# Anderson transitions and multifractal finite-size scaling

Ph.D. dolgozat tézisfüzete

Ujfalusi László
Témavezető: Dr. Varga Imre

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem
Elméleti Fizika Tanszék

2015

# 1 A kutatások előzménye

A rendezetlenség hatására végbemenő fém-szigetelő fázisátalakulás -más néven Anderson-lokalizáció- a XX. sz. közepe óta a szilárdtestfizikai kutatások homlokterében van. Az Anderson átalakulás - kevés kivételtől eltekintve - háromdimenziós rendszerekben megy végbe, egy- és kétdimenziós rendszerekben tetszőlegesen kis rendezetlenség lokalizációt okoz. A rendezetlenség jelen lehet kristályhibák, véletlen elhelyezkedésű szennyező atomok, vagy akár az atomi energiaszinteket eltoló véletlenszerű potenciál formájában is. Az univerzalitás miatt azonban nagyon sok fizikai mennyiség a rendezetlenség konkrét formájától független. Egy tökéletes kristály tökéletes elektromos vezetőként viselkedik, az elektronok ballisztikusan mozognak. Némi rendezetlenséget kapcsolva a rendszerre, az elektronok néhányszor szóródnak, az elektronok diffúzívan mozognak, és a rendszer még mindig viszonylag jó vezető. Tovább növelve a rendezetlenséget, a sorozatos szóródás képes az elektronokat csapdázni (Anderson-lokalizálni), emiatt a rendszer szigetelő tulajdonságokat mutat.

Az elektronok hullámfüggvényeit vizsgálva megállapíthatjuk, hogy azok a fémes fázisban a teljes rácsra kiterjednek, effektíve háromdimenziósak. A szigetelő fázisban exponenciálisan lokalizált hullámfüggvényeket találunk, melyek a lokalizációs hossztól sokkal nagyobb rendszerben gyakorlatilag pontszerűek, effektíve nulla dimenziósak. Mivel a fém-szigetelő fázisátalakulás másodrendű, az átalakulási pontot - ami emiatt egy kritikus pont - a fémes (szigetelő) oldalról megközelítve a korrelációs (lokalizációs) hossz divergál, a rendszer skálafüggetlen. Az ezzel együtt járó önhasonlóság a fraktálokra jellemző, így a fém-szigetelő átalakulási pontban is várhatunk fraktálokhoz hasonló viselkedést, az elektronok hullámfüggvénye multifraktál tulajdonságokat mutat. A multifraktálok a fraktálok általánosításai. Mivel nagyon erős fluktuációk jellemzőek rájuk, egyetlen fraktáldimenzió helyett csak a $q$ paramétertől folytonosan függő, végtelen sok $D_q$ vagy $\alpha_q$ fraktáldimenziók összességével írhatóak le. $D_q$ és $\alpha_q$ mellett további általánosított fraktáldimenziók - más néven multifraktál exponenseknek - definiálhatók.

# 2 Célkitűzések

A kutatásom fő célja az volt, hogy megmutassam, hogy a multifraktálok jelen vannak különféle rendezetlen rendszerekben, illetve hogy ezen rendszerek kritikus mennyiségeit meghatározzam multifraktálok segítségével. A rendezetlen rendszerek az időtükrözési és spin-forgatás szimmetria teljesülésétől illetve sérülésétől függően különböző univerzalitási osztályokba tartoznak. Ezen szimmetriák meglétének vagy sérülésének hatását vizsgáltam a kritikus pontra, kritikus exponensre (lokalizációs/korrelációs hossz divergenciáját leíró exponens) és a multifraktál exponensekre a rendezetlenséget egy véletlen potenciállal figyelembe vevő Anderson modellen. Rendezetlenséget bevezethetünk rácshibák segítségével is, melynek egyik alapvető modellje a perkoláció. Egy háromdimenziós perkolált rácson elsőszomszéd hoppingot megengedve kapjuk a kvantum perkolációs modellt. Ennek hullámfüggvényeit megvizsgálva az Anderson modellhez igen hasonló viselkedést tapasztalunk. Célom itt is a kritikus pontban, $p_c^Q$, jelen lévő multifraktálok kimutatása, és a kritikus paraméterek meghatározása volt. A korábbi problémánál használt módszer jelentősen kihasználta, hogy a rács egy reguláris háromdimenziós kristály, így további célom volt, hogy azt továbbfejlesszem üres rácshelyeket is tartalmazó szabálytalan rácsra. Kvantum színdinamikában is megfigyeltek magas hőmérsékleten a kvarkok hullámfüggvényében Anderson lokalizációra emlékeztető jelenségeket. Az energia növelésével a kvarkok hullámfüggvényei lokalizáltból kiterjedt állapotokba mennek át, melyet eddig spektrálstatisztikákon keresztül vizsgáltak. Célunk a jelenséget felfedező csoporttal együttműködve az volt, hogy a kvarkok hullámfüggvényeit vizsgálva is kimutassuk az átalakulást, illetve hogy kimutassuk a multifraktalitást az átalakulási pontban.

