev. B **49**, 15 730 (1994); K. Hirota, G. Shirane, P. M. Gehring, and C. F. Majkrzak, *ibid.* **49**, 11967

(1994).

¹⁰M. Altarelli, M. D. Núñez-Regueiro, and M. Papoular, Phys. Rev. Lett. **74**, 3840 (1995).

¹¹H. Rieger and F. Iglói, Phys. Rev. Lett. **83**, 3741 (1999).

¹²A. H. Castro Neto, G. Castilla, and B. A. Jones, Phys. Rev. Lett. **81**, 3531 (1998); M. C. de Andrade, R. Chau, R. P. Dickey, N. R. Dilley, E. J. Freeman, D. A. Gajewski, M. B. Maple, R. Movshovich, A. H. Castro Neto, G. Castilla, and B. A. Jones, *ibid.* **81**, 5620 (1998).

¹³A. Weinrib and B. I. Halperin, Phys. Rev. B **27**, 413 (1983).

¹⁴V. V. Prudnikov, P. V. Prudnikov, and A. A. Fedorenko, Phys. Rev. B **62**, 8777 (2000).

¹⁵A. Weinrib, Phys. Rev. B **29**, 387 (1984).

¹⁶H. G. Ballesteros and G. Parisi, Phys. Rev. B **60**, 12912 (1999).

¹⁷V. Blavats'ka, C. von Ferber, and Yu. Holovatch, Phys. Rev. E **64**, 041102 (2001).

¹⁸Vik. S. Dotsenko and Vl. S. Dotsenko, Adv. Phys. **32**, 129

- (1983); V. Dotsenko, Usp. Fiz. Nauk **165**, 481 (1995); B. N. Shalaev, Phys. Rep. **237**, 129 (1994).
- ¹⁹W. Selke, L. N. Shchur, and A. L. Talapov, in *Annual Reviews of Computational Physics*, Vol. 1, edited by D. Stauffer (World Scientific, Singapore, 1994), p. 17.
- ²⁰See R. J. Baxter, *Exactly Solved Models in Statistical Mechanics* (Academic Press, London, 1982).
- ²¹W. Kinzel and E. Domany, Phys. Rev. B **23**, 3421 (1981).
- ²²D. S. Fisher, Phys. Rev. Lett. **69**, 534 (1992); Phys. Rev. B **51**, 6411 (1995).
- ²³U. Wolff, Phys. Rev. Lett. **60**, 1461 (1988).
- ²⁴C. Chatelain and B. Berche, Phys. Rev. E **60**, 3853 (1999).
- ²⁵I. Reš and J. P. Straley, Phys. Rev. B **61**, 14425 (2000).
- ²⁶B. Berche, J. Phys. A **36**, 585 (2003).
- ²⁷F. Iglói and H. Rieger, Phys. Rev. B **57**, 11404 (1998).
- ²⁸A. P. Young and H. Rieger, Phys. Rev. B **53**, 8486 (1996).
- ²⁹M. E. Fisher and P. G. de Gennes, C. R. Seances Acad. Sci., Ser. B **287**, 207 (1978).
- ³⁰B. A. Fuchs and B. V. Shabat, *Functions of a Complex Variable* (Pergamon, Oxford, 1964).
- ³¹D. Karevski, P. Lajkó, and L. Turban, J. Stat. Phys. **86**, 1153 (1996).
- ³²R. H. Swendsen and J.-S. Wang, Phys. Rev. Lett. **58**, 86 (1987).
- ³³F. Y. Wu, Rev. Mod. Phys. **54**, 235 (1982).
- ³⁴P. W. Kasteleyn and C. M. Fortuin, J. Phys. Soc. Jpn. **46** (suppl.), 11 (1969).
- ³⁵R. J. Baxter, J. Phys. C **6**, L445 (1973).
- ³⁶M. Aizenman and J. Wehr, Phys. Rev. Lett. **62**, 2503 (1989); **64**, 1311(E) (1990).
- ³⁷For a review, see J. L. Cardy, Physica A **263**, 215 (1999).
- ³⁸J.-Ch. Anglès d'Auriac and F. Iglói, Phys. Rev. Lett. **90**, 190601 (2003); M.-T. Mercaldo, J.-Ch. Anglès d'Auriac, and F. Iglói, Phys. Rev. E **69**, 056112 (2004).

Critical behavior at the interface between two systems belonging to different universality classes

Farkas Á. Bagaméry,^{1,2} Loïc Turban,^{2,*} and Ferenc Igloi^{3,1,†}¹*Institute of Theoretical Physics, Szeged University, H-6720 Szeged, Hungary*²*Laboratoire de Physique des Matériaux, Université Henri Poincaré (Nancy 1), BP 239, F-54506 Vandœuvre lès Nancy Cedex, France*³*Research Institute for Solid State Physics and Optics, H-1525 Budapest, P.O. Box 49, Hungary*

(Received 13 January 2006; published 17 April 2006)

We consider the critical behavior at an interface which separates two semi-infinite subsystems belonging to different universality classes, thus having different sets of critical exponents, but having a common transition temperature. We solve this problem analytically in the frame of ϕ^k mean-field theory, which is then generalized using phenomenological scaling considerations. A large variety of interface critical behavior is obtained which is checked numerically on the example of two-dimensional q -state Potts models with $2 \leq q \leq 4$. Weak interface couplings are generally irrelevant, resulting in the same critical behavior at the interface as for a free surface. With strong interface couplings, the interface remains ordered at the bulk transition temperature. More interesting is the intermediate situation, the special interface transition, when the critical behavior at the interface involves new critical exponents, which, however, can be expressed in terms of the bulk and surface exponents of the two subsystems. We discuss also the smooth or discontinuous nature of the order parameter profile.

DOI: 10.1103/PhysRevB.73.144419

PACS number(s): 05.50.+q, 75.40.Cx, 75.70.Cn, 75.40.Mg

I. INTRODUCTION

Systems which undergo a second-order phase transition display singularities in different physical observables which have been the subject of intensive research, both experimentally and theoretically.¹ At the critical temperature, T_c , due to the existence of a diverging correlation length $\xi \sim |T - T_c|^{-\nu}$, microscopic inhomogeneities and single defects of finite size do not modify the critical singularities which are observed in the perfect systems.² However, inhomogeneities of infinite extent, such as the surface of the sample,³⁻⁵ internal defect planes,⁶ etc., may modify the local critical properties near the inhomogeneity, within a region with a characteristic size given by the correlation length. For example, the magnetization m , which vanishes in the bulk as $m \sim (T_c - T)^\beta$, behaves as $m_1 \sim (T_c - T)^{\beta_1}$ at a free surface³⁻⁵ and the two critical exponents β and β_1 are generally different.

Inhomogeneities having a more general form, such as localized⁷ and extended defects,⁸ corners,⁹ wedges and edges, parabolic shapes,¹⁰ etc., often have exotic local critical behavior; for a review, see Ref. 11. The local critical behavior can be nonuniversal, so that the local exponents vary continuously with some parameters, such as the opening angle of the corner,⁹ the amplitude of a localized,⁷ or extended defect.⁸ The inhomogeneity can also reduce the local order to such an extent that the local magnetization vanishes with an essential singularity, as observed at the tip of a parabolic-shaped system.¹⁰ On the contrary, for enhanced local couplings, a surface or an interface may remain ordered at or above the bulk critical temperature,³⁻⁵ which in a two-dimensional (2D) system leads to a discontinuous local transition.¹²

In the problems we mentioned so far the inhomogeneities are embedded into a critical system the bulk properties of which govern, among others, the divergence of the correlation length and the behavior of the order-parameter profile. There is, however, another class of problems, in which two

(or more) systems meet at an interface, each having different types of bulk (and surface) critical properties. In this respect we can mention grain boundaries between two different materials or the interface between two immiscible liquids, etc.

If the critical temperatures of the two subsystems are largely different, the nature of the transitions at the interface is expected to be the same as for a surface.¹³ At the lower critical temperature, due to the presence of the nearby ordered subsystem, the interface transition has the same properties as the extraordinary surface transition.³⁻⁵ At the upper critical temperature, the second subsystem being disordered, the interface transition is actually an ordinary surface transition.³⁻⁵ If the dimension of the system is larger than 2 and if the interface couplings are strong enough, one expects an interface transition in the presence of the two disordered subsystems whose properties should depend on the universality classes of these two subsystems.

Even in 2D, the local critical behavior at the interface can be more complex if the critical temperatures of the subsystems are the same or if their difference is much smaller than the deviation from their mean value. In this case an interplay or competition between the two different bulk and surface critical behaviors can result in a completely new type of interface critical phenomena. In this paper we study this problem, assuming that the critical temperatures of the two subsystems are identical.

The structure of the paper is the following. The mean-field solution of the problem including ϕ^3 , ϕ^4 , and ϕ^6 theories and the interface between them is presented in Sec. II. The mean-field results are generalized in Sec. III using phenomenological scaling considerations. In Sec. IV these results are confronted with Monte Carlo simulations in 2D for interfaces between subsystems belonging to the universality classes of the Ising model, the three- and four-state Potts models, as well as the Baxter-Wu (BW) model. Our results are discussed in Sec. V and some details about the analytical mean-field calculations are given in the Appendixes A and B.

II. MEAN-FIELD THEORY

A. Properties of the φ^k model

1. Free energy

We consider a system with volume V limited by a surface S in the Landau mean-field approximation. The total free energy is the sum of bulk and surface contributions which are functionals of the scalar order parameter $\varphi(\mathbf{r})$ so that:³⁻⁵

$$F[\varphi] = \int_{(V)} f_b[\varphi] dV + \int_{(S)} f_s[\varphi] dS. \quad (1)$$

Near a second-order transition, the order parameter is small and the bulk free energy density $f_b[\varphi]$ is written as an expansion in the order parameter and its gradient, limited to the following terms:

$$f_b[\varphi] = f_b[0] + \frac{C}{2}(\nabla\varphi)^2 + \frac{A}{2}\varphi^2 + \frac{B}{k}\varphi^k - h\varphi. \quad (2)$$

The second term, with $C > 0$, gives a positive contribution associated with the spatial variation of the order parameter. $A = -at$ ($a > 0$, $t = T_c - T$) is negative when $T < T_c$ and measures the deviation from the critical point. The next term with $B > 0$ ensures the stability of the system in the ordered phase. In the last term, h is the bulk external field. When k is odd, the order parameter is supposed to take only non-negative values; otherwise, the system would be unstable.

In the same way the surface free energy density is written as

$$f_s[\varphi] = f_s[0] + \frac{C_s}{2} \frac{\varphi^2}{\Lambda}, \quad (3)$$

where φ is the value of the order parameter on (S) . The constant C_s is positive and Λ is a characteristic length related to the surface and bulk couplings of the corresponding microscopic Hamiltonian of the system.³

2. Ginzburg-Landau equation

The mean-field equilibrium value of the order parameter, $\varphi(\mathbf{r})$, minimizes the free energy in (1). It is obtained through a variational method by calculating $\delta F[\varphi]$, the change of the free energy, which vanishes to first order in the deviation $\delta\varphi(\mathbf{r})$ of the order parameter from its equilibrium value. Using Eqs. (1)–(3), one obtains

$$\delta F[\varphi] = \int_{(V)} [C\nabla\varphi \cdot \nabla\delta\varphi + (A\varphi + B\varphi^{k-1} - h)\delta\varphi] dV + \int_{(S)} \left(C_s \frac{\varphi}{\Lambda} \right) \delta\varphi dS. \quad (4)$$

The first term in the volume integral may be rewritten as

$$C\nabla\varphi \cdot \nabla\delta\varphi = \nabla \cdot (C\delta\varphi\nabla\varphi) - C\delta\varphi\nabla^2\varphi, \quad (5)$$

and the contribution to (4) of the first term on the right can be transformed into a surface integral through Gauss' theorem. Then

$$\delta F[\varphi] = \int_{(V)} (-C\nabla^2\varphi + A\varphi + B\varphi^{k-1} - h)\delta\varphi dV + \int_{(S)} \left(-C\mathbf{n} \cdot \nabla\varphi + C_s \frac{\varphi}{\Lambda} \right) \delta\varphi dS, \quad (6)$$

where $\mathbf{n}$ is a unit vector normal to the surface and pointing inside the system.

