



SVEUČILIŠTE U ZAGREBU
PRIRODOSLOVNO-MATEMATIČKI FAKULTET
FIZIČKI ODSJEK

IVAN BALOG

KONTINUIRANI FAZNI PRIJELAZ INDUCIRAN
ZAMRZNUTIM NEREDOM

DOKTORSKA DISERTACIJA

Zagreb, 2011.



UNIVERSITY OF ZAGREB
FACULTY OF SCIENCE
PHYSICS DEPARTMENT

IVAN BALOG

CONTINUOUS PHASE TRANSITION INDUCED BY
QUENCHED DISORDER

DOCTORAL THESIS

Zagreb, 2011.

TEMELJNA DOKUMENTACIJSKA KARTICA

Sveučilište u Zagrebu
Prirodoslovno-matematički fakultet
Fizički odsjek

Doktorska disertacija

Kontinuirani fazni prijelaz induciran zamrznutim neredom

IVAN BALOG

Institut za fiziku, Zagreb

Proučavaju se fazni prijelazi inducirani zamrznutim nemagnetičnim neredom na primjeru Pottsovog modela u 2 i 3d. Predložen je oblik slobodne energije u formalizmu skaliranja u konačnom sustavu, za opis takvog faznog prijelaza. Takav oblik implicira postojanje nehomogenosti na svim skalama pri takvom prijelazu kad je nered relevantan. Za računanje kritičnog ponašanja razvijen je algoritam "Ravnotežnog invazivnog grozda" (engl. "Equilibriumlike invaded cluster algorithm" - EIC) za model Nasumičnog grozda, koji može stimilirati sustav pri vlastitoj kvazikritičnoj temperaturi svake konfiguracije nereda. To svojstvo omogućuje prvu studiju kritičnog ponašanja u sustavima sa zamrznutim nemagnetičnim neredom u kojoj se usrednjuje pri vlastitim kvazikritičnim temperaturama svake konfiguracije nereda zasebno. Takvim pristupom pokazuje se da prostorne nekomogenosti zaista postoje na svim skalama u prijelazima induciranim zamrznutim nemagnetičnim neredom. Predloženi Ansatz za slobodnu energiju opisuje takav prijelaz neovisno o dimenzionalnosti sustava i karakteru prijelaza u čistom sustavu. Proračun daje termalni kritični eksponenti koji nije vezan Chayesovim kriterijem. To omogućuje divergirajući toplinski kapacitet.

(186 stranica, 47 slika, 43 tablice, 150 literaturnih navoda, jezik izvornika: hrvatski)

Rad je pohranjen u Središnjoj knjižnici za fiziku, PMF - Fizički odsjek, Bijenička c. 32, Zagreb.

Ključne riječi: fazni prijelazi / zamrznuti nemagnetični nered / spinski sustavi / model Nasumičnog grozda / samousrednjavanje / prostorne nehomogenosti

Mentor: Dr. sc. Katarina Uzelac, znanstveni savjetnik, Institut za fiziku

Povjerenstvo za obranu: Akademik Slaven Ž. Barišić, PMF
Dr. sc. Katarina Uzelac, IF
Prof.dr.sc Denis K. Sunko, PMF
Prof.dr.sc. Emil Babić, PMF
Prof.dr.sc. Amir Hamzić, PMF

Rad prihvaćen 8. ožujka 2011.

BASIC DOCUMENTATION CARD

University of Zagreb
Faculty of Science
Department of Physics

Doctoral Thesis

Continuous phase transition induced by quenched disorder

Ivan Balog
Institute of Physics, Zagreb

Phase transitions induced by quenched nonmagnetic disorder are studied using Potts model in 2 and 3d as an example. A form of free energy in the formalism of finite size scaling is proposed, for the description of those phase transitions. This form implies existence of inhomogeneities at all scales at the point of transition when disorder is relevant. For calculating the critical behavior "Equilibriumlike invaded cluster algorithm" (EIC) for Random cluster model is developed, which is capable of simulating a system at quasicritical temperature of each disorder configuration. This property enables the first study of critical behavior in systems with quenched nonmagnetic disorder in which the averaging is done at quasicritical temperatures of each disorder configuration. By this approach it is seen that spatial inhomogeneities exist on all scales in phase transitions induced by quenched nonmagnetic disorder. Proposed Ansatz for free energy describes the transition independently of dimensionality or the character of the transition in a pure case. Calculation reveals that thermal critical exponent is not bound by Chayes criterion. This opens the possibility of a divergent heat capacity.

(186 pages, 47 figures, 43 tables, 150 references, original in Croatian)

Thesis deposited in The Central Library for Physics, Faculty of Science - Department of Physics, Bijenička c. 32, Zagreb.

Keywords: phase transitions / quenched nonmagnetic disorder / spin systems / Random cluster model / selfaveraging / spatial inhomogeneities

Supervisor: Dr. sc. Katarina Uzelac, Senior Scientist, Institute of Physics

Commission for defense: Academician Slaven Ž. Barišić, PMF
Dr. sc. Katarina Uzelac, IF
Prof.dr.sc Denis K. Sunko, PMF
Prof.dr.sc. Emil Babić, PMF
Prof.dr.sc. Amir Hamzić, PMF

Thesis accepted: March 8th 2011.

Ova disertacija predložena je Fizičkom odsjeku Prirodoslovno-matematičkog fakulteta Sveučilišta u Zagrebu radi stjecanja akademskog stupnja DOKTORA ZNANOSTI IZ PODRUČJA FIZIKE

Zahvaljujem mentorici dr.sc. Katarini Uzelac što me uvela u ovo interesantno područje fizike, kao i za strpljivost koju je iskazala kroz godine suradnje. Kolegama iz grupe Juraju Szavits-Nossanu i Osoru Slavenu Barišiću zahvaljujem na brojnim diskusijama o fizici. Također bih htio zahvaliti roditeljima, te posebno djevojci Željki na podršci tijekom izrade ovog rada.

Sažetak

Utjecaj zamrznutog nemagnetičnog nereda na fazne prijelaze još uvijek nije do kraja razjašnjen i zaokuplja pažnju teorijskog i eksperimentalnog istraživanja. Dosadašnja istraživanja su pokazala da takav nered može promijeniti kritično ponašanje sustava s prijelazom drugog reda, ali i promijeniti režim prijelaza iz prvog reda u drugi.

Općeniti pristup faznom prijelazu induciranom s neredom jest konstrukcija efektivnog translacijski invarijantnog sustava za koji se pretpostavlja da će moći u potpunosti opisati prijelaz. Takav pristup omogućuje račune u okviru perturbativne renormalizacijske grupe, ali i značajno olakšava numeričke proračune. Neki noviji radovi međutim, daju indicije da takav opis nije ispravan. U radu je provedena detaljna diskusija i dani su originalni argumenti na temelju kojih se tvrdi da je pristup prijelazu pomoću efektivnog translacijski invarijantnog sustava neopravdan. Za opis faznog prijelaza sa zamrznutim nemagnetičnim neredom, predložen je oblik slobodne energije u formalizmu skaliranja u konačnom sustavu. Taj oblik je u mogućnosti uključiti prostorne nehomogenosti na svim skalama pri prijelazu induciranom neredom.

Kako bi se omogućilo računanje kritičnog ponašanja bez konstrukcije efektivnog translacijski invarijantnog sustava, predložen je Algoritam ravnotežnog invazivnog grozda (engl. "Equilibriumlike invaded cluster algorithm" - EIC) za model nasumičnog grozda ("Random cluster" - RC). Taj algoritam je utemeljen na algoritmu Invazivnog grozda, ali je u mogućnosti generirati ravnotežne konfiguracije sustava pri kvazikritičnoj temperaturi konačnog sustava. Izvorni doprinos je uvođenje restrikcije u algoritam Invazivnog grozda, koja uspostavlja uzorkovanje kanonskog ansambla. Ta numerička metoda temeljito je proučena u ovisnosti o pomoćnim parametrima koje je bilo nužno uvesti kako bi se uspostavilo uzorkovanje kanonskog ansambla. Može se argumentirati, korištenjem Kolmogorovljevog kriterija, da je algoritam ravnotežan uvijek kad ograničenje realizira određeni uvjet. Variranje parametara u dozvoljenom području

mijenja dinamički eksponent ovog algoritma, ali u rasponu koji je u skladu s Li-Sokalovom granicom.

Postojanje uvjeta ravnotežnosti i svojstvo samoregulacije u kvazikritičnu točku konačnog sustava čini EIC algoritam idealnim za proučavanje faznog prijelaza sa zamrznutim nemagnetičnim neredom jer omogućuje simuliranje sustava na kvazikritičnoj temperaturi svake konfiguracije nereda zasebno. To svojstvo omogućuje provođenje prve studije kritičnog ponašanja u sustavima sa zamrznutim nemagnetičnim neredom u kojoj se usrednjavanje provodi na vlastitim kvazikritičnim temperaturama svake konfiguracije nereda. Provođenjem računa lokalnog parametra reda pri kvazikritičnoj točki svake konfiguracije nereda, pokazuje se da prostorne nehomogenosti perzistiraju na svim skalama kad je nered relevantan. To je u skladu s Ansatzom koji uvodim za slobodnu energiju. Nehomogenosti čine usrednjavanje pri vlastitim kvazikritičnim temperaturama svake konfiguracije nereda nužnim jer takvo usrednjavanje uzima u obzir nehomogenosti na svim skalama na točki prijelaza.

Račun kritičnog ponašanja pokazuje da predloženi oblik slobodne energije opisuje fazni prijelaz u svim slučajevima kad je nered relevantan, nezavisno o dimenziji i vrsti prijelaza u čistom sustavu. Jedan od važnijih zaključaka jest da termalni kritični eksponent nije ograničen Chayesovim kriterijem. Taj eksponent nikada do sad nije računat jer se usrednjavanjem pri jedinstvenoj temperaturi u slici efektivnog translacijski invarijantnog sustava informacija o njemu kompletno gubi. S druge strane račun eksponenata koji opisuju fluktuacije u ansamblu nereda daje vrijednosti u vrlo dobrom slaganju s onim iz prijašnjih radova.

Summary

Influence of quenched nonmagnetic disorder on phase transitions is still an open problem, in focus of modern theoretical and experimental research. Previous works have shown that this kind of disorder not only may change the critical behavior of the system with second order phase transition, but also the character of a first order phase transition to continuous one.

A general approach to the phase transition induced by quenched disorder is an attempt to construct an effective translationally invariant system which is expected to capture the important features of the phase transition. This approach makes possible calculations by the perturbative renormalization group and also significantly simplifies numerical calculations. Some more recent works however, indicate that this approach might not be correct. In this work the approach via effectively translationally invariant system is discussed in detail and also original arguments are given to support the claim that this approach is not justified. For the description of the phase transition influenced by quenched nonmagnetic disorder, a form of free energy in the formalism of finite size scaling is proposed. This form is capable of including spatial inhomogeneities at all scales at the transition induced by disorder.

To make the calculation of critical behavior without constructing an effective translationally invariant system possible, Equilibriumlike invaded cluster (EIC) algorithm for Random Cluster model is proposed. This algorithm is based on Invaded cluster algorithm, but generates equilibrium configurations of system at its quasicritical point. Original contribution is in introducing the constraint in the nonequilibrium Invaded cluster algorithm, which reestablishes the sampling of canonical ensemble. EIC algorithm is studied in dependence on auxiliary parameters that were introduced to reestablish the sampling of canonical ensemble. By using Kolmogorov criterion, arguments are given that the algorithm is an equilibrium one, whenever a certain

condition is fulfilled. Varying the parameters in the allowed interval changes the dynamical exponent of the algorithm, keeping it in the range of Li-Sokal bound.

Existence of the criterion for equilibrium, together with the property of self-regulation to the quasicritical point of a finite system makes EIC algorithm ideal for studying phase transitions induced by quenched nonmagnetic disorder, because it allows simulating the system at quasicritical temperature of each disorder configuration. This property enables conducting the first study of critical behavior in systems with quenched nonmagnetic disorder in which averaging is done at intrinsic quasicritical temperatures of each disorder configuration. By calculating local order parameter at quasicritical point of each disorder configuration, it is demonstrated that spatial inhomogeneities persist at all scales when disorder is relevant. This is in agreement with the Ansatz that was introduced for the free energy. Inhomogeneities make averaging at quasicritical temperatures of each disorder configuration necessary because it takes into account inhomogeneities at all scales.

Calculation of critical behavior shows that the proposed Ansatz for free energy describes phase transition in all cases when disorder is relevant, independently of dimension and kind of the transition in the corresponding pure system. One of the most important conclusions is that thermal critical exponent is not bound by Chayes criterion. This exponent has not yet been calculated because by averaging at a unique temperature, which is equivalent to defining the effective translationally invariant system, the information about this exponent is completely lost. On the other hand calculation of exponents describing fluctuations in disorder ensemble, gives values that are in very good agreement with values from previous works.

Sadržaj

Sažetak	xiii
Summary	xv
1 Uvod	1
1.0.1 Plan izlaganja	3
1.1 Fazni prijelazi, skaliranje i homogenost	5
1.1.1 Homogenost slobodne energije	5
1.1.2 Skaliranje u konačnom sustavu	9
1.2 Pottsov model	10
1.2.1 Fortuin-Kasteleyn preslikavanje	12
1.3 Primjeri nereda	14
1.4 Nemagnetični nered u Pottsovom modelu	15
1.5 Termalizirani nered	16
2 Opći rezultati za fazni prijelaz s neredom	19
2.1 Harrisov kriterij	21
2.2 Chayesov kriterij	23
2.3 Egzaktni računi	25
2.4 Prijelaz u ef. translacijski invarijantnom sustavu	27
2.5 Imry-Ma argument i Aizenman-Wehr konstrukcija	28

2.6	Zaokruživanje faznog prijelaza prvog reda	34
2.7	Numerička istraživanja - nedostatak samousrednjavanja	35
2.8	Eksperimentalne realizacije	38
2.8.1	Sustavi	38
2.8.2	Metode raspršenja	39
2.8.3	Mjerenja toplinskog kapaciteta	41
3	Problem samousrednjavanja	43
3.1	Prijelaz u efektivnom translacijski invarijantnom sustavu	43
3.2	Homogenost i usrednjavanje	45
3.2.1	Homogenost slobodne energije za sustav s neredom	45
3.2.2	Usrednjavanje pri jedinstvenoj temperaturi	46
3.2.3	Nehomogenosti na skali veličine sustava	48
3.2.4	Chayesova duljina - ζ	49
3.3	Analitički primjeri učinka nereda	51
3.3.1	Kubični lanac s interakcijama prvih susjeda	51
3.3.2	Kvantni Isingov lanac u nasumičnom transverznom polju	54
3.4	Fluktuacije u sustavu s neredom	57
3.4.1	Fluktuacije termodinamičkog ansambla	58
3.4.2	Fluktuacije kvazikritične temperature u ansamblu nereda	61
3.4.3	Fluktuacije u ansamblu nereda	62
3.4.4	Omjer samousrednjavanja	64
3.5	Sažetak problema samousrednjavanja	65
4	EIC algoritam	67
4.1	Nelokalne MC simulacije	68
4.1.1	Geometrijska konstrukcija grozdova	68

4.2	Algoritam invazivnog grozda -IC	71
4.3	Razlog neispravnosti IC algoritma	73
4.4	EIC restrikcija	74
4.5	Rezultati EIC algoritma za kritične eksponente	75
4.5.1	Magentski kritični eksponent y_h	76
4.5.2	Termalni kritični eksponent y_τ i kritična temperatura	78
4.5.3	Sažetak kritičnih eksponenata i korekcija skaliranja	79
4.6	Detekcija prijelaza prvog reda	80
4.7	EIC vremenske korelacijske funkcije	81
4.8	Karakteristično vrijeme korelacija EIC algoritma	83
4.9	Slobodni parametri EIC algoritma	87
4.9.1	Parametar N_a	87
4.9.2	Parametar ν	88
4.10	<i>A posteriori</i> kriterij ravnotežnosti EIC simulacije	89
4.11	Prijašnji samoregulacijski algoritmi	92
4.12	EIC pristup prijelazu s neredom	93
4.12.1	Važnost Pottsovog modela s neredom	93
4.12.2	Uvođenje nereda	94
4.12.3	Specifičnosti računa s neredom	96
4.12.4	Tehnički aspekti računanja kritičnih eksponenata	98
5	Prostorne nehomogenosti na prijelazu	101
5.1	Lokalni parametar reda za čisti Pottsov model	102
5.2	Translacijska neinvarijantnost u sustavima s neredom	106
5.3	Skaliranje raspodjele lokalnih fluktuacija	107
5.3.1	Irelevantan nered - perkolacija u 2d	107
5.3.2	Relevantan nered - $q = 3$ Potts u 2d	109
5.3.3	Korelacijske funkcije sustava s neredom	113

6	Kritični eksponenti sustava s neredom	115
6.1	Primjer irelevantnog nereda – perkolacija	115
6.2	Slučajevi relevantnog nereda u 2D	121
6.2.1	Interes	121
6.2.2	Detalji simulacija	122
6.2.3	Fluktuacije termodinamičkog ansambla	124
6.2.4	Fluktuacije kvazikritičnih temperatura	128
6.2.5	Ponašanje srednjih vrijednosti	131
6.2.6	Omjeri samousrednjavanja	137
6.3	Slučajevi relevantnog nereda u 3D	139
6.3.1	Interes	139
6.3.2	Detalji simulacija	140
6.3.3	Fluktuacije termodinamičkog ansambla	142
6.3.4	Fluktuacije kvazikritičnih temperatura	149
6.3.5	Ponašanje srednjih vrijednosti	152
6.3.6	Omjeri samousrednjavanja	154
7	Zaključci i rasprava	157
7.1	Sažetak	157
7.2	Kritično ponašanje prijelaza s neredom	158
7.2.1	Termalni eksponenti	159
7.2.2	Fluktuacije energije u ansamblu nereda	161
7.2.3	Magnetski eksponenti	162
7.2.4	Omjer samousrednjavanja	163
7.3	Eksperimentalna predikcija divergencije toplinskog kapaciteta	164
7.4	Otvorena pitanja	165
A	Tablice s rezultatima proračuna za 2d	169

B Tablice s rezultatima proračuna za 3d	173
Bibliografija	179
Životopis	187
Popis radova	189

1. Uvod

Proučavanje faznih prijelaza doživjelo je procvat 70-tih godina dvadesetog stoljeća pojavom ideja renormalizacijske grupe (RG) Kennetha Wilsona [1, 2]. Renormalizacijska grupa je omogućila sistematski pristup termodinamičkim sustavima koji pokazuju divergirajuću prostornu skalu, metodama teorije polja. Taj pristup omogućio je dublje uvide u općenite principe. Kao ogledni primjer faznog prijelaza razmatramo feromagnetski kristal. Fazni prijelaz iz para- u feromagnetsku fazu događa se na konačnoj temperaturi, a feromagnetsku fazu karakterizira vrijednost magnetizacije (parametar reda) različita od 0. Eksperimentalna mjerenja na feromagnetskim sustavima pokazivala su potencijско ponašanje veličina kao magnetizacija, toplinski kapacitet ili magnetska susceptibilnost, opisano netrivialnim eksponentima (pregled eksperimentalnih mjerenja moguće je naći u standardnim udžbenicima kao na primjer [3]).

Jednostavan model feromagnetizma predložio je 1920. godine Wilhelm Lenz [4] kao temu svom doktorandu Ernestu Isingu. Zamislimo jednodimenzionalni lanac integrirajućih stupnjeva slobode zadan Hamiltonijanom:

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j. \quad (1.1)$$

S $\langle \cdot \rangle$ označena je suma po prvim susjedima, a stupnjevi slobode σ_i , koje nazivamo spinovima, mogu poprimiti vrijednosti 1 ili -1 . Ising [5] je 1925. godine pokazao da za takav sustav ne postoji fazni prijelaz pri temperaturi različitoj od 0.

Za više dimenzije fazni prijelaz pri $T \neq 0$ postoji. Particijsku funkciju za Isingov sustav u 2d na kvadratnoj rešetci egzaktno je izvrijednio Lars Onsager [6] 1944. godine. Pokazalo se parametar reda i magnetska susceptibilnost pokazuju netrivialno potencijско ponašanje kvalitativno slično eksperimentalno uočenom oko konačne

kritične temperature T_C . Toplinski kapacitet pokazuje logaritamsku divergenciju za temperature bliske temperaturi prijelaza: $c \propto \ln(|T - T_C|)$.

Proučavanje pojednostavljenih statističkih modela predstavlja jako bitan izvor znanja o faznim prijelazima i daje osnovnu intuiciju o toj pojavi [7, 3]. Ali istinsko razumijevanje feromagnetizma u realnim sustavima mora uključiti i razumijevanje utjecaja nečistoća na idealizirani čisti sustav [8]. U ovom radu bavimo se utjecajem nemagnetičnog zamrznutog nereda na fazne prijelaze. U terminima feromagnetskog kristala, takav nered je ostvaren zamjenom određenog broja feromagnetskih atoma nemagnetičnim atomima. Postojanje nemagnetskog nereda uvodi nasumičan utjecaj na lokalnu funkciju gustoće energije sustava. Bitna značajka zamrznutog nereda jest svojstvo da se ne može termalizirati sa stupnjevima slobode sustava.

Uvođenje nemagnetičnog zamrznutog nereda u sustav može suštinski promijeniti kritično ponašanje i uvesti značajke koje se ne javljaju u faznom prijelazu u čistom modelu. Tu činjenicu demonstrira rad McCoya i Wua [9] iz godine 1969. Oni su konstruirali specijalni slučaj zamrznutog nemagnetičnog nereda u 2d Isingovom modelu, što im je omogućilo egzaktno rješavanje problema (pogledati odjeljke 2.3 i 3.3.2). Suštinska pitanja koja njihovi rezultati otvaraju, ilustracija su da utjecaj nereda na fazni prijelaz ima duboke posljedice s teorijskog i eksperimentalnog aspekta.

A priori se može očekivati da je utjecaj nereda na fazni prijelaz gotovo uvijek značajan. Nametanje zamrznutog nereda može se smatrati nametanjem vanjske perturbacije. U velikoj većini slučajeva sustavi na točki faznog prijelaza karakterizirani su divergirajućim odzivom na vanjske perturbacije. Na temelju toga može se očekivati da efekt nereda na fazni prijelaz neće biti moguće opisati perturbacijom čistog sustava.

Kritično ponašanje se proučava na primjerima jednostavnih statističkih modela kao što su Isingov [5] ili Pottsov [10]. Upravo zato što je uočeno da fazni prijelazi pokazuju svojstva univerzalnosti, na temelju zaključaka izvedenih u jednostavnim modelima može se shvatiti općenite principe. Takvi jednostavni statistički modeli, kakve proučavamo u ovom radu, sadrže samo jednu vrstu stupnjeva slobode (na primjer spinovi) koji međusobno interagiraju i koji se nalaze na idealnoj rešetki u d dimenzija. Dodatni stupnjevi slobode vezani uz, na primjer, rešetku ili elektronski podsustav mogu uvesti dodatne efekte i pobuđenja pa se takvi slučajevi u ovom radu ne razmatraju.

1.0.1 Plan izlaganja

U uvodnom poglavlju ovoga teksta izlažemo neke osnovne koncepte neizostavne u svim modernim pristupima proučavanju faznih prijelaza, kao što su invarijantnost na skalu i pojam homogenosti termodinamičkih potencijala oko točke prijelaza. Nakon toga definiramo i ukratko opisujemo Pottsov model kao ogledni primjer za proučavanje faznih prijelaza. Na tom modelu kasnije u radu istražujemo neperturbativne učinke uvođenja nereda na fazni prijelaz. U prirodi su moguće razne realizacije nereda u sustavima koje imaju suštinski različite učinke na fazni prijelaz. Zbog toga se u ovom radu usredotočujemo na nemagnetični nered, za koji pokazujemo kako se uvodi u Pottsov model.

Drugo poglavlje sadrži pregled najvažnijih općih rezultata vezanih uz utjecaj nereda na fazne prijelaze. Posebnu pažnju smo posvetili općim kriterijima za relevantnost nereda koji sadržavaju najvažnije koncepte nužne za razumijevanje njegovog učinka na prijelaz. Pokazuje se da su ti koncepti tako općeniti da se često mogu primijeniti na konceptualno različite slučajeve utjecaja nereda na fazne prijelaze prvoga i drugoga reda. U ovom poglavlju prikazan je i detaljan pregled metoda koje su korištene u teorijskim pristupima računanju kritičnih svojstava konkretnih modela. Navodimo također i pregled nekih eksperimentalnih radova koji se odnose na utjecaj nemagnetičnog nereda na fazni prijelaz.

U trećem poglavlju uvodimo problem samousrednjavanja pri faznom prijelazu u sustavu s neredom. Diskutiramo vezu slike prijelaza drugog reda u efektivnom translacijski invarijantnom sustavu sa standardnim postupkom usrednjavanja po konfiguracijama nereda koji, pod pretpostavkom da je ispravan, omogućuje ili olakšava brojne analitičke i numeričke pristupe problemu. Navodimo zatim analitičke primjere koji su bitni za razumijevanje problema samousrednjavanja. Demonstriramo kako nedostatak translacijske invarijantnosti pri prijelazu ima duboke implikacije na kritično ponašanje čiju punu kompleksnost nije moguće shvatiti preko ponašanja efektivnog translacijski invarijantnog sustava. Predlažemo oblik slobodne energije u formalizmu skaliranja u konačnom sustavu, koji dozvoljava prostorne nehomogenosti na svim skalama pri točki prijelaza. Postavljamo pristup određivanju svojstava faznog prijelaza u kojemu su prostorne nehomogenosti bitne, kao što je prijelaz s relevantnim zamrznutim neredom. Da bismo mogli provesti račun koji zahtjeva taj pristup, tijekom izrade ove disertacije

razvijen je algoritam "ravnotežnog invazivnog grozda" (engl. "Equilibriumlike invaded cluster" - EIC) [11, 12].

U četvrtom poglavlju polazimo od osnovnih principa nelokalnih Monte Carlo simulacija i njihove primjene u računanju kritičnog ponašanja. Koristeći geometrijsku interpretaciju faznog prijelaza u Pottsovom modelu, objašnjavamo kako EIC algoritam generira ravnotežne konfiguracije karakteristične za kvazikritičnu točku konačnog sustava. Algoritam se temelji na neravnotežnom algoritmu invazivnog grozda [13]. U njega je uvedena restrikcija, utemeljena na svojstvima particijske funkcije Pottsovog modela, kako bi se uspostavio kanonski ansambl. Prikazujemo detaljne račune na čistom Pottsovom modelu koji pokazuju da se postupkom može odrediti kritične eksponente s preciznošću usporedivom s najboljim postojećim rezultatima uz znatno manji numerički trud jer lociranje kritične točke nije potrebno. Diskutiramo i dinamička svojstva algoritma koja je moguće mijenjati izborom restrikcije u dozvoljenom području. Kao posebno bitan detalj ističemo *a posteriori* kriterij ravnotežnosti simulacije čije zadovoljavanje implicira ravnotežnost konfiguracija koje su generirane. Na kraju poglavlja, diskutiramo kako smo EIC algoritam primijenili na proučavanje kritičnog ponašanja u Pottsovom modelu sa zamrznutim nemagnetičnim neredom.

U petom poglavlju, na temelju računa lokalne magnetizacije, pokazujemo kako su prostorne nehomogenosti pri točki prijelaza bitne na svim skalama, kad je nered relevantan. S druge strane, kada je nered irelevantan, prostorne nehomogenosti na prijelazu nestaju u granici beskonačnog sustava. Ovaj rezultat iznimno je bitan jer dovodi u pitanje postupak konstrukcije efektivnog translacijski invarijantnog sustava. EIC algoritam nam omogućuje određivanje kritičnog ponašanja u sustavu u kojem su prostorne nehomogenosti bitne na točki prijelaza jer je u stanju računati observable sustava pri kvazikritičnoj temperaturi svake konfiguracije nereda konačnog sustava zasebno.

U šestom poglavlju predstavljamo račune kritičnog ponašanja u sustavu s neredom EIC algoritmom. Na primjerima u kojima je nered irelevantan, demonstriramo da je kritično ponašanje određeno eksponentima čistog modela. Kada je nered relevantan, pokazuje se da su termodinamičke fluktuacije observabli pri prijelazu subdominantne fluktuacijama u ansamblu nereda. Direktno smo računali eksponente koji opisuju termodinamičke fluktuacije i koji nikada prije do sada nisu računati, koliko znamo. Naše rezultate povezujemo s prijašnjim radovima u području. Demonstriramo kako stan-

dardno usrednjavanje pri jedinstvenoj temperaturi omogućuje računanje samo nekih eksponenata koji karakteriziraju fluktuacije u ansamblu nereda, a "maskira" termodinamičke fluktuacije energije onemogućavajući tako određivanje pripadnog eksponenta.

U sedmom poglavlju sumiramo zaključke ovoga rada. Ističemo eksperimentalne predikcije koje on implicira i navodimo brojne mogućnosti za daljnja istraživanja.

1.1 Fazni prijelazi, skaliranje i homogenost

U termodinamičkom smislu, faznim prijelazima svojstveno je singularno ponašanje termodinamičkih potencijala koji opisuju sustav, kao što su Gibbsova energija ili Helmholtzova slobodna energija. Fazni prijelaz predstavlja promjenu režima stanja u kojemu se termodinamički sustav nalazi i koja se događa infinitezimalnom promjenom termodinamičkih parametara (npr. temperatura ili tlak). Tu promjenu se opisuje posebno izabranom termodinamičkom observablom koja je jednaka nuli u neuređenoj (entropijski dominiranoj), ali različita od nule u uređenoj (energijski dominiranoj) fazi. Ta observabla naziva se parametar reda.

Najuobičajenija klasifikacija faznih prijelaza je *Ehrenfestova*. Kad je n -ta derivacija termodinamičkog potencijala prekinuta, fazni prijelaz je n -tog reda. U faznom prijelazu prvog reda observable koje odgovaraju prvim derivacijama termodinamičkog potencijala (kao na primjer parametar reda), pokazuju skok na točki prijelaza, dok su pri faznom prijelazu drugog reda kontinuirane. Eksperimentalna proučavanja kritičnih eksponenata koji opisuju kontinuirane fazne prijelaze pokazala su pojavu univerzalnosti, odnosno neosjetljivost njihovih vrijednosti na mikroskopske detalje sustava.

1.1.1 Homogenost slobodne energije

U blizini faznog prijelaza drugog reda, gustoće termodinamičkih observabli i njihove fluktuacije pokazuju singularno, najčešće potencijalno ponašanje u ovisnosti o reduciranoj temperaturi $\tau = T - T_C$ i magnetskom polju h [14]. Kako se u ovom radu bavimo kritičnim ponašanjem u spinskim sustavima, koristit ćemo standardne observable, energiju i magnetizaciju [15, 16], ali za drugačije sustave moguće je sve izloženo u ovom odjeljku reformulirati u analognim observablama. Potencijalno ovisnost veličina

oko točke prijelaza opisana je kritičnim eksponentima α , β , γ i δ koji općenito mogu biti realni brojevi.

$$\begin{aligned}
 m(\tau, h = 0) &\propto (-\tau)^\beta, \quad \tau < 0 \\
 \chi(\tau, h = 0) &\propto |\tau|^{-\gamma} \\
 c(\tau, h = 0) &\propto |\tau|^{-\alpha} \\
 m(\tau = 0, h) &\propto |h|^{1/\delta} \text{sgn}(h).
 \end{aligned}
 \tag{1.2}$$

U tim izrazima m je magnetizacija (parametar reda), χ magnetska susceptibilnost i c toplinski kapacitet.

Ovakvo ponašanje observabli može se opisati hipotezom skaliranja. To je općenita tvrdnja o ponašanju observabli oko točke faznog prijelaza drugog reda i ne odnosi se na specifičan model. Njena osnovna polaznica jest da su dugodosežne korelacije fluktuacija spinova blizu kritične temperature uzrok singularnog ponašanja.

Doseg korelacija opisuje korelacijska duljina ξ , čija divergencija je oko faznog prijelaza dana potencijskim zakonom:

$$\xi \propto |\tau|^{-\nu} \tag{1.3}$$

U ovoj slici divergirajuća korelacijska duljina jedina je relevantna dugodosežna skala koja određuje singularno ponašanje termodinamičkih funkcija i observabli. Divergirajuća prostorna skala na kritičnoj temperaturi implicira da je ponašanje sustava samoslično na svim prostornim skalama. Slobodna energija $F = L^d f$ (ili bilo koji drugi termodinamički potencijal) može se zapisati kao zbroj analitičkog $L^d g$ i singularnog dijela $L^d f_s$, od kojih je singularni dio bitan za opis faznog prijelaza:

$$L^d f(\tau, h) = L^d g(T, h) + L^d f_s(\tau, h). \tag{1.4}$$

Singularno ponašanje slobodne energije rezultira postojanjem singularnih dijelova observabli koje oko točke prijelaza karakterizira ponašanje prema potencijskom zakonu.

Argument dimenzionalne analize neposredno daje informaciju o svojstvima reska-

liranja singularnih dijelova veličina O_s . Termodinamičke observable O u slobodnu energiju ulaze u konjugiranim parovima s pripadnim termodinamičkim silama x i čine članove tipa Ox . To se posebno odnosi i na singularne dijelove observabli, označene indeksom "s". Stoga članovi $L^d(T - T_C)e_s$ ili $L^d h m$ moraju biti invarijantni na skalu što implicira potencijsko ponašanje faktora umnoška.

Singularni dio slobodne energije, pri reskaliranju za faktor b se može pisati u obliku homogene funkcije:

$$f_s(\tau, h) \rightarrow b^{-d} f_s(b^{y_\tau} \tau, b^{y_h} h), \quad \tau = T - T_C. \quad (1.5)$$

Homogenost slobodne energije (1.5) samo je aproksimacija koja vrijedi u blizini kritične točke u parametarskom prostoru koju nazivamo "kritičnim područjem". Izvan kritičnog područja mogu postati bitni i nelinearni članovi polja skaliranja kao i utjecaji irelevantnih polja skaliranja. Irelevantna polja označena s "u", ulaze u slobodnu energiju preko članova oblika $L^{y_i} u$ gdje je $y_i < 0$.

Argumentacijom skaliranja može se zaključiti o reskaliranju magnetizacija-magnetizacija korelacijske funkcije. Deriviranjem slobodne energije (1.5) po poljima na dva različita mjesta dobiva se korelacijska funkcija:

$$\Gamma(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) = \frac{\partial^2}{\partial h(\vec{r}_1) \partial h(\vec{r}_2)} f_s(\tau, h(\vec{r}))|_{h(\vec{r}) \rightarrow 0} \quad (1.6)$$

Za translacijski invarijantne sustave korelacijska funkcija ovisi samo o $r \equiv |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|$ pa se reskalira kao:

$$\Gamma(r, \tau) = b^{-2(d-y_h)} \Gamma\left(\frac{r}{b}, b^{y_\tau} \tau, b^{y_h} h\right). \quad (1.7)$$

Za $r > \xi$, ponašanje korelacijske funkcije proporcionalno je s $\propto e^{-\frac{r}{\xi}}$. To se vidi na primjeru opisa sustava u režimu "srednjeg polja" s Ginzburg-Landau funkcionalom u kojemu gradijentni član daje eksponencijsku ovisnost. Ako (1.7) reskaliramo za udaljenost $|\vec{r}_1 - \vec{r}_2| \equiv b$, temperaturna ovisnost funkcije skaliranja na desnoj strani pokazuje da je eksponent y_τ povezan s eksponentom divergencije korelacijske duljine ν i da vrijedi: $y_\tau \equiv 1/\nu$. Zbog tog se reproducira ovisnost korelacijske funkcije o omjeru r/ξ . Faktor reskaliranja ispred funkcije skaliranja u izrazu (1.7) daje potencijsko

ponašanje korelacijske funkcije u režimu kada je $r < \xi$, gdje je $\Gamma(r) \propto \frac{1}{r^{2(d-y_h)}} = \frac{1}{r^{d-2+\eta}}$, tako definirajući eksponent η koji je povezan s anomalnom dimenzijom parametra reda. Stoga se korelacijsku funkciju sustava oko faznog prijelaza drugog reda (s kratkodosežnim interakcijama!), u asimptotskom režimu može pisati kao:

$$\Gamma(r, \tau) = C \cdot \frac{e^{-\frac{r}{\xi}}}{r^{d-2+\eta}} \quad (1.8)$$

Parcijalnim deriviranjem izraza (1.5) po varijablama τ i h dobivaju se veličine iz (1.2) u odgovarajućim granicama. Tako se pomoću eksponenata reskaliranja temperature, y_τ i polja y_h mogu izraziti kritični eksponenti koji opisuju potencijско ponašanje veličina koje su nam interesantne (izrazi (1.2) i (1.8)):

$$\begin{aligned} \alpha &= 2 - \frac{d}{y_\tau} \\ \beta &= \frac{d - y_h}{y_\tau} \\ \gamma &= \frac{2y_h - d}{y_\tau} \\ \delta &= \frac{y_h}{d - y_h} \\ \nu &= \frac{1}{y_\tau} \\ \eta &= 2 + d - 2y_h \end{aligned} \quad (1.9)$$

Prema hipotezi skaliranja samo su dva eksponenta nezavisna, pa stoga postoje relacije među njima od kojih navodimo neke:

$$\begin{aligned} \alpha + 2\beta + \gamma &= 2 \\ \alpha + \beta(1 + \delta) &= 2 \\ \beta + \gamma &= \beta\delta \\ \delta &= \frac{d + 2 - \eta}{d - 2 + \eta} \end{aligned} \quad (1.10)$$

1.1.2 Skaliranje u konačnom sustavu

U proučavanju faznih prijelaza, korisno je definirati pojam "područja zaokruživanja". Singularnosti slobodne energije na faznom prijelazu, postoje samo u limesu beskonačnog sustava, ali o njima se može zaključiti proučavanjem konačnih sustava [17].

Područje zaokruživanja ima značenje područja u parametarskom prostoru odgovarajućeg beskonačnog sustava gdje je $\xi > L$, dok je u konačnom sustavu ξ ograničen s L . Ako promatramo konačan sustav s kontinuiranim faznim prijelazom, za vrijednosti parametara izvan područja zaokruživanja, observable (i njihove fluktuacije) izračunate na njemu su jednake kao one u zaista "beskonačnom sustavu". Ako je konačan sustav unutar područja zaokruživanja, observable (i njihove fluktuacije) se razlikuju od onih koje opisuju beskonačan sustav. Područje zaokruživanja u parametarskom prostoru oko točke prijelaza za prethodno opisane sustave s faznim prijelazom drugog reda može se procijeniti kao:

$$\delta\tau \propto L^{-y_\tau} = L^{-\frac{1}{\nu}} \quad (1.11)$$

$$\delta h \propto L^{-y_h} \quad (1.12)$$

Zbog ograničenosti korelacijske duljine konačnošću sustava, varijacije observabli unutar područja zaokruživanja su blage. Uvrštavanjem pomaka (1.11) ili (1.12) u izraze (1.2) i u izraz za korelacijsku funkciju, mogu se procijeniti asimptotske vrijednosti observabli u području zaokruživanja:

$$\begin{aligned} m_C &\propto L^{-\frac{\beta}{\nu}} \\ \chi_C &\propto L^{\frac{\gamma}{\nu}} \\ c_C &\propto L^{\frac{\alpha}{\nu}} \\ \Gamma_C(r) &\propto \frac{1}{L^{2(d-y_h)}} \end{aligned} \quad (1.13)$$

U okviru numeričkog proučavanja faznog prijelaza u ovisnosti o veličini sustava L , može se odrediti vrijednost observable u području zaokruživanja. Kritični eksponenti

se računaju iz skaliranja vrijednosti observabli u području zaokruživanja prema izrazu (1.13). To zahtijeva njihovo računanje u ovisnosti o L iz čega se mogu odrediti eksponenti.

1.2 Pottsov model

Paradigmatski model za proučavanje faznih prijelaza je Pottsov model [10, 20]. On je definiran na geometrijski proizvoljnoj rešetci i opisan Hamiltonijanom:

$$H = - \sum_{\langle i,j \rangle} J(\delta_{\sigma_i, \sigma_j} - 1) \quad (1.14)$$

Stupnjevi slobode σ_i , koje nazivamo spinovi, klasične su veličine koje mogu poprimiti q različitih diskretnih stanja. Indeksi i i j označavaju čvorove na rešetci. Sumacija u (1.14) se odnosi na prve susjede koji interagiraju feromagnetskom interakcijom J ako su u istom stanju spina σ .

Za dovoljno visoke temperature, entropija spinskih stanja nadvladava energijski dobitak kada su susjedi u istom stanju i tada je sustav u neuređenoj fazi. Uređivanje u beskonačnom sustavu se javlja pri kritičnoj temperaturi, kada se simetrija između stanja slomi i jedno od q ekvivalentnih stanja postane globalno zastupljenije od svih ostalih. Pogodno je definirati [21] skalarnu veličinu koja odražava uređivanje u Pottsovom modelu:

$$m = \frac{\frac{N_{max}}{N} - \frac{1}{q}}{1 - \frac{1}{q}} \quad (1.15)$$

U tom izrazu s N_{max} označen je broj spinova u najzastupljenijem Pottsovom stanju. Tako definiran parametar reda poprima vrijednosti između 0 i 1. Iako ne reflektira punu tenzorsku simetriju modela [22], ponašanje m oko kritične točke daje informaciju o pripadnom kritičnom eksponentu.

Pottsov model je uveden kao generalizacija Isingovog modela i za $q = 2$ svodi se upravo na Isingov model za koji postoji egzaktno rješenje u 2d [6]. Variranjem parametra q Pottsov model može pokazivati temperaturni fazni prijelaz prvog ili drugog

Tablica 1.1: Kritični eksponenti čistog Pottsovog modela

$d = 2^a$								
q	y_τ	y_h	α	β	γ	δ	ν	η
1	$\frac{3}{4}$	$\frac{91}{48}$	$-\frac{2}{3}$	$\frac{5}{36}$	$\frac{43}{18}$	$\frac{91}{5}$	$\frac{4}{3}$	$\frac{5}{24}$
2	1	$\frac{8}{15}$	0	$\frac{1}{8}$	$\frac{4}{7}$	15	1	$\frac{1}{4}$
3	$\frac{6}{5}$	$\frac{28}{15}$	$\frac{1}{3}$	$\frac{1}{9}$	$\frac{13}{9}$	14	$\frac{5}{6}$	$\frac{4}{15}$
4	$\frac{3}{2}$	$\frac{15}{8}$	$\frac{2}{3}$	$\frac{1}{12}$	$\frac{7}{6}$	15	$\frac{2}{3}$	$\frac{1}{2}$
$d = 3$								
q	y_τ	y_h	α	β	γ	δ	ν	η
2^b	1.587(1)	2.4818(3)	0.110(1)	0.3265(3)	1.2372(5)	4.789(2)	0.6301(4)	0.0364(5)
$d \geq 4$ - aproksimacija srednjeg polja je egzaktna								
q	y_τ	y_h	α	β	γ	δ	ν	η
2	2	$1 + \frac{d}{2}$	$2 - \frac{d}{2}$	$\frac{1}{2}$	1	$\frac{d+2}{d-2}$	$\frac{1}{2}$	0

^aEgzaktni rezultati [6, 18]^bNajbolji dosadašnji rezultati [19]

reda. U slučaju $d = 2$ postoji egzaktno preslikavanje između kritičnog Pottsovog modela za opći q i "8-vertex" [18] modela pa je pokazano da je fazni prijelaz drugog reda za $q \leq 4$, a prvog reda za $q > 4$. Egzaktno rješenje daje kritične eksponente za $q \leq 4$ i latentne topline za $q > 4$.

Konformna teorija polja dala je alternativan formalizam opisa faznog prijelaza drugog reda u 2d sustavima [23]. Konformne transformacije prirodna su ekstenzija ideje reskaliranja. One su lokalno ekvivalentne dilatacijama i rotacijama. Karakteristika konformne transformacije nad ravninom jest da su u svakoj točki prostora, kutovi pod kojim se dvije proizvoljne krivulje sijeku, invarijantni. Simetrija na konformne transformacije u dvodimenzionalnom kritičnom sustavu toliko je restriktivan uvjet da je samo iz svojstava simetrije moguće napraviti klasifikaciju svih mogućih modela s faznim prijelazom i dobiti informaciju o kritičnom ponašanju za svaki. Pokazuje se da postoje konformni minimalni modeli koje je moguće preslikati na kritično ponašanje Pottsovog modela s $q \leq 4$. To omogućuje alternativan pristup problematici kritičnog ponašanja u dvodimenzionalnim Pottsovim sustavima. Za 3d sustave konformna simetrija daje samo ograničenu informaciju za razliku od 2d sustava.

Za $d = 3$ egzaktna rješenja ne postoje, ali je utvrđeno da je prijelaz drugog reda za $q = 2$ (3d Ising). Već za $q = 3$ model pokazuje slabi prijelaz prvog reda. U slučaju 4d model pokazuje prijelaz prvog reda za $q > 2$ [20] dok je $q = 2$ slučaj opisan Ginzburg-Landau teorijom [24, 25], za koju je upravo $d = 4$ donja kritična dimenzija prema Ginzburgovom kriteriju. To je ishodište pristupa renormalizacijskom grupom (RG) u računanju kritičnih eksponenata Isingovog modela putem $4 - \epsilon$ razvoja. Kritični eksponenti Pottsovog modela u režimu prijelaza drugog reda sumirani su u tablici 1.1. Svojstva kritičnog ponašanja i mogućnost promjene režima prijelaza uzorkovana je simetrijama "prirodnog" parametra reda koji za općeniti q ima tenzorsku prirodu [22], što beznadno komplicira pristup RG problemu Pottsovog modela preko Ginzburg-Landauovog funkcionala.

1.2.1 Fortuin-Kasteleyn preslikavanje

Fortuin i Kasteleyn (FK) [26] su pokazali da se partijska funkcija Pottsovog modela može pisati kao:

$$Z = \sum_{\{\sigma_i\}} e^{-\beta H(\{\sigma_i\})} \equiv \sum_{\{\sigma_i\}} \prod_{\langle i,j \rangle} ((1-p) + p \cdot \delta_{\sigma_i \sigma_j}), \quad (1.16)$$

$$p = 1 - e^{-\beta J} \quad (1.17)$$

S β označen je Boltzmannov faktor. Raspisivanjem binomnog umnoška i sumiranjem preko konfiguracija spina problem se svodi sumu po grafovima i predstavlja model "nasumičnog grozda" (random-cluster model, RC) koji se može shvatiti kao generalizacija perkolacije:

$$Z = \sum_{\gamma \in \Gamma} p^{b(\gamma)} (1-p)^{B-b(\gamma)} q^{c(\gamma)}. \quad (1.18)$$

Sumacija u (1.18) je po grafovima γ iz skupa svih grafova Γ . Radi karakteriziranja grafova uvedena je nova varijabla, "veze" čiji je broj za neki graf označen s $b(\gamma)$, a maksimalni broj veza na rešetci s B . Veze na rešetci formiraju povezane dijelove, takozvane "grozdove" i njihov ukupan broj je označen s $c(\gamma)$. U slučaju $q = 1$ (1.18) opisuje problem perkolacije [27]. Ta granica daje uvid i u fenomen faznog prijelaza u Pottsovom modelu. Za $q = 1$ spinski stupnjevi slobode su trivijalni (uvijek su svi u istom stanju), ali stupnjevi slobode veza na interakcijama vode na perkolacijski prijelaz koji se događa za određenu vjerojatnost veze p_c i koji ima netrivialne eksponente. Pri p_c pojavljuje se grozd (ili više njih) koji se proteže duž cijele rešetke. Perkolacijom FK grozdova može se geometrijski predočiti i fazni prijelaz za općeniti q , jedina razlika je što mogućnost prvih susjeda u različitim stanjima spina vodi na prepreke u perkolaciji u odnosu na $q = 1$ slučaj.

Ovakav raspis particijske funkcije polazište je efikasnih nelokalnih ("cluster") algoritama simulacije Pottsovog modela kao što su Swendsen-Wangov [28], Wolffov [29] ili algoritam ravnotežnog invazivnog grozda ("Equilibriumlike invaded cluster algorithm" EIC) [11, 12] koji je razvijen u sklopu izrade ovog rada i biti će kasnije detaljnije opisan (pogledati poglavlje 4).

U izrazu (1.18) parametar modela q nije ograničen na cjelobrojne vrijednosti i stoga RC model omogućuje generalizaciju Pottsovog modela za necjelobrojne vrijednosti q . Necjelobrojne vrijednosti tog parametra imaju primjenu i u opisu realnih fizikalnih

sustava. Pokazano je da se procesi gelacije i vulkanizacije u polimerima mogu opisati klasom univerzalnosti RC modela za vrijednosti $0 \leq q \leq 1$ [30].

1.3 Primjeri nereda

Kao posebno težak problem u teoriji faznih prijelaza pokazao se utjecaj zamrznutog nereda, kao izvana nametnute nasumične smetnje koja nije u termodinamičkoj ravnoteži sa stupnjevima slobode sustava. Nered može suštinski promijeniti svojstva faznog prijelaza. Kažemo da je nered "relevantan" kada njegovo uvođenje mijenja kritično ponašanje sustava. U okviru fizike nereda obuhvaćeno je mnoštvo klasičnih i kvantnih fenomena kao na primjer: nered u feromagnetskim sustavima [31], spinska stakla [32, 33, 34], kvantni sustavi s neredom [35], Andersonova lokalizacija [36] i drugi. Kvantni modeli s neredom se u ovom radu ne razmatraju iako je neke argumente za klasične fazne prijelaze s neredom [37], moguće reformulirati da daju informacije o kvantnim prijelazima s neredom.

