

# VÉGTELENÜL RENDEZETLEN KRITIKUS VISELKEDÉS

Iglói Ferenc, Kovács István  
MTA Wigner Fizikai Kutatóközpont

## Előzmények

A fázisátalakulások és kritikus jelenségek a mindennapi életben is gyakran előforduló folyamatok, amelyek során a makroszkopikus testek tulajdonságai egy adott ponton hirtelen drasztikusan megváltoznak. Itt elegendő a víz megfagyásával kapcsolatos folyamatokra és azok gyakorlati következményeire utalnunk. A természetben megfigyelhető fázisátalakulások, miként a fagyás-olvadás, többnyire elsődrendűek, amelyeket a termodinamikai potenciálok (például a szabadenergia) első deriváltjainak (például a belső energia) szakadásos viselkedése kísér. Kritikus viselkedést a termodinamikai potenciálok magasabb (általában a második) deriváltjainak (például az izotermikus kompresszibilitás) szakadása és/vagy divergenciája jelez. A kritikus viselkedés első kísérleti megfigyelése *Charles Cagniard de la Tour* nevéhez fűződik, aki 1822-ben ágyúcsőbe zárt etanollal kísérletezett. *Thomas Andrews* a szén-dioxid (CO<sub>2</sub>) részletes kísérleti analizisét végezte el 1869-ben és azt találta hogy a kritikus pont felett ( $T_c$  és  $p_c$ ), az úgynevezett szuperkritikus tartományban, nem lehet cseppfolyósítani (*I. ábra*). A szuperkritikus szén-dioxid az iparban is előszeretettel használt oldószer például koffeinmentes kávé és nikotinmentes dohány előállításánál.

A folyadék-gőz fázisátalakulás és az azzal kapcsolatos kritikus pont első elméleti leírását 1873-ban *Johannes Diderik van der Waals* végezte el az általa felírt állapotegyenlet analizisével. Ugyancsak régóta ismert, hogy egy mágneses anyag magas hőmérsékleten, a  $T_c$  Curie-hőmérséklet felett elveszíti ferromágneses tulajdonságait. A jelenség elméleti modellezése lokalizált momentumokat feltételezve az Ising-modell keretén belül lehetséges, amelynek energiája (Hamilton-függvénye)

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j - b \sum_i s_i \quad (1)$$

alakú, ahol  $s_i = \pm 1$  az elemi momentum az  $i$ -edik rácshelyen,  $J$  a kicsérélődési (kölsönhatási) energia és  $b$  a külső mágneses tér értéke, továbbá az összegzésben  $\langle i,j \rangle$  az első szomszédokat jelöli. A probléma tárgyalásánál 1907-ben *Pierre-Ernest Weiss* az átlagtér (vagy molekuláris tér) közelítést alkalmazta. Amennyiben a lokális momentum termikus átlagértéke (a pozíciótól

függetlenül)  $m = \langle s_i \rangle$ , úgy az  $i$ -edik helyen lévő spin  $b_{eff} = b + mJz$  átlagos teret érez, ahol  $z$  a rác koordinációs száma. Az önkonzisztencia feltételéből az

$$m = \text{th} \frac{b_{eff}}{k_B T}$$

egyenletre jutunk ( $k_B$  a Boltzmann-állandó), amelynek külső tér nélküli megoldása  $T < T_c = Jz/k_B$  esetén  $m > 0$ , ami a ferromágneses fázist jelenti, míg  $T > T_c$ -re a triviális  $m = 0$  megoldást kapjuk, ami a paramágneses fázist jellemzi.

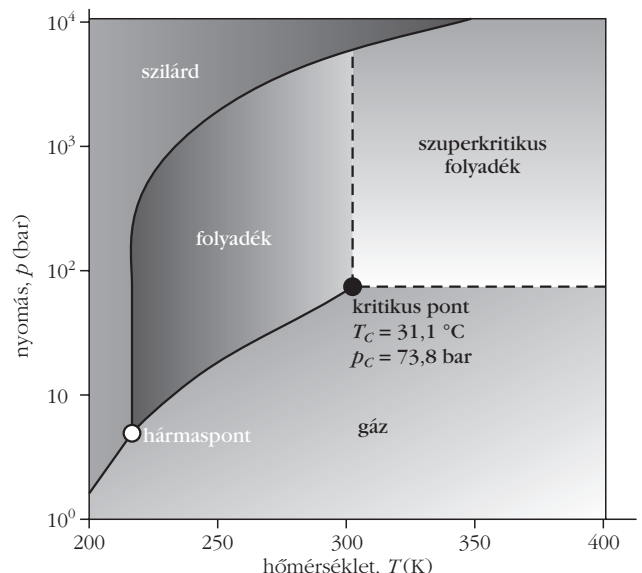
A fázisátalakulások átlagtér-elméletének konzisztens megalkotása, amely magában foglalja a van der Waals- és a Weiss-féle elméleteket is, *Lev Davidovics Landau* nevéhez fűződik. Bevezette a  $\Psi$  rendparaméter fogalmát –  $\Psi = 0$  a rendezetlen fázisban és  $\Psi > 0$  a rendezett fázisban –, és feltette, hogy az  $F$  szabadenergia a kritikus pont környékén  $\Psi$  szerint hatványosorba fejthető. Ez például az Ising-modell esetén