At equilibrium, the first-order variation of the free energy vanishes. The volume integral leads to the Ginzburg-Landau equation

$$-C\nabla^2\varphi(\mathbf{r}) + A\varphi(\mathbf{r}) + B\varphi^{k-1}(\mathbf{r}) = h(\mathbf{r}) \quad (7)$$

governing the equilibrium behavior of the order parameter in the volume of the system and the surface integral provides the boundary condition:

$$C\mathbf{n} \cdot \nabla\varphi(\mathbf{r})|_{(S)} = C_s \frac{\varphi(\mathbf{r})}{\Lambda} \Big|_{(S)}. \quad (8)$$

3. Bulk critical behavior

In the bulk, the first term in (7) vanishes. The zero-field magnetization vanishes when $T > T_c$ and is given by

$$\varphi_b = \left(\frac{at}{B} \right)^\beta = \varphi_0 t^\beta, \quad \beta = \frac{1}{k-2}, \quad (9)$$

in the ordered phase ($T \leq T_c$, $h=0$).

The connected part of order-parameter two-point correlation function is given by

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = k_B T \frac{\delta\varphi(\mathbf{r})}{\delta h(\mathbf{r}')}, \quad (10)$$

where $\varphi(\mathbf{r})$ is the equilibrium order parameter, solution of the Ginzburg-Landau equation. Taking the functional derivative of Eq. (7), one obtains

$$-C\nabla_r^2 G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') + [A + (k-1)B\varphi_b^{k-2}]G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = k_B T \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (11)$$

This may be rewritten as

$$(-\nabla_r^2 + \xi^{-2})G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{k_B T}{C} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad (12)$$

where the expression of the bulk correlation length ξ follows from Eqs. (9) and (11) and reads

$$\xi = \left[(k-2) \frac{at}{C} \right]^{-\nu} = \xi_0 t^{-\nu}, \quad \nu = \frac{1}{2}, \quad (13)$$

in the ordered phase.

4. Order parameter profiles

We now assume that the surface of the system is located at $z=0$ so that $\varphi = \varphi(z)$. Then, according to Eqs. (7), (9), and (13), the zero-field normalized order-parameter profile $\hat{\varphi} = \varphi/\varphi_b$ is the solution of the following differential equation:

$$\frac{d^2\hat{\varphi}}{dz^2} = \frac{A}{C}\hat{\varphi} + \frac{B}{C}\varphi_b^{k-2}\hat{\varphi}^{k-1} = \frac{\hat{\varphi}^{k-1} - \hat{\varphi}}{(k-2)\xi^2}. \quad (14)$$

Multiplying by $2d\hat{\varphi}/dz$ and taking into account the bulk boundary condition, $d\hat{\varphi}/dz \rightarrow 0$ when $\hat{\varphi} \rightarrow 1$, a first integration leads to

$$\left(\frac{d\hat{\varphi}}{dz}\right)^2 = \frac{2\hat{\varphi}^k - k\hat{\varphi}^2 + k - 2}{k(k-2)\xi^2}. \quad (15)$$

To go further we have to specify the value of k and to distinguish between surfaces (or interfaces) which are more ordered [$\hat{\varphi}(0) > 1$] or less ordered [$\hat{\varphi}(0) < 1$] than the bulk. Below we list the solutions of Eq. (15) which will be needed in the sequel. We use the notation $\hat{\varphi}_+(z)$ [$\hat{\varphi}_-(z)$] for a system located in the $z > 0$ [$z < 0$] half-space. The values of the integration constants l_+ and l_- are determined by the boundary conditions at $z=0$.

φ^3 model, $\hat{\varphi}(0) > 1$:

$$\hat{\varphi}_\pm(z) = \frac{1}{2} \left[3 \coth^2\left(\frac{z \pm l_\pm}{2\xi_\pm}\right) - 1 \right],$$

$$\left.\frac{d\hat{\varphi}_\pm}{dz}\right|_0 = \mp \frac{3}{2\xi_\pm} \cosh\left(\frac{l_\pm}{2\xi_\pm}\right) \sinh^{-3}\left(\frac{l_\pm}{2\xi_\pm}\right). \quad (16)$$

φ^3 model, $\hat{\varphi}(0) < 1$:

$$\hat{\varphi}_\pm(z) = \frac{1}{2} \left[3 \tanh^2\left(\frac{z \pm l_\pm}{2\xi_\pm}\right) - 1 \right],$$

$$\left.\frac{d\hat{\varphi}_\pm}{dz}\right|_0 = \pm \frac{3}{2\xi_\pm} \sinh\left(\frac{l_\pm}{2\xi_\pm}\right) \cosh^{-3}\left(\frac{l_\pm}{2\xi_\pm}\right). \quad (17)$$

φ^4 model, $\hat{\varphi}(0) > 1$:

$$\hat{\varphi}_\pm(z) = \pm \coth\left(\frac{z \pm l_\pm}{2\xi_\pm}\right),$$

$$\left.\frac{d\hat{\varphi}_\pm}{dz}\right|_0 = \mp \frac{1}{2\xi_\pm} \sinh^{-2}\left(\frac{l_\pm}{2\xi_\pm}\right). \quad (18)$$

φ^4 model, $\hat{\varphi}(0) < 1$:

$$\hat{\varphi}_\pm(z) = \pm \tanh\left(\frac{z \pm l_\pm}{2\xi_\pm}\right),$$

$$\left.\frac{d\hat{\varphi}_\pm}{dz}\right|_0 = \pm \frac{1}{2\xi_\pm} \cosh^{-2}\left(\frac{l_\pm}{2\xi_\pm}\right). \quad (19)$$

φ^6 model, $\hat{\varphi}(0) > 1$:

$$\hat{\varphi}_\pm(z) = \sqrt{2} \left[3 \tanh^2\left(\frac{z \pm l_\pm}{2\xi_\pm}\right) - 1 \right]^{-1/2},$$

$$\left.\frac{d\hat{\varphi}_\pm}{dz}\right|_0 = \mp \frac{3\sqrt{2}}{2\xi_\pm} \sinh\left(\frac{l_\pm}{2\xi_\pm}\right) \cosh^{-3}\left(\frac{l_\pm}{2\xi_\pm}\right) \times \left[3 \tanh^2\left(\frac{l_\pm}{2\xi_\pm}\right) - 1 \right]^{-3/2}. \quad (20)$$

φ^6 model, $\hat{\varphi}(0) < 1$:

$$\hat{\varphi}_\pm(z) = \pm \sinh\left(\frac{z \pm l_\pm}{2\xi_\pm}\right) \left[\sinh^2\left(\frac{z \pm l_\pm}{2\xi_\pm}\right) + \frac{3}{2} \right]^{-1/2},$$

$$\left.\frac{d\hat{\varphi}_\pm}{dz}\right|_0 = \pm \frac{3}{4\xi_\pm} \cosh\left(\frac{l_\pm}{2\xi_\pm}\right) \left[\sinh^2\left(\frac{l_\pm}{2\xi_\pm}\right) + \frac{3}{2} \right]^{-3/2}. \quad (21)$$

B. Surface critical behavior

In this section we briefly consider, for later use, the critical behavior at the surface when the bulk is in its ordered phase ($T \leq T_c$). We suppose that the system is located in the $z > 0$ half-space. Since there is no ambiguity here, we drop the index $+$ so that, for example, $\varphi(z)$ stands for $\varphi_+(z)$. In this geometry, according to Eq. (8), the boundary condition reads

$$C_s \frac{\hat{\varphi}(0)}{\Lambda} = C \left.\frac{d\hat{\varphi}}{dz}\right|_0. \quad (22)$$

Below we list the values obtained for the integration constant l and the surface order parameter $\varphi(0)$.

1. φ^3 surface

a. $\Lambda < 0$. When $\Lambda < 0$, the surface remains ordered at the bulk critical point, which corresponds to the *extraordinary surface transition*. Thus, the order parameter profile is given by Eq. (16) and l is obtained by expanding both sides of Eq. (22) in powers of $l/\xi \ll 1$. To leading order, one obtains

$$l = 2 \frac{C}{C_s} |\Lambda| \quad (23)$$

and

$$\varphi(0) = \frac{3}{2} \left(\frac{C_s \xi_0}{C |\Lambda|} \right)^2 \varphi_0. \quad (24)$$

b. $\Lambda > 0$. In this case the surface is less ordered than the bulk and we have an *ordinary surface transition*. The profile is given by Eq. (17) and the solution is obtained by assuming that the ratio l/ξ is a constant. Details of the calculation are given in Appendix A. The boundary condition in (22) is satisfied with

$$l = 2 \tanh^{-1}\left(\frac{1}{\sqrt{3}}\right) \xi_0 t^{-1/2}, \quad (25)$$

so that

$$\varphi(0) = \frac{1}{\sqrt{3}} \frac{C \Lambda}{C_s \xi_0} \varphi_0 t^{3/2}. \quad (26)$$

Thus the surface exponent, $\beta_1 = 3/2$, is larger than the bulk exponent, $\beta = 1$.

c. $\Lambda \rightarrow \infty$. The profile is given by either (16) or (17) with $l \rightarrow \infty$. Then the order parameter is constant, keeps its bulk value until the surface and $\varphi(0) = \varphi_b = \varphi_0 t$. We have a *special surface transition*, which corresponds to a multicritical point where the lines of ordinary and extraordinary transitions meet with the line of surface transition³ in a $(T, 1/\Lambda)$ diagram.

2. φ^4 surface

a. $\Lambda < 0$. This corresponds as above to the extraordinary transition where the surface remains ordered at the bulk critical point. The profile is given by Eq. (18) and the boundary condition in (22) requires $l/\xi \ll 1$ so that one obtains

$$l = \frac{C}{C_s} |\Lambda|. \quad (27)$$

The leading contribution to the surface order parameter is given by

$$\varphi(0) = 2 \frac{C_s \xi_0}{C |\Lambda|} \varphi_0. \quad (28)$$

b. $\Lambda > 0$. At the ordinary surface transition, the profile is given by Eq. (19). Here the boundary condition is satisfied with $l/\xi \ll 1$, which gives

$$l = \frac{C}{C_s} \Lambda. \quad (29)$$

The surface order parameter vanishes as

$$\varphi(0) = \frac{1}{2} \frac{C \Lambda}{C_s \xi_0} \varphi_0 t. \quad (30)$$

Thus, the surface exponent is $\beta_1 = 1$ to be compared to the bulk exponent, $\beta = 1/2$.

c. $\Lambda \rightarrow \infty$. Here too, the boundary condition in (22) leads to $l \rightarrow \infty$ and the surface order parameter keeps the bulk value $\varphi(0) = \varphi_0 t^{1/2}$ at the special surface transition.

3. φ^6 surface

a. $\Lambda < 0$. Once more we have an extraordinary surface transition with a profile given by Eq. (20). As shown in Appendix A this is another instance where the boundary condition in (22) is satisfied with a constant value of the ratio l/ξ . Thus, as in (25), we have

$$l = 2 \tanh^{-1} \left(\frac{1}{\sqrt{3}} \right) \xi_0 t^{-1/2}. \quad (31)$$

The leading contribution to the surface order parameter is then

$$\varphi(0) = \left(2\sqrt{3} \frac{C_s \xi_0}{C |\Lambda|} \right)^{1/2} \varphi_0. \quad (32)$$

b. $\Lambda > 0$. The profile at the ordinary surface transition is given by Eq. (21). Here we have the standard behavior, $l/\xi \ll 1$, with

$$l = \frac{C}{C_s} \Lambda. \quad (33)$$

The surface order parameter displays the following behavior:

$$\varphi(0) = \frac{1}{\sqrt{6}} \frac{C \Lambda}{C_s \xi_0} \varphi_0 t^{3/4}. \quad (34)$$

Thus the surface exponent is $\beta_1 = 3/4$ whereas $\beta = 1/4$ in the bulk.

c. $\Lambda \rightarrow \infty$. As for the other models, the length l is infinite at the special transition and the surface order parameter has the bulk value, $\varphi(0) = \varphi_0 t^{1/4}$.