Kao ilustraciju drastičnog utjecaja koji nered može imati na klasični sustav, navodimo Isingov model s nasumičnim interakcijama koje mogu poprimiti pozitivne i negativne vrijednosti:

$$H_\alpha = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \sigma_i \sigma_j \quad (1.19)$$

Spin na mjestu i je označen sa σ_i i svaki od njih može poprimiti vrijednosti 1 i -1 . Sumacija je po prvim susjedima, a vrijednosti vezanja J_{ij} su nametnute raspodjelom koja je centrirana oko nule. Hamiltonijan je eksplicitno ovisan o konfiguraciji nereda α iz ansambla nereda. Smatra se da taj model dobro opisuje spinska stakla [34]. Prisutnost miješanih feromagnetskih i antiferomagnetskih interakcija u model unosi efekte frustracije koje ne samo da mijenjaju kritične eksponente faznog prijelaza nego također i osnovno stanje u niskotemperaturnoj fazi, koja se naziva "staklasta" faza. Javljaju se novi efekti, kao lom ergodičnosti jer krajolik slobodne energije pokazuje mnoštvo lokalnih minimuma odvojenih divergirajućim barijerama [34]. Ponašanje takvog modela suštinski je drukčije od ponašanja Isingovog modela.

Kad se proučavaju realizacije nereda koji ne mijenjaju niskotemperaturno uređeno

stanje sustava nego samo njegovo kritično ponašanje, nered se može uvesti na vrlo općenit način. U statističkim modelima sa spinovima kakav je Pottsov model, relevantne termodinamičke observable su energija E i magnetizacija M (parametar reda) za koje se mogu definirati lokalne gustoće kao $E = \int d\vec{r} e(\vec{r})$ i $M = \int d\vec{r} m(\vec{r})$. Nered se, kao izvana nametnut utjecaj, može uvesti ili kao perturbacija lokalne energije preko člana $\delta'(\vec{r})e(\vec{r})$ ili lokalnog parametra reda članom $\delta''(\vec{r})m(\vec{r})$. U prvom slučaju nered ima učinak lokalno nasumične temperature, a u drugom lokalno nasumičnog polja. Iako je nered uveden kao perturbacija, pokazuje se da se njegovi efekti oko faznog prijelaza ne mogu tretirati perturbativno [38]. Ako se nered veže na energiju zovemo ga nemagnetičnim, a ako se veže za parametar reda zovemo ga magnetičnim. Utjecaj magnetičnog nereda je znatno drastičniji od nemagnetičnog i on uvijek ili mijenja karakter prijelaza ili ga kompletno eliminira [39, 40]. Za razliku od magnetičnog, nemagnetični nered može biti relevantan ili irelevantan za kritično ponašanje [41] ovisno o kritičnom ponašanju čistog modela. Unatoč netrivialnim razlikama neki argumenti koji govore o ponašanju sustava s neredom mogu se formulirati analogijom za ta dva slučaja [41, 42, 43, 44].

1.4 Nemagnetični nered u Pottsovom modelu

U ovom radu problem ograničavamo na utjecaj nemagnetičnih zamrznutih nečistoća na fazni prijelaz, u kojemu još uvijek postoje brojni konceptualni neriješeni problemi. Nered koji proučavamo je zamrznut, to jest, izvana nametnuta perturbacija sustava koja se ne može termalizirati sa stupnjevima slobode sustava. Svugdje nadalje u tekstu pod "nered" podrazumijevamo upravo nemagnetični zamrznuti nered, osim kada je eksplicitno rečeno drugačije.

Postoje dva ekvivalentna načina za unošenje takvog nereda u Pottsov model. Pod ekvivalentnim se smatra da je kritično ponašanje jednako u oba slučaja. Jedan način uvođenja nereda jest "nered na čvorovima" ("site disorder"):

$$H_\alpha = -J \sum_{\langle i,j \rangle} (\delta_{\sigma_i, \sigma_j} t_i t_j - 1). \quad (1.20)$$

U izrazu (1.20) uvedena je varijabla zauzeća čvora t_i , čiji je iznos 1 ako čvor sadrži spin

na sebi, a 0 ako je prazan. Indeks α označava ovisnost Hamiltonijana o realizaciji nereda α .

Drugi način na koji se nered može uvesti je nasumičnost u interakciji spinova, tzv. "nered na interakcijama" ("bond disorder"):

$$H_\alpha = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{i,j} (\delta_{\sigma_i, \sigma_j} - 1). \quad (1.21)$$

Izraz (1.21) dozvoljava zadavanje nereda na interakcijama proizvoljnom nasumičnom raspodjelom vezanja. Prema principu univerzalnosti nije za očekivati da detalji distribucije nereda na interakcijama određuju kritične eksponente. U ovom radu se stoga promatra slučaj vakancija na interakcijama, to jest uzima se da s nekom vjerojatnošću c , $J_{i,j}$ mogu poprimiti vrijednosti J ili 0. Pitanje jakosti nereda u nekom sustavu svodi se tada na zadavanje broja ili koncentracije vakantnih čvorova ili interakcija. Iz definicije nereda je jasno da pretjerana količina nemagnetičnih vakancija može kompletno uništiti prijelaz u sustavu na način da defekti jednostavno fizički spriječe stvaranje dugodosežnog reda, ali ta trivijalna granica nas ne zanima.

1.5 Termalizirani nered

Slučaj kada se nečistoće mogu termalizirati sa spinskim stupnjevima slobode, nije realističan opis izvana nametnutih nečistoća za razliku od zamrznutog, ali povijesno je bitan jer je upravo pomoću koncepta popuštenog nereda objašnjen mehanizam promjene reda prijelaza iz drugog u prvi red u metamagnetima [45]. Promatramo nered na čvorovima za razliku od nereda na interakcijama, jer se sustav može interpretirati kao slučaj spinskog "plina na rešetci" [46] u kojemu termička pobuđenja mogu uzrokovati da pojedini spinovi ne budu efektivno prisutni na čvorovima rešetke, ali isto tako i da se vrate na nju. Termalizirani nered se može uvesti velekanonski preko kemijskog potencijala vakancija, označenog s G :

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} (\delta_{\sigma_i, \sigma_j} t_i t_j - 1) + G \sum_i (t_i - 1). \quad (1.22)$$

Iz tog izraza se može vidjeti da se čista granica uspostavlja u limesu $G \rightarrow -\infty$. Ako

s α označimo konfiguracije nereda, a sa $\{\sigma\}$ konfiguracije spina, particijsku funkciju možemo zapisati kao:

$$Z = \sum_{\{\sigma\}, \alpha} e^{-\beta H(\{\sigma\}, \alpha)} = \sum_{\{\sigma\}} e^{-\beta \tilde{H}(\{\sigma\})} \quad (1.23)$$

Izraz (1.23) podrazumijeva da se u particijskoj funkciji može prosumirati preko konfiguracija nereda i razrjeđenje ulazi samo preko polja G koje ne izaziva uređivanje sustava ("nonordering field"). Fizikalnu sliku faznog prijelaza s termaliziranim neredom zadanim velekanonski razjasnili su Nienhuis i ostali [45] upravo na primjeru Pottsovog modela u 2D metodom renormalizacijske grupe u realnom prostoru [47]. Oni su zaključili da u sustavu s faznim prijelazom drugog reda ($q \leq q_C$ za 2D Potts) postoji vrijednost kemijskog potencijala vakancija G_t za koju se javlja promjena režima prijelaza - iz drugoga u prvi red. Za vrijednosti kemijskog potencijala $G < G_t$ sustav je u režimu faznog prijelaza drugog reda s nepromijenjenim eksponentima (prijelaz je opisan čistom kritičnom točkom). Fiksna točka u parametarskom prostoru koja opisuje promjenu režima zove se trikritična točka [48]. Približavanjem parametra q vrijednosti q_C kritična i trikritična fiksna točka se približavaju u parametarskom prostoru i za $q = q_C$ se anihiliraju. Za vrijednosti $q > q_C$ faznim prijelazom upravlja diskontinuirana fiksna točka na $T = 0$ i on je prvog reda neovisno o G . Za vrijednost q_C dobili su 4.73 što je blizu egzaktnoj vrijednosti promjene režima $q_C = 4$. Na taj način pokazali su da je upravo stvaranje efektivnih vakancija odgovorno za mehanizam promjene reda prijelaza u čistom Pottsovom modelu. Ako je u nekoj konfiguraciji spinova, na nekom mjestu na rešetci, prisutan jako neuređen skup spinova (gotovo svi u različitim Pottsovim stanjima) oni ne pridonose snižavanju energije i reskaliranjem sustava u realnom prostoru djeluju upravo kao termalizirane vakancije.

Na primjeru termaliziranog nereda može se demonstrirati još jedan interesantan termodinamički efekt. Ako su nečistoće zadane kanonski, to jest ako je fiksiran njihov broj u sustavu, kritično ponašanje sustava u režimu drugog reda prijelaza se modificira prema Fisherovoj [49] renormalizaciji kritičnih eksponenata. Fiksiranje broja vakancija uklapa se u fizikalnu sliku ograničavanja "skrivenih varijable" koja je konjugirana polju koje ne izaziva uređivanje G i uvođenje kojega ne mijenja kritično ponašanje. Kritični eksponenti se modificiraju prema izrazima:

$$\begin{aligned}\alpha &\rightarrow -\frac{\alpha}{1-\alpha} \\ \beta &\rightarrow \frac{\beta}{1-\alpha} \\ \nu &\rightarrow \frac{\nu}{1-\alpha} \\ \gamma &\rightarrow \frac{\gamma}{1-\alpha}.\end{aligned}$$

U slučaju prijelaza u režimu prvog reda s kanonski zadanim neredom rezultat je javljanje koegzistencije faza u omjerima zadanim kanonskim ograničenjem.

2. Opći rezultati za fazni prijelaz s neredom

Dosadašnja istraživanja u okviru statističke fizike faznih prijelaza još uvijek nude ograničeno razumijevanje fenomena utjecaja zamrznutog nemagnetičnog nereda na svojstva faznog prijelaza u feromagnetskim sustavima. U ovom poglavlju dajemo pregled zaključaka najvažnijih dosadašnjih istraživanja u području. U samom začetku istraživanja faznog prijelaza s neredom pokazano je da je nered uvijek relevantan kada pripadni čisti sustav pokazuje divergenciju specifičnog toplinskog kapaciteta pri kontinuiranom faznom prijelazu, nezavisno o dimenziji sustava. To je poznati Harrisov kriterij [41] (odjeljak 2.1). Za slučaj diskontinuiranog faznog prijelaza (prijelaz prvog reda), pokazano je da infinitezimalna količina nereda dovodi do kontinuiranog prijelaza za sustave u $d \leq 2$ ([42] odjeljak 2.5), dok u višim dimenzijama postoji konačni prag koncentracije koji je potreban da bi nered promijenio karakter prijelaza.

Postoji slaganje u dosadašnjim radovima (odj. 2.6) da ovi, zamrznutim neredom inducirani, fazni prijelazi pokazuju karakteristike kontinuiranog faznog prijelaza unatoč nekim svojstvima koja nisu potpuno jasna. Naime, radovi McCoya i Wua [9] i Griffithsa [62] (odjeljak 2.3) pokazali su svojstva koja izlaze iz mogućnosti standardnog opisa faznog prijelaza drugog reda koristeći dva nezavisna kritična eksponenta.

Unatoč tome, temeljna pretpostavka koja se koristi u većini analitičkih i numeričkih pristupa takvom faznom prijelazu je mogućnost definiranja jedinstvene korelacijske duljine, nezavisne o realizaciji nereda i ovisne samo o njegovoj koncentraciji. Prema analogiji sa standardnim opisom prijelaza drugog reda [7], uzima se da ona divergira u kritičnoj točki beskonačnog sustava (odjeljci 2.4 i 2.7). Ako je moguće definirati takvu korelacijsku duljinu, sustav ima svojstvo translacijske invarijantnosti na točki prijelaza i nehomogenosti koje nastaju zbog utjecaja nereda na slobodnu energiju,

Tablica 2.1: Kritični eksponenti Pottsovog (i ekvivalentnih) modela s nemagnetičnim neredom pod pretpostavkom efektivnog faznog prijelaza drugog reda

model	metoda	y_τ	ν	α	y_h	β	η
$d = 2, q = 2$	RG [50]	-	-	$0, (c \propto \ln \ln(\tau))$	-	-	$0, (\Gamma(r) \propto e^{-a(\ln \ln(r))^2})$
$d = 2, q = 2$	RG [51]	-	-	= kao čisti	-	-	-
$d = 2, q = 2$	TM [52]	-	1.12(3)	-	-	\approx kao čisti	-
$d = 2, q = 3$	RG [53]	0.980(2)	-	-	-	0.1347(3)	-
$d = 2, q = 3$	TM [52]	-	1.04(4)	-	-	0.1347(2)	-
$d = 2, q = 8$	MC [54]	-	1.004(14)	-	-	0.127(15)	-
$d = 2, q = 8$	TM [52]	-	1.01(2)	-	-	0.142(4)	-
$d = 2, q \rightarrow \infty$	MC [55]	-	≈ 1	-	-	0.18(1)	-
$d = 3, q = 2$	MC [56]	-	0.683(2)	-0.049(6)	2.476(3)	0.354(1)	0.036(1)
$d = 3, q = 3$	MC [57]	-	0.690(5)	-	2.461(2)	-	0.078(4)
$d = 3, q = 4$	MC [58, 59]	-	0.747(2)	-	2.268(3)	-	-
$d = 3, q \rightarrow \infty$	MC [60]	-	0.67(4)	-	2.40(2)	-	-
$d = 4 - \epsilon, q = 2$	RG [61]	-	$\frac{1}{2} + \frac{1}{4}(\frac{6\epsilon}{53})^{1/2}$	-	-	-	$-\frac{1}{106}\epsilon$

nestaju u granici $L \rightarrow \infty$. Jedinственost korelacijske duljine određuje opis sustava u kontekstu teorije skaliranja u konačnom sustavu. U okviru te pretpostavke postaje moguće dati općenitu ocjenu, Chayesov kriterij, (odjeljak 2.2, [63]) o donjoj granici kritičnog eksponenta tako definirane korelacijske duljine: $\nu \geq 2/d$. Takav opis, koji nazivamo slikom "prijelaza drugog reda u efektivnom translacijski invarijantnom sustavu" iznjedrio je pojam "nasumične kritične točke", za koju se smatra da opisuje prijelaz. Razvojem računala, efektivne kritične eksponente je postalo moguće računati numerički (odjeljak 2.7) u okviru diskretnih modela na rešetci, napose Pottsovog. Svi ti rezultati ponudili su razumne vrijednosti eksponenta (tablica 2.1), ali mehanizam kojim se to ostvaruje ostao je do sada nerazjašnjen.

Kasniji važni radovi bacili su novo svjetlo na specifičnosti faznog prijelaza s neredom [64, 65] otvoriši pitanja na koja pretpostavka efektivnog translacijski invarijantnog sustava ne nudi odgovor. Wiseman i Domany [66] istaknuli su važnost "samousrednjavanja" singularnih dijelova observabli u sustavima s neredom kao mjeru utjecaja promjene konfiguracije nereda na te veličine (parametar reda ili susceptibilnost) oko točke prijelaza. Sustav pokazuje samousrednjavanje ako je utjecaj specifične konfiguracije nereda na promjenu observable pri prijelazu irelevantan u limesu $L \rightarrow \infty$. Nasuprot tome, kad je nered relevantan, demonstrirano je [66] da je utjecaj promjene konfiguracije nereda istog reda kao i veličina sama, što se naziva nedostatkom samousrednjavanja. Ovo pitanje dalje je problematizirano u radu Pázmándija, Scalettara i Zimányia [65] koji je plauzibilnim argumentima doveo u pitanje standardne postupke integriranja preko konfiguracija nereda u svrhu uspostavljanja translacijske invarijantnosti u sustavu. U sadašnjem trenutku još uvijek nedostaje dublje razumijevanje karaktera ovih prijelaza, kao i objašnjenje konceptualnih problema u sustavima s neredom.

2.1 Harrisov kriterij

Harris [41] jednostavnom argumentacijom daje argument samokonzistentnosti za irelevantnost zamrznutog nemagnetičnog nereda u sustavu s faznim prijelazom drugog reda. Harrisov kriterij govori da je takav nered uvijek relevantan, kada toplinski kapacitet čistog sustava divergira na točki prijelaza, ili drugim riječima kada je kritični eksponent $\alpha > 0$. Ovaj kriterij govori kada nered ne utječe na kritično ponašanje, a

ne što se dogodi kad je nered bitan. U čistom sustavu koji je u blizini faznog prijelaza drugog reda, jedina netrivialna dugovalna prostorna skala je korelacijska duljina ξ . Udaljenost sustava od kritične temperature, određena je kritičnim eksponentom ν :

$$|T - T_C| \propto \xi^{-\nu} \quad (2.1)$$

Zamrznuti nered unosi lokalne perturbacije korelacijske funkcije. Polazište u izvodu kriterija je pretpostavka da je nered irelevantan. Zbog irelevantnosti ponašanje korelacijske duljine dodavanjem nereda ne smije biti promijenjeno i kritično područje mora biti zadano izrazom (2.1) s istim eksponentom ν . Također potrebno je da udaljenost od kritične točke (2.1) bude uvijek veća od fluktuacija kritične temperature zbog nereda, za bilo koju vrijednost temperature:

$$\delta T_{nered} < |T - T_C|. \quad (2.2)$$

Fluktuacije koncentracije defekata u volumenu ξ^d , iznose:

$$\delta n = \sqrt{c(1-c)} \xi^{-\frac{d}{2}}. \quad (2.3)$$

Ako je nered irelevantan fluktuacije temperature zbog nereda proporcionalne su fluktuacijama koncentracije defekata:

$$\delta T|_{nered} \propto \xi^{-\frac{d}{2}} \quad (2.4)$$

Da bi izrazi (2.1) i (2.4) bili kompatibilni s (2.2) mora vrijediti $d\nu > 2$ ili ekvivalentno tomu $\alpha < 0$.

Taj kriterij implicira da se početna slika koja vrijedi za čisti prijelaz mijenja za $\alpha \geq 0$, ali ta konstatacija je ujedno i njegov doseg jer ne govori ništa o tome što se u tom slučaju događa. Naime irelevantnost je uvedena kroz tri pretpostavke: a) da je kritično područje zadano (2.1) nepromijenjeno; b) da su fluktuacije kritičnih temperatura Gaussove (2.4) i c) da je udaljenost od kritične točke uvijek veća od fluktuacija kritičnih temperatura (2.2). U relevantnom slučaju nereda nije jasno kako se bilo koja od tih postavki mijenja, a za nekonzistentnost kriterija je dovoljno da samo jedna od njih nije zadovoljena.

Iako se u ovom radu proučava utjecaj nemagnetičnih nečistoća, na temelju Harrisovog argumenta se može demonstrirati učinak magnetičnih nečistoća. Perturbacija stvara Gaussove varijacije lokalnog magnetskog polja, $\Delta h \propto L^{-\frac{d}{2}}$. Da bi unatoč perturbaciji sustav ostao u području zaokruživanja, to jest $L^{y_h} \Delta h \leq 1$, mora vrijediti:

$$\frac{d}{y_h} > 2. \quad (2.5)$$

Ovaj izraz je formalno jednak s izričajem Harrisovog kriterija za nemagnetične nečistoće i jedina razlika je u tome što umjesto kritičnog eksponenta y_τ , figurira kritični eksponent reskaliranja polja h , y_h . Ekvivalentan izraz se može izvesti i u slučaju nečistoća koje perturbiraju neko drugo relevantno polje ako ono postoji. Izraz (2.5) predstavlja znatno stroži uvjet jer je y_h redovito znatno veći od y_τ .

2.2 Chayesov kriterij

Harrisov kriterij ne nudi odgovor na pitanje što se dogodi u sustavu čiji toplinski kapacitet divergira ($\alpha \geq 0$) kada se u njega doda zamrznuti nered. Heuristički argument, na tragu Harrisovog kriterija, samo primijenjenog na sustav s neredom, ponudili Chayes i ostali [63]. Oni promatraju ansambl konfiguracija nereda zadan koncentracijom c i konfiguracije nereda klasificiraju binomnom distribucijom u pojedinom uzorku linearne dimenzije L . Oni polaze od pretpostavke egzistencije "Chayesove duljine" ξ_{Chayes} , koja je nezavisna od specifične konfiguracije nereda za koncentraciju c , u konačnom sustavu. Biraju termodinamičku observablu X_L koja ima potencijско ponašanje u ovisnosti o veličini sustava L i koja definira udaljenost od kritične točke (analogno temperaturi u izrazu (2.1)) izrazom:

$$X_L \cdot L^u \equiv a. \quad (2.6)$$

U (2.6), u je eksponent potencijskog ponašanja observable X_L , a a proizvoljan broj > 0 . Chayesovu duljinu definiraju kao najveći L za koji očekivanje vrijednosti $X_L \cdot L^u$ premašuje a u prosjeku po ansamblu nereda. Definiraju eksponent ν_{Chayes} kao eksponent divergencije Chayesove duljine oko kritične vrijednosti koncentracije c_C :

$$\xi_{Chayes}(c) \propto (c - c_C)^{-\nu_{Chayes}} \quad (2.7)$$

Iz polazne pretpostavke da je raspodjela gustoće nečistoća u sustavu veličine L binomna, uporabom Schwartzove nejednakosti slijedi Chayesova granica:

$$\nu_{Chayes} \geq \frac{2}{d}. \quad (2.8)$$

Gornju formulaciju autori u originalnom članku izlažu matematički rigorozno, ali ističu pritom bitnu fizikalnu pretpostavku nevezanu za izloženu konstrukciju – da je Chayesova duljina istovjetna korelacijskoj duljini sustava s neredom. Njihov argument za to jest da je Chayesova duljina najveća pa iz toga izvlače zaključak da je najbitnija. Kako autori naglašavanju, Chayesova duljina daje opadanje korelacijske funkcije usrednjenu po ansamblu nereda (pri danoj koncentraciji):

$$\begin{aligned} G_{Chayes}(|\vec{r}_j - \vec{r}_i|) &\equiv \langle G_\alpha(|\vec{r}_j - \vec{r}_i|) \rangle = \langle \overline{\sigma_j \cdot \sigma_i} \rangle \\ &\propto e^{-\frac{|\vec{r}_j - \vec{r}_i|}{\xi_{Chayes}}} \end{aligned} \quad (2.9)$$

U tom izrazu α označava konfiguraciju nereda, $\langle \cdot \rangle$ usrednjavanje po ansamblu nereda pri jedinstvenoj temperaturi, a crta $\bar{\cdot}$ usrednjavanje po termodinamičkom ansamblu. *A priori* "tipična" duljina opadanja korelacija ξ ne mora biti jednaka ξ_{Chayes} .

Pretpostavka $\xi_{Chayes} = \xi$ se može izraziti u "jeziku" fluktuacija kvazikritične temperature i kritičnog područja s kojim je objašnjen Harrisov kriterij u prethodnom odjeljku. Pretpostavkom da je $\xi_{Chayes} \equiv \xi$ pretpostavlja se da je $\delta T|_{nered} \propto |T - T_C|$. Zatim preostaje tehnički dio ocjene $\delta T|_{nered}$ koji se može formulirati rigorozno pod pretpostavkom veleanonski zadanog nereda. Za razliku od slučaja $\alpha < 0$ kada se može tvrditi da su fluktuacije kvazikritične temperature Gaussove, za slučaj $\alpha \geq 0$ ta tvrdnja ne vrijedi. Bez uvođenja bilo kakvih dodatnih informacija može se konstatirati samo da Gaussove fluktuacije predstavljaju donju granicu fluktuacija kvazikritične temperature. Upravo ta tvrdnja daje Chayesov kriterij.

Cijeli argument ovisi o binomnoj raspodjeli nereda i vidljivo je da postavljanjem nereda kanonski dobiva drugačija donja granica $\nu \geq 1/d$ što je zadovoljeno za gotovo

sve poznate netrivialne modele. Taj argument ne pokazuje kontradikciju s Chayesovom granicom jer je $1/d < 2/d$, ali demonstrira arbitrarnost donje granice eksponenta u argumentu čija je cijela vrijednost upravo ocjena donje granice. Postoje brojni radovi [52, 67] čiji rezultati demonstriraju da je učinak zamrznutog nereda nezavisan o tome je li zadan kanonski ili velekanonski. Ti rezultati daju indicije da mehanizam fluktuacija observabli zbog nereda nije dominantno zbog lokalnih fluktuacija koncentracije nego zbog korelacija stupnjeva slobode sustava i nereda.

Da nema razloga zašto bi Chayesova duljina bila jednaka korelacijskoj, potvrđuju sustavi za koje je analitičkim računima dokazano da se ponašanje tipičnih vrijednosti termodinamičkih observabli ne podudara s ponašanjem observabli usrednjenih po ansamblu nereda [35, 68, 69].

2.3 Egzaktne računi

Počeci analitičkog istraživanja utjecaja zamrznutog nereda na fazne prijelaze slijedili su rane analitičke rezultate McCoya i Wua [9] i Griffithsa [62] koji se baziraju na proučavanju modifikacija Isingovog modela u 2d. Ti radovi, kao i kasniji radovi što slijede njihovo rezoniranje, otkrili su suštinske razlike u faznim prijelazima čistih modela i modela sa zamrznutim neredom, koji dovode u pitanje opis faznih prijelaza s neredom u terminima izmijenjene klase univerzalnosti čistog sustava.

McCoy i Wu [9, 70, 71, 72] su predložili i detaljno obradili analitički rješivu modifikaciju 2d Isingovog modela koja sadržava specijalno zadan zamrznuti nered. Postavljaju da su sve interakcije u vertikalnom smjeru identične, ali dozvoljavaju proizvoljnu nasumičnost u jakosti interakcije između različitih stupaca spinova, na način da su sve interakcije između istih stupaca identične. Svojstvo translacijske invarijantnosti sustava u vertikalnom smjeru, dozvoljava egzaktno rješavanje ovog problema kada je vanjsko polje jednako 0.

Njihovi zaključci otkrivaju suštinske razlike između Onsagerovog rješenja za čisti 2d Ising [6] i 2d Isingovog sustava s neredom. Specifična toplina mijenja ponašanje iz logaritamske divergencije oko kritične točke u čistom slučaju na beskonačnu diferencijabilnost unatoč neanalitičnosti oko T_C . Rezultati za magnetizaciju su pokazali efekte koji nisu prisutni u čistom modelu. Zbog neprimjenjivosti egzaktnog rješenja

na model u vanjskom magnetskom polju, magnetizacija se određuje iz korelacijskih funkcija. Njihov zaključak je da ne postoji $L \rightarrow \infty$ limes korelacijskih funkcija na točki prijelaza, nego da bitno ovise o zadanoj konfiguraciji nereda. Iz tog razloga je neispravno promatrati prosjek korelacijskih funkcija preko konfiguracije nasumičnih interakcija nego je potrebno promatrati i njihovu raspodjelu. Kao posljedica toga kritično ponašanje magnetizacije također relevantno ovisi o konfiguraciji nereda. Autori interpretiraju tu pojavu kao javljanje uređenih grozdova spinova na svim skalama koji ovise o konfiguraciji nereda. Fluktuacije magnetizacije na skali samog efekta promjenom konfiguracije nereda, povezuju se s Griffithsovim singularitetima [62].

Griffiths [62] je promatrao Isingov feromagnet s interakcijama prvih susjeda u 2d sa zamrznutim neredom na čvorovima zadanim udjelom p čvorova na kojima su Isingovi spinovi. Prilikom takvog razrjeđenja poznato je da se kritična temperatura sustava snižava $T_C(p < 1) < T_C(1)$. Koristeći Yang - Lee [73, 74] teorem uspio je rigoroznim argumentima demonstrirati da magnetizacija nije analitička funkcija za bilo koju temperaturu $T_C(p) \leq T \leq T_C(1)$. Slaba neanalitičnost u tom području pripisuje se rijetkim konfiguracijama nereda za neku vrijednost p koje dozvoljavaju uređivanje i iznad temperature $T_C(p)$. Iako je izveden za znatno općenitiji slučaj nereda Griffithsov rezultat pokazuje sličnost sa zaključcima iz rada McCoya i Wua [70] koji se tiču ponašanja magnetizacije. Naime, nepostojanje termodinamičke granice magnetizacije na točki faznog prijelaza pokazuje sličnost s vjerojatnosti uređivanja na konačnom rasponu temperatura koja je rezultat Griffithsovog rada.

McCoy-Wu model je relativno malo zastupljen u literaturi, vjerojatno zbog privida da je nered zadan na jako specifičan način. Jednako tako razmjerno malo radova je nastavilo pristup problemu nereda u njegovoj punoj kompleksnosti koja je nagovještena u radovima opisanim u ovom odjeljku. Nastavak rezoniranja McCoya i Wu-a nastavljen je proučavanjem jednodimenzionalnog kvantnomehaničkog modela nasumičnog lanca Isingovih spinova u transverznom magnetskom polju [75, 76, 35], za koji se može uspostaviti preslikavanje s McCoy-Wu modelom. Radovi na tom i s njim povezanim modelima sačinjavaju pristup takozvane "renormalizacijske grupe jakog nereda" [69] koja je snažno zastupljena u recentnim znanstvenim istraživanjima [77, 68]. Ideja tog pristupa je uzeti u obzir nehomogenosti sustava konstrukcijom pristupa renormalizacije koji se bazira na energiji, eliminiirajući iterativno stupnjeve slobode viših energija.

Bez ulaženja u kompleksnosti rezultata kvantnog Isingovog modela u transverznom polju želimo dati primjer suštinske razlike između kritičnog ponašanja tog i čistih modela. Pokazano je da tipične vrijednosti termodinamičkih observabli pokazuju drugačije kritično ponašanje od onih usrednjenih po konfiguracijama nereda [35]. Tako na primjer taj model pokazuje dvije različite divergirajuće skale: tipičnu korelacijsku duljinu čiju divergenciju opisuje eksponent $\nu = 1/d$ i usrednjenu korelacijsku duljinu, čiji eksponent divergencije iznosi $\tilde{\nu} = 2/d$. Ovim modelom detaljnije se bavimo u odjeljku 3.3.2

2.4 Prijelaz u efektivnom translacijski invarijantnom sustavu

Potpuno drugačiji pristup problemu, koji prevladava u literaturi, slijedi rezoniranje Harrisa i Lubenskog [51] i Grinsteina i Luthera [61]. Pristup koji oni predlažu temelji se na usrednjavanju po ansamblu nereda, čime se dobiva efektivan translacijski invarijantan sustav. Translacijska invarijantnost označava ekvivalentnost svih točaka u prostoru. U usporedbi s dotadašnjim egzaktnim računima takvi pristupi vode na ponašanje ekvivalentno ponašanju faznom prijelazu drugog reda u čistom sustavu, u kojemu je kritično ponašanje kompletno određeno s dva nezavisna kritična eksponenta, na primjer ν i η . To znači da takvi pristupi nemaju načina računanja specifičnosti takvih prijelaza uočenih u radovima McCoya i Wuja i Griffithsa. Efektivan translacijski invarijantan sustav se tretira postupcima renormalizacijske grupe. Prvi računi bili su provedeni na primjeru n -vektor modela renormalizacijskom grupom u realnom prostoru za $2d$ sustave [51] i u $d = 4 - \epsilon$ razvoju renormalizacijom Ginzburg-Landau funkcionala u inverznom prostoru [61, 78]. U navedenim slučajevima autori su uspjeli računati dva efektivna nezavisna eksponenta, ν i η . Priest i Lubensky koriste tenzorska svojstva [22, 79] parametra reda Pottsovog modela s q stanja za konstrukciju renormalizacijskog pristupa sustavu s neredom preko Ginzburg-Landau funkcionala, ali zbog složenosti parametra reda uspijevaju izvući zaključke o eksponentima samo u slučaju perkolacije $q = 1$.

Posebno interesantna varijacija gore navedenog pristupa izložena je u radovima Dotshenka i Dotshenka [50]. Oni su iskoristili egzaktno preslikavanje čistog Isingo-

vog modela u 2d na kvantni model slobodnih fermiona u 2d. Sa stajališta Harrisovog kriterija ovaj slučaj je primjer marginalne relevantnosti nereda jer je $\alpha = 0$, a toplinski kapacitet pokazuje logaritamsku divergenciju: $\ln|T - T_C|$. Postojanje egzaktnog rješenja čistog modela iskorišteno je za konstruiranje perturbativnog pristupa za slučaj s neredom. Uspjeli su pokazati da se divergencija toplinskog kapaciteta modificira u dvostruko logaritamsku ovisnost $\propto \ln \ln |T - T_C|$ demonstrirajući tako relevantnost nereda za taj slučaj.

Razvojem konformne teorije polja [23] i pokazivanjem ekvivalentnosti brojnih klasičnih spinskih modela u 2D s konformnim minimalnim modelima, prirodno se nametnuo okvir za analitičke račune u sustavima s neredom. Konformalni minimalni modeli omogućuju egzaktan opis čistog sustava. Mnogi autori iskoristili su tu korespondenciju za postavljanje perturbativnih pristupa faznom prijelazu s neredom [53, 80, 81, 82]. Slučajevi koji su promatrani pokazali su nove klase univerzalnosti opisane efektivnim kritičnim eksponentima ν i η , a u kontekstu konformne teorije polja postavilo i pitanje prirode teorija polja koje ih opisuju, koje do sada nije odgovoreno. Otkriće Schramm Lövnerove evolucije i njena povezanost s konformnom teorijom polja postavilo je daljnja pitanja o geometrijskim fraktalnim svojstvima objekata koji se u tim teorijama pojavljuju [83].

2.5 Imry-Ma argument i Aizenman-Wehr konstrukcija

Harrisov kriterij je formuliran za utjecaj nereda na fazni prijelaza drugog reda, ali ne govori što se događa kada je fazni prijelaz u čistom sustavu prvoga reda. Prvi radovi [84] dali su nekonkluzivne rezultate pa čak i mogućnost nestajanja faznog prijelaza.

Na točki faznoga prijelaza prvoga reda slobodna energija ima dva ili više ekvivalentnih minimuma, svaki od kojih odgovara jednoj od dvije ili više faza s jednakim statističkim težinama u kojima se sustav može nalaziti. Ako temperatura sustava nije jednaka nuli, moguća su pobuđenja u vidu formiranja domena na prostornoj skali l u kojima su spinovi u nekoj drugoj fazi. Domene su odijeljene od dominantne faze s domenskim zidom. Zbog toga što je fazni prijelaz u sustavu prvoga reda i korelacijska duljina ξ konačna, domenski zid u d dimenzionalnom sustavu ima dimenzionalnost $d - 1$, a iz razloga što stvaranje domene zahtjeva konačnu energiju po jedinici njene

površine može se zaključiti da je energija pobuđenja domenskog zida domene koja ima linearnu dimenziju l proporcionalna s l^{d-1} .

Ako u takav sustav uvedemo zamrznute nemagnetične nečistoće, javljaju se perturbacije u energijama domena koje pripadaju nekoj fazi. Ako se pretpostavi da nered na rešetki nije međusobno koreliran u prostoru, primjenom Centralnog graničnog teorema slijedi da utjecaj nereda na slobodnu energiju domene neke faze koja je veličine l neće biti reda veličine manjeg od $l^{\frac{d}{2}}$. Bitno je naglasiti da je to ocjena donje granice utjecaja i jednakost se dobiva za sustav koji je opisan teorijom srednjeg polja. Ako je nered zadan koncentracijom c , promatrajući bilo koju domenu veličine l , broj nečistoća unutar nje dan je binomnom raspodjelom. Naime ako imamo pravilnu kubičnu rešetku u d dimenzija srednja vrijednost broja vakancija na interakcijama će biti $n = c \cdot d \cdot l^d$, a njena fluktuacija s $\sqrt{\delta^2 n} = \sqrt{d \cdot c(1-c)} \cdot l^{\frac{d}{2}}$. Uz ocjenu perturbacija slobodne energije s linearnim članom u devijaciji koncentracije nereda slijedi:

$$\delta F \propto \sqrt{\delta^2 n} \propto \text{const} \cdot l^{\frac{d}{2}}. \quad (2.10)$$

Usporedbom člana koji pripada slobodnoj energiji granice faza $\propto l^{d-1}$ i fluktuacijama slobodne energije zbog nereda $\propto l^{\frac{d}{2}}$, dobiva se Imry-Ma [85] ocjena relevantnosti nereda u ovisnosti o dimenzionalnosti sustava. Za $d < 2$ infinitezimalna količina zamrznutog nereda je relevantna, a za $d > 2$ je irelevantna.

Marginalni slučaj $d = 2$ izvan je dosega Imry-Ma argumenta. Aizenman i Wehr (AW) [42] poznatim radom iz 1989.g, dokazali su da čak infinitezimalno slab nemagnetični nered u 2d sustavu s faznim prijelazom prvog reda uvijek nadvlada utjecaj površine. Argument isključivo ovisi o dimenzionalnosti sustava.

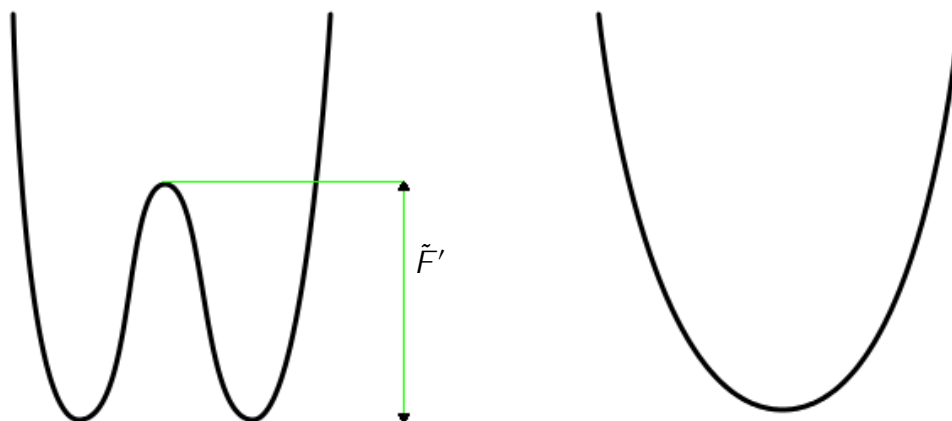
Autori razmatraju funkciju:

$$G(\beta, h, \alpha, V) = \tilde{F}^u(\beta, h, \alpha, V) - \tilde{F}^n(\beta, h, \alpha, V), \quad (2.11)$$

koja predstavlja razliku slobodne energije uređene (\tilde{F}^u) i neuređene (\tilde{F}^n) faze u konačnom sustavu s neredom. S V označen volumen sustava, β označava inverznu temperaturu, h vanjsko magnetsko polje i α konfiguraciju nereda u sustavu. Njena derivacija po magnetskom polju može se izraziti kao:

1. red

2. red



Slika 2.1: shematski prikaz krajolika slobodne energije u faznom prostoru za slučaj faznog prijelaza prvog i drugog reda. U slučaju faznog prijelaza prvog reda postoji slobodna energija domenskog zida $\tilde{F}' \propto \partial V$

$$\frac{\partial G(\beta, h, \alpha, V)}{\partial h} = m_u(\beta, h, \alpha, V) - m_n(\beta, h, \alpha, V). \quad (2.12)$$

Za sustav s faznim prijelazom prvog reda koji ne sadrži nečistoće, derivacija (2.12) ima konačnu vrijednost jedino na točki faznog prijelaza, a svugdje drugdje je identično nula, jer je svugdje osim u točki faznog prijelaza Gibbsovo stanje jedinstveno. U blizini prijelaza, moguća su metastabilna stanja, ali njihova vjerojatnost iščezava u limesu beskonačnog sustava.

Ako je sustav iznad temperature faznog prijelaza, vjerojatnost da se nalazi u uređenoj fazi eksponencijalno iščezava s veličinom sustava i jednako tako ako je na temperaturi ispod temperature faznog prijelaza, vjerojatnost da je u neuređenoj fazi eksponencijalno iščezava, a temperatura faznog prijelaza je jedina u kojoj te dvije faze imaju jednake statističke težine. Vrijednost funkcije $G(\beta, h, \alpha, V)$ ograničena je površinskom slobodnom energijom \tilde{F}' koja raste proporcionalno s površinom na kojoj su rubni uvjeti nametnuti, ∂V .

$$G(\beta, h, \alpha, V) \leq a\partial V. \quad (2.13)$$

Taj izraz daje gornju granicu za funkciju $G(\beta, h, \alpha, V)$. Ako sustav reskaliramo, $L \rightarrow sL$, gornja granica u izrazu (2.13) se reskalira prema $a\partial V \rightarrow s \cdot a\partial V$ pa vrijedi:

$$s \cdot G(\beta, h, \alpha, V) \leq s \cdot a\partial V \quad (2.14)$$

Suština argumenta Aizenmana i Wehra je ocjena donje granice utjecaja nereda na vrijednost $G(\beta, h, \alpha, V)$, koju povezuju s nasumičnom šetnjom oko srednje vrijednosti u ansamblu nereda. Konačni rezultat je da utjecaj velikih fluktuacija u toj nasumičnoj šetnji uvijek prevladava površinsku energiju jer ulazi u particijsku funkciju u eksponentu, preko Boltzmannove težine.

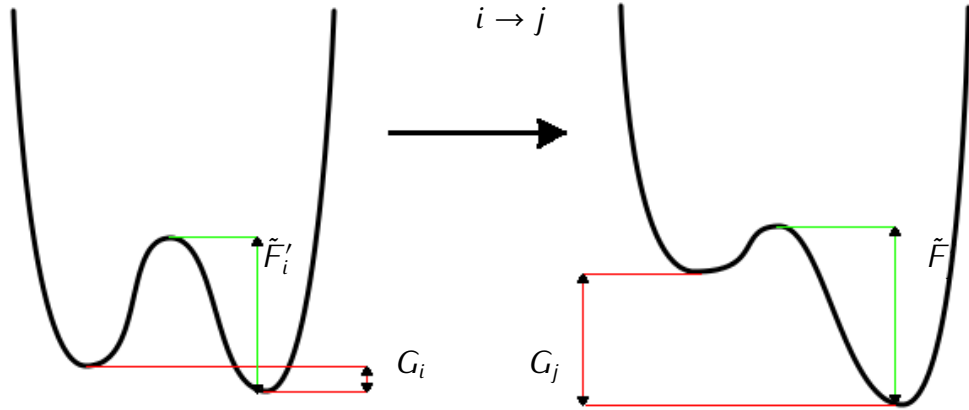
Krećemo od pretpostavke da je sustav s neredom ostao u režimu prijelaza prvog reda nakon što mu je dodana određena koncentracija nereda. Pri temperaturi $T = T_C + 0$ sustav je u neuređenoj fazi (argumentacija je apsolutno identična i ako se odabere $T = T_C - 0$ i sustav u uređenoj fazi). Particijsku funkciju sustava volumena V za konfiguraciju nereda α možemo pisati kao sumu po termodinamičkim konfiguracijama i :

$$\begin{aligned} Z(\beta, h, \alpha, V) &= \sum_i e^{-\beta E_i(h, \alpha, V)} = \sum_{\alpha} e^{-\beta E_i(h, \alpha, V)} + \sum_i^n e^{-\beta E_i(h, \alpha, V)} + \sum_i^l e^{-\beta E_i(h, \alpha, V)} \\ &\approx e^{-\beta \tilde{F}^u(\beta, h, \alpha, V)} + e^{-\beta \tilde{F}^n(\beta, h, \alpha, V)} + \sum_i^l e^{-\beta E_i(h, \alpha, V)} \\ &\equiv e^{-\beta \tilde{F}^n(\beta, h, \alpha, V)} \cdot \left(1 + e^{-\beta(\tilde{F}^u(\beta, h, \alpha, V) - \tilde{F}^n(\beta, h, \alpha, V))} + e^{-\beta \tilde{F}^l(\beta, h, \alpha, V)} \right) \quad (2.15) \end{aligned}$$

$$e^{-\beta G(\beta, h, \alpha, V)} \equiv e^{-\beta(\tilde{F}^u(\beta, h, \alpha, V) - \tilde{F}^n(\beta, h, \alpha, V))}, \quad (2.16)$$

gdje indeks "u" u sumaciji označava konfiguracije koje sadrže domenski zid veličine sustava. Drugi član u (2.15) daje utjecaj nasumičnosti, a treći utjecaj slobodne energije domenskog zida, $\tilde{F}^l(\beta, h, \alpha, V)$, u sustavu. Ako je nered irelevantan, drugi član je manji od trećega jer su razlike slobodnih energija pozitivne i $\propto L^d$. Treći član predstavlja doprinos od domenskog zida, čija je slobodna energija $\propto L^{d-1}$. Ako je nered relevantan drugi član je važniji od doprinosa domenskog zida u granici $L \rightarrow \infty$.

Aizenman i Wehr formulirali su argument o reskaliranju Boltzmannove težine funk-

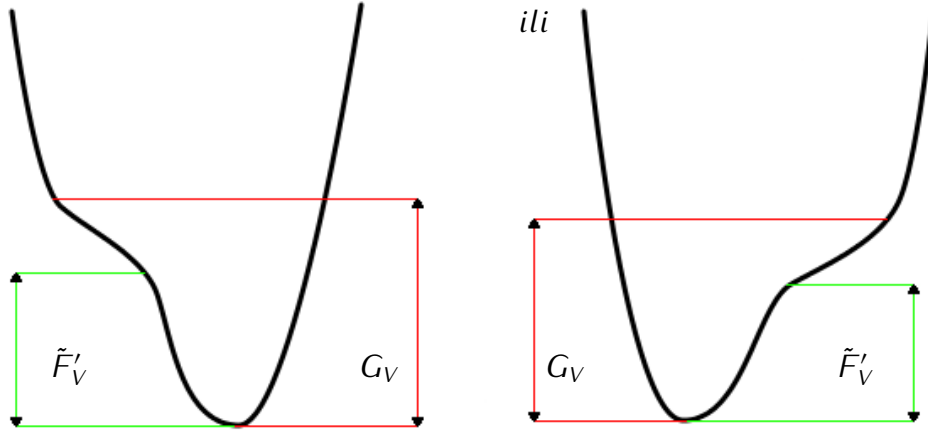


Slika 2.2: shematski prikaz Aizenmann-Wehr konstrukcije utjecaja dodavanja nereda na krajolik slobodne energije kada je fazni prijelaz u čistom sustavu prvog reda.

cije $G(\beta, h, \alpha, V)$ koristeći ocjenu te funkcije nasumičnom šetnjom (slika 2.2), prilikom dodavanja informacije o specifičnoj konfiguraciji nereda α , u odnosu na vrijednost funkcije usrednjenu po ansamblu nereda. Da bi taj argument stavili u matematičku formu raspisuju $G(\beta, h, \alpha, V)$ kao razliku očekivanja te funkcije kada je konfiguracija nereda zadana na proizvoljnim podskupovima ukupnog volumena $V_0 \cdots \subset V_i \cdots \subset V_j \cdots \subset V$, a izvan tog volumena usrednjena.

$$G(\beta, h, \alpha, V) = \sum_i^V (G(\beta, h, \alpha_i, V) - G(\beta, h, \alpha_{i-1}, V)) = \sum_i Y_i(\beta, h, V) \quad (2.17)$$

Jakost nereda u sustavu daje raspodjelu od $G(\beta, h, \alpha_i, V)$ iz koje se dobiva raspodjela $Y_i(\beta, h, V)$. Aizenman i Wehr pokazuju da izabiranjem po volji uskog, ali konačnog intervala oko sredine raspodjele $Y_i(\beta, h, V)$ rezultira u nasumičnoj šetnji funkcije $G(\beta, h, \alpha_i, V)$, koja je jednaka u limesu $L \rightarrow \infty$ kao da je odabrana cijela distribucija $Y_i(\beta, h, V)$. Tako dolaze do izražaja već spomenute po volji velike fluktuacije nasumične varijable na nivou drugog momenta. U matematičkoj terminologiji red $Y_i(\beta, h, V)$ je martingala srednje vrijednosti 0. To svojstvo je temelj za matematički izvod koji daje reskaliranje očekivanja Boltzmannove težine funkcije $G(\beta, h, x, V)$:



Slika 2.3: konačni učinak utjecaja dodavanja određene koncentracije nereda na krajolik slobodne energije kada je fazni prijelaz u čistom sustavu prvog reda.

$$\liminf_{V \rightarrow \infty} \mathbb{E}(e^{\frac{s \cdot G(\beta, h, \alpha, V)}{\sqrt{V}}}) \geq e^{s^2 \cdot c};$$

$$c \propto (m_u - m_n)^2. \quad (2.18)$$

Iz izraza (2.14) i (2.18) može se zaključiti da je nered relevantan za ma koliko malu koncentraciju u dvodimenzionalnom sustavu jer reskaliranjem nasumični član u partijskoj funkciji (2.15) dominira nad površinskim članom u partijskoj funkciji u limesu $L \rightarrow \infty$. Zbog toga što vrijednosti $Y_i(\beta, h, V)$ mogu biti po volji male, infinitezimalna koncentracija nereda dovoljna je da bi se uništila koegzistencija faza u dvodimenzionalnom sustavu. Shematski se stoga konačni utjecaj dodavanja infinitezimalne količine nereda u limesu $L \rightarrow \infty$ može prikazati kao na slici (2.3). Krajolik pokazuje samo jedan minimum slobodne energije pri zadanoj konfiguraciji nereda za bilo koju temperaturu pa se može reći da je Gibbsovo stanje sustava uvijek jedinstveno. Zbog jedinstvenosti Gibbsovog stanja pri temperaturi prijelaza, fazni prijelaz prvog reda zaokružen nemagnetičnim neredom, je kontinuiran.

2.6 Zaokruživanje faznog prijelaza prvog reda

Aizenman-Wehrova konstrukcija daje rigoroznu formulaciju efekta "zaokruživanja" faznog prijelaza prvog reda, pod utjecajem nereda za 2d sustave, kada se primijeni na temperaturni fazni prijelaz prvog reda u Pottsovom modelu s q stanja. Taj rezultat suprotan je od učinka popuštenog nereda, za koji je poznato da u dovoljnoj količini može uzrokovati promjenu režima faznog prijelaza iz drugog reda u prvi. Njihova konstrukcija može se primjeniti i na učinak nasumičnog polja na niskotemperaturnu fazu Isingovog modela u 2d. Dobiva se da nasumično magnetsko polje u tom modelu potpuno sprječava fazni prijelaz u dvije dimenzije.

