Berichte aus der Physik

Joachim Hermisson

Aperiodische Ordnung und Magnetische Phasenübergänge

D 21 (Diss. Universität Tübingen)

Shaker Verlag
Aachen 1999

Die Deutsche Bibliothek - CIP-Einheitsaufnahme

Hermisson, Joachim:
Aperiodische Ordnung und Magnetische Phasenübergänge /
Joachim Hermisson. - Als Ms. gedr. - Aachen : Shaker, 1999
(Berichte aus der Physik)
Zugl.: Tübingen, Univ., Diss., 1999
ISBN 3-8265-6467-7

Copyright Shaker Verlag 1999
Alle Rechte, auch das des auszugsweisen Nachdruckes, der auszugsweisen oder vollständigen Wiedergabe, der Speicherung in Datenverarbeitungsanlagen und der Übersetzung, vorbehalten.

Als Manuskript gedruckt. Printed in Germany.

ISBN 3-8265-6467-7
ISSN 0945-0963

Shaker Verlag GmbH • Postfach 1290 • 52013 Aachen
Telefon: 02407 / 95 96 - 0 • Telefax: 02407 / 95 96 - 9
Internet: www.shaker.de • eMail: info@shaker.de

Zusammenfassung

Aperiodische Ordnung hat viele Facetten. 15 Jahre nach der Entdeckung der Quasikristalle ist es heute offensichtlich, daß die verschiedenen physikalischen Eigenschaften von aperiodisch – und auch periodisch – geordneten Festkörpern durch ganz unterschiedliche Aspekte der zugrundeliegenden strukturellen Ordnung bestimmt werden.

Das *Ziel* der vorliegenden Arbeit war es, mit exakten Methoden einen Beitrag zu leisten zur Klärung dieses Wechselspiels zwischen der Struktur geordneter oder teilgeordneter Festkörper und ihren physikalischen Eigenschaften.

Die *Ergebnisse* lassen sich zwei Bereichen zuordnen. Sie umfassen zum einen die im ersten Kapitel vorgestellte Klassifikation quasiperiodischer Muster nach ihren geometrischen und Reskalierungs-Symmetrien. Zum anderen beinhalten sie eine ausführliche quantitative Analyse des kritischen Skalenverhaltens aperiodischer Ising- und XY-Quantenketten (sowie verwandter Modelle) im zweiten Teil der Arbeit.

Die *Methoden*, die zur Ableitung dieser Resultate verwendet wurden, sind die im ersten Kapitel vorgestellte Torusparametrisierung zur Symmetrie-Analyse quasiperiodischer LI-Klassen und das im zweiten Teil entwickelte, im Niederenergielimes exakte Ortsraum-Renormierungsverfahren für die aperiodischen Spinketten. Die Renormierungsmethode erlaubt neben der Behandlung aperiodischer Unordnung nicht zuletzt auch die exakte Darstellung wichtiger Elemente aus der Theorie der Renormierungsgruppe für ein Modell mit einem nicht-trivialen Phasenübergang. Hierauf wurde bei ihrer Einführung im zweiten Kapitel besonders Rücksicht genommen.

Symmetrie-Eigenschaften. Die Klassifikation von Symmetrien in aperiodischen Strukturen erfordert eine Erweiterung und leichte Abschwächung der Symmetriebegriffe im Vergleich zum kristallographischen Fall. Zur Definition verallgemeinerter Symmetriegruppen hat sich hier in der Vergangenheit eine Vergröberung in der Beschreibung aperiodischer Muster durch den Übergang auf die jeweilige LI-Klasse physikalisch ununterscheidbarer Strukturen als tragfähiges Konzept erwiesen. In der vorliegenden Arbeit haben wir diesen Ansatz für eine Erweiterung des Begriffs der *Wyckoff-Position* verwendet, die im gitterperiodischen Fall die symmetrischen Zentren innerhalb eines Kristalls beschreiben. Für quasiperiodische Strukturen führt die vergröberte Beschreibung zu einer Klassifikation der Symmetrien lokaler Cluster mit beliebiger, aber endlicher Größe innerhalb der Muster. Für alle (bis heute) in der Natur experimentell nachgewiesenen Formen quasiperiodischer Ordnung konnte diese Symmetrie-Analyse mit Hilfe der Torus-Parametrisierung vollständig

durchgeführt werden. Aus dem Ergebnis für dreidimensionale Strukturen mit verallgemeinerter Ikosaedersymmetrie erkennt man unter anderem einen starken Anstieg in der Dichte der ikosaedersymmetrischen Cluster für die in der Natur bevorzugt realisierten Typen.

