Zárójelentés

A pályázat során olyan sokrészecskés rendszerek kollektív tulajdonságait vizsgáltuk, amelyek rendezetlenség jelenlétében speciális alacsony energiás gerjesztésekkel, illetőleg hosszútávú térbeli és időbeli korrelációkkal rendelkeznek. Ezen rendszerek prototípusát a véletlen kötésű kvantum spinláncok jelentik és elsődlegesen ezen rendszerek tanulmányozása állt a fenti pályázat homlokterében. A rendezetlen spinláncok vizsgálata vezetett el az un. végtelenül rendezetlen fixpont (infinite disorder fixed point) koncepciójához. Egy ilyen fixpontban a rendezetlenség erőssége a renormálás során minden határon túl növekszik ami a fizikai változók eloszlásának nagyon széles voltában figyelhető meg. Ennek következményeként a kvantum fluktuációk a rendezetlenségi fluktuációkkal szemben irreleváns szerepet játszanak. A végtelennül rendezetlen fixpont tulajdonságainak vizsgálatára egy speciális renormálási csoport (RCS) módszert fejlesztettek ke, melynek segítségével bizonyos egydimenziós rendezetlen kvantum rendszerek kritikus tulajdonságainak egzakt megoldása lehetővé vált. Hasonlóképpen a kritikus ponthoz csatlakozó kiterjedt tartomány, az un. Griffiths-féle fázis szinguláris tulajdonságai is részben egzaktul feltérképezhetőek lettek.

További vizsgálatok azt mutatták, hogy a speciális RCS transzformáció más rendezetlen problémák vizsgálatánál is alkalmazható és a végtelennül rendezetlen fixpont és a hozzá csatlakozó erős Griffiths-féle fázis koncepciója alkalmazható lehet. Ilyen problémákat találunk, többek között klasszikus spinrendszereknél korrelált rendezetlenség jelenlétében vagy sztochasztikus folyamatoknál, mint a bolyongás egy véletlen közegben vagy a kizárási folyamatok rendezetlenség jelenlétében. További példát találhatunk nemegyensúlyi fázisátalakulásoknál rendezetlen reakciósebességek esetén.

A pályázat során a rendezetlen spinrendszerekkel párhuzamosan a fenti témakörökön is dolgoztunk, melyek módszereikben és koncepciójukban szorosan összefüggnek. A speciális RCS módszert és annak alkalmazásait egy összefoglaló munkában[18] ismertettük, melynek megírására felkérést kaptunk. A következőkben az egyes témakörökben elért eredményeket ismertetjük, a megjelent közleményekre a [...] módon hivatkozunk.

1. Rendezetlen kvantumrendszerek

A rendezetlen kvantumrendszerek prototípusa a véletlen kötésű Ising modell merőleges mágneses térben, melynek Hamilton operátora egy dimenzióban a következő:

$$H_I = -\sum_i J_i \sigma_i^x \sigma_{i+1}^x - \sum_i h_i \sigma_i^z \; . \tag{1}$$

Itt σ_i^x, σ_i^z az i-edik rácshelyhez kapcsolt Pauli mátrixok és a J_i csatolások és a h_i merőleges terek független és azonos eloszlású véletlen változók. Általában a

$$P(\lambda) = D^{-1}\lambda^{-1+1/D} \tag{2}$$

alakú eloszlásokat használjuk ($\lambda = J$ vagy h), ahol $0 \le \lambda \le \lambda_{max}$ és D a rendezetlenség erősségét méri. A rendszer kontrol-paramétere:

$$\delta = \frac{[\ln h]_{av} - [\ln J]_{av}}{\mathrm{var}[\ln \mathrm{h}] + \mathrm{var}[\ln \mathrm{J}]} \; , \tag{3}$$

ahol $[\ldots]_{av}$ a rendezetlenségi átlagot jelenti és $\mathrm{var}[\mathrm{x}]$ az x mennyiség szórásnégyzete. A kritikus pont, melyhez a végtelennül rendezetlen fixpont tartozik a $\delta = 0$-nál van, míg $\delta > 0$ ($\delta < 0$) a paramágneses (ferromágneses) fázist jellemzi. A [3] munkában a fenti rendszer Griffiths szingularitásait vizsgáltuk és a speciális RCS transzformáció segítségével egzakt eredményeket kaptunk. Megmutattuk, hogy a Griffiths szingularitásokat jellemző z dinamikai exponens a:

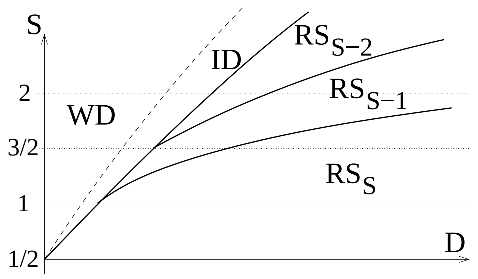
$$\left[\left(\frac{J}{h}\right)^{1/z}\right]_{\mathrm{av}} = 1\ . \tag{4}$$

egyenlet pozitív gyökeként áll elő. Ugyancsak egzakt eredményeket származtattunk a fizikai mennyiségek szingularitásait leíró skálafüggvények alakjára is.