Korespondenciju Pottsovog modela u granici $q \rightarrow \infty$ i Isingovog modela u nasumičnom polju u granici $T \rightarrow 0$ pokazali su Cardy i Jacobsen [86] razmatrajući ponašanje granice faza u ta dva modela. Iako preslikavanje ne vrijedi na točki prijelaza, moguće je dati indicije o mehanizmu zaokruživanja faznog prijelaza prvog reda na temelju volumnog ponašanja. Relacije termalnih varijabli Pottsovog sustava i magnetnih varijabli Isingovog sustava su:

$$\begin{aligned} \frac{s}{kT_C} &\rightarrow \frac{J}{kT} \\ \frac{\Delta E}{kT_C} c &\rightarrow \frac{h_{RF}}{kT} \\ (T - T_C)\Delta E &\rightarrow HM \end{aligned} \tag{2.19}$$

U tim izrazima sa s označena je energija granice faza, J je standardna notacija za interakcije u Isingovom modelu, c je lokalna koncentracija nereda, h_{RF} nasumično polje, ΔE je latentna toplina, a H magnetsko polje u Isingovom modelu. U Isingovom modelu s nasumičnim poljem, može se pokazati da je $\frac{h_{RF}}{J} \propto \frac{c\Delta E}{s}$ marginalno relevantno polje koje sprječava uređivanje. Prema preslikavanju, ono u Pottsovom sustavu s prijelazom prvog reda, vodi na iščezavanje latentne topline. U slučaju $d > 2$, Ising u nasumičnom polju pokazuje kompliciran fazni dijagram s područjima u kojima uređivanje postoji, kao i onima u kojima je potisnuto nasumičnim poljem. Taj argument vodi na postojanje trikritične točke u Pottsovom sustavu u višim dimenzijama, koja upravlja

promjenom režima prijelaza iz prvog reda u kontinuirani pod utjecajem zamrznutog nereda.

Što se tiče sustava u $d > 2$ Imry-Ma argument [85] daje irelevantnost, ali za infinitezimalno snažan nered. Ne postoji općenit odgovor na pitanje kada ocjena utjecaja nereda (2.10) vrijedi. Pojačavanjem snage nereda u sustavu, moguće je efektivno "koreliranje" nereda putem stupnjeva slobode sustava, iako je nametnut nasumično. Tada jednostavna ocjena utjecaja nereda na slobodnu energiju nije moguća. Taj mehanizam [87] dovodi do konačnog praga koncentracije nereda za koji se događa zaokruživanje faznog prijelaza prvog reda, u dobro definirani fazni prijelaz, koji nalikuje kontinuiranom. Takav zaključak u skladu je s prethodno navedenim Cardyjevim argumentom na temelju Isingovog modela u nasumičnom polju. Taj efekt numerički je demonstriran [31] ranom studijom zaokruživanja prijelaza prvog reda u 3d. Autori ističu da je zaokruživanje vidljivo na razini jedne konfiguracije nereda, što implicira iščezavanje energije granice faza.

2.7 Numerička istraživanja - nedostatak samousrednjevanja

Razvojem sve bržih računala otvorena je mogućnost računa svojstava faznih prijelaza s neredom numeričkim simulacijama, ali do trenutka kada je to postalo moguće (početkom 1990-tih) postojao je dojam u zajednici da je pitanje utjecaja zamrznutog nereda na fazni prijelaz drugog reda dovoljno razjašnjeno kroz gore navedene analitičke pristupe problemu. S druge strane, iako je pitanje utjecaja nereda na fazni prijelaz prvog reda postavljeno u isto vrijeme [84] kada i prvi radovi o utjecaju nereda na fazni prijelaz drugog reda, jedine konkluzivne tvrdnje do '90-tih godina o tom pitanju bili su radovi Imryja i Ma [85]. Razlog tome je nemogućnost perturbativnog tretmana problema koji bi bio analogan postupcima u slučaju prijelaza drugog reda, kao i ne postojanje rigoroznih tvrdnji sve do radova Aizenmana i Wehra [42]. Najzastupljeniji način pristupa tom problemu je numerički i stoga je njegovo proučavanje postalo znatno zastupljenije u literaturi od početka '90-tih godina pa sve do danas.

Iako su utjecaj nereda na fazni prijelaz prvog i drugog reda *a priori* dva sasvim različita problema, prve numeričke studije dale su indicaciju da rezultirajući fazni

prijelaz kada je nered relevantan, ima svojstva [64, 54] koja nalikuju kontinuiranom faznom prijelazu. Kao posljedica toga sva numerička istraživanja fenomena zaokruživanja prijelaza prvog reda provedena su posve identično istraživanjima utjecaja nereda na fazni prijelaz drugog reda.

Svi sistematski numerički pristupi problemu za koje znamo polaze od pretpostavke o faznom prijelazu drugog reda u translacijski invarijantnom sustavu. Jednaka opaska o ograničenosti zaključaka koji se iz takvog pristupa mogu očekivati vrijedi kao i za odgovarajuće analitičke račune.

Tipični numerički postupak [64, 57, 54] je odabrati pretpostavljenu temperaturu prijelaza u termodinamičkoj granici i zatim simulirati sustave s različitim konfiguracijama nereda pri toj temperaturi. Vrijednosti termodinamičkih observabli usrednjavaju se preko konfiguracija nereda. Za slučaj nereda u 2d moguće je zaključiti iz argumenta samodualnosti o srednjoj kritičnoj temperaturi u limesu $L \rightarrow \infty$, za specijalno zadane slučajeve nereda [88]. Kad takvi argumenti nisu dostupni, potrebno je računima locirati u dobroj aproksimaciji srednju kritičnu temperaturu. Suptilna varijanta numeričkog pristupa jest, na primjer računanje observabli metodom transfer matrice [52] umjesto MC simulacijom, ali koncept računanja observabli usrednjavanjem po konfiguracijama nereda je isti.

Jako snažni i nerazjašnjeni efekti konačnosti i velike fluktuacije observabli u ansamblu nereda, razlog su iznimnoj zahtjevnosti numeričkih računa i nekonkluzivnosti mnogih studija. Tipični rezultati koje takvi računi daju su efektivni eksponenti ν i η , ali isto tako druga svojstva prijelaza koja su se u proučavanju čistih sustava pokazala univerzalnima [89, 90] (Binderov kumulant, univerzalni omjeri amplituda...). U tablici 2.1 sumiramo rezultate za efektivne kritične eksponente jer su upravo ti rezultati od najvećeg interesa za studiju koju provodimo. Proučavani su brojni modeli, ali Pottsov model je bio najzastupljeniji zbog mogućnosti mijenjanja eksponenta parametrom q i promatranja utjecaja nereda u odnosu na Harrisov kriterij.

Wiseman i Domany napravili su studiju [64] prijelaza u Ashkin-Teller [91] modelu u režimu faznog prijelaza drugog reda s neredom u kojoj su računali fluktuacije srednjih vrijednosti observabli u ansamblu nereda. Značajan doprinos tog rada bilo je promatranje omjera samousrednjavanja za fazne prijelaze s neredom. Promatrali su veličinu $R_O(L)$ vezanu za singularni dio O_s gustoće observable $O(L)$ oko točke prijelaza:

$$R_O(L) = \frac{\langle \bar{O}_s^2(L) \rangle - \langle \bar{O}_s(L) \rangle^2}{\langle \bar{O}_s(L) \rangle^2}. \quad (2.20)$$

U izrazu (2.20) $\bar{\cdot}$ označeno je usrednjavanje po termodinamičkom ansamblu, a s $\langle \cdot \rangle$ usrednjavanje po ansamblu nereda pri jedinstvenoj temperaturi. Utvrdili su da u termodinamičkom limesu ta veličina teži u konstantu različitu od nule, $\lim_{L \rightarrow \infty} R_O(L) = \text{const.} > 0$. To svojstvo nazvano je nedostatkom samousrednjavanja. Dalji radovi Wisemana i Domanyja pokazali su da $L \rightarrow \infty$ limes od $R_O(L)$ ovisi o observabli za koju se promatra, ali su ponuđeni numerički dokazi nezavisnosti te konstante o koncentraciji nereda. Argument renormalizacijske grupe [92] potvrđuje univerzalnost konstante samousrednjavanja. Jedan od zaključaka bio je također da se konstanta znatno smanjuje uzimanjem prosjeka po neredu pri kvazikritičnim temperaturama svake konfiguracije nereda [66]. Unatoč brojnim konceptualnim pitanjima koja su se nametnula, istraživanje problema nedostatka samousrednjavanja u ovakvim sustavima svodi se na pokušaje računanja univerzalnih vrijednosti konstanti samousrednjavanja [93], ali pretežno se smatra da je to numerički problem [57, 56, 59, 94].

Prva sistematska numerička studija kritičnih svojstava sustava s faznim prijelazom prvog reda u kojemu je dodan nered bila je provedena na primjeru $q = 8$ Pottsovog modela u 2d [54] provođenjem precizne Monte Carlo simulacije Swendsen-Wangovim algoritmom. Kritični eksponenti ν i η koje su dobili bili su do na numeričke greške jednaki vrijednostima za 2d Ising model, što je sugeriralo da novi prijelaz pripada toj klasi univerzalnosti. Sličnom metodom proučavan je prijelaz drugog reda s neredom u 3d [56] i zaokruživanje prijelaza prvog reda u 3d slučajevima [59, 57]. Unatoč brojnim poteškoćama uzrokovanim snažnim efektima konačnosti i fluktuacija u ansamblu nereda uspjele su odrediti efektivne eksponente ν i η i ocijeniti prag jakosti nereda koji uzrokuje promjenu režima u slučaju zaokruživanja prijelaza prvog reda.

Cardy i Jacobsen [52] su proveli studiju utjecaja nereda na Pottsov model u 2d za generalni q . Postupak koji koriste je poopćenje metode transfer matrice [95], koja im omogućuje izvrijednjavanje slobodne energije. Iako se takvim elaboriranim postupkom moglo promatrati sustav za svaku realizaciju nereda, oni su izabrali računanje observabli pri samodualnoj temperaturi beskonačnog sustava i usrednjavanje po svim konfiguracijama nereda. Rezultat za efektivni eksponent ν koji dobivaju se slažu sa zaključcima Chena, Ferrenberga i Landaua, ali vrijednost eksponenta η pokazuje znatnu

razliku, podrijetlo koje nije jasno [96]. Nadalje uspjeli su izračunati eksponente za cijelo područje q što je demonstriralo vrlo slabu ovisnost eksponenata o tom parametru. Nadalje, za Isingov slučaj autori su dobili vrijednost $\nu = 1.12 \pm 0.3$, rezultat koji je u direktnom neslaganju s prijašnjim Dotshenkovim računom za toplinski kapacitet [50] i za koji autori nude objašnjenje da je zbog logaritamskih korekcija skaliranju. Također su pokušali interpretirati svoje rezultate u terminima konformne teorije polja i izračunati efektivni "centralni naboj" teorija polja koje tentativno opisuju nasumičnu fiksnu točku. To je pitanje kojim se i danas mnogi autori bave. Primjećen je fenomen "multifraktalnosti" jer fluktuacije srednje vrijednosti energije za različite realizacije nereda nisu pokazivale očekivano skaliranje i primjer su odstupanja od slike faznog prijelaza u efektivnom translacijski invarijantnom sustavu. Fenomen multifraktalnosti [97] opisuje postojanje beskonačne hijerarhije eksponenata koji opisuju momente observabli u sustavima s neredom. Takav pristup proizašao je iz konformne teorije polja i pokušava iskoristiti simetrije dvodimenzionalnih sustava u odnosu na konformne transformacije u primjeni na fazne prijelaze s neredom [98]. Studija Cardyja i Jacobsena ostavila je brojna otvorena pitanja, ali do danas ostaje najopsežnije istraživanje takvog tipa.

Nedavno je [55, 60] provedeno istraživanje zaokruživanja u Pottsovom modelu u 2 i 3d koje se bazira na optimizacijskom algoritmu koji pronalazi graf u FK reprezentaciji, koji minimizira slobodnu energiju. Metoda je primjenjiva u limesu $q \rightarrow \infty$ jer je tada moguće pokazati da niti jedan drugi graf nije bitan. Efektivni eksponenti koje su dobili za kritično ponašanje su u skladu s onima dobivenim SW algoritmom, ali zbog bolje efikasnosti metode u odnosu na pristup SW algoritmom su također bili u mogućnosti izračunati efektivne eksponente nasumične trikritične točke koja upravlja promjenom režima prijelaza s jačinom nereda u $d = 3$ [60].

2.8 Eksperimentalne realizacije

2.8.1 Sustavi

Halidi (fluoridi i kloridi) prijelaznih metala su realizacije Ising, XY i Heisenberg anti-feromagneta u jednoj, dvije i tri dimenzije. Spinovi u tim sustavima su Heisenbergovi, ali različite razine anizotropije sustava u ovisnosti o kemijskom sastavu ograničavaju

kontinuiranu simetriju i vode na XY ili Isingovo ponašanje oko kritične točke. Uvođenjem nasumičnosti nemagnetičnim atomima kao Zn^{++} ili Mg^{++} mogu se pripremiti slitine s nemagnetičnim zamrznutim neredom na čvorovima koje odgovaraju gore navedenim modelima. Prema Harrisovom kriteriju takav nered može biti relevantan jedino za slučajeve koji realiziraju Isingov model pa se na njih fokusiramo [99].

Realizacije 2d Ising modela su K_2CoF_4 i Rb_2CoF_4 [100]. Postoje također spojevi kao K_2NiF_4 ili Rb_2MgF_4 koji imaju dominantno Heisenbergove interakcije, ali zbog male Isingove anizotropije također pokazuju kritično ponašanje 2d Isingovog modela. Uvođenjem nemagnetskih izomorfa K_2MgF_4 ili Rb_2MgF_4 u takve sustave realizira se zamrznuti nemagnetični nered. Koncentracija nemagnetičnog nereda mora biti manja od perkolacijske granice po čvorovima 0.594, jer inače fazni prijelaz nestaje. Primjer realizacije Isingovog modela u 3d je FeF_2 . Nemagnetični nered u takvom sustavu uvodi se supstitucijom određene koncentracije atoma Fe atomima Zn . Ovi antiferomagnetski sustavi s neredom su ekvivalentni pripadnom prijelazu u feromagnetskom sustavu s neredom samo ako je vanjsko polje $h = 0$. U prisutnosti vanjskog polja, javlja se prijelaz u režim feromagnetskog sustava s nasumičnim poljem [101] koji ima drastično drugačije kritično ponašanje.

2.8.2 Metode raspršenja

Metode raspršenja [102] neutrona ili x-zraka na kritičnim uzorcima među najrasprostranjenijim su metodama određivanja kritičnih svojstava. Mjerenja udarnog presjeka u ovisnosti o valnom vektoru \vec{q} raspršenja daju informacije o Van Hoveovoj funkciji raspršenja:

$$S^{ab}(\vec{q}, \omega) = \frac{1}{2\pi} \sum_{\vec{r}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i(\vec{q}\vec{r} - \omega t)} \sigma^a(\vec{0}, 0) \sigma^b(\vec{r}, t) dt. \quad (2.21)$$

U tom izrazu a i b označavaju orijentaciju spinova σ . Zbog diskretne simetrije Isingovih spinova, samo komponenta $S^{zz} \equiv S^{\parallel}$ funkcije raspršenja nosi netrivialnu informaciju. Za određivanje kritičnih eksponenata potrebno je pretpostaviti određeni oblik funkcije S^{ab} . Prema fluktuacijsko - disipacijskom teoremu funkcija raspršenja proporcionalna je s imaginarnim dijelom korelacijske funkcije u translacijski invarijantnom sustavu. Ako se pretpostavi kvazielastičan proces, to jest da je vrijeme prolaska neutrona znatno

manje od karakterističnog vremena fluktuacije spinova, funkcija raspršenja predstavlja integral po svim frekvencijama ω . Pretpostavljanjem Ornstein–Zernike [103] prostornog ponašanja oko kritične točke dobiva se oblik funkcije raspršenja:

$$\Gamma_{oz}^{\parallel}(q) = \frac{A}{\kappa_{\parallel}^2 + q^2} \quad (2.22)$$

$$S^{\parallel}(q) = B^{\parallel} \Gamma_{oz}^{\parallel}(q) + \text{pozadina}. \quad (2.23)$$

Za translacijski invarijantni sustav κ_{\parallel}^{-1} je jednaka longitudinalnoj korelacijskoj duljini ξ_{\parallel} pa se u blizini prijelaza iz relacija za kritične eksponente može pisati:

$$\kappa_{\parallel} \propto |T - T_c|^{\nu}. \quad (2.24)$$

Korelacijska funkcija za $q \rightarrow 0$ povezana je s magnetskom susceptibilnosti χ pa je stoga u kritičnom području moguće pisati relaciju:

$$\Gamma_{oz}^{\parallel}(q \rightarrow 0) \propto |T - T_c|^{-\gamma}. \quad (2.25)$$

Mjerenjem raspršenja na sustavu uz navedene pretpostavke dobiva se informacija o kritičnim eksponentima ν i γ .

Što se tiče sustava u 2d, detaljne studije raspršenjem su provedene na $Rb_2Mn_{0.5}Ni_{0.5}F_4$ [99] i $Rb_2Co_cMg_{1-c}F_4$ [104, 105] koji bi trebali pokazivati ponašanje 2d Isingovog modela s neredom. Pokazalo se da je kritično ponašanje tih sustava identično čistom Isingovom kritičnom ponašanju do na nepouzdanosti mjerenja. Isingov model u 2d je marginalni slučaj relevantnosti nereda pa je takvo ponašanje očekivano. Nadalje, logaritamsko ponašanje, koje brojni teorijski članci [52, 50] pronalaze nije eksperimentalno opaženo.

Proučavanje faznog prijelaza sustava ekvivalentnih 3d Isingu s neredom metodama difrakcije, pokazalo se dosta teškim jer je problem sintetizirati dovoljno kvalitetne uzorke. Zbog efekata nesavršenosti uzoraka [106], prijelaz se može doimati "razmazanim" i nekonzistentnim s potencijalnim ponašanjem. Detaljnom studijom $Fe_{1-c}Zn_cF_2$, koja je uslijedila nakon što je dovoljno kvalitetan uzorak sintetiziran [107], pokazano

je ponašanje usporedivo nasumičnoj kritičnoj točki s eksponentima $\nu = 0.73 \pm 0.03$ i $\gamma = 1.44 \pm 0.06$, dok su vrijednosti nasumične fiksne točke $\nu = 0.683 \pm 0.002$ i $\gamma = 1.333 \pm 0.003$ [19].

2.8.3 Mjerenja toplinskog kapaciteta

Iako su studije u kojima se direktno, kalorimetrijski mjeri kritično ponašanje toplinskog kapaciteta i time određuje eksponent α , provedene za FeF_2 sustav [108] bez nereda, takvih studija nema za sustave s neredom. Zajednički problemi kalorimetrijskih mjerenja su povezani uz teško razlučivanje doprinosa toplinskom kapacitetu od magnetskog sustava, koji pokazuje kritično ponašanje, od ostalih doprinosa, kao na primjer fononskog utjecaja [109].

Umjesto direktnih kalorimetrijskih mjerenja za sustave koji su transparentni, kao fluoridi koji se razmatraju u ovom odjeljku, mogu se koristiti optička mjerenja u određivanju kritičnih svojstava sustava. Antiferomagnetsko uređivanje utječe na dvolomnost u takvim sustavima. Dvolomnost Δn se definira kao razlika indeksa loma zrake polarizirane longitudinalno i transverzalno osi anizotropije u sustavu, $\Delta n = n_e - n_o$. Može se pokazati da je za sustave Isingove simetrije spinova dvolomnost povezana sa srednjom magnetskom energijom [110] u translacijski invarijantnom sustavu. Zbog toga se toplinski kapacitet može dovesti u vezu s temperaturnom derivacijom dvolomnosti:

$$c \propto \frac{d(\Delta n)}{dT} \propto |T - T_C|^{-\alpha}. \quad (2.26)$$

Ispostavlja se da je u proučavanju dvolomnosti znatno manji problem uklanjanje doprinosa rešetke [111]. Određivanje derivacije dvolomnosti u sustavu $Fe_{1-c}Zn_cF_2$ [107] daje $\alpha = -0.09 \pm 0.03$.

3. Problem samousrednjavanja

Važnost nedostatka samousrednjavanja u proučavanju prijelaza s neredom, istakli su Wiseman i Domany u seriji radova [64] analizirajući pojavu variranja srednjih vrijednosti singularnog dijela observabli koja je jednakog reda kao sama vrijednost, promjenom konfiguracije nereda (kako je objašnjeno u odjeljku 2.7). Omjer samousrednjavanja definira se kao omjer standardne devijacije u ansamblu nereda i srednje vrijednosti singularnog dijela observable oko prijelaza u konačnom sustavu (2.20). U jednom od kasnijih radova iz serije [66] primjećuju da se omjer usrednjavanja izračunat u konačnom sustavu, znatno smanjuje ako se promatraju vrijednosti observabli pri vlastitim kvazikritičnim temperaturama sustava za svaku konfiguraciju nereda α . Ovakvo ponašanje je neočekivano, jer računi renormalizacijske grupe daju da su svojstva samousrednjavanja univerzalna [92]. U našem radu termin "problem samousrednjavanja" koristimo za naglašavanje činjenice da rezultati za kritično ponašanje relevantno ovise o načinu na koji se rezultati za specifične konfiguracije nereda usrednjuju po ansamblu nereda.

3.1 Prijelaz u efektivnom translacijski invarijantnom sustavu

U mnogim sustavima u kojima je nemagnetični zamrznuti nered relevantan i postoji pravi fazni prijelaz, taj prijelaz je kontinuiran. Takav ishod potvrđuje se u brojnim primjerima (poglavlje 2), nezavisno o dimenzionalnosti ili vrsti prijelaza u čistom sustavu. Sve studije za koje znamo na konkretnim modelima pristupaju faznom prijelazu u sustavu s neredom, konstrukcijom efektivnog translacijski invarijantnog sustava. Translacijska invarijantnost je preduvjet da bi se problem moglo tretirati, na primjer meto-

dama perturbativne renormalizacijske grupe [61] ili metodama konformne teorije polja za dvodimenzionalne sustave [53]. Numeričke metode ne zahtijevaju nužno translacijsku invarijantnost sustava, ali korištenje efektivnog translacijski invarijantnog sustava definirano analogno kao u analitičkim računima, drastično ih olakšava [52, 59].

Transformacija koja se koristi za uspostavljanje translacijske invarijantnosti u sustavu je usrednjavanje po konfiguracijama nereda pri jedinstvenoj temperaturi [61]. Ako promatramo konačan sustav veličine L s nasumičnom konfiguracijom nereda α , možemo ga zamisliti kao podsustav beskonačnog sustava. Broj konfiguracija nereda eksponencijski raste s veličinom podsustava L^d . Svaka konfiguracija nereda može se smatrati karakterističnom za jedan od podsustava na koji se može podijeliti beskonačan sustav. Drugim riječima konfiguracija nereda α povezana je s koordinatom podsustava u beskonačnom prostoru. Usrednjavanje slobodne energije podsustava veličine L po svim konfiguracijama nereda ima za posljedicu gubitak informacije o konfiguraciji nereda u pojedinom podsustavu. Zbog proizvoljnosti veličine podsustava slijedi da usrednjavanje slobodne energije također ima za posljedicu da sustav veličine L usrednjene slobodne energije ima jednaka svojstva u svakom proizvoljno izabranom volumenu unutar sebe. Stoga slobodna energija usrednjena po ansamblu nereda pri jedinstvenoj temperaturi ne može reproducirati pojavu prostornih nehomogenosti zbog nereda na bilo kojoj skali.

Definirajmo usrednjenje po ansamblu nereda pri jedinstvenoj temperaturi. Zamrznuti nered karakteriziran je raspodjelom konfiguracija nereda $P(\alpha)$ koja je statistički nezavisna od konfiguracije spinova, gdje je α indeks konfiguracije nereda. Složena vjerojatnost $P(\{\sigma\}, \alpha)$ može se pisati kao:

$$P(\{\sigma\}, \alpha) = P(\alpha) \cdot P(\{\sigma\}|\alpha) = P(\alpha) \cdot Z^{-1}(\alpha) e^{-\beta H(\{\sigma\}|\alpha)}. \quad (3.1)$$

Usrednjavanjem po raspodjeli nereda pri jedinstvenoj temperaturi dobiva se efektivan sustav koji nema referencu na α :

$$P(\{\sigma\}) = \sum_{\alpha} P(\{\sigma\}, \alpha) = \sum_{\alpha} P(\alpha) \cdot Z^{-1}(\alpha) e^{-\beta H(\{\sigma\}|\alpha)}. \quad (3.2)$$

Valja naglasiti da je izraz (3.2) različit od popuštenog prosjeka po neredu iz razloga što se svaka Boltzmannova težina otežava s vlastitom particijskom funkcijom za neku

konfiguraciju nereda $Z(\alpha)$. Iz (3.2) slijedi da se srednja slobodna energija usrednjena po konfiguracijama nereda može zapisati kao:

$$\mathcal{F} = \langle F(\alpha) \rangle = \frac{-1}{\beta} \sum_{\alpha} P(\alpha) \ln Z(\alpha). \quad (3.3)$$

U tom izrazu s $\langle \cdot \rangle$ označeno je usrednjenje po neredu pri jedinstvenoj temperaturi. Izrazi (3.2) i (3.3) zahtijevaju netrivialnu pretpostavku da usrednjenje po neredu komutira s usrednjenjem po termodinamičkom ansamblu i termodinamičkim limesom $L \rightarrow \infty$. Zbog prisutnosti faznog prijelaza ta dva usrednjanja ne moraju komutirati. U slijedećim odjeljcima, ponudit ćemo argumente na temelju homogenosti slobodne energije koji to pokazuju.

3.2 Homogenost i usrednjavanje

3.2.1 Poopćenje pretpostavke homogenosti slobodne energije za prijelaz s neredom

U ovom odjeljku poopćavamo pretpostavku homogenosti slobodne energije tako da opis bude u mogućnosti uključiti specifičnosti faznog prijelaza s neredom. Tvrdimo da slobodnu energiju konačnog sustava oko prijelaza možemo smatrati homogenom funkcijom, kad se u sustavu javljaju termodinamičke fluktuacije na skali samog sustava. Opis prijelaza drugog reda u čistom sustavu standardan je primjer te pojave.

Primjer drugačije prirode u kojemu je opis homogenim oblikom slobodne energije moguć, jest prijelaz prvog reda [112]. Unatoč konačnoj korelacijskoj duljini pri svakoj temperaturi, fluktuacije na skali sustava se javljaju se u končnom sustavu, kao rezultat postojanja dvije ili više faza koje imaju jednake statističke težine pri točki prijelaza (u slučaju prijelaza prvog reda u Pottsovom modelu njih je $q + 1$, q čistih i neuređena faza). Zbog toga na točki prijelaza sustav može biti u stanju s proizvoljnim udjelima faza. Upravo oko te točke može se uspostaviti relacija homogenosti slobodne energije. Na nekoj udaljenosti od točke prijelaza u parametarskom prostoru jedna faza prevlada, a ostale su metastabilne i njihova slobodna energija se razlikuje od prevladavajuće

homogene faze za iznos reda $\propto L^d$. Može se pokazati da su eksponenti reskaliranja relevantnih polja ($\tau = T - T_C$ i h) jednaki dimenzionalnosti sustava, $y_\tau = y_h = d$.

Pretpostavimo poopćenje oblika slobodne energije pri faznom prijelazu za konfiguraciju nereda α , oko točke prijelaza u konačnom sustavu:

$$f_\alpha(T, h) = L^{-d} \hat{f}_\alpha(L^{y_\tau}(T - T_\alpha^C(L)), L^{y_h}h) + \tilde{e}_\alpha(T, h). \quad (3.4)$$

Uveli smo kvazikritičnu temperaturu koja ovisi o konfiguraciji nereda α . Ne koristimo pritom, pretpostavku da se fluktuacije $T_\alpha^C(L)$ mogu direktno povezati s termodinamičkim fluktuacijama. U izrazu (3.4) \hat{f}_α predstavlja funkciju skaliranja singularnog dijela gustoće slobodne energije. Singularnost potječe od fluktuacija u termodinamičkom ansamblu pa taj član sadržava svu entropiju. Funkcija nasumične gustoće energije \tilde{e}_α , ne sadržava doprinose od singularnih fluktuacija u termodinamičkom ansamblu i predstavlja doprinos slobodnoj energiji zbog optimizacije u konfiguraciji nereda α . Suptilnost koju valja naglasiti, jest da varijacije kvazikritične temperature $T_\alpha^C(L)$ i nasumične gustoće energije \tilde{e}_α zbog konfiguracije nereda α , uključuju prostorne nehomogenosti u sustavu na točki prijelaza, kako ćemo pokazati u odjeljku 3.2.3.

3.2.2 Usrednjavanje pri jedinstvenoj temperaturi - argument Pázmándi, Scalettar i Zimány

Argument o konzistentnosti usrednjavanja slobodne energije pri jedinstvenoj temperaturi koji navodimo, poopćenje je argumenta iz rada Pázmándija Scalettara i Zymánija [65]. Pitanje konzistentnosti se svodi na ponašanje kvazikritične temperature u sustavu s neredom $T_\alpha^C(L)$. Ako je nered relevantan i ako je slobodna energija opisana homogenom funkcijom, pretpostavimo da za danu veličinu sustava L vrijednost kvazikritične temperature fluktuirá karakterističnom širinom, opisanom potencijalnim zakonom $\propto L^{-\tilde{y}_\tau}$, oko srednje vrijednosti po ansamblu nereda:

$$T_\alpha^C(L) = [T_\alpha^C(L)] + t(\alpha) \cdot L^{-\tilde{y}_\tau} \equiv [T^C](L) + t(\alpha) \cdot L^{-\tilde{y}_\tau}. \quad (3.5)$$

U izrazu (3.5) $[\cdot]$ označava usrednjavanje po ansamblu nereda, a $t(\alpha)$ funkcija koja parametrizira raspodjelu kvazikritične temperature u terminima konfiguracije nereda

i poprima vrijednosti $O(1)$, s prosjekom u ansamblu nereda $[t(\alpha)] = 0$. Eksponent \tilde{y}_τ opisuje skaliranje širine njene raspodjele. Razlika od izvornog argumenta koji autori rada [65] navode jest u tome što oni radi jednostavnosti razmatraju slučaj u kojemu su fluktuacije kvazikritične temperature određene Gaussovom raspodjelom i vrijedi $\tilde{y}_\tau = \frac{d}{2}$.

Ako usporedimo (3.5) s (3.4) dobiva se da ovisnost skalirane vrijednosti pomaka temperature sadrži član $L^{y_\tau - \tilde{y}_\tau} \cdot t(\alpha)$. Konzistentnost usrednjavanja pri jedinstvenoj temperaturi izraza (3.4) zahtijeva $y_\tau \leq \tilde{y}_\tau$. Specijalna realizacija tog uvjeta jest irelevantnost nereda prema Harrisovom kriteriju, kada $y_\tau < \frac{d}{2} \equiv \tilde{y}_\tau$.

U obratnom slučaju član $L^{y_\tau - \tilde{y}_\tau} \cdot t(\alpha)$ postaje po volji veći od konstantne vrijednosti kojom je definirano područje zaokruživanja. Pázmándi, Scalettar i Zimányi ističu da tada usrednjavanje slobodne energije pri jedinstvenoj temperaturi uzorkuje nekritične termodinamičke konfiguracije.

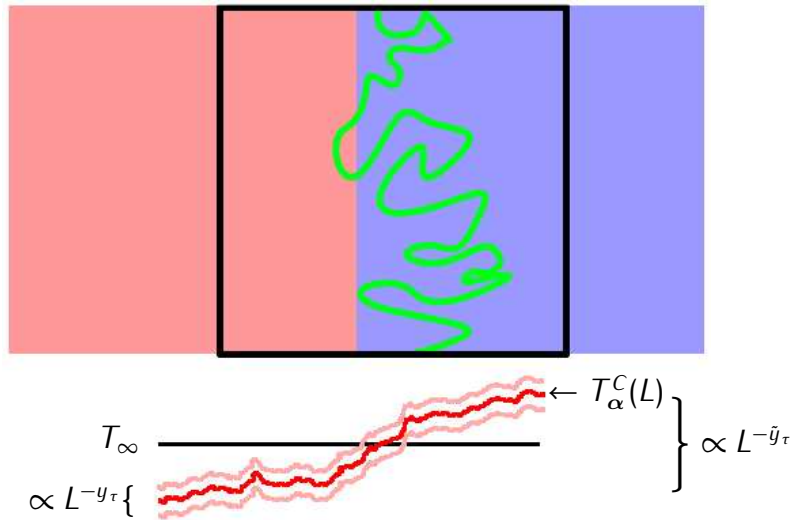
Razmotrimo puni izraz za gustoću slobodne energije $f_\alpha(T, h)$ (3.4). Prisustvo ekscisivnih fluktuacija temperature:

$$\delta T_\alpha^C(L) \propto L^{-\tilde{y}_\tau} > L^{-y_\tau}, \quad (3.6)$$

prilikom usrednjavanja pri jedinstvenoj temperaturi, ekstenzijom argumenta Pázmándija Scalettara i Zimányija [65] vodi na redefiniciju pripadne funkcije skaliranja \hat{f} u obliku:

$$\langle f_\alpha(T, h) \rangle = L^{-d} \hat{g}(L^{\tilde{y}_\tau} \tau, L^{\tilde{y}_h} h), \quad (3.7)$$

gdje je $\tau = T - [T_\alpha^C(L)]$ reducirana temperatura. Forma (3.7) nema prostornu ovisnost i vodi na fazni prijelaz drugog reda u efektivnom translacijski invarijantnom sustavu. Gubi se informacija o eksponentu y_τ i zadržava jedino informacija o eksponentu \tilde{y}_τ koji upravlja fluktuacijama kvazikritičnih temperatura. Razlog zbog kojega se ovakvim postupkom dobivaju netrivialni eksponenti jest postojanje mehanizma optimizacije, razvezanog od termodinamičkih fluktuacija, koji upravlja fluktuacijama kvazikritičnih temperatura i određuje ponašanje redefinirane temperature \tilde{t} s netrivialnim potencijalnim zakonom $\propto L^{-\tilde{y}_\tau}$.



Slika 3.1: dva susjedna podsustava beskonačnog sustava s neredom na temperaturi T_∞ . Temperatura T_∞ je iznad kvazikritične temperature podsustava na lijevoj strani (crveno), ali je ispod kvazikritične temperature podsustava na desnoj strani (plavo). Podsustav označen crnim rubom ima kvazikritičnu temperaturu do na područje zaokruživanja jednaku T_∞ pa može spontano formirati difuzni domenski zid.

3.2.3 Nehomogenosti na skali veličine sustava

Opciju $y_\tau \geq \tilde{y}_\tau$ u ovom radu povezujemo s relevantnosti prostornih nehomogenosti pri temperaturi prijelaza. Interpretacija se nameće prema izrazu za gustoću slobodne energije (3.4). Nazovimo fazu sustava koja je stabilna za $T > T_C$ neuređenom, a fazu koja je stabilna za $T < T_C$ uređenom. Divergencija argumenta slobodne energije $L^{y_\tau - \tilde{y}_\tau} \cdot t(\alpha)$ u granici $L \rightarrow \infty$ implicira da stabilnost faze pri temperaturi $[T^C](L)$ ovisi o konfiguraciji nereda i samim tim o položaju podsustava u beskonačnom volumenu za svaki L .

Sama stabilnost faze nije dovoljna da bi se pojavile prostorne nehomogenosti potrebno je procijeniti zajednički efekt volumnog doprinosa i doprinosa zbog domenskog zida. Na primjer, postoji mogućnost da se neki podsustav nalazi u (volumno) nestabilnoj fazi, čijom promjenom u stabilnu bi se pojavio domenski zid. Ako je slobodna energija sustava u stabilnoj fazi i domenskog zida viša od slobodne energije sustava u volumno nestabilnoj fazi bez domenskog zida, onda podsustav većeg sustava može biti stabilan u fazi koja je nestabilna.

Fluktuacije kvazikritične temperature proporcionalne su s $L^{-\tilde{y}_\tau}$, ali širina područja

zaokruživanja proporcionalna je s manjom širinom L^{-y_τ} . Površinska napetost domenskog zida iščezava na kritičnoj temperaturi kontinuiranog prijelaza i određena je kritičnim eksponentom μ koji ovisi jedino o kritičnom eksponentu y_τ [113]:

$$o \propto |T - T_C|^\mu \quad (3.8)$$

$$\mu = \frac{d-1}{y_\tau} \quad (3.9)$$

Ako je sustav unutar širine zaokruživanja, termodinamičke fluktuacije spontano mogu stvoriti difuzni domenski zid između različitih faza jer je njegova slobodna energija usporediva sa slobodnom energijom bilo koje dvije konfiguracije koje ne sadržavaju domenski zid [113]. U slici konačnog sustava kao podsustava veličine L u beskonačnom sustavu kojega promatramo pri $[T_C](\infty)$, lokalne varijacije kvazikritičnih temperatura su znatno veće od područja zaokruživanja $L^{-\tilde{y}_\tau} > L^{-y_\tau}$ (slika 3.1). Ali varijacije lokalnih kvazikritičnih temperatura su nasumične i mogu poprimiti pozitivne i negativne vrijednosti. Zbog toga je plauzibilno da je moguće naći podsustav, između dva podsustava s varijacijama kvazikritične temperature suprotnih predznaka, u kojemu će temperatura $T = [T_C](\infty)$ biti do na područje zaokruživanja udaljena od vlastite kvazikritične temperature. U tom podsustavu spontano se formira domenski zid između uređene i neuređene faze. Zaključujemo da je sustav nestabilan na stvaranje prostornih homogenosti ako je $y_\tau \geq \tilde{y}_\tau$.

3.2.4 Chayesova duljina - ζ

U izrazu (3.4) argument slobodne energije koji sadržava temperaturu može se napisati kao $L \cdot (T - T_\alpha^C(L))^{\frac{1}{y_\tau}}$. Dimenzionalnom analizom, $(T - T_\alpha^C(L))^{-\frac{1}{y_\tau}}$ prepoznamo kao korelacijsku duljinu ζ čija je divergencija opisana eksponentom $y_\tau = \frac{1}{\nu}$.

Ali usrednjavanjem po ansamblu nereda pri jedinstvenoj temperaturi kada je $y_\tau > \tilde{y}_\tau$, argument slobodne energije koji sadržava temperaturu mijenja se u $L \cdot \tau^{-\frac{1}{\tilde{y}_\tau}}$, kako se može vidjeti u izrazu (3.7). Fluktuacije kvazikritične temperature u ansamblu nereda $\delta T_\alpha^C(L)$ rezultiraju efektivnom temperaturnom varijablom $\tau = T - [T_\alpha^C(L)]$. Argumentom dimenzionalne analize slijedi da se u sustavu pojavljuje prostorna skala $\zeta \propto \tau^{-\frac{1}{\tilde{y}_\tau}}$. Informacija o eksponentu y_τ i korelacijskoj duljini ζ kompletno se gubi jer je eksponent

\tilde{y}_τ dominantan. Iz razloga što se može definirati nezavisno o konfiguraciji nereda, prostornu skalu ζ nazivamo Chayesova duljina.

Chayes i ostali [63] pokazali su da mogućnost definiranja jedinstvene dugovalne skale u sustavu, nezavisno o konfiguraciji nereda α , povlači da eksponent divergencije te duljine mora zadovoljavati Chayesov kriterij (pogledati izraz (2.8) u odjeljku 2.2). Prema toj korespondenciji Chayesov kriterij odnosi se na eksponent \tilde{y}_τ , koji prema njihovim argumentima zadovoljava granicu:

$$\tilde{y}_\tau \leq \frac{d}{2}. \quad (3.10)$$

Povjesno, Chayesov kriterij izložen je tek 1985., ali logika usrednjavanja kao u izrazima (3.2) ili (3.3) je već do tada bila uvriježena u perturbacijskim računima re-normalizacijske grupe [51, 61]. Takav standardni pristup može se naći u udžbenicima [3]. Koncept Chayesove duljine koji se u tom izvodu koristi kao jedine relevantne divergirajuće skale u sustavu koja je u najgorem slučaju marginalno osjetljiva na promjenu konfiguracije nereda α istovjetan je zanemarivanju korelacijske duljine sustava ζ ako vrijedi $y_\tau > \tilde{y}_\tau$. Tada usrednjenje pri jedinstvenoj temperaturi nije opravdano. Ono, prema argumentu Pázmándija, Scalettara i Zimányia [65] daje izraz za efektivnu slobodnu energiju koja sadrži informaciju o eksponentu \tilde{y}_τ , ali ne o y_τ . Takva slobodna energija isključivo je rezultat usrednjavanja i u njoj se gubi informacija o termodinamičkim fluktuacijama u tipičnom sustavu na točki prijelaza.

Jedino kad je pretpostavka $y_\tau < \tilde{y}_\tau$ ispravna, ima smisla raditi prosjek po konfiguracijama nereda pri jedinstvenoj temperaturi. Tada se usrednjavanjem izraza (3.4) uklanja referenca na specifičnu konfiguraciju nereda i omogućuje se zaključivanje o univerzalnim kritičnim svojstvima.

Slika faznog prijelaza drugog reda u efektivnom translacijski invarijantnom sustavu, gdje je singularitet opisan dvama nezavisnim kritičnim eksponentima na analogan način prijelazu drugog reda u čistom sustavu, najjednostavniji je scenarij za opis faznih prijelaza u sustavu s neredom. Unatoč tome postoje primjeri faznog prijelaza u sustavima s neredom za koje se može analitički argumentirati da ovakva slika ne opisuje njihovu punu kompleksnost, kao na primjer McCoy–Wu model (pogledati odjeljak 3.3.2).

3.3 Analitički primjeri učinka nereda

3.3.1 Kubični lanac s interakcijama prvih susjeda

Primjer koji navodimo u ovom odjeljku predstavlja egzaktno rješivi problem u kojemu je nered relevantan po Harrisovom kriteriju, ali u kojemu usrednjavanje slobodne energije pri jedinstvenoj temperaturi daje ispravan rezultat. Nadalje, u tom slučaju nered ne modificira kritično ponašanje. Takav neočekivano slab utjecaj nereda na fazni prijelaz, rezultat je posebnog svojstva egzaktnog rješenja zbog kojeg je slobodna energija ekstenzivna pri temperaturi prijelaza. Ovaj model je također primjer sustava u kojemu je Chayesov kriterij narušen.

Kubični lanac s interakcijama prvih susjeda zadan je Hamiltonijanom:

$$H_{n-v} = - \sum_{i=1}^{N-1} J_i \vec{\sigma}_i \vec{\sigma}_{i+1} - J_N \vec{\sigma}_N \vec{\sigma}_1. \quad (3.11)$$

U (3.11) s N je označen broj spinova, J_i su njihove interakcije, a svaki spin je n komponentni vektor koji može poprimiti $2n$ vrijednosti $\vec{\sigma}_i = (0, 0, \dots, \pm\sqrt{n}, 0, \dots, 0)$. U čistom slučaju, kada je $J_i \equiv J$ ovo je egzaktno rješivi klasični jednodimenzionalni model [114]. Ako je $n < 1$, fazni prijelaz opisuje polimerizaciju, a interesantna karakteristika jest da se uređivanje spinova i u jednodimenzionalnom slučaju događa pri konačnoj temperaturi. Derrida i Hilhorst [115] proučavali su kako je prijelaz modificiran uvođenjem nasumičnosti u interakcije J_i . Particijska funkcija za jednodimenzionalni slučaj s neredom može se zapisati kao:

$$Z_\alpha = (2n)^N \left(\prod_{i=1}^N \left(\frac{\cosh(nJ_i/T) + n - 1}{n} \right) + n \prod_{i=1}^N \left(\frac{\sinh(nJ_i/T)}{n} \right) + (n - 1) \prod_{i=1}^N \left(\frac{\cosh(nJ_i/T) - 1}{n} \right) \right). \quad (3.12)$$

U visokotemperaturnoj fazi ($T > T_C$), prvi produkt dominira nad ostala dva. S druge strane u niskotemperaturnoj fazi ($T < T_C$) drugi produkt dominira. U bilo kojemu od ta dva slučaja, particijska funkcija sustava s neredom (3.12) može se napisati

kao umnožak N lokalnih faktora povezanih sa svakom interakcijom. Rješenje čistog modela dobiva se postavljanjem $J_i \equiv J$ u (3.12) i ima identičnu strukturu kao i rješenje s neredom.

U slučaju sustava s nasumičnim vrijednostima J_i , svaki od faktora čiji umnožak sačinjava particijsku funkciju ($\cosh(\cdot)$ ili $\sinh(\cdot)$), ima nasumičnost koja je statistički nezavisna od bilo kojeg drugog i zadana raspodjelom J_i u ansamblu nereda. Svaki od N faktora rezultat je termodinamičkog usrednjavanja. Zbog te specifičnosti problema, usrednjavanje po termodinamičkom ansamblu i ansamblu nereda komutira. Vrijednost slobodne energije u konačnom sustavu suma je nezavisnih slučajnih varijabli i njena nasumičnost je proporcionalna s $N^{-1/2}$. Zbog statističke nezavisnosti faktora, usrednjavanje po ansamblu nereda realizira se uzimanjem limesa $N \rightarrow \infty$.

U visoko- i niskotemperaturnoj fazi gustoća slobodne energije može se egzaktno zapisati kao prosjek po ansamblu nereda:

$$f = N^{-1} \langle \ln Z \rangle = \begin{cases} \ln 2 + \langle \ln(\cosh(\frac{nJ}{T}) + n - 1) \rangle & \text{za } T > T_C \\ \ln 2 + \langle \ln(\sinh(\frac{nJ}{T})) \rangle & \text{za } T < T_C \end{cases} \quad (3.13)$$

U (3.13) prosjek po ansamblu nereda $\langle \cdot \rangle$ realiziran je uzimanjem granice $N \rightarrow \infty$. Temperatura prijelaza u sustavu s neredom dana je izrazom:

$$\langle \ln(\cosh(nJ/T_{C,1}) + n - 1) \rangle = \langle \ln(\sinh(nJ/T_{C,1})) \rangle. \quad (3.14)$$

U visokotemperaturnoj fazi postoji izraz za korelacijsku funkciju:

$$\overline{\vec{\sigma}_i \vec{\sigma}_{i+R}} = n \prod_{j=i}^{i+R-1} \frac{\sinh(nJ_j/T)}{\cosh(nJ_j/T) + n - 1}. \quad (3.15)$$

Iz izraza (3.15) može se vidjeti da će sustav oko najvjerojatnije temperature prijelaza u ansamblu nereda $T_{C,1}$, pokazivati divergenciju korelacijske duljine ξ_t :

$$\xi_t^{-1} = \langle \ln(\cosh(nJ_i/T_{C,1}) + n - 1) / \sinh(nJ_i/T_{C,1}) \rangle. \quad (3.16)$$

Ali raspodjela korelacijskih funkcija u ansamblu nereda pokazuje netrivialna svojstva. Korelacijska funkcija usrednjena po ansamblu nereda, $\langle \overline{\vec{\sigma}_i \vec{\sigma}_{i+R}} \rangle$, određena je

divergencijom korelacijske duljine ξ_s :

$$\xi_s^{-1} = -\ln(\langle \sinh(nJ/T_{C,2}) / \cosh(nJ/T_{C,2}) + n - 1 \rangle). \quad (3.17)$$

Kumulantnim razvojem dobiva se da je temperatura divergencije, $T_{C,2}$ duljine ξ_p , veća od $T_{C,1}$. Stoga lociranje temperature prijelaza korelacijskom funkcijom usrednjenom u ansamblu nereda ima za rezultat nalaženje temperature pri kojoj tipični sustavi nisu kritični.

Kritični eksponent y_τ koji određuje divergenciju bilo koje od dviju duljina ξ_t ili ξ_s jednak je 1. Zbog toga je ovaj model primjer sustava u kojemu je Chayesov kriterij narušen:

$$y_\tau = 1 > 0.5 = \frac{d}{2} = \tilde{y}_\tau. \quad (3.18)$$

Zbog separacije particijske funkcije na faktore, fluktuacije kvazikritičnih temperatura su Gaussove $\propto L^{-\frac{d}{2}}$. Ovaj rezultat pokazuje da nema nikakvog fizikalnog razloga zašto bi scenarij u kojemu je $y_\tau > \tilde{y}_\tau$ bio nekompatibilan s oštrim faznim prijelazom što mnogi autori ističu kao općenitu nemogućnost [84, 52]. Naime, eksponent fluktuacija kvazikritične temperature u ovom slučaju jednak je $\tilde{y}_\tau = \frac{d}{2}$.

Kubični lanac s interakcijama prvih susjeda odlikuje se specijalnim svojstvom egzaktnog rješenja čistog modela. Particijska funkcija separira se na umnožak N faktora koji se odnose na pojedinačne, lokalne varijable interakcija između spinova u lancu. Ako je nered zadan nasumičnošću u interakcijama, uzrokuje perturbacije faktora koje nisu prostorno korelirane. Zbog toga njegovo uvođenje ne remeti egzaktnu rješivost problema. Specijalan oblik rješenja čistog modela, koji je svojstven isključivo za jednodimenzionalne sustave s diskretnim spinovima, uzrokuje činjenicu da su fluktuacije slobodne energije Gaussove, slučajne varijable. Koliko znamo [116] ne postoji niti jedan drugi egzaktno rješivi čisti model u prostoru dimenzionalnosti $d > 1$ za koji je moguće na jednak način separirati particijsku funkciju u realnom prostoru. Specijalno, egzaktno rješenje Pottsovog modela u $2d$ za $q \leq 4$ na točki prijelaza ne može se faktorizirati na način kao model koji razmatramo u ovom odjeljku.

