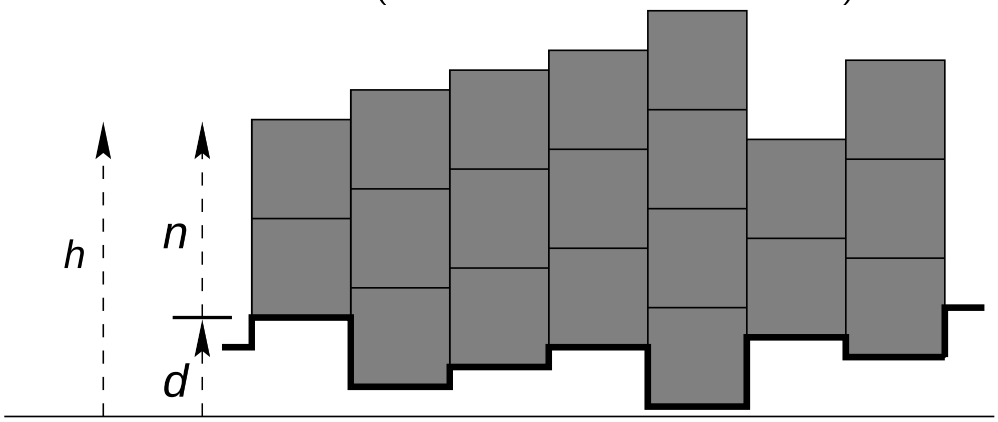
SOS-Modelle und deren Behandlung mittels minimum-cost-flow Algorithmen

- ▷ Einführung
  - ▷ Physikalische Problemstellung
  - ▷ Verwandte Probleme
  - ▷ Bemerkung zu frustrierten Systeme
  - ▷ Warum Grundzustandsberechnung ?
- ▷ Ausflug in die Graphentheorie
  - ▷ Das SOS-Modell als Graph
  - ▷ Der Dualgraph
- ▷ Bemerkungen zur Implementation
- ▷ Verschiedene Ergebnisse
- ▷ Zusammenfassung

Physikalische Problemstellung

▷ Kristallines Wachstum auf einem Substrat mit ungeordneter Oberfläche (**S**olid-**o**n-**s**olid model).



▷ Art des Wachstum ist bestimmt durch Energiefunktion (Hamiltonian):

$$H = \sum_{(ij)} \theta((d_i + n_i) - (d_j + n_j)) = \sum_{(ij)} \theta(d_{ij} + x_{ij})$$

▷ Summe über nächste Nachbarn (ij) einer konvexen symmetrischen Funktion f mit der Differenz der Höhen $d_i + n_i$, $d_{ij} + x_{ij}$ als Argument.

Verwandte Systeme / Motivation

- ▷ Wachstum auf Oberflächen spielt eine wichtige Rolle bei der Herstellung von Halbleitern.
- ▷ Verwandschaft zu einem 2D Hochtemperatursupraleiter Modell
  - ▷ Zweidimensionale Anordnung von Flußlinien mit magnetischem Feld parallel zur supraleitenden Oberfläche und random pinning.
- ▷ Beide Systeme gehören in die gleiche Universalitätsklasse. Am Phasenübergang sollten sie das gleiche Verhalten zeigen.

Frustrierte Systeme

Ein frustriertes System kann wegen Randbedingungen seine minimale Energiekonfiguration lokal nicht annehmen. Ein Beispiel ist ein Ising-Spinsystem:

$$H = -\sigma_1\sigma_2 - \sigma_2\sigma_3 - \sigma_3\sigma_4 + \sigma_4\sigma_1$$

Hier ist es nicht möglich an jedem Platz eine optimale Spinkonfiguration zu verwirklichen.

In diskreten Systemen führt Frustration häufig zu vielfacher Entartung eines Energiezustandes.

▷ Praktisch nicht möglich einen Tieftemperatur-Gleichgewichtszustand mit Monte-Carlo-Simulation zu berechnen.

Warum Grundzustandsberechnung ?

- Der **exakte** Grundzustand ist besser als schlechte Tieftemperatur Simulation.

- Einige Eigenschaften des Grundzustandes bleiben bei endlichen Temperaturen erhalten. Z.B Korrelationen

- Wenn ein Phasenübergang in einen geordneten Zustand bei $T = 0$ stattfindet, lassen sich kritische Exponenten bestimmen.

