

Az OTKA-T-037212 Szakmai Zárójentése, Cím: Kollektív viselkedés két dimenzióban, Témavezető: Dr. Gulácsi Zsolt

Általános jellemzők

Az elérni kívánt cél a kétdimenziós rendszerek kollektív viselkedése jellemzőinek megértése, elemzése és feltárása volt. A munka párhuzamosan klasszikus és kvantummechanikai jelleggel bíró tulajdonságok figyelembevételét is követte, hiszen a kutatás során többfajta rendszer tanulmányozása folyt. Elemeztünk a) sokrészecskés kétsávós kvantummechanikai rendszereket, b) réteges felépítésű rézoxid síkokra épülő kerámia típusú anyagokat, c) kolloid kristályokat, d) rendezetlen mágneses rendszereket, és e) spontán kompozíció modulációkat az epitaxiális növekedésben (a jelölés a munkaterv éves bontásában megadott pontokat követi).

A munkatervtől lényeges eltérés nem történt. A d) pontban, Pázmándi Ferenc távozása miatt kis eltérések tapasztalhatóak a munkatervtől (a d) pont feladatkörét Pál Károly vette át): a hőmérsékletfüggés vizsgálata háttérbe szorult, de a lényegi jellemzők: számítógépes szimulációk, spin-glass kiindulórendszer, hosszú hatótávolságú jelleg, lavi-nahatások, a jellemzésben megmaradtak.

A kutatási feladatokat végeredményben 5 minősített kutató végezte: Bódi Sándor, Daruka István, Gulácsi Zsolt, Kun Ferenc és Pál Károly. A munkába 3 doktoranduszt kapcsoltunk be: Gurin Péter, Kovács Endre és Varga Imre.

A munkatervnek megfelelően, eredményeink nagycirkulációjú nemzetközi fizikai szakfolyóiratokban jelentek meg (7 Phys. Rev. Letters cikk, 10 Phys. Rev. cikk, 1 Németországban megjelent könyv fejezet, 20 Európában megjelentetett nemzetközi fizikai folyóirat cikk.). A publikációkat 18 konferencia bemutatás előzte meg (ebből 7 más kontinensen). A publikált teljes összimpaktfaktor értéke 100.63, az egy évre eső FTE érték 2.58.

A költségtervre vonatkozólag csak azt szeretném megemlíteni, hogy minden pénzügyi átcsoportosítás esetében engedélyt kértünk és kaptunk az OTKA Irodától.

Szakmai eredmények

Az alábbiakban, az előző fejezetben megadott tematikai pontokat követjük.

a) Fermionikus sokrészecskés rendszerek esetében először is eljárásokat dolgoztunk ki és tettünk pontra [10,20,26,27,32,33] amelyek segítségével a tanulmányozott nem-integrálható rendszerekre egzakt alapállapotok vezethetők le. Ezek közül bizonyos eljárások alacsonykoncentrációs határesetre [27,32,33], más módszerek kétsávós rendszerek 1/4-ig terjedő, illetve 3/4 felett elhelyezkedő sávöltésére [10,26] voltak kiélezve és alkalmazva. A módszerek kétdimenziós esetekre vett alkalmazása a kollektív viselkedés rendkívül érdekes megnyilvánulásait és aspektusait hozta napvilágra (a jellemzés szempontjából

közelítésmentes módon). Ezek közül a legfontosabb eredmények a következők:

Kétdimenziós rendezetlen rendszerekben, a kiskölcsönhatási határesetben levezetett skálázási eredményekkel ellentétben fém-szigetelő átalakulás van jelen [18]. A kimutatás során úgy diagonális mint nem-diagonális rendezetlenséget használtunk és a figyelembe vett lokális Coulomb taszítás is lehetett rendezetlen. A levezetést az tette lehetővé, hogy első ízben sikerült felírni egy valódi multi-elektronikus koncentrációfüggő alapállapotú hullámfüggvényt rendezetlen és kölcsönható kétdimenziós rendszerre.

Szintén kétdimenziós rendszerekre stripe, illetve sakktábla típusú alapállapotokat vezettünk le széles koncentrációtartományban, effektív kétsávós rendszerekre $1/4$ sávöltés alatt [31] és tanulmányoztuk az őket stabilizáló járulékokat. Ilyen járulékok például a dimerizáció, a sűrűség-hullámok, vagy a felületen elhelyezkedő disztorziós vonalak.

