Györgyi Géza

RENDEZETLEN HÁLÓZATOK I

Gáspár Merse Előd és Maródi Máté által készített jegyzet alapján.

2006. január 19.

Munkaanyag, a benne hibát találó hallgatók a vizsgán kedvezőbb elbírálásra számíthatnak.

Tartalomjegyzék

1. Előhang

Rendezetlen hálózatok alatt olyan statisztikus fizikai rendszert értünk, amelynek részecskéi, pl. spinek közötti kölcsönhatás erőssége helyről helyre véletlenszerűen változik. A részecskéket a hálózat csomópontjainak tekintjük, s nemcsak párkölcsönhatást, hanem kettőnél több csomópont kölcsöhatását is megengedünk. A részecskék és kölcsönhatásaik együtt definálják a hálózatot.

A speciálkollégiumon bemutatjuk a rendezetlen rendszerek legkezelhetőbb, mégis „egzotikus” termodinamikai viselkedést mutató modelljei elméletének elemeit. Az időbeli korlátok miatt a sztatikával foglalkozunk, s ezenközben mélységesen sajnálkozunk, hogy a kísérletek és szimulációk szempontjából igen fontos dinamikát nem érinthetjük.

Jelen jegyzet az első félév anyaga, itt végtelen hatótávolságú spinüveg modelleket vizsgálunk. Az előadó tapasztalata szerint a hallgatók a rendezett rendszerekbeli fázisdiagramokról halovány képpel bírnak, ezért a bevezetésben ilyeneket számítunk rendezett spinrendszerek átlagtér modelljeiben, a statisztikus fizikai alapkurzus kiegészítéseképpen.

2. Bevezetés: Fázisátalakulások demonstrálása rendezett rendszerekben

Rendezett homogén rendszer: a kölcsönhatás térbeli eltolásra invariáns (homogén), azaz nem függ a kölcsönható részecskék abszolút rácsbeli pozíciójától, noha függhet relatív helyzetüktől. Izotróp, első szomszéd párkölcsönhatás esetén minden csatolási együttható azonos. A kölcsönhatások lehetnek irányfüggők de térben homogének, távolabbi szomszédok kölcsönhatása függhet a helyvektorok különbségétől, de nem függ azok összegétől.

2.1. Ferromágneses Ising-modell átlagtér (mean-field, MF) elmélete

Tekintsünk N darab spinből álló rendszert valamely rácson: $\boldsymbol{S} = \{s_i\}_{i=1}^N$, $s_i = \pm 1$. A Hamilton függvéy:

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j - h \sum_i s_i \tag{2.1}$$

ahol $\sum_{\langle i,j \rangle}$ a szomszédos párokra való öszegzést jelöli. A kölcsönhatás térben homogén $J =$ konst. (a rendszer nem rendezetlen). Ferromágnes: $J > 0$.

Állapotösszeg

$$\mathcal{Z} = \mathrm{Tr}\, \mathrm{e}^{-\beta \mathcal{H}(\boldsymbol{S})} \tag{2.2}$$

ahol Tr $= \sum_{s_1 \dots s_N = \pm 1}$, $\beta = 1/T$ ($k_B = 1$). Szabadenergia

$$fN = F = -\beta^{-1} \ln \mathcal{Z} \tag{2.3}$$

Termikus egyensúlyban az $\boldsymbol{S}$ konfiguráció valószínűsége

$$\mathcal{P}(\boldsymbol{S}) = \mathcal{Z}^{-1} \mathrm{e}^{-\beta \mathcal{H}(\boldsymbol{S})} \tag{2.4}$$

MF közelítés

$$s_i s_j \approx \frac{1}{2} (\langle s_i \rangle s_j + s_i \langle s_j \rangle) \tag{2.5}$$

Mágnesezettség

$$M = Nm, \qquad m = \langle s_i \rangle \,. \tag{2.6}$$

Ha z a koordinációs szám, akkor az átlagtér-hamiltoni

$$\mathcal{H}_{\mathrm{MF}} = -\frac{J}{2}\sum_{\langle i,j\rangle}(\langle s_j\rangle s_i + \langle s_i\rangle s_j)) - h\sum_i s_i = -(Jmz+h)\sum_i s_i, \tag{2.7}$$

a konfiguráció valószínűsége

$$\mathcal{P}_{\mathrm{MF}}(\boldsymbol{S}) = \mathcal{Z}_{\mathrm{MF}}^{-1}\,\mathrm{e}^{\beta(Jmz+h)\sum_i s_i} \tag{2.8}$$

$$\mathcal{Z}_{\mathrm{MF}} = \mathrm{Tr}\,\prod_i \mathrm{e}^{\beta(Jmz+h)s_i} = [2\mathrm{ch}\,\beta(Jmz+h)]^N \tag{2.9}$$

Reális rendszerekben a koordinációs szám növekedésével a spinek által érzékelt tér közelít az átlagtérhez. Szabadenergia

$$f_{\mathrm{MF}} = -(N\beta)^{-1}\ln\mathcal{Z}_{\mathrm{MF}} = -\beta^{-1}\ln 2\mathrm{ch}\,\beta(Jmz+h) \tag{2.10}$$

Itt m paraméter, amelyet konzisztencia feltételből határozunk meg

$$m = \langle s_i\rangle = \mathrm{Tr}\,s_i\mathcal{P}_{\mathrm{MF}}(\boldsymbol{s}) = \frac{\mathrm{Tr}\ s_i\mathrm{e}^{\beta(Jmz+h)s_i}}{\mathrm{Tr}\ \mathrm{e}^{\beta(Jmz+h)s_i}} = \mathrm{th}\,\beta(Jmz+h) = g(m,h) \tag{2.11}$$

Az így nyert $m(h)$ függvényt visszahelyettesítve kapjuk az $f(h)$ szabadenergiát (a hő-

mérsékletfüggést nem jelöltük). Általában $m = -\frac{\partial f}{\partial h}$, ennek teljesülése is a konzisztencia feltétele. Szórás és szuszceptibilitás

$$\begin{aligned}\Delta^2 M &= \left\langle\left(\sum_i s_i\right)^2\right\rangle - \left\langle\sum_i s_i\right\rangle^2 = \frac{1}{\mathcal{Z}}\frac{\partial^2\mathcal{Z}}{\partial(\beta h)^2} - \left(\frac{\partial\mathcal{Z}}{\partial(\beta h)}\right)^2\frac{1}{\mathcal{Z}^2}\\ &= \frac{1}{\beta^2}\frac{\partial^2\ln\mathcal{Z}}{\partial h^2} = -\frac{1}{\beta}\frac{\partial^2 F}{\partial h^2} = \frac{1}{\beta}\frac{\partial M}{\partial h} = \frac{N}{\beta}\chi(h),\end{aligned} \tag{2.12}$$

ahol $\chi(h) = \frac{\partial m}{\partial h}$ a szuszceptibilitás ($\chi \geq 0$).Vegyük észre, hogy két $\mathcal{O}(N^2)$ menyiség különbségéül $\mathcal{O}(N)$-et kaptunk, ezért a relatív szórás nagy rendszerben eltűnik. A (2.11) alapján

$$\chi = \frac{\partial g}{\partial m}\chi + \frac{\partial g}{\partial h} \quad\Rightarrow\quad \chi = \frac{\frac{\partial g}{\partial h}}{1-\frac{\partial g}{\partial m}} \tag{2.13}$$

$$\frac{\partial g}{\partial h} = \beta(1-m^2) \qquad \frac{\partial g}{\partial m} = \beta Jz(1-m^2) \tag{2.14}$$

$$\Rightarrow\quad \chi = \frac{1-m^2}{T-T_c(1-m^2)} \qquad T_c = Jz \tag{2.15}$$

A rendszer termodinamikailag (lineárisan) stabil, ha $\chi > 0$. Mivel $\frac{\partial g}{\partial h} \geq 0$, a $\chi > 0$

ekvivalens a köv. feltétellel

$$g' \equiv \frac{\partial g}{\partial m} < 1. \tag{2.16}$$

Az $m = g(m, h)$ egyenlete például iteratív módon oldhatjuk meg (a h-t nem jelöljük)

$$m_{n+1} = g(m_n). \tag{2.17}$$

Az iteratív stabilitás feltétele ugyancsak (2.16). Ez könnyen belátható az alábbiak szerint

$$m^* = g(m^*), \tag{2.18}$$

$$m^* + \delta m_{n+1} = g(m^* + \delta m_n) \approx g(m^*) + g'(m^*)\delta m_n = m^* + g'(m^*)\delta m_n. \tag{2.19}$$

Innen látszik, hogy ha $|g'(m^*)| < 1$ akkor az iteráció konvergál m^*-hoz. Viszont $g'(m^*)$ nem negatív, ezért az iteratív stabilitás kritériuma éppen (2.16).

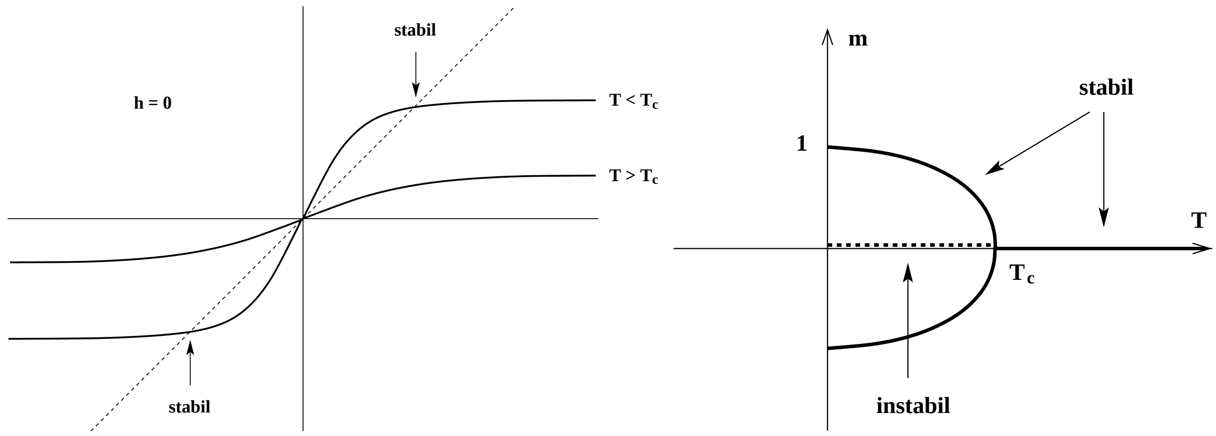
Tehát azt látjuk, hogy

iteratív stabilitás $\Leftrightarrow$ termodinamikai stabilitás

Vizsgáljuk meg először a $h = 0$ esetet,

$$m = g(m) = \operatorname{th} \beta(Jzm). \tag{2.20}$$

Az m-re vonatkozó megoldásokat leolvashatjuk az 1. ábra bal táblájáról: a $g(m)$ és a 45°-os egyenes metszéspontjai. Az egyensúlyi helyzet attól függően stabil vagy instabil, hogy $g'(m) <$ vagy > 1. Ha az instabilhoz -1 indexet, a stabilhoz $+1$-et rendelünk, ezek összege minden T-n $+1$ függetlenül a fixpontok számától.



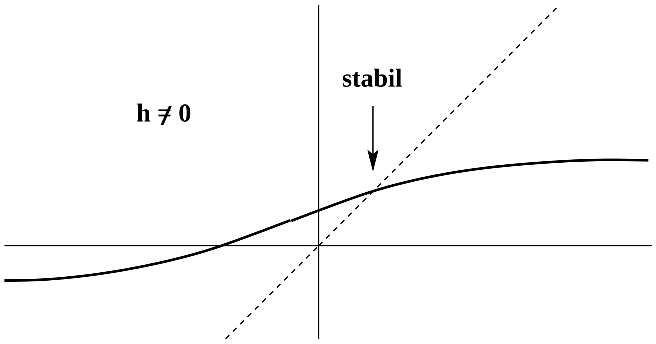
1. ábra. Az állapotegyenlet iteratív megoldása (bal) és a megoldások hőmérsékletfüggése (jobb), ha $h = 0$. A fixpont stabilitása egyben a termodinamikai stabilitást is jelzi.

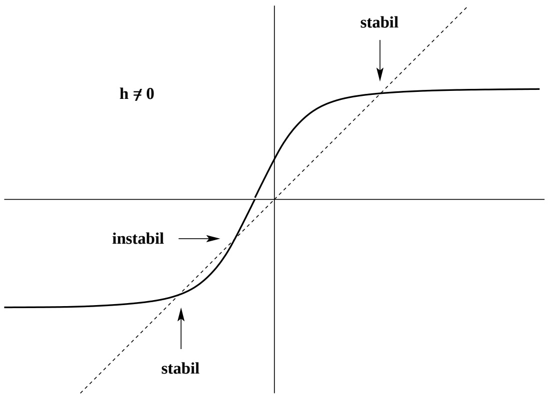
Az 1. ábra jobb tábláján ábrázoltuk a hőmérséklet fügvényében az $m(T)$ egyensúlyi mágnesezettséget (folytonos vonal). Ha $T > T_c$, $m = 0$ stabil, ha $T < T_c$, az $m = 0$ instabil, és a két nemzérus m stabil: ez a vasvilla (pitchfork) bifurkáció.

A $h \neq 0$ esetben a függvényt eltoljuk

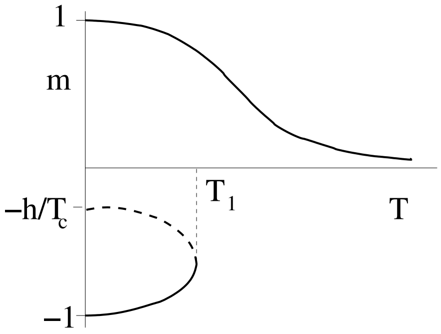
$$m = \operatorname{th} \beta(Jzm + h). \tag{2.21}$$

Ha $|h| > T_c$, akkor egy metszéspont van, ld. a 2. ábra, bal tábla. Ha $|h| < T_c$, akkor alacsony hőmérsékleten, $T < T_1(h) < T_c$, egy új fixpont pár is megjelenik, tangens bifurkáció révén, lásd a 2. ábra jobb tábláját. A stabilitási indexek előjeles összege most is zérus.





2. ábra. Iteratív megoldás $h > 0$, magas T (bal) és $T_c > h > 0$, $T < T_1$ (jobb) mellett.



3. ábra. Az állapotegyenlet megoldásai. Vastag szaggatott vonal a lokálisan instabil, folytonos a stabil megoldásokat jelzi $T_c > h > 0$ mellett. A T_1 alatt két lokálisan stabil állapot létezik, közülük a pozitív a globálisan stabil. Nagyobb tér mellett csak a felső ág marad meg.

Ha több termodinamikailag lokálisan stabil állapot van, akkor közülük a szabadenergia globális minimuma választja ki a fizikait: globálisan stabil állapot. Ilyenből is lehet több, pl. zérus térben a globálisan stabil állapot kétszeresen degenerált az spin átfordítási

szimmetria miatt. Mivel

$$f = -\beta^{-1} \ln 2\mathrm{ch}\, \beta(Jzm + h) = -\beta^{-1} \ln 2 + \frac{\beta^{-1}}{2} \ln(1 - m^2), \tag{2.22}$$

azért a nagyobb $|m|$-hez, azaz a 3. ábrán a pozitív ághoz tartozik a fizikai megoldás. Mivel az $m(T)$ görbe sima, azt mondhatjuk, hogy a mágneses tér az átalakulást eltörölte.

2.2. FM Ising: Végtelen hatótávolságú kölcsönhatás

Közelítés nélkül vizsgálható a $z = N - 1$ eset, azaz spinek teljes konnektivitású hálózata. Az alábbiakban megmutatjuk, hogy ezt a rendszert egzaktul írja le az előző szakaszban tárgyalt átlagtérelmélet. A hamiltoni

$$\mathcal{H} = -\frac{J}{2N} \sum_{i \neq j} s_i s_j - h \sum s_i. \tag{2.23}$$

A J-t N-nel normáltuk, hogy egy spin $\mathcal{O}(1)$ lokális mágneses teret érezzen, $h_i = J/N \sum_{j(\neq i)} s_i$. Mint látni fogjuk, ezzel elérjük, hogy (i) a szabadenergia extenzív (ii) a kritikus hőmérséklet $\mathcal{O}(1)$.

Gauss-, másnéven Hubbard–Sztratonovics-transzformáció

$$e^{A^2/2} = \int \frac{dt}{\sqrt{2\pi}} e^{-t^2/2+At} = \int Dt\, e^{At}, \;\text{ ahol }\; Dt = \frac{dt}{\sqrt{2\pi}} e^{-t^2/2}. \tag{2.24}$$

A hamiltonit átalakítjuk

$$\mathcal{H} = \frac{\beta J}{2N} \sum_{i \neq j} s_i s_j + \beta h \sum s_i = \frac{\beta J}{2N} \left((\sum s_i)^2 - \sum s_i^2 \right) + \beta h \sum s_i \tag{2.25}$$

Az állapotösszeg

$$\begin{aligned} \mathcal{Z} &= \mathrm{Tr}\, \exp\left\{ -\frac{\beta J}{2} + \frac{\beta J}{2N} (\sum s_i)^2 + \beta h \sum s_i \right\} \\ &= e^{-\frac{\beta J}{2}}\, \mathrm{Tr} \int Dt\, e^{\left(t\sqrt{\frac{\beta J}{N}} + \beta h \right) \sum s_i} \\ &= e^{-\frac{\beta J}{2}} \int Dt\; 2^N \mathrm{ch}^N \left[t\sqrt{\frac{\beta J}{N}} + \beta h \right]. \end{aligned} \tag{2.26}$$

Vezessük be az m változót, $t = m\sqrt{\beta J N}$,

$$\begin{aligned} \mathcal{Z} &= e^{-\frac{\beta J}{2}} \int \frac{dm}{\sqrt{2\pi}} \sqrt{\beta J N}\; e^{-\frac{m^2 \beta J N}{2}}\; e^{N \ln 2\mathrm{ch}\, \beta (J m + h)} \\ &= e^{-\frac{\beta J}{2}} \int \frac{dm}{\sqrt{2\pi}} \sqrt{\beta J N}\; e^{-N\beta f(m,h)} = A_N\, e^{-N\beta f(h)}. \end{aligned} \tag{2.27}$$

Itt az A_N exponenciálisnál gyengébben függ az N-től, és a β függést nem jelöltük az f-ek argumentumában. Nyeregpont módszer $N \to \infty$ mellett

$$f(h) = \min_m \left(f(m,h) = \frac{J m^2}{2} - \beta^{-1} \ln 2\mathrm{ch}\, \beta (J m + h) \right) \tag{2.28}$$

A minimum helyen

$$\frac{\partial f(m,h)}{\partial m} = 0 \qquad \Rightarrow \qquad m = \mathrm{th}\, \beta (J m + h) = g(m,h). \tag{2.29}$$

Mágnesezettség

$$\frac{\partial f(h)}{\partial h} = \frac{\partial f(m,h)}{\partial h} + \frac{\partial f(m,h)}{\partial m} \frac{\partial m}{\partial h} = -m, \tag{2.30}$$

azaz m éppen a mágnesezettséget adja a nyeregpontban. A (2.29) éppen az átlagtér állapotegyenlet $J = T_c$-vel.

A lokális minimum (lokális stabilitás) feltétele

$$\frac{\partial^2 f(m,h)}{\partial m^2} = J - \beta J^2(1-m^2) = \frac{T_c}{T}\left[T - T_c(1-m^2)\right] > 0. \tag{2.31}$$

Ez ekvivalens a szuszceptibilitás pozitivitásával, (2.15) szerint

$$\chi = \frac{\partial m}{\partial h} = \frac{1-m^2}{T - T_c(1-m^2)} > 0. \tag{2.32}$$

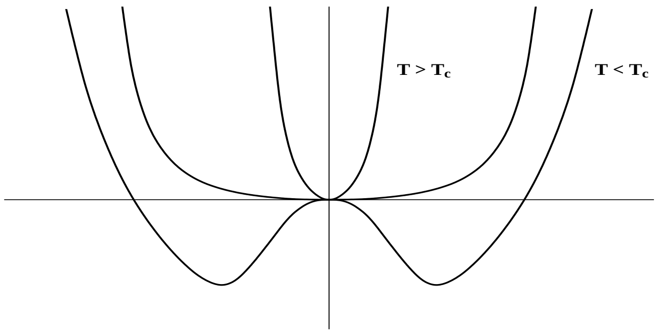
A végtelen hatótávolságú rendszerre az átlagtér közelítés egzakt.

Közelítő szabadenergia kis m és $h = 0$ mellett

$$f(m,0) = -T\ln 2 + \frac{m^2}{2}T_c - \frac{m^2 T_c^2}{2T} + \frac{m^4 T_c^4}{12T^3} + \mathcal{O}(m^6). \tag{2.33}$$

Ha $T \approx T_c$, akkor

$$f(m,0) = -T\ln 2 + \frac{m^2 T_c}{2}\left(1 - \frac{T_c}{T}\right) + \frac{m^4 T_c}{12} + \mathcal{O}\left(m^6, m^4\frac{T_c - T}{T_c}\right) \tag{2.34}$$



4. ábra.

Az egyensúlyi állapot szabadenergiáját az $f(h)$ függvény adja meg. Gondolhatnánk, hogy $f(m,h)$ a rögzített m melletti szabadenergiát adja, ez azonban nem igaz! Az eddigi $f(h)$-t jelöljük $f_h(h)$-val. Mint láttuk

$$\begin{aligned} f_h'(h) &= -m, \quad &(2.35)\\ -f_h''(h) &= \chi > 0. \quad &(2.36)\end{aligned}$$

Ez utóbbi szerint $f_h(h)$ konkáv, tehát Legendre-transzformáció végezhető. A szokásos

Legendre transzformált függvény $-f_m$, az új Legendre változó $-m$, ezért

$$f_m(m) = mh + f_h(h), \tag{2.37}$$

ahol $h(m)$ az

$$m = -f_h'(h(m)) \tag{2.38}$$

alapján fejezhető ki. Ez éppen az állapotegyenlet, amelyet $h(m)$-ra megoldva

$$h(m) = \beta^{-1}\text{arth}(m) - Jm. \tag{2.39}$$

Az $f_m(m)$ éppen a $h = 0$, rögzített m melletti szabadenergia, mert az mh tagot adtuk a mágneses térbeli szabadenergiához

$$\begin{aligned} f_m(m) &= \beta^{-1}m\ \text{arth}(m) - Jm^2 + \frac{1}{2}Jm^2 - \beta^{-1}\ln\left(\frac{2}{\sqrt{1-m^2}}\right) = \\ &= -\frac{1}{2}Jm^2 + \beta^{-1}\left[\frac{1+m}{2}\ln\frac{1+m}{2} + \frac{1-m}{2}\ln\frac{1-m}{2}\right]. \end{aligned} \tag{2.40}$$

Ha mármost az mh tagot levonjuk, s az állapotegyenletből számolt $m(h)$-t beírjuk, vissza kell kapnunk a $h \neq 0$ szabadenergiát, $f_h(h)$-t. Ez elérhető újabb Legendre transz-

formációval, ha $-\tilde{f}$ a transzformált függvény, és $-h$ az új változó, azaz

$$\tilde{f}(m,h) = f_m(m) - mh. \tag{2.41}$$

A Legendre-transzformáció $m(h)$ definíciós relációja éppen $\tilde{f}(m,h)$ extremum feltétele

$$\frac{\partial \tilde{f}}{\partial m} = f_m'(m) - h = 0, \tag{2.42}$$

s könnyen látható, hogy

$$\tilde{f}(m(h),h) = f_h(h). \tag{2.43}$$

Mindezek alapján $\tilde{f}(m,h)$ az adott m melletti szabadenergiának tekinthető. Ez különbözik a korábban kapott $f(m,h)$-tól!

Az $\tilde{f}(m,h)$ extremuma minimum, mert

$$\frac{\partial^2 \tilde{f}}{\partial m^2} = f_m''(m) = h'(m) = \frac{1}{m'(h)} = \frac{1}{\chi} > 0. \tag{2.44}$$

Az egy spinre eső energia (2.40,2.41,2.42) alapján

$$e = \frac{\partial(\beta f(h))}{\partial\beta} = \underbrace{-\frac{1}{2}Jm^2}_{\text{spinek kölcsönhatási energiája}} \underbrace{-mh}_{\text{külső térrel való kölcsönhatás}} \tag{2.45}$$

Az entrópia

$$s = \beta(e - f) = -\left[\frac{1+m}{2}\ln\frac{1+m}{2} + \frac{1-m}{2}\ln\frac{1-m}{2}\right], \tag{2.46}$$

amelyet a mágneses térrel az $m(h)$ helyettesítés révén fejezhetünk ki.