A rendezetlen kvantumrendszerek másik fontos csoportja a Heisenberg-féle Hamilton operátorral írható le, mely egy dimenzióban a:

$$H = \sum_i J_i \vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+1} \tag{5}$$

alakú, ahol $\vec{S}_i$ egy spin-S operátort jelöl és a J_i kicserélődési kölcsönhatások véletlen változók. Antiferromágneses kölcsönhatás esetén az $S = 1/2$ modell tetszölegesen kis rendezetlenség esetén is az un. véletlen singlett (random singlet - RS) fázisban van, mely egy végtelennül rendezetlen fixpontnak felel meg. Nagyobb S értékek esetén a fenti fixpont azonben csak kellően erős rendezetlenség mellett lesz vonzó, kisebb rendezetlenség mellett átmeneti fázisokat találunk. Ezen, a rendezetlenség indukálta fázisátmeneteket vizsgáltuk az $S = 1$ modell[22] és az $S = 3/2$ modell[12] esetén numerikusan a sürüségmátrix renormálási csoport (density matrix renormalization - DMRG) segítségével. Ezen számolások eredményeit az 1 ábrán látható fázisdiagrammon összegezzük[12].



1. ábra. A D rendezetlenség erősségének függvényében irreleváns viselkedés tapasztalható a WD (weak disorder) tartományban. Köztes rendezetlenség mellett (ID - intermediate disorder) Griffiths-féle effektusok tapasztalhatók, míg erős rendezetlenségnél véletlen szinglett fázisok sorozata jelenik meg, ahol RS$_S$ esetén a szingletben effektív S-spinek vesznek részt.

A rendezetlenség indukálta fázisok szerkezetével más, diszkrét szimmetriát mutató modellek (Ashkin-Teller modell, óra modell) esetén is foglalkoztunk és rámutattunk az átmenetek univerzális voltára[1].

A Heisenberg modellel leírható rendszerek között bonyolultabb kölcsönhatású[17] és bonyolultabb topológiájú[8,11] modelleket is vizsgáltunk. Az utóbbiak közé a kvantum spin létrák[8] és a két- és háromdimenziós modellek[11] tartoznak. Ezen rendszerek a kölcsönhatások különböző formája (első- és másodszomszéd kölcsönhatás, dimerizálás, stb.) esetén komplex és változatos fázisdiagrammokat mutatnak. Az alacsonyenergiás gerjesztések alakja általában a rendezetlenség erősségével változik, de frusztrált rendszerek esetén univerzális viselkedést találtunk. Vizsgálataink arra az eredményre vezettek, hogy magasabb dimenzióban a végtelennül rendezetlen fixpont nem figyelhető meg.

Vizsgáltuk az un. erős kötésű (tight binding) modell tulajdonságait véletlen diagonális és off-diagonális paraméterek esetén[25] törtdimenziós (fraktál) rácsokon. Ezek a vizsgálatok pl. a perkolációs klaszteren való kritikus viselkedésről szolgáltathatnak információt. Eredményeink a rács fraktális dimenziójának függvényében különböző végtelennül rendezetlen, illetőleg konvencionális fixpontot szolgáltattak. Orbitális mágneses teret is tekintetbe vettünk és vizsgáltuk a befagyott rácshelyek arányát, a korrelációs függvényt, a perzisztens áramot valamint a mintán áthajtott áramot.

2. Rendezetlenség dominálta klasszikus rendszerek

Kvantum rendszerek esetén a rendezetlenség sokszor domináns volta azzal kapcsolatos, hogy itt a rendezetlenség az idő dimenzióban szigorúan korrelált. Ennek alapján hasonló viselkedés várható olyan klasszikus rendszerek esetén is, ahol a rendezetlenség bizonyos irányokban szintén korrelált. Itt utalunk az ismert leképezésre, mely egy d-dimenziós kvantum rendszerhez annak kritikus pontjában egy $(d+1)$-dimenziós klasszikus rendszert feleltet meg, ahol a plussz tér dimenzió a kvantum rendszer képzetes időtengelyének felel meg. Igy a (1) szerinti kvantum Ising lánccal egy olyan kétdimenziós klasszikus Ising model izonorf, amelyben az egyes oszlopokban azonos értékü, de oszlopról oszlopra változó csatolás van (McCoy-Wu modell).