Hosszútávú sűrűség-sűrűség korrelációk fennállása mellett szigetelő fázist mutattunk ki 2D-ben [2] kétsávós rendszerekre. Az alapállapot érdekessége, hogy egy kvantummechanikai szuperpozíció eredménye mely mellett a rács-csomópontokra eső részecskeszám értéke konstans és 3 (kéttipusú $1/2$ spinű fermion van jelen a rendszerben).

Ugyanazon dimenzióban egy nagyon érdekes normálfázisú (nem szimmetria sértett) nem-Fermi folyadékot találtunk [3] melyről kimutattuk, hogy valós csatolási állandók mellett is stabil a fázisdiagram bizonyos tartományain. Ezen fázis érdekessége, hogy mindannak ellenére, hogy a Fermi energia a rendszerre értelmezhető, a k -térben vett Fermi felület nem definiálható és ezáltal a Luttinger tétel (mely szerint a Fermi felület által bezárt k -tér fogat értékén kölcsönhatás nem változtat) is sérül (lásd [10], [26] eredményeket is).

Ezen túlmenően, véges koncentrációs tartományokon mágnesezettség fellépési lehetőségeit ([4],[26]), síkok között fellépő korrelációk hatását [12], félig töltött sáv körüli tartomány jellemezhetőségét (egyelőre nagyon nagy lokális Coulomb taszítás esetében) [19], illetve fázisdiagram jellemzőket [9] is tanulmányoztuk.

A kiskoncentrációs határesetben is sikerült kollektív viselkedést favorizáló aspektusokat kimutatni. Például a 2D Hubbard modell klaszteren tanulmányozva azt mutatta, hogy az alapállapotú energiához közelálló energiaértékeken (azaz nagyon alacsony energiákon) olyan sajátfüggvények léteznek, melyek a kinetikus Hamiltoni tagnak is sajátfüggvényei, ezekről pedig tudvalevő, hogy szupravezető állapotot generálhatnak [32]. Ezzel ellentétben, az egydimenzióhoz közelebb álló létra szerkezet erősen lecsengő korrelációs függvényekkel rendelkezik [27,33], tehát ez esetben a teljes rendszert átfogó kollektív viselkedés rövid hatótávolságú kölcsönhatások esetében hiányzik.

Az eredményekből három meghívott előadás született, több kongresszusi bemutatás, továbbá a Humboldt Alapítvány egy 3 hónapos Augsburgi Egyetemre szóló ösztöndíjjal ösztönözte a nem-integrálhatóság körülményei között nyerhető egzakt eredményekre vonatkozó módszertani és technikai fejlesztéseket.

Az alkalmazhatóság itt elsősorban a kifejlesztett módszert érinti. Ez utóbbi, az alapállapotra vonatkozólag nagymértékben kitágítja a pontos eredmények levezetésének korlátait, és aránylag könnyen átültethető más rendszerre is.

b) A rézoxid síkokra épülő kerámia anyagok esetében az volt a cél, hogy közvetlenül a szupravezető kritikus hőmérséklet felett tanulmányozzuk a kollektív viselkedés jellemzőit, olyan körülmények között amikor a kollektív viselkedés egyértelműen nem jelent hosszútávú térbeli rendezettséget. Az elképzelés Finnországból származott (Turku Egyetem), a mérések

és kiértékelések nagyrésze is ott történt [1,8,16,17].

A kiindulópont az volt, hogy az együttes viselkedés ha lokáloisan jelenik például meg, nehezen észlelhető. Ténylegesen, tradicionális mérési technikák lokális instabilitásokat kevésbé, indirekt, vagy egyáltalán nem érzékelnek. Nem-egyensúlyi körülmények között viszont, (pl. hőmérsékleti gradiens jelenlétében) a mérés térbeli felbontása növelhető, és ezáltal lokális fizikai folyamatok megfigyelhetősége megnő. Hasonlóan, pulzáló külső tér használata esetében az időbeli jellemzők lesznek kísérletileg jobban hozzáférhetőek. [1].