- $h = 0,\ T > T_c,\ m = 0:\ s = \ln 2$ (szabad spinek entrópiája)
- $h \neq 0,\ T \to \infty,\ m \to 0:\ s \to \ln 2$
- $T \to 0,\ m \to \pm 1:\ s \to 0$

A fajhő

$$c_v = \frac{\partial e}{\partial T} = -\beta^2\frac{\partial e}{\partial\beta} = -\beta^2\frac{\partial e}{\partial m}\frac{\partial m}{\partial\beta}, \tag{2.47}$$

$$\frac{\partial e}{\partial m} = -T_c m - h. \tag{2.48}$$

Deriválva β szerint az

$$m = g(m,h) = \operatorname{th}\beta(Jm + h) \tag{2.49}$$

egyenletet $\frac{\partial m}{\partial\beta}$ kifejezhető. Megmutatható (numerikusan), hogy c_v véges marad az átalakulási pont közelében, azaz nincs látens hő, vagyis a fázisátalakulás másodrendű, összhangban az 2.1 fejezet eredményeivel. A $h = 0$ esetén zérus hőmérséklet közelében

$$c_v \sim \frac{1}{T^2}\mathrm{e}^{-\frac{2T_c}{T}} \tag{2.50}$$

2.3. Többspin kölcsönhatás

Általános spinfüggő hamiltoni az egyes Ising spinek lineáris függvénye, azaz „multilineáris”

$$\mathcal{H}(\boldsymbol{s}) = -\sum_{p=2}^{\infty}\tilde{J}_p\sum_{(i_1\ldots i_p)}s_{i_1}\cdots s_{i_p} - h\sum_i s_i, \tag{2.51}$$

ahol $(i_1\ldots i_p)$ a spin-p-es "plakett"-eket jelöli, melyeken belül nem számít a sorrend. Spinátfordítási szimmetria páros p mellett valósul meg. A $\tilde{J}$-ket olymódon választjuk, hogy extenzív szabadenergiát kapjunk. Intuitíve látható, hogy egy spin által érzett lokális tér akkor $\mathcal{O}(1)$, ha $\tilde{J}_p N^{p-1} = J_p = \mathcal{O}(1)$. Ha $N \to \infty$

$$\begin{pmatrix} N \\ p \end{pmatrix} \approx \frac{N^p}{p\,!}, \tag{2.52}$$

ezzel

$$\tilde{J}_p \sum_{(i_1 \dots i_p)} s_{i_1} \cdots s_{i_p} = \frac{\tilde{J}_p}{p\,!} \sum_{\substack{i_1 \dots i_p \\ (i_k \neq i_l)}} s_{i_1} \cdots s_{i_p} = \frac{\tilde{J}_p}{p\,!} \left(\left(\sum_i s_i \right)^p + \mathcal{O}(N^{p-1}) \right). \tag{2.53}$$

Ezzel

$$\mathcal{H}(\boldsymbol{s}) = -N \sum_p \frac{J_p}{p\,!} \underbrace{\left(\frac{1}{N} \sum_i s_i \right)}_{m}{}^{p} - h \sum_i s_i. \tag{2.54}$$

(A mágneses térrel csatolt tag a $p = 1$ esetnek felel meg, sérti a spin átfordítási szimmetriát.) Vezessük be

$$\varphi(m) = \sum_{p=2}^{\infty} \frac{J_p}{p\,!} m^p, \tag{2.55}$$

ekkor

$$J_p = \varphi^{[p]}(0), \tag{2.56}$$

a szögletes zárójellel a p-edik deriválást jelöltük. Az állapotösszeg

$$\mathcal{Z} = \mathrm{Tr}\ \mathrm{e}^{\beta N \varphi\left(\frac{1}{N} \sum_i s_i\right) + \beta h \sum_i s_i + \mathcal{O}(1)}. \tag{2.57}$$

Illesszünk be egy Dirac-deltát a kifejezésbe,

$$\begin{aligned} \mathcal{Z} &= \mathrm{Tr} \int \frac{\mathrm{d}t \mathrm{d}m}{2\pi} N \exp \Big[\overbrace{itmN - it \sum_i s_i}^{m \text{ definíciója}} + \beta N \varphi(m) + N\beta h m \Big] = \\ &= N \int \frac{\mathrm{d}t \mathrm{d}m}{2\pi} \mathrm{e}^{N(itm + \beta\varphi(m) + \beta h m)} \left[2\mathrm{ch}\, it \right]^N . \end{aligned} \tag{2.58}$$

Bevezetve a $\tau = -i\beta^{-1}t$ változót és az

$$f(\tau, m) = \tau m - \varphi(m) - hm - \beta^{-1} \ln 2\mathrm{ch}\, \beta\tau \tag{2.59}$$

fügvényt, az állapotösszeg

$$\mathcal{Z} = N \int \frac{\mathrm{d}t\mathrm{d}m}{2\pi} \mathrm{e}^{-\beta N f(\tau,m)}. \tag{2.60}$$

Nyeregpont módszert alkalmazva

$$\partial_\tau f(\tau, m) = m - \mathrm{th}\, \beta\tau = 0 \quad \Rightarrow \quad m = \mathrm{th}\, \beta\tau \tag{2.61}$$

$$\partial_m f(\tau, m) = \tau - \varphi'(m) - h = 0 \quad \Rightarrow \quad \tau = \varphi'(m) + h \tag{2.62}$$

2.1. Házi feladat. *Miért alkalmazhatjuk a nyeregpont módszert a τ változót valósnak tekintve? (15%)*

A két feltételt összevetve kapjuk, hogy

$$m = \mathrm{th}\, \beta(\varphi'(m) + h) = g(m, h). \tag{2.63}$$

A szuszceptibilitásra korábban kapott formula segítségével

$$\chi = \frac{\frac{\partial g}{\partial h}}{1 - \frac{\partial g}{\partial m}} = \frac{\beta(1 - m^2)}{1 - \beta\varphi''(m)(1 - m^2)} \tag{2.64}$$

A stabilitás feltétele $\chi > 0$.

A szélsőérték meghatározásához először a (2.61) feltételt használjuk

$$\tau(m) = \beta^{-1}\mathrm{arth} m. \tag{2.65}$$

Behelyettesítve már csak m szerint extremizálandó függvényt kapunk

$$\begin{aligned} f(m) = f(\tau(m), m) = m\beta^{-1}\mathrm{arth}\, m - \varphi(m) - hm - \beta^{-1} \ln \frac{2}{\sqrt{1 - m^2}} = \\ = -\varphi(m) - hm + \beta^{-1} \left[\frac{1+m}{2} \ln \frac{1+m}{2} + \frac{1-m}{2} \ln \frac{1-m}{2} \right]. \end{aligned} \tag{2.66}$$

Ennek speciális esete az Ising modellre ($p = 2$) kapott, rögzített m melletti szabadenergia. Vezessük be az

$$s(m) = -\frac{1+m}{2} \ln \frac{1+m}{2} - \frac{1-m}{2} \ln \frac{1-m}{2} \tag{2.67}$$

jelölést, ezzel

$$f(m) = -\varphi(m) - hm - Ts(m). \tag{2.68}$$

Ebből az energia $e = -\varphi(m) - hm$ és az entrópia $s = s(m)$ az m fixpont behelyettesítésével.

Közvetlen számítással igazolható, hogy $f''(m) = 1/\chi$, azaz a termodinamikai stabilitás feltétele az, hogy m minimum legyen. Most általánosabb eljárást mutatunk, legyen

$$f(\tau, m) = \tau m - hm - f_\tau(\tau) - f_m(m). \tag{2.69}$$

Innen τ stacionárius pontja

$$\partial_\tau f(\tau, m) = m - f'_\tau(\tau) = 0 \qquad \Rightarrow \qquad \tau(m). \tag{2.70}$$

Látható, hogy

$$\tau'(m) = 1/f''_\tau(\tau). \tag{2.71}$$

Határozzuk meg $f(m) = f(\tau(m), m)$ görbületét az extremumban

$$\begin{aligned} f'(m) &= \tau' m + \tau - h - f'_\tau \tau' - f'_m = \tau - h - f'_m, \\ f''(m) &= \tau' - f''_m = \frac{1}{f''_\tau(\tau(m))} - f''_m(m). \end{aligned} \tag{2.72}$$

Másrészről

$$\chi = \frac{\partial m}{\partial h} = f''_\tau \frac{\partial \tau}{\partial h} \tag{2.73}$$

$$\tau = f'_m + h \tag{2.74}$$

$$\frac{\partial \tau}{\partial h} = f''_m \frac{\partial m}{\partial h} + 1 \tag{2.75}$$

$$\chi = f''_\tau \left(f''_m \chi + 1\right) = f''_\tau \left(1 - f''_\tau f''_m\right)^{-1}. \tag{2.76}$$

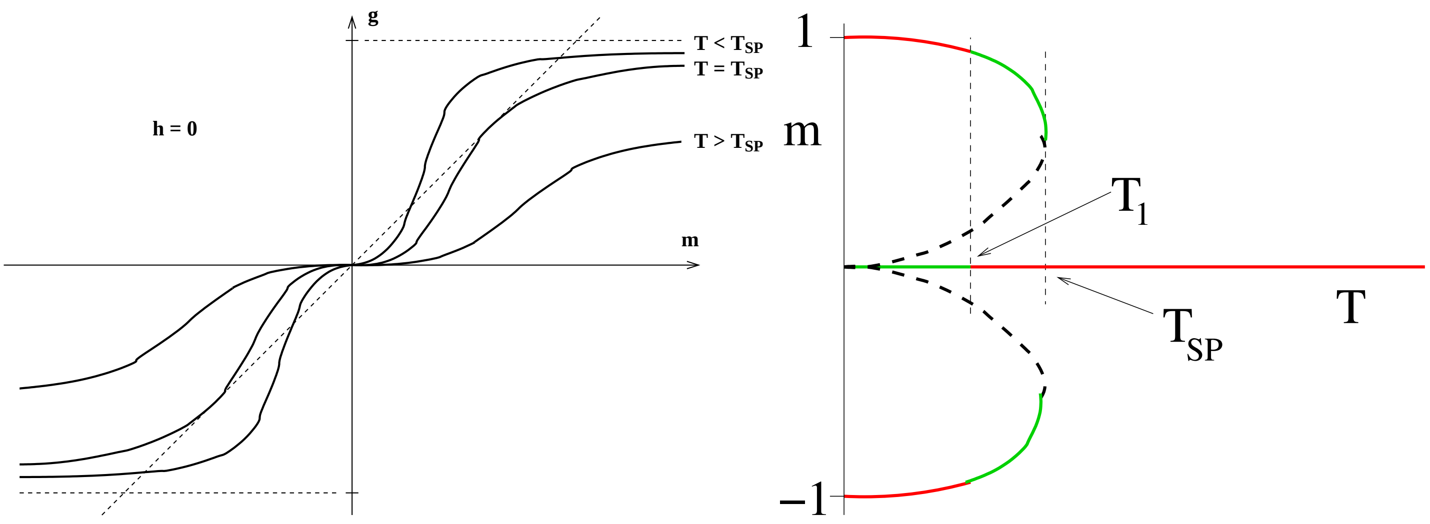
Tehát valóban $f''(m) = 1/\chi$, azaz m-ben minimumot keresünk.

Vegyük észre, hogy az $f(T)$ szabadenergia egyben a kémiai potenciál is, ugyanis a szabadenergia nem függ a térfogattól

$$F(T, V, N) = Nf(T) = N\mu. \tag{2.77}$$

Tekintsük példaképp a p-spin multiplikatív kölcsönhatást $\varphi(m) = m^p$ $(J_p = p!)$.
(a) Vizsgáljuk a páros p esetet $h = 0$ mellett:

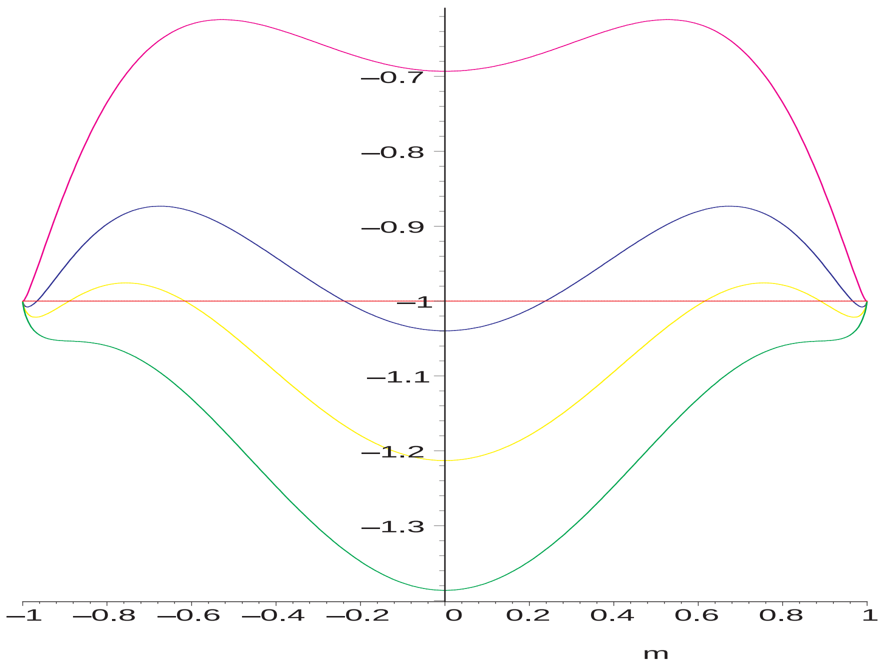
$$m = \operatorname{th} \beta p\, m^{p-1} = g(m, 0) \tag{2.78}$$



5. ábra. A $g(m, h = 0)$ különböző hőmérsékleteken páros p esetén (bal). T_{SP}-ben tangens bifurkáció történik (spinodális pont). Az $m(T)$ görbék $h = 0$ mellett (jobb). Folytonos piros jelzi a globálisan stabil, zöld a csak lokálisan stabil (metastabil) állapotokat, a szaggatott lokálisan is instabil.

Az 5. ábrán T_{SP}-nél tangens bifurkáció révén jön létre két új fixpont. A T_1 hőmérsékletet a kémiai potenciálok egyenlősége, $f(m) = f(0)$, határozza meg. A fázisátalakulás

elsőrendű, m-nek T_1-ben szakadása van.



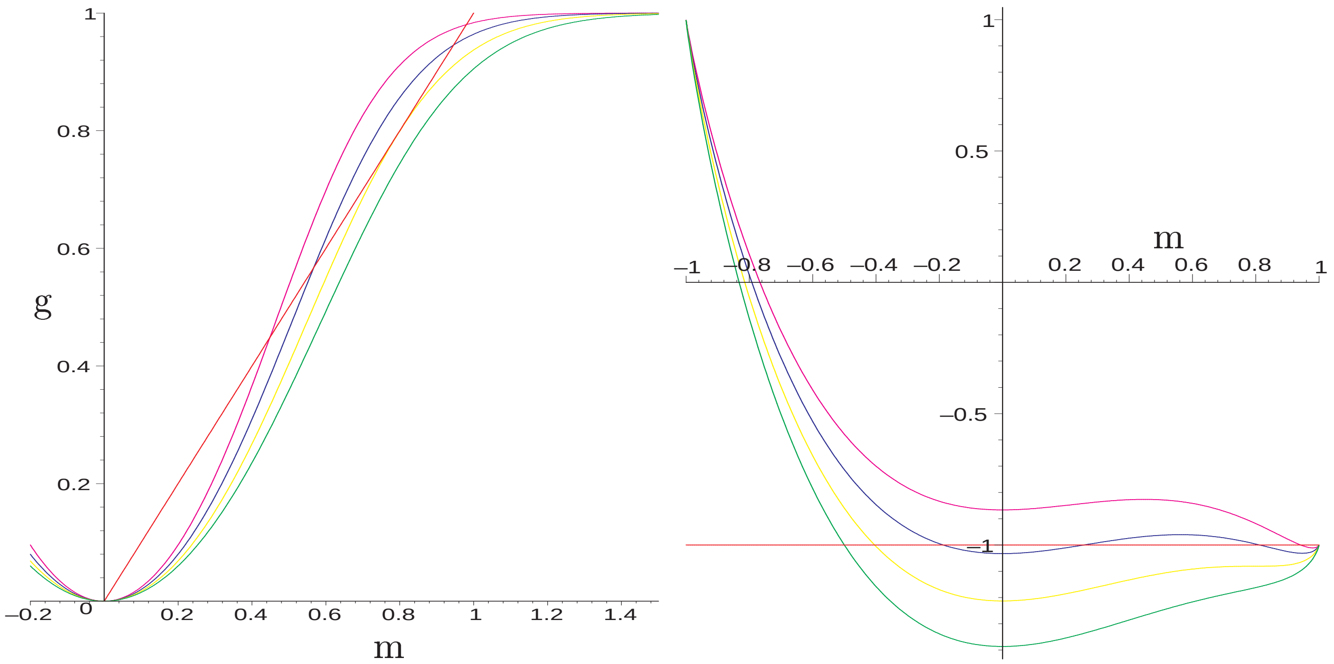
6. ábra. $h = 0$ esetén az $f(m)$ szabadenergia függvény különböző hőmérsékleteken (felfelé csökken). A $T = T_{\mathrm{SP}}$-ben (sárga) a nemzérus m mellett $f'(m) = 0$ egyben inflexiós pont, $f''(m) = 0$. A T_1-ben (lila) a minimumok (egyhez közeli) értéke azonos .

Milyen feltételnek tesz eleget T_{SP} és T_1? Az $m = g(m)$ mellett fenn kell állnia

$$\begin{aligned} T_{SP}: &\quad g'(m) = \beta\varphi''(m)(1-m^2) = 1 \\ T_1: &\quad f(m) = f(0) \qquad \Rightarrow \qquad \varphi(m) + T_1 s(m) = T_1 \ln 2, \end{aligned} \tag{2.79}$$

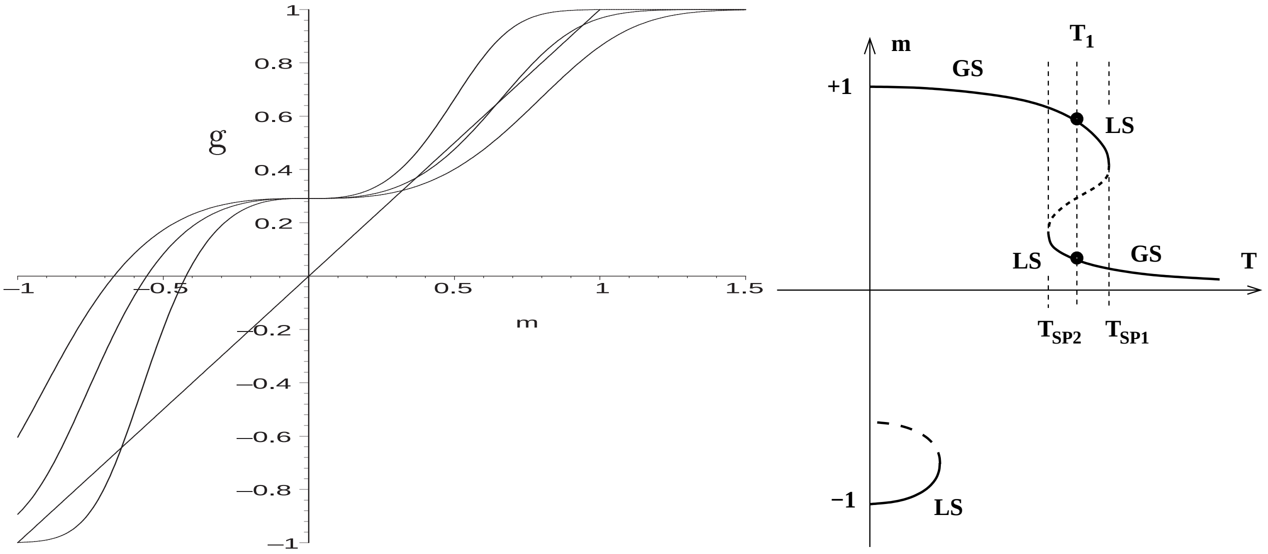
ahol (2.68)-t használtuk, innen a hőmérsékletek meghatározhatók.

(b) Ha p páratlan, akkor $f(m)$ nem invariáns a spintükrözésre, és $g(m,0)$ páros. Ld. a 7. ábra.



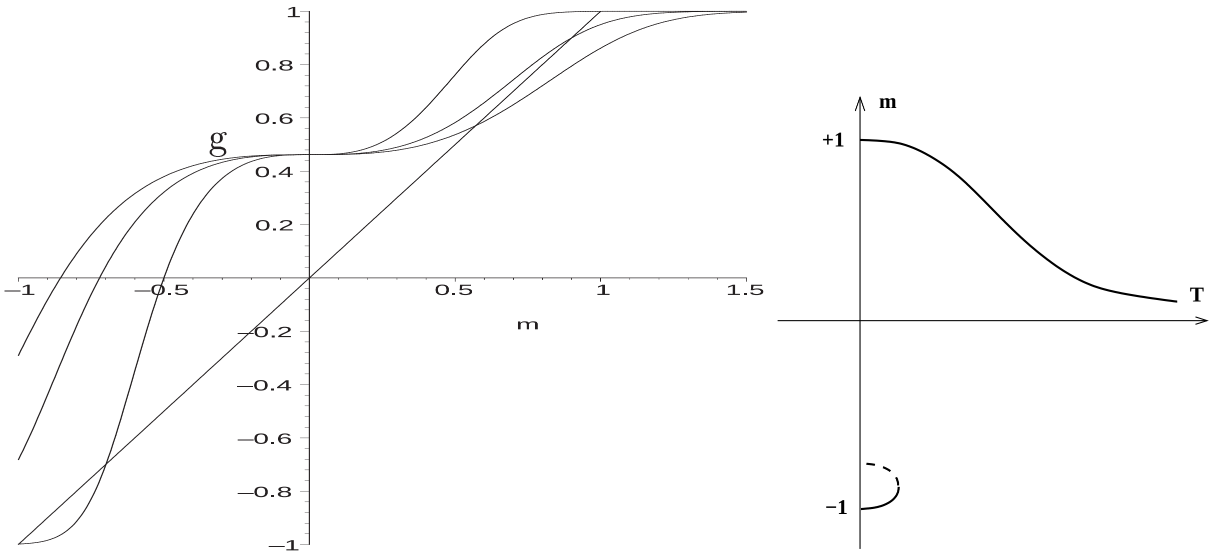
7. ábra. A $g(m,0)$ különböző hőmérsékleteken páratlan p és $h=0$ mellett (bal) és a szabadenergia függvény (jobb).

(c) Fázisátalakulás $h \neq 0$ esetén (p páros).



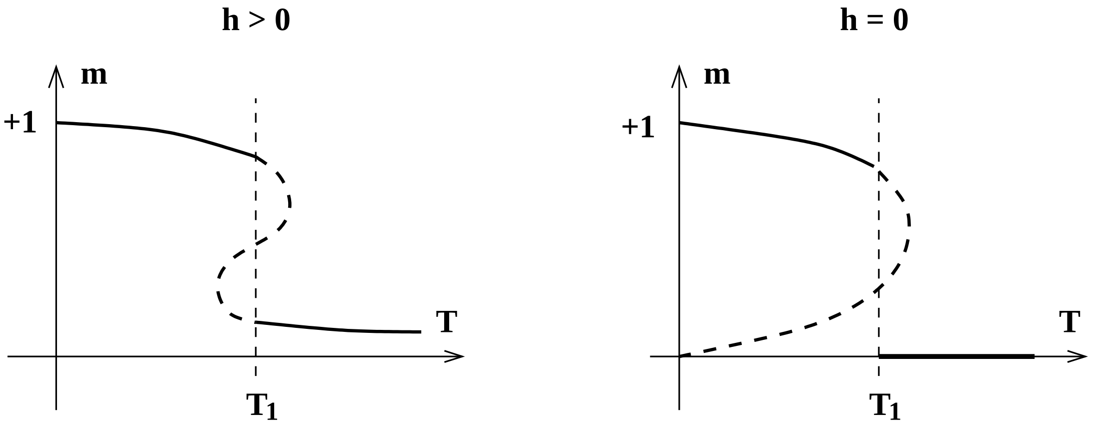
8. ábra. A $g(m, h)$ páros p és kis $h > 0$ mellett különböző hőmérsékleteken (bal), és az $m = g(m, h)$ megoldásai kis h mellett a hőmérséklet függvényében (jobb). A két spinodális hőmérséklet között a globálisan stabil mellet él egy metastabil állapot is. Az átalakulási hőmérséklet T_1, itt az alsó ás felső ág szabadenergiája azonos.

Ha azonban h elég nagy, akkor nincs átalakulás, ahogy az a 9. ábrán látható.



9. ábra. A $g(m, h)$ az m függvényében páros p és nagy h mellett különböző hőmérsékleteken (bal), és az $m = g(m, h)$ megoldásai a hőmérséklet függvényében (jobb). Nagy tér az átalakulást megszünteti. Az $m < 0$ metastabil állapot mindig megjelenik alacsony T mellett.