Za općeniti sustav pri točki prijelaza slobodna energija nije ekstenzivna i particijsku funkciju nije moguće izraziti kao umnožak nezavisnih lokalnih faktora u realnom

prostoru. Razlog zbog kojeg usrednjavanje slobodne energije po ansamblu nereda u ovom problemu daje ispravan rezultat, je ekstenzivnost slobodne energije zbog specifičnosti egzaktnog rješenja

3.3.2 Kvantni Isingov lanac u nasumičnom transverznom polju

Primjer u kojemu prosjek po ansamblu nereda slobodne energije daje krivi rezultat je kvantni fazni prijelaz u 1d Isingovom lancu u nasumičnom transverznom polju (TFIM), opisan Hamiltonijanom:

$$H_{TFI} = -J \sum_i \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z - h \sum_i \sigma_i^x \quad (3.19)$$

U izrazu (3.19) J su interakcije, $\hat{\sigma}_i = (\sigma_i^x, \sigma_i^y, \sigma_i^z)$ su spinski operatori čije komponente su Paulijeve matrice i h predstavlja polje u transverznom (x) smjeru. Ovaj model pokazuje kvantni fazni prijelaz pri $T = 0$ za $\delta h = h - J = 0$ između paramagnetske faze za $\delta h > 0$ i uređene feromagnetske faze za $\delta h < 0$. Zamrznuti nered se u ovaj model može uvesti nasumičnim interakcijama J_i i poljem h_i :

$$H_{RTFI} = - \sum_i J_i \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z - \sum_i h_i \sigma_i^x. \quad (3.20)$$

Ovaj model je po kritičnom ponašanju ekvivalentan dvodimenzionalnom klasičnom McCoy-Wu modelu [9]. To je klasični Isingov dvodimenzionalni model s interakcijama prvih susjeda i specijalno zadanim neredom u interakcijama. Hamiltonijan McCoy-Wu modela može se zapisati kao:

$$H = - \sum_{i,j} J \sigma_{i,j} \sigma_{i,j+1} - \sum_{i,j} J'_i \sigma_{i,j} \sigma_{i+1,j}. \quad (3.21)$$

U tom izrazu $\sigma_{i,j}$ predstavljaju klasične Isingove spinove koji se nalaze na dvodimenzionalnoj rešetci. Indeksi i i j označavaju položaj u stupcu, odnosno retku. U istim stupcima, sve longitudinalne interakcije su identične i iznose J , što čini sustav translacijski invarijantnim uzduž stupaca. Ta prostorna os klasičnog modela, preslikava se

u vremensku os kvantnog Isingovog lanca u nasumičnom transverzalnom polju. Transverzalne interakcije J'_i su nasumične i ovisne o stupcu, a sve interakcije su pozitivne.

Kad nema nasumičnosti u transverzalnim interakcijama u izrazu (3.21), $J'_i \equiv J'$, egzaktnim preslikavanjem [117, 118] je dokazano, da klasični 2d Isingov model i kvantni 1d Isingov model zadan Hamiltonijanom (3.19) imaju identične kritične eksponente. Pritom promjena temperature od (konačne) kritične vrijednosti $\tau = T - T_C$ u dvodimenzionalnom klasičnom modelu, odgovara promjeni u transverzalnom polju $\delta h = h - J$ u jednodimenzionalnom kvantnom modelu pri $T = 0$.

Jednaka korespondencija, može se poopćiti za slučaj nereda pa se stoga McCoy-Wu model može smatrati ekvivalentnim Hamiltonijanu (3.20) u kojemu nema nasumičnosti u transverznom polju, $h_i \equiv h$. Ali korištenje renormalizacijske transformacije [35] uvodi nasumičnost u transverzalno polje čak ako je u početnom Hamiltonijanu ono jednoliko. Zaključak je stoga da iako je fazni prijelaz u RTFIM (3.20) kvantni (pri $T = 0$), a u McCoy-Wu modelu (3.21) klasični (pri konačnom T_C), kritično ponašanje ta dva modela s neredom je identično. Daljnju diskusiju nastavljamo samo za RTFIM uz naglasak da se jednako rezoniranje može provesti i za McCoy-Wu model.

Za RTFIM postoje egzaktni analitički rezultati [35] od kojih navodimo samo neke. Točka prijelaza u tipičnom sustavu može se locirati argumentima dualnosti. Transformacija iz varijabli na čvorovima ($\hat{\sigma}_i$) u varijable na vezama ($\hat{\tau}_i$) definirana kao:

$$\begin{aligned}\tau_i^x &= \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z \\ \tau_i^z &= \prod_{j \leq i} \sigma_j^x,\end{aligned}\tag{3.22}$$

samo izmjenjuje uloge $J_i \leftrightarrow h_i$ u Hamiltonijanu (3.20). Promatrajući srednje vrijednosti logaritma nasumičnog polja u ansamblu nereda kao kontrolni parametar, fazni prijelaz u sustavu dan je izrazom [119]:

$$\langle \ln(h_i) \rangle|_C = \langle \ln(J_i) \rangle.\tag{3.23}$$

Za $\langle \ln(h_i) \rangle > \langle \ln(J_i) \rangle$ sustav je paramagnetičan, dok za $\langle \ln(h_i) \rangle < \langle \ln(J_i) \rangle$ postoji konačna magnetizacija. Egzaktno je pokazano [76] da na točki prijelaza energija

osnovnog stanja sustava pokazuje bitni singularitet.

Diskrepancija između najvjerojatnijeg i usrednjenog ponašanja sustava s neredom može se ilustrirati na primjeru korelacijskih funkcija. Radi specifičnosti promatramo:

$$\Gamma_{i,j} = \langle 0 | \sigma_i^z \sigma_j^z | 0 \rangle - \langle 0 | \sigma_i^z | 0 \rangle \cdot \langle 0 | \sigma_j^z | 0 \rangle. \quad (3.24)$$

U (3.24) $\langle 0 | \cdot | 0 \rangle$ predstavlja trag po osnovnom stanju kvantnomehaničkih operatora. Shankar i Murty [76] su pokazali da je najvjerojatnije ponašanje korelacijske funkcije, u paramagnetskoj fazi u blizini prijelaza opisano s:

$$\ln \Gamma_{i,j}^t \propto -\frac{|j-i|}{\xi_t}, \quad (3.25)$$

s tipičnom korelacijskom duljinom ξ_t određenom pomakom od točke prijelaza $\delta h = h - h_C$:

$$\xi_t \propto \frac{1}{\delta h^\nu} \quad (3.26)$$

$$\nu = 1 \quad (3.27)$$

Ponašanje korelacijske funkcije (3.25) usrednjene po ansamblu nereda pokazuje znatno drugačije ponašanje. Izvodom funkcije skaliranja $\langle \Gamma_{i,j} \rangle$ u paramagnetskoj fazi D.S.Fisher [35] je dobio da usrednjena korelacijska funkcija, za velike udaljenosti trne s karakterističnom skalom:

$$\xi_s \propto \frac{1}{\delta h^{\tilde{\nu}}} \quad (3.28)$$

$$\tilde{\nu} = 2 \quad (3.29)$$

Taj rezultat pokazuje da u usrednjennoj korelacijskoj funkciji dominiraju doprinosi od "atipično" snažnih korelacija na udaljenostima koje su u termodinamičkom limesu znatno veće od njihovog tipičnog dosega.

Činjenica da se eksponenti tipičnih i usrednjenih korelacija (3.27 i 3.29) razlikuju,

govori o postojanju dvije divergirajuće prostorne skale pri točki prijelaza. Usrednjavanje slobodne energije po ansamblu nereda u kritičnom području dovelo bi do detektiranja samo usrednjene korelacijske duljine ξ_s , a informacija o manjoj prostornoj skali ξ_t bi se izgubila u postupku usrednjavanja iako ona opisuje kritične korelacije u bilo kojem nasumično izabranom članu ansambla nereda.

3.4 Fluktuacije u sustavu s neredom

Pri faznom prijelazu, singularni dio slobodne energije opisuje kritične fluktuacije u termodinamičkom ansamblu. Tipične fluktuacije observabli pri faznom prijelazu s neredom predstavljaju upravo fluktuacije u termodinamičkom ansamblu. Ako se usrednjavanjem po ansamblu nereda u kritičnom području može izgubiti informacija o termodinamičkom ansamblu prirodno je promatrati te fluktuacije zasebno. Razlučivanje termodinamičkih fluktuacija od fluktuacija u ansamblu nereda daje mogućnost testiranja pretpostavke komutiranja usrednjenja po neredu i po termodinamičkom ansamblu.

Valja naglasiti suprotnost između takvog pristupa i pristupa koji podrazumijeva fazni prijelaz drugog reda u efektivnom translacijski invarijantnom sustavu. Ako je fazni prijelaz efektivno opisan s dva kritična eksponenta \tilde{y}_τ i \tilde{y}_h izrazom (1.5) ili (3.7), asimptotsko ponašanje svih momenata singularnog dijela gustoće neke observable O_s , kao energije ili magnetizacije, određeno cjelobrojnim višekratnicima istog eksponenta:

$$\overline{O_s} \propto L^{-x_0} \quad (3.30)$$

$$\overline{O_s^2} - \overline{O_s}^2 \propto L^{-2 \cdot x_0} \quad (3.31)$$

$$\overline{O_s^3} - 3 \cdot \overline{O_s^2} \cdot \overline{O_s} + 2 \cdot \overline{O_s}^3 \propto L^{-3 \cdot x_0} \quad (3.32)$$

...

Za slučaj energije, taj eksponent je $x \equiv d - y_\tau$, a za magnetizaciju $\frac{E}{V} = d - y_h$.

Ako su fluktuacije srednjih vrijednosti u ansamblu nereda dominantne nad termodinamičkim fluktuacijama na kvazikritičnoj točki, nemoguće je da su svi momenti neke observable određeni istim eksponentom. Naime srednja vrijednost za bilo koju

konfiguraciju nereda je određena realizacijom nereda u ansamblu nereda, a drugi momenti su određeni termodinamičkim fluktuacijama. Sama činjenica da su fluktuacije u ansamblu nereda dominantne govori o tome da opis takvog sustava izlazi iz okvira prijelaza drugog reda u efektivnom translacijski invarijantnom sustavu.

Stoga je važno izgraditi pristup pomoću kojeg je moguće razdvojeno analizirati fluktuacije koje potječu od nereda od termodinamičkih fluktuacija pri faznom prijelazu sustava s neredom.

Glavna ideja pristupa jest, da se promatranjem kritičnog ponašanja oko kvazi-kritične temperature $T_\alpha^C(L)$ svake pojedine konfiguracije nereda α za bilo koji L , mogu uzeti u obzir nehomogenosti između sustava s različitim konfiguracijama nereda. Prema argumentu skaliranja, promjenom veličine sustava L , na taj način uzimaju se u obzir i nehomogenosti na svim skalama kada su prisutne. Iako dozvoljavamo postojanje nehomogenosti u svim observablama koje karakteriziraju sustav, polazimo od pretpostavke da termodinamičke fluktuacije u sustavima s različitim α pokazuju univerzalnost, koja se pokazuje opravdanom.

3.4.1 Fluktuacije termodinamičkog ansambla

U odjeljku 3.2 uveli smo poopćenje homogenog oblika slobodne energije za sustave s neredom prema izrazu (3.4). Taj oblik slobodne energije opisuje fluktuacije termodinamičkog ansambla oko vlastite temperature prijelaza u konačnom sustavu:

$$f_\alpha^{t.d.}(T, h) = f_\alpha(T, h) - \tilde{e}_\alpha(T, h) = L^{-d} \hat{f}_\alpha(L^{y_\tau}(T - T_\alpha^C(L)), L^{y_h} h). \quad (3.33)$$

U (3.33) od slobodne energije oduzet je član nasumične gustoće energije $\tilde{e}_\alpha(T, h)$, koji predstavlja doprinos slobodnoj energiji od procesa optimizacije slobodne energije u specifičnoj konfiguraciji nereda. Kad se pritom termodinamičke fluktuacije određuju oko vlastitih kvazikritičnih temperatura svake konfiguracije nereda $T_\alpha^C(L)$, prostorne nehomogenosti su uzete su u obzir (poglavlje 5). Ako homogenosti nisu bitne, ovakav pristup eksplicitno daje kao rezultat da one nisu bitne, kako ćemo vidjeti na primjeru perkolacije (odjeljak 6.1).

U homogenu slobodnu energiju (3.33) ulazi samo reducirana temperatura $\tau = T - T_\alpha^C(L)$ koja mjeri udaljenost od temperature prijelaza u konačnom sustavu za

svaku pojedinu konfiguraciju nereda. Za sustav veličine L , područje zaokruživanja u reduciranoj temperaturi određeno je termodinamičkim eksponentom y_τ : $\tau \propto L^{-y_\tau}$ pa je stoga kvazikritičnu temperaturu moguće odrediti do na područje zaokruživanja.

Ovakav opis dozvoljava općenite fluktuacije $T_\alpha^C(L)$ pa i mogućnost da su $\propto L^{-\tilde{y}_\tau} > L^{-y_\tau}$. Tu opciju interpretiramo kao pojavu relevantnih prostornih nehomogenosti na svim skalama. S druge strane, ako se računom dobiva:

$$\tilde{y}_\tau \equiv \frac{d}{2} > y_\tau, \quad (3.34)$$

očekujemo iščezavanje prostornih nehomogenosti u termodinamičkoj granici. Izraz (3.34) nije ništa drugo nego izričaj Harrisovog kriterija.

Slobodna energija ovisi o reduciranoj temperaturi τ i magnetskom polju h čije termodinamički konjugirane veličine su energija e i parametar reda m . Lako je vidjeti da oblik funkcije (3.33) implicira svojstva skaliranja raspodjela fluktuacija observable oko srednje vrijednosti u termodinamičkom ansamblu:

$$\mu_\alpha(O_\alpha - \bar{O}_\alpha) \propto L^{x_O} \hat{\mu}_{O,\alpha}(L^{x_O}(O_\alpha - \bar{O}_\alpha)). \quad (3.35)$$

U (3.35) x_O predstavlja kritični eksponent povezan s observablom O , a $\hat{\mu}$ funkciju skaliranja koja je po definiciji normirana na 1. Reskaliranje raspodjela gustoće energije e i Pottsovog parametra reda m , daje u termodinamičkoj granici informaciju o kritičnim eksponentima $x = d - y_\tau$ i $\frac{d}{v} = d - y_h$:

$$\mu_\alpha(e_\alpha - \bar{e}_\alpha) \propto L^x \hat{\mu}_{e,\alpha}(L^x(e_\alpha - \bar{e}_\alpha)) \quad (3.36)$$

$$\mu_\alpha(m_\alpha - \bar{m}_\alpha) \propto L^{\frac{d}{v}} \hat{\mu}_{m,\alpha}(L^{\frac{d}{v}}(m_\alpha - \bar{m}_\alpha)). \quad (3.37)$$

Mora se uzeti u obzir da funkcija skaliranja $\hat{\mu}_\alpha$ oko prijelaza u termodinamičkom ansamblu ovisi o konfiguraciji nereda α , ali pod pretpostavkom univerzalnosti eksponenti ne ovise. Uklanjanje fluktuacija u ansamblu nereda omogućuje određivanje termodinamičkog eksponenta x_O . Potrebno je računati observablu za svaku konfiguraciju nereda pri temperaturi koja je u području zaokruživanja za tu konfiguraciju, $\tau \equiv T - T_\alpha^C(L) \propto L^{-y_\tau}$. Na taj način, njen fluktuacijski dio gubi ovisnost o konfiguraciji

nereda u argumentima. Zbog toga je smisleno usrednjiti raspodjele (3.35, 3.36, 3.37) po konfiguracijama nereda α :

$$\mu(\delta O) \equiv [\mu_\alpha(O_\alpha - \bar{O}_\alpha)], \quad (3.38)$$

Usrednjenje po neredu vrijednosti observabli pri kvazikritičnim točkama označavamo s uglatim zagradama $[\cdot]$, kako bismo ga razlučili od usrednjavanja po neredu pri jedinstvenoj temperaturi koje u cijelom tekstu označavamo s $\langle \cdot \rangle$. Standardna devijacija observable od srednje termodinamičke vrijednosti, usrednjena po ansamblu nereda daje, u limesu beskonačnog sustava termodinamički kritični eksponent. Naglašavamo da je kvazikritična temperatura za svaku konfiguraciju nereda α određena do na područje zaokruživanja $\tau \propto L^{-y_\tau}$:

$$\begin{aligned} &\text{za svaki } \alpha : \tau \propto L^{-y_\tau} \\ &\sqrt{[\bar{O}_\alpha^2 - \bar{O}_\alpha^2]} \equiv \sqrt{[\bar{O}_\alpha^2|_\tau - \bar{O}_\alpha^2|_\tau]}(L) \propto L^{-x_0}. \end{aligned} \quad (3.39)$$

Standardne devijacije fluktuacija termodinamičkog ansambla energije e i Pottsovog parametra reda m , daju u termodinamičkoj granici informaciju o kritičnim eksponentima y_τ i $y_h = d - \frac{\beta}{\nu}$:

$$\sqrt{[\bar{e}_\alpha^2 - \bar{e}_\alpha^2]} \equiv \sqrt{[\bar{e}_\alpha^2|_\tau - \bar{e}_\alpha^2|_\tau]}(L) = a_e \cdot L^{-x} + b_e \cdot L^{-x-\omega_e} \dots \quad (3.40)$$

$$x = d - y_\tau$$

$$\sqrt{[\bar{m}_\alpha^2 - \bar{m}_\alpha^2]} \equiv \sqrt{[\bar{m}_\alpha^2|_\tau - \bar{m}_\alpha^2|_\tau]}(L) = a_m \cdot L^{-\frac{\beta}{\nu}} + b_m \cdot L^{-\frac{\beta}{\nu}-\omega_m} \dots \quad (3.41)$$

Kvazikritične termodinamičke fluktuacije energije i parametra reda opisuju kritično ponašanje toplinskog kapaciteta c_α i magnetske susceptibilnosti χ_α za svaku realizaciju nereda. Prema definiciji, širine raspodjela observabli u termodinamičkom ansamblu daju informaciju o odzivu sustava na perturbaciju koja odgovara konjugiranoj veličini od određene observable.

$$c = [c_\alpha(L)] = \frac{L^d}{k_B T} [\overline{e^2}_\alpha - \bar{e}_\alpha^2] \quad (3.42)$$

$$\chi = [\chi_\alpha(L)] = \frac{L^d}{k_B T} [\overline{m^2}_\alpha - \bar{m}_\alpha^2] \quad (3.43)$$

Usrednjavanje po ansamblu nereda pri vlastitim kvazikritičnim temperaturama ($[\cdot]$), u našem postupku, služi isključivo kao alat računanja u konačnom sustavu, a ne za uspostavljanje translacijske invarijantnosti u sustavu, kao usrednjavanje pri jedinstvenoj temperaturi. Ponašanje c ili χ u eksperimentalnom sustavu (koji pokazuje divergirajuću prostornu skalu) određeno upravo s termodinamičkim eksponentima, opisanim u ovom odjeljku.

3.4.2 Fluktuacije kvazikritične temperature u ansamblu nereda

Posebnu važnost u ovom radu zauzimaju fluktuacije kvazikritičnih temperatura u ansamblu nereda. Separiranje termodinamičkih fluktuacija na način opisan u odjeljku 3.4.1 podrazumijeva mogućnost nezavisnog određivanja kvazikritičnih temperatura. Oko kontinuiranog faznog prijelaza može se pretpostaviti potencijaska ovisnost konvergencije $[T_\alpha^C](L)$ i standardne devijacije njihovih fluktuacija $\sqrt{[T_\alpha^{C2} - [T_\alpha^C]^2]}(L)$:

$$[T^C] \equiv [T_\alpha^C](L) = [T_\alpha^C](\infty) + \tilde{a}'_T \cdot L^{-\tilde{y}'_\tau} + \dots \quad (3.44)$$

$$\sqrt{[\delta T_\alpha^{C2}]} \equiv \sqrt{[T_\alpha^{C2} - [T_\alpha^C]^2]}(L) = \tilde{a}_T \cdot L^{-\tilde{y}_\tau} + \dots \quad (3.45)$$

Nezavisno određivanje kvazikritičnih temperatura $T_\alpha^C(L)$ i fluktuacija termodinamičkog ansambla temelj je testiranja pretpostavke ekvivalentnosti prijelaza s prijelazom drugog reda u sustavu s neredom opisane u odjeljku 3.1. Uspoređivanjem eksponenta \tilde{y}_τ s eksponentom y_τ dobivenim iz fluktuacija termodinamičkog ansambla energije (3.40) može se direktno provjeriti slaganje sa slikom faznog prijelaza u efektivnom translacijski invarijantnom sustavu (3.7).

3.4.3 Fluktuacije u ansamblu nereda

Razmatranje opcije $y_\tau > \tilde{y}_\tau$, nužno vodi na neadekvatnost opisa sustava izrazom (3.7). Postojanje dodatnog, netrivialnog eksponenta \tilde{y}_τ pokreće pitanje njegovog podrijetla. Ako je on manji od y_τ ne može se tvrditi da je cijela informacija o faznom prijelazu sadržana u singularnom dijelu slobodne energije, jer on opisuje samo termodinamičke fluktuacije pri prijelazu. Stoga mora postojati dodatni mehanizam utjecaja nereda koji upravlja fluktuacijama $T_\alpha^C(L)$ i koji nije na jednostavan način povezan s termodinamičkim fluktuacijama. Smatramo da su fluktuacije kvazikritičnih temperatura i observabli u ansamblu nereda povezane s optimizacijom slobodne energije u sustavu s određenom konfiguracijom nereda, mehanizam koje je razjašnjen. Taj doprinos u slobodnu energiju (3.4) ulazi kroz funkciju nasumične energije $\tilde{e}_\alpha(T, h)$ koja predstavlja srednju gustoću energije određenu u ansamblu nereda. Za srednju kvazikritičnu vrijednost energije koju određujemo EIC algoritmom vrijedi: $\bar{e}_\alpha \equiv \tilde{e}_\alpha(T_\alpha^C(L), 0)$. Parcijalnom derivacijom funkcije $\tilde{e}_\alpha(T, h)$ po h dobivaju se srednje vrijednosti gustoće magnetizacije $\bar{m}_\alpha(T, h)$.

Ponašanje srednjih vrijednosti observabli $\bar{O}_\alpha|_\tau$ (pri kvazikritičnoj temperaturi $T_\alpha^C(L)$ pojedine konfiguracije nereda α) stoga promatramo nezavisno od termodinamičkih fluktuacija. Srednje kritične vrijednosti observabli definiraju raspodjelu, koju označavamo s $\tilde{\mu}(\bar{O}_\alpha - [\bar{O}_\alpha])$. Najvažnije njene karakteristike su srednja vrijednost i standardna devijacija za koje također očekujemo potencijsko ponašanje:

$$[\bar{O}](L) \equiv [\bar{O}_\alpha|_\tau](L) = [\bar{O}_\alpha|_\tau](\infty) + a'_O \cdot L^{-\tilde{x}'_O} + \dots \quad (3.46)$$

$$\sqrt{[\bar{O}_\alpha^2] - [\bar{O}_\alpha]^2} \equiv \sqrt{[\bar{O}_\alpha^2|_\tau] - [\bar{O}_\alpha|_\tau]^2}(L) = a_O \cdot L^{-\tilde{x}_O} + \dots \quad (3.47)$$

EIC algoritam omogućuje zasebno određivanje eksponentata \tilde{x}_O i \tilde{x}'_O koji opisuju potencijsko ponašanje ove dvije veličine. Ako su \tilde{x}_O ili $\tilde{x}'_O < x_O$ (eksponent termodinamičkih fluktuacija iste observable), slika efektivnog faznog prijelaza drugog reda nije ispravna jer su fluktuacije srednjih vrijednosti po ansamblu nereda dominantne nad termodinamičkim fluktuacijama. U tom slučaju srednje vrijednosti gustoće energije i Pottsovog parametra reda konvergenciju opisujemo oblikom:

$$[\bar{e}] \equiv [\bar{e}_\alpha]_\tau(L) = [\bar{e}_\alpha](\infty) + \tilde{a}'_e \cdot L^{-\tilde{x}'} + a_{1,e} \cdot L^{-x} \dots \quad (3.48)$$

$$[\bar{m}] \equiv [\bar{m}_\alpha]_\tau(L) = \tilde{a}'_m \cdot L^{-\tilde{y}'} + a'_{1,m} \cdot L^{-\frac{\beta}{v}} \dots \quad (3.49)$$

U izrazima (3.48, 3.49) definiramo eksponente \tilde{x}' i \tilde{y}' koji određuju dominantno ponašanje. Očekujemo da termodinamički eksponenti opisuju vodeće korekcije skaliranja, kako je naznačeno u izrazima (3.48) i (3.49).

Ako je s druge strane, slika prijelaza u translacijski invarijantnom sustavu ispravna, nezavisnim određivanjem eksponenata treba se dobiti $\tilde{x}_0, \tilde{x}'_0 \geq x_0$. U tom slučaju eksponenti fluktuacija u ansamblu nereda su korekcije skaliranja u odnosu na dominantno kritično ponašanje određeno termodinamičkim fluktuacijama.

U fluktuacijama srednjih vrijednosti u ansamblu nereda, član od termodinamičkih fluktuacija ne očekujemo:

$$\sqrt{[\bar{e}_\alpha^2] - [\bar{e}_\alpha]^2} \equiv \sqrt{[\bar{e}_\alpha^2]_\tau - [\bar{e}_\alpha]^2_\tau}(L) = \tilde{a}_e \cdot L^{-\tilde{x}} + \dots \quad (3.50)$$

$$\sqrt{[\bar{m}_\alpha^2] - [\bar{m}_\alpha]^2} \equiv \sqrt{[\bar{m}_\alpha^2]_\tau - [\bar{m}_\alpha]^2_\tau}(L) = \tilde{a}_m \cdot L^{-\tilde{y}} + \dots \quad (3.51)$$

U izrazima (3.50, 3.51) definirani su eksponenti \tilde{x} i \tilde{y} koji određuju termodinamičku granicu fluktuacija srednjih vrijednosti u ansamblu nereda.

Moguće je uspostaviti relaciju među eksponentima \tilde{y} i \tilde{y}' koji opisuju magnetizaciju. Kontinuirani fazni prijelaz je određen iščezavajućim parametrom reda na točki prijelaza s srednjom vrijednošću koja konvergira u nulu s eksponentom \tilde{y}' i ne može poprimiti negativne vrijednosti. Kad bi eksponent \tilde{y} bio relevantniji od \tilde{y}' , to bi bilo u suprotnosti s polaznom pretpostavkom da srednja vrijednost konvergira s \tilde{y} . Stoga se može tvrditi da u termodinamičkom limesu mora vrijediti:

$$\tilde{y} \geq \tilde{y}'. \quad (3.52)$$

Kao primjer situacije u kojoj vrijedi stroga nejednakost u izrazu (3.52) navodimo slučaj irelevantnog nereda (pogledati odjeljak 6.1). Tada su eksponenti povezani uz

skaliranje efekata nereda strogo manji od eksponenata konvergencije koji su određeni termodinamičkim fluktuacijama. Na temelju tog primjera za skaliranje magnetizacije u sustavu s relevantnim neredom očekujemo jednakost u izrazu (3.52), $\tilde{y} \equiv \tilde{y}'$.

3.4.4 Omjer samousrednjavanja

Kako smo već spomenuli u odjeljku 2.7 i definirali izrazom (2.20), način za opis nedostatka samousrednjavanja u sustavu pri točki prijelaza, jest preko omjera varijance neke observable u ansamblu nereda i kvadrata singularnog dijela te observable usrednjenog po ansamblu nereda [64]. Izraz za omjer samousrednjavanja parametra reda glasi:

$$R_m \equiv \lim_{L \rightarrow \infty} R_m(L) \quad (3.53)$$

$$R_m(L) \equiv \frac{[\overline{m_\alpha^2} | \tau] - [\overline{m_\alpha} | \tau]^2}{[\overline{m_\alpha} | \tau]^2}. \quad (3.54)$$

U literaturi se često računa i omjer samousrednjavanja magnetske susceptibilnosti:

$$R_\chi \equiv \lim_{L \rightarrow \infty} R_\chi(L) \quad (3.55)$$

$$R_\chi(L) \equiv \frac{[\overline{\chi_\alpha^2} | \tau] - [\overline{\chi_\alpha} | \tau]^2}{[\overline{\chi_\alpha} | \tau]^2}. \quad (3.56)$$

Ekvivalentne veličine ne postoje za čisti sustav. U sustavu s irelevantnim neredom, fluktuacije singularnih dijelova observabli u ansamblu nereda trnu brže od srednjih vrijednosti u limesu $L \rightarrow \infty$ i omjeri samousrednjavanja su 0. Ako je nered relevantan, pokazano je [64] da su fluktuacije u ansamblu nereda jednakog reda kao i srednje vrijednosti i omjeri samousrednjavanja teže u konstantu vrijednost, koja ovisi o promatranoj observabli.

Aharony i Harris [92, 120] proučavali su metodama renormalizacijske grupe, ponašanje omjera samousrednjavanja R_χ . Polazna točka njihovog rada je pretpostavka o

faznom prijelazu drugog reda u efektivnom translacijski invarijantnom sustavu (odjeljak 3.1). Uvode prostorno ovisnu perturbaciju kvadratnog člana u Ginzburg–Landau funkcional $\delta r(x)$. Zatim pokazuju, za nekoliko polaznih nasumičnih raspodjela $P(r)$, da pri RG transformaciji one teže u invarijantni oblik. Pokazuju da omjer samousrednjavanja R_χ , ovisi samo o asimptotskom obliku $P(r)$. Takav rezultat je snažna indikacija univerzalnosti omjera samousrednjavanja.

Wiseman i Domany [66] prvi su istakli činjenicu da omjer samousrednjavanja ovisi o načinu usrednjavanja. Iako nisu proveli kompletnu studiju kritičnih eksponenata usrednjavanjem pri kvazikritičnim temperaturama pojedinačnih konfiguracija nereda, pokazuju da je omjer R_χ za 3d Isingov model oko $50\times$ manji od rezultata standardnog usrednjavanja pri jedinstvenoj temperaturi. Odstupanje od univerzalnosti koja je očekivana za omjer samousrednjavanja, upućuje na mogućnost različitog rezultata za kritično ponašanje, ovisno o načinu usrednjavanja.

3.5 Sažetak problema samousrednjavanja

U ovom poglavlju, povezali smo problem samousrednjavanja s nedostatkom translacijske invarijantnosti u sustavu pri točki prijelaza. Uvođenje ovisnosti slobodne energije o lokalnoj kvazikritičnoj temperaturi dozvoljava uzimanje u obzir relevantnosti prostornih nehomogenosti u sustavu prilikom računa skaliranjem u konačnom sustavu. Za klasu prijelaza koji su nam interesantni, fenomenološki smo opisali kako se kritično ponašanje relevantno modificira prisustvom prostornih nehomogenosti.

U odsustvu egzaktnih rezultata, mahom je prihvaćeno mišljenje (odjeljci 2.4 i 2.7) je da je fazni prijelaz u prisustvu nemagnetičnog zamrznutog nereda u Pottsovom modelu opisan slikom faznog prijelaza drugog reda u efektivnom translacijski invarijantnom sustavu (odjeljak 3.1). Do sada postoje samo dva teorijska rada (Pázmándi, Scalettar i Zymány [65] i Bernardet, Pázmándi i Batrouni [121]) koji dovode u pitanje postavke tog pristupa za općenit sustav. Iako Wiseman i Domany [66] ne dovode u pitanje postupak definiranja ekvivalentnog translacijski invarijantnog sustava, pokreću pitanje nedostatka samousrednjavanja [64]. Zaključili su da su rezultati za kritično ponašanje sustava drugačiji kada se nered usrednjuje pri vlastitoj kvazikritičnoj temperaturi svake konfiguracije. Numerička zahtjevnost takvog računa razlog je zbog kojega

ovakva studija prije nikada nije provedena. EIC pristupom elegantno se rješava problem lociranja pojedine kvazikritične temperature za neku konfiguraciju nereda α , što omogućuje provođenje računa u izvedivom vremenu.

Da bismo tretirali relevantne prostorne nehomogenosti pri točki prijelaza, razvili smo algoritam ravnotežnog invazivnog grozda (EIC) za Pottsov model [11, 12], koji se odlikuje svojstvom automatskog samoreguliranja u temperaturu prijelaza sustava za bilo koju zadanu konfiguraciju nereda. Taj algoritam nam omogućuje račun kritičnih eksponenata na način opisan u odjeljku 3.4.

4. Algoritam ravnotežnog invazivnog grozda – EIC

Egzaktna rješenja problema u statističkoj fizici vrlo često se svode na ekstremno op-skurne probleme. U njihovom odsustvu, za računanje svojstava netrivialnih statističkih modela često se koriste se Monte Carlo (MC) simulacije. Općeniti princip Monte Carlo simulacije jest krenuti od izraza za particijsku funkciju modela (na primjer Pottsovog) i iskonstruirati algoritam koji uzorkuje konfiguracije sustava prema težinama koje su zadane sumandima u particijskoj funkciji. Kada raspolažemo s ravnotežnim konfiguracijama uzorkovanjem dovoljnog broja konfiguracija može se izračunati bilo koja termodinamička observabla. Nedostatak MC simulacija je u tome što mogu računati isključivo svojstva konačnih sustava, veličinu kojih označavamo s L .

U proučavanju kontinuiranog faznog prijelaza princip MC simulacije je isti, ali zbog pojavljivanja beskonačne prostorne skale u sustavu nije dovoljno simulirati sustav samo za jednu veličinu. Informacije o kritičnom ponašanju dobivaju se ekstrapolacijom u limes $L \rightarrow \infty$ uz pomoć teorije skaliranja u konačnom sustavu (pogledati odjeljak 1.1.2 ili [17]).

U ovom poglavlju objašnjavamo algoritam ravnotežnog invazivnog grozda (EIC) [11, 12] koji je razvijen i usavršen tijekom izrade ove disertacije. On se pokazuje idealnim za računanje kritičnih svojstava Pottsovog sustava s neredom, o čemu će više riječi biti kasnije (poglavlja 5 i 6). U ovom poglavlju demonstriramo taj algoritam na primjeru čistog Pottsovog modela. Direktna primjena svih koncepata na način na koji su izneseni je moguća na bilo koji klasični spinski sustav u kojemu spinovi imaju diskretnu simetriju, ali poopćenje je moguće i za sustave s kontinuiranom simetrijom spinova.

4.1 Nelokalne MC simulacije

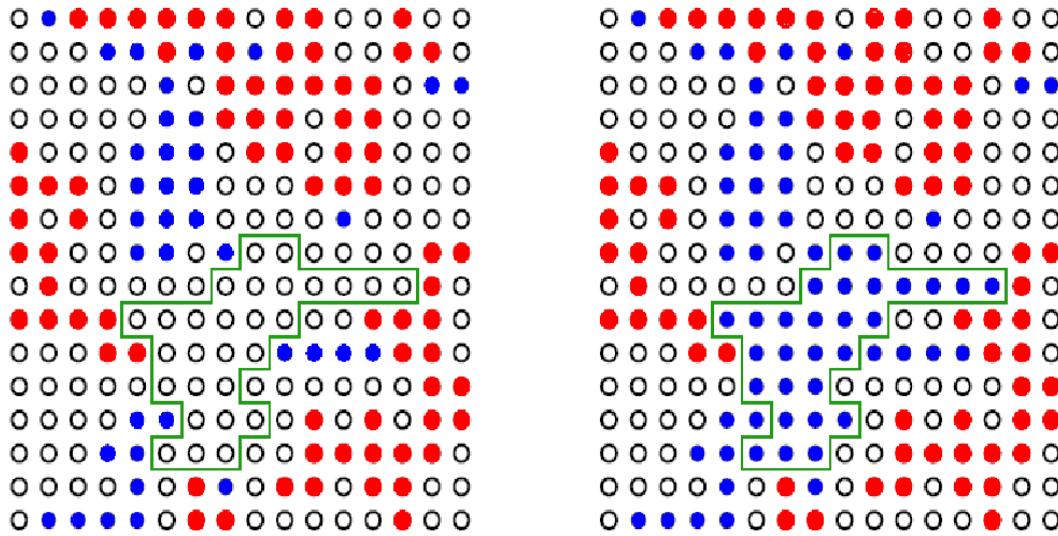
Slijedimo pedagoški pristup Newmana i Barkeme [122] kako bismo ilustrirali korak konstrukcije grozdova koji je zajednički svim nelokalnim MC simulacijama koje se u ovom poglavlju navode kao primjeri [13, 28, 29, 11]. Nelokalni MC algoritmi donijeli su znatan napredak u proučavanju faznog prijelaza u klasičnim spinskim modelima jer omogućavaju znatno efikasnije uzorkovanje faznog prostora nego što je to slučaj u klasičnim Metropolis-Hastings [123] ili Kawasaki [124] algoritmima. Oko kvazikritične točke, radi perkolacije FK grozdova, javlja se efekt kritičnog usporavanja i karakteristično "vrijeme" izraženo u broju koraka algoritma (Monte Carlo koraci - MC koraci) potrebno za generirati statistički nezavisnu spinsku konfiguraciju, raste kao:

$$t_c \propto L^z. \quad (4.1)$$

U (4.1) z označava dinamički kritični eksponent koji je neuniverzalan iako je pokazano da postoji rigorozna Li-Sokalova [125] donja granica za vrijednost koju može poprimiti, ovisna o kritičnim eksponentima faznog prijelaza $z > \frac{\alpha}{\nu}$. Dinamički eksponent ovisi o efikasnosti uzorkovanja faznog prostora algoritma koji se koristi za numeričko proučavanje faznog prijelaza. Za ilustraciju dinamički eksponent za 3D Isingov model iznosi redom: za Metropolis algoritam, 2.02 ± 0.02 [126]; Wolff-ov algoritam, 0.33 ± 0.01 [127] i za Swendsen-Wangov algoritam 0.54 ± 0.02 [128], dok je vrijednost $\frac{\alpha}{\nu} = 0.172$ [19].

4.1.1 Geometrijska konstrukcija grozdova

Geometrijska konstrukcija grozdova, koji sadržavaju određene spinove na rešetci ima fizikalnu interpretaciju jedne "realizacije" spin-spin korelatora u sustavu. Nakon što su grozdovi konstruirani, moguće nezavisno mijenjati stanje svim spinovima u svakom grozdu. Kompletan MC korak sačinjen je još i od nasumičnog mijenjanja stanja grozdova nakon postupka konstrukcije grozdova, ali ovdje se fokusiramo na objašnjavanje koraka konstrukcije grozdova. Pokazuje se da pristup konstrukcije grozdova direktno vodi na Fortuin-Kasteleynovu konstrukciju [26] za Pottsov model, ali princip formiranja grozda koji ćemo demonstrirati ne ovisi o specifičnostima Pottsovog modela.



Slika 4.1: Grozd na proizvoljnoj konfiguraciji spinova za $q = 3$ Pottsov model u 2d, iskonstruiran je dodavanjem "veza" između susjeda koji su u istom stanju. Kada se formira grozd ovakvim vjerojatnosnim postupkom, može se svim spinovima u grozdu proizvoljno promijeniti stanje.

Razmotrimo $q = 3$ Pottsov model u 2d (1.14) na kvadratnoj rešetki (slika 4.1) u nasumičnoj konfiguraciji spinova. Grozd, kao na slici 4.1 konstruiran je vjerojatnosnim postupkom koji uključuje *a priori* vjerojatnost veze p (1.17) iz izraza za Fortuin-Kasteleynovu particijsku funkciju (1.16):

- izabrati nasumični spin i kao ishodište grozda
- za svakog prvog susjeda j provjeriti je li u istom stanju kao početni spin i i pridijeliti ga grozdu s vjerojatnosti p ako je $\sigma_i = \sigma_j$
- postupak dodavanja prvih susjeda u grozd ponoviti za svaki novopridijeljeni spin j na način da se postupak dodavanja spina ne ponovi više od jedanput niti za jedan par

Gore navedeni postupak se završava kada su sve opcije dodavanja spinova u grozd iscrpljene. Takvom grozdu na konfiguraciji spinova σ_A je po završetku pridijeljena težina W :

$$W(A) = e^{-\beta E_A} \cdot p^{b_A} (1-p)^{n_A - b_A}, \quad (4.2)$$

gdje prvi član u umnošku na desnoj strani označava Boltzmannovu težinu, b označava broj uspostavljenih "veza", a n ukupan broj veza koji se u formiranju grozda mogao staviti. Ako želimo promijeniti stanja svih spinova u grozdu u neko drugo stanje B , pitamo se što je potrebno da taj proces zadovoljava princip detaljne ravnoteže koji je uvjet za generiranje ravnotežnog ansambla. Ako označimo početno stanje sustava s A , a konačno s B uvjet detaljne ravnoteže glasi:

$$W(A)G(A \rightarrow B) = W(B)G(B \rightarrow A), \quad (4.3)$$

gdje $G(A \rightarrow B)$ vjerojatnost prijelaza iz stanja A u B u nekom procesu. Promjena vrijednosti svih spinova u grozdu može utjecati samo na energije susjeda koji se nalaze sa suprotne strane granice grozda. Označimo li s m_A broj zadovoljnih susjeda na rubu grozda u konfiguraciji A , a s m_B broj zadovoljnih susjeda na istom rubu u konfiguraciji B , omjer težina stanja koja bi se dobila formiranjem grozda na konfiguracijama A odnosno B iznosi:

$$\frac{W(A)}{W(B)} \equiv \frac{G(B \rightarrow A)}{G(A \rightarrow B)} = (e^{\beta J} \cdot (1 - p))^{m_B - m_A} \quad (4.4)$$

Upravo za vjerojatnost $p = 1 - e^{-\beta J}$, desna strana izraza jednaka je 1. U tom slučaju može se s vjerojatnošću 1 promijeniti stanje svih spinova grozda u bilo koje drugo stanje, a da se uzorkuje kanonski ansambl u konfiguracijama spinova. Jednako rezoniranje može se primijeniti nezavisno o tome koliko se grozdova formiralo u postupku. Uvođenje dodatnih varijabli veza $b_{i,j}$, koji mogu poprimiti vrijednosti 1 i 0 na interakcije prvih susjeda definira složenu statističku težinu:

$$w(\{\sigma\}, \{b\}) = \prod_{\langle i,j \rangle} ((1 - p) \cdot \delta_{b_{i,j},0} + p \cdot \delta_{b_{i,j},1} \cdot \delta_{\sigma_i, \sigma_j}). \quad (4.5)$$

Kada se razmatra Pottsov model, sumiranjem po spinskim stupnjevima slobode izraza (4.5) dobiva Fortuin-Kasteleynova particijska funkcija (1.16), a sumiranjem po stupnjevima slobode veza originalna Pottsova particijska funkcija.

Swendsen-Wangov [28] i Wolffov [29] algoritam temelje se na gore opisanom postupku formiranja grozdova i koriste činjenicu da se tako formiranim grozdovima može mijenjati stanje spina nezavisno od konfiguracije spinova na ostatku rešetke. U jed-

nom koraku Swendsen-Wangova algoritma, veze se formiraju na svim bridovima¹ i na taj način se dobiva kompletan graf grozdova – svaki spin nakon formiranja grafova pripada nekom grozdu. Potom se stanja spinova svim grozdovima nezavisno mijenjaju i tako se dobiva nova spinska konfiguracija. Jedan korak Wolffovog algoritma bira nasumičan spin i oko njega formira grozd kojem se zatim nasumično mijenja stanje.

4.2 Algoritam invazivnog grozda -IC

Standardni nelokalni algoritmi simuliraju sustav pri danoj temperaturi T koja određuje vjerojatnost stavljanja veze p (1.17). Vrijednost p se koristi za konstruiranje grafa grozdova. Ako se želi proučavati pojavu faznog prijelaza, potrebno je odabrati p blizak kritičnoj točki $p_C = 1 - e^{-\beta cJ}$, čija lokacija ne mora biti poznata. Lociranje kritične točke numeričkom simulacijom zahtijeva dodatan numerički trud. Machta i ostali [13] htjeli su doskočiti problemu lociranja kritične točke dizajniranjem algoritma invazivnog grozda (IC) koji automatski simulira sustav na točki prijelaza.

Njihova ideja je koristiti svojstvo perkolacije FK grozda kao indikator faznog prijelaza i iskonstruirati konfiguracije koje imaju upravo to svojstvo, postupkom inspiriranim invazivnom perkolacijom [130]. Polazeći od bilo koje proizvoljne konfiguracije spinova, grozdovi na rešetki ne formiraju se *a priori* vjerojatnošću p , nego se veze dodaju prema pravilu:

- a) za svaki nasumično izabrani brid rešetke koji spaja dva spina u istom stanju, veza se dodaje s vjerojatnošću 1
- b) postupak se ponavlja dok se: i) ne postigne perkolacija ili ii) više nije moguće staviti niti jednu vezu
- c) svim formiranim grozdovima se nasumično mijenjaju stanja spina

Iteriranjem postupak a)-b)-c) ima tendenciju samoregulacije u kritičnu točku. Ako pretpostavimo da je početna konfiguracija spinova tipična za temperaturu višu od

¹"Bridovi" u uvriježenoj notaciji teorije grafova [129] predstavljaju spojnice između susjednih čvorova na bilo kakvom grafu i takav naziv se ovdje koristi.

kritične, na rešetci je prisutno manje zadovoljnih susjeda n_{ss} nego na kritičnoj temperaturi. Postupak dodavanja veza suočen je stoga s većim brojem "uskih grla" koja otežavaju postizanje perkolacije nego što bi bio slučaj na kritičnoj temperaturi. U postupku dodavanja veza stoga se tipično doda više veza nego što bi to bilo potrebno da je sustav bio na kritičnoj temperaturi. Kao rezultat toga, nakon nasumičnog mijenjanja spinova grozdova, n_{ss} može biti samo veći od početne vrijednosti. S druge strane, ako je početna konfiguracija tipična za temperaturu ispod kritične, n_{ss} će biti veći nego pri kritičnoj temperaturi. Stoga će biti moguće znatno lakše postići perkolaciju u postupku dodavanja veza i kao rezultat toga najveći grozd će biti znatno "razvedeniji". To u postupku nasumičnog mijenjanja spinskih stanja grozdova dovodi do konfiguracije spinova koja ima manji n_{ss} od početnog.

Korak b) gore navedenog postupka predstavlja primjer "pravila zaustavljanja" IC algoritma. Modifikacijom pravila zaustavljanja, IC algoritam može se primijeniti i na fazni prijelaz prvog reda. Tada se veze dodaju do trenutka kada neki grozd ne postigne konačnu masu u broju čvorova. Takvo pravilo je prikladnije zbog efekata histereze i metastabilnosti koji se pojavljuju pri prijelazu prvog reda. Nezavisno o pravilu zaustavljanja, IC algoritam određuje srednju vrijednost udjela zauzetih veza u ansamblu konfiguracija:

$$\bar{p} = \overline{\left(\frac{b}{n_{ss}}\right)}. \quad (4.6)$$

Ako se \bar{p} izjednači s *a priori* vjerojatnošću veze u nelokalnim algoritmima $p_C = 1 - e^{-\beta c J}$ IC simulacija bi se mogla smatrati MC simulacijom koja generira kritične konfiguracije. Iako se takvu tvrdnju ne može opravdati pokazalo se da IC algoritam u nekim slučajevima daje vrijednosti kritičnih eksponenta koje su bliske vrijednostima određenim drugim metodama. Što se tiče dinamičkih svojstava, utvrđeno je da algoritam ima $z \approx 0$ za sve promatrane slučajeve pa i one u kojima su vrijednosti $\frac{\alpha}{\nu}$ znatno veće od nule. Takav rezultat povreda je Li-Sokalove granice [125] i može se shvatiti kao indikacija da je nešto u postupku krivo. Sami autori IC algoritma proučavali su raspodjele observabli, za koje pokazuju neravnotežne fluktuacije tipične za sam algoritam [131]. Naše preliminarne studije IC algoritma pokazale su da algoritam daje sistematske greške u eksponentima [132], a drugi autori su pogreške pripisali "efektima konačnosti koje nije bilo moguće kontrolirati" [133].

4.3 Razlog neispravnosti IC algoritma

U sklopu izrade ovoga rada uspjeli smo razumjeti razlog zbog kojeg veličine računate IC algoritmom ne pokazuju ispravno skaliranje što nam je pomoglo u konstruiranju postupka koji je u stanju reproducirati ispravno skaliranje. Složenu statističku težinu (4.5) koja uključuje stupnjeve slobode spinova i veza za svaku danu konfiguraciju $\{\sigma\}$ može se napisati preko ukupnog broja veza u njoj $n_{ss}(\{\sigma\})$:

$$w(\{\sigma\}) = (1 - p)^{B - n_{ss}(\{\sigma\})} \sum_b \binom{n_{ss}(\{\sigma\})}{b} p^b (1 - p)^{n_{ss}(\{\sigma\}) - b} \quad (4.7)$$

Raspodjela $p_{\{\sigma\}}$ za svaku konfiguraciju $\{\sigma\}$ dana je binomnom raspodjelom čija širina se može pisati kao:

$$\text{var}(p_{\{\sigma\}})^{\frac{1}{2}} = \sqrt{p(1 - p)n_{ss}^{-\frac{1}{2}}}. \quad (4.8)$$

Broj zadovoljnih susjeda $n_{ss}(\{\sigma\})$ odgovara energiji konfiguracije. Gustoća energije usrednjena po termodinamičkom ansamblu ima konačan limes pa je stoga rezultirajuća širina raspodjele $p_{\{\sigma\}}$:

$$\text{var}(p_{\{\sigma\}})^{\frac{1}{2}}|_{RC} \propto L^{-\frac{d}{2}}. \quad (4.9)$$

IC postupak samoregulacije u kritičnu točku pri kojoj FK grozdovi perkoliraju koji je opisan u odjeljku 4.2 ima manu. Fluktuacije u $p_{\{\sigma\}}$ koje se tim postupkom generiraju određene su znatno širom raspodjelom $\propto L^{-b}$. Na primjeru Pottsovog modela u 2d autori [13] navode vrijednosti $b(q)$: $b(1) = 0.71 \pm 0.01$, $b(2) = 0.46 \pm 0.02$, $b(3) = 0.30 \pm 0.02$, $b(4) = 0.23 \pm 0.01$. Kao posljedica toga tipične konfiguracije u ansamblu koji generira IC algoritam pripadaju repovima binomne raspodjele (4.8) i ne karakteriziraju dobro kritično ponašanje. Generiranjem znatno šire raspodjele $p_{\{\sigma\}}$ od binomne prilikom formiranja grozdova, izraz za detaljnu ravnotežu (4.4) ne vrijedi. Ne može se smatrati da je proces formiranja grozdova vjerojatnosni proces opisan u odjeljku 4.1. To vodi na zaključak da pretjerane fluktuacije generiraju ansambl koji nije kanonski nego karakterističan za sam IC algoritam.