# 3 Vizsgálati módszerek

A különféle rendezetlen rendszereket numerikusan vizsgálatam. Az Anderson modellben és a kvantum perkolációs modellben is elsőszomszéd hoppingot vettem figyelembe, így egy véges rendszert leíró Hamilton mátrix nagyon ritka. Feladatom egy a mátrix spektrumának belsejében lévő sajátvektor megtalálása volt, mely egy elektron hullámfüggvényét írja le. Ehhez ILU prekondícionálást (ILUPACK könyvtár) követően Jacobi-Davidson iterációt (PRIMME könyvtár) használtam. A mátrix ritkasága lehetővé tette igen nagy, akár egymillió rácspontot tartalmazó rendszerek vizsgálatát is, így igen pontos eredményeket kaphattam. A számításokhoz a BME Elméleti Fizika Tanszék klaszterét, és a BME szuperszámítógépét használtam. A kvak-gluon rendszer vizsgálatához már egy meglévő GPU-kódot használtunk, melyet egy GPU-klaszteren futtattunk le. A sajátvektorokból kiszámítottam az multifraktál exponensek véges méret változatát, pl. $D_q$, az átalakulási pont közelében, melyet általánosított multifraktál exponenseknek neveznek. Mivel az átalakulás fémes oldalán $D_q \equiv 3$, a szigetelő oldalon pedig $D_q \equiv 0$ ha $q > 0$, illetve $D_q \equiv \infty$, ha $q < 0$ érvényes egy végtelen nagy rendszerben, az általánosított multifraktál exponenseket rendparaméterként használhatjuk. Ezeket különböző rendszerméreteknél és a rendezetlenség különböző értékeinél megmértem, majd véges-méret skálázást végeztem: Az általánosított multifraktál exponenseket a kritikus pont közelében véges rendszer méretnél leíró skálafüggvényt illesztettem a nyers adatokra. Mielőtt az általánosított multifraktál exponenseket kiszámolnánk, a hullámfüggvényen végrehajthatunk egy ú.n. „coarse graining”-et: A rendszermérettől jelentősen kisebb dobozokba eső hullámfüggvény értéke-ket összeadhatjuk. Ezután két módszert haszálhatunk: $\lambda$-t fixálva, mely a dobozméret és a rendszerméret aránya, egy egyváltozós skálafüggvényt kapunk, míg ha $\lambda$-t engedjük szabadon változni, egy kétváltozós skálfüggvényhez jutunk. A véges méret skálázás eredményeként megkapjuk a kritikus pont helyét, a kritikus exponens és egyéb kritikus paraméterek értékét.