A $h \to 0$ határátmenet szinguláris, ahogyan az a 10. ábrán látható.



10. ábra. A rendparaméter hőmérsékletfüggése kis h térben és $h = 0$ mellett.

2.3.1. A kritikus pont meghatározása

A mágnesezettség ugrása a h növelésekor valamely h_c mellett zérussá zsugorodik, ehhez a T_c hőmérséklet tartozik. Ekkor a két spinodális hőmérséklet egybeesik a T_c-vel. Az alábbi feltételeknek kell teljesülniük a h_c, T_c pontban.

fixpont:

$$m = g(m,h) = \mathrm{th}\left(\beta(\varphi'(m) + h)\right) \tag{2.80}$$

spinodális feltétel:

$$\frac{\partial g}{\partial m} = 1 = \beta(1-g^2)\varphi''(m) = \beta(1-m^2)\varphi''(m) \tag{2.81}$$

inflexió:

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 g}{\partial m^2} = 0 \quad &= \quad \beta(1-m^2)\varphi'''(m) - 2\beta m\varphi''(m)\cdot\beta(1-m^2)\varphi''(m) \\ &= \quad \frac{\varphi'''(m)}{\varphi''(m)} - 2\beta m\varphi''(m). \end{aligned} \tag{2.82}$$

A fentiek megoldása a kritikus pont (T_c, h_c, m_c). A (2.82) alapján

$$T_c = \frac{2m_c\varphi''^2(m_c)}{\varphi'''(m_c)}. \tag{2.83}$$

Tekintsük a

$$\varphi(m) = m^p \tag{2.84}$$

esetet, ekkor

$$T_c = \frac{2p(p-1)}{p-2} m_c^p. \tag{2.85}$$

A (2.81) egyenlet alapján

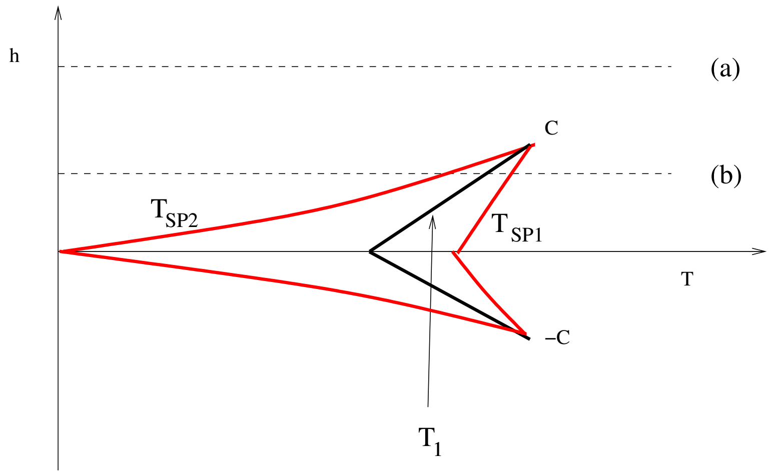
$$T_c = (1-m_c^2)p(p-1)m_c^{p-2}. \tag{2.86}$$

A két formulát egyenlővé téve kapjuk

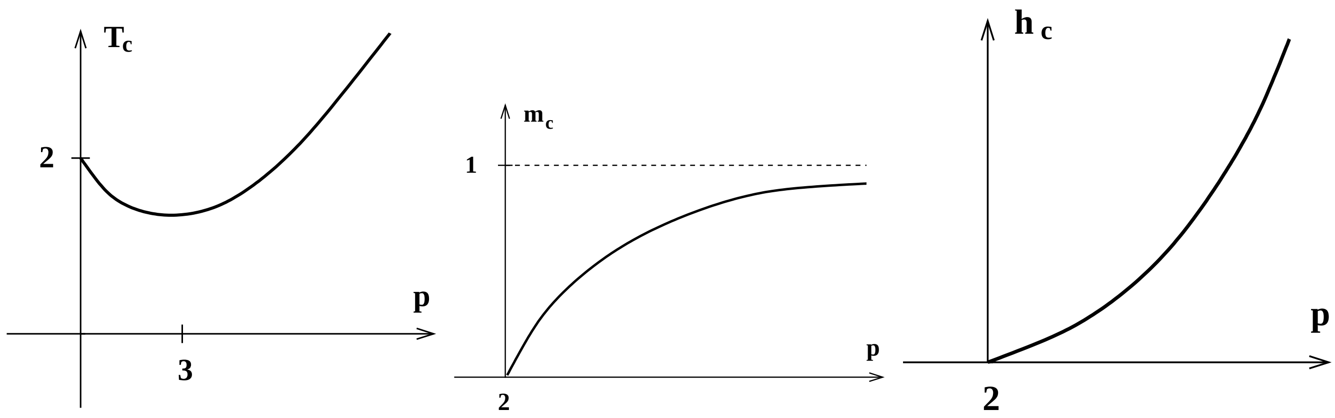
$$\begin{aligned} m_c =& \sqrt{\frac{p-2}{p}}, \\ T_c =& 2(p-1)\left(\frac{p-2}{p}\right)^{\frac{p-2}{2}}. \end{aligned} \tag{2.87}$$

Végül

$$\begin{aligned} h_c =& \beta_c^{-1} \operatorname{arth} m_c - \varphi'(m_c) = \\ =& (p-1)\left(\frac{p-2}{p}\right)^{\frac{p-2}{p}} \ln \frac{\sqrt{p}+\sqrt{p-2}}{\sqrt{p}-\sqrt{p-2}} - p\left(\frac{p-2}{p}\right)^{\frac{p-1}{2}} \end{aligned} \tag{2.88}$$



11. ábra. Fázisdiagramm páros p mellett. C és $-C$ a két kritikus pont. (a) nagy h esetén nincs, (b) kis tér mellett van átalakulás.



12. ábra. A kritikus hőmérséklet (bal), a kritikus mágnesezetteség (közép), és a kritikus tér (jobb), mint a p függvénye.

2.2. Házi feladat. *Készítsük el a p páros és páratlan esetekben a fázisátalakulást illusztráló ábrákat (itt a pároséit mutattuk be, azokat is ellenőrizzük). (35%)*

2.3.2. Határesetek: $p \gtrsim 2$ és $p \to \infty$

Közel a kritikus viselkedést mutató rendszerhez a rendparaméter ugrása kicsiny, ezért az elsőrendű átalakulás perturbatív módon leírható!

• $p = 2$ esetén az átalakulás folytonos, az m rendparaméterben perturbatív a kritikus hőmérséklet körül.

• $p = 2 + \epsilon$, $\epsilon \ll 1$ esetén T_1 közel van $J = 2! = T_c$-hez és m ugrása, Δm, kicsi. Legyen $h = 0$ (kis h mellett is perturbatíven számolhatunk) és $\varphi(m) = m^p$. A T_1 pontban

$$\Delta m = m = \mathrm{th}\,(\beta_1 \varphi'(m)) \tag{2.89}$$

$$\beta_1 \varphi'(m) = \frac{p}{T_1} m^{p-1} = \frac{T_c}{T_1}\left(1 + \frac{\epsilon}{2}\right) m^{1+\epsilon} \qquad \Rightarrow \tag{2.90}$$

$$\mathrm{th}\,(\beta_1 \varphi'(m)) \approx \frac{T_c}{T_1}\left(1 + \frac{\epsilon}{2}\right) m^{1+\epsilon} - \frac{1}{3} m^3 = m \qquad \Rightarrow \tag{2.91}$$

$$\frac{T_1}{T_c} = \frac{m^\epsilon \left(1 + \frac{\epsilon}{2}\right)}{1 + \frac{m^2}{3}}. \tag{2.92}$$

A kémiai potenciál, azaz a szabadenergia egyenlősége a két fázisban (2.68) alapján

$$f(m) = -\varphi(m) - T_1 s(m) = f(0) = -T_1 ln2 \tag{2.93}$$

$$s(m) \approx \ln 2 - \frac{m^2}{2} - \frac{m^4}{12} + \cdots \qquad \Rightarrow \tag{2.94}$$

$$f(m) - f(0) = 0 = -m^{2+\epsilon} + T_1 \left[\frac{m^2}{2} + \frac{m^4}{12}\right]. \tag{2.95}$$

Tehát

$$\frac{T_1}{T_c} = \frac{m^\epsilon}{1 + \frac{m^2}{6}}. \tag{2.96}$$

Vezető rendben, (2.92) felhasználásával

$$\begin{aligned} m =& \sqrt{3\epsilon} \\ \frac{T_1}{T_c} \approx& \epsilon^{\epsilon/2} \end{aligned} \tag{2.97}$$

A kritikus viselkedést mutató rendszerhez közel az elsőrendű átalakulás formulái tipikusan nem-analitikusak az eltérés paraméterében !

A páros $p \to \infty$ határesetben is expliciten leírható az átalakulás. $h = 0$ esetén a

$g(m) = \mathrm{th}\left(\beta p m^{p-1}\right)$ függvény a 13. ábrán látható. Az egyensúlyi helyzetek mindegyike lokálisan stabil, a szabadenergiákat kell összehasonlítani:

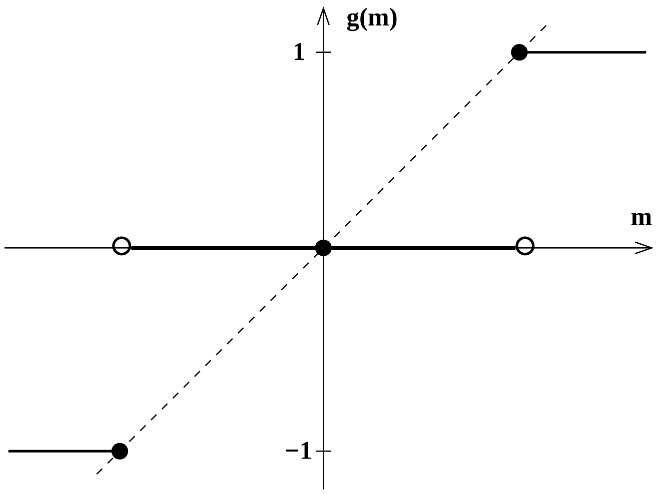
$$\begin{aligned} f(1) =& -1 \\ f(0) =& -T \ln 2 \end{aligned} \tag{2.98}$$

Látható, a $T_1 = \frac{1}{\ln 2}$ hőmérsékleten befagy az $|m| = 1$ ferromágneses alapállapotba. Fajlagos extenzív mennyiségek

$$\text{energia: } e(1) = -1 \text{ és } e(0) = 0,$$

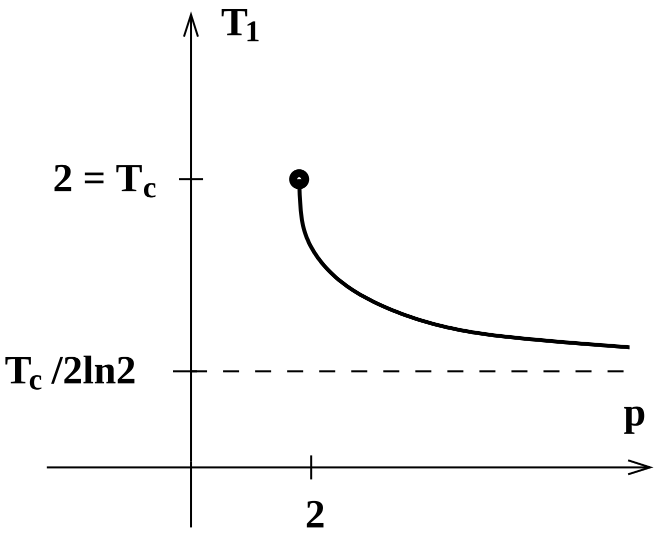
$$\text{entrópia: } s(1) = 0 \text{ és } s(0) = \ln 2.$$

2.3. Házi feladat. *Írjuk le a rendszert a $p \to \infty$ határesetben mágneses tér jelenlétében. (25%)*



13. ábra. A fixpont egyenlet a $p = \infty$ határesetben.

A $T_1(p)$ a két határeset ismeretében kvalitatíve meghatározható (14. ábra). A görbe függőleges meredekséggel indul, $T_1 \approx 2\epsilon^{(p-2)/2}$.



14. ábra. Az elsőrendű átalakulási hőmérséklet a p függvényében.

3. Rendezetlen rendszerek – hosszú hatótávolságú spinüvegek modellje

3.1. Véletlen energia modell (REM)

3.1.1. Ismeretlen kölcsönhatás – energiaszintjeivel adjuk meg a rendszert

Tekintsünk N darab spint, lehetséges konfigurációik száma 2^N. Nem a kölcsönhatást adjuk meg közöttük, hanem feltesszük, hogy az energiaeloszlás véletlenszerű. Gauss eloszlást véve, az energia extenzivitására figyelve, kapjuk

$$\rho(E) = \frac{\mathrm{e}^{-E^2/N}}{\sqrt{\pi N}}. \tag{3.1}$$

A ΔE-be eső állapotok számának átlaga

$$\langle \mathcal{N}(E) \rangle \approx 2^N \frac{\mathrm{e}^{-E^2/N}}{\sqrt{\pi N}} \Delta E. \tag{3.2}$$

Megjegyzés: $\Delta E \approx \mathcal{O}(N^\alpha)$ megfelel, ahol $0 < \alpha < 1$. Ez kisebb, mint az energiaskála, de elég nagy ahhoz, hogy statisztikát vehessünk.

Véges N mellett létezik egy maximális $|E| < E_0$ energia, amely fölött nincs állapot. Ehhez közeli tartományban az állapotok ritkák, az átlagos leírás nem alkalmazható.

A maximumra becslés adható annak alapján, hogy ott az állapotok számának várható értéke egységnyi nagyságrendű. Termodinamikai limeszben

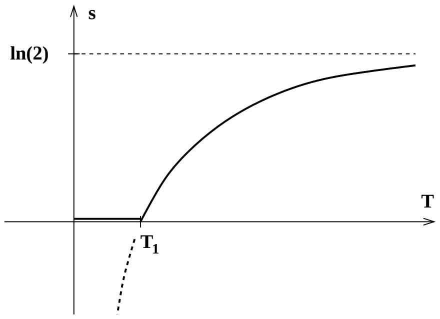
$$e_0 = E_0/N = \sqrt{\ln 2}. \tag{3.3}$$

A fajlagos entrópia (az állapotszám logaritmusa):

$$s = \ln 2 - e^2, \tag{3.4}$$

ahonnan

$$\frac{1}{T} = \frac{\partial s}{\partial e} = -2e \qquad \Rightarrow \qquad s = \ln 2 - \frac{1}{4T^2}. \tag{3.5}$$



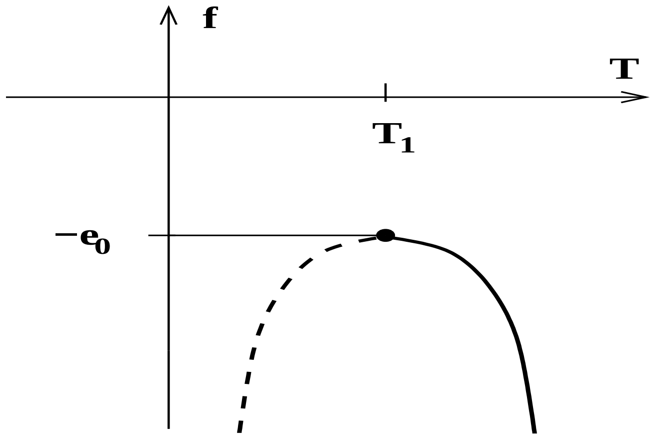
15. ábra. Entrópia a hőmérséklet függvényében.

Mivel az entrópia nem lehet negatív, ezért a függvény $T_1 = 1/2\sqrt{\ln 2}$-nél törik, miként az a 15. ábrán látható. Az rendszer befagy a $-E_0$ állapotba! Valóban, T_1 mellett az energia megegyezik a korábban becsült alapállapoti szinttel, ebben marad $T < T_1$ mellett is:

$$e_1 = e(T_1) = -\frac{1}{2T_1} = -\sqrt{\ln 2} = -e_0. \tag{3.6}$$

$T \leq T_1$ mellett $f = e - Ts = -e_0$, míg $T \geq T_1$ esetén

$$f = e - Ts = -\frac{1}{2T} - T\ln 2 + \frac{1}{4T} = -\frac{1}{4T} - T\ln 2. \tag{3.7}$$



16. ábra. Szabadenergia a hőmérséklet függvényében

A szabadenergia folytonos, ebből a szempontból az átalakulás másodrendűnek látszik.

A 16. ábra szerint a nagyobb szabadenergiájú állapotot követi a rendszer! Ez rendezetlen rendszerek sajátossága. Ne felejtsük azonban, hogy a szaggatott vonal nem igazi állapotokat jelez, ezért az a szabadenergiának csak formális analitikus folytatása.

Kanonikus leírás:

$$\begin{aligned}\mathcal{Z} =&2^N \int \mathrm{d}E\,\mathrm{e}^{-\frac{E^2}{N}-\beta E} = \mathrm{e}^{-\beta N f},\\ \beta f =& -\ln 2 - \frac{1}{4T^2}.\end{aligned} \tag{3.8}$$

Ez az előzőleg kapott nagy-T formula. Az entrópia nemnegativitása alapján innen is meghatározhatjuk az átalakulási hőmérsékletet.

Hallgatólagosan egy közelítést alkalmaztunk a fenti számítások során. Hol?

3.1.2. Mikroszkopikus modell

Véletlen, hosszú hatótávolságú, p-spin kölcsönhatás:

$$\mathcal{H} = -\sum_{(i_1,\ldots,i_p)} J_{i_1\cdots i_p} s_{i_1}\cdots s_{i_p} \tag{3.9}$$

A szumma az összes p-spin plakettre megy, azaz az összes $(i_1,\ldots i_p)$ kombinációra. A $J_{i_1\cdots i_p}$ együtthatókat adott $\rho(J)$ valószínűségeloszlás szerint választjuk, majd rögzítjük azokat. Ezt hívjuk „kvencselt" (quenched), befagyott rendezetlenségnek: termikusan

csak a spinek gerjeszthetők, kölcsönhatásaik viszont adottnak tekinthetők valamely hőmérsékleti tartományban. Ilyen rendszert kaphatunk amorf szilárd anyagban, amelyben a spinek távolságának ingadozása következtében a kölcsönhatások véletlenszerűnek tekinthetők. Becsüljük meg az energia nagyságrendjét

$$\left\langle \mathcal{H}^2 \right\rangle \approx \begin{pmatrix} N \\ p \end{pmatrix} \left\langle J^2 \right\rangle. \tag{3.10}$$

A $J_{i_1\cdots i_p}$-k függetlenek, ezért a kereszttagok kiestek. Beállítjuk a szórást egy J paraméter bevezetésével

$$\left\langle J^2 \right\rangle = \frac{1}{2} J^2 N \begin{pmatrix} N \\ p \end{pmatrix}^{-1}. \tag{3.11}$$

Ekkor az energia szórására a REM-beli nagyságrend adódik $\left\langle \mathcal{H}^2 \right\rangle \propto N$, azaz $E^2 \sim N$. Válasszuk a $J_{i_1\cdots i_p}$-k átlagát zérusnak (Gauss-eloszlás normáját nem írjuk ki)

$$\rho(J) \propto \mathrm{e}^{-\frac{J^2}{2\langle J^2\rangle}} \tag{3.12}$$

$$P(E) = \langle \delta(E-\mathcal{H}(\boldsymbol{s}))\rangle_{\mathrm{qu}} = \int \frac{\mathrm{d}u}{2\pi} \mathrm{e}^{iuE} \left\langle \mathrm{e}^{-iu\mathcal{H}} \right\rangle_{\mathrm{qu}} \tag{3.13}$$

Itt a "qu" index a kvencselt, azaz a véletlen kölcsönhatásokra vett átlagot jelöli. Mivel $s^2 = 1$, azért

$$\left\langle \mathrm{e}^{-iu\mathcal{H}} \right\rangle_{\mathrm{qu}} = \prod_{(i_1 \cdots i_p)} \exp\left(-\frac{1}{2}u^2 \left\langle J^2 \right\rangle\right) = \mathrm{e}^{-\frac{1}{4}u^2 J^2 N}, \tag{3.14}$$

ahonnan

$$P(E) \propto \mathrm{e}^{-\frac{E^2}{J^2 N}}. \tag{3.15}$$

Az energiaeloszlás p-től és az $\boldsymbol{s}$ konfigurációtól független! Vizsgáljuk a $P(E_1, E_2)$ eloszlást.

$$P(E_1, E_2) = \left\langle \delta(E_1 - \mathcal{H}(\boldsymbol{s}^{(1)}))\delta(E_2 - \mathcal{H}(\boldsymbol{s}^{(2)})) \right\rangle_{\mathrm{qu}}. \tag{3.16}$$

Ezt Fourier-transzformálva, az $\boldsymbol{u}$ és $\boldsymbol{E}$ kétdimenziós vektor jelöléssel

$$\begin{aligned} &\int \frac{\mathrm{d}u_1 \mathrm{d}u_2}{4\pi^2}\, \mathrm{e}^{i(u_1 E_1 + u_2 E_2)} \prod_{(i_1 \cdots i_p)} \left\langle \mathrm{e}^{-iJ_{i_1 \ldots i_p}\left(u_1 s^{(1)}_{i_1} \cdots s^{(1)}_{i_p} + u_2 s^{(2)}_{i_1} \cdots s^{(2)}_{i_p}\right)} \right\rangle_{\mathrm{qu}} = \\ &= \int \frac{\mathrm{d}u_1 \mathrm{d}u_2}{4\pi^2}\, \mathrm{e}^{i\boldsymbol{u}\,\boldsymbol{E}} \times \\ &\times \prod_{(i_1 \cdots i_p)} \exp\left[-\frac{J^2 N}{4} \begin{pmatrix} N \\ p \end{pmatrix}^{-1} \left(u_1 s^{(1)}_{i_1} \cdots s^{(1)}_{i_p} + u_2 s^{(2)}_{i_1} \cdots s^{(2)}_{i_p}\right)^2\right] \end{aligned} \tag{3.17}$$

A kereszttag definiálja a q átfedést

$$\begin{pmatrix} N \\ p \end{pmatrix}^{-1} \sum_{(i_1 \cdots i_p)} \left(s^{(1)}_{i_1} s^{(2)}_{i_1} \ldots s^{(2)}_{i_p} s^{(2)}_{i_p}\right) = \underbrace{\left(\frac{1}{N}\sum_i s^{(1)}_i s^{(2)}_i\right)^p}_{q} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{N}\right). \tag{3.18}$$

Az $\mathcal{O}\left(\frac{1}{N}\right)$ olyan tagokat jelöl, amelyekben van egyező index. Az eredmény tehát

$$\int \frac{\mathrm{d}^2 u}{4\pi^2}\, \mathrm{e}^{i\boldsymbol{u}\,\boldsymbol{E}}\, \mathrm{e}^{-\frac{J^2 N}{4}\,\boldsymbol{u}\,\mathbf{M}\,\boldsymbol{u}}, \tag{3.19}$$

ahol

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} 1 & q^p \\ q^p & 1 \end{pmatrix}. \tag{3.20}$$

Tudnivaló: az $\mathbf{A}$ kovariancia mátrixszal adott Gauss-eloszlásra

$$p(\boldsymbol{x}) \propto \mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\,\boldsymbol{x}\,\mathbf{A}^{-1}\,\boldsymbol{x}} \qquad \Rightarrow \qquad \langle x_i x_j \rangle = A_{ij}, \tag{3.21}$$

ugyanis

$$-\frac{1}{2}\langle x_i x_j \rangle = \frac{\partial}{\partial A_{ij}^{-1}} \ln \int \mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\,\boldsymbol{x}\,\mathbf{A}^{-1}\,\boldsymbol{x}}\, \mathrm{d}^d x = -\frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial A_{ij}^{-1}} \ln \det \mathbf{A}^{-1} = -\frac{1}{2} A_{ij}. \tag{3.22}$$

Tehát $P(E_1, E_2)$ Gauss-eloszlás, ahol $\frac{J^2 N}{2} \boldsymbol{M}$ a kovariancia mátrix

$$\langle E_i E_j \rangle = \frac{J^2 N}{2} M_{ij}. \tag{3.23}$$

Ha $p \to \infty$, akkor $|q| < 1$ esetén $\langle E_i E_j \rangle \to 0$, azaz E_1 és E_2 függetlenné válnak. Tehát ebben a limeszben megkapjuk a véletlen energia modellt. A véletlen kölcsönhatások eloszlásfüggvénye páros, ennek tulajdonítható, hogy $T < T_c$ mellett a befagyott mágnesezettség $m_1 = 0$.