4.4 EIC restrikcija

Činjenica da je za IC algoritam $b < \frac{d}{2}$, može se prema svom efektu doslovno shvatiti kao efekt algoritmom nametnute fluktuacije temperature u sustavu. Iako varijabla $p_{\{\sigma\}}$ ne korespondira direktno temperaturi interpretacija se nameće jer fluktuacije te varijable izvan širine (4.9) *de facto* znače preveliku zastupljenost konfiguracija grafa koje su netipične za srednju temperaturu. Zbog toga uvodimo ograničenje u IC algoritam kojoj je svrha ograničiti fluktuacije u $p_{\{\sigma\}}$ na širinu manju ili jednaku od one koja je dozvoljena RC partijskom funkcijom.

Ograničenje u IC algoritam uvodimo pomoću dva dodatna parametra koje smo označili s v i N_a . Monte Carlo korake grupiramo u intervale od N_a koraka. U svakom intervalu postupak počinje postavljanjem veza s vjerojatnošću 1 između nasumičnih zadovoljnih susjeda s ciljem postizanja perkolacije, ali u odnosu na IC algoritam pravilo zaustavljanja je modificirano. Postavljamo da za svaki interval i prilikom formiranja grafa, broj pridijeljenih veza mora biti takav da se vrijednost $p_{\{\sigma\}}$ nalazi u intervalu:

$$\bar{p}_{i-1} - v \leq p_{\{\sigma\}} \leq \bar{p}_{i-1} + v. \quad (4.10)$$

Stoga, ako je FK grozd properkolirao za $p_{\{\sigma\}}$ manje od donje granice intervala, postupak stavljanja veza se nastavlja do trenutka kada se postigne donja granica $\bar{p}_{i-1} - v$. S druge strane, ako perkolacija nije postignuta niti uz broj postavljenih veza za koji je vrijednost $p_{\{\sigma\}}$ narasla do gornje granice intervala $\bar{p}_{i-1} + v$, postupak se prekida bez zahtijevanja da se perkolacija postigne. Kada se faza formiranja grafa završi stanja grozdova se nasumično mijenjaju i nova konfiguracija spinova služi za uspostavljanje grafa u slijedećem MC koraku. Nakon završetka intervala i srednja vrijednost \bar{p}_i postaje referentna vrijednost u izrazu (4.10), za interval vrijednosti koji $p_{\{\sigma\}}$ može poprimiti u $i + 1$ -vom intervalu.

Iako je ideja ograničavanja raspodjele $p_{\{\sigma\}}$ na širinu koju zahtjeva RC partijska funkcija jasna, tehnički detalji povezani uz odabir parametara v i N_a koji realiziraju takvu posljednicu nisu trivijalni. Heuristički argument rasvjetljava njihov izbor. Vrijednost N_a potrebno je izabrati dovoljno velikom da fluktuacije $p_{\{\sigma\}}$ unutar intervala i budu dominantne u odnosu na fluktuacije srednjih vrijednosti \bar{p}_i , drugim riječima vrijednost N_a mora biti veća od korelacijskog vremena, $N_a > t_c(L)$. Vrijednost v mora

zadovoljavati $v \leq \text{var}(p_{\{\sigma\}})^{\frac{1}{2}}|_{RC}$. Pokazuje se da odabir "sigurnijih" vrijednosti uvijek reproducira dobro kritično ponašanje dok popuštanje restrikcije na $v \propto L^{-b_{EIC}} > L^{-\frac{d}{2}}$ ili $N < t_c(l)$, vodi k prijelaznom režimu prema IC ansamblu. S druge strane promjena eksponenta širine b_{EIC} tako da $v \propto L^{-b_{EIC}} < L^{-\frac{d}{2}}$ ne mijenja termodinamičke kritične eksponente, ali mijenja dinamički kritični eksponent z . Detaljniju raspravu parametara ostavljamo za odjeljak 4.9 da bismo komentirali primjere rezultata koji demonstriraju njihovu razinu robusnosti.

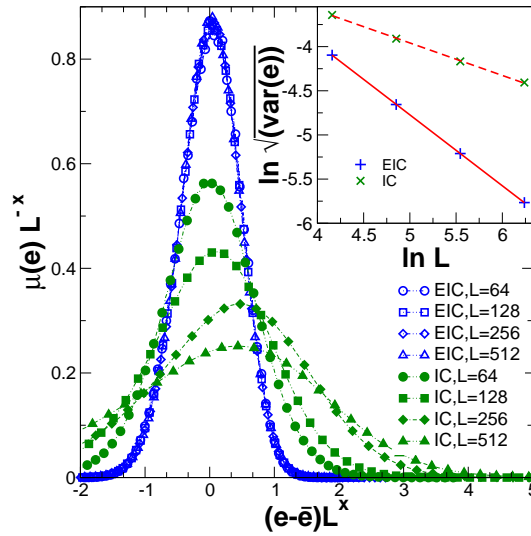
Rezultati koje ćemo izložiti pokazuju da postavljanje parametara ograničenja N_σ i v na način da rezultantna raspodjela $p_{\{\sigma\}}$ bude uža ili jednako uska kao pripadna RC raspodjela, u potpunosti uspostavlja uzorkovanje kanonskog ansambla oko kvazi-kritične točke konačnog sustava. Uz tu modifikaciju, pokazuje se da samoregulacijski mehanizam IC algoritma i dalje radi kako je prvotno zamišljen. S EIC algoritmom u mogućnosti smo simulirati sustav na kvazikritičnoj točki za bilo koju veličinu rešetke sustava bez prethodnog znanja o njenoj lokaciji. Prednost EIC algoritma u odnosu na IC algoritam je što zbog uspostavljanja uzorkovanja kanonskog ansambla vrijedi da srednja vrijednost vjerojatnosti FK veze $\overline{p_{\{\sigma\}}}|_{EIC}$ odgovara kritičnoj vjerojatnosti veze u FK partijskoj funkciji (1.17):

$$\overline{p_{\{\sigma\}}}|_{EIC} \equiv p = 1 - e^{-\frac{1}{k_B T_c}}. \quad (4.11)$$

4.5 Rezultati EIC algoritma za kritične eksponente

Ilustriramo rezultate EIC algoritma na dva primjera koji pokazuju fazni prijelaz drugog reda: $q = 3$ Pottsov model u 2d i Isingov model ($q = 2$ Potts) u 3d. Simulacije provodimo na kvadratnim rešetkama veličina od $L = 64$ do 1024 u 2d i $L = 16$ do 96 u 3d slučaju. Koristimo periodičke rubne uvjete radi izbjegavanja efekata površine. Broj iteracija u MC koracima varira od 15×10^6 za najmanje do 7×10^6 za najveće rešetke. Za uvjet perkolacije FK grozda uzimamo uvjet topološke perkolacije, to jest kada se grozd omota oko torusa koji je zadan periodičkim rubnim uvjetima. Za vrijednosti proizvoljnih parametara odabiremo $v = \frac{1}{10} \cdot L^{-\frac{d}{2}}$ i $N_\sigma = 100$.

Bez ulaženja u detaljne račune moguće je ilustrirati kako EIC algoritam uzorkuje kanonski ansambl za razliku od IC algoritma. Na slici 4.2 je pokazano reskaliranje



Slika 4.2: Raspodjele energije $\mu(e)$ za $q = 3$ Pottsov model u 2d reskalirane s egzaktnim eksponentom $x = 0.8$. Unutar slike prikazujemo i vrijednosti $\sqrt{\text{var}(e)}$ u ovisnosti o L na ln-ln grafu čiji nagibi predstavljaju eksponent $-x$. Dobiva se $x_{EIC} \approx 0.81$ i $x_{IC} \approx 0.37$.

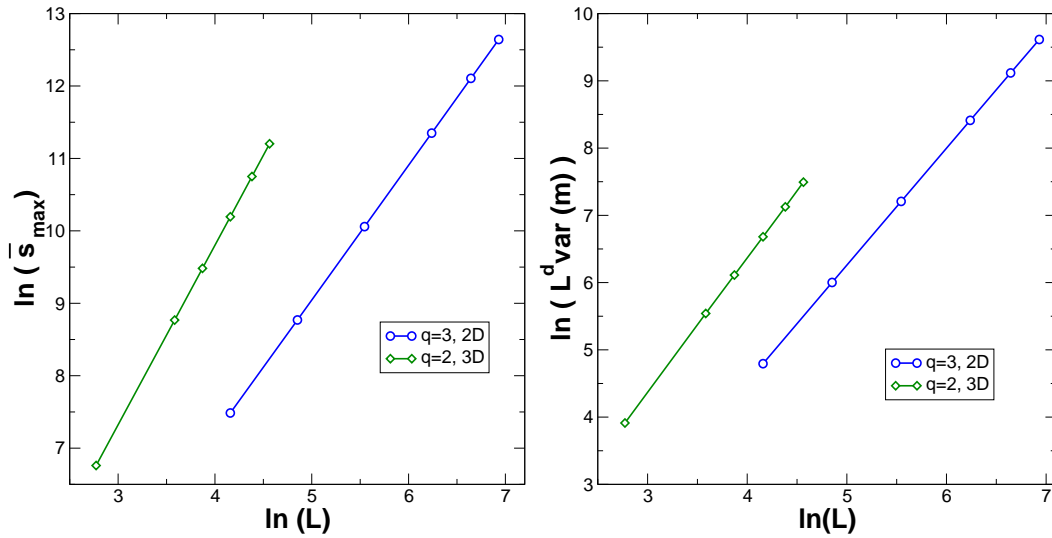
raspodjela energije $\mu(e)$ $q = 3$ Potts modela u 2d za EIC i IC algoritme. Raspodjele su reskalirane s egzaktnim eksponentom skaliranja $x = \frac{d}{2} - \frac{\alpha}{2\nu} = \frac{4}{5}$. Jasno se vidi da raspodjele izračunate EIC algoritmom imaju savršen kolaps, dok se one izračunate IC algoritmom reskaliraju drugačije. Unutar slike također prikazujemo širine raspodjela $\sqrt{\text{var}(e)}$ u ovisnosti o L na ln-ln grafu. Nagibi daju eksponente $x_{EIC} \approx 0.81$ i $x_{IC} \approx 0.37$.

4.5.1 Magentski kritični eksponent y_h

Magnetski kritični eksponent određujemo nezavisno iz tri različite observable promatrane u kritičnom području, srednje mase najvećeg FK grozda, parametra reda i susceptibilnosti.

Srednja masa najvećeg FK grozda \bar{s}_{max} je definirana kao broj čvorova koji pripada najvećem grozdu usrednjen preko termodinamičkog ansambla. Kritično skaliranje te veličine daje direktno eksponent y_h :

$$\bar{s}_{max}|_{p=p_c} = a_s \cdot L^{y_h} + b_s \cdot L^{y_h+\omega_1} + \dots \quad (4.12)$$



Slika 4.3: Slika lijevo: skaliranje mase najvećeg FK grozda \bar{s}_{max} ; slika desno: skaliranje fluktuacija parametra reda.

Ugađanje rezultata na četveroparametarski oblik (4.12) daje jako preciznu procjenu eksponenta y_h kao i njegove vodeće korekcije ω_1 (slika 4.3 lijevo). Rezultati za eksponente su: $y_h = 2.4815(5)$ s $\omega_1 = -2.2(1)$ i $y_h = 1.8661(7)$ s $\omega_1 = -1.1(1)$ za slučaj 3d Isinga, odnosno $q=3$ 2d Pottsja.

Kritično skaliranje parametra reda dano je izrazom:

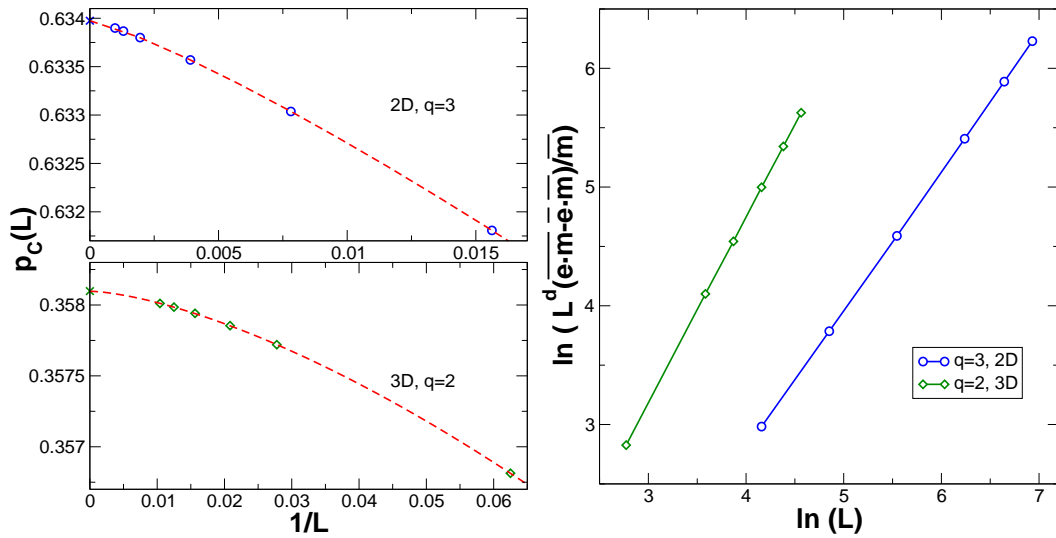
$$m|_{p=p_c} = a_m \cdot L^{-\beta/\nu} + b_m \cdot L^{-\beta/\nu + \omega_2} + \dots, \quad (4.13)$$

gdje je $\frac{\beta}{\nu} = d - y_h$. Parametar reda je izračunat je standardnom formulom za skalarni Pottsov parametar reda (1.15). Ugađanjem na četveroparametarski oblik (4.13) dobiva se eksponente: $\frac{\beta}{\nu} = 0.5180(2)$ s $\omega_1 = -1.9(1)$ i $\frac{\beta}{\nu} = 0.1345(5)$ s $\omega_1 = -2.2(1)$ za slučaj 3d Isinga, odnosno $q=3$ 2d Pottsja.

Fluktuacije parametra reda u ravnoteži su povezane sa susceptibilnosti izrazom:

$$\chi = \frac{L^d}{k_B T} \left[\overline{m^2} - \bar{m}^2 \right], \quad (4.14)$$

koji zahtjeva da vrijedi fluktuacijsko-disipacijski teorem, što nije zadovoljeno za IC algoritam. Na kvazikritičnoj točki susceptibilnost ima maksimum koji se skalira po-



Slika 4.4: Slika lijevo: konvergencija $p_c(L)$ u ovisnosti o $1/L$, crtkane linije predstavljaju troparametarske funkcije ugađanja, a križevi najbolje poznate ili egzaktno rezultate; slika desno: skaliranje logaritamske derivacije magnetizacije $\frac{\partial \ln m}{\partial \beta}$.

tencijski:

$$\chi|_{p=p_{cl}} \propto L^{\gamma/\nu}, \quad (4.15)$$

i koji je povezan s magnetskim eksponentom preko relacije $\frac{\gamma}{\nu} = 2y_h - d$. Rezultati linearne regresije na ln-ln skali (slika 4.3 desno) daju $\frac{\gamma}{\nu} = 1.98(1)$ i $\frac{\gamma}{\nu} = 1.74(1)$ za slučaj 3d Isinga, odnosno $q=3$ 2d Pottsja. Nalazimo rezultate za eksponent $\frac{\gamma}{\nu}$ manje preciznima nego za y_h ili $\frac{\beta}{\nu}$. Razlog tome može biti u pravilu zaustavljanja algoritma, koje locira perkolaciju najvećeg FK grozda. Izbor koji je direktno povezan s kritičnim ponašanjem parametra reda. U konačnom sustavu ta točka se ne mora poklapati s maksimumom susceptibilnosti.

4.5.2 Termalni kritični eksponent y_τ i kritična temperatura

Promatrali smo dvije veličine povezane uz termalni kritični eksponent $y_\tau = \frac{1}{\nu}$. Prva od njih je $p_c(L)$, povezana s kvazikritičnom temperaturom preko izraza (1.17). Vodeće kritično ponašanje očekujemo u obliku:

$$p_c(L) = p_c(L \rightarrow \infty) + a_p \cdot L^{-y_\tau} + \dots \quad (4.16)$$

Iznos te veličine se dobiva termodinamičkim prosjekom po $p_{\{\sigma\}}$. Troparametarskim ugađanjem podataka na funkcijsku ovisnost (4.16) dobivaju se jako precizne procjene $p_c(L \rightarrow \infty)$ (slika 4.4 lijevo): 0.358097(1) za 3d Ising i 0.633975(1) za 2d $q = 3$ Pottsov slučaj.

Procjena eksponenta y_τ ovom procedurom, za red veličine je manje precizna od skaliranja logaritamske derivacije magnetizacije čije skaliranje je opisano izrazom:

$$\frac{\partial \ln m}{\partial \beta} = L^d \cdot \frac{\overline{em} - \bar{e} \cdot \bar{m}}{\bar{m}} \propto a_{em} \cdot L^{y_\tau} + b_{em} \cdot L^{y_\tau + \omega_3} + \dots \quad (4.17)$$

Jednakost u izrazu (4.17) implicira uzorkovanje kanonskog ansambla, što smatramo da je zadovoljeno za EIC proceduru. To potvrđuju i vrijednosti za y_τ su u izvrsnom slaganju s egzaktnim ili najboljim aproksimativnim rezultatima. Četveroparametarsko ugađanje na izraz na desnoj strani (4.17) daje eksponente: $y_\tau = 1.586(5)$ uz $\omega_3 = -2.0(2)$ i $y_\tau = 1.201(8)$ uz $\omega_3 = -1.0(3)$ za 3d Ising odnosno 2d $q = 3$ Potts.

4.5.3 Sažetak kritičnih eksponenata i korekcija skaliranja

Tablica 4.1: Relevantni kritični eksponenti dobiveni EIC algoritmom (na rešetkama od $L = 64$ do 1024 za $q = 3$ 2d i od $L = 16$ do 96 za 3d slučajeve) uspoređeni s najboljim poznatim ili egzaktnim rezultatima.

	$q = 2, 3D$		$q = 3, 2D$	
	EIC	najbolji [19, 134]	EIC	egzaktni
$p_c(L \rightarrow \infty)$	0.358097(1)	0.358098(3)	0.633975(1)	0.6339745...
y_τ	1.586(5)	1.587(6)	1.201(8)	$\frac{6}{5}$
y_h	2.4815(5)	2.4818(6)	1.8661(7)	1.86
β/ν	0.5180(4)	0.5182(6)	0.134(1)	0.13
γ/ν	1.98(1)	1.964(1)	1.74(1)	1.73

Vrijeme koje je potrebno za MC korak EIC algoritmom otprilike je jednako kao za MC korak IC algoritma, što je za 10-ak % više nego što je potrebno SW algoritmu. Za primjer generiranje 10^5 MCS za $L = 96$ rešetku 3d Isingovog modela potrebno je oko 24h na Intel Xeon E5405 (2.0GHz) procesoru.

Tablica 4.2: Korekcije skaliranja dobivene EIC algoritmom. U zagradama su navedene observable iz kojih su dobivene.

	$q = 2, 3D$	$q = 3, 2D$
$\omega_1, (\bar{\xi}_{max})$	-2.2(1)	-1.1(1)
$\omega_2, (m)$	-1.9(1)	-2.2(1)
$\omega_3, (\frac{\partial \ln m}{\partial \beta})$	-2.0(2)	-1.0(3)
y_i	-0.84(4)[19]	$-\frac{4}{5}$

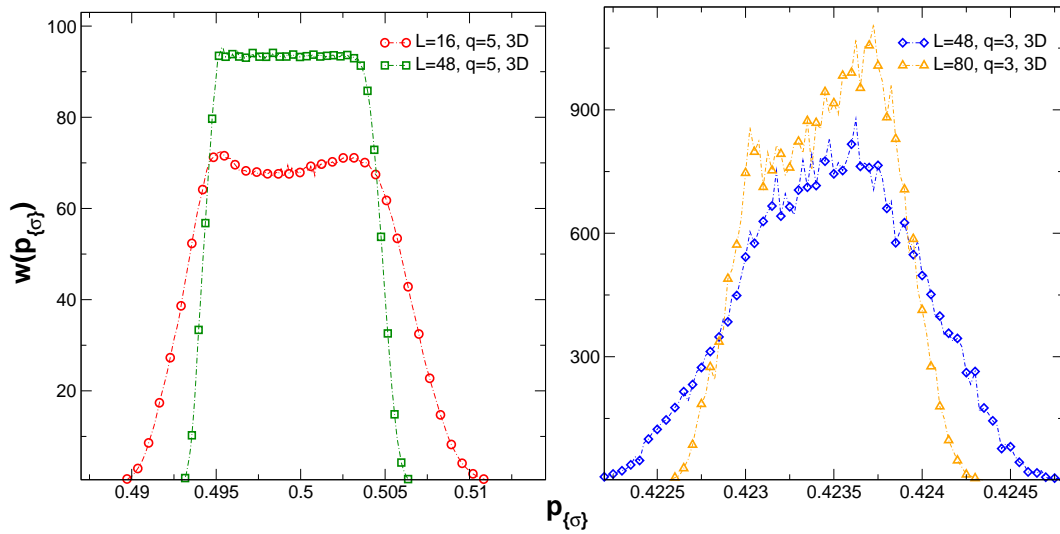
Kritične eksponente i pripadne korekcije skaliranja sumiramo u tablicama 4.1 i 4.2. Zbog iznimnog svojstva samoregulacije u kvazikritičnu točku, numerički trud nije potreban za lociranje točke prijelaza. Stoga smo uz znatno manji napor nego što bi bilo potrebno sa SW algoritmom, u stanju dobiti kritične eksponente na razini najboljih poznatih numeričkih procjena bez znanja lokacije točke prijelaza.

U studiji smo uključili i diskusiju vodećih korekcija skaliranju. Za $q = 3$ 2d Pottsov model vodeći irelevantni eksponent je egzaktno $y_i = -\frac{4}{5}$, a za 3d Ising vrijednost se procjenjuje na $y_i = -0.84(4)$ [134]. Vrijednosti korekcija skaliranju koje smo odredili znatno se razlikuju od onih određenih u literaturi i nameće se zaključak da ovise o metodi. Naše vrijednosti eksponenata su znatno manje i vode na brže opadanje korekcija s L - ta činjenica koristi u određivanju relevantnih kritičnih eksponenata.

4.6 Detekcija prijelaza prvog reda

Primjer Pottsovog modela dozvoljava primjenu algoritma i na slučaj faznog prijelaza prvog reda. U ovoj studiji, nije nam cilj proučavati takav prijelaz nego demonstrirati da postoji jasna indikacija u rezultatima EIC algoritma kada je fazni prijelaz prvog reda. Pomnije proučavanje takvog prijelaza EIC algoritmom zahtijevalo bi primjenu pravila zaustavljanja koje se bazira na masi najvećeg grozda koje se vrlo lako može implementirati.

Pokažimo ipak, kako se fazni prijelaz prvog reda očituje kada se koristi pravilo zaustavljanja bazirano na topološkoj perkolaciji, inače prikladnije za proučavanje kontinuiranog faznog prijelaza. Prijelaz prvog reda karakteriziran je konačnom širinom histereze. Zbog toga je moguće konstruirati perkolirajući grozd za bilo koju vrijednost $p_{\{\sigma\}}$ unutar širine histereze. To rezultira u raspodjeli $\mu(p_{\{\sigma\}})$ koja pokazuje plato u području histereze. Širina teži u konstantu u limesu $L \rightarrow \infty$ za razliku od kontinuiranog



Slika 4.5: Raspodjele $\mu(p_{\{\sigma\}})$ dobivene EIC algoritmom za 3d Pottsov model za slučajeve jakog ($q = 5$) i slabog ($q = 3$) prijelaza prvog reda.

faznog prijelaza kada trne s $L^{-\frac{d}{2}}$.

Takav ishod ilustriramo na slici 4.5. Prikazana su dva primjera faznog prijelaza prvog reda u Pottsovom modelu u 3d. Za $q = 5$ prijelaz prvog reda je snažan i vidi se da je termodinamički limes širine histereze dostignut već za relativno skromne veličine sustava. S druge strane za $q = 3$ prijelaz prvog reda je jako slab zbog čega dugo nije bilo jasno je li drugog ili prvog reda. EIC simulacija nudi jasan odgovor na to pitanje. Iz slike 4.5 jasno se vidi da širina raspodjele $\mu(p_{\{\sigma\}})$ ne teži u nulu s $L^{-\frac{d}{2}}$ nego konvergira k ponašanju koje je kvalitativno nalik ponašanju za $q = 5$ iako je histereza otprilike za red veličine uža.

4.7 EIC vremenske korelacijske funkcije

Dinamiku uvedenu u simulaciju EIC restrikcijom proučavamo promatranjem vremenske autokorelacijske funkcije za observablu O :

$$\Gamma_o(t) = \frac{\overline{O(t)O(0)} - \bar{O}^2}{\overline{O^2} - \bar{O}^2}. \quad (4.18)$$

Srednja vrijednost se uzima preko ansambla generiranog u neprekinutoj simulaciji, nakon što se sustav termalizirao:

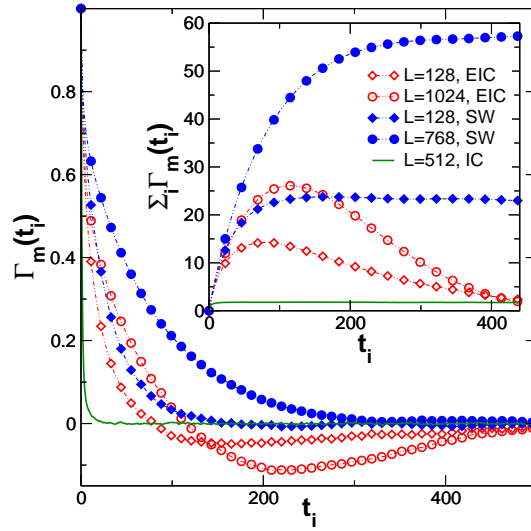
$$\overline{O(t')O(0)} = \frac{1}{t_{max} - t'} \sum_{t=1}^{t_{max}-t'} O(t)O(t + t'), \quad (4.19)$$

$$\overline{O^n} = \frac{1}{t_{max}} \sum_{t=1}^{t_{max}} O(t)^n, \quad (4.20)$$

gdje t i t' označavaju "vrijeme" simulacije u diskretnim cjelobrojnim jedinicama koje odgovaraju MC koraku. S t_{max} označavamo broj koraka u neprekinutoj simulaciji. Izraz (4.19) podrazumijeva translacijsku invarijantnost u vremenu i dobro definiranu temperaturu (ili p). EIC procedura stvara devijacije od tih svojstava, ali budući da su one unutar granica potrebnih za očuvanje ravnotežnog ansambla, smatramo da je opravdano je promatrati ovaj proces kao ravnotežan.

U standardnim MC pristupima vremenske korelacijske funkcije pokazuju tri režima [135]. Za kratka vremena ponašaju se kao suma eksponencijalno opadajućih funkcija. Nakon prvotnog režima nastupa dominantni režim gdje funkcija poprimi jedinstveno eksponencijalno trnjenje $\Gamma_O(t) \propto e^{-\frac{t}{t_c}}$, s karakterističnim vremenom korelacije t_c . Za $t \gg t_c$ korelacije iščezavaju i statistički šum dominira. Zanimaju nas isključivo korelacije u području zaokruživanja konačnog sustava.

Na slici 4.6 prikazujemo usporedbu korelacijske funkcije izračunate EIC algoritmom s kvazikritičnim korelacijskim funkcijama izračunatim SW i IC algoritmima. Dobivamo da $\Gamma_m(t)$ i $\Gamma_e(t)$ korelacijske funkcije imaju kvalitativno jednako ponašanje. U IC slučaju korelacijska funkcija opada unutar prvih desetak MCS nezavisno o veličini sustava. Pretjerane fluktuacije $p_{\{\sigma\}}$ snažno dekoreliraju sustav, ali cijena za to je neravnotežni ansambl. EIC korelacije za $t \ll \frac{N_a}{2}$ opadaju slično SW korelacijama. U EIC algoritmu pad korelacija je usporen u odnosu na IC slučaj, zahtjevom da vrijednosti $p_{\{\sigma\}}$ tijekom N_a i -tog intervala MC koraka ostanu u uskom intervalu od $2v$ oko \bar{p}_{i-1} . Korelacijska funkcija EIC algoritma poprima negativne vrijednosti, što je povezano s naglom promjenom u srednjoj vrijednosti \bar{p}_i nakon svakih N_a koraka koja je dio postupka samoregulacije. Negativne vrijednosti su odraz tendencije "prebacivanja" kritične točke koja je prisutna u EIC pristupu, iako je ona u granicama koje su



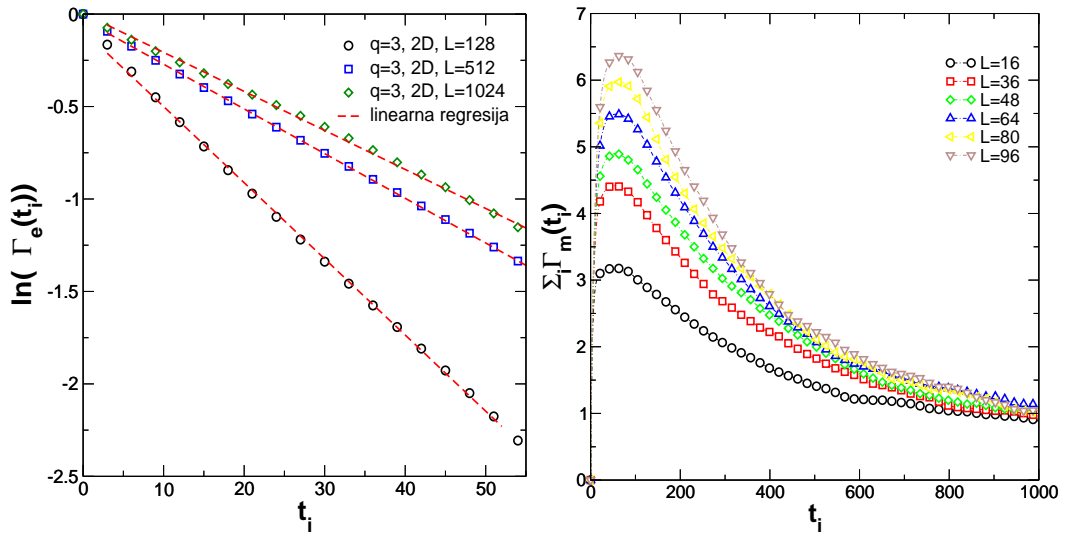
Slika 4.6: Magnetske korelacijske funkcije $\Gamma_m(t)$ na kvazikritičnoj točki za EIC, SW i IC algoritme na primjeru $2d$, $q = 3$ Pottsovog modela. Parametri EIC algoritma su $\nu = \frac{1}{10}L^{-\frac{d}{2}}$ i $N_a = 100$. Unutar slike prikazani su integrali onih korelacijskih funkcija koje pokazujemo na glavnoj slici.

dozvoljene da bi ansambl konfiguracija ostao kanonski. Srednja vrijednost observable \bar{O}_i u jednom intervalu od N_a MC koraka općenito se razlikuje od srednje vrijednosti po ansamblu observable \bar{O} . Zbog tendencije prebacivanja vrijednosti $(O(t) - \bar{O})$ i $(O(t+t') - \bar{O})$ kada t i $t+t'$ pripadaju susjednim intervalima i i $i+1$, imaju u prosjeku suprotne predznake. Tu pojavu nazivamo "antikorelacije".

4.8 Karakteristično vrijeme korelacija EIC algoritma

U standardnim MC simulacijama određivanje karakterističnog vremena opadanja korelacija je relativno jednostavno jer se dominantni oblik vremenske korelacijske funkcije svodi na eksponencijalno trnjenje. Oblik EIC vremenske korelacijske funkcije nije toliko jednostavan pa zato predlažemo dva načina određivanja karakterističnog vremena. Zbog činjenice da EIC algoritam samoregulira u kritičnu točku vrijednosti karakterističnog vremena $t_c \equiv \theta$ odnose se na kritično područje i daju informaciju o dinamičkom eksponentu z :

$$\theta \propto L^z. \quad (4.21)$$



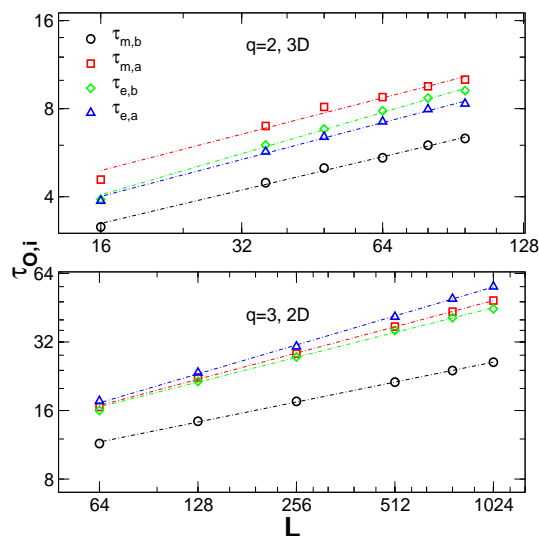
Slika 4.7: Slika lijevo: energijske vremenske korelacijske funkcije $\Gamma_e(t)$ za $q = 3$ 2d Pottsov slučaj u eksponencijalnom području. Crtkane linije predstavljaju najbolje ugođene pravce čiji nagibi označavaju $-\frac{1}{\theta_{e,a}}$; slika desno: integrali magnetizacijske korelacijske funkcije $I_m(t) = \sum_{t'=0}^t \Gamma_m(t')$ za 3d Isingov model.

Prvi način određivanja karakterističnog vremena je promatrati trnjenje vremenske korelacijske funkcije prije nego što uđe u režim antikorelacija. Pokazuje se da ponašanje zaista je dominantno eksponencijalno (slika 4.7 lijevo), što dopušta određivanje vremena koje nazivamo $\theta_{O,a}$.

Postoji dobar razlog za sumnju u informativnost vremena $\theta_{O,a}$. Ono po definiciji uključuje samo informaciju o vremenima koja su manja od vremena u kojemu se dogodi samoregulatorna promjena \bar{p}_i . Zbog toga želimo definirati karakteristično vrijeme koje će nositi informaciju i o vremenima koja su veća od intervala samoregulacije N_a i usporediti ga s vremenom $\theta_{O,a}$. Ako samoregulatorni mehanizam ne radi bitne perturbacije, ta dva vremena trebala bi se skalirati jednako. Promotrimo parcijalnu sumu vremenske korelacijske funkcije:

$$I_O(t) = \sum_{t'=0}^t \Gamma_O(t'). \quad (4.22)$$

Na slici 4.7 desno prikazano je tipično ponašanje te parcijalne sume. Ona raste do trenutka kada nastupe antikorelacije, tada postigne maksimum. Nakon toga opada i za $t \rightarrow \infty$ teži u neku konačnu vrijednost. Maksimumi parcijalne sume mogu se



Slika 4.8: Karakteristična vremena energijskih $\Gamma_e(t)$ i magnetskih $\Gamma_m(t)$ vremenskih korelacijskih funkcija određena s dva pristupa opisana u tekstu.

smatrati karakterističnim vremenom:

$$\theta_{O,b} = I_O^{max}(t). \quad (4.23)$$

Ako se promotri režim $\theta \ll \frac{N_a}{2}$ postaje jasan razlog opravdanosti takve tvrdnje. U toj granici, eksponencijalno trnjenje prestane znatno prije no što korelacijska funkcija doživi perturbaciju zbog samoregulacije. Zbog toga je maksimum ekvivalentan s integriranim autokorelacijskim vremenom. Nakon perturbacije sustav reagira relaksacijom, ali korelacije su negativne. Stoga se integral (4.22) za $t' > \frac{N_a}{2}$ može smatrati vremenom trnjenja vremenske korelacijske funkcije zbog samoregulacije, jedina razlika je da se zbog negativne vrijednosti autokorelacijske funkcije taj doprinos oduzima od prvotnog eksponencijalnog.

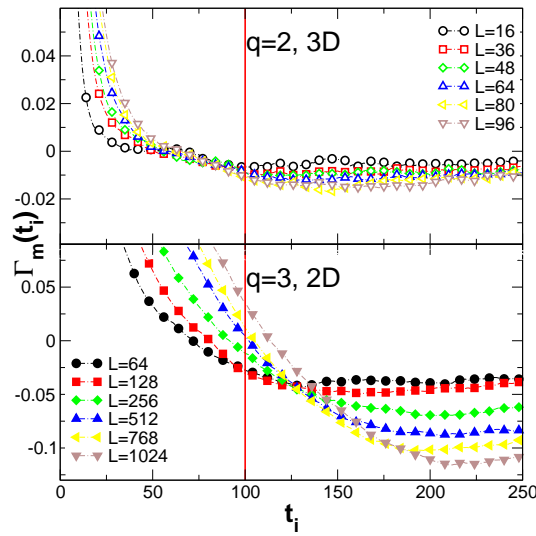
Na slici 4.8 prikazana su karakteristična vremena $\theta_{O,a}$ i $\theta_{O,b}$, a u tablici 4.3 sumirani su dinamički eksponenti određeni iz karakterističnih vremena. Iz te tablice može se vidjeti da se za 3d slučaj dinamički eksponenti podudaraju gotovo do na margine pogrešaka. U 2d slučaju postoje određene diskrepancije koje se mogu pripisati pre-maloj vrijednosti parametra N_a . Ispostavlja se da su korelacijska vremena za 2d slučaj nekoliko puta veća (slika 4.9) nego za 3d slučaj iako je parametar N_a EIC algoritma

Tablica 4.3: Dinamički eksponenti EIC algoritma s parametrima $N_a = 100$ i $\nu = \frac{1}{10}L^{-\frac{d}{2}}$.

	$q = 2, 3D$	$q = 3, 2D$
EIC: $z_{m,a}$	0.41(5)	0.38(2)
EIC: $z_{m,b}$	0.38(3)	0.29(2)
EIC: $z_{e,a}$	0.42(3)	0.42(2)
EIC: $z_{e,b}$	0.47(3)	0.36(2)
SW z^1	0.46(3)	0.49(1)
α/ν	$0.172(1)^2$	$2/5$

¹ rezultati iz: [136],[137]

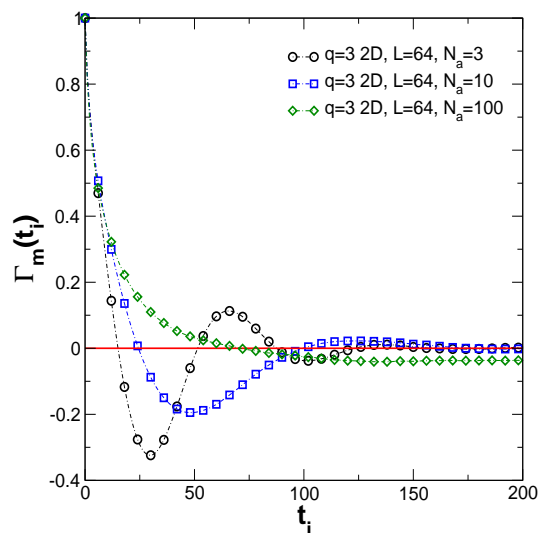
² najbolje vrijednosti [19].



Slika 4.9: ponašanje vremenskih korelacijskih funkcija magnetizacije za t oko $N_a = 100$ (crvena okomita linija) za slučaj Isingovog modela u 3d i $q = 3$ Pottsovog modela u 2d.

postavljen isti. Na slici 4.9 se vidi da je izbor $N_a = 100$ dovoljno velik da bi se ispunio uvjet $\theta < \frac{N_a}{2}$ i stoga dozvoljava iščezavanje korelacije prije nego što nastupi režim antikorelacija. Za 2d slučaj to očito nije zadovoljeno, što se najbolje vidi za veće rešetke. Stoga zaključujemo da samoregulacijski mehanizam u tom slučaju počinje utjecati na karakteristično vrijeme θ .

Rezultati za korelacijska vremena mogu se dovesti u vezu s radom Lija i Sokala [125], u kojemu je određena donja granica dinamičkog eksponenta z u numeričkim simulacijama kritičnih sustava. Donju granicu autori dovode u vezu s toplinskim kapacitetom što daje nejednakost:



Slika 4.10: ponašanje vremenskih korelacijskih funkcija magnetizacije za nekoliko vrijednosti N_a pri $v = \frac{1}{10}L^{-\frac{d}{2}}$.

$$z \geq \alpha/v. \quad (4.24)$$

U oba navedena slučaja, EIC dinamički eksponent je usporediv iako manji od vrijednosti za SW algoritam. Diskrepancija u dinamičkim eksponentima za 2d može se shvatiti kao prekursor prijelaznog režima u IC ponašanje. Ispostavlja se da mala vrijednost N_a samo povećava šum u rezultatima u ovom slučaju iako rezultati za kritične eksponente ostaju vrlo precizni (tablica 4.1).

4.9 Slobodni parametri EIC algoritma

4.9.1 Parametar N_a

Ako vrijednost θ , koja nije *a priori* poznata postane usporediva s N_a može se dogoditi da se sustav ne relaksira u jednom intervalu od N_a koraka i tada se može korelirati više sukcesivnih intervala. Na primjeru $q = 3$ Pottsovog modela u 2d demonstriramo taj efekt. Za parametar v biramo vrijednost $\frac{1}{10} \cdot L^{-\frac{d}{2}}$, a vrijednost N_a variramo u "nedopušteno" područje malih vrijednosti. Izračunate korelacijske funkcije

su prikazane na slici 4.10. Koreliranje sukcesivnih intervala želimo izbjeći jer je ono kontrolirano IC nestabilnošću na fluktuacije $p_{\{\sigma\}}$. U tom slučaju događa se da unatoč postavljenoj restrikciji ν rezultatna širina $\sqrt{\text{var}(p_{\{\sigma\}})} > L^{-\frac{d}{2}}$ u ansamblu generiranih konfiguracija.

4.9.2 Parametar ν

Utjecaj mijenjanja parametra ν na karakteristično vrijeme korelacija θ ilustriramo na dva primjera za $q = 3$ 2d Potts model. U prvom primjeru zadržavamo širinu $\nu \propto L^{-\frac{d}{2}}$, a konstantu $\tilde{\nu}$ povećavamo izvan vrijednosti kompatibilnom sa širinom u RC ansamblu. U drugom primjeru stavljamo $\nu \propto L^{-1.5} < L^{-\frac{d}{2}}$, što je u eksponentu uže od zahtjeva RC particijske funkcije.

Za računanje korelacijskih funkcija koristimo rešetke veličina $L = 64$ do 640 i statistiku od 10^6 MC koraka za svaki L . Stavljamo $N_a = 250$ kako bismo izbjegli utjecaj tog parametra na neravnotežne efekte. Za $q = 3$ 2d, može se iz kritičnih vrijednosti gustoće energije i p_C dobiti ekvivalentna vrijednost širine: $\nu_{RC} \approx 0.19L^{-1}$. Vrijednosti parametra ν za koje računamo korelacijske funkcije su: a) $\nu = \frac{1}{3}L^{-1}$; b) $\nu = \frac{1}{10}L^{-1}$ i c) $\nu = 1 \cdot L^{-1.5}$. Pripadni dinamički eksponenti su prikazani u tablici 4.4

Tablica 4.4: Dinamički eksponenti za 2d, $q = 3$ Potts u ovisnosti o ν pri $N_a = 250$.

	$\nu = \frac{1}{3} \cdot L^{-1}$	$\nu = \frac{1}{10} \cdot L^{-1}$	$\nu = 1 \cdot L^{-1.5}$
EIC: $z_{m,a}$	-	0.39(3)	0.56(2)
EIC: $z_{m,b}$	0.20(3)	0.34(4)	0.53(2)
EIC: $z_{e,a}$	-	0.41(3)	0.52(2)
EIC: $z_{e,b}$	0.33(4)	0.38(4)	0.54(2)

Slučaj b) razlikuje se od parametara kojima su računati kritični eksponenti samo u vrijednosti N_a . Povećavanjem N_a sa 100 na 250 eksponent $z_{O,a}$ približava Li-Sokalovoj granici dok se u isto vrijeme smanjuje diskrepancija između $z_{O,a}$ i $z_{O,b}$ eksponenata. To potvrđuje prijašnju diskusiju u odjeljku 4.7 i očekivanje da povećanje N_a zaista popravljiva neravnotežne efekte.

U slučaju a) širina ν ima ispravno skaliranje, ali konstantni faktor $\tilde{\nu}$ je izvan granica RC raspodjele. Unatoč ispravnom skaliranju širine ν primjećuje se prijelazak u IC režim. Režim vremenskih korelacijskih funkcija gdje dominira trnjenje po jedinstvenom eksponencijalnom zakonu se drastično sužava pa se stoga vremena $\theta_{O,a}$ ne mogu

definirati. Da je sustav u neravnotežnom režimu vidi se preko skaliranja vremena $\theta_{O,b}$, čiji eksponent $z_{O,b}$ je izvan Li-Sokalove granice [125].

Kao kontrast, slučaj c) pokazuje znatno šire područje u kojemu vremenske korelacijske funkcije pokazuju trnjenje s jedinstvenom eksponencijalnom funkcijom nego za izbor $\nu = \frac{1}{10}L^{-1}$. To dozvoljava znatno preciznije određivanje karakterističnih vremena i dinamičkih eksponenata. Rezultati u tablici 4.4 pokazuju da su vrijednosti svih dinamičkih eksponenata unutar statističkih nepouzdanosti. Dodatna interesantna posljedica sužavanja eksponenta parametra širine ν jest povećanje dinamičkog eksponenta bez utjecaja na kritične eksponente. Tako se pokazuje da je u EIC algoritmu moguće kontinuirano mijenjati dinamički eksponent što je samo za sebe vrijedno proučavanja.

4.10 *A posteriori* kriterij ravnotežnosti EIC simulacije

Biranje parametara EIC algoritma sadrži dozu proizvoljnosti. Pitanje širine ν je relativno jasno, ali zbog povećanja karakterističnog vremena na kvazikritičnoj točki s povećanjem rešetke odabir prikladne vrijednosti N_a postaje problematičan. Smatramo da je najbolji pristup tom problemu procijeniti korelacijsko vrijeme θ_{max} za najveći sustav koji se želi proučavati. Odrediti N_a tako da $N_a \geq 2\theta_{max}$ i koristiti takav N_a za sve manje rešetke. Svaki elaboriraniji scenarij koji bi uključivao mijenjanje N_a s L (nakon što je određena referentna vrijednost za najveći sustav) može potencijalno uvesti dodatne utjecaje u sustav, uključuje pogađanje funkcije $N_a(L)$, a dobitak u računanju je zanemariv zbog toga što je najviše vremena uvijek potrebno za simulacije najvećih sustava.

Bez obzira na gore izloženi "sigurni" način biranja parametara, moguće je *a posteriori* provjeriti je li simulacija bila ravnotežna, nezavisno o izabranim parametrima. Tvrdimo da EIC algoritam generira ravnotežne konfiguracije uvijek kada je zadavanjem parametara postignut uvjet:

$$\sqrt{\text{var}(p_{\{\sigma\}})|_{EIC}} \leq \sqrt{\text{var}(p_{\{\sigma\}})|_{RC}}. \quad (4.25)$$

Razmatramo mogućnost koja je izložena u prethodnom paragrafu, da raspodjela $p_{\{\sigma\}}$ bude u eksponentu uža od $L^{-\frac{d}{2}}$ bez utjecaja na kritične eksponente. Postavljanje

$v \propto L^{-b_{EIC}}$ gdje je $b_{EIC} > \frac{d}{2}$ uz izabiranje prikladnog N_σ ima za rezultat ograničavanje širine raspodjele $p_{\{\sigma\}}$ pri konstrukciji grafova, na širinu užu od pripadne RC širine.

Prva opservacija jest da su vrijednosti $p_{\{\sigma\}}$ koje su generirane s proizvoljno uskom raspodjelom $b_{EIC} > \frac{d}{2}$, tipične za kritične konfiguracije u kanonskom ansamblu za svaku veličinu rešetke L . Koliko god da je raspodjela uska, njena srednja vrijednost je određena upravo pravilom zaustavljanja koje traži prag perkolacije FK grozda. Kao rezultat, u granici $L \rightarrow \infty$ uvijek se generira 50% konfiguracija u kojima najveći FK grozd perkolira, a u ostatku konfiguracija ne perkolira. Skaliranje raspodjele mora biti strogo uže od binomne raspodjele ($b_{EIC} > \frac{d}{2}$), jer je tada skup generiranih $p_{\{\sigma\}}$ uvijek podskup tipičnih vrijednosti koje se javljaju u binomnoj raspodjeli. Suprotno vrijedi ako je $b_{EIC} < \frac{d}{2}$ jer se generiraju netipične konfiguracije koje ulaze u prosjek. Prosjek je tada nekanonski i javlja se prijelazni režim u IC ponašanje.