Although the characteristic length l sometimes remains finite and sometimes diverges at the critical point, the exponent β_1 at the ordinary surface transition always satisfies the scaling relation:

$$\beta_1 = \beta + \nu \quad (\text{ordinary transition}). \quad (35)$$

In the same way, at the special transition, we have

$$\beta_1 = \beta \quad (\text{special transition}). \quad (36)$$

One should notice that these scaling relations are only valid in mean-field theory.³

At the extraordinary transition the singular term, governing the approach to the constant value at T_c of the surface order parameter, appears at the next order in the expansion. It vanishes linearly in t for the φ^3 and φ^4 models and as $t^{1/2}$ for the φ^6 model. We do not give further details since we shall not need it in the following. For the same reason, we did not examine the properties of the surface transition which occurs in the surface region, above the bulk critical temperature, when $\Lambda < 0$.

C. Interface critical behavior

In this section, we consider the critical behavior at the interface between two systems, belonging to different universality classes, in their ordered phase ($T \leq T_c$). Thus the free energy densities of the two subsystems are given by (2) with different values of k . They are coupled through an interface at $z=0$ with free energy density

$$f_i[\varphi] = f_i[0] + \frac{C_i}{2} \frac{\varphi^2}{\Lambda}. \quad (37)$$

We assume that the positive half-space corresponds to the system which is the more ordered in the bulk when T_c is approached from below so that $\beta^+ < \beta^-$. The order parameter profiles, $\varphi_+(z)$ for $z > 0$ and $\varphi_-(z)$ for $z < 0$, have now to satisfy

$$\varphi(0) = \varphi_+(0) = \varphi_-(0),$$

$$C_i \frac{\varphi(0)}{\Lambda} = C_+ \left. \frac{d\varphi_+}{dz} \right|_0 - C_- \left. \frac{d\varphi_-}{dz} \right|_0. \quad (38)$$

These boundary conditions generalize Eq. (22) for the interface geometry where each subsystem contributes a normal derivative to the surface integral in Eq. (6).

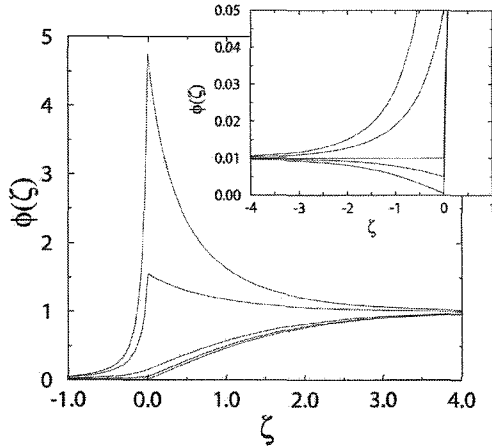


FIG. 1. Reduced order parameter profile $\phi = \phi(z)/\phi_b^+$ at the φ^3 - φ^4 interface as a function of $\zeta = z/\xi_+$ for different values of $\lambda = \Lambda/\xi_0^+$ with $1/\lambda = -0.2, -0.1, 0, 0.1$, and 0.5 , from top to bottom. The behavior for $\lambda \geq 0$ and $\zeta < 0$ is enlarged in the inset where $1/\lambda = 0, 0.1, 0.5, 1$, and 10 , from top to bottom. One may notice the change of behavior at $1/\lambda_c = \xi_0^+/ \Lambda_c = 1/2$. All other parameters have the same values in the two subsystems: $C_+ = C_- = C_i$, $\varphi_0^+ = \varphi_0^-$, $\xi_0^+ = \xi_0^-$, and $t = 10^{-4}$.

When two subsystems are coupled, the boundary conditions in Eq. (38) determine the integration constants $l_{\pm}$ —i.e., the complete order parameter profile. In the following, we give these integration constants as well as $\varphi(0)$, the value of order parameter at the interface, for the different types of interface considered. Technical details about the calculations can be found in Appendix B.

As in the surface case, depending on the value of Λ , different types of interface critical behaviors are obtained (see Figs. 1–3). When $\Lambda < 0$, the interface remains ordered at the

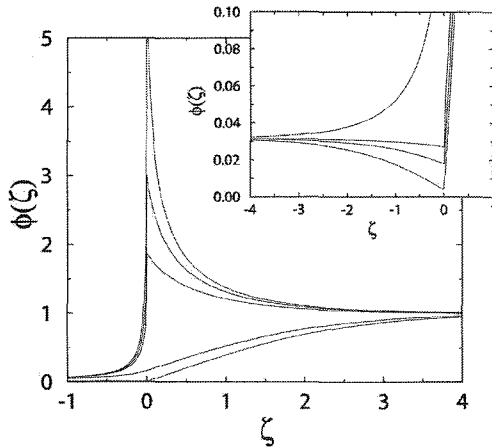


FIG. 2. Reduced order parameter profile $\phi = \phi(z)/\phi_b^+$ at the φ^4 - φ^6 interface as a function of $\zeta = z/\xi_+$ for different values of $\lambda = \Lambda/\xi_0^+$ with $1/\lambda = -0.1, -0.05, -0.03, 0$, and 0.1 , from top to bottom. The behavior for $\lambda \geq 0$ and $\zeta < 0$ is enlarged in the inset where $1/\lambda = 0, 0.01, 0.02$, and 0.1 , from top to bottom. All other parameters have the same values in the two subsystems and $t = 10^{-6}$.

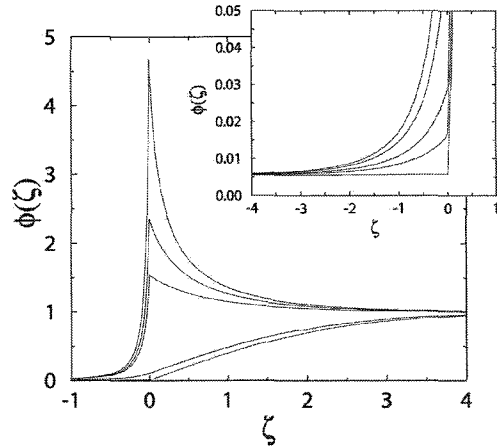


FIG. 3. Reduced order-parameter profile $\phi = \phi(z)/\phi_b^+$ at the φ^3 - φ^6 interface as a function of $\zeta = z/\xi_+$ for different values of $\lambda = \Lambda/\xi_0^+$ with $1/\lambda = -0.2, -0.05, -0.02, 0$, and 1 , from top to bottom. The behavior for $\lambda \geq 0$ and $\zeta < 0$ is enlarged in the inset where $1/\lambda = 0, 0.2, 0.5, 1$, and 10 , from top to bottom. All other parameters have the same values in the two subsystems and $t = 10^{-3}$.

bulk critical point and we have an *extraordinary interface transition*. When $d > 2$, the local order persists above the bulk critical temperature until a Λ -dependent *interface transition* temperature is reached. This transition, which always occurs in mean-field theory, will not be discussed further here. When $\Lambda > 0$ the interface order parameter vanishes at the bulk T_c as a power of t . This corresponds to the *interface ordinary transition*. When parametrized by $1/\Lambda$, these two transition lines meet, together with the interface transition line when it exists, at a multicritical point corresponding to the *special interface transition* located at $1/\Lambda = 0, T = T_c$.

1. φ^3 - φ^4 interface

a. $\Lambda < 0$. This corresponds to strong couplings at the interface. The order parameter increases when the interface is approached so that $\varphi_-(z)$ and $\varphi_+(z)$ are given by (16) and (18), respectively. To leading order in t , we have

$$l_- = f \frac{C_-}{C_i} |\Lambda|, \quad (39)$$

$$l_+ = \frac{1}{3} \frac{\varphi_0^+}{\varphi_0^-} \left(f \frac{C_- \Lambda}{C_i \xi_0^+} \right)^2 \xi_0^+,$$

where

$$f = 1 + \sqrt{1 + 3 \frac{\Lambda^*}{|\Lambda|}}, \quad \Lambda^* = \frac{C_+ C_i \varphi_0^-(\xi_0^+)^2}{C_-^2 \varphi_0^+ \xi_0^+}. \quad (40)$$

The leading contribution to the order parameter at the interface,

$$\varphi(0) = 6 \left(\frac{1}{f} \frac{C_i \xi_0^+}{C_- \Lambda} \right)^2 \varphi_0^-, \quad (41)$$

is also independent of t ; i.e., the interface remains ordered at the bulk critical point.

According to (40) and (41), the asymptotic dependence on $|\Lambda|$ is the following:

$$\varphi(0) \propto \begin{cases} |\Lambda|^{-2} & |\Lambda| \gg \Lambda^*, \\ |\Lambda|^{-1} & |\Lambda| \ll \Lambda^*. \end{cases} \quad (42)$$

b. $\Lambda > 0$. This corresponds to weak couplings between the two subsystems. When

$$0 < \Lambda < \Lambda_c = 2 \frac{C_i \varphi_0^-}{C_+ \varphi_0^+} \xi_0^+, \quad (43)$$

the order parameter decreases from both sides towards the interface. Then $\varphi_-(z)$ is given by (17) and $\varphi_+(z)$ by (19) with

$$l_- = 2 \tanh^{-1} \left(\sqrt{\frac{1 + 2\Lambda/\Lambda_c}{3}} \right) \xi_0^- t^{-1/2},$$

$$l_+ = \frac{C_+}{C_i} \Lambda. \quad (44)$$

l_- diverges when $\Lambda = \Lambda_c$. Then $\varphi_-(z)$ is a constant and keeps its bulk value for any $z \leq 0$.

When $\Lambda_c < \Lambda < \infty$, $\varphi_+(z)$ is still given by (19) and l_+ keeps the value given in Eq. (44) but now $\varphi_-(z)$, which increases, is given by Eq. (16) with

$$l_- = 2 \coth^{-1} \left(\sqrt{\frac{1 + 2\Lambda/\Lambda_c}{3}} \right) \xi_0^- t^{-1/2}. \quad (45)$$

For $0 < \Lambda < \infty$, the order parameter at the interface is always given by

$$\varphi(0) = \frac{1}{2} \frac{C_+ \Lambda}{C_i \xi_0^+} \varphi_0^+ t. \quad (46)$$

c. $\Lambda \rightarrow \infty$. The profile remains monotonously increasing and keeps the same functional form as for $\Lambda > \Lambda_c$ although l_- and l_+ are now given by

$$l_- = 2 \left(3 \frac{C_- \varphi_0^-}{C_+ \varphi_0^+} \xi_0^+ \right)^{1/3} (\xi_0^-)^{2/3} t^{-1/3},$$

$$l_+ = \left(3 \frac{\varphi_0^-}{\varphi_0^+} \xi_0^+ \right)^{1/3} \left(\frac{C_+}{C_-} \xi_0^- \right)^{2/3} t^{-1/3}, \quad (47)$$

so that

$$\varphi(0) = \frac{1}{2} (3 \varphi_0^-)^{1/3} \left(\frac{C_+ \xi_0^-}{C_- \xi_0^+} \varphi_0^+ \right)^{2/3} t^{2/3}. \quad (48)$$

2. φ^4 - φ^6 interface

a. $\Lambda < 0$. The interface is more ordered than the bulk. Thus $\varphi_-(z)$ is given by (18) and $\varphi_+(z)$ by (20) with

$$l_- = \frac{f C_-}{2 C_i} |\Lambda|,$$

$$l_+ = 2 \left[\tanh^{-1} \left(\frac{1}{\sqrt{3}} \right) + h(t) \right] \xi_0^+ t^{-1/2},$$

$$h(t) = \frac{\sqrt{3}}{32} \left(\frac{C_- \varphi_0^+ |\Lambda|}{C_i \varphi_0^- \xi_0^-} f \right)^2 t^{1/2}, \quad (49)$$

where

$$f = 1 + \sqrt{1 + \frac{8}{\sqrt{3}} \frac{\Lambda^*}{|\Lambda|}}, \quad \Lambda^* = \frac{C_i C_+ (\varphi_0^- \xi_0^-)^2}{(C_- \varphi_0^+)^2 \xi_0^+}. \quad (50)$$

Here and below in Eq. (57) we keep the next-to-leading term $h(t)$ in l_+ . This correction is actually needed to obtain the correct form of the profile in the vicinity of $z=0$.