3.1.3. REM mágneses térben

$$\mathcal{H} = -\sum_{(i_1,\ldots,i_p)} J_{i_1\ldots i_p} s_{i_1} \cdots s_{i_p} - h \underbrace{\sum_i s_i}_{M} \tag{3.24}$$

Az energiaszintek eloszlása adott mágnesezettség mellett az előzőek alapján

$$P(E|M) \propto \mathrm{e}^{-\frac{(E+hM)^2}{NJ^2}}. \tag{3.25}$$

Legyen N_+ a fölfelé, N_- a lefelé mutató spinek száma. Ekkor

$$N = N_+ + N_-, \qquad M = N_+ - N_- \qquad \Rightarrow \qquad N_\pm = \frac{N \pm M}{2}, \tag{3.26}$$

$$E = Ne, \qquad M = Nm. \tag{3.27}$$

Az M-független energiaeloszlást M-re összegezve kapjuk

$$P(E) \propto \sum_{N_+} \begin{pmatrix} N \\ N_+ \end{pmatrix} \mathrm{e}^{-\frac{(E+hM)^2}{NJ^2}} = \sum_{M=-N}^{N} \mathrm{e}^{Ns(m,e)}, \tag{3.28}$$

ahol a Stirling-formulát használva, nagy N-re

$$s(m,e) = -\frac{(1+m)}{2}\ln\frac{1+m}{2} - \frac{1-m}{2}\ln\frac{1-m}{2} - \frac{(e+hm)^2}{J^2}. \qquad (3.29)$$

Mivel $s(m,e)$ az állapotszám logaritmusa, ezért az entrópiával azonosíthatjuk. Az összeget nyeregpont módszerrel, azaz a maximális $s(m,e)$ értékkel számítjuk

$$\frac{\partial s}{\partial m} = 0 \qquad (3.30)$$

innen az állapotegyenlet

$$\operatorname{arth} m + \frac{2(e+hm)h}{J^2} = 0, \quad \text{vagy} \quad m = -\operatorname{th}\frac{2h}{J^2}(e+hm). \qquad (3.31)$$

A maximumhelyen

$$T^{-1} = \frac{\partial s}{\partial e} + \frac{\partial s}{\partial m}\frac{\partial m}{\partial e} = \frac{\partial s}{\partial e} = -\frac{2(e+hm)}{J^2}, \qquad (3.32)$$

ezért

$$e = -\frac{J^2}{2T} - hm, \qquad (3.33)$$

innen (3.31)-ből kapjuk a hőmérséklettel kifejezett állapotegyenletet

$$m = \operatorname{th}\frac{h}{T}. \qquad (3.34)$$

Ennek alapján a h, T változókkal kifejezhetjük a fajlagos energiát, entrópiát, és szabadenergiát

$$\begin{aligned} e &= -\frac{J^2}{2T} - h\operatorname{th}\frac{h}{T}, \\ s &= \ln 2\operatorname{ch}\frac{h}{T} - \frac{J^2}{4T^2} - \frac{h}{T}\operatorname{th}\frac{h}{T}, \\ f &= -\frac{J^2}{4T} - T\ln 2\operatorname{ch}\frac{h}{T}. \end{aligned} \qquad (3.35)$$

Az entrópia diszkrét rendszerben nem lehet negatív, ezért a $T_1(h)$ hőmérsékleten, amelyet az $s=0$ feltétel határoz meg, a rendszer befagy. A fenti képletek csak a $T \geq T_1$ tartományban érvényesek.

Ha $T \leq T_1$, akkor f hőmérsékletfüggetlen

$$s = -\frac{\partial f}{\partial T} = 0. \qquad (3.36)$$

A $T = T_1$határesetben a magashőmérsékleti formula is használható, innen T_1 kiszámítható. Másodrendig

$$T_1(h) = \frac{J}{2\sqrt{\ln 2}}\left(1 + \frac{h^2}{J^2}\right) + \ldots. \tag{3.37}$$

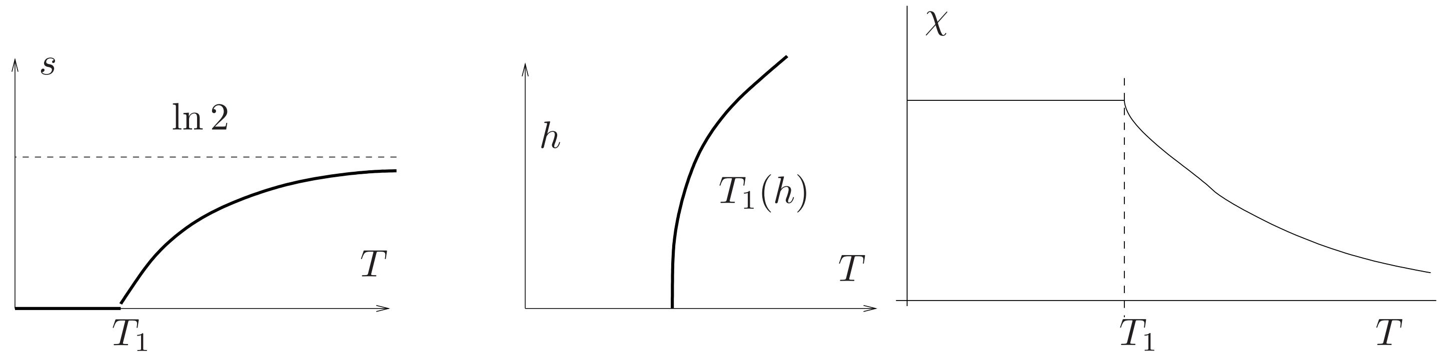
A T_1 alatt

$$f(T < T_1) = \text{const.} = -\frac{J^2}{4T_1} - T_1 \ln 2\text{ch}\,\frac{h}{T_1} = e - Ts = e = e_{\min}, \tag{3.38}$$

az alapállapoti energia. A mágnesezettség befagy T_1 alatt, s a szuszceptibilitás T_1-ben törik

$$m = \begin{cases} \text{th}\,\frac{h}{T}, & T > T_1 \\ \text{th}\,\frac{h}{T_1}, & T < T_1 \end{cases} \quad \Rightarrow \quad \chi_0 = \left.\frac{\partial m}{\partial h}\right|_{h=0} = \begin{cases} 1/T, & T > T_1 \\ 1/T_1, & T < T_1 \end{cases}. \tag{3.39}$$

Az átalakulás folytonos m-ben, s a szabadenergia nem törik, ez másodrendű átalakulásra utal. Viszont a szuszceptibilitás nem divergál, ez elsőrendű átalakulások sajátja.



17. ábra. Entrópia a hőmérséklet függvényében (bal tábla), a $T_1(h)$ (közép), és a szuszceptibilitás a hőmérséklet függvényében (jobb).

Vessük eredményünket össze a rendezett p-spin modell nagy p limeszével. A 2.3.2 házi feladat megoldását előlegezve m diszkontinuus

$$m = \begin{cases} \text{th}\,\frac{h}{T}, & T > T_1 \\ 1, & T < T_1 \end{cases} \quad \Rightarrow \quad \chi_0 = \left.\frac{\partial m}{\partial h}\right|_{h=0} = \begin{cases} \frac{1}{T}, & T > T_1 \\ 0, & T < T_1 \end{cases} \tag{3.40}$$

ahol T_1 a rendezett rsz. küszöbhőmérséklete. "Szokásos" elsőrendű átalakulás.

4. Rendezetlen rendszerek – Tiszta és kevert állapotok

4.1. Különböző átlagok

Áttekintjük a rendezetlen, kvencselt rendszerekben képezhető különböző átlagolásokat.

A Gibbs-Boltzmann vagy termális átlag a szokásos hőmérsékleti átlagolást jelenti

$$\langle A \rangle_{\mathrm{th}} = \frac{1}{\sum_{\{s\}} e^{-\beta H(\{s\})}} \sum_{\{s\}} A e^{-\beta H(\{s\})}.$$

A lokális mágnesezettség például:

$$m_i = \langle s_i \rangle_{\mathrm{th}} .$$

Térbeli átlag a rendszer minden rácspontjára vett átlagolás

$$\overline{A} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} A_i.$$

Egy spinkonfigurációhoz tartozó mágnesezettség

$$\overline{s} = \frac{1}{N} \sum_i s_i,$$

amely véletlen változó a Gibbs-Boltzmann sokaságon.

Kvencselt rendezetlenség esetén a $J_{\{i\}}$ csatolások valamely $\rho(J_{\{i\}})$ eloszlást követnek. Értéküket ezután egy rendszerben „befagyott"-nak tekintjük. A kvencselt (quenched) átlag a különböző kvencselt rendszerek sokaságára vett középérték

$$\langle A \rangle_{\mathrm{qu}} = \int \mathrm{D}J_{\{i\}}\, \rho(J_{\{i\}}) A.$$

4.2. Önátlagolás és a replika módszer

Hogyan átlagoljuk a termodinamikai mennyiségeket? Ha az állapotösszeget átlagoljuk, az azt jelenti, hogy a szabadenergiát a következő módon számítjuk

$$f \stackrel{?}{=} -\frac{1}{\beta} \ln \langle Z_J \rangle_{\mathrm{qu}} .$$

Ez az annealed átlag. Könnyű számítani, de kvencselt rendszerben általában nem, csak speciális esetekben, gyakran pl. magas hőmérsékletek esetén használható.

Bontsuk a rendszert n darab egymással gyengén kölcsönható részrendszerre. A kölcsönhatás elhanyagolható, ha a korrelációs hossz jóval kisebb, mint a részrendszer mérete, amely a kritikus ponttól távol, rövid hatótávú kölcsönhatásnál nyilvánvalóan teljesül.

$i=1$	$i=2$	...		
		F_i		F_j
				$i=n$

18. ábra. Részrendszerekre bontás. Az egyes alrendszerek különböző kvencselt $\{J\}$ realizációkat tartalmaznak.

A szabadenergia extenzív, ezért

$$F = \sum_{i=1}^{n} F_i .$$

A részrendszerek n száma egyrészt kellően nagy legyen, hogy a rájuk való összegzés a realizációk felett átlagnak feleljen meg, másrészt az egyes, N/n részecskéből álló részrendszerek is makroszkopikusnak legyenek tekinthetők

$$N \gg n \gg 1 .$$

A részrendszerek szabadenergiáját kifejezve a fajlagos szabadenergiával $F_i = \frac{N}{n} f_i$. Ezek alapján a teljes rendszer fajlagos szabadenergiája

$$f = \frac{F}{N} = \sum_{i=1}^{n} \frac{f_i}{n} = \left(\frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} f_i \right) \approx \langle f \rangle_{\mathrm{qu}} ,$$

azaz a szabadenergia jól közelíthető a kvencselt átlagával. Az ilyen rendszereket önátlagolónak nevezzük. Az önátlagolás a szabadenergia extenzivitásán alapult, nemcsak rövid hatótávolságú rendszerekben teljesül. Rigorózus bizonyítása nehéz feladat, csak néhány spinüveg modellben történt meg.

A logaritmus átlagolását

$$-\beta f = \frac{1}{N} \langle \ln Z \rangle_{\mathrm{qu}}$$

a replika módszer segítségével végezhetjük. Használjuk fel az alábbi relációt

$$\ln x = \lim_{n\to 0} \frac{\mathrm{d}x^n}{\mathrm{d}n} = \lim_{n\to 0} \frac{x^n - 1}{n},$$

ahonnan

$$\langle \ln x \rangle = \lim_{n\to 0} \frac{\langle x^n \rangle - 1}{n} = \lim_{n\to 0} \frac{\ln\langle x^n \rangle}{n}.$$

Innen kapjuk a szabadenergia replika módszer szerinti kifejezését

$$-\beta F = \lim_{n\to 0} \frac{1}{n}(\langle Z^n \rangle_{\mathrm{qu}} - 1) = \lim_{n\to 0} \frac{1}{n} \ln \langle Z^n \rangle_{\mathrm{qu}} .$$

Termodinamikai limeszben $N \to \infty$, gyakorlati számításokban megfordítjuk a határátmenetek sorrendjét. A fajlagos szabadenergia

$$f = \lim_{n\to 0} f(n), \tag{4.1}$$

$$f(n) = -\frac{1}{\beta n} \lim_{N\to\infty} \frac{1}{N} \ln \langle Z^n \rangle_{\mathrm{qu}} . \tag{4.2}$$

Ez lényegében azt jelenti, hogy aszimptotikusan

$$\langle Z^n \rangle_{\mathrm{qu}} \approx \exp\left(-nN\beta f\right).$$

Replikák az azonos $\{J\}$ realizációjú rendszerek. Amíg n egész, nem kölcsönható n replika állapotösszege Z^n. A kvencs átlagolással közöttük kölcsönhatás generálódik, ennek kezelése lesz a technikai feladat.

4.3. Tiszta állapotok

Hagyományos értelemben egyensúlyi termodinamikai állapot a Boltzmann-Gibbs súllyal ellátott konfigurációs tér. Néha ennek leszűkítésére nyilvánvalóan szükség van, például szimmetriasértés esetén, amely esetben a sértett szimmetriájú, azaz szűkített állapot a fizikai.

Általában állapotnak tekinthetünk a konfigurációs téren értett valamely valószínűségeloszlást. Ezt részekre szűkíthetjük olymódon, hogy a részek (egyre normált) súlyokkal vesznek részt az eredeti állapotban. Egy konfiguráció valószínűségét a teljes állapotban úgy kapjuk, hogy a szűkített állapotokhoz tartozó valószínűségeknek a szűkített állapotok súlyaival vett lineárkombinációját vesszük.

Tiszta állapotról akkor beszélünk, ha a fajlagos rendparaméter, pl. spinrendszerben az $\overline{s} = \frac{1}{N}\sum_i s_i$ ingadozása a termodinamikai limeszben eltűnik:

$$\langle \overline{s}^2 \rangle - \langle \overline{s} \rangle^2 = \frac{1}{N^2} \sum_{i,j} \left(\langle s_i s_j \rangle - \langle s_i \rangle \langle s_j \rangle \right) \underset{N\to\infty}{\longrightarrow} 0.$$

Itt $\langle \ldots \rangle$ az adott állapotra vett (esetleg szűkített) termális átlagot jelenti. Ennek elégséges feltétele, ha $|i-j| \to \infty$ estetén a spinek dekorrelálódnak, azaz

$$\langle s_i s_j \rangle \underset{|i-j|\to\infty}{\longrightarrow} \langle s_i \rangle \langle s_j \rangle.$$

A dekorrelációból viszont az eredetinél erősebb feltétel következik

$$\frac{1}{N^2} \sum_{ij} \left(\langle s_i s_j \rangle - \langle s_i \rangle \langle s_j \rangle \right)^2 \to 0.$$

4.4. Kevert állapotok

Címkézzük a tiszta állapotokat α-val, a jelöljük az α-ik tiszta állapotra szűkített termális átlagot $\langle \ldots \rangle_\alpha$-val. Tiszta állapotok valamely

$$\langle A \rangle = \sum_\alpha p_\alpha \langle A \rangle_\alpha,$$

valószínűségi kombinációját kevert állapotnak nevezzük. A Boltzmann–Gibbs-állapot keverék, ha a termális átlag bontható így fel

$$\langle A \rangle_{\mathrm{th}} = \sum_\alpha p_\alpha \langle A \rangle_\alpha, \quad \text{ahol} \quad p_\alpha = \frac{e^{-\beta F_\alpha}}{\sum_\alpha e^{-\beta F_\alpha}}.$$

Mivel $F_\alpha = N f_\alpha = \mathcal{O}(N)$, a releváns járulékok azokból az állapotokból származnak, amelyek fajlagos szabadenergiája felveszi a minimális értéket

$$f = \min_\alpha f_\alpha,$$

a nagyobb f_α ugyanis N-ben exponenciálisan eltűnő relatív súlyt ad. Ha a végesméret korrekció N-ben hatványfüggvény, akkor a releváns F_α-k a következő alakúak,

$$F_\alpha = Nf + N^{\eta_\alpha} g_\alpha^J,$$

ahol $\eta_\alpha < 1$. Extenzivitására alapozva feltettük, hogy a szabadenergia önátlagoló, azaz f nem függ a $\{J\}$ csatolások realizációjától, a g_α^J korrekció J-függését azonban általában nem hanyagolhatjuk el. Ekkor a tiszta állapotok súlyai

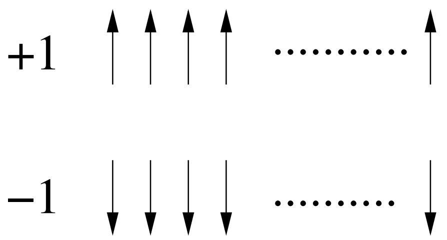
$$p_\alpha^J = \frac{e^{-\beta N^\eta g_\alpha^J}}{\sum_\alpha e^{-\beta N^\eta g_\alpha^J}},$$

ahol a közös szabadenergiát tartalmazó Boltzmann–Gibbs-faktorral egyszerűsítettünk, s az összegben csak a legkisebb $\eta = \min_\alpha \eta_\alpha$ exponensű tiszta állapotok maradtak meg.

4.5. Triviális példa

Vizsgáljuk az Ising ferromágnest $T = 0$-n külső tér nélkül. Ilyenkor a Boltzmann–Gibbs-sokaság a két homogén konfiguráció egyenként 1/2 súllyal. Az állapotot leszűlítjük, ha külön állapotnak tekintjük a két konfigurációt – jelöljük $\langle A\rangle_\pm$-szal az A mennyiség két

alapállapotbeli értékét (az „átlagolás” most a + vagy − konfigurációbeli értéket jelenti).



19. ábra. Ising ferromágnes alapállapotban.

A szűkített alapállapotokban

$$\langle s_i s_j\rangle_\pm = 1, \qquad \langle s_i\rangle_\pm = \pm 1,$$

tehát a mágnesezettség varianciája azonosan zérus

$$\langle s_i s_j\rangle_\pm - \langle s_i\rangle_\pm \langle s_j\rangle_\pm = 0.$$

Ezért mindkét konfiguráció tiszta állapot. A Gibbs–Boltzmann állapotbeli átlag

$$\langle A\rangle_{\rm th} = \frac{1}{2}(\langle A\rangle_+ + \langle A\rangle_-),$$

ezért

$$\langle s_i s_j \rangle_{\text{th}} = 1, \quad \langle s_i \rangle_{\text{th}} = 0.$$

Innen látszik, hogy a Gibbs-Boltzmann állapot nem tiszta állapot. Általában, $0 < T < T_c$ mellett két tiszta állapot létezik, és ezek keveréke a Boltzmann–Gibbs állapot.

A tiszta állapotokat úgy tekinthetjük, mint a kevert állapotok ergodikus komponenseit, azaz az egyes tiszta állapotok terét járja be idővel a rendszer. A különböző tiszta állapotok között nagy N mellett lelassul, a limeszben megszűnik a közlekedés.

5. Átfedések és rendparaméterek

5.1. Állapotok átfedései

Míg rendezett rendszerekben a mágnesezettség (szúkített) termodinamikai átlaga általában homogén

$$\langle s_i \rangle_{\text{th}} = m_i \equiv m, \tag{5.1}$$

addig rendezetlen rendszerekben a lokális mágnesezettség fluktuációja lényeges lehet. Például elképzelhető, hogy $m = \overline{m_i} = 0$, de az egyes spinekre $m_i \neq 0$.

20. ábra. Lokális mágnesezettség véges hőmérsékleten, szimmetriasértő állapotban rendezett Ising (a) Heisenberg (b) ferromágnesben. Az (a) esetben a sértett szimmetria diszkrét, a (b) esetben folytonos.

21. ábra. Rendezetlen rendszerben a mágesezettség térátlaga lehet zérus, miközben lokálisan különböző értékeket vesz fel, Ising (c) Heisenberg (d). Ilyen a spinüveg állapot.

Ennek jellemzésére vezessük be a lokális mágnesezettségek második momentumát

$$q = \frac{1}{N}\sum_i m_i^2 = \overline{m_i^2}.$$

Ezt a lokális mágnesezettségek „önátfedés”-ének nevezhetjük. A q-nak az m^2-től való eltérése jellemzi a lokális mágnesezettségek helyről helyre történő fluktuációját, ezért az üveg állapot rendparaméterének tekinthetjük. Legyen $m_i^\alpha = \langle s_i \rangle_\alpha$ egy adott α tiszta

állapotra, s a keverékre

$$m_i = \sum_\alpha p_\alpha m_i^\alpha.$$

Két tiszta állapot átfedését

$$q_{\alpha\beta} = \overline{m_i^\alpha m_i^\beta}$$

méri, míg a fent bevezetett q a keverékbeli átfedés

$$q = \sum_{\alpha\beta} p_\alpha p_\beta q_{\alpha\beta}.$$

NB. Ha a helyátlag kvencs átlagot állít elő, akkor $q_{\alpha\beta}$ nem függ a csatolások realizációjától. Mivel azonban a p_α súlyok a $\{J\}$ realizációtól függnek (nem jelöltük külön), azért általában q függhet azoktól. Ilyenkor q^J nem önátlagoló, s a $\{J\}$-független mennyiséget kvencs átlagolással kapjuk

$$q = \left\langle q^J \right\rangle_{\mathrm{qu}}. \tag{5.2}$$

5.2. Edwards–Anderson rendparaméter

Tekintsük a

$$\lim_{t\to\infty}\lim_{t_0\to\infty}\lim_{N\to\infty}\langle s_i(t_0)s_i(t_0+t)\rangle_{\mathrm{th}} \tag{5.3}$$

átlagot. Az $N\to\infty$ termodinamikai limesz miatt a dinamika egy ergodikus komponensre korlátozott, amelyben a kellően nagy t_0 idő alatt egy tiszta α állapotba relaxál. Az α-n belül a $t\to\infty$ miatt a spinek dekorrelálódnak, s az α-ra szűkített átlaguk faktorizálódik. A $\langle\ldots\rangle_{\mathrm{th}}$ termikus átlag a tiszta állapotokat a Gibbs–Boltzmann-súlyokkal keveri, ezt praktikusan a nagyszámú kezdeti feltétel melletti hőmérsékleti dinamika valósítja meg. A (5.3) mennyiséget ezért a

$$q^J_{\mathrm{EA}\,i}=\sum_\alpha p^J_\alpha (m_i^\alpha)^2$$

formula állítja elő, amely még az i helytől függő mennyiség. Ez az Edwards–Anderson rendparaméter lokális változata. Hely szerinti átlaga

$$q^J_{\mathrm{EA}}=\overline{q^J_{\mathrm{EA}\,i}}=\frac{1}{N}\sum_{\alpha,i}p^J_\alpha(m_i^\alpha)^2=\sum_\alpha p^J_\alpha q_{\alpha\alpha},$$

a kvencs átlag pedig

$$q_{\mathrm{EA}}=\left\langle q^J_{\mathrm{EA}}\right\rangle_{\mathrm{qu}}$$

az Edwards–Anderson rendparaméter. Előfordul, hogy a tiszta állapotok ekvivalensek abban az értelemben, hogy $q_{\alpha\alpha}$ nem függ α-tól. Ekkor az Edwards–Anderson rendparaméter önátlagoló, azaz $q_{\mathrm{EA}}=q^J_{\mathrm{EA}}$. Nyilvánvaló, hogy

$$q_{\alpha\alpha}\ge q_{\alpha\beta}\qquad\Rightarrow\qquad q_{\mathrm{EA}}\ge q.$$

5.1. Gyakorló feladat. *Határozzuk meg az Ising ferromágnes alapállapotában a fent definiált q és q_{EA} értékét.*

N.B. Általában rendezetlen rendszerekben a spininverziót automatikusan kihagyjuk az állapotok számbavételekor, azaz szűkített értelemben ilyenkor a ferromágneses alapállapot tisztának számít, s kevertnek az inverzió nélkül sem tisztának adódó állapotot tekintjük.

5.3. Az átfedések eloszlása

Mint láttuk (a p_α-k J-függését most kiírjuk)

$$q^J = \overline{m_i^2} = \overline{\left(\sum_\alpha p_\alpha^J m_i^\alpha\right)^2} = \sum_{\alpha,\beta} p_\alpha^J p_\beta^J \overline{m_i^\alpha m_i^\beta} = \sum_{\alpha,\beta} p_\alpha^J p_\beta^J q_{\alpha\beta}. \tag{5.4}$$

A q^J eloszlása (5.4) alapján

$$P_J(q) = \sum_{\alpha,\beta} p_\alpha^J p_\beta^J \delta(q - q_{\alpha\beta}), \tag{5.5}$$

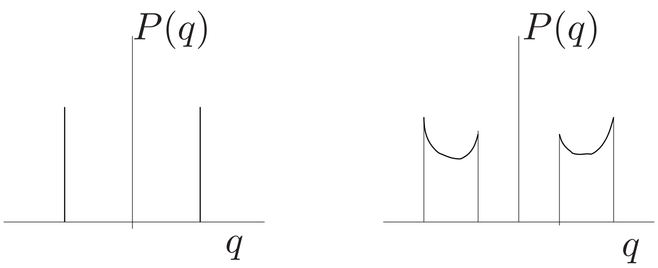
s innen

$$q^J = \int q\, P_J(q) \mathrm{d}q.$$

Az önátfedés kvencs átlaga a q eloszlásának átlagával kifejezhető

$$\left\langle q^J \right\rangle_{\mathrm{qu}} = \int q \,\left\langle P_J(q) \right\rangle_{\mathrm{qu}} \mathrm{d}q = \int q\, P(q) \mathrm{d}q.$$

Gyakran ezt a mennyiséget jelöljük q-val.