$$F = a + r\Psi^2 + s\Psi^4 + b\Psi + \dots \quad (2)$$

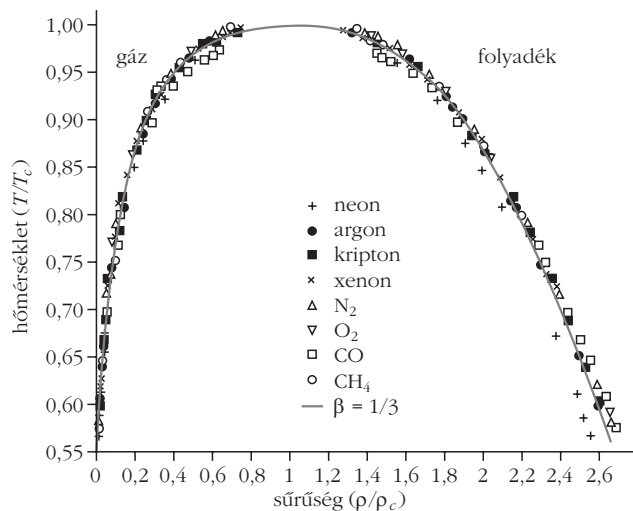
alakú, ahol  $\Psi = m$ ,  $r = r_0(T - T_c)$  és  $s > 0$ . Az átlagtér-elméletek fontos eredménye, hogy leírják a fázisátalakulás tényét és általában megadják az átalakulás rendjét, viszont a kritikus pontban fellépő szingularitásokat jellemző kritikus exponensek értékét nem adják meg helyesen.

Példaként a *2. ábrán* a folyadék-gőz kritikus pont közelében a kísérletileg mért redukált sűrűséget ( $\rho/\rho_c$ ) a redukált hőmérséklet ( $T/T_c$ ) függvényében ábrázoljuk különböző anyagok esetén. Láthatóan anyagi minőség-

1. ábra. A CO<sub>2</sub>-rendszer fázisdiagramja.



Az írás a 2014. évi Fizikai Fődíjhoz kapcsolódó előadás szerkesztett változata. A kutatás az OTKA K75324, K77629 és K109577 pályázatok támogatásával valósult meg. K. I. publikációt megalapozó kutatása a TÁMOP-4.2.4.A/2-11/1-2012-0001 azonosító számú Nemzeti Kiválóság Program – Hazai hallgatói, illetve kutatói személyi támogatást biztosító rendszer kidolgozása és működtetése konvergencia-program című kiemelt projekt keretében zajlott. A projekt az Európai Unió támogatásával, az Európai Szociális Alap társfinanszírozásával valósul meg.



2. ábra. A redukált sűrűség a redukált hőmérséklet függvényében különböző anyagok kritikus pontjának közelében.

től függetlenül, univerzálisan, a  $\rho - \rho_c \sim (T - T_c)^\beta$  aszimptotikus összefüggés teljesül azonos  $\beta = 0,33$  exponenssel, ugyanakkor az átlagtérérték ettől eltérő  $\beta_{MF} = 0,5$ .

A múlt század hatvanas éveiben összegyűlt kísérleti eredmények további mennyiségek (izotermikus kompresszibilitás, szuszceptibilitás, fajhő, kritikus izoterma, korrelációs hossz stb.) hatványfüggvényszerű szingularitásait jelezték, és az azokat jellemző kritikus exponensek jelölésére szinte a teljes görög ábécét felhasználták. Termodinamikai elvek alapján az ábécé betűi között egyenlőségeket állítottak fel, amelyeket azután egyenlőségek alakjában is megfogalmaztak az úgynevezett skálázási hipotézis felhasználásával. Így a teljes ábécé helyett elég volt csak néhány kritikus exponens a rendszer jellemzésére. Az előbb említett skálázási invariancia azon a felismerésen alapul, hogy a kritikus pontban a rendszer kooperatív viselkedését leíró korrelációs hossz divergál és így a fizikai mennyiségek a hosszúságskála megválasztásától függetlenek. A Michael E. Fisher, Leo P. Kadanoff és mások által bevezetett skálázási elv magyarázata és a kritikus viselkedés kvantitatív meghatározása a Kenneth G. Wilson által 1971-ben bevezetett renormálási csoport (RCS) segítségével vált lehetségessé. Az RCS-transzformáció során a rendszer szabadsági fokainak számát fokozatosan csökkentjük, úgy, hogy a fluktuációk – a kritikus viselkedés szempontjából lényegtelen – rövid hullámhosszú komponenseit elhagyjuk. Az RCS-transzformáció nem-triviális fixpontja írja le a rendszer kritikus viselkedését, és a fixponti transzformáció releváns sajátértékei határozzák meg a rendszer kritikus exponenseit. Az RCS-transzformáció magyarázattal szolgál a kritikus rendszerekben megfigyelhető önhasonlóságra, a geometriai objektumok fraktálszerkezetére, a fizikai mennyiségek hatványfüggvényszerű szingularitásaira és az azokat jellemző kritikus exponensek értékeire. Ugyancsak természetesen értelmezi az univerzalitás elvét, mivel a kritikus jelenségeket csak néhány releváns jellemző határozza meg: a rendszer dimenziója, a rendparaméter szimmetriája és a kölcsönhatás hatótávolsága.

Az RCS-transzformációval kapcsolatos vizsgálatokba hamar bekapcsolódtak magyar kutatók is, a teljesség igénye nélkül Szépfalussy Péter, Zawadowski Alfréd, Sólyom Jenő, Menyhárd Nóra, Kondor Imre, Rácz Zoltán, Vicsek Tamás és Kertész János nevét említjük.