Može se smatrati da EIC algoritam za generiranje kritičnih FK grozdova koristi vrijednosti $p_{\{\sigma\}}$ iz uskog prozora širine $\epsilon(L)$ oko sredine binomne FK složene mjere (4.5). Tvrdimo stoga da se nasumičnim mijenjanjem mogu generirati sve konfiguracije sustava karakteristične za kritičnu točku s pripadnim Boltzmannovim težinama.

Korak SW algoritma koji prevodi spinsku konfiguraciju $\{\sigma\}_A \equiv A$ u spinsku konfiguraciju $\{\sigma\}_B \equiv B$ putem nasumično izabrane konfiguracije veza $\{b\}_A \equiv \tilde{A}$ možemo zapisati preko operatora:

$$\mathcal{G}(A \rightarrow B) = \omega(A \rightarrow (A, \tilde{A})) \times G((A, \tilde{A}) \rightarrow (B, \tilde{A})) \times \mathcal{P}((B, \tilde{A}) \rightarrow B). \quad (4.26)$$

S ω označavamo nasumični korak stvaranja grafova, s G nasumično mijenjanje stanja svih grozdova, a s \mathcal{P} projekciju iz produktnog prostora spinova i veza na prostor spinova.

Uvodimo modifikaciju SW algoritma koja je ekvivalentna EIC algoritmu kada je $p \equiv p_C(L)$:

- a) Polazeći od konfiguracije spinova $\{\sigma\}_A$ formiraju se grafovi stavljanjem veza s vjerojatnošću p
- b) Ako je broj veza $b \in [p \cdot n_{ss}(\{\sigma\}) - \epsilon(L), p \cdot n_{ss}(\{\sigma\}) + \epsilon(L)] \rightarrow$ nasumično mijenjanje stanja grozdova $\rightarrow \{\sigma\}_B$

- c) Ako je broj veza $b \notin [p \cdot n_{ss}(\{\sigma\}) - \epsilon(L), p \cdot n_{ss}(\{\sigma\}) + \epsilon(L)] \rightarrow$ brisanje svih veza, \rightarrow a)

Dodatno pravilo stvara filtriranje u vjerojatnosti prijelaska iz spinske konfiguracije $\{\sigma\}_A$ u $\{\sigma\}_B$. Efekt filtriranja \mathcal{F} može se zapisati uz pomoć izraza (4.26):

$$\mathcal{G}'(A \rightarrow B) = \omega(A \rightarrow (A, \tilde{A})) \times \mathcal{F}(A, \tilde{A}) \times G((A, \tilde{A}) \rightarrow (B, \tilde{A})) \times \mathcal{P}((B, \tilde{A}) \rightarrow B). \quad (4.27)$$

Ali filtriranje ograničava samo omjer broja veza i broja zadovoljnih susjeda pa je plauzibilno da će ovakav algoritam biti u stanju obići konfiguracije svih mogućih stanja energije. Zbog toga je također plauzibilno pretpostaviti specijalno da će biti moguće konstruirati proces koji se vraća u isto stanje spina:

$$\mathcal{G}'(A \rightarrow B \rightarrow C \cdots X \rightarrow A) \equiv \mathcal{G}'(A \rightarrow B) \times \mathcal{G}'(B \rightarrow C) \times \cdots \times \mathcal{G}'(X \rightarrow A). \quad (4.28)$$

Vjerojatnost prijelaska \mathcal{G}' se razlikuje od originalne SW vjerojatnosti \mathcal{G} samo po filtriranju \mathcal{F} . Jasno je da je prijelazna vjerojatnost \mathcal{G}' ili identična SW vjerojatnosti ili je 0. Za SW vjerojatnost vrijedi Kolmogorovljev kriterij [138] koji govori da je prijelazna vjerojatnost jednaka i za suprotan proces:

$$\mathcal{G}(A \rightarrow B \cdots X \rightarrow A) = \mathcal{G}(A \rightarrow X \cdots B \rightarrow A). \quad (4.29)$$

To implicira da jednakost također vrijedi za modificirane vjerojatnosti \mathcal{G}' . Korištenjem (4.27), može se provjeriti da u izraz, u obrnutom smjeru $\mathcal{G}'(A \rightarrow X \cdots B \rightarrow A)$ ulaze filtri \mathcal{F} između jednakih stanja u produktnom prostoru kao i u prvotnom smjeru pa stoga slijedi:

$$\mathcal{G}'(A \rightarrow B \cdots X \rightarrow A) = \mathcal{G}'(A \rightarrow X \cdots B \rightarrow A). \quad (4.30)$$

Nudimo argument koji demonstrira Kolmogorovljev kriterij za modificirani SW algoritam koji je istovjetan EIC algoritmu za rezultatnu raspodjelu $p_{\{\sigma\}}$ s proizvoljnim

$b_{EIC} > \frac{d}{2}$. Iz Kolmogorovljevog kriterija slijedi detaljna ravnoteža, zbog čega smatramo da EIC algoritam pod uvjetom (4.25) generira ravnotežne konfiguracije.

Pitanje koje se nameće jest kada vjerojatnost procesa (4.30) nije 0? Skup svih procesa u modificiranom algoritmu koji mogu dovesti iz početnog stanja spina A u završno Z , je podskup svih procesa koji to mogu u originalnom SW algoritmu. Tvrdimo bez dokaza da taj skup nije prazan. Takav zaključak je u skladu s našim rezultatima koji demonstriraju usporavanje kritične dinamike dok ansambl koji se uzorkuje ostaje kanonski. Smanjivanje broja putanja povećavanjem b_{EIC} u rasponu vrijednosti $b_{EIC} > \frac{d}{2}$, rezultira povećanjem dinamičkog eksponenta z (4.21).

4.11 Prijašnji samoregulacijski algoritmi

Postoje i drugi pokušaji konstrukcije algoritma sa svojstvom samoregulacije u točku prijelaza konačnog sustava. Tomita i Okabe [139] konstruiraju algoritam, temeljen na Swendsen-Wangovom [28], koji je u stanju detektirati perkolaciju najvećeg FK grozda. Na temelju detektiranja perkolacije, varijabla temperature mijenja se u svakom MC koraku za određenu vrijednost s ciljem da perkolacija bude postignuta u 50% slučajeva. Iako autori primjenjuju svoj algoritam na Isingov model u 2d s neredom na interakcijama, određuju jedino magnetizaciju i fluktuacije kvazikritičnih temperatura [140]. Autori ne navode eksponente termodinamičkih fluktuacija.

Fulco i ostali [141] pokušavaju slično, uvođenjem samoregulacijskog pravila u SW algoritam. Njihov postupak mijenja varijablu temperature simulacije ovisno o vrijednosti parametra reda koju detektiraju. Cilj postupka je lokacija temperature pri kojoj je parametar reda manji od neke proizvoljno male vrijednosti. Koliko znamo, autori nisu primijenili svoj algoritam na sustave s neredom, usporedive onima u našoj studiji

Svaki pokušaj konstrukcije samoregulacijskog algoritma koji locira točku prijelaza u konačnom sustavu, sadržava proizvoljno pravilo koje upravlja samoregulacijom. Svako takvo pravilo potencijalno narušava ravnotežnost simulacije. Da bi sustav generirao ravnotežne konfiguracije, potrebno je koristiti pravilo koje ne narušava ravnotežnost simulacije. U odjeljku 4.10 nudimo argumente na temelju kojih tvrdimo da EIC algoritam generira ravnotežne konfiguracije sustava. Za samoregulacijske postupke nabrojene u prethodnom paragrafu, autori ne nude argumentaciju o ravnotežnosti svo-

jih algoritama. Dinamika sustava s neredom netrivialno se mijenja u odnosu na čisti sustav, zbog čega je od presudne važnosti za proučavanje sustava s neredom, upravo činjenica da znamo da su konfiguracije koje EIC algoritam generira ravnotežne.

4.12 EIC pristup prijelazu s neredom

EIC algoritam ne zahtijeva modifikacije prilikom primjene na Pottsov sustav s neredom. Svi zaključci koji se odnose na algoritam za čisti model direktno se stoga primjenjuju na slučajeve u kojima je uveden nered.

4.12.1 Važnost Pottsovog modela s neredom

Utjecaj nereda na fazni prijelaz proučavamo na primjeru Pottsovog modela. Variranjem dimenzionalnosti sustava i parametra modela q , pokriva se širok spektar slučajeva prijelaza čija različitost daje značajan uvid u mehanizam utjecaja nereda.

Slučajevi perkolacije ($q = 1$ Pottsov model), bilo u 2 ili 3d predstavljaju modele u kojima je utjecaj nereda irelevantan prema Harrisovom kriteriju. Ta činjenica bi se u računu EIC algoritmom trebala očitovati u nebitnosti prostornih nehomogenosti na točki prijelaza u limesu $L \rightarrow \infty$. Kritično ponašanje trebalo bi biti određeno eksponentima čistog slučaja, a fluktuacije kvazikritičnih temperatura trebale bi biti Gaussove. Rezultati za perkolaciju su interesantni kao primjer sustava s neredom kojega se može opisati faznim prijelazom drugog reda u efektivnom translacijski invarijantnom sustavu, što naši rezultati i pokazuju.

Za dvodimenzionalni Pottsov model s parametrom $2 < q \leq 4$, prijelaz u čistom slučaju je kontinuiran, a Harrisov kriterij [41] daje relevantnost zamrznutog nereda. Za $q > 4$ prijelaz u čistom sustavu je prvog reda i prema teoremu Aizenman-Wehr [42] očekujemo promjenu karaktera faznog prijelaza u kontinuirani čak i za infinitezimalnu količinu nereda. Zbog toga od dvodimenzionalnih sustava razmatramo $q = 3$ Pottsov model kao primjer prijelaza drugog reda u kojemu je nered relevantan. Razmatramo i $q = 8$ Pottsov model kao primjer prijelaza prvog reda koji se zaokružuje. Činjenica da je infinitezimalna količina nereda potrebna za relevantan utjecaj na prijelaz prvog

reda implicira da je topologija dvodimenzionalnog prostora presudna za učinak nereda. Zbog toga nas zanima i usporedba između modificiranog prijelaza drugog reda i zaokruženog prijelaza prvog reda.

Harrisov kriterij nezavisan je o dimenzionalnosti sustava i daje relevantnost utjecaja nereda na 3d Isingov sustav ($q = 2$ Potts u 3d) koji zbog toga razmatramo. Promjena režima čistog 3d Pottsovog modela iz drugog u prvi red događa se za vrijednost parametra $2 < q < 3$ pa je prijelaz u čistom slučaju uvijek prvog reda za cjelobrojnu vrijednost $q \geq 3$. Zaokruživanje prijelaza prvog reda u 3d prostoru drugačijeg je karaktera nego u 2d, što se očituje u konačnoj vrijednosti praga koncentracije. Za koncentracije nereda ispod praga, prijelaz ostaje nepromijenjen, a za koncentracije iznad praga, prijelaz se zaokružuje. Kritično ponašanje zaokruženog prijelaza proučavamo za slučajeve $q = 4$ i 8 .

4.12.2 Uvođenje nereda

Numerička istraživanja u ovom radu obuhvaćaju slučajeve Pottsovog modela s neredom u 2 i 3d u kojima je fazni prijelaz u čistom slučaju prvoga ili drugoga reda. Nered je zadan nasumičnom interakcijom $J_{i,j}$ (1.21). Uzimamo da interakcije $J_{i,j}$ mogu poprimiti vrijednosti 0 ili J pa je utjecaj nečistoća zadan samo koncentracijom c "defektnih" veza. Fazni prijelazi u Pottsovom modelu, zbog korespondencije s modelom nasumičnog grozda [26], povezani su s pojavom perkolacijskog grozda u varijablama veza. Nered na interakcijama najneposrednije utječe na kratkodosežne korelacije u sustavu pa s toga pretpostavljamo da je isto slučaj i za dugodosežne korelacije koje se javljaju pri prijelazu.

Za očekivati je da pitanje nereda na čvorovima ili interakcijama nije bitno za univerzalnost faznog prijelaza, ali mogući su korekcijski efekti. Nered na čvorovima rešetke, u usporedbi s neredom na interakcijama, može uzrokovati cijeli raspon broja defektnih interakcija ovisno o konfiguraciji. Izabiranjem nereda na interakcijama želimo reducirati dodatan šum, kako bi numerički računi bili što efikasniji.

Nered unosimo stavljanjem točno određenog broja defektnih interakcija, koji odgovara zadanoj koncentraciji c , na nasumična mjesta. Kad bi se nered za danu koncentraciju unosi vjerojatnosno, tako da je svaka interakcija defektna s vjerojatnošću c , postupak bi stvorio šum reda $\propto L^{d/2}$ u broju nečistoća na rešetci između različitih

konfiguracija α . Takav efekt je nebitan za univerzalno ponašanje i doprinosi šumu pa ga ovakvim zadavanjem nereda zaobilazimo.

Vrsta nereda koju promatramo u ovom radu je nekorelirana, te je vjerojatnost da bilo koje dvije interakcije budu defektne jednaka umnošku vjerojatnosti da bilo koja od njih bude defektna. Slučaj koreliranog nereda je drugačiji od nekoreliranog [142] i pokazuje drugačije kritične eksponente.

Raspon koncentracija c koji je interesantan za proučavanje utjecaja nereda seže od 0 do vrijednosti c' za koju postane nemoguće postići uređivanje Pottsovog sustava snižavanjem temperature i kad fazni prijelaz nestane. Mnogi autori napominju kako ekscesivne fluktuacije u neredu mogu uništiti dobro definirani fazni prijelaz i pretvoriti ga u "razmazani prijelaz" [52, 84]. Na primjeru faznog prijelaza u Pottsovom modelu može se ponuditi jednostavan heuristički argument ovisan o dimenziji sustava koji pokazuje da zamrznuti nered može uništiti pojavu faznog prijelaza jedino fizičkim onemogućavanjem dosega korelacijske funkcije. Ogledni slučaj koji promatramo, kad su jakosti veza ili 0 ili konačna vrijednost J je ujedno najnepovoljnija raspodjela nemagnetičnog nereda sa stajališta uređivanja, koju je moguće zamisliti.

Pottsov model je, na temelju korespondencije s Modelom nasumičnog grozda, općeni model perkolacije. Fazni prijelaz odgovara perkolaciji najvećeg FK grozda. S druge strane, svaka konfiguracija nereda na rešetki predstavlja jednu konfiguraciju u modelu nasumične perkolacije defektnih interakcija s vjerojatnošću koja odgovara njihovoj koncentraciji c . Stupnjevi slobode nereda nisu vezani sa stupnjevima slobode Pottsovog modela jer je nered zamrznut pa je stoga sustav nečistoća sam za sebe opisan nasumičnom perkolacijom. Za dvodimenzionalnu nasumičnu perkolaciju po bridovima kvadratične rešetke koncentracijski prag iznosi 0.5 [143]. Ako je koncentracija defektnih bridova veća od $c'(d = 2) = 0.5$ nije moguće naći put po bridovima koji nisu defektni od jednog do drugog kraja rešetke za beskonačan sustav. Za 2d slučaj upravo je to granična koncentracija nereda za koju je moguć fazni prijelaz.

Za trodimenzionalan slučaj, gdje perkolacijska granica za kvadratnu rešetku iznosi $\approx 0.249\dots$, moguće je primijeniti sličan argument. Koncentracija nereda mora biti manja od $c'(d = 3) \approx 0.751$ da bi perkolacija po bridovima koji nisu defektni bila moguća. Kad god je koncentracija bridova koji nisu defektni infinitezimalno veća od perkolacijske granice, tada postoji višestruko spojeni volumen $\propto L^d$ na rešetki u limesu $L \rightarrow \infty$ koji je sačinjen od njih. Za beskonačan sustav, u bilo kojoj nasumičnoj konfiguraciji

nereda, gotovo je sigurno da najveći FK grozd modela nasumičnog grozda može na konačnoj temperaturi postići perkolaciju [144]. Perkolaciju neće biti moguće postići jedino u ekstremno nepovoljnim konfiguracijama nereda čija zajednička vjerojatnost je mjere 0 u odnosu na tipične konfiguracije. Svaki pojedini sustav, ako ima idealni kontinuirani fazni prijelaz s divergirajućom korelacijskom dužinom, uvijek predstavlja samo jednu konfiguraciju nereda. Zaključujemo stoga da pravi fazni prijelaz u sustavu s neredom za model nasumičnog grozda uvijek postoji kad je c manje od 0.5 u 2d i ≈ 0.751 u 3d.

Ovim argumentom postaje jasna i suštinska topološka razlika između 2d i 3d slučajeva koja čini zanimljivim promatrati ta dva slučaja zasebno. U 3d slučaju moguća je perkolacija sustava defektnih interakcija, a da pritom Pottsov sustav pokazuje perkolaciju FK grozda. U 2d takav scenarij nije moguć jer infinitezimalno iznad koncentracije perkolacije defektnih bridova u termodinamičkom limesu, perkolacijski grozd nereda se rasteže punim volumenom rešetke u oba smjera i tako fizički onemogućuje perkolaciju najvećeg FK-grozda i time fazni prijelaz u sustavu s neredom.

Variramo i parametar q Pottsovog modela jer želimo usporediti slučajeve kad je fazni prijelaz u čistom sustavu prvog i drugog reda. U režimu relevantnog nereda, oba ta slučaja pokazuju neku vrstu kontinuiranog faznog prijelaza [87]. Efekti promjene koncentracije nereda pri istom parametru q na univerzalnost prijelaza također predstavljaju bitno pitanje. Na temelju univerzalnosti kritičnih eksponenata, za očekivati je da koncentracija ne utječe na univerzalnost prijelaza. Dosadašnji numerički računi ne mogu dati definitivan odgovor na to pitanje i ovisnost kritičnih eksponenata o koncentraciji u numeričkim računima [57, 145] interpretira se snažnim efektima konačnosti.

4.12.3 Specifičnosti računa s neredom

EIC algoritam locira temperaturu perkolacije najvećeg FK grozda u konačnom sustavu za svaku pojedinu konfiguraciju nereda α . Tvrdimo da je perkolacija FK grozda također dobar izbor za kvazikritičnu temperaturu u sustavu s nemagnetičnim zamrznutim neredom. Nemagnetični nered ne mijenja prirodu niskotemperaturne i visokotemperaturne faze. Pri temperaturi perkolacije FK grozda, za svaku konfiguraciju nereda α , Pottsov sustav mijenja fazu u kojoj se nalazi iz neuređene u uređenu. Na primjerima

faznog prijelaza drugog i prvog reda pokazat ćemo da upravo oko te točke konačni sustav pokazuje fluktuacije koje se mogu opisati homogenom funkcijom (3.33).

Observable koje promatramo su gustoća energije e i gustoća Pottsovog parametra reda m , jer njima u čistom slučaju korespondiraju dva nezavisna relevantna eksponenta koji opisuju kritično ponašanje. Vrijednosti observabli za svaku ravnotežnu konfiguraciju i bilo koju konfiguraciju nereda su zbog svojstva samoregulacije uvijek pri kvazikritičnoj točki svake konfiguracije nereda. Trivijalan je postupak razlučiti termodinamičke fluktuacije observabli za svaku konfiguraciju nereda (odjeljak 3.4.1) od fluktuacija srednjih vrijednosti u ansamblu nereda (odjeljak 3.4.3).

Informaciju o kvazikritičnoj temperaturi za svaku konfiguraciju nereda α (4.11) daje raspodjela vjerojatnosti FK veze p_α^C za kvazikritičnu točku. EIC algoritam uvijek simulira sustav pri kritičnoj vjerojatnosti veze, kao rezultat izbornog pravila algoritma pa nadalje u tekstu izbacujemo oznaku "C" koja označava da se radi o vrijednosti na kvazikritičnoj točki. Raspodjela te varijable za svaki α u EIC postupku dobiva se kao izlazni podatak. U okviru već navedene rasprave o algoritmu u odjeljku 4.10 skaliranje $\sqrt{p_\alpha^2 - \bar{p}_\alpha^2}$ služi kao kontrola konzistentnosti odabranih proizvoljnih parametara EIC algoritma. Očekivano skaliranje te veličine usrednjene po ansamblu nereda jest:

$$\sqrt{[p_\alpha^2 - \bar{p}_\alpha^2]} \equiv \sqrt{[p_\alpha^2 - \bar{p}_\alpha^2](L)} = \tilde{a}_{dp} \cdot L^{-b} + \dots \quad (4.31)$$

Eksponent konvergencije b određen je izborom slobodnih parametara EIC algoritma v i N_a i mora zadovoljavati uvjet $b \geq \frac{d}{2}$ prema izrazu (4.25) da bi konfiguracije bile ravnotežne.

Netrivijalna fizikalna informacija o raspodjeli kvazikritičnih temperatura dobiva se iz skaliranja standardne devijacije $\sqrt{[\bar{p}_\alpha^2] - [\bar{p}_\alpha]^2}$ i konvergencije $[\bar{p}_\alpha](L)$.

$$[\bar{p}] \equiv [\bar{p}_\alpha]_\tau(L) = [\bar{p}_\alpha](\infty) + \tilde{a}'_p \cdot L^{-\tilde{y}'_\tau} + \dots \quad (4.32)$$

$$\sqrt{[\bar{p}_\alpha^2] - [\bar{p}_\alpha]^2} \equiv \sqrt{[\bar{p}_\alpha^2]_\tau - [\bar{p}_\alpha]_\tau^2}(L) = \tilde{a}_p \cdot L^{-\tilde{y}_\tau} + \dots \quad (4.33)$$

Indeksi τ u tim izrazima označavaju da je kvazikritična temperatura sustava za svaku konfiguraciju nereda, zbog konačnosti sustava, locirana do na područje zaokruživanja

termodinamičkih fluktuacija: $\tau \propto L^{-y_\tau}$.

Masa najvećeg FK grozda s je veličina koja daje identičnu informaciju o eksponentima kao Pottsov parametar reda, a u EIC simulaciji se trivijalno dobiva. U proučavanju perkolacije s neredom ($q = 1$), kad m nije dobro definiran prema izrazu (1.15), informacije o eksponentima dobivamo promatrajući p i s . Alternativno parametar reda za Pottsov model se može definirati kao $m' = \frac{s}{L^d}$ i iako tako definiran parametar reda nije identičan standardnom Pottsovom, pokazuje se u svim našim računima, da je razlika u pripadnom eksponentu između računa s m i m' manja od statističke nepouzdanosti. Zbog toga u sustavima za koje $q \neq 1$ ne navodimo rezultate za s .

Da bismo dobili kompletnu informaciju o raspodjelama termodinamičkih fluktuacija, odnosno raspodjelama srednjih vrijednosti po neredu, raspolažemo s kompletnim podacima promatranih veličina za svaku termodinamičku konfiguraciju pri svim konfiguracijama nereda α . Za određivanje najbitnijih karakteristika reskaliranja najčešće je potrebna samo srednja vrijednost i standardna devijacija raspodjele. U rijetkim slučajevima te dvije karakteristike ne daju konkluzivnu informaciju i tada je potrebno zaključivati iz ostalih karakteristika raspodjele (odjeljak 6.3).

4.12.4 Tehnički aspekti računanja kritičnih eksponenata

U skladu s pretpostavkama iznesenim u odjeljku 3.4 uzimamo da sve veličine koje se računaju pri točki prijelaza u konačnom sustavu (srednje vrijednosti, standardne devijacije, maksimumi raspodjela, i.t.d.), imaju potencijalnu ovisnost o veličini sustava L . U asimptotskom režimu promatrane veličine određene jednopotencijskim zakonom s ili bez konstantnog člana:

$$f_1(L) = b \cdot L^c \quad (4.34)$$

$$f'_1(L) = a + b \cdot L^c, \quad (4.35)$$

gdje su a, b, \dots konstante. Sustavi koje razmatramo su konačni i zbog toga veličine koje promatramo često nisu u asimptotskom režimu. Najblaži oblik korekcija na asimptotsko ponašanje su korekcije skaliranja koje dolaze od irelevantnih polja skaliranja i očituju se u dvopotencijskom ponašanju:

$$f_2(L) = b \cdot L^c + d \cdot L^e \quad (4.36)$$

$$f'_2(L) = a + b \cdot L^c + d \cdot L^e, \quad (4.37)$$

pri čemu je u (4.36 i 4.37) $c > e$. Nadalje u tekstu koristimo ovdje uvedene nazive za ove četiri vrste funkcija. Rezultati za kritične eksponente se dobivaju ugađanjem izračunatih vrijednosti na dvo- ili jednopotencijske ovisnosti koje smo naveli. Prilikom postupka ugađanja ekstremno je bitno procijeniti nepouzdanost rezultata zbog statističkog šuma. Na primjer, ako je statistički šum veći od korekcije skaliranja, nema smisla ugađati rezultate na dvopotencijsku ovisnost.

Postupkom "jacknife binninga" procjenjujemo statističke nepouzdanosti. Pojedine točke se izbacuju iz skupa podataka i onda se radi ugađanje na reduciranim skupovima podataka. Općenito kad je mnoštvo točaka u skupu podataka, podskupovi koji se izbacuju trebaju imati broj članova koji je reda veličine broja članova čitavog skupa podataka. Variranje promatranog parametra ugađanjem na reduciranim skupovima daje procjenu nepouzdanosti. Ovakva procjena odnosi se samo na statističke popravke. Nepouzdanosti eksponentata koje navodimo, standardno se odnose na statističke nepouzdanosti.

Rezultati koje ćemo prezentirati za fluktuacije termodinamičkog ansambla, kao i rezultati za srednje vrijednosti observabli po ansamblu nereda, su u većini slučajeva dovoljno precizni da je moguće konzistentno provesti ugađanje na dvopotencijsku ovisnost. To ne vrijedi za standardne devijacije srednjih vrijednosti u ansamblu nereda jer je veličina drugi moment, a isto tako statistika nereda koju smo koristili je ograničena raspoloživim računskim resursima. Zbog toga za potonje koristimo ugađanje na jednopotencijske ovisnosti.

Pod pretpostavkom da je statistički šum dovoljno slab, ocjenu preciznosti ugađanja daje suma kvadratnih odstupanja točaka od najbolje ugođene funkcije označena s χ^2 . Često je korisno isprobati i jedno- i dvopotencijsko ugađanje na neki skup rezultata i tada je vrijednost χ^2 korisna u kvantificiranju koliko dobro neka funkcija opisuje rezultate.

U nekim rezultatima računa bili su prisutni i efekti konačnosti koji se ne mogu opisati utjecajem irelevantnih polja skaliranja. Primjer takvog ponašanja je promjena

značajki prijelaza iz onih svojstvenih prijelazu prvog u svojstvene prijelazu drugog reda ovisno o veličini sustava. Njihova prisutnost može biti interesantna za proučavanje značajki domenskog zida pri prijelazu u sustavu s neredom, ali onemogućuje račun kritičnih eksponenata jer su u numeričkim računima dostupni samo relativno ograničeni rasponi veličina sustava.

Postojanje "perzistentnih" korekcija skaliranja specifičnost je faznog prijelaza u sustavima s neredom. Takve korekcije su znatno snažnije od korekcija konačnosti pri faznom prijelazu čistog sustava. Perzistentne korekcije skaliranju očituju se u numeričkim računima, kao dosljedno odstupanje eksponenta u gotovo čitavom rasponu dostupnih rešetki u ovisnosti o koncentraciji nereda. Perzistentne korekcije skaliranja moguće je uzeti u obzir jedino promatranjem ovisnosti efektivnog eksponenta o koncentraciji i pronalaženjem koncentracije saturacije, koja predstavlja vrijednost invarijantnu na reskaliranje pri prijelazu.

5. Relevantnost prostornih nehomogenosti na prijelazu

U ovom poglavlju, koristimo lokalni parametar reda kako bismo proučavali prostorne nehomogenosti pri kvazikritičnoj točki u sustavu s neredom uz pomoć EIC algoritma. Pružit ćemo dokaze o korespondenciji između dominantnosti fluktuacija kvazikritičnih temperatura nad područjem zaokruživanja ($y_\tau > \tilde{y}_\tau$) i nedostatka translacijske invarijantnosti oko prijelaza u sustavu.

Relevantnost prostornih nehomogenosti na točki prijelaza, uočavamo putem prostorne raspodjele parametra reda određene pri vlastitim kvazikritičnim temperaturama svake konfiguracije nereda α zasebno, zbog čega je korištenje EIC algoritma od presudne važnosti. U nekim slučajevima koristimo veći broj konfiguracija nereda kao i skaliranje, kako bismo zaključili o sustavima u granici $L \rightarrow \infty$. Smatramo da je ta raspodjela izvrsna mjera utjecaja nereda na fazni prijelaz. Zaključci koje je moguće iz nje izvući temelje na proučavanju oblika i reskaliranja te raspodjele i zbog toga statističke pogreške i numerička nepreciznost igraju zanemarivu ulogu.

Opis faznog prijelaza s neredom u slici faznog prijelaza drugog reda u efektivnom translacijski invarijantnom sustavu (3.7), nije u stanju opisati prostorne nehomogenosti na točki prijelaza. Zbog toga, postojanje prostornih nehomogenosti na skali veličine sustava pri točki prijelaza implicira nemogućnost opisa prijelaza u toj slici. Formalno, iz izraza (3.7), lokalni parametar reda može se definirati kao:

$$\bar{m}(\vec{r}) = \frac{\partial \langle f_\alpha(T, h(\vec{r})) \rangle}{\partial h(\vec{r})} \Big|_{h(\vec{r}) \rightarrow 0 \forall \vec{r}}. \quad (5.1)$$

Iz razloga što u izrazu (3.7) nema ovisnosti o \vec{r} , prema slici faznog prijelaza u efektiv-

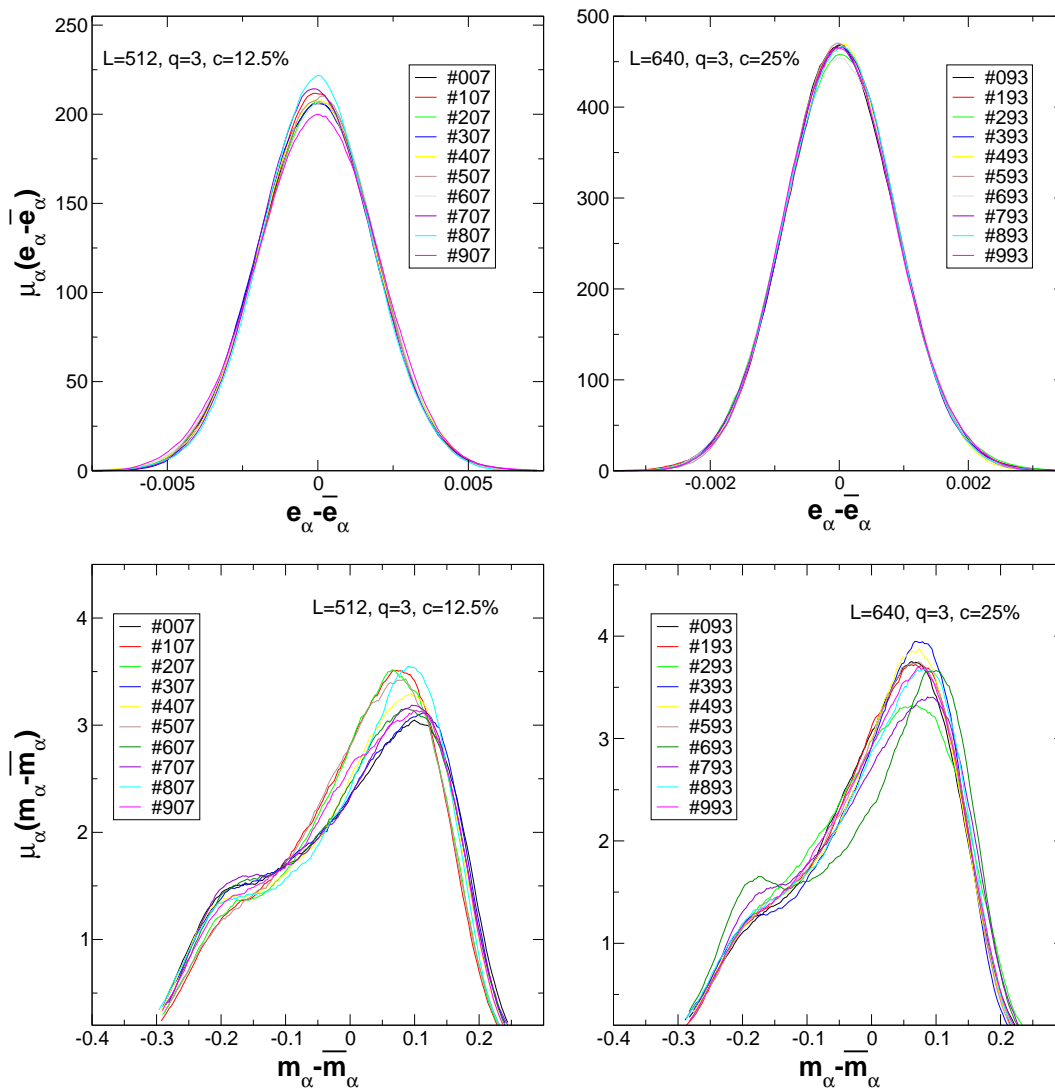
nom translacijski invarijantnom sustavu, srednja vrijednost parametra reda je jednaka u svakoj točki. To također implicira da je raspodjela termodinamičkih fluktuacija u svakoj točki jednaka jer je srednja vrijednost parametra reda pri prijelazu određena kritičnim fluktuacijama. Rezultati koje ćemo prezentirati u ovom odjeljku ilustriraju da prostorne nehomogenosti u parametru reda postoje kao rezultat utjecaja nemagnetičnog nereda. Uspostavit ćemo vezu između pojave relevantnosti prostornih nehomogenosti na svim skalama i nejednakosti kritičnih eksponenata $y_\tau > \tilde{y}_\tau$.

Mnogi autori eksplicitno napominju da mogućnost $y_\tau \geq \tilde{y}_\tau$, nije u skladu s "oštrim" faznim prijelazom [84, 52]. Razmatramo $q = 3$ Pottsov model u 2d s neredom za koji je nered relevantan i za koji rezultati sumirani u poglavlju 6 govore da je karakteriziran svojstvom da je $y_\tau > \tilde{y}_\tau$. Da bismo intuitivno demonstrirali da takva nejednakost ima smisla za sustav s oštrim faznim prijelazom, na slici (5.1) prikazane su ravnotežne raspodjele gustoće energije e i parametra reda m oko srednjih vrijednosti određenih EIC algoritmom pri vlastitim kvazikritičnim temperaturama, za različite konfiguracije nereda. Raspodjele pokazuju minorne razlike u obliku za različite konfiguracije nereda, ali sve se skaliraju s jedinstvenim eksponentom. Da se različiti slučajevi nereda reskaliraju drugačije, to bi se očitovalo drastičnim razlikama između raspodjela za sustave veličina koje su prikazane na slici. Zbog toga prosjek raspodjele termodinamičkih fluktuacija po ansamblu nereda pri kvazikritičnoj temperaturi svake konfiguracije α ima smisla i daje informaciju o prijelazu za svaku pojedinu konfiguraciju nereda.

5.1 Lokalni parametar reda za čisti Pottsov model

Uz pomoć korespondencije Pottsovog modela i modela nasumičnog grozda moguće je parametar reda definirati lokalno za svaku konfiguraciju iz termodinamičkog ansambla. Promotrimo složenu statističku težinu $w(\{\sigma\}, \{b\})$ (izraz (4.5) u odjeljku 4.1) koja je definirana na produktnom prostoru spinskih konfiguracija $\{\sigma\}$ i konfiguracija FK-veza $\{b\}$. Pri temperaturi prijelaza, najveći FK grozd postiže perkolaciju. Označimo sa $S(\{\sigma\}, \{b\})$ skup svih spinova koji pripadaju najvećem FK grozdu za neku konfiguraciju spinova i veza. Definiramo funkciju pripadnosti najvećem FK grozdu, $\pi(\vec{r})$:

$$\pi(\vec{r}) = \begin{cases} 1 & \text{ako } \sigma(\vec{r}) \in S(\{\sigma\}, \{b\}) \\ 0 & \text{ako } \sigma(\vec{r}) \notin S(\{\sigma\}, \{b\}) \end{cases} \quad (5.2)$$



Slika 5.1: Raspodjele energija i magnetizacija u odnosu na pripadne termodinamičke prosjeke za neke konfiguracije nereda. Ilustracija za 2d $q = 3$ Pottsov model veličina rešetke $L = 512$ s $c = 12.5\%$ i $L = 640$ s $c = 25\%$ sa statistikom od $W = 20000$ MCS za svaku konfiguraciju nereda.

Lokalni parametar reda može se definirati kao vjerojatnost u termodinamičkom ansamblu, pripadanja spina $\sigma(\vec{r})$ koji se nalazi na mjestu \vec{r} na rešetci, najvećem FK grozdu:

$$\overline{m}(\vec{r}) = \frac{\sum_{\{\sigma\},\{b\}} \pi(\vec{r}) \cdot w(\{\sigma\}, \{b\})}{\sum_{\{\sigma\},\{b\}} w(\{\sigma\}, \{b\})}. \quad (5.3)$$

Prosjeak od (5.3) po cijelom sustavu veličina je ekvivalentna standardnom Pottsovom parametru reda jer predstavlja vjerojatnost pripadanja najvećem FK grozdu bilo kojeg spina na rešetci.

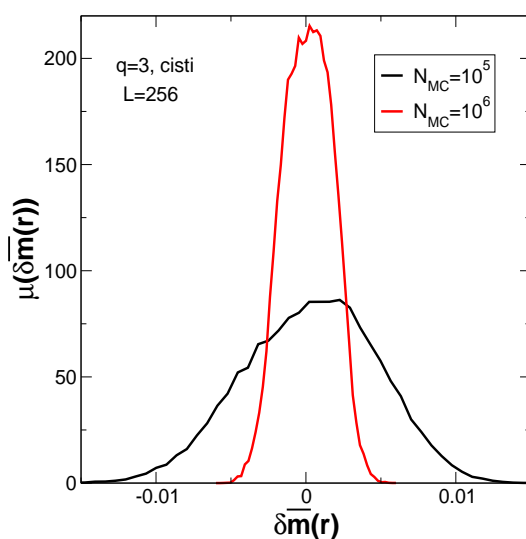
U čistom sustavu na točki kontinuiranog faznog prijelaza, parametar reda iščezava u limesu $L \rightarrow \infty$. To je odraz činjenice da je skup $S(\{\sigma\}, \{b\})$ fraktalan. Iako je fraktalan skup mjere nula u odnosu na volumen, on nije irelevantan za makroskopsko ponašanje jer njegova struktura pri točki prijelaza, uzrokuje pojavu potencijalnog ponašanja parametra reda ispod točke prijelaza, koje se opaža eksperimentalno. Fraktalni skup uređivanja u čistom sustavu ima jednaku vjerojatnost pojavljivanja na bilo kojem mjestu u sustavu, što je odraz translacijske invarijantnosti. Ako je sustav konačan translacijska invarijantnost u ovom kontekstu također ima smisla ako su nametnuti periodički rubni uvjeti, koje u ovom radu dosljedno koristimo.

Iz razloga što je $\overline{m}(\vec{r})$ rezultat usrednjavanja po termodinamičkom ansamblu, promatranje lokalnog parametra reda u konačnim vremenima simulacije, rezultira odstupanjem od srednje vrijednosti pri kvazikritičnoj točki. Definirajmo termodinamički prosjeak odstupanja lokalnog parametra reda od vrijednosti usrednjene u cijelom prostoru:

$$\delta \overline{m}(\vec{r}) = \overline{m}(\vec{r}) - \frac{1}{V} \int d\vec{r} \overline{m}(\vec{r}). \quad (5.4)$$

U tom izrazu s \vec{r} označeno je usrednjavanje po termodinamičkom ansamblu koje uključuje statistiku MC koraka.

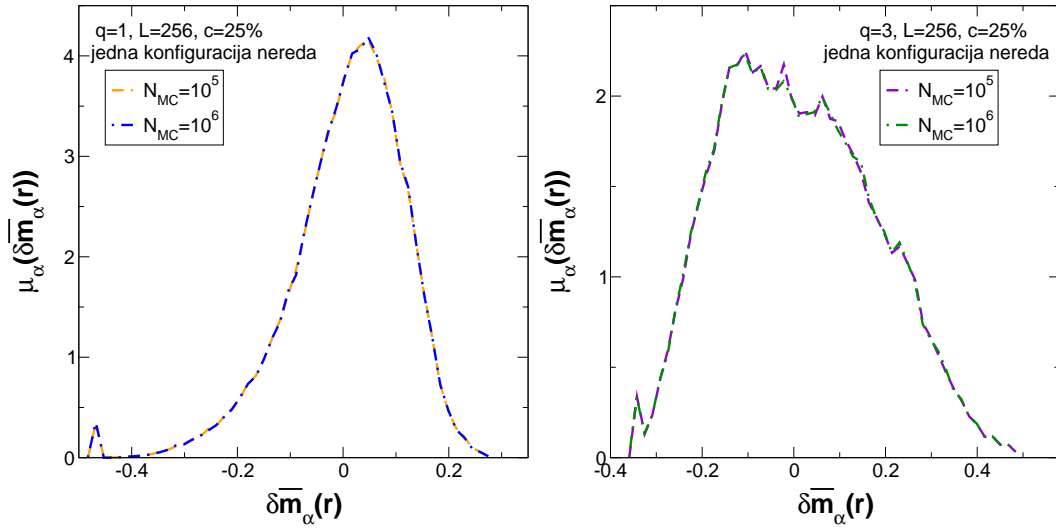
Na slici 5.2 prikazujemo prostorne raspodjele lokalnog parametra reda za čisti $q = 3$ Pottsov sustav pri kvazikritičnoj točki u 2d, veličine rešetke $L = 256$. Raspodjelu određujemo s dvije različite statistike MC koraka. Zbog translacijske invarijantnosti u čistom sustavu, raspodjela vrijednosti $\delta m(\vec{r})$ jednaka je na svakoj točki rešetke. Prostorne varijacije u parametru reda potječu isključivo od termodinamičkih fluktuacija,



Slika 5.2: Prostorne raspodjele parametra reda oko srednje vrijednosti pri kvazikritičnoj točki za čisti $q = 3$ Pottsov sustav veličine rešetke $L = 256$ u 2d. Povećavanjem statistike MC koraka te raspodjele se sužavaju kao rezultat Središnjeg graničnog teorema, jer raspodjele parametra reda na svakoj točki su identične, a ako su uzorkovane vrijednosti vremenski razmknute za interval MC koraka usporediv s autokorelacijskim vremenom $\approx \Theta$, vrijednosti su statistički nezavisne.

koje su korelirane na skali $\xi \equiv L$ u prostoru i $\Theta \propto \xi^z$ u vremenu (izraženom u MC koracima). Za konačan sustav, vrijednosti parametra reda na bilo kojoj točki rešetke nisu korelirane ako ih se promatra razmknute za vremena veća od $\propto \Theta$. Zbog toga, prostorna raspodjela parametra reda određena je Središnjim graničnim teoremom. U ovisnosti o broju MC koraka N_{MC} , njena širina oko termodinamičke srednje vrijednosti smanjuje se kao $\frac{1}{\sqrt{N_{MC}/\Theta}}$. Bitno je naglasiti da za bilo koju veličinu rešetke L konačnog sustava ta raspodjela teži u δ - funkciju kako $N_{MC}/\Theta \rightarrow \infty$. To svojstvo je vidljivo na slici 5.2 gdje je prikazana prostorna raspodjela parametra reda na kvazikritičnoj točki za čisti sustav. Raspodjela sužuje povećavanjem statistike MC koraka, što je u skladu sa Središnjim graničnim teoremom.

Ponašanje raspodjele lokalnih varijacija parametra reda, konzistentno je s trivijalnom prostornom ovisnošću. Kako se statistika MC koraka povećava u odnosu na autokorelacijsko vrijeme Θ ($\frac{N_{MC}}{\Theta} \rightarrow \infty$), prostorne nehomogenosti na kvazikritičnoj točki nestaju za sustav bilo koje veličine L . Stoga je sustav pri kvazikritičnoj točki translacijski invarijantan za svaki L .



Slika 5.3: Prostorne raspodjele parametra reda oko srednje vrijednosti pri kvazikritičnim temperaturama za $q = 1$ i 3 Pottsov sustav veličine rešetke $L = 256$ u $2d$ s $c = 25\%$ nereda. Povećavanjem statistike MC koraka te raspodjele se ne sužavaju u suprotnosti s ponašanjem čistog sustava. Štoviše, raspodjele za navedene slučajeve su identične nezavisno o promjeni MC statistike od u intervalu od $N_{MC} = 10^5$ do 10^6 . To je rezultat činjenice da raspodjele parametra reda nisu identične za svaku točku na rešetki. Prostorne varijacije u parametru reda dovoljno su velike da su raspodjele varijacija parametra reda u potpunosti određene njima. Shodno tome, konačni sustav pri kvazikritičnoj točki nije translacijski invarijantan za dani L čak i ako je nered irelevantan.

5.2 Translacijska neinvarijantnost u sustavima s neredom

Lokalni parametar reda može se analogno definirati za Pottsov model s neredom. Jedina razlika se svodi na činjenicu da pripadnost najvećem FK grozdu eksplicitno ovisi o konfiguraciji nereda α . Zbog toga, za sustav s neredom vrijede izrazi (5.2), (5.3) i (5.4) uz korespondencije:

$$S(\{\sigma\}, \{b\}) \rightarrow S_\alpha(\{\sigma\}, \{b\}) \quad (5.5)$$

$$\pi(\vec{r}) \rightarrow \pi_\alpha(\vec{r}) \quad (5.6)$$

$$\bar{m}(\vec{r}) \rightarrow \bar{m}_\alpha(\vec{r}) \quad (5.7)$$

$$\delta \bar{m}(\vec{r}) \rightarrow \delta \bar{m}_\alpha(\vec{r}) \quad (5.8)$$

Sustavi s neredom, nezavisno o tome je li nered relevantan ili irelevantan prema Harrisovom kriteriju, pokazuju suštinski drugačije ponašanje prostorne raspodjele parametra reda od čistog slučaja. Na slici 5.3 pokazujemo prostorne raspodjele parametra reda za jednu konfiguraciju nereda koncentracije 25%, u 2d sustavima veličine $L = 256$. Promatramo $q = 1$ sustav, za koji je nered irelevantan i $q = 3$ za koji je relevantan.

U suprotnosti s čistim slučajem, povećavanje N_{MC} , nema apsolutno nikakvog utjecaja na raspodjelu niti u jednom od ta dva slučaja. To je vrlo jasna indikacija da raspodjele parametra reda na različitim položajima na rešetci nisu nezavisne i da ih vremenska evolucija ne može dekorelirati za proizvoljno dugačka vremena. Ovakav rezultat može isključivo biti efekt vremenski statičke, translacijski neinvarijantne raspodjele parametra reda zbog utjecaja nereda.

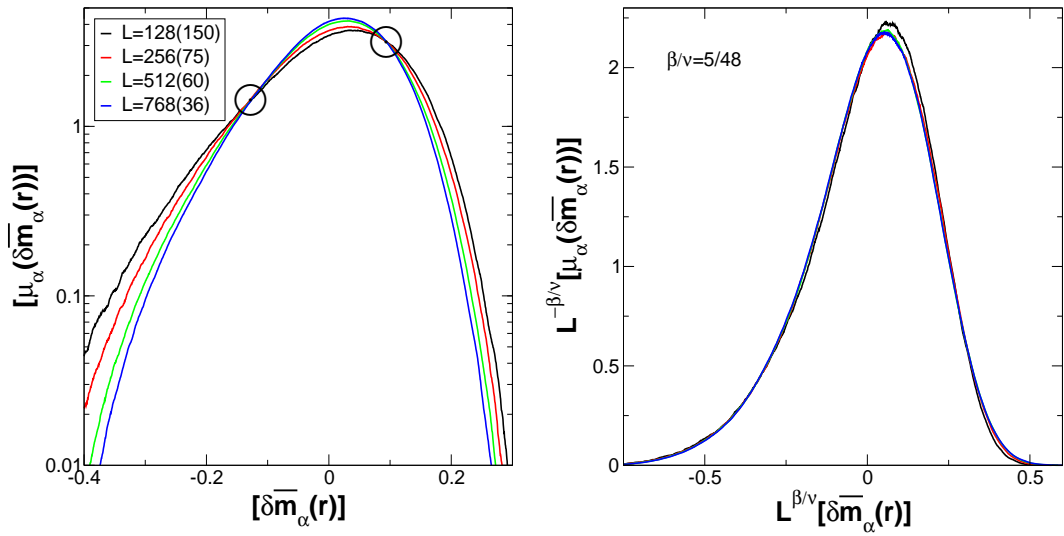
Ovaj rezultat govori kako nije *a priori* opravdano zanemariti prostorne nehomogenosti u sustavu, ali ne pokazuje da su nehomogenosti bitne na točki prijelaza u limesu $L \rightarrow \infty$. Ako nehomogenosti nisu bitne u tom limesu, onda je sustav moguće opisati ekvivalentnim translacijski invarijantnim sustavom pri točki prijelaza. S druge strane ako jesu takav opis neće biti u stanju opisati punu kompleksnost prijelaza s neredom.

5.3 Skaliranje raspodjele lokalnih fluktuacija

Kako bismo provjerili perzistiraju li nehomogenosti u granici $L \rightarrow \infty$ ili ne, koristimo argumente skaliranja u konačnom sustavu. Promatramo nekoliko veličina rešetki i za njih provodimo račun prostornih fluktuacija parametra reda pri kvazikritičnoj temperaturi svake konfiguracije nereda α zasebno. Da bismo isključili specifičnosti raspodjela za pojedine konfiguracije nereda, radimo prosjek raspodjela po nekoliko konfiguracija nereda. Razmatramo slučajeve $q = 1$ i $q = 3$ u 2d.