A fenti problémakörben a rétegesen véletlenszerű perkoláció problémáját vizsgáltuk[7], ahol egy négyzetrácson a kötések elfoglalásának valószínüsége rétegről rétegre változott. Gyakorlati szempontból hasonló problémák merülhetnek fel porózus kőzetek esetén, melyek tulajdonságai a kialakulásuknál fennálló körülményektől függően rétegesen változnak. Vizsgálataink a kétdimenziós problémánál azt mutatják, hogy a rendezetlenség erősségével a perkolációs átalakulás tulajdonságai módosulnak. Tetszőlegesen kicsi rendezetlenség is új, anizotrópan skálázódó átalakulást eredményez, de a rendezetlenség növelésekor az anizotrópia exponens, z, mely a párhuzamos, $\xi_{\|}$, és a merőleges, $\xi_{\perp}$, korrelációs hosszak viszonyát a $\xi_{\perp} \sim \xi_{\|}^{z}$ sszefüggés szerint méri rendezetlenség függőnek adódik. Ugyancsak változnak a perkolációs átmenetet jellemzű exponensek is (pl. a β rendparaméter exponens). Elegendően erős, de véges értékű rendezetlenség mellett a rendezetlen spinláncoknál megismert végtelennül rendezetlen fixpont jelenik meg. Itt z formálisan végtelenné válik, mig a sztatikus exponensek a rendezetlen kvantum Ising láncnál egzaktul ismert értékeket veszik fel.

A rendezetlen kvantum Ising lánc egzakt kritikus eredményei nyomán felmerül a kérdés, hogy létezik-e olyan kétdimenziós klasszikus rendezetlen rendszer, amely izotróp módon skálázódik (azaz az anizotrópia exponens $z = 1$) és a sztatikus kritikus exponensei a kvantum modellével megegyeznek. Más szavakkal, egy olyan klasszikus rendszer, melynek hamiltoni (kvantum) határesete a (1) szerinti rendszer. Ezzel kapcsolatban azzal a jóslattal álltunk elő, hogy egy ilyen lehetséges rendszer a véletlen ferromégneses kötésű q-állapotú Potts modell (random bond Potts model - RBPM, ha q nagyon nagy. A Potts modell homogén csatolások esetén q elegendő nagy értékére elsőrendű fázisátalakulást mutat. Matematikailag szigorú eredmények szerint két dimenzióban tetszőlegesen kis rendezetlenség mellett is az átalakulás másodrendűvé válik, mig három dimenzióban ez csak véges rendezetlenség mellett következik be.

A RBPM kényelmesen vizsgálható a klaszter reprezentációban, ahol az állapotösszeg a

$$Z = \sum_{G \subseteq E} q^{c(G)} \prod_{ij \in G} \left[q^{\beta J_{ij}} - 1 \right] \tag{6}$$

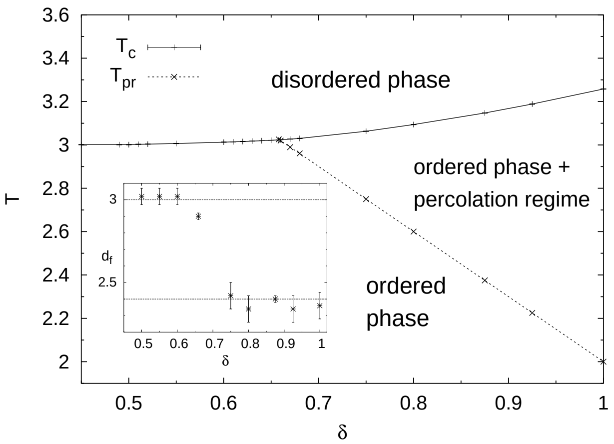
alakú[2], ahol az összegzés az összes lehetséges kötésrendszerre, $G \subseteq E$, történik és $c(G)$ a G gráf összekapcsolt komponenseinek száma. Az elsőszomszéd kötéseket $J_{ij} > 0$ jelöli és $\beta = 1/(k_B T \ln q)$. A nagy-q határesetben, amikor $q^{\beta J_{ij}} \gg 1$, az állapotösszeg a

$$Z = \sum_{G \subseteq E} q^{\phi(G)}, \quad \phi(G) = c(G) + \beta \sum_{ij \in G} J_{ij} \tag{7}$$

alakba írható, melyet a legnagyobb tagja határoz meg: $\phi^* = \max_G \phi(G)$. Ez a formalizmus jól mutatja, hogy nagy-q esetén a RBPM tulajdonságait a rendezetlenség dominánsan meghatározza és a termikus fluktuációk elenyésző szerepet játszanak.