## A rendezetlenség hatása a kritikus viselkedésre

A kritikus viselkedésre kidolgozott RCS-elmélet alapvetően tökéletes, szabályos rendszerek tulajdonságaira vonatkozik. Ugyanakkor kísérleti tény, hogy a reális fizikai rendszerek mindig tartalmaznak valamennyi rendezetlenséget a rácshibák, szennyező atomok, diszlokációk stb. jelenléte miatt. Az is ismert, hogy a kondenzált rendszerekben a rendezetlenség dinamikája általában lassú, így jó közelítéssel időfüggetlen, a mintába befagyott rendezetlenséggel számolhatunk. Ebben az esetben a termodinamikai mennyiségek várható értékeit kétféle átlagolás során kapjuk meg: először adott rendezetlen minta esetén kiszámítjuk a termikus átlagértéket, majd ezt a különböző mintákra, azaz a rendezetlenségre is átlagoljuk. A rendezetlen rendszerek vizsgálatának kezdetén több elvi kérdés is felmerült. Értelmezhető-e termodinamikai szempontból stabil fázis ilyen rendszerekben, vagy az csak inhomogén, különböző lokális tulajdonságú részek összessége? Továbbá létezik-e éles fázisátalakulás, vagy a rendszerben a különböző inhomogén részek eltérő hőmérsékleten rendeződnek? Mindkét kérdés első felére a válasz igenlő lett, ezek után a rendezetlen rendszerek fázisátalakulása tulajdonságainak vizsgálatára fordult az elméleti és kísérleti kutatók figyelmé.

A rendezetlen rendszerek RCS-analízise során először is arra a kérdésre keresünk választ, hogy miként viselkedik a rendezetlenség erőssége az RCS-transzformáció során, azaz egyre nagyobb skálán. Ebből a szempontból a rendezetlen rendszerek három csoportba oszthatók.

Az első csoport esetén a rendezetlenség erőssége a skála növekedésével csökken és nullához tart. Ekkor a rendezetlenség irreleváns perturbációt képvisel és a rendezetlen rendszer is ugyanazon kritikus exponensekkel rendelkezik, mint a tiszta rendszer. Ez a helyzet, például a háromdimenziós Ising-modell és a folyadék-gőz kritikus pont esetén. Ez a tulajdonság magyarázza meg, hogy miért lehet reális, fizikai mintákon is megfigyelni a tiszta rendszerekre vonatkozó kritikus viselkedést a kísérletekben.

A rendezetlen rendszerek második csoportja esetén a rendezetlenség erőssége a skála növekedése során egy véges értékhez tart, azaz ebben az esetben a rendezetlenség releváns perturbáció. Ebbe a csoportba tartozik, többek között a háromdimenziós Heisenberg-modell, amely a folytonos szimmetriájú rendparaméterrel rendelkező rendszerek prototípusa. De ide tartoznak a szerkezeti rendezetlenségű üvegek, a mágneses tulajdonságú spinüvegek és a véletlen terű modellek is. Ezen rendszerek elméleti vizsgálata nagyon nehéz és alapjaiban nem megoldott, mivel a rendszerekben

megfigyelhető kooperatív viselkedés több, azonos nagyságrendű hatás (rendezetlenség, frusztráció, termikus fluktuációk) eredményeként jön létre.

Végül, a rendezetlen rendszerek *harmadik csoportja* esetén a rendezetlenség erőssége a skála növekedése során minden határon túl növekszik, tehát a rendezetlenség nemcsak releváns perturbáció, hanem teljes mértékig domináns a kooperatív viselkedés, így a fázisátalakulás tulajdonságainak meghatározásánál. Ezen rendszerek esetén végtelenül rendezetlen kritikus viselkedésről beszélünk és az utóbbi időben számos rendszer és folyamat esetén ismerték fel a végtelen rendezetlenség jelenlétét [1]. Ezek egy része sztochasztikus folyamat, mint az egydimenziós bolyongás véletlen közegben (Sinai-féle bolyongás), az aszimmetrikus kizárási folyamat, felületnövekedési modellek és reakció-diffúzió rendszerek, mint a betegségterjedést modellező úgynevezett kontakt folyamat. A végtelenül rendezetlen rendszerek másik része kvantum rendszer, amelyben  $T=0$  hőmérsékleten kvantum fázisátalakulás zajlik le. Ilyenek egy dimenzióban a kvantum spinláncok, vagy a rendezetlen Hubbardmodell; két dimenzióban a Mott-típusú fém-szigetelő átalakulás; három dimenzióban a különböző kvantum mágnesek, amelyeket a kvantum Ising-moddal szokás leírni. A következőkben ezen rendszer tulajdonságairól, kritikus viselkedéséről és a vizsgálati módszerekről szólnunk részletesebben.

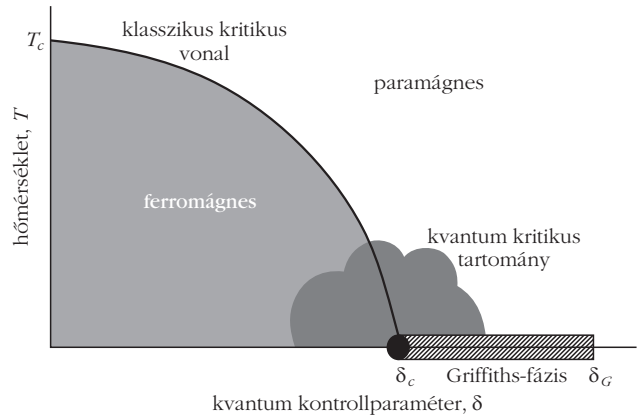
## A rendezetlen kvantum Ising-modell

A rendezetlen kvantum Ising-modellt a

$$H = -\sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \sigma_i^x \sigma_j^x - \sum_i b_i \sigma_i^z \quad (3)$$