22. ábra. Ferromágnes ill. hosszú hatótávú kölcsönhatást tartalmazó spinüveg tipikus $P(q)$ függvényei.

5.4. Negyedrendű rendparaméter

Negyedrendű rendparamétert többféle módon is felírhatunk. Emlékeztetünk arra,hogy

$$\left\langle s_i s_j \right\rangle_{\mathrm{th}} = \sum_\alpha p_\alpha^J \left\langle s_i s_j \right\rangle_\alpha. \tag{5.6}$$

Tekintsük például a következő mennyiséget

$$q_{(4)}^J = \overline{\left\langle s_i s_j \right\rangle_{\mathrm{th}}^2} = \frac{1}{N^2} \sum_{i,j} \sum_{\alpha,\beta} p_\alpha^J p_\beta^J \left\langle s_i s_j \right\rangle_\alpha \left\langle s_i s_j \right\rangle_\beta.$$

Termodinamikai határesetben a spinek a tiszta állapotokban dekorrelálódnak, ezért

$$q^J_{(4)} = \frac{1}{N^2}\sum_{i,j}\sum_{\alpha,\beta} p^J_\alpha p^J_\beta \langle s_i\rangle_\alpha \langle s_j\rangle_\alpha \langle s_i\rangle_\beta \langle s_j\rangle_\beta$$
$$= \frac{1}{N^2}\sum_{i,j}\sum_{\alpha,\beta} p^J_\alpha p^J_\beta m_i^\alpha m_j^\alpha m_i^\beta m_j^\beta$$
$$= \sum_{\alpha,\beta} p^J_\alpha p^J_\beta q^2_{\alpha\beta} = \int q^2 P_J(q)\mathrm{d}q.$$

Látható tehát, hogy a $q^J_{(4)}$ negyedrendű rendparaméter q második momentuma a $P_J(q)$ eloszlás szerint, amelyet (5.5)-ben vezettünk be. Ezt az eredményt általánosíthatjuk magasabb rendekre, bevezetve a $2k$-ad rendű rendparamétereket

$$q^J_{(2k)} = \overline{\langle s_{i_1}\dots s_{i_k}\rangle^2_{\mathrm{th}}} = \int q^k P_J(q)\mathrm{d}q.$$

Kettőnél magasabb rendű nemtriviális átfedéseket többféleképpen definiálhatunk, mert a termikus átlagot a spinekre különbözőképpen végezhetjük. Pl.

$$q'^J_{(4)} = \overline{\langle s_i\rangle^2_{\mathrm{th}}\,\langle s_j\rangle^2_{\mathrm{th}}} = \overline{\langle s_i\rangle^2_{\mathrm{th}}}\;\overline{\langle s_j\rangle^2_{\mathrm{th}}} = (q^J)^2 = \Big(\int qP_J(q)\mathrm{d}q\Big)^2.$$

Összegzésképpen, a rendezetlen mágnesekben a (másodrendű) rendparaméter q a $P(q)$ átlagos eloszlásával jellemezhető, ezért az utóbbit rendparaméter-függvénynek tekinthetjük. A rendszer fizikai leírására elvileg az összes magasabb rendű rendparaméter eloszlására van szükség. Ha a másodrendű q eloszlása elegendő (hosszú hatótávolság, $\mathcal{O}(N)$ konnektivitás esetében ez egzakt), a szabadenergia

$$f = \operatorname*{extr}_{P(q)} f[P(q)], \tag{5.7}$$

ahol $f[\dots]$ a rendparaméter függvény funkcionálja. Ha azonban a koordinációs szám véges ($\mathcal{O}(1)$), akkor ez nem kielégítő leírás. Például tekintsük a

$$\overline{\langle s_i\rangle_\alpha\langle s_i\rangle_\beta\langle s_i\rangle_\gamma\langle s_i\rangle_\delta} = \overline{m_i^\alpha m_i^\beta m_i^\gamma m_i^\delta}$$
$$= \underbrace{\overline{m_i^\alpha m_i^\beta}}_{q_{\alpha\beta}}\cdot\underbrace{\overline{m_i^\gamma m_i^\delta}}_{q_{\gamma\delta}} + q_{\alpha\gamma}q_{\beta\delta} + q_{\alpha\delta}q_{\beta\gamma}$$

mennyiséget, ahol az utolsó egyenlőség csak Gauss-eloszlású lokális mágnesezettség esetén teljesül. Ez nagy koordinációs szám mellett valósul meg. Véges $\mathcal{O}(1)$ koordinációs szám mellett azonban a magasabb rendű rendparaméterek nem fejezhetők ki a másodrendű segítségével, ezért a szabadenergia nem áll elő az "egyszerű" (5.7) alakban.

6. A p-spin Ising spinüveg véletlen, hosszú hatótávolságú kölcsönhatással

6.1. Replika szabadenergia

A végtelen hatótávolságú, véletlen kölcsönhatású, p-spin modell Hamilton-függvényét már ismerjük

$$\mathcal{H} = -\sum_{(i_1 \dots i_p)} J_{i_1 \dots i_p} s_{i_1} \dots s_{i_p} - h \sum_{i=1}^{N} s_i, \tag{6.1}$$

ahol a $J_{\{i\}}$ csatolások Gauss eloszlásúak

$$\left\langle J_{\{i\}} \right\rangle = 0, \qquad \left\langle J_{\{i\}}^2 \right\rangle = \frac{J^2 N}{2\binom{N}{p}}. \tag{6.2}$$

Számítsuk ki a szabadenergiát a replika-módszerrel!

$$\begin{aligned} \langle Z^n \rangle_{\text{qu}} &= \operatorname*{Tr}_{\{s_i^a\}} \prod_{(i_1 \dots i_p)} \left\langle \exp\left(\beta J_{i_1 \dots i_p} \sum_{a=1}^{n} s_{i_1}^a \dots s_{i_p}^a \right) \right\rangle_{\text{qu}} \prod_i \exp\left(\beta h \sum_{a=1}^{n} s_i^a \right) \\ &= \operatorname*{Tr}_{\{s_i^a\}} \prod_{(i_1 \dots i_p)} \exp\left(\frac{\beta^2 J^2 N}{4} \frac{1}{\binom{N}{p}} \sum_{a,b} s_{i_1}^a s_{i_1}^b \dots s_{i_p}^a s_{i_p}^b \right) \prod_i \exp\left(\beta h \sum_a s_i^a \right). \end{aligned} \tag{6.3}$$

Itt a Tr az összes $s_i^a = \pm 1$ spinre végzendő, i a hely, a a replikák indexe. A termodinamikai limeszben

$$\frac{1}{\binom{N}{p}} \sum_{(i_1 \dots i_p)} s_{i_1}^a s_{i_1}^b \dots s_{i_p}^a s_{i_p}^b = \left(\frac{1}{N} \sum_i s_i^a s_i^b \right)^p + \mathcal{O}(\tfrac{1}{N}) = q_{ab}^p + \mathcal{O}(\tfrac{1}{N}), \tag{6.4}$$

ahol bevezettük két replika átfedését

$$q_{ab} = \frac{1}{N} \sum_i s_i^a s_i^b. \tag{6.5}$$

Ez nem tévesztendő össze a korábban tekintett $q_{\alpha\beta}$-val, amely a tiszta állapotok közötti átfedést jelölte – a kapcsolatukat később vizsgáljuk. Nyilvánvaló különbség a kettő között, hogy mindig $q_{aa} = 1$, míg lehet $q_{\alpha\alpha} < 1$. A rendezett p-spin modell számításához hasonlóan, ahol m-et definiáltuk Dirac-deltával, itt toldjuk be a q_{ab}-t definiáló azonosan egy kifejezést

$$\int \prod_{a<b} N \mathrm{d}q_{ab} \delta(N q_{ab} - \sum_j s_j^a s_j^b) = \int \underbrace{\prod_{a<b} N \frac{\mathrm{d}q_{ab} \mathrm{d}\tilde{q}_{ab}}{2\pi}}_{\mathrm{D}(q,\tilde{q})} e^{iNq_{ab}\tilde{q}_{ab} - i\tilde{q}_{ab}\sum_j s_j^a s_j^b} \tag{6.6}$$

kifejezést. Mivel i mindig a $\tilde{q}_{ab}$-val szorozva fordul elő, azért vezessük be $\hat{q}_{ab}$-t

$$\hat{q}_{ab} = -i\tilde{q}_{ab}. \tag{6.7}$$

Ez a rendparaméterhez "konjugált" változó, mert együtt bilineárisan jelennek meg a sz.e-ban. A (6.4) közelítést a (6.3)-be helyettesítve az i rácspontokra vett produktumot kapunk. Ennek „trace”-ét tényezőnként képezhetjük, ezek minden i rácspontra azonosak,

s ezért végül az egy rácspontból származó tényező N-edik hatványa adódik

$$\langle Z^n \rangle = \int \mathrm{D}(q,\tilde{q}) \exp\left\{ N \left(-\sum_{a<b} q_{ab}\hat{q}_{ab} + \frac{\beta^2 J^2}{4} \sum_{a,b} q_{ab}^p + \right.\right.$$
$$\left.\left. + \ln \operatorname*{Tr}_{\boldsymbol{s}} \underbrace{\exp\left[\sum_{a<b} \hat{q}_{ab} s^a s^b + \beta h \sum_a s^a \right]}_{\Phi(\boldsymbol{s})} \right) \right\}$$
$$= \int \mathrm{D}(q,\tilde{q}) e^{-\beta N f(\mathbf{Q},\hat{\mathbf{Q}})} \approx e^{-\beta N n f}.$$

Itt bevezettük az $\boldsymbol{s} = (s^1, s^2, \ldots, s^n)$ vektort, ahol az index a replikát jelöli. Az exponensből leolvasható a replika szabadenergia

$$-\beta f(\mathbf{Q},\hat{\mathbf{Q}}) = \frac{\beta^2 J^2 n}{4} - \sum_{a<b} q_{ab}\hat{q}_{ab} + \frac{\beta^2 J^2}{2} \sum_{a<b} q_{ab}^p + \ln \operatorname*{Tr}_{\boldsymbol{s}} \exp \Phi(\boldsymbol{s}). \tag{6.8}$$

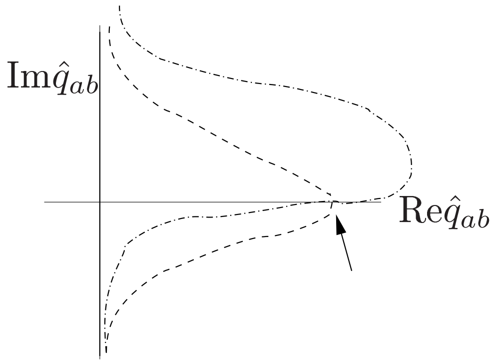
A $\hat{q}_{ab}$-t a rendparaméterhez konjugált mennyiségnek tekinthetjük.

6.2. Stacionaritás

A szabadenergiát nyeregpont módszerrel kapjuk

$$f = \lim_{n\to 0} \min_{\mathbf{Q}} \operatorname{extr}_{\hat{\mathbf{Q}}} \frac{1}{n} f(\mathbf{Q}, \hat{\mathbf{Q}}). \tag{6.9}$$

A $\hat{\mathbf{Q}}$ imaginárius segédváltozó, a nyeregpontja viszont valós. A kontúr alakítható, ezért bármilyen extremum (min. vagy max.) megfelelmegfelel, ld. a 23. ábrát. A $\mathbf{Q}$ fizikai változó, ebben egyelőre minimumot keresünk – ezt a kérdést később megvizsgáljuk.



23. ábra. Lehetséges $\hat{q}_{ab}$ integrálási kontúrok. A nyíl a nyeregpontot jelzi.

Célszerű bevezetnünk a replika átlagot

$$\langle\langle A(\boldsymbol{s})\rangle\rangle = \frac{\operatorname{Tr}_{\boldsymbol{s}} A(\boldsymbol{s}) e^{\Phi(\boldsymbol{s})}}{\operatorname{Tr}_{\boldsymbol{s}} e^{\Phi(\boldsymbol{s})}}. \tag{6.10}$$

A nevező 1-hez tart, ha $n \to 0$. A szélsőértékek feltételei egész n mellett

$$\frac{\partial f(\mathbf{Q}, \hat{\mathbf{Q}})}{\partial \hat{q}_{ab}} = 0, \qquad \frac{\partial f(\mathbf{Q}, \hat{\mathbf{Q}})}{\partial q_{ab}} = 0, \tag{6.11}$$

azaz

$$q_{ab} = \left\langle\left\langle s^a s^b \right\rangle\right\rangle, \qquad \hat{q}_{ab} = \frac{p\beta^2 J^2}{2} q_{ab}^{p-1}. \tag{6.12}$$

Az első feltételből kifejezhetjük a segédteret

$$\hat{\mathbf{Q}} = \hat{\mathbf{Q}}(\mathbf{Q}) \tag{6.13}$$

ebbből a csak $\mathbf{Q}$-tól függő replika szabadenergia

$$f(\mathbf{Q}) = f(\mathbf{Q}, \hat{\mathbf{Q}}(\mathbf{Q})). \tag{6.14}$$

A minimumot közvetlenül ebben a függvényben is kereshetjük.

6.3. Szabadenergia-minimum vagy -maximum?

Vizsgáljuk meg a $\mathbf{Q}$-ra kiszabott minimumfeltételt. Jelölje $\mathbf{Q}$ nyeregpontbeli értékét $\mathbf{Q}^*$, ekkor a szabadenergia a nyeregpont körül

$$f + \delta f = f(\mathbf{Q}^* + \delta\mathbf{Q}) = f(\mathbf{Q}^*) + \frac{1}{2}\delta\mathbf{Q}\,\mathbb{M}\,\delta\mathbf{Q} + \mathcal{O}(\delta\mathbf{Q}^3). \tag{6.15}$$

Az $\mathbb{M}$ mátrix elemei négyindexesek $M_{(ab)(cd)}$, a minimumfeltétel szerint $\mathbb{M}$ pozitív szemidefinit (a zérus sajátértékek esetén nemlineáris stabilitás vizsgálandó). Tekintsük azt az egyszerű példát, amikor $\mathbb{M}$ az egységmátrixszal arányos

$$\mathbb{M} = \mu\mathbb{I}, \quad \mu > 0, \tag{6.16}$$

továbbá vizsgáljunk homogén perturbációkat

$$\delta q_{ab} \equiv \delta q, \quad \forall(a,b). \tag{6.17}$$

Ekkor

$$\delta f = \frac{\mu}{2}(\delta q)^2\binom{n}{2}, \tag{6.18}$$

és mivel $n \to 0$ mellett

$$\binom{n}{2} \approx -\frac{n}{2} < 0, \tag{6.19}$$

ezért

$$\delta f < 0. \tag{6.20}$$

Tehát a „minimumfeltétel” valójában lokális maximumot határoz meg. Ez összhangban van a REM azon tulajdonságával, hogy alacsony T-n a nagyobb szabadenergia a fizikai.

Általános $\mathbb{M}$ pozitív szemidefinit mátrixokra is kimutatható, hogy a rendparaméter ingadozásai csökentik a szabadenergiát. Ezután a „min” feltétel alatt az $\mathbb{M}$ pozitív szemidefinitségét fogjuk érteni, miközben tudomásul vesszük, hogy ez az $n \to 0$ limeszben a szabadenergia maximumát jelenti.

6.4. A szabadenergia paraméterezése

Mint láthattuk a szabadenergia kifejezésében $n \to 0$, amely formálisan 0×0 méretű mátrixokhoz vezet. Ennek kikerülésére a $\mathbf{Q}$ $n \times n$-es mátrixot paraméterezzük olyan $\boldsymbol{a}$ véges paraméterkészlettel, amely megtartható $n \to 0$ mellett is (a konjugált $\hat{\mathbf{Q}}$ mátrixra hasonlóan járunk el, feltesszük, hogy annak paraméterei szerint már extremizáltunk)

$$\lim_{n\to 0}\frac{1}{n}f(\mathbf{Q}) = f(\boldsymbol{a}). \tag{6.21}$$

értelmes kifejezés. A paraméterezés a megoldásra felvett próba alak, „Ansatz”. Például a később tárgyalásra kerülő replika szimmetrikus Ansatz azt jelenti, hogy minden $a \neq b$ mátrixelemet azonosnak veszünk. Ekkor

$$\sum_{a<b} q_{ab}^p = \binom{n}{2} q^p, \tag{6.22}$$

azaz a paraméter $\boldsymbol{a} \sim q$. Az adott paraméterezésen, Ansatz-on belüli szabadenergia

$$f_{\boldsymbol{a}} = \max_{\boldsymbol{a}} f(\boldsymbol{a}). \tag{6.23}$$

Itt az $f_{\boldsymbol{a}}$ indexe az adott paraméterezés típusára, nem a paraméter értékére utal. A tényleges szabadenergia elvileg a különböző paraméterezésekkel előállított szabadenergiák maximuma

$$f = \max_{\text{paraméterezés}} f_{\boldsymbol{a}}. \tag{6.24}$$

A gyakorlatban nehéz annak igazolása, hogy valamely paraméterezéssel a globális maximumot találtuk meg.

6.5. Lokális stabilitás az átfedéshez konjugált tér jelenlétében

Az alábbiakban megmutatjuk, hogyan kell eljárni, ha valamely változóra nem írjuk elő az extremum típusát. Tekintsük az alábbi extremizálandó függvényt (az $\boldsymbol{x}$ ill. $\hat{\boldsymbol{x}}$ paraméterkészlet a $\mathbf{Q}$ ill. $\hat{\mathbf{Q}}$ mátrix elemeinek felel meg)

$$f(\boldsymbol{x},\hat{\boldsymbol{x}}) = -\hat{\boldsymbol{x}}\cdot\boldsymbol{x} + f(\boldsymbol{x}) + \hat{f}(\hat{\boldsymbol{x}}). \tag{6.25}$$

Az $\hat{\boldsymbol{x}}$ szerinti szélsőérték-feltétel

$$\hat{\boldsymbol{\nabla}} f(\boldsymbol{x},\hat{\boldsymbol{x}}) = -\boldsymbol{x} + \hat{\boldsymbol{\nabla}}\hat{f}(\hat{\boldsymbol{x}}) = 0 \tag{6.26}$$

alapján megkaphatjuk az

$$\hat{\boldsymbol{x}} = \hat{\boldsymbol{x}}(\boldsymbol{x}) \tag{6.27}$$

függvényt. Ezt visszaírva a szabadenergiába

$$F(\boldsymbol{x}) = f(\boldsymbol{x},\hat{\boldsymbol{x}}(\boldsymbol{x})) = -\hat{\boldsymbol{x}}(\boldsymbol{x})\cdot\boldsymbol{x} + f(\boldsymbol{x}) + \hat{f}(\hat{\boldsymbol{x}}(\boldsymbol{x})). \tag{6.28}$$

Az F-re vonatkozó stacionaritási feltétel a várakozásnak megfelelően

$$\boldsymbol{\nabla} F = -\hat{\boldsymbol{x}} - (\boldsymbol{\nabla}\circ\hat{\boldsymbol{x}})\boldsymbol{x} + \boldsymbol{\nabla} f + (\boldsymbol{\nabla}\circ\hat{\boldsymbol{x}})\underbrace{(\hat{\boldsymbol{\nabla}}\hat{f})}_{\boldsymbol{x}} = \boldsymbol{\nabla} f - \hat{\boldsymbol{x}} = 0. \tag{6.29}$$

Skalár második derivált tenzorát Hesse-mátrixnak nevezzük. Az F Hesse-mátrixa

$$\boldsymbol{\nabla} \circ \boldsymbol{\nabla} F(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{\nabla} \circ \boldsymbol{\nabla} f(\boldsymbol{x}) - \boldsymbol{\nabla} \circ \hat{\boldsymbol{x}}. \tag{6.30}$$

Jelölés:

$$\mathbf{M} = \boldsymbol{\nabla} \circ \boldsymbol{\nabla} f(\boldsymbol{x}), \tag{6.31}$$

$$\hat{\mathbf{M}} = \hat{\boldsymbol{\nabla}} \circ \hat{\boldsymbol{\nabla}} \hat{f}(\hat{\boldsymbol{x}}). \tag{6.32}$$

A (6.26) stacionaritási feltétel $\boldsymbol{x}$ szerinti gradiens tenzora

$$(\boldsymbol{\nabla} \circ \hat{\boldsymbol{x}})(\hat{\boldsymbol{\nabla}} \circ \hat{\boldsymbol{\nabla}} \hat{f}) = (\boldsymbol{\nabla} \circ \hat{\boldsymbol{x}})\hat{\mathbf{M}} = \mathbf{I} \quad \Rightarrow \quad \boldsymbol{\nabla} \circ \hat{\boldsymbol{x}} = \hat{\mathbf{M}}^{-\mathbf{1}}, \tag{6.33}$$

amiből a Hesse-mátrixra

$$\boldsymbol{\nabla} \circ \boldsymbol{\nabla} F(\boldsymbol{x}) = \mathbf{M} - \hat{\mathbf{M}}^{-1} \tag{6.34}$$

adódik. Ha $\mathbf{M}$ és $\hat{\mathbf{M}}$ közös sajátrendszerrel rendelkezik, akkor a Hesse-mátrix sajátértékei

$$\Lambda = \lambda - \frac{1}{\hat{\lambda}} \tag{6.35}$$

alakúak lesznek. A $\Lambda \geq 0$ a lokális minimum, $\Lambda \leq 0$ a maximum szükséges feltétele.

6.6. A replikák termodinamikai értelmezése

Mint korábban láttuk, az átlagos q átfedést az átlagos $P(q)$ eloszlásból kaphatjuk

$$q = \sum_{\alpha,\beta} \left\langle p^J_\alpha p^J_\beta \right\rangle_{\mathrm{qu}} q_{\alpha\beta} = \int q P(q) \mathrm{d}q \quad \Rightarrow \quad P(q) = \sum_{\alpha,\beta} \left\langle p^J_\alpha p^J_\beta \right\rangle_{\mathrm{qu}} \delta(q - q_{\alpha\beta}). \tag{6.36}$$

Két replika átfedése a stacionaritási feltétel szerint

$$q_{ab} = \left\langle \left\langle s^a s^b \right\rangle \right\rangle. \tag{6.37}$$

Mivel $f(\mathbf{Q}) = f(\mathbf{Q}, \hat{\mathbf{Q}}(\mathbf{Q}))$ invariáns a replikák permutációjára, ezért az átlagos átfedés képzésekor a replikákat azonos súllyal vesszük

$$q = \frac{1}{\binom{n}{2}} \sum_{a<b} q_{ab}, \tag{6.38}$$

ahonnan q eloszlásának átlaga

$$P(q) = \frac{1}{\binom{n}{2}} \sum_{a<b} \delta(q - q_{ab}). \tag{6.39}$$

Összevetve (6.36)-vel azt látjuk, hogy a replika átfedések termodinamikai súlya arányos azzal, hányszor fordul elő ugyanaz az érték a q_{ab} átfedések között.

Ugyanazon tiszta állapothoz több replika tartozhat. Valamely „a” replikával egyazon tiszta állapotban levő más replikákat az tünteti ki, hogy az „a”-adikkal a legnagyobb az átfedésük. Ez a legnagyobb átfedés éppen az Edwards–Anderson rendparaméter. Tehát az „α” tiszta állapot annak az $\alpha \sim \{a_1, a_2, \ldots, a_m\}$ replika-indexhalmaznak felel meg, amelyre

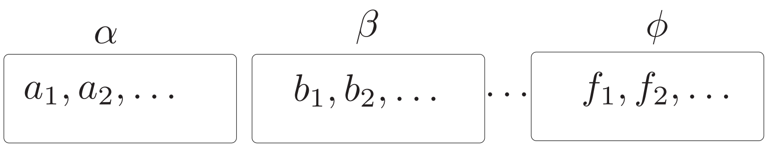
$$q_{\mathrm{EA}}^{\alpha} = q_{\alpha\alpha} = q_{a_i a_j}, \tag{6.40}$$

s minden más $b \notin \{a_1, a_2, \ldots, a_m\}$ replikával való átfedés ennél kisebb

$$q_{\alpha\alpha} > q_{a_i b}. \tag{6.41}$$

Emlékeztetünk arra, hogy a replikák önátfedése $q_{aa} = 1$, viszont $1 > q_{\alpha\alpha}$ lehet, innen látható, hogy a konfigurációkat jellemez, q_{ab} pedig a konfigurációk átlagos átfedését. Mivel a $q_{\alpha\beta}$ átfedések tiszta állapotok között vannak értve, azt várjuk, hogy a replikák átlagos átfedése csak attól függ, mely tiszta állapotokhoz tartoztak

$$q_{\alpha\beta} \equiv q_{a_i b_j} \quad \forall a_i \in \alpha, b_j \in \beta. \tag{6.42}$$



24. ábra. Tiszta állapotok és replikák. Az $a_i, b_j, \ldots f_k$ indexek összesen az n db. replika indexet adják ki. Az α, β tiszta állapotokon belül az átfedések $q_{\alpha\alpha}, q_{\beta\beta}$, az állapotok közötti $q_{\alpha\beta}$ átfedés azoknál kisebb.