# 4 Új tudományos eredmények

Alább a tézispontokat listázom:

1. Multifraktál véges-méret skálázás segítségével megvizsgáltam a Wigner-Dyson szimmetria osztályokba tartozó Anderson modelleket. A fix $\lambda$-t használó valamint a változó $\lambda$-t használó módszerrel megerősítettem a multifraktálok jelenlétét mindhárom Wigner-Dyson univerzalitási osztályban. Mindhárom osztályban meghatároztam a kritikus pont, kritikus exponens és az irreleváns exponens értékét. A két módszerrel

kapott eredmények egyezést mutattak egymással és az irodalomban elérhető adatokkal is. A változó $\lambda$-t használó módszer szignifikánsan különböző kritikus exponenseket adott a különböző univerzalitási osztályokra. Kiszámítottam a multifraktál exponenseket is mindhárom univerzalitási osztályra. A különböző univerzalitási osztályok multifraktál exponensei egymáshoz igen közel esnek, de szignifikánsan különböznek a $q$ paraméter legtöbb általam vizsgált értékénél.
Az 1. publikáció kapcsolódik ezen tézisponthoz.

2. Numerikusan vizsgáltam a három dimenziós kvantum perkolációs modellt. A lokalizáció leírásához multifraktál véges méret skálázást használtam. Meghatároztam a rendszer mozgékonysági küszöbét, mely korábbi eredményekkel egyezést mutatott. A kritikus exponensre energiától független értéket kaptam 95%-os konfidenciaszint mellett. Ezek átlaga hibahatáron belül megyegyezik az ortogonális Anderson modellre kapott értékkel, ami arra enged következtetni, hogy a modell a királis ortogonális Anderson univerzalitási osztályba tartozik. Meghatároztam a $D_q$ és $\alpha_q$ multifraktál exponenseket a mozgékonysági küszöb mentén, és magas $p_c^Q$ értékek esetén nem találtam eltérést az Anderson modellben kapott eredményektől, mely a fenti univerzalitási osztályba tartozást erősíti meg.
A 2. publikáció kapcsolódik ezen tézisponthoz.

3. Megmutattam, hogy az Anderson modell nagy rendezetlenség mellett nem-triviális módon viselkedik, különösen a sáv szélének közelében. Megmutattam azt is, hogy már egy két vagy három rácshelyet tartalmazó modell is kvalitatívan jól írja le a rendszert.
A 3. publikáció kapcsolódik ezen tézisponthoz.

4. Megvizsgáltam a kvantum színdinamika Dirac-operátorában magas hőmérséklet mellett bekövetkező Anderson átalakulást. A QCD Dirac operátorának és az unitér Anderson modell Hamilton operátorának sajátvektorai közt hasonló korrelációkat találtam. A fix $\lambda$ mellett végzett multifraktál véges méret skálázás korábbi eredményekkel egyező kritikus pontot adott. A kritikus exponens megegyezik az unitér Anderson modellre kapott saját eredményemmel. A multifraktál exponensek közelítő értékei is jó egyezést mutatnak az unitér Anderson modellben kapott eredményekkel. Munkám megerősíti, hogy a QCD Dirac operátorának spektrumában valóban egy Anderson átalakulás megy végbe, és hogy az a királis unitér Anderson univerzalitási osztályba tartozik.
A 4. és 5. publikáció kapcsolódik ezen tézisponthoz.

# 5 Publikációk

A tézishez kapcsolódó publikációk:


1. L. Ujfalusi and I. Varga : Finite size scaling and multifractality at the Anderson transition for the three Wigner-Dyson symmetry classes in three dimensions, *Physical Review B* **91**, 184206 (2015).

2. L. Ujfalusi and I. Varga: Quantum percolation transition in three dimensions: Density of states, finite-size scaling, and multifractality, *Physical Review B* **90**, 174203 (2014).

3. L. Ujfalusi and I. Varga: Anderson localization at large disorder, *Physical Review B* **86**, 125143 (2012).

4. M. Giordano, T. G. Kovács, F. Pittler, L. Ujfalusi and I. Varga : Dirac eigenmodes at the QCD Anderson transition, PoS LATTICE2014 (2015) 212.

5. L. Ujfalusi, M. Giordano, F. Pittler, T. G. Kovács and I. Varga: Anderson transition and multifractals in the spectrum of the Dirac operator of Quantum Chromodynamics at high temperature, submitted to PRB

Egyéb publikáció:

6. L. Ujfalusi, D. Schumayer and I. Varga: Quantum chaos in one dimension?, *Physical Review E* **84**, 016230 (2011).