5.3.1 Irelevantan nered – perkolacija u 2d

Za perkolaciju ($q = 1$) u 2d, u poglavlju 6, pokazujemo da prisutnost nemagnetičnog nereda ne mijenja kritične eksponente i da je eksponent fluktuacija kvazikritičnih temperatura konzistentan s $\frac{d}{2}$. Takav rezultat u skladu je s irelevantnosti nereda



Slika 5.4: Raspodjela prostorne ovisnosti parametra reda $[\bar{m}_\alpha(\vec{r})]$ oko srednje vrijednosti od svake konfiguracije nereda, usrednjena preko nekoliko konfiguracija nereda za slučaj $q = 1$, $c = 25\%$. Na slici lijevo prikazana je usrednjena raspodjela s ordinatnom u logaritamskoj skali. Statistike nereda su navedene u zagradama u kazalu. S krugovima označavamo točke u blizini kojih se, za ovaj raspon rešetki, mijenja relevantnost reskaliranja pojedinih vjerojatnosti m_α iz raspodjele. Vidljivo je da vjerojatnosti vrijednosti $\delta\bar{m}_\alpha(\vec{r})$ koje pripadaju repovima raspodjele ($|\delta\bar{m}_\alpha(\vec{r})| \approx 1$) reskaliranjem idu u nulu. Na slici desno prikazan je prosjek prostorne raspodjele reskaliran s egzaktnim eksponentom čistog slučaja $\frac{\beta}{\nu} = \frac{5}{48}$ i vidi se da je kolaps izvrstan.

prema Harrisovom kriteriju. Između termičkog eksponenta i eksponenta fluktuacija vrijedi nejednakost:

$$y_\tau = \frac{3}{4} < 1 = \tilde{y}_\tau \equiv \frac{d}{2}. \quad (5.9)$$

U izrazu (5.9) vrijednost eksponenta y_τ je egzaktna i jednaka vrijednosti iz čistog slučaja. Prema našoj argumentaciji iz odjeljka 3.2.4, nejednakost (5.9) implicira da je prijelaz u sustavu moguće opisati prijelazom u efektivnom translacijski invarijantnom sustavu.

Prostorna raspodjela parametra reda trebala bi stoga odražavati kritični eksponent parametra reda čistog sustava. Očekujemo da s povećavanjem sustava nehomogenosti postaju sve manje značajne. Pri kvazikritičnoj točki pretpostavljamo oblik usrednjene prostorne raspodjele u obliku:

$$[\mu_\alpha([\delta\bar{m}_\alpha(\vec{r})])] = L^{\frac{\beta}{\nu}}[\hat{\mu}_\alpha(L^{\frac{\beta}{\nu}}[\delta\bar{m}_\alpha(\vec{r})])], \quad (5.10)$$

gdje je $\frac{\beta}{\nu}$ eksponent parametra reda čistog modela, jer je nered irelevantan. Plauzibilni oblik funkcije skaliranja $\hat{\mu}$ jest (strogo) monotono padajući od vrijednosti $\propto 1$ za argument funkcije 0, do vrijednosti 0 za argument funkcije u oba limesa $\rightarrow \pm\infty$. Nije za očekivati da funkcija skaliranja ima dodatnu netrivialnu strukturu u obliku promjena režima ili dodatnih karakterističnih točaka osim maksimuma za vrijednost argumenta 0. Naime, u slučaju irelevantnog nereda u sustavu koji pokazuje prijelaz drugog reda, svu relevantnu informaciju o singularitetu nosi singularni dio slobodne energije (1.4), koji nema prostornu ovisnost.

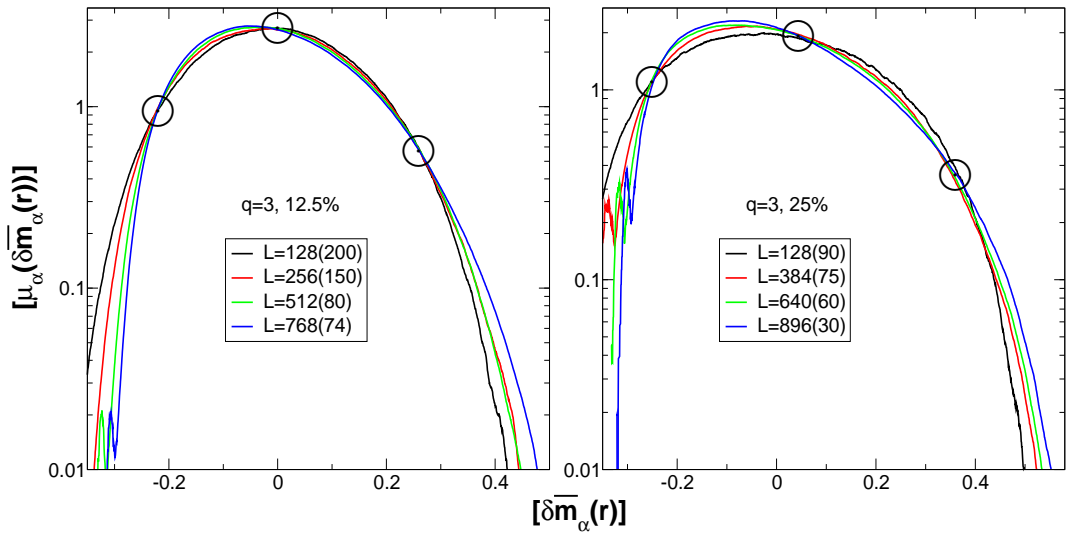
Na slici 5.4 prikazani su prosjeci po ansamblu nereda prostorne raspodjele parametra reda oko srednjih vrijednosti za sustave na kvazikritičnim temperaturama za slučaj irelevantnog nereda. U tom slučaju prostorna raspodjela pokazuje skaliranje oko srednje vrijednosti parametra reda s egzaktnim i nepromijenjenim eksponentom $\frac{\beta}{\nu} = \frac{5}{48}$ iz čistog slučaja. Slaganje s pretpostavljenim oblikom skaliranja (izraz (5.10)) je izvrsno kako se može vidjeti na slici 5.4 desno. Takav oblik implicira da raspodjela teži u delta funkciju oko nule u termodinamičkom limesu. To je jasna indikacija irelevantnosti nereda jer znači da prostorne nehomogenosti parametra reda nestaju kada $L \rightarrow \infty$.

5.3.2 Relevantan nered - $q = 3$ Potts u 2d

Kompletne rezultate za kritične eksponente $q = 3$ slučaja s neredom prezentiramo u poglavlju 6 i oni su u skladu s fenomenološkim opisom kritičnog ponašanja, koji navodimo u odjeljku 3.4. Najvažniji detalj tih rezultata za diskusiju o prostornim nehomogenostima je upravo nejednakost:

$$y_\tau > \tilde{y}_\tau, \quad (5.11)$$

koju dobivamo za ovaj slučaj, kao i sve ostale slučajeve u kojima je nered relevantan. Valja naglasiti da je $q = 3$ slučaj izabran kao primjer najslabijeg utjecaja relevantnog nereda na fazni prijelaz od svih slučajeva koje promatramo, a rezultati ovog odjeljka će pokazati da su efekti prostornih nehomogenosti na svim skalama jasno vidljivi.



Slika 5.5: Raspodjela prostorne ovisnosti parametra reda $[\bar{m}_\alpha(\vec{r})]$ oko srednje vrijednosti od svake konfiguracije nereda, usrednjena preko nekoliko konfiguracija nereda za slučajeve $q = 3$ s koncentracijama nereda od $c = 12.5\%$ i $c = 25\%$. Statistike nereda su navedene u zagradama u kazalu. Ordinata je u logaritamskoj skali da bi perzistentnost repa pri velikim pozitivnim vrijednostima $\delta m_\alpha(\vec{r})$ bila očitija. S krugovima označavamo točke u blizini kojih se, za ovaj raspon rešetke, mijenja relevantnost reskaliranja pojedinih vjerojatnosti $m_\alpha(\vec{r})$ iz raspodjele. U usporedbi sa slučajem $q = 1$ u kojemu je nered irelevantan, za slučaj $q = 3$ relevantnost funkcije u ovisnosti o argumentu mijenja se tri puta. To znači da vjerojatnosti pozitivnih vrijednosti $\delta \bar{m}_\alpha(\vec{r}) \propto 1$ iz repa postaju sve značajnije reskaliranjem.

Raspodjela prostornih fluktuacija parametra reda ima suštinski drugačije reskaliranje za $q = 3$ nego za $q = 1$ slučaj. Na slici 5.5 prikazujemo prostorne raspodjele lokalnog parametra reda za dvije koncentracije nereda $c = 12.5\%$ i 25% , u $q = 3$ Pottsovom modelu u 2d, za nekoliko veličina sustava. Ordinata je u logaritamskoj skali, da bi bile što uočljivije karakteristike reskaliranja raspodjele. S krugovima, na slici 5.5, označene su točke u blizini kojih se, za ovaj raspon rešetke, mijenja relevantnost reskaliranja pojedinih vjerojatnosti $m_\alpha(\vec{r})$ iz raspodjele. U usporedbi sa slučajem $q = 1$, za slučaj $q = 3$ relevantnost funkcije u ovisnosti o argumentu mijenja se tri puta. Vidljivo je da rep raspodjele za ekstremno velike pozitivne vrijednosti odstupanja $\delta \bar{m}_\alpha(\vec{r}) \propto 1$ ne iščezava povećanjem sustava nego postaje važniji reskaliranjem.

Nije se teško uvjeriti da općenito raspodjelu s takvim reskaliranjem nije moguće opisati oblikom (5.10), za bilo kakvu, proizvoljno odabranu vrijednost eksponenta $\frac{\beta}{\nu}$. Specijalno, ove raspodjele nije moguće reskalirati s neredom modificiranim eksponentom konvergencije parametra reda $\tilde{\beta}'$, koji smo odredili u poglavlju 6. Ovo je

odraz razlike u prirodi prijelaza u sustavu u kojemu je nered relevantan. Povećavanje relevantnosti vrijednosti iz repa raspodjele, naznaka je netrivialne prostorno ovisne strukture. Slobodna energija usrednjena po ansamblu nereda pri jedinstvenoj temperaturi (3.7) ne nosi informaciju o položaju u sustavu pa stoga ne može opisati ovakav ishod.

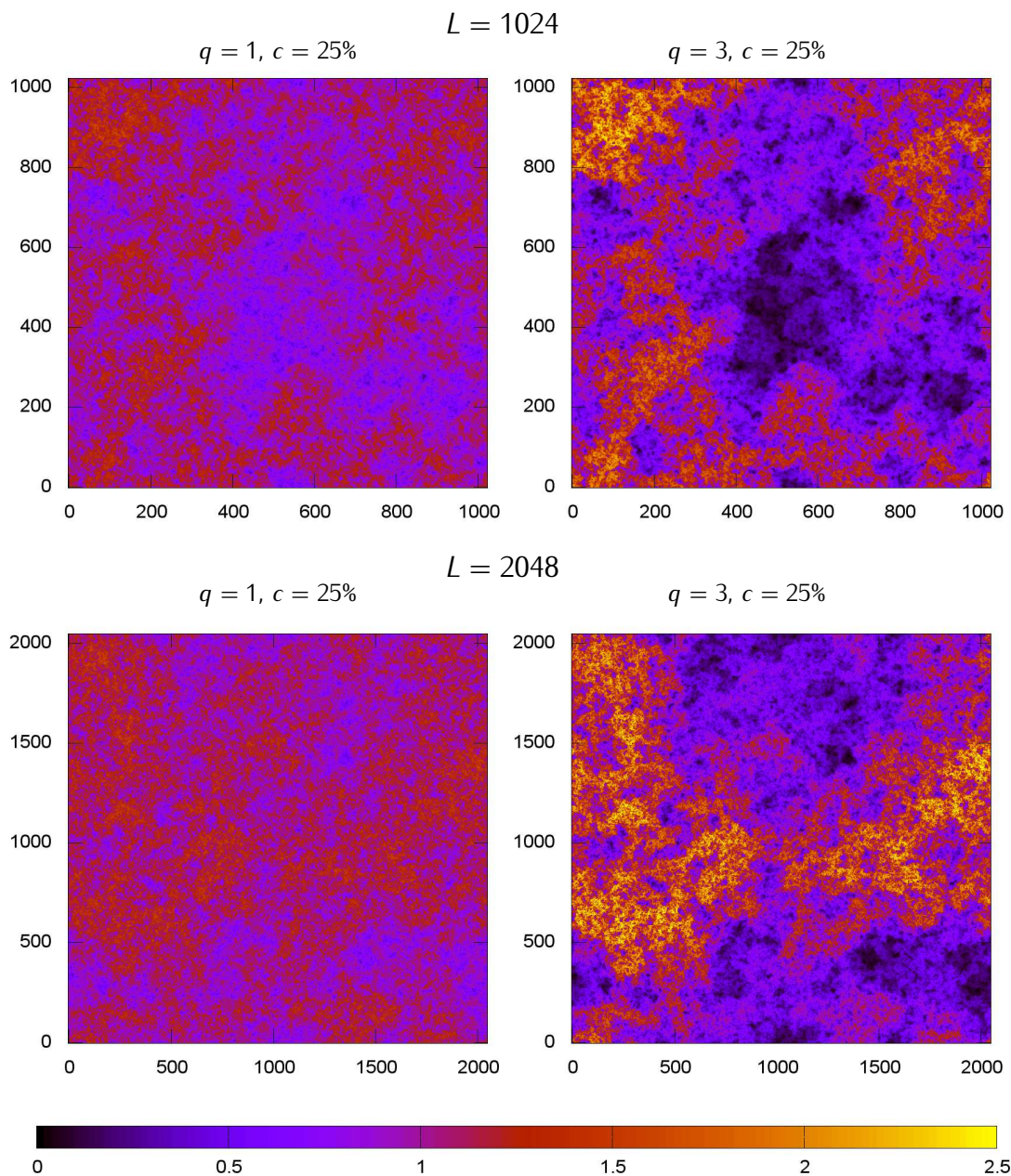
Perzistiranje repa raspodjele $\bar{m}_\alpha(\vec{r})$ za vrijednosti $\propto 1$ direktno implicira translacijsku neinvarijantnost na svim skalama pri točki prijelaza. Činjenica da parametar reda isčezava za fazni prijelaz s relevantnim neredom znači da je volumen uređivanja fraktalan, jednako kao i za kontinuirani prijelaz u čistom slučaju. Iz razloga što reskaliranjem vrijednosti parametra reda $m_\alpha(\vec{r}) \propto 1$ postaju sve značajnije, zaključujemo da dominantan doprinos parametru reda dolazi od fraktalnog volumena koji je fiksiran za određenu konfiguraciju nereda α . U fiksiranosti volumena sastoji se razlika između kontinuiranog faznog prijelaza u čistom sustavu i onoga u kojem je nered relevantan. Ako na nekom fraktalnom volumenu $\tilde{V}_\alpha \propto L^{\tilde{d}}$, gdje je $\tilde{d} < d$, perzistira određena konstantna vrijednost parametra reda, bez obzira koliko mala, to znači da ostatak volumena sustava u prosjeku po termodinamičkom ansamblu daje najviše doprinos jednakog reda ukupnom parametru reda:

$$\frac{1}{V} \int_{\tilde{V}_\alpha} d\vec{r} m_\alpha(\vec{r}) \propto \frac{1}{V} \int_{L^d/\tilde{V}_\alpha} d\vec{r} m_\alpha(\vec{r}) \quad (5.12)$$

Volumen koji ne pripada volumenu \tilde{V}_α , L^d/\tilde{V}_α ima dimenzionalnost $d > \tilde{d}$ pa stoga slijedi da na njemu $m_\alpha(\vec{r})|_{L^d/\tilde{V}_\alpha} \rightarrow 0$ za svaki $\vec{r} \in L^d/\tilde{V}_\alpha$. Kada bi doprinos parametru reda od integracije po volumenu L^d/\tilde{V}_α bio veći nego po \tilde{V}_α , vjerojatnosti ekstremnih pozitivnih fluktuacija $\delta\bar{m}_\alpha(\vec{r})$ bi se smanjivale, što nije slučaj.

Kako bismo ilustrirali činjenicu da se uređivanje događa na fiksiranom fraktalnom volumenu ako je nered relevantan, na slici 5.6 prikazujemo je prostornu ovisnost lokalnog parametra reda $\bar{m}_\alpha(\vec{r})$. Lokalni parametar reda računamo za jednu konfiguraciju nereda, pri kvazikritičnoj temperaturi u već razmatrana dva slučaja $q = 1$ i $q = 3$. Vrijednosti $\bar{m}_\alpha(\vec{r})$ navodimo u jedinicama prostornog prosjeka vrijednosti parametra reda po cijeloj rešetci $\frac{1}{V} \int d\vec{r} \bar{m}_\alpha(\vec{r})$. Vrijednost 1 na skali odgovara srednjoj gustoći parametra reda za svaki od navedenih slučajeva.

Za konfiguracije nereda koje promatramo, maksimalna vrijednost $\bar{m}_\alpha(\vec{r})$ izražena u usrednjenosti po čitavom sustavu, je u slučaju $q = 3 \approx 2.1$ za $L = 1024$,



Slika 5.6: Prostorna ovisnost parametra reda $\bar{m}_\alpha(\vec{r})$ za jednu konfiguraciju nereda, pri kvazikritičnoj temperaturi, u dva različita slučaja u 2d: kad je nered irelevantan $q = 1$ i kad je nered relevantan $q = 3$. Promatramo koncentraciju nereda $c = 25\%$, a specifična konfiguracija nereda je ista za sustave iste veličine i različitog q . Lokalni parametar reda definiramo kao vjerojatnost pripadanja najvećem FK grozdu u termodinamičkom ansamblu. Skala vrijednosti lokalnog parametra reda $\bar{m}_\alpha(\vec{r})$ izražena je u prostornom prosjeku parametra reda po čitavom sustavu: $\frac{1}{V} \int d\vec{r} \bar{m}_\alpha(\vec{r})$. Prikazani su rezultati za rešetke veličine $L = 1024$ i $L = 2048$ tako da bismo ilustrirali da nehomogenosti perzistiraju povećanjem veličine sustava za relevantan nered, a nestaju kada je nered irelevantan. Ovakav krajolik je rezultat usrednjenja preko 10^6 ravnotežnih MC koraka. Slika izgleda kvalitativno jednako i usrednjenjem preko 10^5 MC koraka.

$i \approx 2.5$ za $L = 2048$. Zbog toga je 2.5 odabrana kao maksimalna vrijednost skale. Maksimalne vrijednosti za $q = 1$ su ≈ 1.8 za $L = 1024$ i ≈ 1.7 za $L = 2048$. Ove vrijednosti, određene na temelju jedne konfiguracije nereda, odražavaju trend povećavanja nehomogenosti reskaliranjem, za slučaj $q = 3$, a smanjivanja istih u slučaju $q = 1$.

Kad je nered relevantan pojavljuju se skupovi točaka na kojima je sustav uvijek uređen s vjerojatnošću $\propto 1$. Iz razloga što srednji parametar reda ide u 0 kako $L \rightarrow \infty$, normalizirana vrijednost $\overline{m}_\alpha(\vec{r})$ u tim točkama divergira. To se na slici 5.6 opaža kao komparativno veći udio svijetlih dijelova (koji odgovaraju višim vrijednostima $\overline{m}_\alpha(\vec{r})$) na većoj rešetci u odnosu na manju za $q = 3$ slučaj. Za razliku od toga, slučaj $q = 1$ pokazuje znatno blaže prostorne nehomogenosti. Vidi se da niti za $L = 1024$ ni za 2048 ne postoji preferirano mjesto uređivanja na rešetci kao za slučajeve $q = 3$, iako su lokalne nehomogenosti vidljive.

5.3.3 Korelacijske funkcije sustava s neredom

Korelacije unutar uređenog volumena u drugačijem su režimu nego izvan (slika 5.6). Zbog toga su određene tim volumenom pa je korelacijsku dužinu moguće definirati jedino u odnosu na zadanu konfiguraciju nereda α . Na primjer, ako promatramo lokalni parametar reda u dvije točke i i j unutar volumena uređivanja \check{V}_α , udaljene za $\propto L$, prosjek od $\overline{m}_i^\alpha \cdot \overline{m}_j^\alpha$ po termodinamičkom ansamblu, imati će uvijek vrijednost > 0 čak i u limesu $L \rightarrow \infty$. Ako promatramo isti prosjek u dvije točke koje su izvan tog volumena, na jednakoj udaljenosti kao u prethodnom slučaju, njegova vrijednost u limesu $L \rightarrow \infty$ može jedino biti 0 jer je fazni prijelaz kontinuiran, kako u našim računima i dobivamo.

Za sustav s neredom može se za observablu O definirati dvije vrste prostornih korelacijskih funkcija:

$$\Gamma_O(i, j, \alpha, T) = \overline{O_i^\alpha \cdot O_j^\alpha} - \overline{O_i^\alpha} \cdot \overline{O_j^\alpha} \quad (5.13)$$

$$\check{\Gamma}_O(i, j, T) = [\overline{O_i^\alpha \cdot O_j^\alpha}] - [\overline{O_i^\alpha}] \cdot [\overline{O_j^\alpha}] \quad (5.14)$$

Ove dvije vrste prostornih korelacijskih funkcija uveo je G.Grinstein [146] u prouča-

vanju feromagnetskog faznog prijelaza s nasumičnim poljima. Prema strukturi izraza (5.14) ta je funkcija povezana s Edwards–Andersonovim parametrom reda [33]. Autor napominje da je funkcija (5.14) karakteristična za sustave s neredom i da pokazuje divergenciju prostorne skale oko točke prijelaza. Nadalje, u fusnoti, bez daljnje razrade navodi da je za sustav s nasumičnim interakcijama, kakav mi proučavamo, (5.14) različita od nule jedino za $T < T_C$. Argumenti o netrivialnoj prostornoj raspodjeli lokalnog parametra reda, koje smo iznijeli, daju dokaze da je pri $T = T_C$ ponašanje te korelacijske funkcije netrivialno i da dominira nad termodinamičkim fluktuacijama opisanom funkcijom (5.13).

Izraz (5.13), pri temperaturi prijelaza, predstavlja tipičnu korelacijsku funkciju za jednu konfiguraciju nereda α , a (5.14) predstavlja prostornu korelacijsku funkciju srednjih vrijednosti observabli u ansamblu nereda. Naglasimo da je uvođenje ove dvije vrste korelacijskih funkcija prirodni nastavak ideja o separiranosti termodinamičkih fluktuacija i fluktuacija u ansamblu nereda koje smo uveli u odjeljcima 3.4.1 i 3.4.3. Zbog dominantnosti fluktuacija nereda nad termodinamičkim fluktuacijama pri faznom prijelazu, koju smo demonstrirali, ima smisla raditi prosjek po neredu pri jedinstvenoj temperaturi jedino za izraz (5.14). Prosjek po neredu tipične korelacijske funkcije pri jedinstvenoj temperaturi, ako je $y_\tau > \tilde{y}_\tau$, u termodinamičkoj granici ne uključuje konfiguracije tipične za kritično ponašanje. Zbog toga se informacija o singularitetu koji opisuje tipične korelacije gubi.

Ako postoji zamrzavanje srednjih vrijednosti u ansamblu nereda i ako je ponašanje srednjih vrijednosti razvezano od termodinamičkih fluktuacija, dvije korelacijske funkcije su također nezavisne. Svi rezultati koje dobivamo konzistentni su s tvrdnjom da je karakteristična duljina opadanja srednje korelacijske funkcije (5.14), duljina uređivanja ili Chayesova duljina (odjeljak 3.2.4) koju označavamo sa ζ . Karakteristična duljina opadanja tipične korelacijske funkcije (5.13) je korelacijska duljina ξ . U slučaju irelevantnog nereda (ili čistom sustavu), kada je $y_\tau < \frac{d}{2}$, korelacijska duljina identična je duljini uređivanja jer su termodinamičke fluktuacije dominantne nad tendencijom zamrzavanja stupnjeva slobode zbog nereda. Ali kada je nered relevantan i $y_\tau > \tilde{y}_\tau$, divergencija duljine uređivanja ζ određena je eksponentom \tilde{y}_τ , a divergencija korelacijske duljine ξ s $y_\tau = \frac{1}{\nu}$.

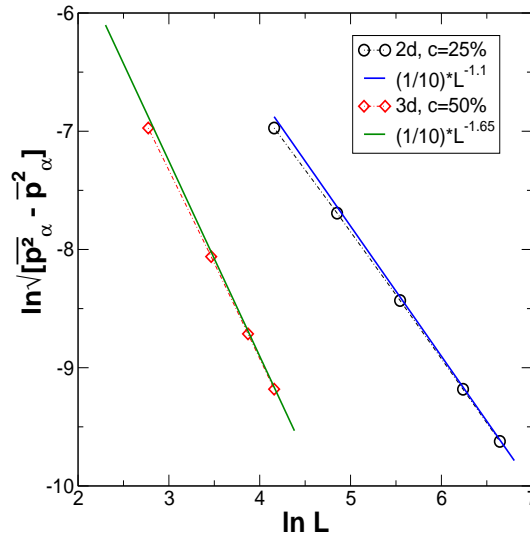
6. Kritični eksponenti sustava s neredom

U ovom poglavlju izložimo rezultate za kritične eksponente na primjerima u 2 i 3d Pottsovog modela. Primjer perkolacije navodimo u svrhu ilustracije načina na koji se irelevantnost nereda očituje u računima EIC algoritmom. Od slučajeva u kojima je nered relevantan razmatramo zasebno slučajeve u 2 i 3d. Pokazujemo da u slučaju relevantnog nereda, činjenica da prostorne nehomogenosti perzistiraju na svim skalama na točki prijelaza, ima snažne implikacije na kritično ponašanje, kako smo i diskutirali u odjeljku 3.4.

6.1 Primjer irelevantnog nereda - perkolacija

Granica u kojoj je nered irelevantan trebala bi pokazati termodinamičke eksponente čistog modela. Slobodna energija sustava pri prijelazu trebala bi biti opisana izrazom (3.7) koji opisuje fazni prijelaz drugog reda u efektivno translacijski invarijantnom sustavu. Zbog ovih svojstava promatrali smo slučajeve perkolacije ($q = 1$ Potts) u 2 i 3d s neredom kao svojevrсни "kontrolni" slučaj rezultata EIC algoritma. Kritični eksponenti kojima je određen fazni prijelaz u čistom slučaju su $y_\tau = \frac{3}{4}$ i $y_h = \frac{91}{48}$ za 2d [20] i $y_\tau = 1.1450(7)$ i $y_h = 2.5226(1)$ [147] za 3d slučaj.

U oba slučaja vrijedi nejednakost $dv > 2$ što prema Harrisovom [41] kriteriju znači irelevantnost nereda. Jedini učinak uvođenja zamrznutog nereda bi trebao biti normalan (Gaussov) rasap kvazikritičnih temperatura. Irelevantnost nereda očituje se u činjenici da se utjecaj nereda ne "veže" na dugodosežne korelacije pri faznom prijelazu pa su fluktuacije kritičnih temperatura slučajne varijable i slijedi da je eksponent koji



Slika 6.1: Skaliranje $\sqrt{[\bar{p}_\alpha^2 - \bar{p}_\alpha^2]}$ u odnosu na nametnute EIC restrikcije za irelevantne slučajeve nereda.

Tablica 6.1: Analiza skaliranja standardne devijacije $\sqrt{[\bar{p}_\alpha^2 - \bar{p}_\alpha^2]}$ linearnom regresijom za slučajeve irelevantnog nereda. Pretpostavljamo jednopotencijsku funkcionalnu ovisnost f_1 (4.34) s eksponentom b

	N_a, ν	b - sve točke	b najveće dvije
2d, $c = 25\%$	1000, $\frac{1}{10}L^{-1.1}$	1.063	1.088
3d, $c = 50\%$	500, $\frac{1}{10}L^{-1.65}$	1.592	1.626

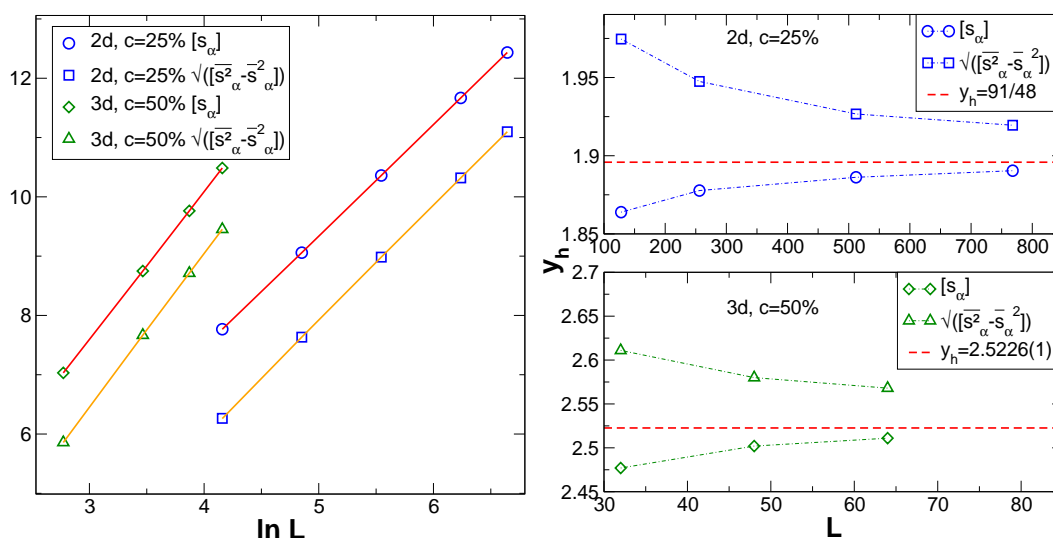
ih opisuje $\tilde{y}_\tau = \frac{d}{2}$. Očekujemo također da omjer samousrednjavanja R_m teži u nulu u granici $L \rightarrow \infty$, kao mjera utjecaja nereda na fazni prijelaz.

Parametri EIC algoritma su $\nu = \frac{1}{10} \cdot L^{-1.1}$ i $N_a = 1000$ za 2d i $\nu = \frac{1}{10} \cdot L^{-1.65}$ i $N_a = 1000$ za 3d slučaj. Rezultantno skaliranje $\sqrt{[\bar{p}_\alpha^2 - \bar{p}_\alpha^2]}$ konzistentno je s nametnutim ograničenjem algoritma za oba slučaja. Analiza skaliranja ove veličine prikazana je u tablici 6.1, a vrijednosti su prikazane na slici 6.1. Za 2d računi su provedeni na rešetkama veličina $L = 64, 128, 256, 512$ i 768 , a za 3d na $L = 16, 32, 48$ i 64 . Rezultati su sažeti u dodacima A i B. Statistika nereda bila je 300 – 200 konfiguracija za 2d slučaj i 400 konfiguracija za 3d slučaj. Takva statistika dovoljna je za ilustraciju osnovnih svojstava ponašanja iz kojih se vidi irelevantnost nereda.

Može se vrlo precizno provjeriti da je eksponent skaliranja mase najvećeg grozda, $y_h = d - \frac{d}{\nu}$, usrednjene po ansamblu nereda $[s_\alpha]$ za ove slučajeve s neredom isti kao u

Tablica 6.2: Analiza skaliranja mase najvećeg grozda $[s_\alpha]$ i standardne devijacije $\sqrt{[s_\alpha^2] - \bar{s}_\alpha^2}$ usrednjene po ansamblu nereda. Radi ilustracije koristimo linearnu regresiju kroz dvije točke kao i ugađanje podataka za $[s_\alpha]$ i $\sqrt{[s_\alpha^2] - \bar{s}_\alpha^2}$ na dvopotencijsku ovisnost f_2 (4.36).

	2d, c = 25%		3d, c = 50%	
	y_h ($[s_\alpha]$)	y_h ($[s_\alpha^2] - \bar{s}_\alpha^2$)	y_h ($[s_\alpha]$)	y_h ($[s_\alpha^2] - \bar{s}_\alpha^2$)
64 – 128	1.864	1.975	16 – 32	2.477
128 – 256	1.878	1.948	32 – 48	2.502
256 – 512	1.886	1.927	48 – 64	2.511
512 – 768	1.890	1.920	-	-
y_h iz f_2	1.898(5)	1.908(8)	-	2.52(1)
y_h iz [20] i [147]	$\frac{91}{48} = 1.8958\bar{3}$		2.5226(1)	

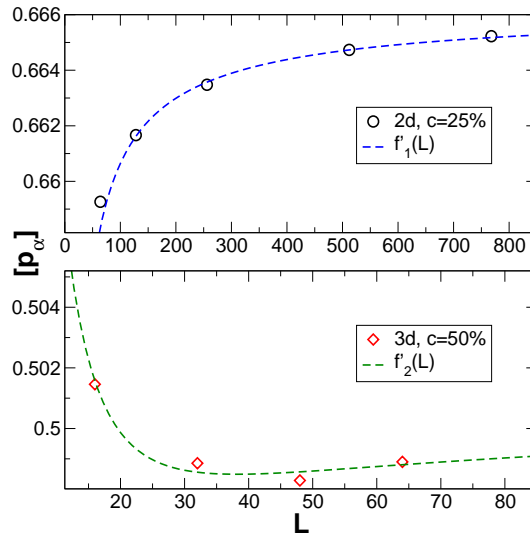


Slika 6.2: Lijevo: skaliranje $[s_\alpha]$ i $[s_\alpha^2] - \bar{s}_\alpha^2$ za dva slučaja kad je nered irelevantan, Pune crte označavaju najbolje ugađene dvopotencijske funkcije oblika f_2 ; Desno: Eksponenti $y_h = d - \frac{\beta}{\nu}$ izračunati iz podataka za srednje vrijednosti i standardne devijacije linearnom regresijom kroz dvije točke uspoređeni s egzaktnim [20] ili najboljim vrijednostima [147] iz prijašnjih radova.

čistom slučaju. Skaliranje termodinamičkih fluktuacija mase najvećeg grozda, također očekujemo da pokazuje skaliranje s jednakim eksponentom.

$$[s_\alpha](L) \propto a_s \cdot L^{d - \frac{\beta}{\nu}} + \dots \quad (6.1)$$

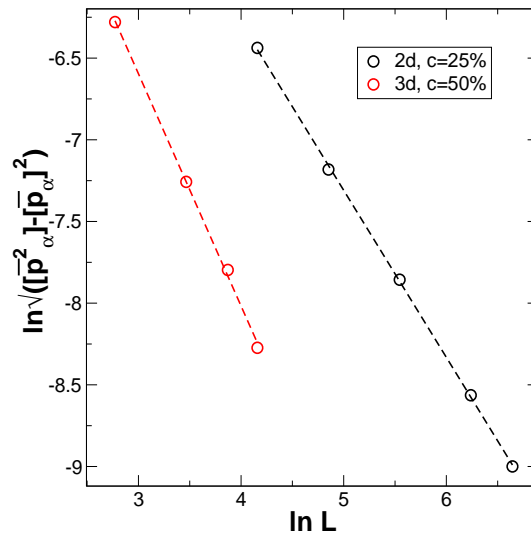
$$\sqrt{[s_\alpha^2] - \bar{s}_\alpha^2} \propto a_{ds} \cdot L^{d - \frac{\beta}{\nu}} + \dots \quad (6.2)$$



Slika 6.3: Konvergencija srednjih vrijednosti $[\bar{p}_\alpha]$ za irelevantne slučajeve nereda, uspoređena s najbolje ugođenom potencijском funkcijom oblika f'_1 (4.35) za 2d slučaj. Za 3d slučaj nije bilo moguće ocijeniti eksponente ugađanjem pa uz podatke prikazujemo funkciju oblika f'_2 (4.37) koja sadrži najbolji poznati eksponent [147] čistog slučaja.

Unatoč korekcijama skaliranja za oba slučaja, na slici 6.2 desno, vidimo da magnet-ski eksponent y_h jako dobro konvergira u vrijednost od čistoga modela. Ugađanjem vrijednosti $[s_\alpha]$ i $\sqrt{[s_\alpha^2 - \bar{s}_\alpha^2]}$ na dvopotencijsku ovisnost oblika f_2 (4.36) dobivamo vrijednosti eksponenta y_h koje su do na statističku nepouzdanost jednake čistim vrijednostima. Detaljna analiza konvergencije navedena je u tablici 6.2. Naši rezultati potvrđuju da nemagnetični nered ne mijenja eksponent y_h .

Jedini način određivanja termalnog eksponenta y_τ je preko konvergencije srednje vrijednosti $[\bar{p}_\alpha]$ pošto je energija za $q = 1$ slučaj Pottsovog modela konstantna u termodinamičkom ansamblu. Čak i u čistom slučaju određivanje eksponenta konvergencije $[\bar{p}_\alpha]$ je za red veličine nepouzdanije nego preko fluktuacija energije (odjeljak 4.5.2). Razlog nepouzdanosti je mala vrijednost eksponenta y_τ u odnosu na eksponente korekcija skaliranja. Za slučaj s neredom nepouzdanosti su znatno gore. Ugađanjem na funkcijsku ovisnost f'_1 najbolja procjena eksponenta y_τ za 2d slučaj iznosi 0.57(8) u usporedbi s egzaktnom vrijednosti $y_\tau = \frac{3}{4}$. Mala vrijednost y_τ eksponenta, u odnosu na eksponent korekcija skaliranja, čini ugađanje osjetljivim na korekcije zbog utjecaja nereda što vjerujemo da je izvor odstupanja. Na slici 6.3 prikazane su vrijednosti i najbolje ugođena funkcija oblika f'_1 .

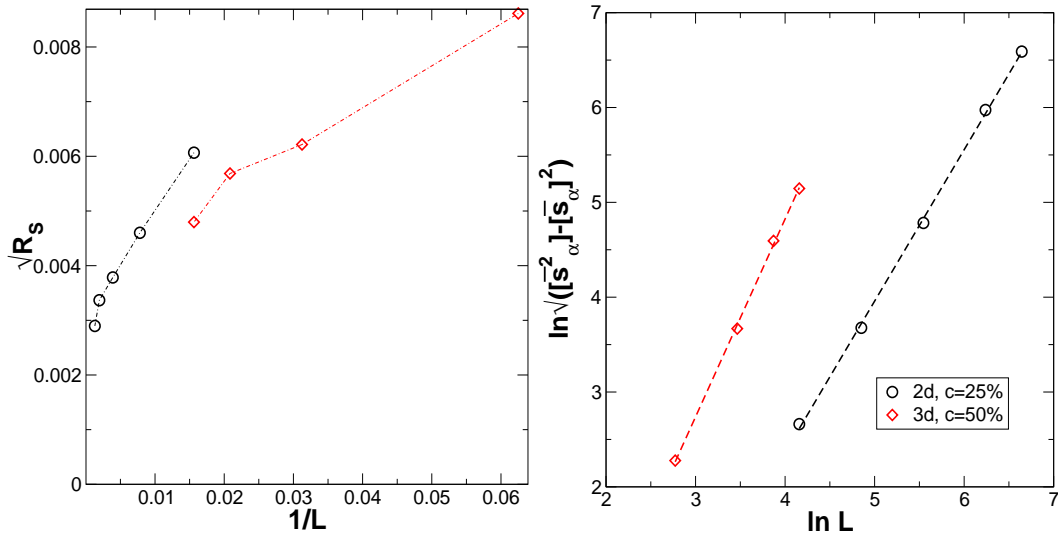


Slika 6.4: Skaliranje $\sqrt{[\bar{p}_\alpha^2] - [\bar{p}_\alpha]^2}$ za irelevantne slučajeve nereda na logaritamskoj skali. Crtkane linije označavaju najbolje pravce linearne regresije koji daju eksponente $\tilde{y}_\tau = 1.02(3)$ za 2d i $\tilde{y}_\tau = 1.46(6)$ za 3d. Vrijednosti tih eksponenata se dobro slažu s očekivanom vrijednošću od $\frac{d}{2}$

Radi malog broja točaka nije moguće ugađanjem odrediti eksponent za 3d slučaj. Konvergencija u ovom slučaju nije monotona pa zaključujemo da su u ovom rasponu veličina sastoji od dva usporedivo snažna potencijska doprinosa. Pretpostavljamo da je konvergencija dominantno određena eksponentom čistog modela, koji iznosi $y_\tau = 1.1450(7)$ [147]. Očekivana korekcija skaliranja je zbog slučajnih fluktuacija uzrokovanih neredom $\propto L^{-1.5}$. Na slici 6.3 uz rezultate za 3d slučaj također prikazujemo najbolje ugođenu funkciju oblika f_2' . Slaganje je znatno slabije nego u 2d slučaju, no vidljivo je da se nemonotonost može objasniti dvopotencijskim oblikom.

Irelevantnost nereda se vidi na skaliranju standardne devijacije $\sqrt{[\bar{p}_\alpha^2] - [\bar{p}_\alpha]^2}$. Rezultati ne pokazuju znatne efekte promjene režima, ali pokazuju statistički šum zbog male statistike nereda. Najbolje procjene eksponenata \tilde{y}_τ su: 1.02(3) za 2d i 1.46(6) za 3d slučaj, a vrijednosti su prikazane na slici 6.4. Vrijednosti eksponenata se dobro slažu s očekivanim vrijednostima $\frac{d}{2}$.

Irelevantnost nereda može se demonstrirati i na primjeru omjera samousrednjavanja veličine najvećeg grozda u ansamblu nereda:



Slika 6.5: Lijevo: konvergencija samousrednjavanja veličine najvećeg grozda $\sqrt{R_s}$; Desno: konvergencija $\sqrt{[s_\alpha^2] - [s_\alpha]^2}$. Crtkane linije označavaju pravce linearne regresije koji daju eksponente $\tilde{y}_h = 1.60(5)$ za 2d i $\tilde{y}_h = 2.08(8)$ za 3d, koji su manji za oba slučaja od pripadnih eksponenata y_h .

$$\sqrt{R_s} = \frac{\sqrt{[s_\alpha^2] - [s_\alpha]^2}}{[s_\alpha]} \equiv \sqrt{R_m}. \quad (6.3)$$

Na slici 6.5 prikazana je konvergencija $\sqrt{R_s(L)}$. Srednji eksponenti konvergencije $\sqrt{[s_\alpha^2] - [s_\alpha]^2}$ su $\tilde{y}_h = 1.60(5)$ za 2d i $\tilde{y}_h = 2.08(8)$ za 3d, što objašnjava naglu promjenu oko $\frac{1}{L} \rightarrow 0$. Konvergencija $\sqrt{[s_\alpha^2] - [s_\alpha]^2}$ ne pokazuje znatne promjene režima kako je vidljivo na slici 6.5. Iz razloga što su eksponenti u oba slučaja manji od pripadnih eksponenata y_h zaključujemo da je $\lim_{L \rightarrow \infty} \sqrt{R_s} = 0$.

Najvažniji zaključak koji se može izvući iz ovog primjera irelevantnog nereda, jest da usrednjavanje veličina pri kvazikritičnim temperaturama za svaku konfiguraciju nereda α uvijek daje ispravan rezultat jer omogućuje nezavisno određivanje fluktuacija i ne uključuje nikakve pretpostavke o njima. Za razliku od usrednjavanja pri jedinstvenoj temperaturi, koje samo po sebi uključuje snažne pretpostavke o sustavu i kojim se zbog toga, može izgubiti informacija o termodinamičkim eksponentima, kako smo opisali u odjeljcima 3.2.2 i 3.2.4. Na primjer, iako u našem računu ne pretpostavljamo oblik slobodne energije u obliku (3.7), rezultati pokazuju da je taj oblik ispravan u

ovom slučaju, jer je nered irelevantan. Usrednjavanje slobodne energije pri jedinstvenoj temperaturi s druge strane, vodi na opis oblikom slobodne energije (3.7), bio on ispravan ili ne. U slijedeća dva odjeljka 6.2 i 6.3, pokazat ćemo da u svim slučajevima u kojima je nered relevantan, koje smo promatrali naš pristup usrednjavanju daje drastično različite rezultate od usrednjavanja pri jedinstvenoj temperaturi i da korištenje oblika slobodne energije (3.7) nije opravdano.

6.2 Slučajevi relevantnog nereda u 2D

6.2.1 Interes

U ovom odjeljku cilj je proučiti utjecaj nereda na fazni prijelaz za slučajeve kad je nered relevantan pa se stoga fokusiramo na slučajeve $q > 2$. Marginalni slučaj relevantnosti $q = 2$, ne promatramo jer je znatno kompliciraniji zbog logaritamskih korekcija skaliranju, a cilj u ovom radu je dobiti opću sliku prijelaza s neredom.

Razmatramo slučajeve $q = 3$ i 8 . U slučaju $q = 3$, koji u čistom modelu ima fazni prijelaz drugog reda, želimo istražiti utjecaj nereda na promjenu kritičnih eksponenata. U slučaju $q = 8$ želimo proučiti fenomen zaokruživanja faznog prijelaza prvog reda. Osnovna koncentracija nereda pri kojoj računamo je $c = 25\%$. Za tako visoku koncentraciju očekujemo da je sustav i za numerički dostupne veličine ($L \lesssim 1000$), u režimu dominantnog utjecaja nereda na kritično ponašanje uz relativno mali utjecaj čiste fiksne točke. Za $q = 3$ račune smo proveli i u slučaju $c = 12.5\%$ gdje se također naknadno ispostavlja da su efekti čiste fiksne točke relativno mali, iako ih je moguće primijetiti na konvergenciji $[\bar{p}_\alpha](L)$, kako ćemo pokazati u odjeljku 6.2.4.

Zaključak do kojega ovim računima dolazimo, a koji je jednak i za slučajeve relevantnog nereda u 3d, jest da je eksponent fluktuacije kvazikritičnih temperatura \tilde{y}_τ u ansamblu nereda uvijek dominantan nad termičkim eksponentom y_τ koji određuje divergenciju korelacijske duljine ξ . Zbog toga je promatranje prijelaza na način opisan u odjeljcima 3.4 nužnost. U protivnom, informacija o termodinamičkim fluktuacijama potpuno se gubi, kako je opisano u odjeljku 3.2.4.

Prvo izložimo rezultate za termodinamičke kritične eksponente jer oni nose informaciju o ponašanju toplinskog kapaciteta i magnetske susceptibilnosti oko točke

prijelaza. Bitno je istaknuti da je ovo prvi rad u kojemu se ti eksponenti računaju usrednjavanjem pri vlastitim kvazikritičnim temperaturama svake konfiguracije nereda. Nakon toga izlažemo rezultate koji se mogu usporediti s rezultatima dosadašnjih radova. Ti rezultati uključuju veličine povezane s fluktuacijama srednjih vrijednosti u ansamblu nereda, koje su neosjetljive na način usrednjavanja.

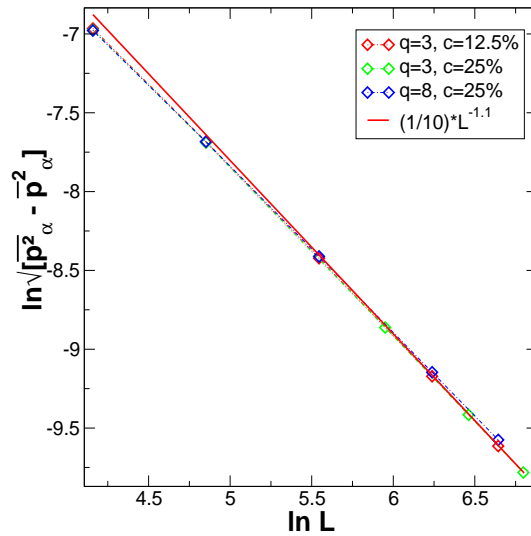
Eksponenti termodinamičkih fluktuacija koje dobivamo su vrlo precizni, uglavnom do na 4. pouzdanu znamenku. Bitno je napomenuti da gotovo sve raspodjele termodinamičkih fluktuacija koje smo dobili, a pogotovo energije, pokazuju relativno male korekcije skaliranja u odnosu na dominantno skaliranje, nakon što su iz njih uklonjene fluktuacije srednjih vrijednosti u ansamblu nereda. Takva konstatacija stoji unatoč činjenici da su u radu korištene vrlo visoke koncentracije nereda. Kvaliteta podataka za termodinamičke fluktuacije je dovoljna da su statističke nepouzdanosti točaka redovito znatno manje od korekcija skaliranja, što nam dopušta njihovo uzimanje u obzir u ugađanju na funkcijsku ovisnost.

Razlog zbog kojega su termodinamički eksponenti pouzdani jest u tome što se raspodjele termodinamičkih observabli za različite konfiguracije nereda znatno manje razlikuju (slika 5.1) kada se računaju pri kvazikritičnoj temperaturi svake konfiguracije nereda α , nego kada se računaju pri jedinstvenoj temperaturi. Raspodjele termodinamičkih observabli oko srednjih kritičnih vrijednosti za svaku konfiguraciju nereda pokazuju znatno bolja svojstva samousrednjavanja od, na primjer, srednjih vrijednosti po ansamblu nereda. Provjerili smo da broj konfiguracija nereda može biti i do red veličine manji, a da preciznost termodinamičkih eksponenata bude do na 3. pouzdanu znamenku.

Preciznost eksponenata koji opisuju fluktuacije u ansamblu nereda se kreće do na 3. ili 2. pouzdanu znamenku. Svojstva samousrednjavanja srednjih vrijednosti i njihovih fluktuacije po ansamblu nereda znatno su lošija nego za termodinamičke fluktuacije. Čak i s 700-1400 konfiguracija, koliko smo računali statistički šum tih veličina je znan.