Hamilton-operátorral definiáljuk, ahol  $\sigma_i^x$  és  $\sigma_i^z$  a Pauli-mátrixokat (feles spinek operátorait) jelöli az  $i$ -edik rácshelyen. A  $J_{ij}$  csatolások és a  $b_i$  merőleges (transzverzális) terek véletlen változók. Ismert, hogy a különböző irányú Pauli-mátrixok egy adott rácshelyen nem cserélhetők fel ( $\sigma_i^x \sigma_i^z \neq \sigma_i^z \sigma_i^x$ ), ezért a fenti rendszer kvantum tulajdonságokat mutat. A kvantum fluktuációk erőssége a  $b_i$  merőleges terek növekedésével nagyobbá válik, és az ezzel kapcsolatos  $\delta$  kvantum kontrollparamétert az átlagolt log-terek és az átlagolt log-csatolások különbségével fejezzük ki:  $\delta = \overline{\ln b} - \overline{\ln J}$ . A rendszer sematikus fázisdiagramja  $d \geq 2$  dimenzió esetén a  $T$  és a  $\delta$  függvényében a 3. ábrán látható: a rendszer ferromágneses és paramágneses fázisait a  $T_c(\delta)$  kritikus vonal választja el.

Merőleges tér nélkül ( $\delta \rightarrow -\infty$ ) a rendszerben klaszikus fázisátalakulás történik. A merőleges tér bekapcsolásakor a kritikus hőmérséklet növekvő  $\delta$ -val csökken, végül a  $\delta = \delta_c$  kvantum kritikus pontban a kritikus hőmérséklet nullává válik. Megmutatható, hogy  $\delta < \delta_c$  esetén a véges hőmérsékleti fázisátalakulás azonos univerzalitási osztályba tartozik, mint a klasszikus rendszeré. A  $T = 0$ -án és  $\delta = \delta_c$ -nél bekövetkező kvantum fázisátalakulás azonban gyökeresen



3. ábra. A rendezetlen kvantum Ising-modell sematikus fázisdiagramja  $d \geq 2$  dimenzióban.

más tulajdonságú. Habár ez az átalakulás szigorúan zérus hőmérsékleten következik be, az úgynevezett kvantum kritikus tartományban erős hatással van a rendszer alacsony hőmérsékleti viselkedésére is. Az egydimenziós modell esetén nincs véges hőmérsékleten rendezett fázis, de a fázisdiagram  $T=0$  szelete ott is érvényes.

Kísérletileg a (3) Hamilton-operátorral leírt rendszert a  $\text{LiHo}_x\text{Y}_{1-x}\text{F}_4$  – illetve a hasonló tulajdonságú  $\text{Rd}_{1-x}(\text{NH}_4)_x\text{H}_2\text{PO}_4$  és  $\text{K}(\text{H}_x\text{D}_{1-x})_2\text{PO}_4$  – ötvözetekkel szokás azonosítani. Ezen ötvözetekben dipól-dipól kölcsönhatás van jelen, ezért  $J_{ij}$  hosszú hatótávolságú. A modell rövid hatótávolságú változatát optikai rácsokra helyezett ultrahideg atomokkal (például Rb) lehet kísérletileg megvalósítani. A következőkben ezen modellre szorítkozunk, ahol az  $\langle i,j \rangle$  jelölés elsősorban szomszédpozíciókra vonatkozik.

## Fenomenológia – skálázási tulajdonságok

Tekintsünk egy nagy, de véges rendszert, amelynek lineáris mérete  $L \gg 1$ . A *statikus* (időtől független) tulajdonságok jellemzésére rendparaméterként az átlagos mágnesezettséget használjuk, amelyet az

$$m = L^{-d} \sum_i \langle 0 | \sigma_i^x | 0 \rangle$$

módon definiálunk, ahol  $|0\rangle$  a rendszer, azaz a (3) szerinti Hamilton-operátor alapállapota. A ferromágneses fázisban a mágnesezettség véges (határ)értékű:  $m(\delta < \delta_c) = \mathcal{O}(1)$ , amely a kritikus pont közelében a  $m(\delta) \sim (\delta_c - \delta)^\beta$  összefüggés szerint tűnik el. A paramágneses fázisban a mágnesezettség a mérettel exponenciálisan tart 0-hoz:  $m(\delta > \delta_c) \sim \exp(-L/\xi)$ , ahol  $\xi = \xi(\delta)$  a rendszer korrelációs hossza. A kritikus ponthoz közelítve a korrelációs hossz divergál:  $\xi(\delta) \sim |\delta|^{-\nu}$  és magában a kritikus pontban a lecsengés hatványfüggvényt vesz fel:  $m(\delta = \delta_c) \sim L^{-x}$ , ahol  $x$  a mágnesezettség skálázási dimenziója. Megjegyezzük, hogy az itt felírt kritikus exponensek között a  $\beta = \nu x$  skála-összefüggés áll fenn.