Magnetische Phasenübergänge. Das zentrale Resultat des thermodynamischen Teils der Arbeit in den Kapiteln 2 und 3 ist die exakte Ableitung des Harris-Luck-Relevanzkriteriums für Ising- und XY-Quantenketten mit beliebigen (durch Substitution erzeugten) Modulationen in der Stärke der Spin-Wechselwirkungen. Damit erfahren die heuristischen Skalenargumente, die das Kriterium im allgemeinen Fall stützen, zumindest für zwei einfache Modellklassen eine exakte Bestätigung. Die quantitativen Resultate umfassen analytische Ausdrücke für die kritischen Singularitäten der Anregungslücke, der Oberflächenmagnetisierung bzw. der Oberflächen-*String*ordnung sowie (unter Verwendung eines *Finite-Size-Scaling*-Arguments) der Korrelationslänge.

Die entscheidende Größe zur Abgrenzung von Universalitätsklassen ist der Fluktuationsexponent ω_δ der lokalen Verschiebungen $\delta^{(j)}$ des kritischen Punktes. Im Formalismus der Renormierungsgruppe läßt sich $\delta^{(j)}$ als Funktion der lokalen Spin-Wechselwirkungen identifizieren. Wie im Rahmen des Harris-Luck-Kriteriums vorhergesagt, sind aperiodische Modulationen, die zu beschränkten Fluktuationen von $\delta^{(j)}$ führen, irrelevant. Die entsprechenden Modelle zeigen wie im periodischen Fall kritisches Skalenverhalten vom Onsager-Typ und besitzen einen konform invarianten Kontinuumslimes. Unbeschränkte Fluktuationen mit $\omega_\delta > 0$ führen dagegen zu einer Abschwächung der kritischen Singularitäten, speziell für $\omega_\delta = 1/2$ ist das Skalenverhalten zahlreicher Größen identisch zum Fall unkorrelierter Unordnung in den Kopplungen. Kennzeichen des marginalen Falls mit logarithmisch divergenten Fluktuationen ($\omega_\delta = 0$) sind schließlich nicht-universelle Potenzgesetze am kritischen Punkt mit Exponenten, die stetig von der Stärke der Spin-Wechselwirkungen abhängen.

Weitere Aspekte von 'Ordnung', wie die Komplexität einer Struktur oder ihr Diffraktionsverhalten, beeinflussen – wie vorhergesagt – die kritischen Eigenschaften des Modells nicht. Die exakten Resultate zeigen zudem, daß die Relevanz (oder Irrelevanz) der Aperiodizität auch von der *Amplitude* der aperiodischen Modulation unabhängig ist: Das Relevanzkriterium gilt für die untersuchten Modellklassen in gleicher Form auch für starke aperiodische (Un)ordnung.

Unsere Untersuchungen lassen aber auch erkennen, daß die Berechnung des maßgeblichen Fluktuationsexponenten ω_δ für Modelle mit korrelierter oder deterministisch aperiodischer Unordnung eine durchaus nicht-triviale Aufgabe bleibt. Hier kann einer vorgegebenen Ordnungsstruktur, im Gegensatz zum Fall periodisch geordneter oder zufallsverteilter Kopplungen, nicht mehr unabhängig vom Modell ein eindeutiger, fester Fluktuationsexponent zugeordnet werden. Insbesondere können die Fluktuationen in der mittleren Kopplungsstärke nicht mehr ohne weiteres als Maß für die Relevanz der Unordnung verwendet werden. Innerhalb der beiden Modellklassen, die eine exakte Bestimmung von ω_δ erlauben, zeigen dies die Ergebnisse für die XY-Quantenkette mit isotroper aperiodischer Unordnung.

Die Aufgabe des letzten Unterkapitels 3.3 der Arbeit war es schließlich, die Übertragbar-

keit der in den exakt behandelbaren Fällen gewonnenen Ergebnisse auf analytisch nicht in gleicher Weise zugängliche Systeme zu überprüfen. Zu diesem Ziel wurde eine ursprünglich für homogene Gitter definierte approximative Ortsraumrenormierung auf eine Klasse zweidimensionaler aperiodischer Ising-Modelle angewendet. Dabei findet sich ein wichtiger Punkt der exakten Renormierung (die zentrale Funktion der Substitutionsmatrix) in dem approximativen Verfahren wieder. Die Resultate reproduzieren für die betrachtete Modellklasse – im Rahmen der Approximation – genau die Vorhersagen des Harris-Luck-Relevanzkriteriums.