Ha az Edwards–Anderson rendparaméter nem függ attól, mely tiszta állapotban mérjük

$$q_{\alpha\alpha} = q_{\mathrm{EA}}^{\alpha} = q_{\mathrm{EA}}. \tag{6.43}$$

Bevezethetjük két tiszta állapot $d_{\alpha\beta}$ távolságát

$$d_{\alpha\beta} = \frac{1}{2}(1 - q_{\alpha\beta}), \tag{6.44}$$

s $d_{\alpha\alpha}$ a tiszta állapoton belüli konfigurációk átlagos távolsága. Két különböző replika távolsága

$$d_{ab} = \frac{1}{2}(1 - q_{ab}). \tag{6.45}$$

Ez minimális a tiszta állapotokon belül, pl. az „a” replikával azonos α tiszta állapotokban levőktől való távolság

$$d_a = \min_b d_{ab} = d_{\alpha\alpha}. \tag{6.46}$$

Azonos replikák azonos konfigurációt jelentenek, mert távolságuk zérus $d_{aa} = 0$.

6.7. Replikaszimmetrikus (RS) ansatz

A replika szabadenergia permutáció-szimmetrikus a replika indexekre. Mivel a replikák címkézése önkényes, ezért az a-k felcserélésének nincs fizikai jelentősége. Azonban a replika párok q_{ab} átfedése lehet különböző, az átfedésekre nem feltétlenül teljesül a szimmetria. Általában, szimmetrikus szabadenergia esetén csak azt mondhatjuk, ha van szimmetriasértő extremum, akkor a szimmetriatranszformáció ezt más extremumhelybe viszi.

A legegyszerűbb Ansatz a replika szimmetria, ekkor az átfedések függetlenek a replikák megválasztásától

$$q_{ab} \equiv q, \quad \hat{q}_{ab} \equiv \hat{q} \quad (a \neq b). \tag{6.47}$$

Emlékeztetünk arra, hogy $q_{aa} = 1$, továbbá $\hat{q}_{aa}$ nem lép fel a replika szabadenergiában.

Az RS paraméterezéssel

$$\beta f_{\mathrm{RS}}(q, \hat{q}) = \frac{1}{n} \beta \, f(\mathbf{Q}, \hat{\mathbf{Q}}) \Big|_{n=0}, \tag{6.48}$$

$$f_{\mathrm{RS}} = \max_q \operatorname*{extr}_{\hat{q}} f_{\mathrm{RS}}(q, \hat{q}). \tag{6.49}$$

Az RS paraméterezés mátrixalakban ($\hat{q}_{aa} = \hat{q}_d$ helyére bármit írhatunk)

$$\mathbf{Q} = \begin{pmatrix} 1 & q & \cdots & q \\ q & 1 & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & q \\ q & \cdots & q & 1 \end{pmatrix}, \quad \hat{\mathbf{Q}} = \begin{pmatrix} \hat{q}_d & \hat{q} & \cdots & \hat{q} \\ \hat{q} & \hat{q}_d & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \hat{q} \\ \hat{q} & \cdots & \hat{q} & \hat{q}_d \end{pmatrix}. \tag{6.50}$$

Mivel egyetlen q érték szerepel, azért $q_{\mathrm{EA}} = q$, és az átfedések valószínűségsűrűsége a q-ra centrált Dirac-delta

$$P(q') = \delta(q' - q). \tag{6.51}$$

6.8. RS állapotegyenlet

Felidézzük a replika szabadenergiát

$$-\beta f(\mathbf{Q},\hat{\mathbf{Q}}) = \frac{\beta^2 J^2 n}{4} - \sum_{a<b} q_{ab}\hat{q}_{ab} + \frac{\beta^2 J^2}{2}\sum_{a<b} q_{ab}^p + \ln \operatorname*{Tr}_{\boldsymbol{s}} \exp \Phi(\boldsymbol{s}), \tag{6.52}$$

ahol

$$\Phi(\mathbf{s}) = \sum_{a<b} \hat{q}_{ab} s^a s^b + \beta h \sum_a s^a. \tag{6.53}$$

Az összegeket könnyű az RS paraméterezéssel kiszámítani

$$\sum_{a<b} q_{ab}\hat{q}_{ab} = \binom{n}{2} q\hat{q} \approx -\tfrac{n}{2} q\hat{q}, \tag{6.54}$$

$$\sum_{a<b} q_{ab}^p = \binom{n}{2} q^p \approx -\tfrac{n}{2} q^p. \tag{6.55}$$

Innen látható, hogy az egész n mellett bevezetett összegek megfelelő paraméterezés esetén folytonos n-re is értelmezhetők.

Meghatározzuk a „trace”-t

$$\begin{aligned}
\operatorname{Tr} e^{\Phi(\mathbf{s})} &= \operatorname{Tr} \exp\left(\frac{\hat{q}}{2}\sum_{a\neq b} s^a s^b + \beta h \sum_a s^a\right) \\
&= e^{-\frac{n\hat{q}}{2}} \operatorname{Tr} \exp\left(\frac{\hat{q}}{2}\left(\sum_a s^a\right)^2 + \beta h \sum_a s^a\right) \\
&= e^{-\frac{n\hat{q}}{2}} \int \mathrm{D}z \operatorname{Tr} \exp\left(\sqrt{\hat{q}} z \sum_a s^a + \beta h \sum_a s^a\right) \\
&= e^{-\frac{n\hat{q}}{2}} \int \mathrm{D}z \left(2\cosh\left(\sqrt{\hat{q}}z + \beta h\right)\right)^n .
\end{aligned} \tag{6.56}$$

Innen az RS szabadenergia függvény, az $n \to 0$ határátmenet elvégzése után

$$-\beta f_{\mathrm{RS}}(q,\hat{q}) = -\frac{\hat{q}}{2}(1-q) + \frac{\beta^2 J^2}{4}(1-q^p) + \int \mathrm{D}z \ln\left(2\cosh\left(\sqrt{\hat{q}}z + \beta h\right)\right). \tag{6.57}$$

Az RS szabadenergia

$$f_{\mathrm{RS}} = \max_q \operatorname*{extr}_{\hat{q}} f_{\mathrm{RS}}(q,\hat{q}). \tag{6.58}$$

A $\hat{q}$ szerinti extrémum feltétel

$$\frac{\partial f_{\mathrm{RS}}(q,\hat{q})}{\partial \hat{q}} = 0, \tag{6.59}$$

ahonnan parciálisan integrálással ($\mathrm{D}z = \exp(-z^2/2)\,\mathrm{d}z/\sqrt{2\pi}$ a Gauss-mérték)

$$\begin{aligned} q &= 1 - \int \mathrm{D}z \tanh(\sqrt{\hat{q}}z + \beta h)\frac{z}{\sqrt{\hat{q}}} \\ &= 1 - \int \mathrm{D}z(1 - \tanh^2(\sqrt{\hat{q}}z + \beta h)) \\ &= \int \mathrm{D}z \tanh^2(\sqrt{\hat{q}}z + \beta h). \end{aligned} \tag{6.60}$$

A q szerinti szélsőérték feltétel

$$\frac{\partial f_{\mathrm{RS}}(q,\hat{q})}{\partial q} = 0, \tag{6.61}$$

ahonnan

$$\hat{q} = \frac{p}{2}\beta^2 J^2 q^{p-1}. \tag{6.62}$$

Visszaírva ezt az előző kifejezésbe kapjuk

$$q = \int \mathrm{D}z \tanh^2\left(z\beta J\sqrt{\frac{pq^{p-1}}{2}} + \beta h\right) = g_q(q). \tag{6.63}$$

A rendezett modellben alkalmazott módszerünk analógiájára a megoldást kereshetjük iterációval

$$q_{n+1} = g_q(q_n), \tag{6.64}$$

ennek fixpontjai a lokális szélsőértékhelyek. A fixpont egyenlet meghatározza az átfedést a T, h függvényében, az állapotegyenletnek tekinthetjük.

6.9. Szabadenergia, energia és entrópia

A replikaszimmetrikus szabadenergia függvény

$$-\beta f_{\mathrm{RS}}(q,\hat{q}) = \frac{\hat{q}}{2}(q-1) + \frac{\beta^2 J^2}{4}(1-q^p) + \underbrace{\int \mathrm{D}z \ln\left(2\cosh(\sqrt{\hat{q}}z + \beta h)\right)}_{A}.$$

Helyettesítsük be a $\hat{q}(q)$ korábbról ismert

$$\hat{q}(q) = \frac{p}{2}\beta^2 J^2 q^{p-1}$$

kifejezését, ekkor

$$-\beta f_{\mathrm{RS}}(q) = \frac{\beta^2 J^2}{4}\left((p-1)q^p - pq^{p-1} + 1\right) + A \tag{6.65}$$

adódik. Ezt maximalizálva az állapotegyenletet kapjuk. Közvetlenül számítható a fajlagos energia az $f(q,\hat{q})$-t deriválva

$$e_{\mathrm{RS}} = \frac{\partial \beta f_{\mathrm{RS}}}{\partial \beta} = \frac{\partial \beta f_{\mathrm{RS}}(q,\hat{q})}{\partial \beta} = -\frac{\beta J^2}{2}(1-q^p) - hm,$$

majd a fajlagos entrópia

$$s_{\mathrm{RS}} = \beta(e_{\mathrm{RS}} - f_{\mathrm{RS}}) = \frac{\beta^2 J^2}{4}\left((p+1)q^p - pq^{p-1} - 1\right) + A - \beta hm.$$

Itt az

$$m = -\frac{\partial f_{\mathrm{RS}}(q,\hat{q})}{\partial h} = \int \mathrm{D}z \tanh(\sqrt{\hat{q}}z + \beta h) = g_m(q) \tag{6.66}$$

a mágnesezettséget jelöli — később visszatérünk rá.

6.10. Az RS megoldás $p \to \infty$ határesete

A $p = \infty$ limeszben

$$g_q(q) \to \begin{cases} \tanh^2 \beta h, & q < 1 \\ 1, & q = 1 \end{cases}. \tag{6.67}$$

A $q < 1$ megoldás éppen azt jelenti, hogy

$$q = \tanh^2(\beta h),$$

továbbá

$$m = \tanh(\beta h).$$

A segédváltozóra

$$\hat{q} = \frac{p}{2}\beta^2 J^2 q^{p-1} \xrightarrow[p\to\infty]{} 0,$$

adódik. Közvetlenül kapható a szabadenergia

$$-\beta f_{\mathrm{RS}} = \frac{\beta^2 J^2}{4} + \ln(2\cosh(\beta h)), \tag{6.68}$$

az energia

$$e_{\mathrm{RS}} = -\frac{\beta J^2}{2} - h \tanh \beta h,$$

és az entrópia

$$s_{\mathrm{RS}} = \beta(e_{\mathrm{RS}} - f_{\mathrm{RS}}) = -\frac{\beta^2 J^2}{4} + \ln(2\cosh(\beta h)) - h\beta \tanh(\beta h),$$

a $T_1(h)$ alatt negatív. Ha $h = 0$, akkor

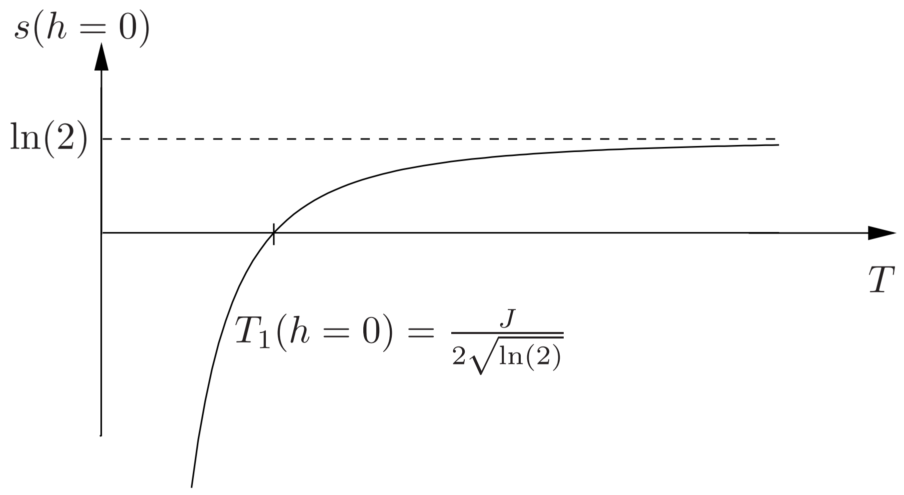
$$s_{\mathrm{RS}} = \ln(2) - \frac{J^2}{4T^2},$$

miként az a 25. ábrán is látható, és

$$T_1(0) = \frac{J}{2\sqrt{\ln(2)}}.$$

Látható, alacsony hőmérsékleteken az RS megoldás nemfizikai.

A termodinamikai függvényeket korábban a REM magas hőmérsékleti fázisára replika módszer nélkül határoztuk meg.



25. ábra. Az entrópia $p \to \infty$ esetben, $h = 0$ mellett. T_1 alatt $s < 0$!

Ami a $q = 1$ megoldást illeti, a határátmenetet kell vizsgálnunk.

6.1. Házi feladat. *Találunk-e a $p \to \infty$ limeszben $q \nearrow 1$ megoldást? (20%)*

6.11. A p-spin modell RS megoldásának stabilitása

6.11.1. Az RS paraméterezésen belüli stabilitás

Vizsgáljuk a megoldás stabilitását az RS paraméterezésen belül. Az RS szabadenergia-függvényt felbonthatjuk a

$$2\beta f(q,\hat{q}) + \frac{\beta^2 J^2}{2} = -q\hat{q} + f(q) + \hat{f}(\hat{q}) \tag{6.69}$$

alakban, ahol

$$f(q) = \frac{\beta^2 J^2}{2} q^p \tag{6.70}$$

$$\hat{f}(\hat{q}) = \hat{q} - 2\int \mathrm{D}z \ln\left(2\cosh\left(\sqrt{\hat{q}}z + \beta h\right)\right). \tag{6.71}$$

A 6.5 fejezetbeli eredmények szerint a maximum feltétele

$$\Lambda = \lambda - \frac{1}{\hat{\lambda}} \leq 0. \tag{6.72}$$

ahol

$$\lambda = f''(q) = \frac{p(p-1)}{2}\beta^2 J^2 q^{p-2} = \frac{(p-1)\hat{q}}{q} \geq 0, \tag{6.73}$$

ha a nemnegatív q-kra szorítkozunk, és

$$\begin{aligned}
\hat{\lambda} = \hat{f}''(\hat{q}) &= \left(1 - \int \mathrm{D}z \frac{z}{\sqrt{\hat{q}}} \tanh(\underbrace{\sqrt{\hat{q}}z + \beta h}_{B})\right)' = \left(\int \mathrm{D}z \tanh^2 B\right)' \\
&= \int \mathrm{D}z \frac{z}{\sqrt{\hat{q}}} \tanh(B)\cosh^{-2}(B) = \int \mathrm{D}z \frac{z}{\sqrt{\hat{q}}} \left(\tanh(B) - \tanh^3(B)\right) \\
&= \int \mathrm{D}z \left(\cosh^{-2}(B) - 3\tanh^2(B)\cosh^{-2}(B)\right) \\
&= \int \mathrm{D}z \left(1 - 4\tanh^2(B) + 3\tanh^4(B)\right) \\
&= 1 - 4q + 3q_{(4)}.
\end{aligned} \tag{6.74}$$

Itt bevezettük a $q_{(n)} = \int \mathrm{D}z \tanh^n(\sqrt{\hat{q}}z + \beta h)$ jelölést, $m = q_{(1)}$, $q = q_{(2)}$. Ha $\hat{\lambda} < 0$, akkor λ nemnegativitása miatt a stabilitás sérül. Ha $\hat{\lambda} > 0$, akkor a stabiltási kritérium

$$1 - \lambda\hat{\lambda} \geq 0. \tag{6.75}$$

A $p \to \infty$ limeszben

$$\lambda = \frac{p(p-1)}{2}\beta^2 J^2 (\tanh \beta h)^{2(p-2)} \to 0, \tag{6.76}$$

$$\hat{\lambda} = 1 - 4\tanh^2 \beta h + 3\tanh^4 \beta h, \tag{6.77}$$

innen

$$1 - \lambda\hat{\lambda} \to 1, \tag{6.78}$$

azaz pozitív minden hőmérsékleten, az RS szabadenergia függvényt valóban maximaliz áltuk.

6.11.2. Iteratív stabilitás

Vizsgáljuk most a fixpont stabilitását a $q_{n+1} = g_q(q_n)$ iterációval szemben. A fentiek fényében a leképezésre a következőket írhatjuk

$$q_{n+1} = g_q(q_n) = \hat{f}'(\hat{q}(q_n)), \tag{6.79}$$

amiből

$$g_q'(q) = \hat{f}''(\hat{q}(q))\hat{q}'(q) = \hat{\lambda}\lambda. \tag{6.80}$$

Mivel ez nemnegatív (6.63) alapján, a fixpont stabilitásának szükséges feltétele

$$g_q'(q) \leq 1 \quad \Rightarrow \quad 1 - \lambda\hat{\lambda} \geq 0. \tag{6.81}$$

Látható, hogy ez megegyezik a szabadenergia q szerinti maximuma alapján kapott feltétellel, hacsak $\hat{\lambda} > 0$.

6.11.3. Az RS paraméterezésen túli stabilitás

Engedjünk meg a $\mathbf{Q}$ mátrixban nemcsak RS, hanem RS-et sértő (RS breaking, RSB) perturbációkat. Ekkor az vizsgálandó, hogy az

$$f(\mathbf{Q}) = \operatorname*{extr}_{\hat{\mathbf{Q}}} f(\mathbf{Q}, \hat{\mathbf{Q}}) \tag{6.82}$$

Hesse-mátrixának sajátértékei nemnegatívak-e az $n \to 0$ limeszben. Hosszabb számítással azt kapjuk, hogy az RS-en belüli stabilitási feltétel mellett egy további feltétel adódik. A

$$\begin{aligned}\lambda_2 &= \lambda = \frac{(p-1)\hat{q}}{q} && (6.83)\\ \hat{\lambda}_2 &= 1-2q+q_{(4)} && (6.84)\end{aligned}$$

sajátértékekkel

$$1-\lambda_2\hat{\lambda}_2 > 0. \qquad (6.85)$$

Azonnal látható, hogy a $p \to \infty$ esetben a $\lambda_2 \to 0$ miatt ez is teljesül minden T mellett. Tehát az RS megoldás lokálisan stabil! A negatív entrópia tartományban azonban ez nem fogadható el, azaz a fizikai megoldás nem lehet RS.

6.12. Az RS megoldás mágnesezettsége és szuszceptibilitása

A mágnesezettség

$$\begin{aligned} m &= \frac{1}{N}\left\langle\left\langle\sum_{i=1}^{N} s_i\right\rangle_{\mathrm{th}}\right\rangle_{\mathrm{qu}} = \langle\langle\bar{s}_i\rangle_{\mathrm{th}}\rangle_{\mathrm{qu}} = -\frac{\partial f_{\mathrm{RS}}(q,\hat{q})}{\partial h}\\ &= \int \mathrm{D}z \tanh(\sqrt{\hat{q}}z+\beta h) = g_m(\hat{q}), \end{aligned} \qquad (6.86)$$

s az alábbiakban a g_q függvényt is $g_q(\hat{q})$-nak tekintjük, mert $\hat{q}$ szerepel benne expliciten. Figyelembe vettük, hogy a közvetett deriváltak eltűnnek, mivel q és $\hat{q}$ szerint is szélsőérték valósul meg. A szuszceptibilitás (nem feltétlenül zérus h mellett)

$$\chi = \frac{\partial m}{\partial h} = \frac{\partial g_m}{\partial h} + \frac{\partial g_m}{\partial \hat{q}}\frac{\partial \hat{q}}{\partial q}\frac{\partial q}{\partial h}. \qquad (6.87)$$

Itt szerepel

$$\frac{\partial q}{\partial h} = \frac{\partial g_q}{\partial \hat{q}}\frac{\partial \hat{q}}{\partial q}\frac{\partial q}{\partial h} + \frac{\partial g_q}{\partial h}, \qquad (6.88)$$

amiből az átrendezés után

$$\frac{\partial q}{\partial h} = \frac{\frac{\partial g_q}{\partial h}}{1 - \frac{\partial \hat{q}}{\partial q}\frac{\partial g_q}{\partial \hat{q}}} \tag{6.89}$$

adódik. Kiszámítjuk az egyes tagokat

$$\frac{\partial g_m}{\partial h} = \beta(1-q), \tag{6.90}$$
$$\frac{\partial g_q}{\partial h} = 2\beta(m - q_{(3)}), \tag{6.91}$$
$$\frac{\partial \hat{q}}{\partial q} = \lambda, \tag{6.92}$$
$$\frac{\partial g_m}{\partial \hat{q}} = -m + q_{(3)}, \tag{6.93}$$
$$\frac{\partial g_q}{\partial \hat{q}} = \hat{\lambda}, \tag{6.94}$$

ahonnan

$$\chi = \beta(1-q) - \frac{2\lambda\beta(m - q_{(3)})^2}{1 - \lambda\hat{\lambda}}. \tag{6.95}$$

Ha $h = 0$, akkor a második tag eltűnik (az integrandusok páratlan függvények) és $0 \le q \le 1$ miatt a $\chi|_{h=0}$ nemnegatív. A spinüvegben a lineáris szuszceptibilitás nem segít kiválasztani a stabil megoldást. Azonban látható, hogy az RS-en belüli perturbációk stabilitási feltétele a nemlineáris tag nevezőjébe belép.

6.1. Gyakorló feladat. *Végezzük el a háttérszámításokat, azaz igazoljuk a szuszceptibilitásra adott formulát.*

6.13. Alapállapoti energia és entrópia

Számítsuk ki a $T \to 0$ (alapállapoti) mennyiségeket, zérus külső tér mellett. A várakozás szerint $q \to 1$. A $\hat{q}$-ra ismert formula

$$\hat{q} = \frac{\beta^2 J^2}{2} p q^{p-1} \approx \frac{\beta^2 J^2}{2} p \longrightarrow \infty. \tag{6.96}$$

Vezessük be az $u = \sqrt{\hat{q}} \approx \beta J p/\sqrt{2}$ jelölést. A q-t kifejező egyenletből

$$q = \int \mathrm{D}z \tanh^2(uz) = 1 - \int \mathrm{D}z \cosh^{-2}(uz) = 1 - \delta \tag{6.97}$$

$$\begin{aligned} \delta &= \frac{1}{u} \int \mathrm{D}z (\tanh(uz))' = \frac{1}{u} \int \mathrm{D}z\, z \tanh(uz) \\ &\approx \frac{1}{u} \int \mathrm{D}z |z| = \frac{1}{u}\sqrt{\frac{2}{\pi}} \approx \frac{2}{\sqrt{p\pi}} \frac{1}{\beta J}. \end{aligned} \tag{6.98}$$

A korrekció $\mathcal{O}(T^2)$. Számítsuk most ki a fenti feltételek mellett ($T \to 0$, $h = 0$) a szabadenergia (6.65) kifejezésében szereplő

$$A = \int \mathrm{D}z \ln\left(2\cosh(zu)\right)$$

mennyiséget. Használjuk ki, hogy $|z|u \gg 1$ értékekre

$$\ln(2\cosh(zu)) \approx |z|u + \ln\left(1 - e^{-2|z|u}\right).$$

Innen

$$A \approx \int \mathrm{D}z |z| u + \underbrace{\int \mathrm{D}z \ln\left(1 - e^{-2|z|u}\right)}_{\mathcal{O}(\frac{1}{u})} \approx u\sqrt{\frac{2}{\pi}} \tag{6.99}$$

Mivel

$$u = \sqrt{\frac{p}{2}} \beta J q^{(p-1)/2} \approx \sqrt{\frac{p}{2}} \beta J \left(1 - \frac{p-1}{2}\delta\right) \tag{6.100}$$

azért δ fenti értékét behelyettesítve kapjuk

$$A = \sqrt{\frac{p}{\pi}} \beta J - \frac{p-1}{\pi} + \mathcal{O}(T). \tag{6.101}$$

A szabadenergia (6.65) kifejezésében még fellép a következő tag (δ^2 rendig számolunk)

$$
\begin{aligned}
&(p-1)q^p - pq^{p-1} + 1 = \\
&\quad = (p-1)\left(1 - p\delta + \frac{p(p-1)}{2}\delta^2\right) - p\left(1 - (p-1)\delta + \frac{(p-1)(p-2)}{2}\delta^2\right) + 1 \\
&\quad = \frac{p(p-1)}{2}\delta^2 = \mathcal{O}(T^2),
\end{aligned}
$$

ezt T-ben lineáris rendig elhagyhatjuk. Tehát az RS szabadenergia (6.65) szerint

$$
\begin{aligned}
-\beta f &= \sqrt{\frac{p}{\pi}}\beta J - \frac{p-1}{\pi} + \mathcal{O}(T) \\
&= -\beta e_0 + s_0 + \mathcal{O}(T).
\end{aligned}
$$

Innen közvetlenül leolvasható az alapállapoti entrópia értéke

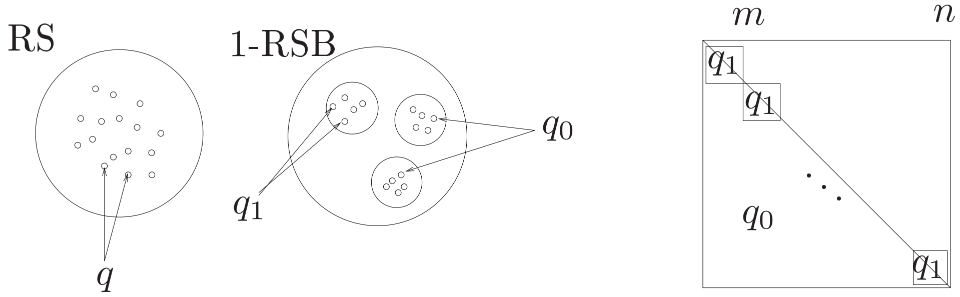
$$s_0 = -\frac{p-1}{\pi} < 0.$$

Diszkrét állapotterű rendszerben az entrópia nemnegatív, ezért az RS megoldás fizikailag elfogadhatatlan az alapállapotban, nemcsak a $p \to \infty$ határesetben.