A fenti optimalizációs feladatot először közelítő algoritmusokkal (simulated annealing, stb) vizsgáltuk[2]. A számolások pontossága és a vizsgálható rendszerek mérete ugrásszerüen megnőtt, amikor egy olyan kombinatorikus optimalizációs algoritmust fejlesztettünk ki[5], mely adott realizáció esetén az egzakt optimumot polinimoális idő alatt számolja ki. A fenti algoritmusnak a négyzetrácson[10] és más kétdimenziós rácsokon[16] való alkalmazása azt mutatta, hogy minden bizonnyal a RBPM kritikus viselkedése a rendezetlen kvantum Ising lánccal izomorf és igy a kritikus exponensei egzaktul ismertek.

.



2. ábra. A RBPM fázisdiagrammja köbös rácson a hőmérséklet (T) rendezetlenség (δ) síkon. A rendezett fázisban erősebb rendezetlenségnél az optimális gráf izolált pontjai is perkolálnak. Ezen tartományon az átalakulás másodrendűvé válik. A betétábra a kritikus perkoláló klaszter d_f fraktális dimenzióját mutatja. Az elsőrendű tartományon $d_f = 3$, a másodrendű tartományon $d_f \simeq 2.4$ a rendezetlenség erősségétől függetlenül. A trikritikus pontban $d_f \simeq 2.9$. (A β mágneses, és a ν korrelációs hossz exponens a $\beta/\nu = d - d_f$ összefüggést teljesíti.)

A fenti vizsgálatokat a köbös rács esetére is kiterjesztettük[21,28] ahol elsősorban a rendezetlenség indukálta első- másodrendű fázisátalakulás váltást tanulmányoztuk. A numerikusan talált fázisdiagrammot a 2 ábrán mutatjuk be.

A rendezetlenségnek klasszikus rendszerek kritikus viselkedésére gyakorolt hatását további munkákban is vizsgéltuk. Igy biaxiálisan korrelált rendezetlenséget tekintettünk kétdimenziós Ising modellben és megmutattuk, hogy a kritikus viselkedése azonos azzal, mintha a korreláció izotróp volna.[19] Ugyancsak igazoltuk, hogy a konform szimmetria a fenti rendszerben megörződik. A rendezetlen felületi tér a kétdimenziós Ising modellben marginálisan irreleváns perturbáció. A térelméletileg jósolt logaritmikus korrekciókat számítógépes szimulációk eredményeivel vetettük össze a [15] munkában. Végül komplex hálózatok[4] és aperiodikus rendszerek[6] fázisátalakulásait is vizsgáltuk egy-egy munkában.

3. Rendezetlen nemegyensúlyi folyamatok

A reakció-diffúzió típusú folyamatok stacionér állapotai a kontrol-paraméter változtatása esetén különböző nemegyensúlyi fázisátalakulásokat mutatnak. Ezen fázisátalakulások egyik legfontosabb uneverzalitási osztályát az un. irányított perkoláció (IP) adja. Ezen folyamatnak ugyan nagyon pontos numerikus vizsgálatai ismertek, mégis nincs egzakt eredmény, még $(1+1)$-dimenzóban sem. További különös tény, hogy ezen alapvető univerzalitási osztály kísérleti megfigyelése mind a mai napig nem sikerült. Ennek egyik lehetséges magyarázata abban rejlik, hogy az elkerülhetetlen rendezetlenség jelenléte miatt az univerzalitási osztály megváltozik.

Az IP univerzalitási osztályba tartozó modellek prototípusa az un. kontakt folyamat, melynek rendezetlenség jelenlétében mutatott viselkedését a [10] és [13] munkákban vizsgáltuk. Legfontosabb eredményünk szerint kellően erős rendezetlenség esetén a rendszer kritikus tulajdonságait egy végtelennül rendezetlen fixpont szabályozza, mely izomorf a rendezetlen kvantum Ising modellnél találttal. Következésképpen az $(1+1)$-dimenziós rendezetlen rendszer kritikus tulajdonságai egzaktul ismertek, noha ez a tiszta rendszer esetén nem igaz. Gyengébb rendezetlenség esetén numerikus vizsgálatokat végeztünk, melyek rendezetlenségtől függő kritikus exponenseket tartalmazó konvencionális fixpontok jelenlétét mutatták ki.