Az említett formában tett mérési eredmények (főként alóldopolt YBCO anyagokban történtek a mérések) a kritikus hőmérséklet feletti tartomány rendkívüli gazdagságára mutatott rá. Ez a gazdagság hangsúlyozottan nemcsak a magashőmérsékletű szupravezetők területén „pseudogap” gyűjtőnéven ismert T_c felett megjelenő Cooper párokra vonatkozik, hanem számos különböző korrelációs hossz és átlagos koherencia élettartammal jellemezhető szakaszokra bontható [16,17].

Megmutattuk továbbá [8], hogy az alkalmazott mérés technika lehetővé teszi a próbatestben lévő lokális inhomogenitások szétválasztását a strukturális modifikációk okozta hatásoktól. A mérési eljárás dinamikus exponens meghatározására is alkalmas [1].

A potenciális alkalmazási lehetőségek főként mérésmódszertani jellegűek, mérések lokális felbontóképességének növelését eredményezhetik.

c) Kolloid kristályokra vonatkozólag [5,6,13,14,21,23,24,29,30,36-38] kétdimenziós részecske-rendszerek kollektív viselkedésének tanulmányozása során elsőként erőláncok kialakulását vizsgáltuk nagysűrűségű, szorosan pakolt granulátumokban lassú nyomás alatt. Kimutattuk, hogy az erőláncok létrejöttét a részecskék lavinászerű átrendeződései kísérik. Kidolgoztunk egy mikroszkopikus modellt, amely a granulátum makroszkopikus mechanikai válasza mellett a lavinák statisztikáját is nagy pontossággal reprodukálja [5,6].

Ferromágneses anyagok dinamikus törések a doménszerkezet megváltozása miatt úgynevezett mágneses zaj lép fel, amelyet megfelelő berendezésekkel feszültségjellé lehet alakítani. Acél törésekor keletkező mágneses zajspektrumok elemzésével kimutattuk, hogy a mágneses zajspektrum csúcsainak amplitúdó-, időtartam-, energia és terület-eloszlása hatványfüggvény viselkedést mutat, melynek exponense jellemző a törés módjára [21]. Eredményeink lehetővé teszik, hogy a mágneses doménszerkezetre alapozva pontosabb képet kapjunk ferromágneses anyagok töréséről. Az eredmények pontos értelmezéséhez, összehasonlításként megvizsgáltuk nemmágneses anyagok törésekor keletkező akusztikus zajspektrumok szerkezetét és törési tulajdonságait is [13,14].

Bináris dipoláris vékonyrétegek struktúráképződéssel járó kollektív folyamatainak kísérleti vizsgálatára kidolgoztunk egy egyszerű módszert. Kísérleteinkben víz felszínén úszó szabályos alakú parafa korongokhoz kisméretű mágneses részecskéket rögzítünk úgy, hogy dipólmomentumuk a vízfelszínre merőleges legyen. A kolloid két komponensét az ellentétes irányítású dipólusok reprezentálják. Véletlenszerű kezdeti pozícióból indítva a részecskéket, a dipól-dipól kölcsönhatás révén a vizen úszva aggregálnak és változatos struktúrákat formálnak. Kísérleti módszerünkkel vizsgáltuk a kétkomponensű dipoláris vékonyréteg aggregációs folyamatait, meghatároztuk a folyamat dinamikai jellemzőit változtatva a komponensek koncentrációját, relatív koncentrációját és polidiszperzitását. A nagykoncentrációs határesetben sikerült kimutatni a kristályosodás folyamatát [29,36]. Az aggregációs és kristályosodási folyamatok elméleti vizsgálatára kifejlesztettünk egy

kétdimenziós diszkrét modellt, amelynek keretében számítógépes szimulációkkal sikerült nagy pontossággal reprodukálnunk a kísérleti eredményeket [23,36].

Külön elemeztük a dipólusok egyszerű, szabályos struktúráinak, mint például a gyűrű és lánc létrejöttét és külső perturbációkkal szembeni stabilitását [37].