A dinamikai (időtől függő) tulajdonságok jellemzésére kvantum rendszer esetén az  $\epsilon$  legkisebb gerjesz-

tési energia, azaz energiarés, szolgál. A rendezett fázisban az energiarés exponenciálisan tűnik el,  $\epsilon(\delta < \delta_c) \sim \exp(-aL^d)$ , mivel a rendszer alapállapota aszimptotikusan ( $L \rightarrow \infty$  esetén) degenerált. *Homogén rendszer* paramágneses fázisában az energiarés véges. Rendezetlen rendszer esetén azonban a helyzet jóval összetettebb: véges energiarés csak elegendően nagy  $\delta > \delta_G > \delta_c$  esetén van, és ebben a tartományban a  $\max(J_{ij}) < \min(b_i)$  feltétel teljesül. Azaz a rendezetlen minta minden elemi tartományára átlagolt lokális kontrollparaméter,  $\delta_{loc}$  teljesíti a  $\delta_{loc} > \delta_c$  feltételt. *Robert Griffiths* ismerte fel, hogy a  $\delta_c < \delta < \delta_G$  tartományon (lásd a 3. ábrán a sávzott szakaszt), az úgynevezett Griffiths-féle fázisban a rendezetlen rendszer dinamikája speciális. Itt az energiarés a rendszer lineáris méretével az  $\epsilon \sim L^{-z(\delta)}$  összefüggést követi, ahol a  $z(\delta)$  dinamikai exponens a  $\delta$  kontrollparaméter folytonos függvénye. A Griffiths-féle fázis értelmezését a következő alfejezetben tárgyaljuk. Érdekes módon a kritikus ponthoz közelítve  $z(\delta)$  divergál és magában a kritikus pontban a gerjesztési energia skálafüggésére az  $\epsilon \sim \exp(-AL^w)$  összefüggés teljesül. Azaz a végtelenül rendezetlen kritikus pontban a dinamika extrém módon anizotróp térben és időben.

## A Griffiths-féle fázis

A Griffiths-féle fázis értelmezéséhez tekintsük a rendezetlenség azon speciális esetét, amikor a kölcsönhatás bimodális eloszlást követ:  $1-p$  valószínűséggel  $J_{ij} = J_0$  és  $p$  valószínűséggel  $J_{ij} = J_1 > J_0$ , továbbá a transzverzális tér homogén:  $b_i = b$ . Adott hígítás mellett a rendszer  $b_c(p)$  kritikus pontja a  $p$  monoton növekvő függvénye és így teljesül a  $b_c(0) < b_c(p) < b_c(1)$  feltétel, ahol  $b_c(0)$  és  $b_c(1)$  a homogén,  $J_0$ , illetve  $J_1$  csatolású rendszer kritikus pontját jelöli. Tekintsük most a rendszert olyan  $b$  transzverzális térben, amely teljesíti a  $b_c(p) < b < b_c(1)$  feltételt, azaz a rendszer, mint egész, paramágneses fázisban van. Ugyanakkor vannak benne olyan ritka régiók, amelyek csak  $J_1$  erős csatolásokból állnak, és így lokálisan a ferromágneses fázishoz tartoznak. Egy  $V_R$  térfogatú ritka tartomány nagyon kicsi  $\mathcal{P}(V_R) \sim p^{V_R} \sim \exp(-bV_R)$  valószínűséggel van jelen, ugyanakkor a hozzá tartozó energiarés is exponenciálisan kicsi:  $\epsilon(V_R) \sim \exp(-cV_R)$ . Ezen összefüggésből  $V_R \sim -\ln\epsilon/c$ , amelyet a  $\mathcal{P}(V_R)$  összefüggésbe helyettesítve kapjuk a gerjesztési energia állapotsűrűségére a  $\rho(\epsilon) \sim \epsilon^{\lambda-1}$  összefüggést ( $\lambda = b/c$ ). Kiszámolva az időtől függő autokorrelációs függvényt:

$$G(t) \sim \int d\epsilon \rho(\epsilon) \exp(-t\epsilon) \sim t^{-\lambda},$$

az hatványfüggvényszerűen cseng le, amelynek  $\lambda$  kitevője a  $b$  transzverzális tér függvénye. Azaz dinamikai szempontból a rendszer a teljes Griffiths-féle fázisban kritikusnak tekinthető. Ennek következményeként bizonyos dinamikai jellemzők szingulárisak, például alacsony hőmérsékleten a fájhő  $C \sim T^\lambda$ , a szusz-

ceptibilitás  $\chi \sim T^{\lambda-1}$  és az entrópia  $S \sim T^\lambda$ . Megmutatható, hogy  $\lambda$  az előzőekben bevezetett dinamikai exponenssel a  $\lambda = d/z$  kapcsolatban van.

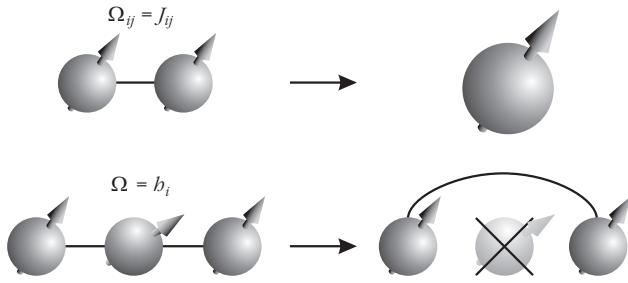
## Elméleti vizsgálat: az erős rendezetlenségi RCS

Az erős rendezetlenségi RCS-módszert *Shang-Keng Ma* és munkatársai [2] vezették be 1979-ben a rendezetlen Heisenberg-spinlánc kritikus viselkedésének tanulmányozására. A módszer széles körű alkalmazására azután került sor, hogy *Daniel Fisher* 1992-ben megmutatta: az RCS-módszer a rendezetlen kvantum Ising-lánc esetén aszimptotikusan egzakt eredményeket szolgáltat. A későbbiekben az erős rendezetlenségi RCS-t különböző rendezetlen spinláncokra és magasabb dimenziós kvantum modellekre is sikerrel alkalmazták, de megfelelő variánsai a Sinai-bolyongásra, reakció-diffúzió modellekre és az aszimmetrikus kizárási folyamatra is egzakt eredményekre vezettek. A módszerről és alkalmazásairól írt összefoglaló munka az [1] referenciában található. A módszer lényegét a rendezetlen kvantum Ising-modellre történő alkalmazásával illusztráljuk.