The leading contribution to the order parameter at the interface is constant:

$$\varphi(0) = \frac{4}{f} \frac{C_i \xi_0^-}{C_- |\Lambda|} \varphi_0^-. \quad (51)$$

Its asymptotic behavior

$$\varphi(0) \propto \begin{cases} |\Lambda|^{-1} & |\Lambda| \gg \Lambda^*, \\ |\Lambda|^{-1/2} & |\Lambda| \ll \Lambda^*, \end{cases} \quad (52)$$

follows from Eqs. (50) and (51).

b. $\Lambda > 0$. The profile is always decreasing when the interface is approached. Thus $\varphi_-(z)$ is given by (19) and $\varphi_+(z)$ by (21) with the following expressions for the integration constants:

$$l_- = \sqrt{\frac{2}{3}} \frac{C_+ \varphi_0^+ \xi_0^-}{C_i \varphi_0^- \xi_0^+} \Lambda t^{-1/4},$$

$$l_+ = \frac{C_+}{C_i} \Lambda. \quad (53)$$

The interface order parameter behaves as

$$\varphi(0) = \frac{1}{\sqrt{6}} \frac{C_+ \Lambda}{C_i \xi_0^+} \varphi_0^+ t^{3/4}. \quad (54)$$

c. $\Lambda \rightarrow \infty$. Then the profile increases monotonously with z . $\varphi_-(z)$ is given by (18) and $\varphi_+(z)$ by (21) with

$$l_- = \left(2 \sqrt{6} \frac{C_- \varphi_0^-}{C_+ \varphi_0^+} \xi_0^+ \xi_0^- \right)^{1/2} t^{-3/8},$$

$$l_+ = \left(2 \sqrt{6} \frac{C_+ \varphi_0^-}{C_- \varphi_0^+} \xi_0^- \xi_0^+ \right)^{1/2} t^{-3/8}. \quad (55)$$

The interface order parameter vanishes as

$$\varphi(0) = \left(\sqrt{\frac{2}{3}} \frac{C_+ \xi_0^-}{C_- \xi_0^+} \varphi_0^- \varphi_0^+ \right)^{1/2} t^{3/8}. \quad (56)$$

3. φ^3 - φ^6 interface

a. $\Lambda < 0$. As usual in this case, the interface is more ordered than the bulk. The profiles $\varphi_-(z)$ and $\varphi_+(z)$ are given by Eqs. (16) and (20). The calculation of l_- involves the solution of an equation of the fourth degree (see Appendix B). Here we only report the limiting behavior for large and small values of $|\Lambda|$:

$$l_- \sim \frac{C_-}{C_i} |\Lambda|, \quad |\Lambda| \gg \Lambda^*,$$

$$l_- \sim \left(2\sqrt{27} \frac{C_+ |\Lambda|}{C_i \xi_0^+} \right)^{1/4} \left(\frac{\varphi_0^-}{\varphi_0^+} \right)^{1/2} \xi_0^-, \quad |\Lambda| \ll \Lambda^*,$$

$$l_+ = 2 \left[\tanh^{-1} \left(\frac{1}{\sqrt{3}} \right) + h(t) \right] \xi_0^+ t^{-1/2},$$

$$h(t) = \frac{2\sqrt{3}}{9} \left(\frac{C_- |\Lambda|}{C_i \xi_0^+} \right)^4 \left(\frac{\varphi_0^+}{\varphi_0^-} \right)^2 t^{1/2}, \quad |\Lambda| \gg \Lambda^*,$$

$$h(t) = \frac{1}{4} \frac{C_+ |\Lambda|}{C_i \xi_0^+} t^{1/2}, \quad |\Lambda| \ll \Lambda^*. \quad (57)$$

The crossover is taking place around

$$\Lambda^* = C_i \left(\frac{\varphi_0^-}{\varphi_0^+} \right)^{2/3} \left(\frac{C_+}{\xi_0^+} \right)^{1/3} \left(\frac{\xi_0^-}{C_-} \right)^{4/3}. \quad (58)$$

The interface order parameter reads

$$\varphi(0) \sim \frac{3}{2} \left(\frac{C_i \xi_0^-}{C_- \Lambda} \right)^2 \varphi_0^-, \quad |\Lambda| \gg \Lambda^*,$$

$$\varphi(0) \sim \left(2\sqrt{3} \frac{C_i \xi_0^+}{C_+ |\Lambda|} \right)^{1/2} \varphi_0^+, \quad |\Lambda| \ll \Lambda^*, \quad (59)$$

b. $\Lambda > 0$. The profile is monotonously increasing. $\varphi_-(z)$ and $\varphi_+(z)$ have the form given in Eqs. (16) and (21) with the following values of the constants:

$$l_- = \left(6\sqrt{6} \frac{C_i \varphi_0^- \xi_0^+}{C_+ \varphi_0^+ \Lambda} \right)^{1/2} \xi_0^- t^{-3/8},$$

$$l_+ = \frac{C_+}{C_i} \Lambda. \quad (60)$$

The interface order parameter vanishes as

$$\varphi(0) = \frac{1}{\sqrt{6}} \frac{C_+ \Lambda}{C_i \xi_0^+} \varphi_0^+ t^{3/4}. \quad (61)$$

c. $\Lambda \rightarrow \infty$. The profile is still given by Eqs. (16) and (21) with the following values of the constants:

$$l_- = \left[12\sqrt{6} \frac{C_- \varphi_0^-}{C_+ \varphi_0^+} (\xi_0^-)^2 \xi_0^+ \right]^{1/3} t^{-1/4},$$

$$l_+ = \sqrt{6} \left(\frac{1}{2} \frac{C_+}{C_-} \right)^{2/3} \left[\frac{\varphi_0^-}{\varphi_0^+} (\xi_0^-)^2 \xi_0^+ \right]^{1/3} t^{-1/4}. \quad (62)$$

At the interface we obtain

$$\varphi(0) = \left(\frac{1}{2} \frac{C_+ \xi_0^-}{C_- \xi_0^+} \varphi_0^+ \right)^{2/3} (\varphi_0^-)^{1/3} t^{1/2}. \quad (63)$$

III. SCALING CONSIDERATIONS

Here we generalize the mean-field results obtained in the previous section. First, we consider the order-parameter profiles in semi-infinite systems with free and fixed boundary conditions. These results are used afterwards to study the scaling behavior at an interface, which separates two different semi-infinite systems.

A. Order-parameter profiles in semi-infinite systems

We consider a semi-infinite system, which is located in the half-space $z > 0$ and which is in its bulk-ordered phase ($T \leq T_c$); see in Sec. II B. As in mean-field theory, the order parameter $\varphi(z)$ depends on the distance from the surface, z , and approaches its bulk value $\varphi_b \sim t^\beta$ for $z/\xi \gg 1$. The bulk correlation length asymptotically behaves as $\xi \sim |t|^{-\nu}$. These expressions generalize the mean-field results in Eqs. (9) and (13).

1. Free boundary conditions

At a free surface, due to the missing bonds, the local order is weaker than in the bulk. The surface order parameter displays the so-called ordinary transition with the temperature dependence $\varphi(0) \sim t^{\beta_1}$, where generally $\beta_1 > \beta$. The profile $\varphi(z)$, which interpolates between the surface and bulk values has the scaling form³⁻⁵

$$\varphi(z) = \varphi_b f_{\text{ord}} \left(\frac{z+l}{\xi} \right), \quad (64)$$

and the scaling function, $f_{\text{ord}}(y)$, behaves as $y^{(\beta_1 - \beta)/\nu}$, for $y \ll 1$.

2. Fixed boundary conditions

For fixed boundary conditions, the system displays the extraordinary surface transition and stays ordered in the surface region at the bulk critical temperature, so that $\varphi(z) = O(1)$ as $t \rightarrow 0_+$ and $z \ll \xi$. This behavior is formally equivalent to having a surface exponent, $\beta_1 = 0$. The magnetization profile can be written into an analogous form³⁻⁵ as in Eq. (64):

$$\varphi(z) = \varphi_b f_{\text{ext}} \left(\frac{z+l}{\xi} \right); \quad (65)$$

however, now the scaling function $f_{\text{ext}}(y)$ has the asymptotic behavior,¹⁴ $f_{\text{ext}}(y) \sim y^{-\beta/\nu}$, for $y \ll 1$.

B. Interface critical behavior

Now we join the two semi-infinite systems and study the behavior of the order parameter in the vicinity of the interface. In general we expect that, depending on the strength of the interface coupling, at the bulk critical temperature the interface (i) can stay disordered for weak couplings, which corresponds to the $\Lambda > 0$ case in mean-field theory, or (ii) can stay ordered for stronger couplings, which is the case for $\Lambda < 0$ in mean-field theory. These two regimes of interface criticality are expected to be separated by a special transition point, which corresponds to $\Lambda \rightarrow \infty$ in mean-field theory.

To construct the order-parameter profile we start with the profiles in the semi-infinite systems and join them. First we require continuous behavior of the profile at $z=0$, like in mean-field theory. The second condition in mean-field theory in Eq. (38) cannot be directly translated; here, we just use its consequences for the extrapolation lengths. In the weak- and strong-coupling regimes in mean-field theory the left-hand side of Eq. (38) is finite so that the derivative of the profile is discontinuous at $z=0$ and at least one of the extrapolation lengths $l_{\pm}$ is $O(1)$. The same behavior of $l_{\pm}$ is expected to hold in scaling theory, too. On the other hand, at the special transition point in mean-field theory the left-hand side of Eq. (38) is zero and the extrapolation lengths are divergent. In scaling theory the asymptotic form of the extrapolation lengths is expected to be deduced from the same condition—i.e., from the equality of the derivatives of the profiles. This leads to a relation $l_{\pm} \sim t^{-\nu_{\pm}\omega_{\pm}}$, in which $0 \leq \omega_{\pm} \leq 1$ is defined later.

If the subsystem—say, at $z > 0$ —displays an ordinary transition, the interface magnetization follows from Eq. (64) as

$$\varphi(0) \sim t^{\beta_i}, \quad \beta_i = (1 - \omega_+) \beta_1^+ + \omega_+ \beta_+, \quad (66)$$

and $\beta_+ \leq \beta_i \leq \beta_1^+$. On the other hand, if the subsystem—say, at $z < 0$ —has an extraordinary transition, the interface magnetization exponent follows from Eq. (65) as

$$\beta_i = \omega_- \beta_- . \quad (67)$$

Evidently, β_i calculated from the two joined subsystems should have the same value. This type of construction of the order-parameter profiles will lead to a smooth profile at the interface provided the extrapolation lengths are smaller or, at most, of the same order than the correlation lengths, $\max(l_+, l_-) \lesssim \min(\xi_+, \xi_-)$, which holds provided

$$\max(\omega_+ \nu_+, \omega_- \nu_-) \leq \min(\nu_+, \nu_-) . \quad (68)$$

Otherwise, the profile measured in a length scale, $\min(\xi_+, \xi_-)$, has a sharp variation at the interface and as the critical temperature is approached the profile becomes discontinuous. Note that in mean-field theory, with $\nu_+ = \nu_-$ and $\omega_{\pm} \leq 1$, the profile is always smooth.