Kétdimenziós kolloid kristályok kialakulásának és olvadásának tanulmányozására egyedülálló lehetőséget nyújtanak a periodikus hordozó felületen kialakuló, úgynevezett kolloid molekula-kristályok. A közelmúltban sikerült kísérletileg kimutatni, hogy lézer interferenciával létrehozott kétdimenziós, periodikus optikai csapdán, az egymást taszító részecskék változatos kristályszerkezetekbe rendeződhetnek, változtatva a potenciál gödrök mélységét és a részecskék koncentrációját. Kimutatuk, hogy bináris dipoláris vékonyrétegekben lehetséges pozíció és irány szerinti rendet is mutató molekula-kristályállapotok kialakulása periodikus hordozófelület jelenléte nélkül is, ami egyedülálló lehetőségeket nyújt alkalmazások számára [38].

Megemlítjük továbbá, hogy kétdimenziós rendszerek törésére kapott eredményeinket alkalmaztuk héjszerkezetek széttörésének megértésére is [24,30]. A héjak azért speciálisak, mert lokálisan kétdimenziósak, de dinamikájuk három dimenzióban zajlik.

Eredményeinket számos konferencián bemutattuk, továbbá 6 külföldi és 4 belföldi meghívott előadás született. A potenciális alkalmazási területek: granulátumok mechanikája az iparban, fotonikus kristályok előállítás, repedés megindulás időpontjának meghatározására vonatkoznak.

d) A rendezetlen mágneses anyagok tanulmányozása esetében javaslatot tettünk egy új általános célú heurisztikus optimalizációs algoritmusra [7], melyet — akárcsak a széleskörűen alkalmazott szimulált annealing módszerét — egy fizikai folyamat inspirált, nevezetesen mágneses anyagok viselkedése külső tér hatására. Az általunk hiszterézises optimalizációnak nevezett módszer azon a tapasztalaton alapul, hogy egy csökkenő amplitudóval oszcilláló mágneses tér által lemágnesezett minta a folyamat végére alacsony energiájú állapotba kerül. A módszer legtermészetesebb alkalmazása rendezetlen mágneses rendszerek, így modell spinűvegek energiájának minimalizálása. Ilyenkor nem kell mást tenni, mint szimulálni a mágneses minta viselkedését a változó külső tér hatására. A tér változtatása során a rendszer lavinák során át fejlődik. A spinűvegek alapállapotának meghatározása a legnehezebb optimalizációs problémák közé tartozik. Ha a rendszerben a kölcsönhatások rövid hatótávolságúak, a hiszterézises optimalizáció hatékonysága valamivel jobb, mint a szimulált annealingé, de vannak olyan egyéb módszerek, amelyekkel nem veszi fel a versenyt. Ezzel szemben hosszú hatótávolságú kölcsönhatások esetén, nevezetesen a Sherrington–Kirkpatrick-féle spinűvegre, ez az algoritmus sokkal jobb, mint bámi más, amit ezen rendszerre próbáltak [35]. Ekkor a lavinák méreteloszlása egészen más, mint ha a kölcsönhatás rövid hatótávolságú, egy-egy lavina az egész rendszer méretéhez is hozzá mérhető lehet, és ez segít abban, hogy a rendszer valóban képes lehet megtalálni a legrendezettebb állapotát. Ez a folyamat felfogható úgy mint a hosszú hatótávolságú jelleg miatt kialakult specifikus kollektív viselkedési forma.

Ahhoz, hogy a módszer általános célú algoritmus legyen, azaz az optimalizációs problémák széles körére alkalmazni lehessen, ki kell terjeszteni a külső mágneses tér fogalmát ezen esetekre. Javasoltunk erre egy módszert, s működését demonstráltuk a kétdimenziós utazó ügynök problémájára, bár ez a demonstráció első cikkünkben [7] nem

volt teljesen meggyőző. Egy további cikkben [15] ezt a hiányosságot sikerült kiküszöbölni, és megmutatni, hogy a módszerünk hatékonyabb lehet, mint a szimulált annealing ezen problémára is. Később azt is megmutattuk, hogy a külső tér fogalmának másféle kiterjesztése is lehetséges, amelyet gyakran könnyebb implementálni, koncepcionálisan egyszerűbb, és bizonyos esetekben szignifikánsan hatékonyabb algoritmusra vezet [34].

A Wiley kiadó gondozásában megjelent 'New optimization algorithms in physics' című könyv egyik fejezetét a szerkesztők ezen módszer ismertetésére szánták. Ezen fejezetet [22] felkérésükre a jelen pályázat egyik résztvevője írta. Az eredményeket több nemzetközi konferencián is bemutattuk.