Egy másik vizsgálatsorban hajtott rácsgázok stacionér és nem stacionér (pl. durvulási - coarsening) tulajdonságait tanulmányoztuk rendezetlenség jelenlétében. A hajtott rácsgázok prototipusa az egyszerű kizárási folyamat (asymetric simple exclusion process - ASEP), melynek számos biológiai, kémiai és közlekedési alkalmazása ismeretes. Az ASEP esetén a részecskék egy egydimenziós rács üres szomszédos rácshelyeire ugorhatnak, ahol az ugrási ráták függhetnek i) a részecskétől (részecske rendezetlenség), vagy a ii) rácshelytől (rácshely rendezetlenség). Vizsgálataink az un. részlegesen aszimmetrikus folyamatra történtek, amikor a részecskék mindkét irányba elmozdulhatnak és a részecskék (rácshelyek) preferenciális ugrási iránya is véletlen változó[23]. RCS analízissel és extrém érték statisztika alkalmazásával megmutattuk, hogy a modellben a leglassabb részecske mögött a többiek feltorlódnak és a stacionér sebesség, v, a rendszer méretével, L, a $v \sim L^{-z}$ összefüggés szerint tünik el. A z dinamikai exponenst részecske rendezetlenség esetén egzaktul meghatároztuk, és megmutattuk hogy annak értéke rácshely rendezetlenség esetén (z_{rh}) a $z_{rh} = z/2$ összefüggést teljesíti. Ugyancsak vizsgáltuk az egydimenziós zérus hatótávolságú folyamatot (zero range process) rendezetlenség jelenlétében[24]. A részlegesen aszimmetrikus változatban részecske kondenzációt találtunk és vizsgáltuk az áramot, a részecskék eloszlását és a durvulási folyamatot is.

Egy újabb kutatási problémaként klasszikus ferromágneses rendszerek nemegyensúlyi relaxációját tanulmányoztuk. A fenti folyamatnál a rendszert egy kezdeti állapotba preparáljuk (mely általában a magashőmérsékleti, rendezetlen fázist jelenti), majd hirtelen a kritikus pontjára hűtjük és vizsgáljuk a mágnesség relaxációját, az autokorrelációs függvényt, stb. Ismeretes, hogy az idő irányban sérülő eltolási szimmetria miatt a fenti folyamatok jellemzésére az egyensúlyi kritikus exponensek mellett új, nemegyensúlyi exponenseket is be kell vezetni. Vizsgálatainkban véges minták felülete mentén bekövetkező nemegyensúlyi relaxációs folyamatokat tekintettünk[14,20]. Megmutattuk, hogy itt a mágnesség relaxációja két különböző forgatókönyvet követhet. Ha a felületi rend kellően erős, akkor a minta belsejében ismért domén-növekedéssel a mágnesezettség kezdeti növekedését észleljük. Ezzel szemben gyenge felületi rend esetén (ez valósul meg például a háromdimenziós Ising modellben és több kisérletileg vizsgálható mágneses anyagban) új típusú, un. klaszter feloldódási folyamat során a mágnesezettség nyujtott exponenciális alakü csökkenése látható. Ugyancsak vizsgáltuk a kezdeti állapot befolyását a relaxációra, amikor a kétdimenziós Ising modell kezdeti állapotát véletlen tér segítségével állítottuk elő[26]. A véletlen tér erősségétől függően a kezdeti relaxációs lépésekben visszatérő (reentrance) viselkedést találtunk, de ez az aszimptotikus növekedés exponensét nem befolyásolta. Végül megemlítjük, hogy nemegyensúlyi fázisátalakulást (a kontakt folyamatot) skála nélküli komplex hálózatokon is vizsgáltuk[27].

Összefoglalva elmondható, hogy a fenti kutatási projektben több szorosan összefüggő jelenségen dolgoztunk, melyben a rendezetlenség szerepe (mind a kritikus, mind a Griffiths-féle) szingularitások esetén meghatározó volt. Eredményeink 28 nemzetközi folyóiratcikkben lettek közölve (ezek közül öt a Phyisical Review Letters-ben), melyek összegzett impakt faktora közel 110. Ezen munkákra ezidáig több mint 160 hivatkozás érkezett. Eredményeink nemzetközi elismertségét jelzi, hogy összefoglaló cikk írására kaptunk felkérést[18], továbbá, hogy a pályázati időszak alatt mintegy tiz felkérést kaptunk konferencián illetve workshop-on meghívott előadás tartására.