1. Relevance-irrelevance criterion

Here we generalize the relevance-irrelevance criterion known to hold at an internal defect plane with weak defect couplings.⁶ If two different critical systems are weakly coupled, the operator corresponding to the junction is the

product of the two surface magnetization operators. Consequently, its anomalous dimension x_i is given by the sum of the dimensions of the two surface operators, $x_i = x_1^- + x_1^+$, where $x_1^{\pm} = \beta_1^{\pm} / \nu_{\pm}$. Then the scaling exponent of the defect, y_i , in a d -dimensional system is given by

$$y_i = d_i - x_i = d - 1 - \frac{\beta_1^+}{\nu_+} - \frac{\beta_1^-}{\nu_-}, \quad (69)$$

where $d_i = d - 1$ is the dimension of the interface.

For $y_i < 0$ the weak interface coupling is irrelevant so that the defect coupling renormalizes to zero and the defect acts as a cut in the system. Consequently the interface critical behavior is the same as in the uncoupled semi-infinite systems and the interface magnetization exponent is $\beta_i = \min(\beta_1^{\pm})$ since the stronger local order manifests itself at the interface. In the other case, $y_i > 0$, the coupling at the interface is relevant and the interface critical behavior is expected to be controlled by a new fixed point.

For the 2D q -state Potts model with $2 \leq q \leq 4$ we have¹⁵ $x_1 \geq 1/2$; thus, weak interface coupling is expected to be irrelevant according to Eq. (69).

In mean-field theory, when d appears in a scaling relation, it has to be replaced by the upper critical dimension d_c for which hyperscaling is verified. However, we have here different values of d_c for the two subsystems so that there is some ambiguity for the value of d in Eq. (69). The analytical results of Sec. II C show that a weak interface coupling is also irrelevant in all the cases studied in mean-field theory.

2. Weakly coupled systems

For weak interface coupling the order parameter profile is not expected to display a maximum at the interface. Depending on the relative values of the critical exponents β_+ , β_- , β_1^+ , and β_1^- it can be either a minimum or an intermediate point of a monotonously increasing profile. We use the same convention as in Sec. II C, that $\beta^+ < \beta^-$, and treat separately the different cases.

a. $\beta_+ < \beta_- < \beta_1^+ < \beta_1^-$. The order-parameter profile is obtained by joining two ordinary surface profiles in Eq. (64) both for $z < 0$ and for $z > 0$. In this case the weak coupling does not modify the asymptotic behavior of the more ordered, $z > 0$ subsystem. Consequently we have $\varphi(0) \sim \varphi_1^+$, $l_+ = O(1)$, and $\omega_+ = 0$; thus, $\beta_i = \beta_1^+$. From Eq. (66) we obtain

$$\omega_- = \frac{\beta_1^- - \beta_1^+}{\beta_1^- - \beta_-} . \quad (70)$$

Note that the above reasoning leads to a smooth order-parameter profile at the interface if according to Eq. (68) we have $\omega_- \nu_- < \nu_+$. This type of behavior is realized in mean-field theory for the φ^4 - φ^6 interface for $\Lambda > 0$, see in Sec. II C 2.

b. $\beta_+ < \beta_- < \beta_1^- < \beta_1^+$. In this case the profile is obtained from two ordinary subprofiles. The order parameter is still minimum at the interface, but it is determined by the $z < 0$ subsystem, which has the larger surface order parameter. Consequently, $\varphi(0) \sim \varphi_1^-$, $l_- = O(1)$, and $\omega_- = 0$; thus, $\beta_i = \beta_1^-$. From Eq. (66) we obtain

$$\omega_+ = \frac{\beta_1^+ - \beta_1^-}{\beta_1^+ - \beta_+} \quad (71)$$

and the order-parameter profile is smooth if $\omega_+ \nu_+ < \nu_-$. This type of behavior is never realized in mean-field theory; see the exponent relation in Eq. (35).

c. $\beta_+ < \beta_1^+ < \beta_- < \beta_1^-$. In this case the order-parameter profile is monotonously increasing and obtained by joining an extraordinary profile in Eq. (65) for $z < 0$ with an ordinary profile in Eq. (64) for $z > 0$. The order parameter at the interface is determined by the surface order parameter of the $z > 0$ subsystem. Then we have $\varphi(0) \sim \varphi_1^+$, $l_+ = O(1)$ and $\omega_+ = 0$; thus, $\beta_i = \beta_1^+$. From Eq. (66) we obtain $\omega_- = \beta_1^+ / \beta_-$ and the interface is smooth, provided $\omega_- \nu_- < \nu_+$. In mean-field theory this type of behavior is realized for the φ^3 - φ^6 interface for $\Lambda > 0$; see in Sec. II C 3.

3. Special transition point

In this case the profile is monotonously increasing and it is constructed by joining an extraordinary subprofile in Eq. (65) for $z < 0$ with an ordinary subprofile in Eq. (64) for $z > 0$. As we argued before, the extrapolation lengths and the corresponding exponents are obtained (i) from the continuity of the profile at $z=0$,

$$\beta_i = \beta_- \omega_- = (1 - \omega_+) \beta_1^+ + \beta_+ \omega_+, \quad (72)$$

and (ii) from the continuity of the derivative at $z=0$, which leads to the condition $l_+ \sim l_-$ —consequently,

$$\nu_i = \omega_+ \nu_+ = \omega_- \nu_-. \quad (73)$$

The solution of Eqs. (72) and (73) is given by

$$\nu_i = \frac{\beta_1^+}{\frac{\beta_1^+ - \beta_+}{\nu_+} + \frac{\beta_-}{\nu_-}}, \quad \beta_i = \frac{\beta_-}{\nu_-} \nu_i. \quad (74)$$

Let us now analyze the condition for the smooth or discontinuous nature of the interface given in Eq. (68).

a. $\nu_- \geq \nu_+$. In this case the condition is equivalent to $\beta_- / \nu_- \geq \beta_+ / \nu_+$. As we will discuss in Sec. IV this condition is satisfied in 2D for the three- and the four-state Potts (or BW) models so that the profile is predicted to be smooth. On the contrary for the Ising and three-state Potts models this condition does not hold; thus, the profile is probably sharp and becomes discontinuous at the critical temperature. Finally, for the Ising and BW models the relation in Eq. (68) is just an equality, so that we are in a marginal situation.

b. $\nu_- < \nu_+$. In this case the profile is smooth, provided

$$\beta_1^+ < \frac{\beta_- / \nu_- - \beta_+ / \nu_+}{1/\nu_- - 1/\nu_+}. \quad (75)$$

This type of situation seems to be less common in real systems.

4. Strongly coupled systems

In this case the interface stays ordered at the bulk critical temperature, so that the profile is expected to be composed

from two extraordinary subprofiles. As a consequence the interface critical behavior is the same as in two independent semi-infinite systems, both having an extraordinary surface transition.

IV. NUMERICAL INVESTIGATIONS

We have studied numerically the critical behavior at the interface between two q -state Potts models on the square lattice, with different values of q for the two subsystems. For a review of the Potts model, see Ref. 16. In particular we considered the value $q=2$, which corresponds the Ising model, as well as $q=3$ and $q=4$. All these systems display a second-order phase transition for a value of the coupling given by $e^{qK_c} = 1 + \sqrt{q}$, which follows from self-duality. The associated critical exponents are exactly known¹⁸ for $q=2$ ($\beta=1/8$, $\nu=1$, and $\beta_1=1/2$) and have been conjectured for $q=3$ ($\beta=1/9$, $\nu=5/6$, and $\beta_1=5/9$) and $q=4$ ($\beta=1/12$, $\nu=2/3$, and $\beta_1=2/3$), where they follow from conformal invariance²⁰ and the Coulomb-gas mapping.²¹ We have also considered the BW model,¹⁷ which is a triangular lattice Ising model with three-spin interactions on all the triangular faces. This model is also self-dual and has the same critical coupling as the Ising model. This model is exactly solved,¹⁸ and it belongs to the universality class of the $q=4$ state Potts model, but without logarithmic corrections to scaling, which facilitates the analysis of the numerical data.

We have performed Monte Carlo simulations on 2D systems consisting of two $L \times L$ subsystems which interact directly through interface couplings K_i (between adjacent spins of the two subsystems) such that $K_i/K_+ = \Delta$. Here K_+ is the coupling in the half-space $z > 0$, which corresponds to the subsystem having the larger value of q , thus the larger magnetization. Periodic boundary conditions are applied in both directions. Using the Swendsen-Wang cluster-flip algorithm¹⁹ we have calculated the magnetization profile in systems with size up to $L=300$ for different values of the reduced temperature $t = (T_c - T)/T_c$ and coupling ratio Δ . Depending on the size of the system and the temperature we have skipped the first $5-20 \times 10^4$ thermalization steps and the thermal averages were taken over $6-20 \times 10^6$ MC steps. We have checked that the magnetization profiles, at the reduced temperatures we used, does not show any noticeable finite-size effects. From the magnetization data at the interface we have calculated effective, temperature-dependent interface exponents given by

$$\beta_i(t) = \frac{\ln[m(t+\delta)/m(t-\delta)]}{\ln[(t+\delta)/(t-\delta)]}, \quad (76)$$

which approach the true exponents as $\delta \rightarrow 0$ and $t \rightarrow 0$. For the Ising-BW interface, we have also made calculations at the critical temperature in order to check the finite-size scaling properties of the profiles. In the following we present the numerical results for the $q=2-3$, $q=3-4$, and Ising-BW interfaces. In each case we have a different type of special transition, separating the ordinary and the extraordinary transition regimes.

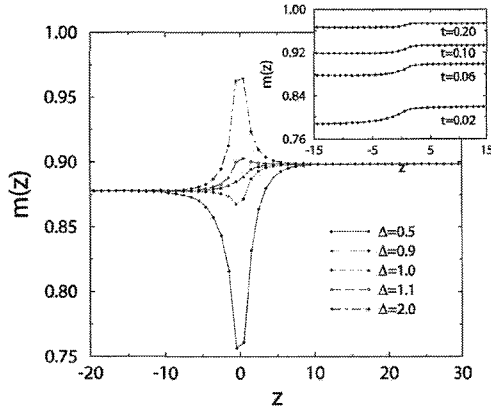


FIG. 4. Order-parameter profiles of the $q=3-4$ interface at the reduced temperature $t=0.06$ and for different values of the interface coupling ratio, $\Delta=2.0, 1.1, 1.0, 0.9$, and 0.5 , from top to bottom. Inset: profiles around the special transition point, $\Delta=1$, for different temperatures. The results indicate a smooth profile at the transition point.

A. $q=3-4$ interface

We start in Fig. 4 with a presentation of the order-parameter profiles, in the vicinity of the critical temperature, for different values of the interface coupling. Here one can differentiate between the ordinary transition regime for small Δ , in which the magnetization at the interface vanishes faster than in the bulk of the two subsystems, and the extraordinary transition regime for large Δ , where the interface magnetization keeps a finite value. The special transition separating these two regimes is located at $\Delta \approx 1$. The inset of Fig. 4 shows the evolution of the interface at the special transition point as the bulk transition point is approached. Here the criterion in Eq. (68) is satisfied, since, as discussed below Eq. (74), $\beta_-/\nu_- = 2/15 > \beta_+/\nu_+ = 1/8$. Thus the profile is predicted to be smooth, which is in accordance with the numerical results.