A fő alkalmazási lehetőségek ez esetben az optimalizációs folyamatokban rejlenek.

e) A spontán kompozíció modulációk epitaxiális növekedésére vonatkozólag megemlítenék hogy napjaink tudás- és információalapú társadalmában fontossá váltak az információtechnológiai eszközök méretének csökkentésére ill. integrációjuk növelésére vonatkozó kutatások és új elveken működő eszközök kifejlesztésére irányuló törekvések. Ebben az irányban, a lehetséges nanotechnológiai alkalmazások tekintetében sok ígéretes lehetőséggel kecsegtetnek az epitaxiális felületnövekedésben kialakuló önszervező periódikus nanostruktúrák.

A munkaterv e tematikához tartozó fő kutatási irányvonalaként felállítottunk egy analitikus modellt az epitaxiális növekedés során fellépő önszervező spontán kompozíció modulációk vizsgálatára. A modell magába foglalja a térfogati diffúziót, spinodális dekompozíciót és a felületnövekedést is.

A vizsgált periodikus struktúrák a felületnövekedés, a térfogati diffúzió és a nem-lokális kölcsönhatási tagot tartalmazó spinodális dekompozíció összjátékaként jönnek létre, egy kollektív atomi mozgásokat magába foglaló folyamat eredményeként. Az általánosított, nem lokális kölcsönhatási tagot tartalmazó Cahn-Hilliard modellünk differenciálegyenleteinek numerikus vizsgálata három különböző növekedési módot adott eredményül. Nagy felületnövekedési sebességek esetén a növekedő felülettől kiinduló, a növekvő felülettel párhuzamos (1D laterális), kompozíciós hullámok lecsengenek, majd idővel elhalnak. Ez a viselkedés a felületindukált spinodális dekompozícióra emlékeztet. Analitikus technikával sikerült meghatároznunk a spinodális hullám terjedési sebességét erre a növekedési módusra. Közepes növekedési sebességek esetén 1D laterális periódikus kompozíció oszcillációk alakulnak ki. A modulációk amplitúdója és hullámhossza a felületnövekedés sebességének csökkenésével növekszik. Ezt a trendet kvantitatíve is jellemeztük. Végül, kis növekedési sebességek esetén az 1D laterális kompozíció modulációk amplitúdója eléri a spinodális határokat. Lineáris stabilitásvizsgálat segítségével megmutattuk, hogy közepes növekedési sebességek esetén az 1D laterális kompozíció modulációk három térbeli dimenzióban is stabilak maradnak [25]. A másik két növekedési módusban az 1D laterális kompozíció modulációk elvesztik stabilitásukat a transzverzális (felületre merőleges) módusokkal szemben, így ezekben a növekedési tartományokban összetett, a felületre merőleges irányba is kiemelkedő nanostruktúrák megjelenésére számíthatunk.

Alapmodellünk általánosításaként figyelembe vettük a felületi diffúziót és a felületi szegregációt is. Az erre vonatkozó numerikus vizsgálataink kiderítették, hogy mindkét effektus csökkenti, ill. megszünteti az 1D laterális kompozíció modulációk transzverzális stabilitását. Továbbá megvizsgáltuk a periodikus szemcsehatárok, mint periodikus nano-

struktúrák stabilitását [6], ill. a diffúziós egyenlet kapcsán egy alkalmazás-közeli hővezetési problémát oldottunk meg [28].

Az eredmények több nemzetközi konferencián is bemutatásra kerültek, az eredményekből két külföldi és egy belföldi meghívott előadás született.

A fő alkalmazási lehetőségek ez esetben a nanotechnológia irányába összpontosulnak.