## Alkalmazás a rendezetlen kvantum Ising-modellre

Az erős rendezetlenségi RCS-módszert lokálisan használjuk, azaz a renormálási lépéseket nem uniform módon alkalmazzuk, miként például a blokk RCS-módszernél. Általában a Hamilton-operátor (lásd a rendezetlen kvantum Ising-modellre a (3) egyenletet) paramétereit (a  $J_{ij}$  csatolásokat és a  $b_i$  transzverzális tereket) nagyság szerint rendezzük és ezek közül a legnagyobbat, amely az  $\Omega$  energiaskálát definiálja, eltüntetjük, kidecimáljuk. Mivel  $1/\Omega$  a legkisebb karakterisztikus időt adja, a leggyorsabb relaxációhoz tartozó szabadsági fokot tüntetjük így el, amely a kritikus relaxációt (ahol az időskála divergál) nem befolyásolja. A renormálás során megmaradó szabadsági fokok között új, renormált paraméterek jelennek meg, amelyeket perturbációszámítással határozzunk meg. A decimálási transzformációt szukcesszíven tovább folytatjuk, így  $\Omega$  fokozatosan csökken, egészen az  $\Omega^* = 0$  fixpontig, ahol a fixponti skálázásból a modell kritikus viselkedését meg tudjuk határozni. A rendezetlen kvantum Ising-modell esetén az elemi decimálási szabályok a 4. ábrán láthatók.

Amennyiben a legnagyobb paraméter egy csatolás, például  $\Omega = J_{ij}$ , úgy a két összekapcsolt momentum koherensen mozog,  $\sigma_i^x$  és  $\sigma_j^x$  jó közelítéssel párhuzamos, azaz azonos állapotban van. A perturbációszámítás nyelvén ez azt jelenti, hogy az  $ij$  spinekből álló klaszter négy lehetséges állapota közül a magasabban fekvő kettőt, amelyek  $2J_{ij}$ -vel az alsó két nívó felett fekszenek, elhagyjuk és a megmaradó két nívót egy effektív spinmomentum két állapotával azonosítjuk. A két megmaradó nívó felhasadásából az effektív merő-



4. ábra. Decimálási lépések a rendezetlen kvantum Ising-modelnél.

leges tér, a  $b'_i = b_i b_j / J_{ij}$  értékűnek adódik. Az új spin-klaszter momentuma a  $\mu'_i = \mu_i + \mu_j$  additív szabályt követi, ahol a kezdeti állapotban  $\mu_i = 1, \forall i$ . Ez az aggregációs lépés a renormálásnál.

Amennyiben a legnagyobb paraméter egy transzverzális tér, például  $\Omega = b_i$ , úgy az adott momentum a longitudinális szuszceptibilitáshoz elhanyagolható járulékot szolgáltat, így kidecimálható. A kidecimálás követően az  $i$ -vel elsőszomszéd spinnek, például  $j$  és  $k$ , között effektív kölcsönhatás ébred, amelynek értéke másodrendű perturbációszámítás szerint:  $J'_{ij} = J_{ij} J_{ik} / b_i$ . Ez az eliminációs lépés a renormálásnál.

A kontrollparaméter különböző tartományában az aggregációs és az eliminációs lépések különböző gyakoriságúak. A ferromágneses fázisban az aggregációs lépések dominálnak és a minta teljes mágneses momentuma a spinnek számával arányos. Ugyanakkor a paramágneses fázisban az eliminációs lépések a dominánsak, így a rendszer különálló, véges klaszterekre bomlik: az összekapcsolt klaszterek lineáris mérete a  $\xi$  korrelációs hosszát adja. A kontrollparaméter kritikus értékénél az aggregációs és eliminációs folyamatok egyensúlyt tartanak: a legnagyobb klaszter egy nem összefüggő fraktál lesz, amelynek  $\mu$  momentuma a lineáris mérettel a  $\mu \sim L^{d_f}$  összefüggést követi. Itt  $d_f$  a fraktáldimenzió, amely a mágnesség  $x$  skálázási dimenziójával az  $x = d - d_f$  kapcsolatban áll.

Egy dimenzióban, ahol a lánc topológiája a transzformáció során változatlan marad, az RCS-egyenleteket a fixpontban Fisher analitikusan megoldotta és végtelenül rendezetlen kritikus viselkedést tapasztalt, amelyet a következő tulajdonságok jellemeznek. A renormálás során a log-csatolások (és log-terek) eloszlása minden határon túl szélesedik, így a szomszédos helyzetű terek és csatolások aránya végtelenhez (vagy nullához) tart és a renormálási lépések egzakttá válnak. A rendszer nagy skálán is inhomogén módon viselkedik. Az átlagértékeket jellemzően a ritka régiók járuléka dominálják és ezért a tipikus és az átlagos viselkedés általában eltérő. A dinamika extrém lassú, a  $\tau$  időskála és az  $L$  hosszúságskála között az  $\ln \tau \sim L^\psi$  összefüggés teljesül.