The values of the effective, temperature-dependent exponents, as defined in Eq. (76), are presented in Fig. 5 for three

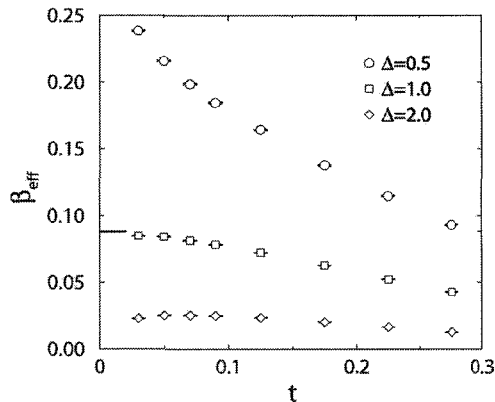


FIG. 5. Effective magnetization exponents measured on the two sides of the $q=3-4$ interface for three different values of the coupling ratio Δ . At the special transition point $\Delta \approx 1$, the theoretical prediction from Eq. (74) is indicated by a bar.

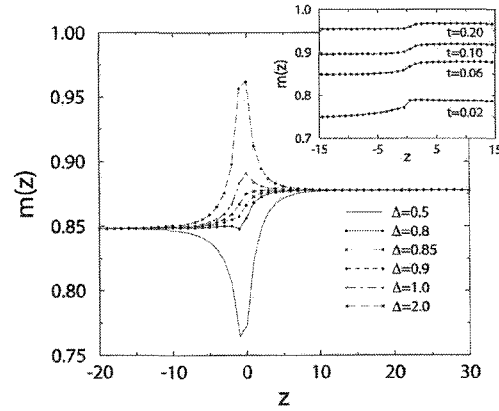


FIG. 6. The same as in Fig. 4 for the $q=2-3$ interface with interface coupling ratio $\Delta=2.0, 1.0, 0.9, 0.85, 0.8$, and 0.5 , from top to bottom, and $t=0.06$. Inset: profiles around the special transition point, $\Delta_c=0.85$, for different temperatures. The results indicate that the profile becomes discontinuous at the critical temperature.

values of Δ , corresponding to the different transition regimes. Clearly the values of the effective exponents are affected by strong crossover effects for small t , since the limiting values are $\beta_i = \beta_1(q=3) = 5/9$ for $\Delta < 1$ and $\beta_i = 0$ for $\Delta > 1$, according to scaling theory. Unfortunately, due to finite-size effects we could not go closer to the critical point. At the special transition point, however, the crossover effects are weaker and the effective exponents are close to the theoretical prediction in Eq. (74), $\beta_i = 32/363 = 0.088$.

B. $q=2-3$ interface

We have performed a similar investigation for the interface critical behavior of the $q=2-3$ system and the results are summarized in Figs. 6 and 7. Here one can also identify the ordinary and extraordinary transition regimes (see Fig. 6), which are separated by the special transition around $\Delta \approx 0.85$. However, as can be seen in the inset of Fig. 6, the behavior around the special transition point is more complex than for the $q=2-3$ interface. The evolution of the profile suggests the existence of a discontinuity at the transition

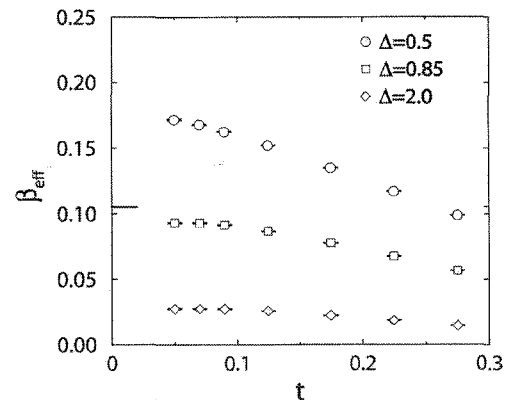


FIG. 7. The same as in Fig. 5 for the $q=2-3$ interface.

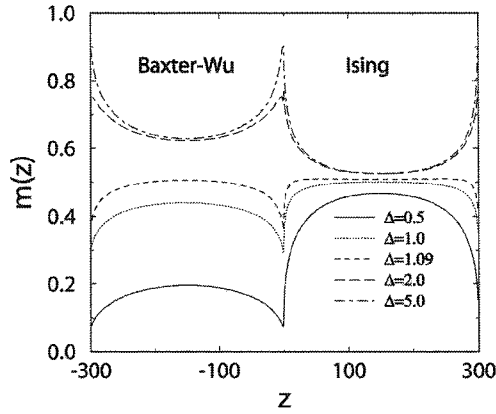


FIG. 8. Critical magnetization profiles in the Ising-BW system with two symmetrically placed interfaces for different values of the coupling ratio Δ .

temperature. This is in accordance with the scaling criterion in Eq. (68) since, as discussed below Eq. (74), $\beta_-/\nu_- = 1/8 < \beta_+/ \nu_+ = 2/15$ leads to a discontinuous profile. Due to this discontinuity, it is more difficult to locate precisely the special transition point and to determine the associated interface exponent β_i . The measured effective interface exponents are shown in Fig. 7 for three values of Δ corresponding to the different interface fixed points. The crossover effects are strong but, at the special transition point, our estimates are compatible with the scaling prediction in Eq. (74), $\beta_i = 25/237 = 0.105$.

C. Ising-BW interface

The interface between the Ising model and BW model (or the four-state Potts model) has some special features. These are mainly due to the fact that the anomalous dimension of the bulk magnetization in the two systems has the same value, $\beta_-/\nu_- = \beta_+/\nu_+ = 1/8$. Consequently one can define and numerically study the finite-size scaling properties of the magnetization profile at the phase-transition point, since it is expected to scale as $m(z, L) = L^{-1/8} f(z/L)$. The scaling function $f(y)$ is expected to depend on the value of the interface coupling ratio Δ , and we have studied this quantity numerically.

The magnetization profiles at the critical temperature for different values of the interface coupling ratio Δ are given in Fig. 8. It is interesting to notice that the shape of the curves as well as the relative heights of the profiles in the two subsystems vary with the interface coupling. For $\Delta < \Delta_c \approx 1$, the interface stays disordered and the interface critical behavior is governed by the surface exponent of the Ising model. The larger bulk value on the Ising side is understandable since the profile on the right side is more singular, $\beta_1^-/\nu_- > \beta_1^+/\nu_+$; see below Eq. (64). On the contrary, for $\Delta > \Delta_c$ the interface is ordered at the bulk critical temperature and the profiles decay towards the bulk values.

At the special transition point $\Delta = \Delta_c$, the profile has a universal form in terms of $L^{1/8} m(z/L)$. This is illustrated in Fig. 9, in which for each finite system a critical value $\Delta_c(L)$

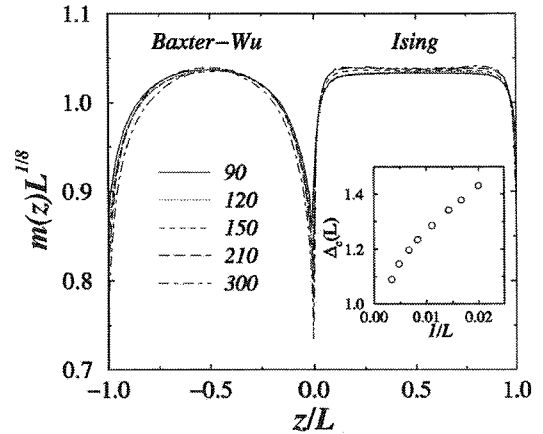


FIG. 9. Scaled magnetization profiles for the coupled Ising-BW systems at the common critical temperature for $L=90-300$. The interface coupling ratio is fixed at the critical value, $\Delta_c(L)$, for which the two maxima of the curves are identical. The inset gives the effective critical interface coupling as a function of the inverse size.

is calculated from the condition that the two maxima of the curves have identical values and the profile be measured at that interface coupling. The size-dependent effective interface coupling ratio $\Delta_c(L)$, shown in the inset of Fig. 9, seems to tend to a limiting value, $\Delta_c \approx 1$. The scaled magnetization profiles have different characteristics in the two subsystems. In the BW model, having the smaller correlation length, the profile has a smooth variation. On the contrary, on the Ising side, the profile has a quasidiscontinuous nature at the interface, which is probably related to the fact that in the criterion of Eq. (68) the equality holds.

V. DISCUSSION

In this paper we have studied the critical behavior at the interface between two subsystems displaying a second-order phase transition. We assumed that the critical temperatures are identical but the sets of critical exponents (i.e., the universality classes of the transitions) are different for the two subsystems. By varying the interface couplings, we monitored the order at the interface and studied the behavior of the order-parameter profile as the critical temperature is approached. We provided a detailed analytical solution of the problem in the framework of mean-field theory, which leads to a physical picture which is useful for the study of realistic systems. Solutions of the mean-field equations are obtained by adjusting the order-parameter profiles of the two semi-infinite subsystems through the introduction of appropriate extrapolation lengths on the two sides. The same strategy has been applied in the frame of a phenomenological scaling approach. As a result, basically three types of interface critical behavior are observed. For weak interface couplings the interface renormalizes to an effective cut and we are left with the surface critical behavior of the subsystems. In the limit of strong interface couplings, the renormalization leads to infinitely strong local couplings and thus interface order at the

bulk critical point. Finally, for some intermediate value of the interface couplings, the interface displays a special transition, which is characterized by a new critical exponent for the order parameter in the interface region. In the scaling theory this exponent can be expressed in terms of the bulk and surface exponents of the semi-infinite subsystems.

These results have been tested through large scale Monte Carlo simulations, in which the critical behavior at the interface between 2D Ising, Potts, and BW models was studied and satisfactory agreement has been found. However, it would be interesting to confirm the analytical expressions for the interface exponents through a field-theoretical renormalization group study, using the methods of Ref. 4.

The results obtained in this paper can be generalized into different directions. First we mention the case when the critical temperatures of the subsystems are not exactly equal but differ by an amount ΔT_c . If the deviation in temperature from the average value, $\bar{T}_c = (T_c^- + T_c^+)/2$, is small but satisfies $\bar{T}_c - T \gg \Delta T_c$, then our results are still valid. Our second remark concerns 3D systems in which sufficiently enhanced interface couplings may lead to an independent ordering of the interface above the bulk critical temperatures. In semi-infinite systems this phenomena is called the *surface transition*.³⁻⁵ At the bulk critical temperature the ordered interface then shows a singularity, which is analogous to the *extraordinary transition* in semi-infinite systems. The singularities at the *interface* and *extraordinary interface transitions* remain to be determined, even in the mean-field approach. Third, we can mention that nontrivial interface critical behavior could be observed when one of the subsystems displays a first-order transition. It is known for semi-infinite systems that the surface may undergo a continuous transition, which, however, has an anisotropic scaling character, even if the bulk transition is discontinuous.^{22,23} Similar phenomena can happen at an interface, too. Our final remark concerns the localization-delocalization transition of the interface provided an external ordering field is applied. For two subsystems having the same φ^4 mean-field theory and the same²⁴ or different²⁵ critical temperatures, this wetting problem has already been solved. This solution could be generalized for subsystems having different field-theoretical descriptions.

ACKNOWLEDGMENTS

F.Á.B. thanks the Ministère Français des Affaires Étrangères for a research grant. This work has been supported by the Hungarian National Research Fund under Grant Nos. OTKA TO34183, TO37323, TO48721, MO45596, and M36803. Some simulations have been performed at CINES Montpellier under Project No. pnm2318. The Laboratoire de Physique des Matériaux is Unité Mixte de Recherche CNRS No. 7556.

APPENDIX A: SURFACE CRITICAL BEHAVIOR

The calculation of the surface behavior is straightforward when $l/\xi \rightarrow 0$ at the critical point. Here we give some details

about the two cases where the surface boundary condition leads to a constant value for l/ξ .