- Überprüfung von Rechnungen bei endlichem T mit anderen Methoden. (z.B. Renormierungsgruppen). Wenn es einen Fixpunkt bei $T = 0$ gibt, dann lassen sich sogar Kritische Exponenten für endliche Temperaturen bestimmen.

Das SOS-Modell als Graph

▷ Das SOS-Modell wird als Graph zum Gitter, mit der Höhe eines Gitterplatzes am Vertex und der Differenz der Höhen an jeder Kante.

▷ In jedem geschlossenen Umlauf ist die Summe der Werte der durchlaufenen Kanten gleich Null, da diese eine Potentialdifferenz beschreiben.

▷ Mit $\theta(x) := x^2$, $d_{ij} := d_i - d_j$ und $x_{ij} := n_i - n_j$ läßt sich das Problem schreiben als:

$$H(X) = \sum_{(ij)\in E} (d_{ij} + x_{ij})^2$$

Der Dualgraph

Der Dualgraph wird konstruiert,

- ▷ indem in jedes Gebiet des ursprünglichen Graphen ein Vertex gelegt wird.
- ▷ indem für jede Kante des ursprünglichen Graphen eine neue, die alte schneidende Kante mit demselben Wert konstruiert wird.
- ▷ Dadurch wird die Potentialzwangsbedingung zu einer Stromerhaltung an jedem Vertex.
- ▷ Gesucht ist also eine Lösung, die die folgenden Bedingungen erfüllt:

1. Lösung optimal:

$$H(X) = \sum_{(ij)\in E} (d_{ij} + x_{ij})^2$$

minimal.

2. Ganzzahlige Höhe:

$$x_{ij} \in Z$$

für alle Kanten $(ij) \in E$

3. Stromerhaltung erfüllt:

$$\sum_{(ij)} x_{ij} - \sum_{(ji)} x_{ji} = 0$$

▷ Ein Problem dieser Art bezeichnet man auch als **minimum-cost-flow** Problem mit Massenerhaltung.

Bemerkungen zur Implementation

Zwei Algorithmen zur Lösung bieten sich an:

1. Zu Anfang werden alle x_{ij} auf 0 gesetzt, danach werden werden Regionen (cluster) kollektiv erhöht, um Energie zu gewinnen.
   - ▷ Die Stromerhaltung ist bei jedem Schritt gewährleistet.
   - ▷ Dies wird vom **negative cycling canceling** Algorithmus durchgeführt. Dieser umrundet Bereiche im Dualgraph in dem die Höhe erhöht oder erniedrigt werden soll.
   - ▷ Der Rechenaufwand ist nicht-polynomial.

2. Man startet mit einer optimalen Lösung für $H(\mathbf{x})$. Diese Lösung verletzt i.A. die Stromerhaltung. Die Verletzungen werden iterativ durch Vergrößern des Flusses an einzelnen Vertizes aufgelöst.
   - ▷ Der **successive shortest path** Algorithmus kodiert dieses Vorgehen.
   - ▷ Der Rechenaufwand ist polynomial.

Stabilität gegenüber thermischen Fluktuationen

Zur Untersuchung wählt man das Konzept der **domain wall renormalization**.

▷ Bekannt aus **random spin** Systemen.

▷ Berechnung der Energie, die eine Treppenstufe von Höhe 1 in einem System mit linearer Größe L kostet.

▷ Wenn die Energie mit der Systemgröße L zunimmt, ist der Grundzustand stabil. Dies gilt auch für endliche Temperaturen.

Randbedingungen

Zur Ermittlung von $[|\Delta E|]_{\mathrm{av}}$ wählt man:

- $\triangleright$ Die untere Kante des Gitters zu:

$$h_{(x,0)} = 0$$

- $\triangleright$ Die obere Kante des Gitters zu:

$$h_{(x,L)} = 1$$

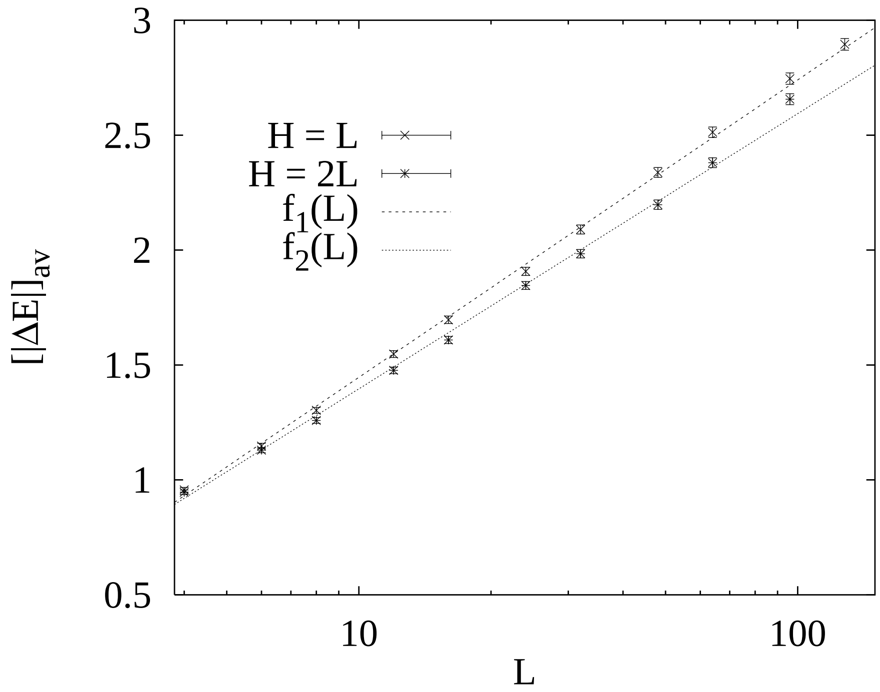
- $\triangleright$ Sowie die linke und rechte Kante:

$$h_{(0,y)} = h_{(L+1,y)} = \theta(y - L/2)$$

Damit wird $\Delta E = L$ für $d_i \equiv 0$. Die Oberfläche ist also stabil für endliche Temperaturen in diesem Fall.

Computerexperiment

Die Stufenenergie $[|\Delta E|]_{\text{av}}$ gemittelt über 10^4 Ergebnisse. Für die Oberfläche wurde eine rechteckige Geometrie $L \times H$ gewählt.

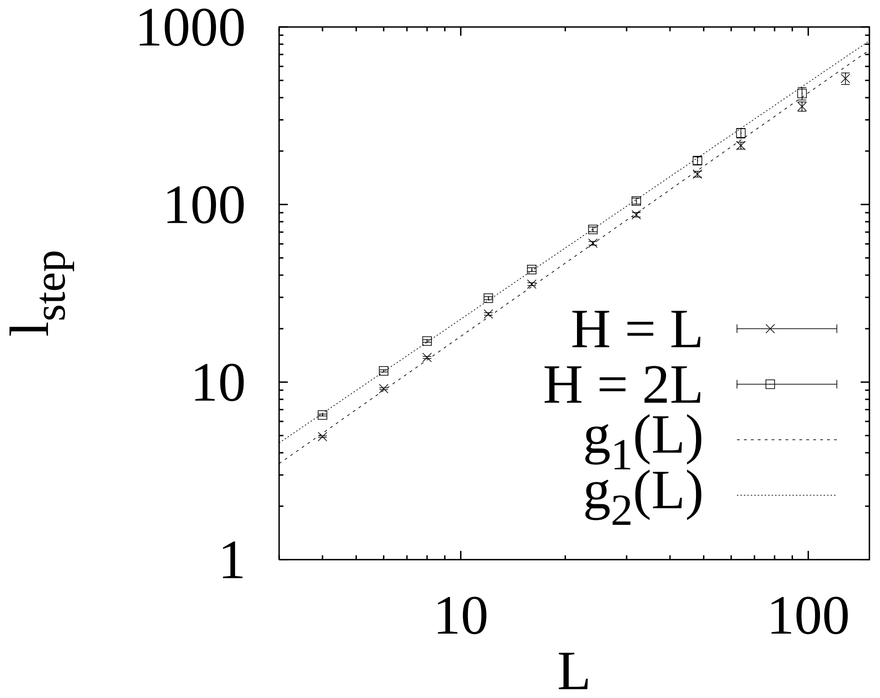


Die Ergebnisse lassen sich gut fitten an:

$$[|\Delta E|]_{\text{av}} \sim a + b \ln L$$

Fraktale Dimension der Stufe

Es stellt sich heraus, daß die Stufe, die das Gitter durchquert fraktal ist.