Magasabb dimenzióban az RCS-transzformáció alkalmazásakor a rács topológiája megváltozik, amely különösen a transzverzális terek decimálá-

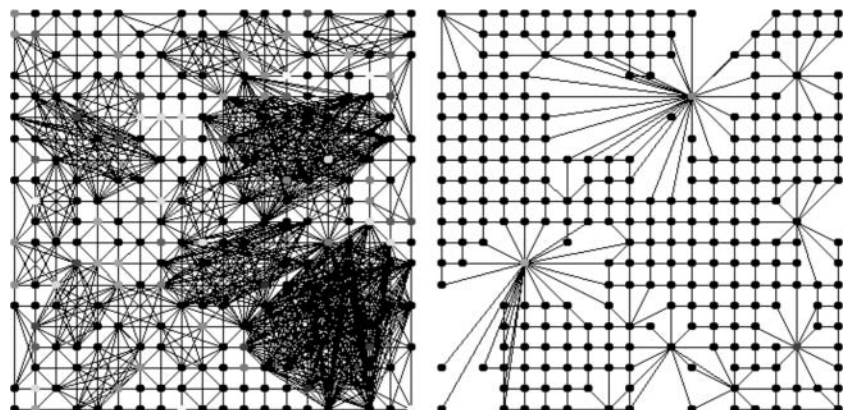
sa során vezet látványos különbségekre: ugyan minden lépésben eggyel csökken a spinek száma, mégis az effektív kötések száma erősen megnövekszik és a rendszer egy teljesen összekapcsolt gráfra emlékeztető alakzatba transzformálódik. A problémát valamelyest enyhíti az úgynevezett maximumszabály alkalmazása: ha két rácshely között az RCS adott lépésénél két csatolás is jelen van, akkor ezek közül a nagyobbát választjuk (és nem az összeget). A végtelenül rendezetlen fixpont közelében a maximumszabály nyilvánvalóan érvényes.

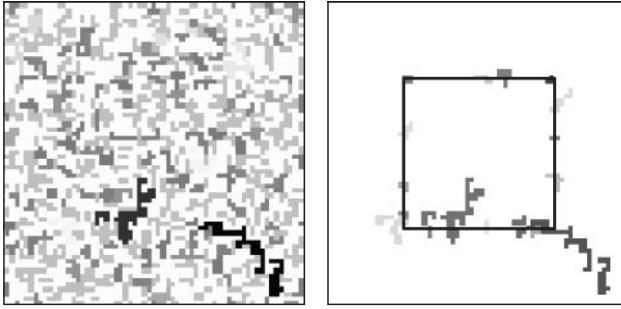
Amennyiben az RCS-módszer direkt numerikus alkalmazásával végezzük el a renormálást, akkor a kialakult összekapcsolt gráfon viszonylag sok számítógépes műveletet kell elvégezni és egy  $N$  spinből álló alakzat esetén  $t \sim N^3$  időre van szükségünk annak teljes renormálásához. Magasabb dimenzióban ez a vizsgálható rendszerek méretét erősen korlátozza. A maximumszabály alkalmazása esetén azonban a számolás időigénye jelentősen csökkenthető. Megmutatható, hogy a generált új csatolások többsége nem játszik szerepet a renormálásnál és ezért az algoritmusnál elegendő csak azokra koncentrálni, amelyek a továbbiakban valóban decimálásra kerülnek. Az általunk kifejlesztett hatékony algoritmus [3] jóval gyorsabb, időigénye a  $t \sim \text{Mlog}N$  összefüggést követi. Segítségével néhány millió spint tartalmazó rendszerek is hatékonyan vizsgálhatók, ami lehetővé tette két- és háromdimenziós rendezetlen kvantum Ising-modellek kritikus viselkedésének numerikus tanulmányozását is. A tradicionális és az optimalizált RCS-algoritmust az 5. ábrán illusztráljuk.

## Numerikus vizsgálatok magasabb dimenzióban

A vizsgálatok első lépése a rendszerek kritikus pontjának meghatározása, amelyhez az úgynevezett dupláziási eljárást használjuk. Ennek során egy adott rendezetlen mintát két azonos példányban elkészítünk, ezeket felületi kötésekkel összekapcsoljuk, majd a kontrollparaméter adott értéke mellett elvégezzük a teljes RCS-transzformációt. Ha a rendszer lokálisan a ferromágneses fázisban van, a két példány összekapcsolt módon, korreláltan renormálódik, míg a para-

5. ábra. A tradicionális (balra) és az optimalizált (jobbra) RCS-algoritmus illusztrálása.





6. ábra. Klaszterszerkezet a  $64 \times 64$ -es rácson (balra), valamint az összefonódási entrópiába számító klaszterek egy négyzetes alrendszer esetén (jobbra).

mágneses fázisban a renormálás függetlenül zajlik le a két példányban. A két renormálási viselkedést (fázist) elválasztó kontrollparaméter-értéket a mintához tartozó pszeudo-kritikus pontként értelmezzük. Ezek eloszlása értékes információt szolgáltat a kritikus viselkedésre; például a nagy méretre extrapolált átlagértéke a rendezetlen rendszer kritikus pontját adja.

A kritikus pont ismeretében a rendezetlen kvantum Ising-modell kritikus paramétereit a klaszterstatistika segítségével tudjuk meghatározni, a feladat ezen része analóg a perkolációnál megszokottal. (Egy tipikus klaszterszerkezetet a 6. ábrán mutatunk be.) Az összekapcsolt klaszterek mérete a korrelációs hosszát adja, a kritikus klaszter fraktáldimenziója a mágneszettségi kritikus exponenst, míg a klaszterek energiája az energiárést definiálja. Véges kiterjedésű rendszerek esetén további lokális kritikus jellemzőket lehet meghatározni, például felületek, élek vagy sarkok mentén. A kritikus klaszter megfelelő (felületi, él vagy sarok) fraktális dimenziójából az egyes lokális kritikus exponensek kiszámíthatók [4].