1. φ^3 model with $\Lambda > 0$

Using the results of Eq. (17), the boundary condition in (22) is rewritten as

$$\frac{C_s}{2\Lambda} \left[3 \tanh^2\left(\frac{l}{2\xi}\right) - 1 \right] = \frac{3C}{2\xi} \sinh\left(\frac{l}{2\xi}\right) \cosh^{-3}\left(\frac{l}{2\xi}\right). \quad (\text{A1})$$

Let

$$3 \tanh^2\left(\frac{l}{2\xi}\right) - 1 = \alpha t^{1/2}, \quad \hat{\varphi}(0) = \frac{\alpha}{2} t^{1/2}. \quad (\text{A2})$$

Then, to leading order,

$$\tanh\left(\frac{l}{2\xi}\right) = \frac{1}{\sqrt{3}}, \quad \cosh^{-2}\left(\frac{l}{2\xi}\right) = \frac{2}{3}. \quad (\text{A3})$$

The first relation gives l in Eq. (25), and Eq. (A1) leads to

$$\alpha = \frac{2C\Lambda}{\sqrt{3}C_s\xi_0}. \quad (\text{A4})$$

Finally, combining Eqs. (A1) and (A4), one obtains the value of $\varphi(0)$ given in Eq. (26).

2. φ^6 model with $\Lambda < 0$

Since the surface is ordered, the profile is given by Eq. (17). The boundary condition in (22) translates into

$$\begin{aligned} & \frac{\sqrt{2}C_s}{|\Lambda|} \left[3 \tanh^2\left(\frac{l}{2\xi}\right) - 1 \right]^{-1/2} \\ &= \frac{3\sqrt{2}C}{2\xi} \sinh\left(\frac{l}{2\xi}\right) \cosh^{-3}\left(\frac{l}{2\xi}\right) \left[3 \tanh^2\left(\frac{l}{2\xi}\right) - 1 \right]^{-3/2}. \end{aligned} \quad (\text{A5})$$

The boundary condition is satisfied when

$$\sqrt{3 \tanh^2\left(\frac{l}{2\xi}\right) - 1} = \alpha t^{1/4}, \quad (\text{A6})$$

so that

$$\hat{\varphi}(0) = \frac{\sqrt{2}}{\alpha} t^{-1/4}. \quad (\text{A7})$$

Equation (A6) gives the value of l in Eq. (31). Using the values given in (A3) which remain valid here together with Eq. (A6) in Eq. (A5), one obtains

$$\alpha = \left(\frac{2C|\Lambda|}{\sqrt{3}C_s\xi_0} \right)^{1/2}. \quad (\text{A8})$$

Inserting this expression in (A7) leads to the surface order parameter given in Eq. (32).

APPENDIX B: INTERFACE CRITICAL BEHAVIOR

In this appendix we give some details about the calculations of $l_{\pm}$ and $\varphi(0)$, limiting ourselves to three representative cases. Other results are easily obtained using similar methods.

1. $l_{\pm}/\xi_{\pm} \ll 1$

This situation is encountered for the φ^3 - φ^4 interface with $\Lambda < 0$ and $\Lambda \rightarrow \infty$ as well as for the φ^4 - φ^6 and φ^3 - φ^6 interfaces with $\Lambda > 0$ and $\Lambda \rightarrow \infty$. Here we consider as an example the φ^3 - φ^4 interface with $\Lambda < 0$.

The boundary conditions in Eq. (38) are satisfied with $\varphi_-(z)$ and $\varphi_+(z)$ given by (16) and (18) and reads

$$\begin{aligned} \varphi(0) &= \varphi_0^{+1/2} \coth\left(\frac{l_+}{2\xi_+}\right) = \frac{\varphi_0^-}{2} \left[3 \coth^2\left(\frac{l_-}{2\xi_-}\right) - 1 \right], \\ \frac{C_+ \varphi_0^{+1/2}}{2\xi_+} \sinh^{-2}\left(\frac{l_+}{2\xi_+}\right) + \frac{3C_- \varphi_0^-}{2\xi_-} \cosh\left(\frac{l_-}{2\xi_-}\right) \sinh^{-3}\left(\frac{l_-}{2\xi_-}\right) \\ &= \frac{C_i \varphi_0^{+1/2}}{|\Lambda|} \coth\left(\frac{l_+}{2\xi_+}\right). \end{aligned} \quad (B1)$$

With $l_{\pm}/\xi_{\pm} \ll 1$, one may expand the hyperbolic functions in powers of $l_{\pm}/(2\xi_{\pm})$. To leading order, the first equation in (B1) gives

$$\varphi(0) = \frac{3\varphi_0^-}{2} \left(\frac{2\xi_-}{l_-}\right)^2 = \frac{2\varphi_0^+ \xi_0^+}{l_+}, \quad (B2)$$

so that

$$\frac{l_-}{2\xi_-} = \sqrt{\frac{3\varphi_0^- l_+}{4\varphi_0^+ \xi_0^+}}. \quad (B3)$$

Introducing this result in the second equation, one obtains an equation of the second degree in $x = \sqrt{l_+}$:

$$-x^2 + 2 \frac{C_- |\Lambda|}{C_i \xi_0^-} \sqrt{\frac{\varphi_0^+ \xi_0^+}{3\varphi_0^-}} x + \frac{C_+ |\Lambda|}{C_i} = 0. \quad (B4)$$

Thus we have

$$\begin{aligned} \sqrt{l_+} &= f \frac{C_- |\Lambda|}{C_i \xi_0^-} \sqrt{\frac{\varphi_0^+ \xi_0^+}{3\varphi_0^-}}, \\ f &= \sqrt{1 + 3 \frac{C_+ C_i \varphi_0^- (\xi_0^-)^2}{C_-^2 \varphi_0^+ \xi_0^+ |\Lambda|}}. \end{aligned} \quad (B5)$$

This last result together with Eqs. (B3) and (B2) leads to the expressions given in (39) and (41).

2. $l_-/\xi_- \rightarrow \text{const}, l_+/\xi_+ \ll 1$

This behavior is obtained only for the φ^3 - φ^4 interface with $\Lambda > 0$. When Λ is smaller than a critical value Λ_c to be determined later, the profiles $\varphi_-(z)$ and $\varphi_+(z)$ are given by

(17) and (19). They lead to the following boundary conditions:

$$\begin{aligned} \varphi(0) &= \varphi_0^{+1/2} \tanh\left(\frac{l_+}{2\xi_+}\right) = \frac{\varphi_0^-}{2} \left[3 \tanh^2\left(\frac{l_-}{2\xi_-}\right) - 1 \right], \\ \frac{C_+ \varphi_0^{+1/2}}{2\xi_+} \cosh^{-2}\left(\frac{l_+}{2\xi_+}\right) + \frac{3C_- \varphi_0^-}{2\xi_-} \sinh\left(\frac{l_-}{2\xi_-}\right) \cosh^{-3}\left(\frac{l_-}{2\xi_-}\right) \\ &= \frac{C_i \varphi_0^{+1/2}}{\Lambda} \tanh\left(\frac{l_+}{2\xi_+}\right). \end{aligned} \quad (B6)$$

With

$$\frac{l_-}{2\xi_-} = K_<, \quad (B7)$$

the first equation in (B6) gives

$$\varphi(0) = \varphi_0^{+1/2} \left(\frac{l_+}{2\xi_0^+}\right) = \frac{\varphi_0^-}{2} (3 \tanh^2 K_< - 1). \quad (B8)$$

It follows that

$$l_+ = \frac{\varphi_0^-}{\varphi_0^+} (3 \tanh^2 K_< - 1) \xi_0^+. \quad (B9)$$

The second equation in (B6) can be rewritten as

$$C_+ \varphi_0^+ + 3C_- \varphi_0^- \frac{\xi_0^+ \sinh K_<}{\xi_0^- \cosh^3 K_<} t^{1/2} = C_i \varphi_0^+ \frac{l_+}{\Lambda}. \quad (B10)$$

Close to the critical point, the second term can be neglected so that

$$l_+ = \frac{C_+}{C_i} \Lambda. \quad (B11)$$

Combining this result with (B9), one obtains

$$\tanh K_< = \sqrt{\frac{1 + 2\Lambda/\Lambda_c}{3}}, \quad \Lambda_c = 2 \frac{C_i \varphi_0^-}{C_+ \varphi_0^+} \xi_0^+. \quad (B12)$$

Since $\tanh K_< \leq 1$, this solution remains acceptable as long as $\Lambda \leq \Lambda_c$. Equations (B7), (B8), (B11), and (B12) immediately lead to the expressions given in (44) and (46).

When $\Lambda = \Lambda_c$, l_- diverges and the order parameter remains constant, keeping its bulk value on the φ^3 side of the interface.

When $\Lambda > \Lambda_c$, the profile is always increasing. Then $\varphi_-(z)$ is given by Eq. (16) and the boundary conditions are changed into

$$\begin{aligned} \varphi(0) &= \varphi_0^{+1/2} \tanh\left(\frac{l_+}{2\xi_+}\right) = \frac{\varphi_0^-}{2} \left[3 \coth^2\left(\frac{l_-}{2\xi_-}\right) - 1 \right], \\ \frac{C_+ \varphi_0^{+1/2}}{2\xi_+} \cosh^{-2}\left(\frac{l_+}{2\xi_+}\right) - \frac{3C_- \varphi_0^-}{2\xi_-} \cosh\left(\frac{l_-}{2\xi_-}\right) \sinh^{-3}\left(\frac{l_-}{2\xi_-}\right) \\ &= \frac{C_i \varphi_0^{+1/2}}{\Lambda} \tanh\left(\frac{l_+}{2\xi_+}\right). \end{aligned} \quad (B13)$$

Inserting

$$\frac{l_-}{2\xi_-} = K_> \quad (\text{B14})$$

into the first equation of (B6) leads to

$$\varphi(0) = \varphi_0^+ t \left(\frac{l_+}{2\xi_0^+} \right) = \frac{\varphi_0^- t}{2} (3 \coth^2 K_> - 1) \quad (\text{B15})$$

and

$$l_+ = \frac{\varphi_0^-}{\varphi_0^+} (3 \coth^2 K_> - 1) \xi_0^+. \quad (\text{B16})$$

From the second equation in (B13) one deduces

$$C_+ \varphi_0^+ - 3 C_- \varphi_0^- \frac{\xi_0^+ \cosh K_>}{\xi_0^- \sinh^3 K_>} t^{1/2} = C_i \varphi_0^+ \frac{l_+}{\Lambda}, \quad (\text{B17})$$

where the second term can be neglected close to the critical point. Thus l_+ is still given by

$$l_+ = \frac{C_+}{C_i} \Lambda. \quad (\text{B18})$$

Comparing with (B16), one obtains

$$\coth K_> = \sqrt{\frac{1 + 2\Lambda/\Lambda_c}{3}}, \quad (\text{B19})$$

with the value of Λ_c given in Eq. (B12). Since $\coth K_> \geq 1$, this new solution replaces the preceding one when $\Lambda \geq \Lambda_c$. The results given in (45) and (46) follow from Eqs. (B14), (B15), (B18), and (B19).