Die Meßergebnisse lassen sich fitten an:

$$\mathcal{L}_{\mathrm{step}} = L^{d_{\mathrm{step}}} \qquad \text{mit} \qquad d_{\mathrm{step}} = 1.35 \pm 0.02$$

▷ Diese Eigenschaft ist universal, auch für verschiedene Funktionen $f(x)$.

Dekorrelationen bei infinitesimalen Variationen in der Oberflächenrauhigkeit

Untersuchung der Änderung der Grundzustandskonfiguration bei Störung der d_i:

$$d'_i = d_i + \varepsilon_i \qquad \text{mit} \qquad \varepsilon_i \in [-\delta/2, +\delta/2] \text{ und } \delta \ll 1$$

Die folgende Größe ist ein Maß für die gesammte Höhendifferenz:

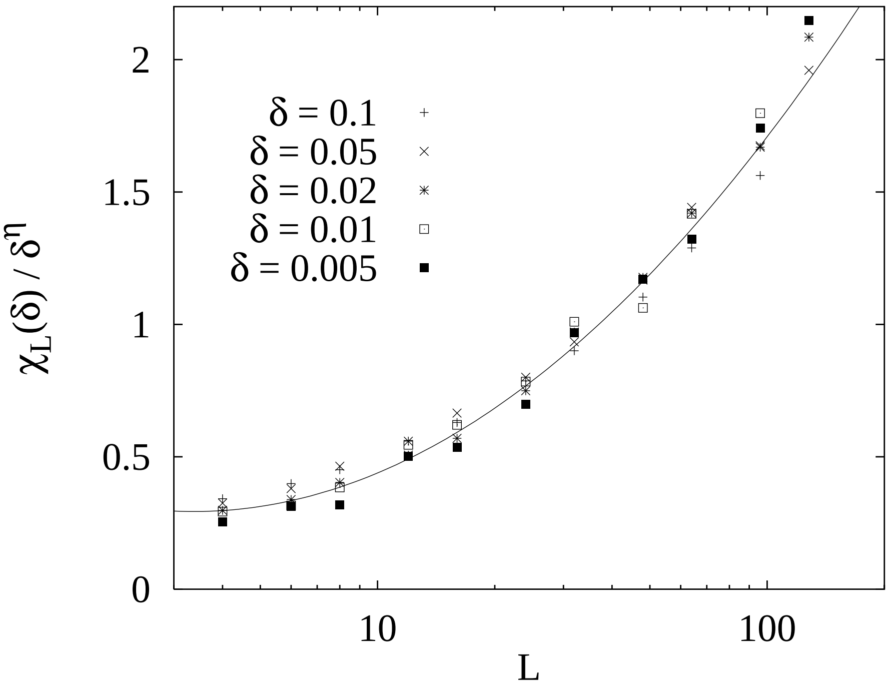
$$\chi_L(\delta) = \sum_i [h_i - h'_i]_{\mathrm{av}}$$

Motiviert aus Untersuchungen mit Spin-Gläsern wählt man folgenden Ansatz:

$$\chi_L(\delta)/\delta^\eta \sim g(L)$$

Computerexperiment

Eine gute Übereinstimmung ergibt sich für $\eta = 0.91 \pm 0.05$.



Für die Funktion $g(L)$ ergibt sich ein wesentlicher $\log^2(r)$ Beitrag.

- ▷ Die Größe $1/\delta^\eta$ läßt sich als charakteristische Länge interpretieren, über die zwei Grundzustände dekorrelieren.

- ▷ Diese Interpretation ist analog zur Überlapp-Länge im Zusammenhang mit Spin-Gläsern.

Zusammenfassung

▷ Das SOS-Modell mit rauher Oberfläche läßt sich auf einem Graphen abbilden.

▷ Das Modell ist ein repräsentant aus einer Klasse verwandter Systeme.

▷ Mit dem Übergang zu einem Dualgraphen wird eine Potentialzwangsbedingung zu einer Stromerhaltung.

▷ Zur Lösung des Optimierunsproblemes stehen leistungsfähige Algorithmen aus der Graphentheorie zur Verfügung. (minimum-cost-flow Problem)

▷ Die Stufenanregungsenergie wächst logarithmisch. Der Grundzustand ist also thermisch stabil.

▷ Eine erzwungen Höhenstufe ist fraktal.