# Rendezetlenség által dominált szinguláris viselkedés klasszikus- és kvantum rendszerekben

PhD tézisek

Juhász Róbert

Szegedi Tudományegyetem
Elméleti Fizikai Tanszék
2002.

## 1. Bevezetés

A természetben előforduló anyagokat és folyamatokat kevés kivételtől eltekintve mindig bizonyos fokú inhomogenitás jellemzi. A valós rendszerek ezen tulaj-donságának elméleti leírása hívta létre a *rendezetlenség* koncepcióját, majd indította útjára a—mára már széleskörűen alkalmazott—*rendezetlen modellek* vizsgálatát, mely lassanként önálló diszciplinává növi ki magát. A rendezetlen modelleken belül különös érdeklődés indult meg a *fázisátalakulást* mutató modellek iránt, melyeknél természetes módon fölmerülő kérdés, hogy a rendezetlenség milyen változásokat eredményez a rendezetlenségtől mentes, ún. tiszta rendszer tulajdonságaihoz képest.

A tapasztalatok szerint a rendezetlenség változó mér-tékben befolyásolja a tiszta rendszer fázisátalakulását: Előfordul, hogy a fázisátalakulási pont megszűnéséhez vezet, vagy az átalakulás rendűségének megváltozásához: az eredetileg elsőrendű fázisátmenet folytonossá válhat. Ezenkívül a rendezetlenség egy folytonos fázisátalakulási pont (kritikus pont) *univerzális* tulajdonságainak megváltozását is eredményezheti.

Folytonos fázisátalakulások rendezetlenséggel szembeni stabilitására ismert egy heurisztikus kritérium, melyet először Harris fogalmazott meg hígított rendszerekre, és amelyet aztán más típusú rendezetlen rendszerekre is álta-lánosítottak. Ezen eredmények nyomán intenzív numerikus és analitikus vizsgálatok kezdődtek meg az egyes véletlen modellek univerzalitási osztályának tisztázására. A klasszi-kus rendszerekben lezajló—termikus fluktuációk által kontrollált—fázisátalakulások mellett az—abszolút nulla fokon végbemenő—ún. *kvantum-fázisátalakulások* is az érdeklődés középpontjába kerültek. Itt—hőtartály nem

lévén—az aktiválási dinamikát az alagútazás váltja fel, ami a klasszikustól merőben eltérő fázisátalakulási mechanizmus-hoz vezet. A rendezetlen rendszerekben lezajló kvantum-fázisátalakulások tulajdonságait a termikus fluktuációk helyett a *kvantum-fluktuációk* és a rendezetlenség fluktuációinak összjátéka alakítja ki.

Az alacsony-dimenziós rendezetlen kvantum-rendsze-rekre vonatkozó ismeretek terén figyelemreméltó előrelépést hozott egy aszimptotikusan egzakt valós-tér renormálási-csoport transzformáció, melyet elsőként Ma, Dasgupta és Hu alkalmazott a rendezetlen Heisenberg-láncra. Az eljá-rást, melyet Fisher később számos rendezetlen spinláncra—köztük a kvantum-Ising-láncra és az XX-láncra—kiterjesztett, kizárólag a kritikus pontban és közvetlen közelében gondolták aszimptotikusan egzaktnak. Kiderült, hogy a fenti modellek különleges nagyléptékű viselkedést mutatnak: a—hosszúságegység növekedésével járó—renormálási-csoport transzformáció során a Hamilton-operátor paramétereinek eloszlása, logaritmikus skálán minden határon túl szélesedik, amint a rendszer a kritikus fixponthoz közelít. A rendszer viselkedését kontrolláló fixpont, egy *végtelenül erős rendezetlenségű fixpont,* amelyben a paraméterek hányadosa tipikusan végtelen vagy nulla. A széles eloszlások következményeként a fizikai mennyiségek elveszítik ön-átlagoló tulajdonságukat, és átlagértéküket a kiugró járu-lékot adó, de kis valószínűségű ún. *ritka minták* határozzák meg.

Azonban a rendezetlenség hatása nem csupán a fázisátalakulási pont jellemzőinek befolyásolására korlátozódik. Griffiths ill. McCoy mutatta ki, hogy a rendezetlen

során, és a dinamikai exponens számítására szolgáló egzakt összefüggés egy új, független levezetését adtuk [4].