3. $l_-/\xi_- \ll 1$, $l_+/\xi_+ \rightarrow \text{const}$

This is the situation encountered for the φ^4 - φ^6 and φ^3 - φ^6 interfaces with $\Lambda < 0$. The treatment is similar in both cases but we give some details for the φ^3 - φ^6 interface which is a little more complicated. The interface is more ordered than the bulk so that the profiles are given by (16) for $z < 0$ and (20) for $z > 0$. They lead to the following boundary conditions:

$$\begin{aligned} \varphi(0) &= \sqrt{2} \varphi_0^+ t^{1/4} \left[3 \tanh^2 \left(\frac{l_+}{2\xi_+} \right) - 1 \right]^{-1/2} \\ &= \frac{\varphi_0^- t}{2} \left[3 \coth^2 \left(\frac{l_-}{2\xi_-} \right) - 1 \right], \\ \frac{3\sqrt{2} C_+ \varphi_0^+ t^{1/4}}{2\xi_+} \sinh \left(\frac{l_+}{2\xi_+} \right) \cosh^{-3} \left(\frac{l_+}{2\xi_+} \right) \\ &\times \left[3 \tanh^2 \left(\frac{l_+}{2\xi_+} \right) - 1 \right]^{-3/2} \\ &+ \frac{3 C_- \varphi_0^- t}{2\xi_-} \cosh \left(\frac{l_-}{2\xi_-} \right) \sinh^{-3} \left(\frac{l_-}{2\xi_-} \right) \\ &= \frac{\sqrt{2} C_i \varphi_0^+ t^{1/4}}{|\Lambda|} \left[3 \tanh^2 \left(\frac{l_+}{2\xi_+} \right) - 1 \right]^{-1/2}. \end{aligned} \quad (\text{B20})$$

As in Appendix A 2, the solution is obtained by assuming that close to the critical point:

$$\sqrt{3 \tanh^2 \left(\frac{l_+}{2\xi_+} \right) - 1} = \alpha t^{1/4}. \quad (\text{B21})$$

From this expression one deduces the leading contribution to l_+ given in (57).

With $l_-/\xi_- \ll 1$ the first equation in (B20) can be rewritten as

$$\varphi(0) = \frac{\sqrt{2} \varphi_0^+}{\alpha} = 6 \varphi_0^- \left(\frac{\xi_0^-}{l_-} \right)^2. \quad (\text{B22})$$

Thus we have

$$l_- = \xi_0^- \sqrt{3 \sqrt{2} \alpha \frac{\varphi_0^-}{\varphi_0^+}}. \quad (\text{B23})$$

The second equation in (B20) allows us to determine the value of α . Actually, we obtain the following equation for $x = 1/\sqrt{\alpha}$:

$$x^4 + ax - b = 0,$$

$$a = 2^{3/4} \frac{C_- \xi_0^+}{C_+ \xi_0^-} \sqrt{\frac{\varphi_0^+}{\varphi_0^-}}, \quad b = \sqrt{3} \frac{C_i \xi_0^+}{C_+ |\Lambda|}. \quad (\text{B24})$$

It is easy to verify that this equation has a single real positive root x_0 . Below, we evaluate x_0 in the two limiting cases $x_0 \ll 1$ and $x_0 \gg 1$.

When $x_0 \ll 1$, one can iterate the relation

$$x_0 = \frac{b - x_0^4}{a} = \frac{b}{a} \left(1 - \frac{x_0^4}{b} \right), \quad (\text{B25})$$

following from Eq. (B24). We obtain

$$x_0 = \frac{b}{a} \left[1 + O \left(\frac{b^3}{a^4} \right) \right] \simeq \frac{\sqrt{3} C_i \xi_0^-}{2^{3/4} C_- |\Lambda|} \sqrt{\frac{\varphi_0^-}{\varphi_0^+}} = \alpha^{-1/2}. \quad (\text{B26})$$

This result is valid as long as $b^3 \ll a^4$ —i.e., when

$$|\Lambda| \gg \Lambda^* = C_i \left(\frac{\varphi_0^-}{\varphi_0^+} \right)^{2/3} \left(\frac{C_+}{C_-} \right)^{1/3} \left(\frac{\xi_0^-}{\xi_0^+} \right)^{4/3}. \quad (\text{B27})$$

Combining (B22), (B23), and (B26) one easily obtains the results given in Eqs. (57) and (59) for $|\Lambda| \gg \Lambda^*$.

The relation following from Eq. (B24) which is appropriate when $x_0 \gg 1$ is

$$x_0 = b^{1/4} \left(1 - \frac{ax_0}{b} \right)^{1/4} \simeq b^{1/4} \left(1 - \frac{ax_0}{4b} \right), \quad (\text{B28})$$

so that

$$x_0 = b^{1/4} \left[1 + O \left(\frac{a}{b^{3/4}} \right) \right] \simeq \left(\sqrt{3} \frac{C_i \xi_0^+}{C_+ |\Lambda|} \right)^{1/4} = \alpha^{-1/2}. \quad (\text{B29})$$

The correction term can be neglected when $a^4 \ll b^3$ —i.e., when $|\Lambda| \ll \Lambda^*$. Then Eqs. (B22) and (B23) together with Eq. (B29) lead to the results given in (57) and (59) for $|\Lambda| \ll \Lambda^*$.

*Electronic address: turban@lpm.uhp-nancy.fr

†Electronic address: igloi@szfki.hu

- ¹ See the series *Phase Transitions and Critical Phenomena*, edited by C. Domb, M. S. Green, and J. L. Lebowitz (Academic Press, London).
- ² T. W. Burkhardt, in *Proceedings of the XXth Winter School, Karpacz, Poland, 1984*, Lecture Notes in Physics, edited by A. Pekalski and J. Sznajd (Springer, Berlin, 1984), Vol. 206, p. 169.
- ³ K. Binder, in *Phase Transitions and Critical Phenomena*, edited by C. Domb and J. L. Lebowitz (Academic, London, 1983), Vol. 8, p. 1.
- ⁴ H. W. Diehl, in *Phase Transitions and Critical Phenomena*, edited by C. Domb and J. L. Lebowitz (Academic Press, London, 1986), Vol. 10, p. 75; Int. J. Mod. Phys. B **11**, 3503 (1997). T. W. Burkhardt and H. W. Diehl, Phys. Rev. B **50**, 3894 (1994).
- ⁵ M. Pleimling, J. Phys. A **37**, R79 (2004).
- ⁶ T. W. Burkhardt and E. Eisenriegler, Phys. Rev. B **24**, 1236 (1981); H. W. Diehl, S. Dietrich, and E. Eisenriegler, Phys. Rev. B **27**, 2937 (1983).
- ⁷ R. Z. Bariev, Zh. Eksp. Teor. Fiz. **77**, 1217 (1979) [Sov. Phys. JETP **50**, 613 (1979)].
- ⁸ H. J. Hilhorst and J. M. J. van Leeuwen, Phys. Rev. Lett. **47**, 1188 (1981).
- ⁹ J. L. Cardy, J. Phys. A **16**, 3617 (1983); M. N. Barber, I. Peschel, and P. A. Pearce, J. Stat. Phys. **37**, 497 (1984); B. Davies and I. Peschel, J. Phys. A **24**, 1293 (1991); D. B. Abraham and F. T. LaTrémolière, Phys. Rev. E **50**, R9 (1994); J. Stat. Phys. **81**, 539 (1995).
- ¹⁰ I. Peschel, L. Turban, and F. Iglói, J. Phys. A **24**, L1229 (1991).
- ¹¹ F. Iglói, I. Peschel, and L. Turban, Adv. Phys. **42**, 683 (1993).
- ¹² F. Iglói and L. Turban, Phys. Rev. B **47**, 3404 (1993).
- ¹³ B. Berche and L. Turban, J. Phys. A **24**, 245 (1991).
- ¹⁴ M. E. Fisher and P.-G. de Gennes, C. R. Seances Acad. Sci., Ser. B **287**, 207 (1978).
- ¹⁵ J. L. Cardy, Nucl. Phys. B **240**[FS12], 514 (1984).
- ¹⁶ F. Y. Wu, Rev. Mod. Phys. **54**, 235 (1982).
- ¹⁷ R. J. Baxter and F. Y. Wu, Phys. Rev. Lett. **31**, 1294 (1973); Aust. J. Phys. **27**, 357 (1974).
- ¹⁸ See R. J. Baxter, *Exactly Solved Models in Statistical Mechanics* (Academic Press, London, 1982).
- ¹⁹ R. H. Swendsen and J.-S. Wang, Phys. Rev. Lett. **58**, 86 (1987).
- ²⁰ J. L. Cardy, in *Phase Transitions and Critical Phenomena*, edited by C. Domb and J. L. Lebowitz (Academic, London, 1987), Vol. 11.
- ²¹ B. Nienhuis, in *Phase Transitions and Critical Phenomena*, edited by C. Domb and J. L. Lebowitz (Academic, London, 1987), Vol. 11.
- ²² R. Lipowsky, J. Appl. Phys. **55**, 2485 (1984).
- ²³ L. Turban and F. Iglói, Phys. Rev. B **66**, 014440 (2002).
- ²⁴ A. Sevrin and J. O. Indekeu, Phys. Rev. B **39**, 4516 (1989).
- ²⁵ F. Iglói and J. O. Indekeu, Phys. Rev. B **41**, 6836 (1990).

SIC 000 NANCY
54000 NANCY Cedex
Rue du Jardin Botanique - 03 83 68 21 00
54601 VILLERS LES NANCY Cedex

Monsieur BAGAMERY Farkas Adam

DOCTORAT DE L'UNIVERSITE HENRI POINCARÉ, NANCY 1
en PHYSIQUE STATISTIQUE

VU, APPROUVÉ ET PERMIS D'IMPRIMER N° 1206

Nancy, le 3 juillet 2006

Le Président de l'Université



Résumé

Cette thèse est consacrée à l'étude de l'influence de différentes perturbations inhomogènes sur le comportement critique de systèmes bidimensionnels.

Dans une première partie nous considérons le modèle d'Ising 2D placé dans un champ de surface aléatoire qui constitue une perturbation marginalement non-pertinente au point critique. Nous étudions le problème à l'aide de simulations Monte Carlo pour différentes amplitudes de désordre. Nous déterminons des exposants critiques effectifs dont la dépendance en température ou en taille est en accord avec les résultats de théorie des champs et interprétable en termes de corrections logarithmiques au comportement du système pur.

Dans la seconde partie, nous étudions le modèle d'Ising sur le réseau carré avec un désordre corrélé biaxial qui constitue une perturbation pertinente d'après le critère de Harris étendu. Le problème est abordé par simulations Monte Carlo extensives. L'exposant ν prend la valeur attendue dans un système avec désordre corrélé isotrope tandis que la densité d'aimantation a une dimension supérieure à celle du système pur. Les propriétés conformes des densités d'énergie et d'aimantation sont aussi examinées.

Finalement, nous considérons le comportement critique à l'interface entre deux sous-systèmes appartenant à des classes d'universalité différentes mais ayant la même température critique. Le problème est étudié dans le cadre d'une théorie de champ moyen et en utilisant des arguments d'échelle. La grande variété de comportements d'interface obtenue est confrontée à une étude numérique sur des interfaces de Potts 2D à q états ($2 \leq q \leq 4$).

Mots-clés

Phénomènes critiques, modèle d'Ising, modèle de Potts, systèmes désordonnés, simulations Monte Carlo.

Abstract

In this work we study the influence of different inhomogeneous perturbations on the critical behaviour of two-dimensional models.

In the first part we consider the two-dimensional Ising model in a random surface field which is predicted to be a marginally irrelevant perturbation at the critical point. We study this question by Monte Carlo simulations for various strengths of disorder. The calculated effective (temperature or size-dependent) critical exponents fit with the field-theoretical results and can be interpreted in terms of the expected logarithmic corrections to the pure system's critical behaviour.

In the second part we study the Ising model on the square lattice with biaxially correlated random couplings which is a relevant perturbation according to the extended Harris criterion. The problem is studied by large scale Monte Carlo simulations. The correlation length critical exponent has the value expected in a system with isotropic correlated long-range disorder, whereas the scaling dimension of the magnetization density is larger than in the pure system. Conformal properties of the magnetization and energy density profiles are also examined.

Finally we consider the critical behaviour at an interface between two subsystems belonging to different universality classes, but having a common transition temperature. We solve this problem analytically in the frame of ϕ^k mean-field theory and present some phenomenological scaling arguments. A large variety of interface critical behaviour is obtained which is checked numerically on the example of two-dimensional q -state Potts models with $2 \leq q \leq 4$.

Keywords

Critical phenomena, Ising model, Potts model, disordered systems, Monte Carlo simulations.