Publikált irodalom

- [1] A. C. Bodi, R. Laiho, E. Lahderanta, J. Raittila, Solid State Commun. **123**, 69, (2002).
- [2] Zs. Gulácsi, Phys. Rev. **B66**, 165109, (2002).
- [3] Zs. Gulácsi, Eur. Phys. Jour. **B30**, 295, (2002).
- [4] P. Gurin, Zs. Gulácsi, Czech. Jour. Phys. **52**, 119, (2002).
- [5] H. J. Herrmann, R. C. Hidalgo, F. Kun, Eur. Phys. Jour. **E9**, 261, (2002).
- [6] R. C. Hidalgo, C. U. Grosse, F. Kun, H. W. Reinhardt, H. J. Herrmann, Phys. Rev. Lett. **89**, 205501, (2002).
- [7] G. Zaránd, F. Pázmándi, K. F. Pál, G. T. Zimányi, Phys. Rev. Lett. **89**, 150201, (2002).
- [8] A. C. Bodi, R. Laiho, E. Lahderanta, J. Raittila, Thermochemica Acta **406**, 143, (2003).
- [9] Zs. Gulácsi, Acta Phys. Pol. **B34**, 749, (2003).
- [10] Zs. Gulácsi, D. Vollhardt, Phys. Rev. Lett. **91**, 186401, (2003).
- [11] J. C. Hamilton, D. J. Siegel, I. Daruka, Phys. Rev. Lett. **90**, 246102, (2003).
- [12] E. Kovács, F. Kusmartsev, R. T. Giles, Jour. of Phys. **A36**, 9391, (2003).
- [13] F. Kun, R. C. Hidalgo, H. J. Herrmann, K. F. Pál, Phys. Rev. **E67**, 061802, (2003).
- [14] F. Kun, Y. Moreno, R. C. Hidalgo, H. J. Herrmann, Europhys. Lett. **63**, 347, (2003).
- [15] K. F. Pál, Physica **A329**, 287, (2003).
- [16] A. C. Bodi, R. Laiho, E. Lahderanta, Jour. of Supercond. **17**, 465, (2004).
- [17] A. C. Bodi, R. Laiho, E. Lahderanta, Physica **C411**, 107, (2004).
- [18] Zs. Gulácsi, Phys. Rev. **B69**, 054204, (2004).
- [19] Zs. Gulácsi, Phil. Mag. Lett. **84**, 405, (2004).
- [20] E. Kovács, L. Molnár, Reports on Math. Physics **54**, 201, (2004).

- [21] F. Kun, G. B. Lenkey, N. Takács, D. L. Beke, Phys. Rev. Lett. **93**, 227204, (2004).
- [22] K. F. Pál, Hysteretic Optimization, New Optimization Algorithms in Physics, Edited by Hartmann A. K. and Rieger H., Wiley-VCH Verlag GmbH & Co., Weinheim, Germany, Chapter 10, pg. 205-226, (2004).
- [23] I. Varga, F. Kun, K. F. Pál, Phys. Rev. **E69**, 030501(R), (2004).
- [24] F. K. Wittel, F. Kun, H. J. Herrmann, B. H. Krop, Phys. Rev. Lett. **93**, 035504, (2004).
- [25] I. Daruka, J. Tersoff, Phys. Rev. Lett. **95**, 076102, (2005).
- [26] Zs. Gulácsi, D. Vollhardt, Phys. Rev. **B72**, 075130, (2005).
- [27] E. Kovács, Zs. Gulácsi, Jour. of Phys. **A 38**, 10273, (2005).
- [28] S. Z. Szilasi, E. Baradacs, I. Daruka, P. Raics, Cs. Cserháti, I. Rajta, Nucl. Instr. and Methods **B231**, 419, (2005).
- [29] I. Varga, H. Yamada, F. Kun, H. G. Matuttis, N. Ito, Phys. Rev. **E71**, 051405, (2005).
- [30] F. K. Wittel, F. Kun, H. J. Herrmann, B. H. Krop, Phys. Rev. **E71**, 016108, (2005).
- [31] Zs. Gulácsi, M. Gulácsi, Phys. Rev. **B73**, 014524, (2006).
- [32] E. Kovács, Zs. Gulácsi, Phil. Mag. **86**, 2073, (2006).
- [33] E. Kovács, Zs. Gulácsi, Phil. Mag. **86**, 1997, (2006).
- [34] K. F. Pál, Physica **A360**, 525, (2006).
- [35] K. F. Pál, Physica **A367**, 261, (2006).
- [36] N. Yoshioka, I. Varga, F. Kun, S. Yukawa, N. Ito, Phys. Rev. **E72**, 061403, (2005).
- [37] I. Varga, F. Kun, Phil. Mag. **86**, 2011, (2006).
- [38] I. Varga, F. Kun, Molecular crystalline states in dipolar monolayers, Phys. Rev. E (2006), publikálásra elfogadva.