–Általánosan megmutattuk, hogy rendezetlen kvantum-spinláncok Griffiths-fázisában, melyek kritikus viselkedését egy végtelenül erős rendezetlenségű fixpont kontrollálja, a
nemcsak a kritikus pontban, hanem egy—a kritikus pont körüli—kiterjedt tartományban is szinguláris. Ezen—kizárólag rendezetlen rendszerekben megfigyelhető—*Griffiths-fázis* megjelenését olyan ún. *ritka tartományok* okozzák, melyek lokálisan a kritikus pont túloldalán lévő fázisban vannak. A kvantum-Ising-modell-ben, ahol a Griffiths-McCoy szingularitások a klasszikus modellhez képest lényegesen hangsúlyozottabban jelentkeznek, az átlagos időbeli korrelációk—a kritikus viselkedésre emlékeztető—hatványfüggvény alakú lecsen-gése figyelhető meg. Ezzel szemben a térbeli korrelációk rövidtávú rendet jeleznek, ezért a Griffiths-fázist "szemikritikus fixpontok" sorozatának nevezik. Egy feno-menologikus skálaelmélet segítségével az energiarés eloszlá-sának hatványfüggvény alakú aszimptotikus tartománya kapcsolatba hozható a rendszer dinamikai exponensével. Ily módon az energia-réssel kapcsolatba hozható szinguláris mennyiségeket jellemző exponensek kifejezhetőek a rendszer dinamikai exponensével. Ezen utóbbi mennyiség pedig a kontroll-paraméter folytonosan változó függvénye a Griffiths-fázisban.

A folytonos fázisátalakulásokkal ellentétben, az első-rendű fázisátalakulások rendezetlenséggel szembeni stabili-tására vonatkozó általános érvényű kritérium mindezidáig nem ismert. Kétdimenziós rendszerekre azonban ismert egy—Aizenman és Wehr nevéhez

fűződő—egzakt állítás, mely szerint tetszőlegesen csekély mértékű rendezetlenség is az átalakulás folytonossá válásához vezet. Az eredmény nyomán meginduló numerikus vizsgálatok javarészt egy alapvető modellre, a véletlen kötésű $q$-állapotú Potts-modell-re koncentrálódtak. Véges $q$-ra végzett transzfer-mátrix szá-molások és Monte Carlo szimulációk eredményei szerint a modell korrelációs hossz exponense $q$-tól alig függ, míg a mágnesezettségi exponens $q$-függést mutat, és a $q \to \infty$ határesetben véges értékhez tart.

## 2. Célkitűzés és módszerek

Feltehető a kérdés, hogy a kvantum-Ising-lánc Griffiths-fázisában a dinamikai exponens minden szinguláris mennyiség leírására elegendő-e, beleértve azokat is, amelyek az energiaréssel nem hozhatók közvetlenül kapcsolatba. Ilyen mennyiségek a második- és magasabb energiarések, a nemlineáris szuszceptibilitás vagy az energiasűrűség autokorrelációs függvény. Célunk ezen mennyiségek Griffiths-fázisbeli viselkedésének tisztázása volt. Alkalmazott módszereink egy része a kvantum-Ising-lánc *szabadfermion-reprezentá-ciójára* támaszkodik. A kérdéses mennyiségek szabadfer-mion-alakjaiból egyrészt egy fenomenologikus skálaelmélet segítségével vontunk le következtetéseket a szinguláris viselkedésükre vonatkozólag, másrészt a szabadfermion-kép az eredeti problémához képest lényegesen alacsonyabb dimenziójú sajátérték-problémára vezet, így numerikus szá-mítások ideális kiindulópontja. Ezt kihasználva, a szóban-forgó mennyiségek részletes numerikus analízisét végeztük el. A legnagyobb vizsgált

lánchossz 128 volt, a jellemző mintaszám pedig néhány tízezer.

Eredményeink másik jelentős részét a Griffiths-fázisra kiterjesztett Ma-Dasgupta-Hu renormálási-csoport transzformációval kaptuk. A kvantum-Ising-modellt ezen módszer segítségével analitikus úton tanulmányoztuk. Emellett fenomenologikus, skálázási érveket is felhasználtunk általános érvényű eredmények levezetésére. A rendezetlen kvantum-Potts-lánc renormálási-csoport egyenleteit analitikusan meg-oldani nem tudtuk, ezért a kérdéses csatolt integro-differenciálegyenlet-rendszert numerikusan oldottuk meg, valamint ezen modellt a renormálási-csoport eljárás közvetlen nu-merikus szimulációjával is vizsgáltuk.

A—kvantum-Ising lánccal rokon—rendezetlen XY-lán-cot és rendezetlen, dimerizált XX-láncot illetően célunk az ismeretlen kritikus exponensek és az időbeli korrelációk (melyek a fent említett renormálási-csoport módszerrel nem tanulmányozhatók) meghatározása, valamint a Griffiths-fázis sajátságainak tisztázása volt. A vizsgálat kiindulópontját
a szóbanforgó modellek szabadfermion-reprezentációja, va-lamint szétcsatolt Ising-láncokra való leképezése jelentette. A rendezetlen XY- és rendezetlen, dimerizált XX-láncra kidolgoztuk az átlagos mennyiségek—ritka tartományok tulajdonságaira épülő—fenomenologikus skálaelméletét. A ritka tartományokat a fenti modellek és egy alapvető sztochasztikus folyamat, a véletlen bolyongás közötti kapcsolat segítségével azonosítottuk, majd az ún. túlélő bolyongás jellemzőit használtuk fel az átlagos mennyiségek skálázási viselkedésének meghatározására. A Griffiths-fázisban kap-csolatot állapítottunk meg a vizsgált modellek és a *Sinai-bolyongás* között. Mindezek mellett

numerikus úton számí-tottuk a modellek rendparaméter-profiljait, valamint a spin-spin autokorrelációs függvényt. A legnagyobb tanulmányozott lánchossz 512 volt, a minták tipikus száma pedig néhány tízezer. A kritikus exponenseket véges-méret skálá-zással határoztuk meg, melyhez a rendparaméter-profilokra vonatkozó konform el-méleti eredményeket is felhasználtunk.