6.14. Replika szimmetria sértés

6.14.1. A legegyszerűbb replika szimmetria sértés

Túl az RS megoldáson: replica symmetry breaking (RSB). Hogyan szüntessük meg a $\mathbf{Q}$ és $\hat{\mathbf{Q}}$ mátrixok homogenitását? Legegyszerűbb az egylépéses RSB (1-RSB), ld. 26. ábra.



26. ábra. RS: minden replika ugyanahhoz a tiszta állapothoz tartozik, az átfedés q. 1-RSB: A tiszta állapotok egyenértékűek, a replikák azokon belül azonos számban csoportosulnak, kétféle átfedés $q_1 < q_0$. Az 1-RSB-hez tartozó $\mathbf{Q}$ mátrixban az átlós elemek értéke 1, az $m \times m$ almátrixokban q_1, kívülük q_0 a nemdiagonális elemek értéke.

Legyen az n-dimenziós egységmátrix $\mathbf{I}_n$ és a homogén mátrix

$$\mathbf{U}_n = \begin{pmatrix} 11\ldots 1 \\ \vdots \\ 1\ldots\ 1 \end{pmatrix}. \tag{6.102}$$

Ezekkel az RS és 1RSB mátrixok

$$\text{RS:}\quad \mathbf{Q} = (1-q)\mathbf{I}_n + q\mathbf{U}_n, \tag{6.103}$$

$$\text{1RSB:}\quad \mathbf{Q} = (1-q_1)\mathbf{I}_n + (q_1-q_0)\mathbf{U}_m \otimes \mathbf{I}_{n/m} + q_0\mathbf{U}_n. \tag{6.104}$$

Hasonlóan a $\hat{\mathbf{Q}}$ mátrixra, ahol az átlós elemeket szintén 1-nek vehetjük, mert azok nem fordulnak elő a replika szabadenergiában. Határozzuk meg a replika szabadenergia tagjait. Először vizsgáljuk az alábbi összeget

$$\begin{aligned} \frac{1}{\binom{n}{2}}\sum_{a<b} A(q_{ab}) &= \frac{1}{\binom{n}{2}}\left\{\left[\binom{n}{2} - \frac{n}{m}\binom{m}{2}\right]A(q_0) + \frac{n}{m}\binom{m}{2}A(q_1)\right\} \\ &= xA(q_0) + (1-x)A(q_1), \end{aligned} \tag{6.105}$$

ahol

$$x = \frac{n-m}{n-1}, \quad 0 \le x \le 1. \tag{6.106}$$

Ha $n \to 0$, akkor rögzített x mellett $m \to x$, tehát m is folytonosnak tekintendő a $[0,1]$ intervallumban, s az egészekre fennálló $n > m$ reláció megfordul! Innen leolvasható, hogy az átfedések eloszlásában x a különböző, $1-x$ az azonos tiszta állapotok közötti átfedések valószínűségi súlya. Formulával

$$P(q) = x\delta(q-q_0) + (1-x)\delta(q-q_1). \tag{6.107}$$

A fentiek alapján

$$\sum_{a<b} q_{ab}\hat{q}_{ab} \approx -\frac{n}{2}\left((1-x)q_1\hat{q}_1 + xq_0\hat{q}_0\right), \tag{6.108}$$

$$\sum_{a<b} q_{ab}^p \approx -\frac{n}{2}\left((1-x)q_1^p + xq_0^p\right). \tag{6.109}$$

Továbbá szükségünk lesz a $\Phi(\boldsymbol{s})$-ben szereplő összegre

$$\sum_{a<b} \hat{q}_{ab} s_a s_b = \frac{1}{2}\left[\hat{q}_0 \left(\sum s_a\right)^2 + (\hat{q}_1 - \hat{q}_0) \sum_{k=1}^{n/m} \left(\sum_{a=(k-1)m+1}^{km} s_a\right)^2 - \hat{q}_1 \sum s_a^2\right], \quad (6.110)$$

ahonnan

$$\begin{aligned} \operatorname{Tr}\exp\left(\Phi(\boldsymbol{s})\right) &= e^{-n\hat{q}_1/2} \int \mathrm{D}z_0 \left(\prod_{k=1}^{n/m} \mathrm{D}u_k\right) \\ &\times \operatorname{Tr}\exp\left\{\sqrt{\hat{q}_0} z_0 \sum s_a + \sum_{k=1}^{n/m} u_k \sqrt{\hat{q}_1 - \hat{q}_0} \sum_{a=(k-1)m+1}^{km} s_a + \beta h \sum s_a\right\} \\ &= e^{-n\hat{q}_1/2} \int \mathrm{D}z_0 \left(\int \mathrm{D}z_1 2^m \cosh^m \Psi\right)^{n/m}, \quad (6.111) \\ \Psi &= z_0 \sqrt{\hat{q}_0} + z_1 \sqrt{\hat{q}_1 - \hat{q}_0} + \beta h. \quad (6.112) \end{aligned}$$

Mindezek alapján az 1-RSB szabadenergia függvény

$$\begin{aligned} -\frac{1}{n}\beta\, f(\mathbf{Q})\big|_{n=0} &= -\beta f(q_0, q_1, \hat{q}_0, \hat{q}_1, x) \\ &= -\frac{\beta^2 J^2}{4}\left(x q_0^p + (1-x) q_1^p\right) + \frac{\beta^2 J^2}{4} + \frac{1}{2}\left(x q_0 \hat{q}_0 + (1-x) q_1 \hat{q}_1\right) \\ &\quad -\frac{1}{2}\hat{q}_1 + \frac{1}{x}\int \mathrm{D}z_0 \ln \int \mathrm{D}z_1 2^x \cosh^x \Psi. \quad (6.113) \end{aligned}$$

A 1-RSB szabadenergia:

$$f = \max_{q_0, q_1, x} \operatorname*{extr}_{\hat{q}_0, \hat{q}_1} f(q_0, q_1, \hat{q}_0, \hat{q}_1, x). \quad (6.114)$$

Az állapotegyenleteket deriválással kapjuk (az x szerinti extremumot később vizsgáljuk)

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial q_i}: \quad \hat{q}_i &= \frac{p\beta^2 J^2}{2} q_i^{p-1}, \quad (6.115) \\ \frac{\partial}{\partial \hat{q}_1}: \quad q_1 &= \int \mathrm{D}z_0 \frac{\int \mathrm{D}z_1 \cosh^x \Psi \tanh^2 \Psi}{\int \mathrm{D}z_1 \cosh^x \Psi}, \quad (6.116) \\ \frac{\partial}{\partial \hat{q}_0}: \quad q_0 &= \int \mathrm{D}z_0 \left[\frac{\int \mathrm{D}z_1 \cosh^x \Psi \tanh \Psi}{\int \mathrm{D}z_1 \cosh^x \Psi}\right]^2. \quad (6.117) \end{aligned}$$

Az RS stacionaritási feltételeket visszakapjuk a $\hat{q}_0 = \hat{q}_1$ helyettesítéssel.

6.2. Házi feladat. *Vezessük le a fenti egyenleteket! (15%)*

6.14.2. A $p \to \infty$ eset (REM)

Ha $q_0 < 1$ akkor $\hat{q}_0 \to 0$. Pozitív $\hat{q}_1$-hez $q_1 = 1$ szükséges, ebből $\hat{q}_1 \to \infty$. Ekkor $|\Psi| \to \infty$, innen valóban $q_1 = 1$. Számítsuk ki q_0-t

$$2^x \cosh^x \Psi \approx e^{x|\Psi|} \approx 2\cosh x\Psi, \tag{6.118}$$

$$2^x \cosh^x \Psi \tanh \Psi \approx e^{x|\Psi|}\mathrm{sign}\Psi \approx 2\sinh x\Psi, \tag{6.119}$$

$$\int \mathrm{D}z_1 2^x \cosh^x \Psi \approx \int \mathrm{D}z_1 2\cosh x\Psi = e^{\hat{q}_1 x^2/2} 2\cosh x\beta h, \tag{6.120}$$

$$\int \mathrm{D}z_1 2^x \cosh^x \Psi \tanh \Psi \approx \int \mathrm{D}z_1 2\sinh x\Psi = e^{\hat{q}_1 x^2/2} 2\sinh x\beta h, \tag{6.121}$$

ahonnan

$$q_0 \approx \tanh^2 x\beta h. \tag{6.122}$$

A szabadenergia függvénybe visszahelyettesítjük a $q_1 = 1, \hat{q}_0 = 0, \hat{q}_1 \to \infty$ értékeket. Kiszámítandó

$$\begin{aligned}\int \mathrm{D}z_0 \ln \int \mathrm{D}z_1 2^x \cosh^x \Psi &\approx \int \mathrm{D}z_0 \ln \int \mathrm{D}z_1 2\cosh x\Psi = \int \mathrm{D}z_0 \ln \left(e^{\hat{q}_1 x^2/2} 2\cosh x\beta h\right) \\ &= \frac{1}{2}x^2\hat{q}_1 + \ln 2\cosh x\beta h.\end{aligned} \tag{6.123}$$

A $q_0^p = 0, q_1^p = 1$ felhasználásával (6.113)-ből kapjuk

$$\begin{aligned}-\beta f() &\approx -\frac{\beta^2 J^2}{4}(1-x) + \frac{\beta^2 J^2}{4} + \frac{1-x}{2}\hat{q}_1 - \frac{1}{2}\hat{q}_1 + \frac{1}{x}\left(\frac{1}{2}x^2\hat{q}_1 + \ln 2\cosh x\beta h\right) \\ &= \frac{\beta^2 J^2}{4}x + \frac{1}{x}\ln 2\cosh x\beta h = -\beta f(x,\beta,h).\end{aligned} \tag{6.124}$$

Az 1-RSB szabadenergia innen

$$f = \max_x f(x,\beta,h). \tag{6.125}$$

Az x a $\mathbf{Q}$ és $\hat{\mathbf{Q}}$ közös paramétere volt, a $\mathbf{Q}$-beli szerepe miatt keresünk maximumot az egyensúlyban. Vegyük észre, hogy az RS szabadenergia, ld. (6.68), ugyanúgy függ β-tól, mint az $f(x, \beta, h)$ az $x\beta$-tól

$$f(x, \beta, h) = f_{\rm RS}(x\beta, h). \tag{6.126}$$

Mivel az entrópia az RS megoldásban a T_1 hőmérsékleten vált zérussá, azaz az

$$s = \beta^2 \frac{\partial f_{\rm RS}(\beta, h)}{\partial \beta} = 0 \tag{6.127}$$

éppen $\beta_1 = 1/T_1$-ben teljesül, azért a maximum feltételből

$$x = \frac{T}{T_1}. \tag{6.128}$$

Eszerint $x \leq 1$ a $T \leq T_1$ esetén áll fenn, azaz az 1-RSB megoldás éppen az RS nemfizikai tartományában jelenik meg. A szabadenergia

$$f_{\rm 1RSB}(\beta, h) = f_{\rm RS}(\beta_1, h). \tag{6.129}$$

Az 1-RSB megoldáshoz $0 \leq q_0 < q_1 = 1$ tartozik, azaz itt a tiszta állapotok befagyottak (az állapotokon belül maximális az átfedés, lényegében egy konfiguráció jellemez egy tiszta állapotot), míg a tiszta állapotok makroszkopikusan elkülönülnek. Az entrópia a szabadenergia hőmérsékletfüggetlensége miatt zérus, azaz az állapotok száma

szubextenzív. Ezt kaptuk a REM megoldásakor $T < T_1$ esetén.

Megjegyezzük, hogy a szabadenergia deriváltja is folytonos T_1-ben. Eszerint másodrendű az átalakulás. Azonban a $q_1 = 1$ rendparaméter ugrásszerűen jelenik meg, ebből a szempontból diszkontinuus az átalakulás. Emlékezzünk arra, hogy az RS megoldás lokálisan stabil minden T-n, az RS és 1-RSB között a nagyobb szabadenergiájú a globálisan stabil. Lokálisan stabil állapotok közötti globális stabilitásváltás elsőrendű átalakulásokra jellemző.

6.14.3. Nagy p aszimptotika $h = 0$ mellett

A REM limesze speciális, vizsgáljuk a hozzá közeli, nagy p-vel jellemezhető rendszert. Ilyenkor a $q_0, \hat{q}_0$ kicsi, $q_1 \lesssim 1$, $\hat{q}_1 x^2 \to \infty$. A szabadenergia korrekciójához szükségünk lesz a következő függvényre

$$\xi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int \mathrm{d}z \left(2 \cosh zx - 2^x \cosh^x z\right). \tag{6.130}$$

A szabadergia függvényben megjelenik (a korrekcióban $\sqrt{\hat{q}_0/\hat{q}_1}$ lép fel, ezt elhanyagoljuk)

$$\int \mathrm{D}z_0 \ln \int \mathrm{D}z_1 2^x \cosh^x \Psi \approx \ln \int \mathrm{D}z_1 2^x \cosh^x z_1 \sqrt{\hat{q}_1}, \tag{6.131}$$

viszont (6.120) szerint $h = 0$-ban közelítőleg

$$\int \mathrm{D}z_1 2^x \cosh^x \Psi \approx \int \mathrm{D}z_1 2 \cosh x\Psi = 2e^{x^2\hat{q}_1/2}, \tag{6.132}$$

amiből az előző egyenletet folytatva kapjuk

$$\begin{aligned} &\ln\left[2e^{x^2\hat{q}_1/2} - \int \mathrm{D}z_1 \left(2\cosh xz_1\sqrt{\hat{q}_1} - 2^x \cosh^x z_1 \sqrt{\hat{q}_1}\right)\right] \\ &= \ln 2 + \frac{1}{2}\hat{q}_1 x^2 - \frac{\xi(x)}{2\sqrt{\hat{q}_1}} e^{-x^2\hat{q}_1/2}. \end{aligned} \tag{6.133}$$

Ezzel a szabadergia függvény

$$\begin{aligned} \beta f() &= x\left(\frac{\beta^2 J^2}{4} q_0^p - \frac{1}{2} q_0 \hat{q}_0\right) + (1-x)\left(\frac{\beta^2 J^2}{4} q_1^p + \frac{1}{2}(1-q_1)\hat{q}_1\right) \\ &\quad - \frac{\ln 2}{x} + \frac{\xi(x)}{2x\sqrt{\hat{q}_1}} e^{-x^2\hat{q}_1/2}. \end{aligned} \tag{6.134}$$

A stacionaritási feltételek

$$q_0 = 0, \tag{6.135}$$

$$q_1 = 1 - \frac{x\xi(x)}{(1-x)\sqrt{2p}\beta J} e^{-x^2 p\beta^2 J^2/4}, \tag{6.136}$$

$$\frac{1}{4}\beta^2 x^2 J^2 = \ln 2 + x^2 \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} \frac{\xi(x)}{x\sqrt{2p}\beta J} e^{-x^2 p\beta^2 J^2/4}. \tag{6.137}$$

Az átalakulást az $x = 1$ jellemzi.

6.3. Házi feladat. *Számítsuk ki az átalalkulási T_1 hőmérsékletet, és azalatt az x valószínűséget! (30%)* Megadjuk a végeredményt

$$T_1 = \frac{1}{2\sqrt{\ln 2}}\left(1 + 2^{-(p+1)}\sqrt{\frac{\pi}{p(\ln 2)^3}}\right), \tag{6.138}$$

$$x = \frac{T}{T_1}\left[1 - 2^{-(p+1)} \frac{T}{T_1} \xi\left(\frac{T}{T_1}\right) \sqrt{\frac{p}{2\ln 2}}\right] \tag{6.139}$$

6.14.4. Az 1-RSB megoldás stabilitása

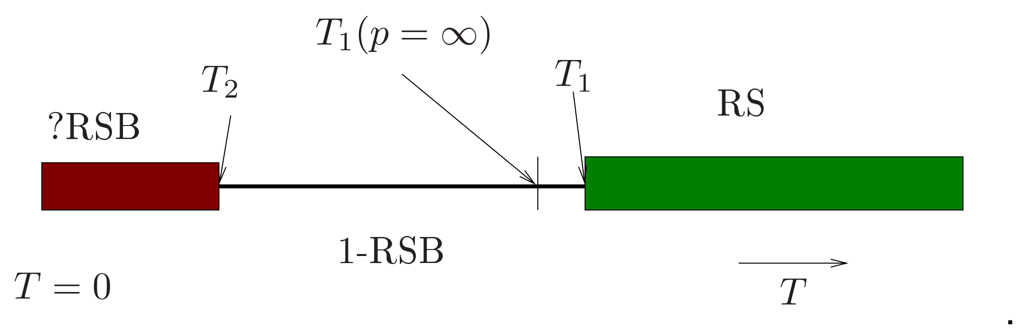
Vizsgáljuk meg az 1-RSB mátrixok tetszőleges δq_{ab} perturbációkkal szembeni stabilitását. Levezetés nélkül közöljük, hogy a „legveszélyesebb” sajátérték

$$\begin{aligned}
\Lambda &= 1-\lambda\hat{\lambda}, \\
\lambda &= (p-1)\frac{\hat{q}_1}{q_1}, \\
\hat{\lambda} &= \int \mathrm{D}z_0 \frac{\int \mathrm{D}z_1 \cosh^{x-4}\Psi}{\int \mathrm{D}z_1 \cosh^{x}\Psi}.
\end{aligned} \tag{6.140}$$

Ezt numerikusan vizsgálhatjuk, de nagy p-k mellett az előző rész eredményeit felhasználva explicit formulát kapunk. A $\Lambda > 0$ feltétel akkor teljesül, ha

$$T > T_2 = \frac{2p^{3/2}}{\sqrt{\pi}} 2^{-p}. \tag{6.141}$$

Az egyensúlyi fázisdiagramot a 27. ábra mutatja.



27. ábra. Az RS és 1-RSB megoldások stabilitási tartományai $p > 2$ mellett egyensúlyban. Ha $p \to 2$, akkor T_1, T_2 ugyanahhoz a limithez tart, az 1-RSB tartomány összezsugorodik.

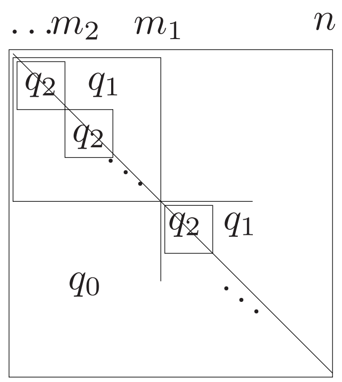
6.4. Házi feladat. *Írjuk le a rendszert a $p = 2 + \epsilon$ esetben! Használjuk ki, hogy az RS–>1-RSB átalalkulás gyengén elsőrendű, s számítsuk ki a T_1 küszöbértéket. Meddig terjed az 1-RSB stabilitása (adjuk meg T_2-t) (45%).*

6.15. Folytonos RSB

Az 1-RSB alacsony hőmérsékleten elveszti lokális stabilitását. Egyfajta általánosítása az R lépéses RSB (R-RSB) Parisi-mátrix

$$\text{1-RSB:}\quad \mathbf{Q} = (1-q_1)\mathbf{I}_n + (q_1-q_0)\mathbf{U}_m \otimes \mathbf{I}_{n/m} + q_0\mathbf{U}_n, \tag{6.142}$$

$$R\text{-RSB:}\quad \mathbf{Q} = \sum_{r=0}^{R+1}(q_r - q_{r-1})\mathbf{U}_{m_r} \otimes \mathbf{I}_{n/m_r}. \tag{6.143}$$



28. ábra. Az R-RSB-hez tartozó $\mathbf{Q}$ mátrix.

Feltesszük, hogy

$$q_{-1} = 0 \le q_0 \le q_1 \cdots \le q_R \le q_{R+1} = q_D = 1, \tag{6.144}$$

ahol a legnagyobb nemtriviális átfedés $q_{(1)} = q_R$, továbbá

$$m_{R+1} = 1 \le m_R \le m_{R-1} \cdots \le m_1 \le m_0 = n, \tag{6.145}$$

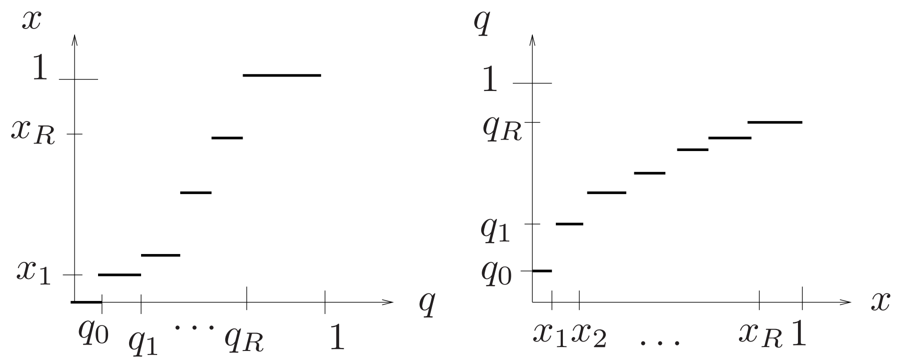
ahol m_r az m_{r-1} osztója, s ezért az

$$x_r = \frac{n - m_r}{n-1} \tag{6.146}$$

definícióval

$$x_{R+1} = 1 \ge x_R \ge x_{R-1} \cdots \ge x_1 \ge x_0 = 0, \tag{6.147}$$

Nyilván az RS megfelel az $R = 0$, az 1-RSB az $R = 1$ esetnek, és $R \to \infty$ mellett kapjuk a „folytonos” CRSB-t.

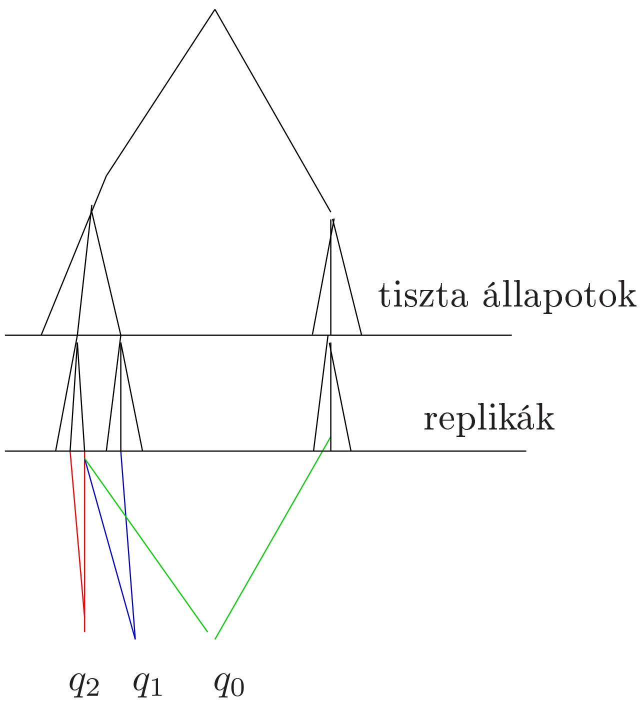


29. ábra. Az R-RSB $x(q)$ és $q(x)$ függvénye. Az Edwards-Anderson rendparaméter tiszta állapotokon belüli átfedés, q_R.