A fenti kérdéseken túl a kvantum fázisátalakulások elméletének egyik legnagyobb kihívása azon vonások megértése, amelyek a klasszikus elméletekben nincsenek jelen. A részrendszerek *összefonódása* egy ilyen alapvető jellemző. A klasszikus fizikával ellentétben egy részrendszer – például egy spin – több állapotban lehet akkor is, ha az egész rendszer egy jól definiált kvantumállapotban van. Egy egyértelmű hullámfüggvénnyel leírható „tisza” állapotban – mint amilyen egy degenerálatlan alapállapot – az  $S$  összefonódási entrópia egy közismerten jó mérték, amely egy  $\mathcal{A}$  alrendszer és a  $B$  környezete között van definiálva. Neumann János szerint  $S = -\text{Tr}(\rho_{\mathcal{A}} \log_2 \rho_{\mathcal{A}})$ , ahol  $\rho_{\mathcal{A}} = \text{Tr}_B |\Psi\rangle\langle\Psi|$  az alrendszer redukált sűrűségoperátora és  $|\Psi\rangle$  a teljes rendszer alapállapota. Megmutatható, hogy a rendezetlen kvantum Ising-modell esetén  $S$  azon klaszterek száma, amelyeknek mind  $\mathcal{A}$ -ban, mind  $B$ -ben van pontja, lásd a 6. ábrát.  $S$  követi az úgynevezett felületi törvényt:  $S(\ell) \sim \ell^{d-1}$ , ahol  $\ell$  az  $\mathcal{A}$  alrendszer lineáris mérete. A kritikus pontban a felületi taghoz logaritmikusan divergens korrekció járul:  $\Delta S(\ell) = b \ln \ell$ . Megmutatható, hogy ez a szinguláris tag az  $\mathcal{A}$ -n lévő sarkok következménye és a  $b$  előfaktor univerzális, nem függ a rendezetlenség alakjától [5].

1. táblázat

**Az univerzális kritikus exponensek a magasabb dimenziós rendezetlen kvantum Ising-modellben az egydimenzióban egzaktul ismert értékek tükrében**

	1D	2D	3D
$\nu$	2	1,24(2)	0,99(2)
$x$	$(3-5^{1/2})/4$	0,98(2)	1,84(2)
$\Psi$	0,5	0,48(2)	0,46(2)

## Összefoglalás

A fázisátalakulások során fellépő kollektív viselkedés mind klasszikus, mind kvantum rendszerek esetén érzékeny lehet a rendszer inhomogenitásaira, rendezetlenségére. Abban az esetben, amikor a rendezetlenség döntő szerepet játszik, az erős rendezetlenségi RCS-technika egy rendkívül hatékony és széleskörűen alkalmazható vizsgálati eszközt jelent. Eredményeink szerint a rendezetlen kvantum Ising-modell kritikus viselkedése egy, kettő, három és négy dimenzióban is végtelenül rendezetlennek adódott. A formálisan végtelen dimenziós rendszert képviselő Erdős–Rényi-féle gráf esetén is megmarad ez a tulajdonság, így a problémához kapcsolható felső kritikus dimenzió minden valószínűség szerint végtelen. Ennek következtében az erősen rendezetlenségi RCS minden esetben aszimptotikusan (azaz elegendően nagy rendszer esetén) egzakt kritikus exponenseket szolgáltat, amelyek közül a legfontosabak értékeit az 1. táblázatban foglaltuk össze.

Az itt feltüntetett kritikus exponensek minden olyan végtelenül rendezetlen fixponttal rendelkező rendszer esetén érvényesek, amelyeknél a rendparaméter diszkrét szimmetriájú. Érdekes speciális esetként megemlítjük a járványok és betegségek terjedését modellező kontakt folyamatot. Itt a szomszédok közötti fertőzést leíró  $\lambda_{ij}$  ráták, illetve a megbetegedett egyének gyógyulására vonatkozó  $\mu_i$  ráták véletlenszerűek. (A rendezetlen kvantum Ising-moddal a  $J_{ij} \rightarrow \lambda_{ij}$  és  $h_i \rightarrow \mu_i$  analógia tehető.) A rendezetlen kontakt folyamatban lezajló nem-egyensúlyi fázisátalakulás végtelenül rendezetlen és a rendezetlen kvantum Ising-modell univerzalitási osztályába tartozik [6].

Az itt leírt vizsgálatok több irányban is kiterjeszthetők. Itt megemlítjük a rendezetlenség erősségével változó kritikus viselkedést, a nem-egyensúlyi dinamika kérdését, valamint a hosszú hatótávolságú kölcsönhatások esetét.

## Irodalom

1. F. Iglói, C. Monthus, *Phys. Rep.* 412 (2005) 277.
2. S. K. Ma, C. Dasgupta, C.-K. Hu, *Phys. Rev. Lett.* 43 (1979) 1434.
3. I. A. Kovács, F. Iglói, *Phys. Rev. B* 83 (2011) 174207, *J. Phys. Condens. Matter* 23 (2011) 404204.
4. I. A. Kovács, F. Iglói, *Phys. Rev. B* 87 (2013) 024204.
5. I. A. Kovács, F. Iglói, *EPL* 97 (2012) 67009.
6. J. Hooyberghs, F. Iglói, C. Vanderzande, *Phys. Rev. Lett.* 90 (2003) 100601.