A kétdimenziós, véletlen kötésű $q$-állapotú Potts-modell-ben, a kritikus tulajdonságok—közvetlenül a $q \to \infty$ határ-esetben való—meghatározását tűztük ki célul. Erre a célra a legalkalmasabb a modell gráf-reprezentáci-ójának, az ún.

*véletlen-klaszter reprezentáció* használata. A domináns gráf meghatározására két numerikus optimalizálási módszert használtunk: Egy standard sztochasztikus eljárást ("simulated annealing"), és egy kombinatorikus optima-lizációs módszert, ami a—hálózatok elméletéből ismert—*minimális vágásra* épül. A klaszter-analízis céljára a stan-dard Hoshen-Kopelman algoritmust használtuk fel. A mo-dell kritikus exponenseit véges-méret skálázás segítségével becsültük meg, valamint csík alakú minták térbeli korre-lációinak mérésével. Ezen utóbbi módszer a modell kon-form invariáns voltára épül.

## 3. Eredmények

Fő eredményeink a következők:

–Megmutattuk, hogy a kvantum-Ising-lánc Griffiths-fázisában a második- és magasabb energiarések, a nemlineáris szuszceptibilitás és az energiasűrűség autokorrelációs függvény hatványfüggvény alakú szingularitással rendelkezik, és a megfelelő exponenseket kifejeztük a dinamikai expo-nenssel [1].

–Megoldottuk a kvantum-Ising-lánc Ma-Dasgupta-Hu re-normálási-csoport egyenleteit a modell Griffiths-fázisában, és megmutattuk, hogy az eljárás itt is aszimptotikusan egzakt [4].

–Bizonyítottuk, hogy kvantum-Ising-lánc Griffiths-fázisbeli dinamikai exponense változatlan marad a fenti eljárás

klasszi-kus- ill. kvantum-Ising-modellben néhány fizikai mennyiség
Ma-Dasgupta-Hu renormálási-csoport transzformáció a-szimptotikusan egzakt, és a dinamikai exponens invariáns marad az eljárás során [4].

–Numerikus becslést adtunk az egydimenziós, rendezet-len $q$-állapotú kvantum-Potts-modell $q$-tól függő dinamikai exponensére a Griffiths-fázis számos pontjában [4].

–Meghatároztuk a rendezetlen XY-lánc és a rendezetlen, dimerizált XX-lánc felületi- és tömbi kritikus exponenseit [2,3].

–Meghatároztuk a spin-spin autokorrelációs függvény eloszlásának alakját valamint átlagos aszimptotikus visel-kedését a rendezetlen XY-lánc és a rendezetlen dimerizált XX-lánc kritikus pontjában és Griffiths-fázisában [2,3].

–Egzakt kifejezést adtunk a rendezetlen XY-lánc és a rendezetlen dimerizált XX-lánc Griffiths-fázisbeli dinamikai exponensének számítására [2,3].

–Megmutattuk, hogy a véletlen kötésű $q$-állapotú Potts-modell megoldásának problémája a $q\to\infty$ határesetben optimalizálási feladatra vezet [5].

–A $q\to\infty$ határesetben numerikus becslést adtunk a két-dimenziós, véletlen kötésű $q$-állapotú Potts-modell kritikus exponenseire, és megalkottuk a modell fázisdiagramját [5].

## Publikációk


1. F. Iglói, R. Juhász, and H. Rieger
*Griffiths-McCoy Singularities in the Random Transverse Ising Spin Chain*
Phys. Rev. B **59**, 11308 (1999).

2. H. Rieger, R. Juhász, and F. Iglói
*Critical Exponents of Random XX and XY Chains: Exact Results via Random Walks*
Europ. Phys. J. B **13**, 409 (2000).

3. F. Iglói, R. Juhász, and H. Rieger
*Random Antiferromagnetic Quantum Spin Chains: Exact Results from Scaling of Rare Regions*
Phys. Rev. B **61**, 11552 (2000).

4. F. Iglói, R. Juhász, and P. Lajkó
*Griffiths-McCoy Singularities in Random Quantum Chains: Exact Results through Renormalisation*
Phys. Rev. Lett. **86**, 1343 (2001).

5. R. Juhász, H. Rieger, and F. Iglói
*Random-Bond Potts Model in the Large-q Limit*
Phys. Rev. E **64**, 56122 (2001).