Paraméterezés: Az átfedési mátrixot a $\{x_r, q_r\}$ készlet jellemzi, vagy ekvivalensen az $x(q)$ lépcsős függvény. amelyet úgy definiálunk, hogy $x_r = x(q)$, ha $q_{r-1} - q_r$. A CRSB nem zárja ki a lépcsőt, de az $x(q)$ tartalmaz növekvő folytonos szakaszt is.

Az R-RSB próbamátrix az állapotok családfába rendeződését feltételezi. Három replika átfedésére ugyanis fennáll, hogy vagy mindhárom átfedés azonos, vagy a két kisebb (nagyobb távolságnak megfelelő) átfedés azonos. Ez az ultrametrika, képlettel

$$q_{ab} = q_{bc} = q_{ac}, \quad \text{vagy ha } q_{ab} > q_{bc} \text{ akkor } q_{ac} = q_{bc}. \tag{6.148}$$



30. ábra. Ultrametrikus fa $R = 2$ mellett.

Fennáll

$$\sum_{a,b} q_{ab} y_a y_b = \sum_{r=0}^{R+1} (q_r - q_{r-1}) \sum_{k_r=1}^{n/m_r} \left(\sum_{a=(k_r-1)m_r+1}^{k_r m_r} y_a \right)^2 , \tag{6.149}$$

ahonnan az $1 \to y_a$ és az $F(q_{ab}) \to q_{ab}$ helyettesítéssel nyerjük (az $a \neq b$ miatt a diagonál értékeket $F(q_{R+1}) = 0$-nak tekintjük, és $q_R = q_{(1)} = q(1^{-0})$)

$$\begin{aligned} \frac{1}{n} \sum_{a \neq b} F(q_{ab}) &= -F(q_R) + \sum_{r=0}^{R} \left(F(q_r) - F(q_{r-1}) \right) m_r \\ &= -F(q_{(1)}) + \int_0^{q_{(1)}} \mathrm{d}q\, \dot{F}(q) x(q) \\ &= -\int_0^1 \mathrm{d}q\, \dot{x}(q) F(q). \end{aligned} \tag{6.150}$$

Valószínűségi interpretáció

$$\frac{1}{\binom{n}{2}} \sum_{a<b} F(q_{ab}) = \int \mathrm{d}q\, P(q) F(q), \tag{6.151}$$

ahonnan kapjuk, hogy $\dot{x}(q) = P(q)$. A határfeltétellel összevetve adódik

$$x(q) = \int_0^q \mathrm{d}t\, P(t), \tag{6.152}$$

azaz $x(q)$ a $(0, q)$ intervallum valószínűségi mértéke.

6.15.1. $p = 2$: a Sherrigton-Kirkpatrick modell

A replika szabadenergia $p = 2$ esetén

$$-\beta f(\mathbf{Q}, \hat{\mathbf{Q}}) = \frac{\beta^2 J^2 n}{4} - \sum_{a<b} q_{ab} \hat{q}_{ab} + \frac{\beta^2 J^2}{2} \sum_{a<b} q_{ab}^2 + \ln \operatorname*{Tr}_{\boldsymbol{s}} \exp \Phi(\boldsymbol{s}), \tag{6.153}$$

ahol

$$\Phi(\mathbf{s}) = \sum_{a<b} \hat{q}_{ab} s^a s^b + \beta h \sum_a s^a. \tag{6.154}$$

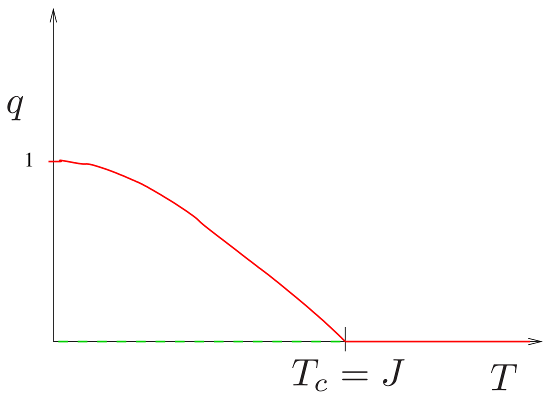
A stacionaritás egyik egyenletéből, $\hat{q}_{ab} = \beta^2 J^2 q_{ab}$, kiküszöböljük a $\hat{q}_{ab}$-t, s kapjuk

$$-\beta f(\mathbf{Q}) = \frac{\beta^2 J^2 n}{4} - \frac{\beta^2 J^2}{2} \sum_{a<b} q_{ab}^2 + \ln \operatorname*{Tr}_{\boldsymbol{s}} \exp \left(\beta^2 J^2 \sum_{a<b} q_{ab} s^a s^b + \beta h \sum_a s^a \right). \tag{6.155}$$

Az RS megoldást korábban felírtuk

$$
\begin{aligned}
m &= \int \mathrm{D}z \tanh\left(z\beta J\sqrt{q} + \beta h\right), \\
q &= \int \mathrm{D}z \tanh^2\left(z\beta J\sqrt{q} + \beta h\right). \qquad (6.156)
\end{aligned}
$$

Az átmenet folytonos, zérus térben a 31. ábrán látható állapotgörbe adódik.



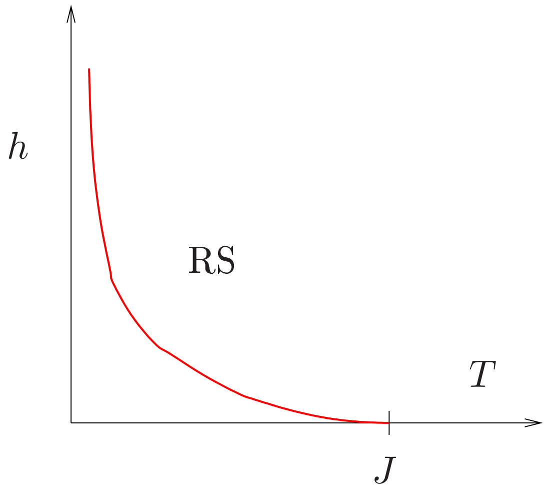
31. ábra. Az RS megoldás $h = 0$ mellett $p = 2$ esetén. Ha $T < T_c$, a $q = 0$ megoldás iteratívan, ezért lokálisan is instabil ($p > 2$-re lokálisan stabil volt).

A stabilitási paraméterek (de Almeida & Thouless)

$$\Lambda_1 = 1 - \beta^2 J^2 (1 - 4q + 3q_{(4)}), \qquad (6.157)$$

$$\Lambda_2 = 1 - \beta^2 J^2 (1 - 2q + q_{(4)}). \qquad (6.158)$$

Numerikusan kiértékelve kapjuk, hogy $\Lambda_2 \lessgtr 0$ ha $h \lessgtr h_c(T)$.



32. ábra. Az RS megoldás stabilitása $p = 2$ esetén. A $h_c(T)$ görbe alatt az RS állapot lokálisan instabil.

Tegyük fel, hogy az RSB megoldás a kritikus vonal közelében kevéssé tér el az RS-től, és fejtsünk sorba. Ha $h \ll J = T_c$, akkor kis q_{ab}-val számolhatunk,

$$\begin{aligned} \ln \operatorname*{Tr}_{\boldsymbol{s}} \exp\left(\sum_{a<b} \hat{q}_{ab} s^a s^b + \beta h \sum_a s^a\right) &= \ln\left(2^n + \operatorname*{Tr}_{\boldsymbol{s}} \sum_{a<b} \hat{q}_{ab} s^a s^b\right. \\ &\left. + \frac{1}{2} \operatorname*{Tr}_{\boldsymbol{s}} \left(\sum_{a<b} \hat{q}_{ab} s^a s^b\right)^2 + \frac{1}{2}\beta^2 h^2 \operatorname*{Tr}_{\boldsymbol{s}} \left(\sum_a s^a\right)^2 + \dots\right). \end{aligned} \tag{6.159}$$

Egy tagot példaképpen kiszámolunk (ne felejtsük, hogy $\hat{q}_{aa} = \hat{q}_{\mathrm{D}} = 0$)

$$\operatorname*{Tr}_{\boldsymbol{s}} \sum_{a<b,c<d} \hat{q}_{ab}\hat{q}_{cd} s^a s^b s^c s^d = 2^n \sum_{a<b} \hat{q}_{ab}^2 = 2^{n-1} \operatorname{Tr} \hat{\mathbf{Q}}^2. \tag{6.160}$$

Végül, a $\hat{q}_{ab} = \beta^2 J^2 q_{ab}$ helyettesítéssel (most $q_{aa} = q_{\mathrm{D}} = 0$)

$$\frac{1}{n}\beta f(\mathbf{Q}) + \frac{\beta^2(J^2 + 2h^2)}{4} + \ln 2 \approx -\frac{1}{2n}\left(\tau \operatorname{Tr} \mathbf{Q}^2 + \frac{1}{3} \operatorname{Tr} \mathbf{Q}^3 + \frac{1}{6} \sum_{a,b} q_{ab}^4 + \frac{h^2}{J^2} \sum_{a,b} q_{ab}\right), \tag{6.161}$$

ahol $\tau = (T_c - T)/T_c \approx (\beta^2 J^2 - 1)/2$, és a magasabb rendekhez $\beta J = 1$-et írtunk. Más negyedrendű tag is fellép, de arról később kiderül, hogy az a rendparaméter függvényt

vezető rendben nem befolyásolja. A

$$\mathbf{Q} = \sum_{r=0}^{R+1} (q_r - q_{r-1}) \mathbf{U}_{m_r} \otimes \mathbf{I}_{n/m_r} \tag{6.162}$$

Parisi-mátrixot az $\{x_r = (n - m_r)/(n-1), q_r\}$ készlet, vagy ekvivalensen a $q(x)$ függvény jellemzi, ld. a 29. ábrát. Fontos észrevétel, hogy azonos $\{m_r\}$ készlettel jellemzett Parisi-mátrixok szorzata szintén Parisi-mátrix, mert

$$\begin{aligned} \mathbf{U}_{m_1} \otimes \mathbf{I}_{n/m_1} \cdot \mathbf{U}_{m_2} \otimes \mathbf{I}_{n/m_2} &= m \mathbf{U}_{m'} \otimes \mathbf{I}_{n/m'}, \\ m &= \min(m_1, m_2), \\ m' &= \max(m_1, m_2), \end{aligned} \tag{6.163}$$

ahol kihasználtuk, hogy m osztója m'-nek. Ennek alapján, ha a $\mathbf{Q}$ mátrixot a q_{D}-vel és $q(x)$-szel jellemezzük, és bevezetjük a $\langle q \rangle = \int_0^1 q(x)\mathrm{d}x$ jelölést, akkor a

$$\mathbf{Q}\mathbf{Q}' = \mathbf{Q}''$$

szorzásnak a

$$q''_{\rm D} = q_{\rm D} q'_{\rm D} - \langle q(x) q'(x) \rangle \tag{6.164}$$

$$q''(x) = \left(q_{\rm D} - \langle q(x) \rangle\right) q'(x) + \left(q'_{\rm D} - \langle q'(x) \rangle\right) q(x) - \int_0^x (q(x) - q(y))(q'(x) - q'(y)) {\rm d}y \tag{6.165}$$

felel meg (a $'$ most nem derivált :-). Ez érvényes az RS, az R-RSB és CRSB állapotokra egyaránt. Figyelembe véve, hogy $q_{\rm D} = 0$, kapjuk

$$\frac{1}{n} \operatorname{Tr} \mathbf{Q}^2 = \left[\mathbf{Q}^2\right]_{aa} = -\left\langle q^2(x) \right\rangle, \tag{6.166}$$

$$\frac{1}{n} \sum_{ab} q_{ab}^4 = -\left\langle q^4(x) \right\rangle, \tag{6.167}$$

$$\frac{1}{n} \operatorname{Tr} \mathbf{Q}^3 = \left[\mathbf{Q}^3\right]_{aa} = \int_0^1 {\rm d}x \left[x q^3(x) + 3 q(x) \int_0^x q^2(y) {\rm d}y\right]. \tag{6.168}$$

Végül a paraméterezett szabadenergia a CRSB állapotban funkcionálként áll elő

$$\beta(f[0] - f[q(x)]) \approx \frac{1}{2} \int_0^1 {\rm d}x \left[\tau q^2(x) + \frac{1}{6} q^4(x) - \frac{x}{3} q^3(x) - q(x) \int_0^x {\rm d}y q^2(y) + \frac{h^2}{J^2} q(x)\right]. \tag{6.169}$$

6.5. Házi feladat. *Igazoljuk a szabadenergia funkcionál sorfejtett alakját, azaz végezzük el az itt nem bemutatott háttérszámításokat az (6.161-6.169) egyenletekhez. Vegyük észre, hogy a (6.164) kompozíciós szabályt elég két olyan R-RSB Parisi-mátrixra megmutatni, melyeket azonos $\{m_r\}$ készlet jellemez. Az $R \to \infty$ limesszel ugyanis különböző beosztású lépcsős, valamint sima függvényeket tetszőlegesen megközelíthetünk. (50%)*

A $q(x)$ szerint variálunk

$$0 = 2\tau q(x) + \frac{2}{3} q^3(x) - x q^2(x) - \int_0^x q^2(y) {\rm d}y - 2q(x) \int_x^1 q(y) {\rm d}y + \frac{h^2}{J^2}. \tag{6.170}$$

Deriválva x szerint

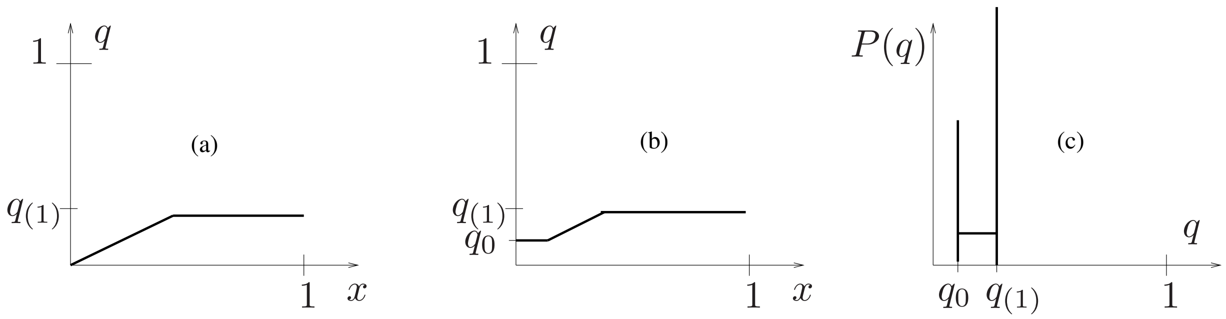
$$0 = \dot{q}(x) \left(\tau + q^2(x) - x q(x) - \int_x^1 q(y) {\rm d}y\right). \tag{6.171}$$

Vagy $\dot{q}(x) = 0$, vagy a zárójelben levő kifejezés eltűnik. CRSB megoldást keresünk, ezért a második esetet vizsgáljuk. Újabb differenciálással kapjuk

$$0 = 2\dot{q}(x)q(x) - q(x) - x\dot{q}(x) + q(x) \quad \Rightarrow \quad q(x) = \frac{x}{2}, \quad \text{vagy} \quad \dot{q}(x) = 0. \tag{6.172}$$

Ha $h = 0$, akkor (6.170) szerint $q(0) = 0$. Az $x \to 1$ limeszt véve kapjuk $q(1^{-0}) = q_{(1)}$-re

$$0 = 2\tau q_{(1)} - q_{(1)}^2 - \int_0^1 q^2(x)\mathrm{d}x \approx 2\tau q_{(1)} - 2q_{(1)}^2 \quad \Rightarrow \quad \tau \approx q_{(1)}. \tag{6.173}$$



33. ábra. A $q(x)$ függvény a kritikus vonal közelében, (a) $h = 0$, (b) $0 < h \ll J$, (c) mágneses tér jelenlétében a $P(q) = \dot{x}(q)$ valószínűségsűrűség függvény.

Kis mágneses tér jelenlétében a $q_{(1)}$ nem változik, de

$$q_0 \approx \frac{3}{4}\left(\frac{h}{J}\right)^{1/3}. \tag{6.174}$$

Összefoglalásképpen, a CRSB tiszta állapotok keveréke, a rendparaméter valójában függvény, fizikai jelentése az átfedések eloszlásával kapcsolatos.

A CRSB módszer kiterjeszthető a teljes alacsonyhőmérsékleti fázisra. Jóslata az alapállapoti energiára $E_0 \approx -0.763$ a szimulációs eredménnyel összhangban van! Az RS (és minden véges R-RSB) megoldásból negatív alapállapoti entrópia származott, ezzel szemben a CRSB entrópiája zérus, ezzel az ellentmodást kiküszöböltük. A stabilitás analízise azt mutatja, hogy nincs instabil perturbáció, ez azonban csak a lokális stabilitást igazolja. További eredmények abba az irányba mutatnak, hogy a Parisi-megoldás a globálisan stabil.

Számos más, rendezetlenséget tartalmazó rendszert, például ideghálózati modelleket és kombinatorikai optimalizációs feladatokat sikerült a termodinamikai limeszben a replika módszerrel megoldani. A közelmúltban a k-kielégíthetőségi problémában megfigyelhető fázisátalakulást spinüveg-analógia alapján írták le.

7. Szuszceptibilitások spinüvegekben

A véletlen csatolású spinrendszerekben különböző szuszceptibilitásokat definiálhatunk. Vezessük be a lokális külső teret, amelynek energiajáruléka

$$\Delta\mathcal{H} = -\sum_{i=1}^{N} h_i s_i .$$

Innen megadhatjuk a lokális szuszceptibilitás kifejezését

$$\chi_{ij} = \left.\frac{\partial m_i}{\partial h_j}\right|_{h=0} = \frac{1}{\beta}\left.\frac{\partial^2 \ln Z}{\partial h_i \partial h_j}\right|_{h=0} = \beta\left(\langle s_i s_j\rangle_{\mathrm{th}} - \langle s_i\rangle_{\mathrm{th}}\langle s_j\rangle_{\mathrm{th}}\right) .$$

A fenti képlet közvetlenül összeköti a lokális mágnesezettség fluktuációit a lokális szuszceptibilitással. A lokális szuszceptibilitás átlagolásával kapjuk a „szokásos” szuszcepti-

bilitást:

$$\chi = \frac{\partial m}{\partial h} = \frac{1}{N}\sum_i \frac{\partial m_i}{\partial h} = \frac{1}{N}\sum_{i,j}\chi_{ij} = \frac{\beta}{N}\sum_i (1-m_i^2) + \frac{2\beta}{N}\sum_{i<j}\chi_{ij}$$
$$= \beta(1-q_{\mathrm{e}}) + \frac{2\beta}{N}\sum_{i<j}\chi_{ij},$$

ahol bevezettük a q_{e} „empirikus” rendparamétert, amely függhet a választott átlagolástól. Emlékeztetünk arra, hogy a p-spin modell RS megoldásánál a szuszceptibilitásra

$$\langle\chi\rangle_{\mathrm{qu}} = \beta(1-q)$$

adódott, amiből

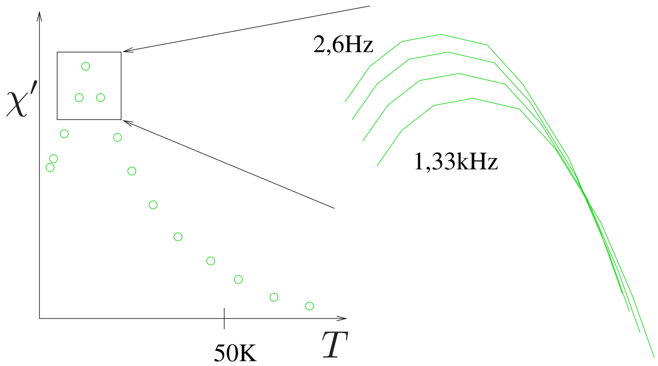
$$\frac{1}{N}\sum_{i<j}\chi_{ij} = 0$$

következik. Ez az eredmény általánosan igaz minden olyan esetben, amikor a csatolások $\rho(J)$ sűrűségfüggvénye páros.

A szuszceptibilitással kapcsolatosak a rendezetlen rendszerekre vonatkozó korai kísérleti eredmények. A frekvenciafüggő szuszceptibilitás

$$\chi(\omega) = \chi'(\omega) + \mathrm{i}\chi''(\omega),$$

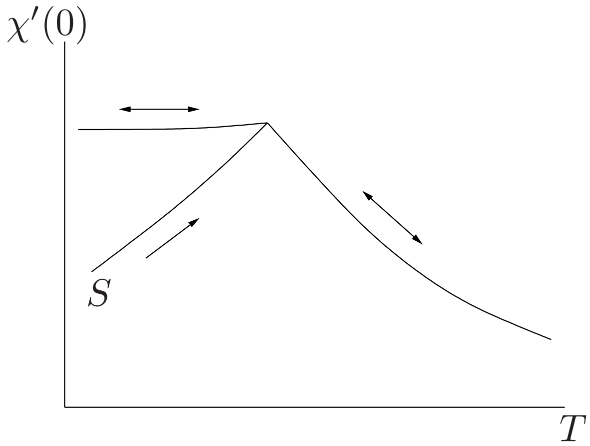
ahol a képzetes rész a csillapodást jellemzi. A mérések szerint χ' véges csúcsot („cusp”-ot) mutat.



34. ábra. $Cu_{1-x}Mn_x$, $x = 0,9\%$ valós szuszceptibilitása az $\omega \sim 2,6 - 1330$Hz tartományban. A csúcs környékén logaritmikus frekvenciafüggés?

Memória effektus: Ha $h < 0,05$Oe mellett lehűtjük a rendszert (zero-field-cooling), akkor a rendszer az S pontba jut. A hőmérsékletfüggés mérése után a rendszer már

nem tér vissza az alsó ágra. Ennek magyarázata, hogy a szuszceptibilitás méréséhez ($h \lesssim 6$ Oe) mágneses teret kell alkalmazni, amely mellett hűtve (field-cooling) más viselkedést mutat (ld. a 35. ábra).



35. ábra. Memória effektus

A mért szuszceptibilitás alapján bevezethetjük a q_{exp} kísérleti rendparaméter

$$\chi_{\mathrm{exp}} = \beta(1 - q_{\mathrm{exp}}).$$

amely tehát függ a rendszer előéletétől.

A fentieken túl több szuszceptibilitás jellegű mennyiséget vezethetünk be. A spinüveg szuszceptibilitás a negyedrendű korrelációs függvények egyikének felel meg:

$$\chi_{\mathrm{SG}} = \frac{1}{N} \sum_{ij} \chi_{ij}^2.$$

Legyen most a külső h_i tér normális eloszlású valószínűségi változó

$$\langle h_i \rangle = 0, \quad \langle h_i h_j \rangle = \sigma \delta_{ij},$$

amelynek alapján szintén definiálható szuszceptibilitás

$$\chi_\sigma = \left. \frac{\partial q}{\partial \sigma} \right|_{\sigma=0}.$$

Láthatóan ez is egy negyedrendű korrelációs függvényt határoz meg. Végül megemlítjük a nemlineáris szuszceptibilitást, amelyet a

$$m = \chi h - \chi_{\mathrm{nl}} h^3 + \cdots$$

összefüggés definiál. A nemlineáris és spinüveg szuszceptibilitás között összefüggés teremthető, ezért ez utóbbi is mérhető mennyiség.

8. A VIZSGÁRÓL

A vizsgán saját kézzel írt jegyzet használható a tétel kidolgozásakor. (Más által írt nem – előfordulhat, hogy az írásképet ellenőrzöm.) A tétel megváltható összesen 100%-ot kitevő házi feladatokkal. A tételt vagy a feladatokat táblánál adja elő a vizsgázó, eközben használhatja a tétel helyszíni kidolgozásakor készített jegyzeteit, ill. a magával hozott, saját kezűleg írt házi feladat megoldásokat.

A jelölttől bármit kérdezhetek, akár tételről, akár házi feladatokról számol be. Gyakran kérdezek is, akár olyasmit, ami kapcsolódik az anyaghoz, de nem volt róla szó a kurzuson, esetleg magam sem tudom rá a választ. Többször előfordult, hogy segítségemmel mindkettőnknek új összefüggést gondolt vagy számított ki a vizsgán az értelmes hallgató.

Sok szerencsét a készüléshez.

BOLDOG KARÁCSONYT ÉS
SIKEREKBEN GAZDAG ÚJ ÉVET!