6.2.2 Detalji simulacija

Unatoč EIC algoritmu numerički računi su vrlo zahtjevni jer je zbog nedostatka samousrednjavanja potrebno je napraviti statistike jednakog broja konfiguracija nereda za



Slika 6.6: Skaliranje $\sqrt{[p_\alpha^2 - \bar{p}_\alpha^2]}$ u odnosu na nametnutu restrikciju $\frac{1}{10} \cdot L^{-1.1}$.

svaku veličinu sustava. Za primjer navodimo da računanje dovoljne termodinamičke statistike (20000 MC koraka) za jednu konfiguraciju nereda za sustav s najvećom promatranom veličinom od $L = 896$ traje otprilike $28h$, zajedno s termalizacijom na procesoru Intel Xeon E5405 (2.0GHz). Vrijeme simulacije ovisi o broju spinova u sustavu $\propto L^2$. Brzina računanja vrlo malo ovisi o parametru q Pottsovog modela i gornja procjena varira otprilike 10%. Statistike nereda za tri slučaja su 400 za $q = 3$, $c = 12.5\%$; 600 za $q = 3$, $c = 25\%$ i 1200 za $q = 8$, $c = 25\%$ (rezultati računa navedeni su u dodatku A). Za $q = 8$ i $q = 3$ slučaj s koncentracijom 12.5%, veličine rešetaka koje koristimo su: $L = 64, 128, 256, 512, 768$. Za $q = 3$ s koncentracijom od 25% koristimo rešetke veličine $L = 64, 128, 384, 640$ i 896 .

Parametri EIC algoritma, odabrani su vrlo konzervativno, na temelju nekoliko probnih simulacija, anticipirajući znatno produljivanje autokorelacijskog vremena u sustavu s neredom. Iznose $\nu = \frac{1}{10} \cdot L^{-1.1}$ i $N_a = 1000$. Pokazuje se da je taj odabir zadovoljavajući, jer se u svim slučajevima vrijednosti $[p_\alpha^2 - \bar{p}_\alpha^2]$ skaliraju prema nametnutom ograničenju (slika 6.6).

U tablici 6.3 sažeta je analiza skaliranja za standardnu devijaciju $\sqrt{[p_\alpha^2 - \bar{p}_\alpha^2]}$ koja pokazuje da ona ne premašuje širinu Gaussove raspodjele $\propto L^{-\frac{d}{2}}$. Na slici 6.6 uspoređene su vrijednosti $\sqrt{[p_\alpha^2 - \bar{p}_\alpha^2]}$ s nametnutim ograničenjem $\nu = \frac{1}{10} \cdot L^{-1.1}$.

Tablica 6.3: Analiza skaliranja standardne devijacije $\sqrt{[p^2_\alpha - \bar{p}^2_\alpha]}$ linearnom regresijom na logaritmirane vrijednosti za slučajeve relevantnog nereda u 2d. Pretpostavljamo jednopotencijsku ovisnost oblika f_1 .

	N_α, ν	b - sve točke	b najveće dvije
$q = 3, c = 12.5\%$	$1000, \frac{1}{10}L^{-1.1}$	1.069	1.091
$q = 3, c = 25\%$	$1000, \frac{1}{10}L^{-1.1}$	1.067	1.088
$q = 8, c = 25\%$	$1000, \frac{1}{10}L^{-1.1}$	1.046	1.058

6.2.3 Fluktuacije termodinamičkog ansambla

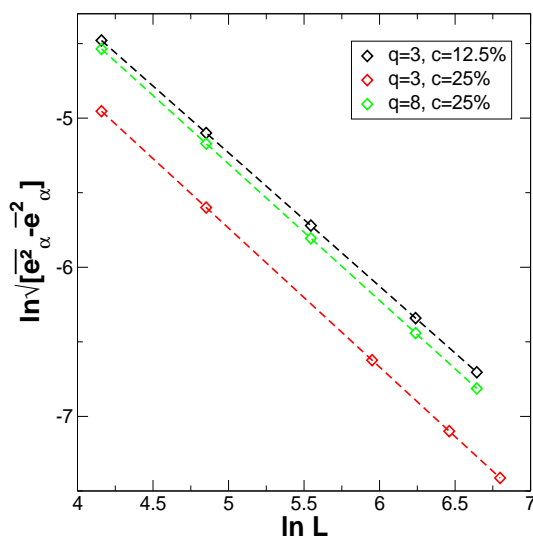
Fluktuacije gustoće energije u termodinamičkom ansamblu, $[e^2_\alpha - \bar{e}^2_\alpha]$, daju informaciju o kritičnom ponašanju toplinskog kapaciteta u sustavu, prema izrazu (3.42). Na slici 6.7 one su prikazane u ovisnosti o veličini sustava na ln–ln grafu. Pravci dobro opisuju prikazane točke, a korekcije skaliranja su ispod razine statističke nepouzdanosti. Pripadni eksponent skaliranja standardne devijacije gustoće energije je $x = d - y_\tau$ (izraz 3.40). Analiza skaliranja i vrijednosti eksponenta su prikazane u tablici 6.4 gdje također navodimo i vrijednosti termalnog kritičnog eksponenta y_τ izračunatog iz najbolje vrijednosti x (označene masnim slovima u tablici 6.4). Kao ilustraciju da raspodjele $\mu([e_\alpha - \bar{e}_\alpha])$ imaju identične oblike prikazujemo ih reskalirane s pripadnim eksponentima na slici 6.8. Vrijednosti eksponenata su vrlo slične za sve slučajeve, ali zbog nemogućnosti procjene perzistentnih korekcija skaliranju na termodinamičke eksponente preciznije tvrdnje o univerzalnosti nije moguće dati.

Vrijednosti y_τ su izvan Chayesove granice [63] koja u ovom slučaju iznosi $\frac{d}{2} = 1$. To je posljedica razvezanosti termodinamičkih i fluktuacija u ansamblu nereda okviru rasprave o samousrednjavanju iz poglavlja 3. Prema relaciji između kritičnih eksponenata (1.9), ovaj rezultat implicira da toplinski kapacitet divergira oko točke prijelaza za pojedinu konfiguraciju nereda. Implicira također da je u sustavima s neredom korelacijska duljina ζ_α za neku konfiguraciju nereda α pri kvazikritičnoj točki subdominantna duljini uređivanja ζ , čije fluktuacije u ansamblu nereda uzrokuju fluktuacije kvazikritičnih temperatura. Rezultat usrednjavanja pri jedinstvenoj temperaturi za ove slučajeve, je gubitak informacije o termodinamičkim fluktuacijama.

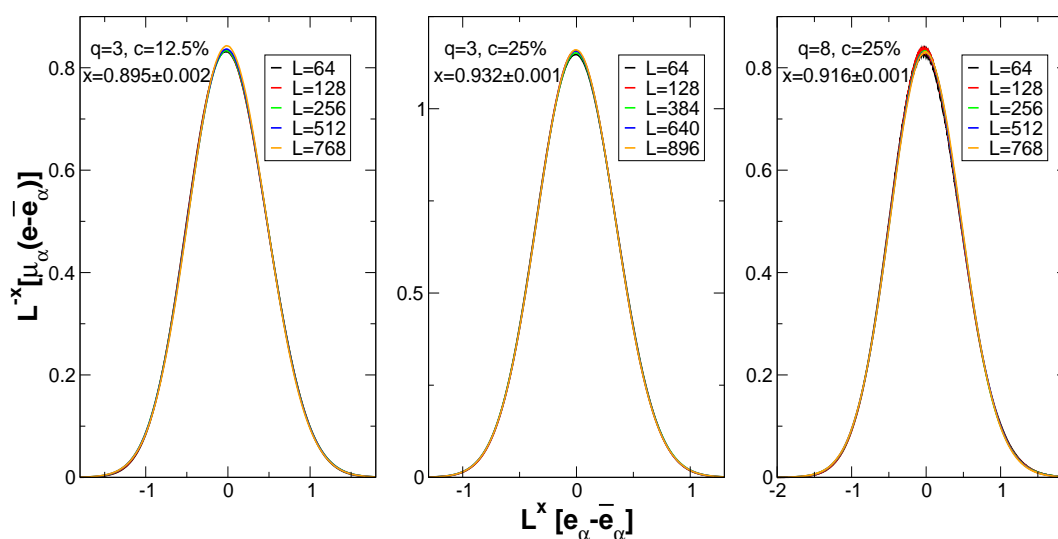
Rezultati za termodinamičke fluktuacije Pottsovog parametra reda daju informaciju o kritičnom ponašanju magnetske susceptibilnosti prema izrazu (3.43). Za određivanje fluktuacija parametra reda pristup određivanju kritičnih eksponenata je sličan kao za fluktuacije energije, ali rezultati pokazuju korekcije skaliranja. Raspodjela $[m_\alpha - \bar{m}_\alpha]$

Tablica 6.4: Analiza skaliranja standardne devijacije $\sqrt{[e^2_\alpha - \bar{e}_\alpha^2]}$ za slučajeve relevantnog nereda u 2d. Koristi se potencijska ovisnosti tipa f_1 .

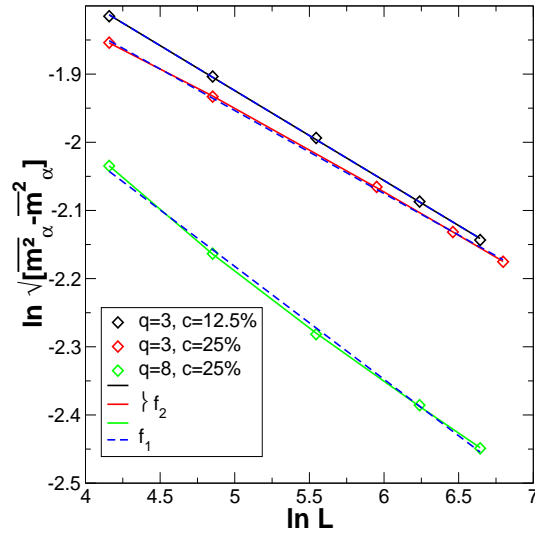
	x, f_1 - sve točke	x, f_1 bez $L = 64$	y_τ
$q = 3, c = 12.5\%$	0.895(2)	0.896(3)	1.105(2)
$q = 3, c = 25\%$	0.932(1)	0.932(2)	1.068(1)
$q = 8, c = 25\%$	0.916(1)	0.916(3)	1.084(1)



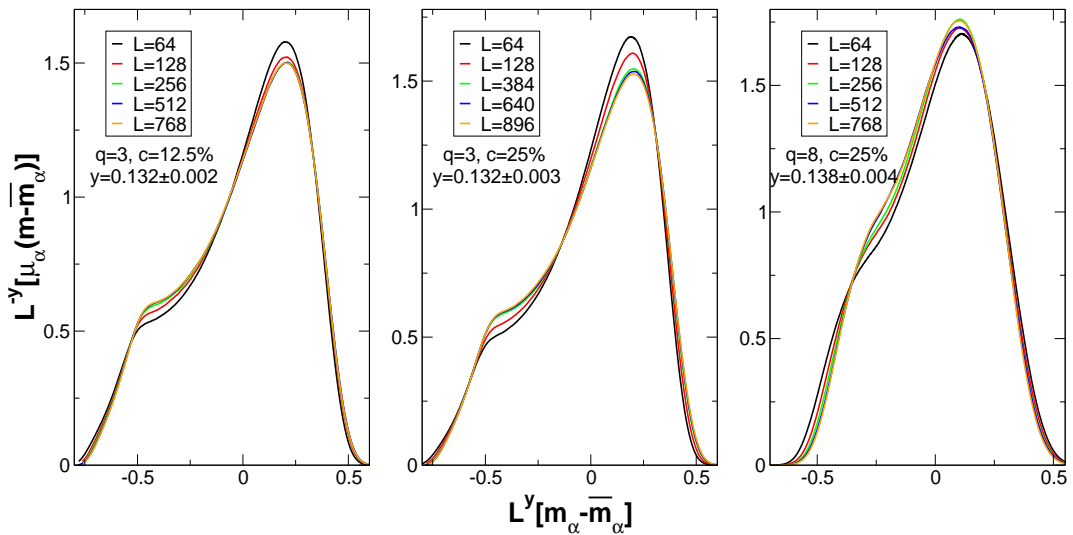
Slika 6.7: Skaliranje $\sqrt{[e^2_\alpha - \bar{e}_\alpha^2]}$ zajedno s najbolje ugođenim funkcijama oblika f_1 .



Slika 6.8: Raspodjele od $[e_\alpha - \bar{e}_\alpha]$ reskalirane pripadnim eksponentima x za različite slučajeve parametra Pottsovog modela q i koncentracije nereda c .



Slika 6.9: Skaliranje $\sqrt{[m_\alpha^2 - \bar{m}_\alpha^2]}$ u ovisnosti o L zajedno s najbolje ugođenim dvopotencijskim funkcijama oblika f_2 i f_1 .



Slika 6.10: Raspodjele od $[m_\alpha - \bar{m}_\alpha]$ reskalirane pripadnim eksponentima y za različite slučajeve parametra Pottsovog modela q i koncentracije nereda c .

Tablica 6.5: Analiza skaliranja standardne devijacije $\sqrt{[m^2_\alpha - \bar{m}^2_\alpha]}$ za slučajeve relevantnog nereda u 2d. Koriste se jedno- i dvopotencijska ovisnosti tipa f_1 i f_2 . S y_1 označen je eksponent korekcije skaliranja dvopotencijske funkcije f_2 .

	y, f_1	χ^2	y, f_2	y_1, f_2	χ^2	y_h
$q = 3, c = 12.5\%$	0.132(2)	$1.7 \cdot 10^{-5}$	-	-	-	1.868(2)
$q = 3, c = 25\%$	0.122(7)	$3.6 \cdot 10^{-5}$	0.132(3)	-0.8(1)	$2.5 \cdot 10^{-6}$	1.868(3)
$q = 8, c = 25\%$	0.166(8)	$2.1 \cdot 10^{-4}$	0.138(4)	-0.7(1)	$7.6 \cdot 10^{-6}$	1.862(4)

Tablica 6.6: Usporedba termodinamičkih kritičnih eksponenata y_τ i y_h u sustavima s neredom i egzaktih eksponenata za čiste slučajeve za dvodimenzionalne slučajeve.

	EIC - prijelaz s neredom		egz. eksp. za čisti slučaj	
	y_τ	y_h	y_τ	y_h
$q = 3, c = 12.5\%$	1.105(2)	1.868(2)	1.2[20]	1.86[20]
$q = 3, c = 25\%$	1.068(1)	1.868(3)		
$q = 8, c = 25\%$	1.084(1)	1.862(4)		

se prema izrazu (3.41) u termodinamičkom limesu skalira s eksponentom $y = \frac{\beta}{v} = d - y_h$. Na slici 6.9 prikazane su vrijednosti $\sqrt{[m^2_\alpha - \bar{m}^2_\alpha]}$ u ovisnosti o L iz kojih se vidi da ta ovisnost nije jednostavna potencijska oblika f_1 , osim u slučaju $q = 3, c = 12.5\%$. Za ostale slučajeve koristimo ugađanje na dvopotencijsku funkciju f_2 . Analiza konvergencije prikazana je u tablici 6.5 u kojoj su također i odgovarajuće vrijednosti eksponenta y_h . Na slici (6.10) prikazan je kolaps raspodjela veličine $[m - \bar{m}_\alpha]$ s najboljim vrijednostima vodećeg eksponenta y . Na toj slici se vidi da u sva tri slučaja reskalirane raspodjele mijenjaju oblik u ovisnosti o L . Odatle potječu korekcije skaliranja koje su već uočene na vrijednostima $\sqrt{[m^2_\alpha - \bar{m}^2_\alpha]}$. Također se može vidjeti da u slučajevima $q = 3$ kolaps postaje sve bolji za veće L , što je indicacija da su za najveće rešetke korekcije skaliranja zanemarive. U slučaju $q = 8$ korekcije skaliranja ostaju vidljive i za najveće promatrane rešetke. Kao i u slučaju eksponenta y_τ sve vrijednosti su međusobno bliske uz to što su za $q = 3$ slučajeve identične.

Ovaj rad je, koliko znamo prvi koji računa eksponente kritičnih fluktuacija termodinamičkog ansambla. Unatoč teorijskim radovima koji argumentiraju da usrednjavanje slobodne energije pri jedinstvenoj temperaturi može dovesti do potpunog gubitka informacije o termodinamičkim fluktuacijama [65, 121], ovakva studija do sada nije provedena. Vrijednosti termodinamičkih eksponenata koje dobivamo uspoređene su s eksponentima prijelaza u čistim slučajevima u tablici 6.6. Prema očekivanju, nered ima relevantan utjecaj na oba slučaja. Za $q = 3$ slučaj utjecaj na termalni eksponent

y_τ je značajniji nego na y_h . Efekt nereda je drastičan na ponašanje prijelaza prvog reda u slučaju $q = 8$. Prijelaz postane kontinuiran i javljaju se eksponenti čije su vrijednosti slične kao u $q = 3$ slučajevima. Valja istaknuti preciznost kojom je moguće računati eksponente termodinamičkih fluktuacija pomoću EIC algoritma

Vrijednosti eksponenta $\frac{\beta}{v}$ vrlo su bliske eksponentu $d - \tilde{y}'_h$ (pogledati odjeljak 6.2.5) koji određuje konvergenciju srednje termodinamičke vrijednosti parametra reda u ansamblu nereda. Vrijednosti tih dvaju eksponenata, za sve 2d slučajeve koje promatramo, su unutar statističkih nepouzdanosti iako nije jasno zašto bi ti eksponenti bili isti.

U postupku usrednjavanja pri jedinstvenoj temperaturi, perzistentno različito ponašanje u ovisnosti o koncentraciji nereda eksplicitno ulazi u račun svih observabli. Komparativna prednost EIC metode je u tome što su ove fluktuacije u znatnoj mjeri separirane i ne ulaze u račun termodinamičkih fluktuacija, koje prezentiramo u ovom odjeljku. Kao posljedica toga primjećujemo znatno veću neosjetljivost termodinamičkih kritičnih eksponenata za slučaj $q = 3$ o koncentraciji nereda, nego što je to slučaj za rezultate kritičnih eksponenata što opisuju fluktuacije u ansamblu nereda.

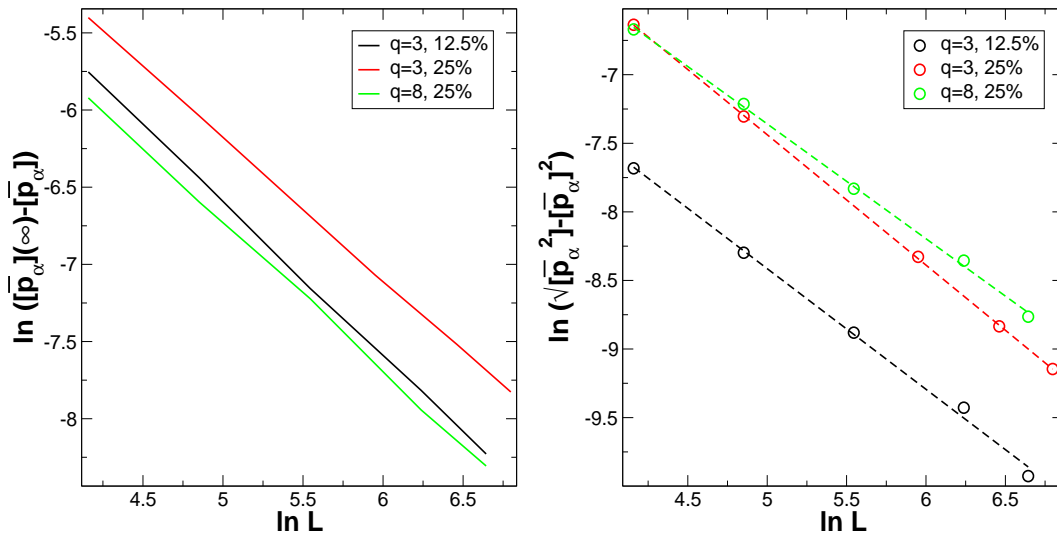
6.2.4 Fluktuacije kvazikritičnih temperatura

Koristeći EIC algoritam postaje moguće direktno odrediti ponašanje konvergencije $[\bar{p}_\alpha](L)$ i skaliranja $\sqrt{[\bar{p}_\alpha^2] - [\bar{p}_\alpha]^2}$. Eksponent skaliranja standardne devijacije označavamo s $\tilde{y}_\tau = \frac{1}{v}$, a eksponent konvergencije srednje vrijednosti \tilde{y}'_τ .

Tablica 6.7: Analiza konvergencije $[\bar{p}_\alpha]$ i skaliranja standardne devijacije $\sqrt{[\bar{p}_\alpha^2] - [\bar{p}_\alpha]^2}$ za slučajeve relevantnog nereda u 2d. Koristi se jednopotencijske ovisnost tipa f'_1 (4.35) i f_1 .

	$[\bar{p}_\alpha](\infty)$	\tilde{y}'_τ	\tilde{y}_τ sve točke	$\tilde{y}_\tau, L \geq 128$
$q = 3, c = 12.5\%$	0.69820(3)	1.00(5)	0.88(2)	0.87(4)
$q = 3, c = 25\%$	0.77730(4)	0.95(5)	0.95(1)	0.95(2)
$q = 8, c = 25\%$	0.85383(8)	0.90(7)	0.84(3)	0.85(5)

Analiza konvergencije $[\bar{p}_\alpha](L)$ je provedena ugađanjem podataka na ovisnost f'_1 (4.35). Proračun skaliranja veličine $\sqrt{[\bar{p}_\alpha^2] - [\bar{p}_\alpha]^2}$ napravljen je ugađanjem na potencijsku ovisnost tipa f_1 . Rezultati su sumirani u tablici 6.7 i prikazani na slici 6.11. Pokazuje se da korekcije skaliranja nisu važnije od statističkog šuma za $q = 3$, ali su prisutne za $q = 8$.



Slika 6.11: Vrijednosti $\sqrt{\langle \bar{p}_\alpha^2 \rangle} - [\bar{p}_\alpha]^2$ u ovisnosti o L na ln-ln grafu, prikazane u usporedbi s vrijednostima $\langle \bar{p}_\alpha \rangle(L \rightarrow \infty) - \langle \bar{p}_\alpha \rangle(L)$.

Na temelju argumenta Pázmándija Scalettara i Zymánya [65] smatramo da se rezultati za eksponent \tilde{y}_τ mogu usporediti s rezultatima za y_τ iz radova koji koriste sliku prijelaza drugog reda u efektivnom translacijski invarijantnom sustavu. Po našoj definiciji iz odjeljka 3.4, eksponent koji opisuje fluktuacije kvazikritičnih temperatura jest onaj koji mi označavamo s \tilde{y}_τ .

Promatranje kumulanta energija-magnetizacija, koji je u čistom slučaju logaritamska derivacija magnetizacije po temperaturi (4.17) također daje informaciju o eksponentu \tilde{y}_τ [59]. U prijašnjim radovima tu su veličinu računali usrednjavanjem pri jedinstvenoj temperaturi kao:

$$\langle U_{em} \rangle = \frac{L^d (\langle \bar{e} \cdot \bar{m} \rangle - \langle \bar{e} \rangle \cdot \langle \bar{m} \rangle)}{\langle \bar{m} \rangle} \quad (6.4)$$

Izraz (3.7) implicira da se $\langle U_{em} \rangle$ skalira kao $L^{\tilde{y}_\tau}$. Usporedba eksponenta koji označavamo s \tilde{y}_τ i eksponenta koji se u literaturi tumači kao termalni eksponent y_τ , dana je u tablici 6.8.

Wiseman i Domany [66] provode direktno račune fluktuacija kvazikritične temperature metodom transformacija raspodjele energije ("histogram reweighing") za 3d Isingov model. Juhász, Rieger i Iglói [55] koriste optimizacijski algoritam za račun slo-

Tablica 6.8: Usporedba kritičnih eksponenata \tilde{y}_τ s vrijednostima y_τ iz literature za dvodimenzionalne slučajeve. Reference su navedene uz pripadne vrijednosti.

		\tilde{y}_τ	y_τ - literatura
2d	$q = 3, c = 12.5\%$	0.88(2)	0.96(4)[52]
	$q = 3, c = 25\%$	0.95(1)	
	$q = 8, c = 25\%$	0.84(3)	0.99(1)[52] 0.99(5)[54]

bodne energije Pottsovog modela u granici $q \rightarrow \infty$ i također su određivali fluktuacije kvazikritičnih temperatura.

Jacobsen i Cardy [52] koriste metodu transfer matrice [95] za račun kritičnog ponašanja dvodimenzionalnog Pottsovog modela s q stanja. "Korelacijsku duljinu" usrednjenu pri jedinstvenoj temperaturi, dobivaju iz druge po veličini svojstvene vrijednosti transfer matrice [95]. Sustavi koje promatraju su beskonačni u longitudinalnom smjeru, a konačni (do $L = 13$) u transverzalnom smjeru. Za specijalnu vrstu nereda koju koriste postoji egzaktni izraz za termodinamički limes srednje kritične temperature u ansamblu nereda, na temelju svojstva dualnosti sustava na kvadratnoj rešetki u 2d [88]. Upravo ta temperatura je ona koju koriste kao ulazni parametar za sve veličine sustava i sve konfiguracije nereda. Usrednjavanje slobodne energije pri jedinstvenoj temperaturi vodi na znatno snažnije fluktuacije u svim observablama pa je zbog toga potrebna statistika nereda od oko reda veličine veća od one koju mi koristimo za jednaku razinu preciznosti rezultata. Unatoč tome, činjenica da ne lociraju vlastite kvazikritične temperature im omogućuje račun za mnogo različitih koncentracija nereda.

Za računanje eksponenta \tilde{y}_τ , pokazuje se potrebnim raditi i ekstrapolacije vrijednosti efektivnog eksponenta ovisne o jakosti nereda. U svom radu Jacobsen i Cardy primjećuju varijacije zbog konačnosti u vrijednostima eksponenata u ovisnosti o jakosti (u našem slučaju koncentraciji) nereda koje su otprilike veličine razlike u eksponentima \tilde{y}_τ koju dobivamo za dva različita razrjeđenja u $q = 3$ slučaju u 2d. Autori tog rada uspijevaju pokazati da različiti eksponenti ipak pokazuju "patološki" sporu konvergenciju u univerzalnu vrijednost povećavanjem veličine sustava. Konstatiraju također da postoji specijalna vrijednost jakosti nereda za koju su korekcije skaliranja u određivanju tog eksponenta zanemarive. Na primjer, naši rezultati daju indicaciju da je slučaj $q = 3$ s $c = 25\%$ nereda vrlo blizu univerzalne vrijednosti jakosti nereda

jer se vrlo konzistentno dobiva eksponent koji je u jako dobrom slaganju s rezultatom iz [52].

Prividna ovisnost eksponenata koji opisuju fluktuacije observabli u ansamblu nereda o koncentraciji javlja se i za magnetizaciju i energiju. U ovom radu takvo ponašanje zovemo "perzistentnim" korekcijama skaliranja iz razloga što očekujemo da trnu u limesu $L \rightarrow \infty$, ali u rasponu dostupnih rešetki pokazuju perzistentno drugačiji eksponent. Takvu pojavu tumačimo povećavanjem "efektivne koncentracije" nereda reskaliranjem oko kvazikritičnih točaka i takva interpretacija je u skladu sa studijom Jacobsen-a i Cardy-a.

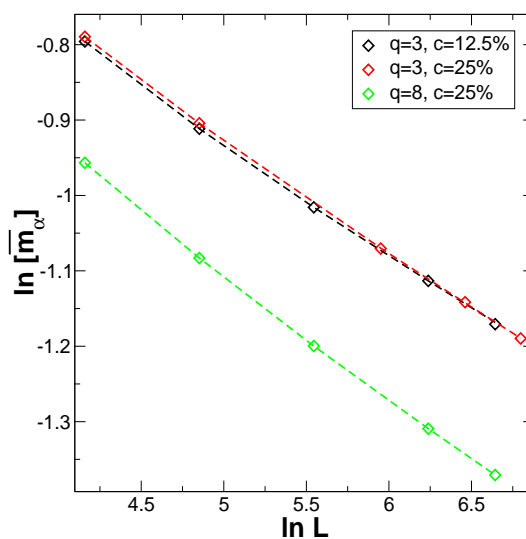
Za određivanje asimptotske vrijednosti eksponenata \tilde{y}_τ u okviru naše studije bilo bi potrebno sistematski proučiti efekt variranja koncentracije nereda. Također, za proučavanje perzistentnih korekcija skaliranja koje su opazili [52] trebalo bi koristiti znatno veće veličine rešetki.

Za precizno određivanje eksponenta konvergencije \tilde{y}'_τ srednjih vrijednosti $[\bar{p}_\alpha](L)$ potreban je veći broj točaka za velike rešetke, koje su veće od nama numerički dostupnih. Postojanje konačnog limesa veličine kad $L \rightarrow \infty$ čini račun eksponenta \tilde{y}'_τ osjetljivim na korekcije skaliranja koje su u sustavu s neredom jače nego u čistom slučaju. Rezultati za eksponente \tilde{y}_τ i \tilde{y}'_τ prikazani su u tablici 6.7. Vjerujemo da je razlika između ta dva eksponenta za dvodimenzionalne slučajeve moguće tumačiti snažno perzistirajućim efektima konačnosti kakvi su primijećeni i u drugim studijama. Tome ide u prilog i činjenica da su diskrepancije između eksponenata \tilde{y}'_τ i \tilde{y}_τ veće za manje koncentracije. Za $q = 3$ sustav s 12.5% nereda eksponent konvergencije blizak je $\approx \frac{d}{2}$ što je eksponent normalne distribucije. To je indikacija da učinak nereda nije postigao asimptotsku jakost.

Unatoč nepreciznosti u našim rezultatima, općenita granica koju vrijednosti \tilde{y}_τ i \tilde{y}'_τ zadovoljavaju jest Chayesova granica jer su uvijek manji od $\frac{d}{2} = 1$. To je u skladu s našom interpretacijom duljine uređivanja ζ kao duljine koja se može jedinstveno definirati za konačni sustav nezavisno o konfiguraciji nereda α (odjeljak 3.2.4).

6.2.5 Ponašanje srednjih vrijednosti

Skaliranje vrijednosti $[\bar{m}_\alpha]$ u ovisnosti o L (slika 6.12) je dvopotencijsko. Statističke pogreške u rezultatima su znatno manje od vodećih korekcija skaliranja pa je stoga



Slika 6.12: Skaliranje $[\bar{m}_\alpha]$ u ovisnosti o L na logaritamskoj skali zajedno s najbolje ugođenim nelinearnim funkcijama oblika f_2 (crtkane linije).

Tablica 6.9: Analiza skaliranja vrijednosti $[\bar{m}_\alpha]$ za slučajeve relevantnog nereda u 2d. Koriste se jedno- i dvopotencijske ovisnosti tipa f_1 i f_2 . S \tilde{y}'_1 označen je eksponent korekcije skaliranja

	\tilde{y}', f_1	χ^2	\tilde{y}', f_2	\tilde{y}'_1, f_2	χ^2
$q = 3, c = 12.5\%$	0.150(3)	$1.2 \cdot 10^{-4}$	0.130(4)	-0.8(2)	$7.3 \cdot 10^{-8}$
$q = 3, c = 25\%$	0.151(2)	$9.1 \cdot 10^{-5}$	0.128(3)	-0.6(1)	$1.3 \cdot 10^{-7}$
$q = 8, c = 25\%$	0.166(4)	$1.3 \cdot 10^{-4}$	0.131(3)	-0.6(1)	$5.4 \cdot 10^{-10}$

Tablica 6.10: Usporedba magnetskog eksponenta \tilde{y}'_h određenog u ovom radu s odgovarajućim vrijednostima iz literature.

		EIC	literatura
		\tilde{y}'_h	y_h
2d	$q = 3, c = 12.5\%$	1.870(4)	1.8653(1)[52]
	$q = 3, c = 25\%$	1.872(3)	
	$q = 8, c = 25\%$	1.869(3)	1.858(4)[52] 1.873(2)[54]

moguće koristiti funkcijsku ovisnost f_2 za određivanje kritičnih eksponenta konvergencije. Analiza konvergencije u kojoj uspoređujemo ugađanje na funkcije oblika f_1 i f_2 prikazana je u tablici 6.9. Rezultati pokazuju da su eksponenti jednaki do na statističku nepouzdanost neovisno o q ili c .

Standardni postupak određivanja eksponenta povezanog s magnetizacijom u prijašnjim radovima jest promatranje konvergencije parametra reda $\langle \bar{m}_\alpha \rangle$ ili $\langle \bar{m}_\alpha^2 \rangle$. Očekujemo da je asimptotska konvergencija tih veličina određena eksponentom konvergencije $[\bar{m}_\alpha]$, $\tilde{y}' = \frac{\tilde{E}'}{v} = d - \tilde{y}'_h$, odnosno $2\tilde{y}'$. Različitosti u načinima usrednjavanja mogu se svesti na šum u temperaturi, koji može proizvesti samo korekciju skaliranja koja iščezava u $L \rightarrow \infty$, jer su magnetski eksponenti najrelevantniji u opisu prijelaza. Zbog toga parametar reda nije intrinzično osjetljiv na usrednjavanje pri jedinstvenoj temperaturi.

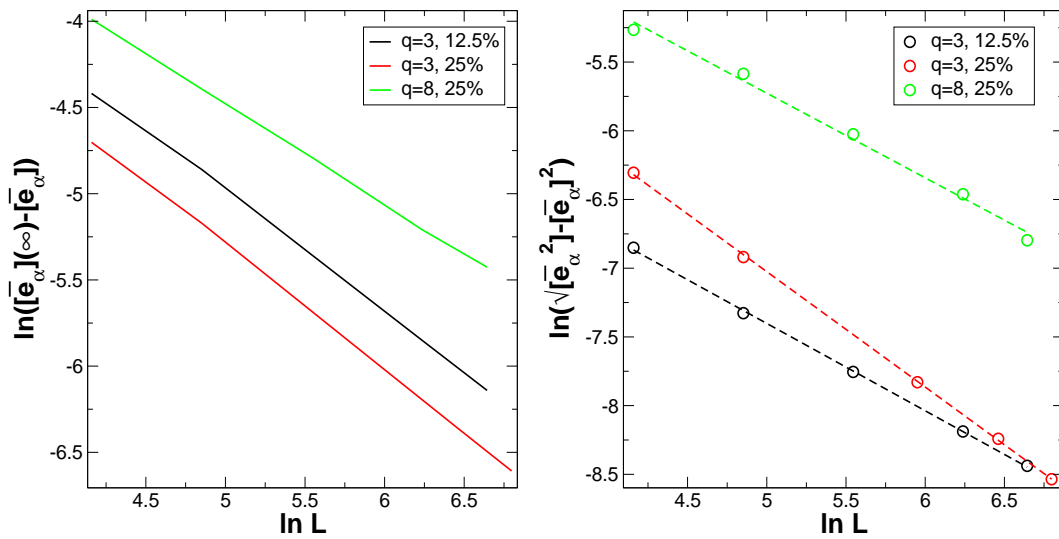
Naši rezultati za magnetske eksponente konvergencije magnetizacije \tilde{y}'_h su bliski odgovarajućim vrijednostima iz prijašnjih radova, kako se vidi u tablici 6.10.

Analiza rezultata konvergencije $[\bar{e}_\alpha]$ u ovisnosti o L pokazuje prisutnost korekcija skaliranja. Postojanje konačnog analitičkog člana energije u limesu $L \rightarrow \infty$ otežava određivanje korekcije skaliranja zbog premalog broja točaka u rezultatima iako su točke precizne do na zadnju znamenku navedenu u tablicama u dodatku A. Pokazuje se da prilagodba na troparametarsku ovisnost oblika f'_1 ne opisuje dovoljno dobro izračunate točke za slučajeve $q = 3$. Zbog toga, pokušavamo procijeniti utjecaj korekcija skaliranja ispuštanjem vrijednosti za najmanje rešetke. U tablici 6.11 prikazana je analiza konvergencije $[\bar{e}_\alpha]$ na temelju koje određujemo eksponent \tilde{x}' , a preciznost ugađanja procjenjujemo preko vrijednosti $\frac{\chi^2}{\text{brojtočaka}}$.

Zaključujemo da se odbacivanjem prve točke može postići bolje slaganje s funkcijom f'_1 za slučajeve $q = 3$, iako se ne može konzistentno uzeti u obzir korekcije skaliranja,

Tablica 6.11: Analiza ugađanja rezultata za $[\bar{e}_\alpha]$ na funkcionalnu ovisnost f'_1 .

	sve točke			bez $L = 64$ točke		
	$e(\infty)$	\bar{x}'	$\frac{\chi^2}{n}$	$e(\infty)$	\bar{x}'	$\frac{\chi^2}{n}$
$q = 3, c = 12.5\%$	-0.717(1)	0.61(9)	$2.8 \cdot 10^{-9}$	-0.7163(4)	0.72(5)	$0.5 \cdot 10^{-10}$
$q = 3, c = 25\%$	-0.643(1)	0.65(8)	$8.8 \cdot 10^{-10}$	-0.6429(3)	0.74(4)	$1.0 \cdot 10^{-10}$
$q = 8, c = 25\%$	-0.5839(1)	0.58(1)	$1.6 \cdot 10^{-9}$	-0.5841(2)	0.58(1)	$1.9 \cdot 10^{-9}$

Slika 6.13: Vrijednosti $\sqrt{[\bar{e}_\alpha]^2 - [\bar{e}_\alpha]^2}$ u ovisnosti o L na ln-ln grafu zajedno s vrijednostima $[\bar{e}_\alpha](L \rightarrow \infty) - [\bar{e}_\alpha](L)$.

Tablica 6.12: Analiza skaliranja standardne devijacije $\sqrt{\langle \bar{e}_\alpha^2 \rangle - \langle \bar{e}_\alpha \rangle^2}$ za slučajeve relevantnog nereda u 2d. Koristi se jednopotencijska ovisnosti tipa f_1 .

	\tilde{x}, f_1 - sve točke	\tilde{x}, f_1 bez $L = 64$
$q = 3, c = 12.5\%$	0.62(2)	0.64(4)
$q = 3, c = 25\%$	0.82(2)	0.83(3)
$q = 8, c = 25\%$	0.62(5)	0.67(8)

zbog čega su nepouzdanosti u eksponentima \tilde{x} velike. Za slučaj $q = 8$ procjena eksponenta je znatno preciznija jer korekcije skaliranja nisu značajne.

Na slici 6.13 prikazane su vrijednosti $\sqrt{\langle \bar{e}_\alpha^2 \rangle - \langle \bar{e}_\alpha \rangle^2}$ u ovisnosti o L na ln-ln grafu zajedno s vrijednostima $\langle \bar{e}_\alpha \rangle(L \rightarrow \infty) - \langle \bar{e}_\alpha \rangle(L)$. Kvaliteta podataka za te standardne devijacije je određena statistikom konfiguracija nereda W i stoga se postupak najbolje procjene eksponenta \tilde{x} svodi na računanje nagiba u ln-ln grafu, s procjenom statističkih pogreški. Rezultati ne dozvoljavaju računanje korekcija skaliranja. Analiza konvergencije prikazana je u tablici 6.12. Prisutnost perzistentnih razlika u eksponentu fluktuacija u ansamblu nereda za $q = 3$ potvrđuje da se jakost nereda za $c = 12.5\%$ pojačava reskaliranjem.

Ako usporedimo vrijednosti eksponenta konvergencije srednje vrijednosti \tilde{x}' i standardnih devijacija \tilde{x} plauzibilnim se čini da bi u termodinamičkom limesu trebali biti isti, analogno s ponašanjem kritične vjerojatnosti veze p . Vrijednosti \tilde{x}' za $q = 3$ pokazuju trend povećavanja s povećavanjem rešetke, a njihove vrijednosti su iste gotovo do na nepouzdanosti. Vrijednost \tilde{x}' za $q = 8$ je usporediva s vrijednosti eksponenta \tilde{x} , za što smatramo da predstavlja asimptotski režim rezultata.

Fluktuacije gustoće energije najbolji su primjer veličine koju nije moguće opisati prijelazom drugog reda u efektivnom translacijski invarijantnom sustavu, opisanog slobodnom energijom prema izrazu (3.7). Postoje sporadični navodi u prijašnjim radovima o postojanju "ekscesivnih" fluktuacija energije u ansamblu nereda koje se ne mogu objasniti [64, 52]. Niti jedan rad za koji znamo ne ulazi u analizu te pojave. Definiramo eksponent κ fluktuacija gustoće energije u ansamblu nereda pri jedinstvenoj temperaturi $\sqrt{\langle \bar{e}_\alpha^2 \rangle - \langle \bar{e}_\alpha \rangle^2}$ kao:

$$\sqrt{\langle \bar{e}_\alpha^2 \rangle - \langle \bar{e}_\alpha \rangle^2} \propto L^{-\kappa}. \quad (6.5)$$

Prema izrazu (3.7) fluktuacije gustoće energije bi trebale biti određene konvergen-

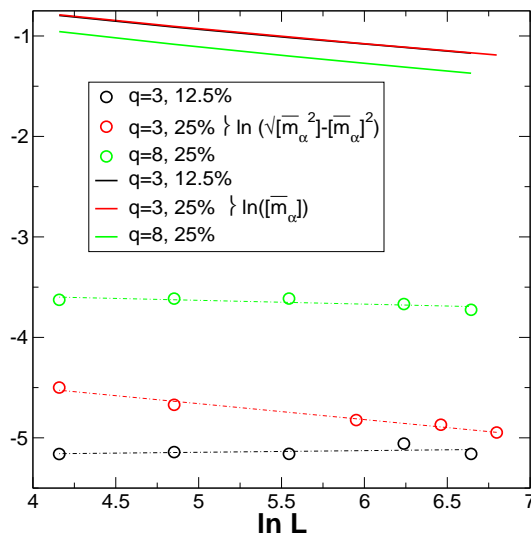
Tablica 6.13: EkspONENT konvergencije $\sqrt{[\bar{e}_\alpha^2] - [\bar{e}_\alpha]^2}$, \bar{x} izračunat u ovom radu usrednjavanjem pri vlastitim kvazikritičnim temperaturama uspoređen s ekspONENTOM konvergencije $\sqrt{\langle \bar{e}_\alpha^2 \rangle - \langle \bar{e}_\alpha \rangle^2}$ određenim usrednjavanjem pri jedinstvenoj temperaturi za dvodimenzionalne slučajeve. EkspONENT konvergencije iz literature označavamo s κ . Radi usporedbe navodimo također i ekspONENT koji se naziva termičkim ekspONENTOM u literaturi y_τ i koji odgovara ekspONENTU \tilde{y}_τ određenom u ovom radu. Reference za pojedine vrijednosti ekspONENTATA su prikazane uz njih.

	EIC	literatura:			
		\bar{x}	κ	$d - \kappa$	$y_\tau (\equiv \tilde{y}_\tau)$
2d	$q = 3, c = 12.5\%$	0.62(2)	0.91(1)[52]	1.09(1)	0.96(4)
	$q = 3, c = 25\%$	0.82(2)	0.927(1)($q = 2$) \leftrightarrow 0.86(1)($q = 4$)[64]	1.073(1) \leftrightarrow 1.14(1)	$\approx 1^+$
	$q = 8, c = 25\%$	0.62(5)	0.65(1)[52]	1.35(1)	0.99(1)

cijskim ekspONENTOM $\tilde{y}_\tau - d$. U literaturi se smatra da \tilde{y}_τ predstavlja pravi termalni ekspONENT $\equiv y_\tau$. U tablici 6.13 vidi se da niti u jednom navedenom slučaju ekspONENTI \tilde{y}_τ i $d - \kappa$ navedeni u prijašnjim radovima, nisu isti. To je dokaz da su fluktuacije energije u ansamblu nereda opisane mehanizmom za koji ne postoji jasna poveznica s termodinamičkim fluktuacijama. EkspONENTI \bar{x} koje određujemo u ovom radu, dobro se slažu s rezultatima za ekspONENT κ iz prijašnjih radova.

Nudimo argument na temelju invarijantnosti na skalu, da su ekspONENTI κ i \bar{x} jednaki. Može se smatrati da rezultati observabli dobiveni računom pri jedinstvenoj temperaturi sadrže šum u temperaturi reda $\propto L^{-\tilde{y}_\tau}$ u odnosu na vrijednosti pri vlastitoj kvazikritičnoj temperaturi. Ako je sustav pri vlastitoj kvazikritičnoj temperaturi invarijantan na skalu, takav šum u temperaturi trebao bi inducirati šum u gustoći energije ne veći od $\propto L^{\tilde{y}_\tau - d}$. Pokazuje se da su fluktuacije u energiji opisane znatno relevantnijim ekspONENTOM od $\tilde{y}_\tau - d$ pa smatramo da određivanje fluktuacija energije u ansamblu nereda ne ovisi o načinu usrednjavanja i kao rezultat toga $\bar{x} \equiv \kappa$.

Unatoč snažnim fluktuacijama energije u ansamblu nereda, skaliranje energija-magnetizacija kumulanta određenog usrednjavanjem pri jedinstvenoj temperaturi, opisano je ekspONENTOM \tilde{y}_τ [54, 59]. Energija-magnetizacija kulant pri kvazikritičnoj temperaturi konačnog sustava, mjera je pomaka srednje vrijednosti energije od vrijednosti kritične točke u granici $L \rightarrow \infty$. Dominantni doprinos fluktuacijama energije u ansamblu nereda razvezan je od temperature i specifičnost je sustava s relevantnim neredom. Usrednjavanjem po ansamblu nereda pri jedinstvenoj temperaturi taj snažni doprinos, usrednji se u nulu. Unatoč tome postoji komponenta energije koja je termodinamički konjugirana temperaturi i koja je subdominantna fluktuacijama energije

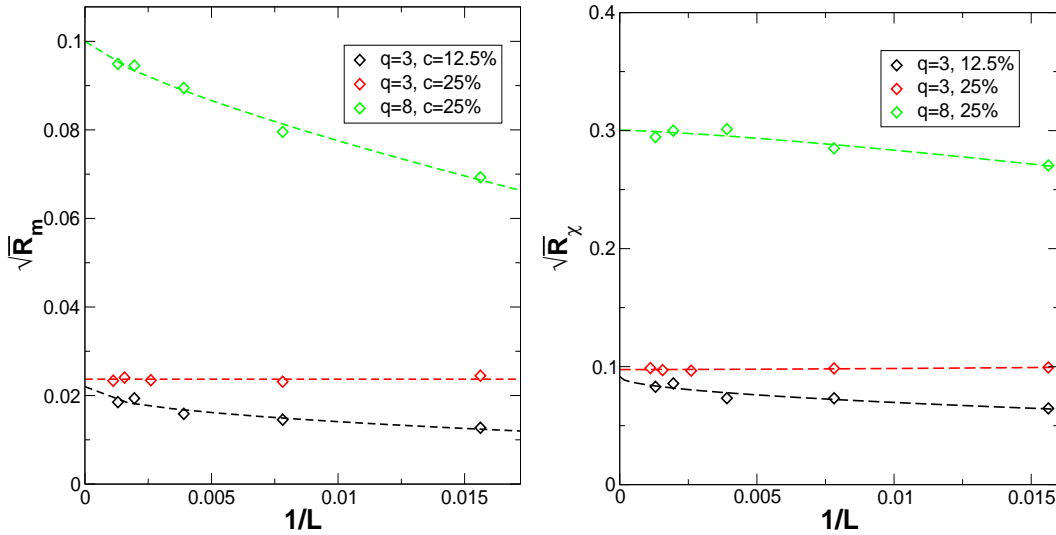


Slika 6.14: skaliranje $\sqrt{[\overline{m_\alpha^2}] - [\overline{m_\alpha}]^2}$ u usporedbi sa skaliranjem srednje vrijednosti parametra reda $[\overline{m_\alpha}]$ na logaritamskoj skali.

u ansamblu nereda. U odnosu na sustave pri vlastitim kvazikritičnim temperaturama za svaku konfiguraciju nereda α , sustavi s neredom simulirani pri jedinstvenoj kritičnoj temperaturi sadrže fluktuacije temperature reda $L^{-\tilde{y}_\tau}$. Ako je sustav pri prijelazu invarijantan na skalu, takve fluktuacije uzrokuju pomake u komponenti gustoće energije koja je konjugirana s temperaturom, $\delta e \propto L^{-d+\tilde{y}_\tau}$. Iz toga slijedi da vrijednost energija-magnetizacija kumulanta divergira kao $L^d \cdot \delta e \propto L^{\tilde{y}_\tau}$.

6.2.6 Omjeri samousrednjavanja

Fluktuacije srednjih vrijednosti parametra reda uzrokovane promjenom konfiguracije nereda $\sqrt{[\overline{m_\alpha^2}] - [\overline{m_\alpha}]^2}$ su gotovo dva reda veličine manje u odnosu na pripadne vrijednosti parametra reda. Određivanje tako male veličine predstavlja problem jer su znatno osjetljivije na statistički šum i efekte konačnosti. Uz to pojavljuju se i već komentirane perzistirajuće razlike u eksponentima između slučajeva u kojima bi eksponenti trebali biti jednaki (u našem primjeru za $q = 3$). Na slici 6.14 uspoređene su vrijednosti parametra reda i standardne devijacije njegove fluktuacije u ansamblu nereda. Skaliranje tih standardnih devijacija ne prati skaliranje srednje vrijednosti u ovom rasponu L i štoviše u nekim slučajevima izlazi iz granice dane izrazom (3.52).



Slika 6.15: ovisnosti $\sqrt{R_m}$ (lijevo) i $\sqrt{R_x}$ (desno) o $\frac{1}{L}$, crtkane linije prikazuju funkciju tipa f'_1 koja najbolje aproksimira točke pod uvjetom da omjeri imaju konačan $L \rightarrow \infty$ limes.

Tablica 6.14: Analiza skaliranja omjera $\sqrt{R_m(L)}$ i $\sqrt{R_x(L)}$ za slučajeve relevantnog nereda u 2d. Koristimo potencijnsku ovisnost oblika f'_1 . S ω i ω' označavamo eksponente konvergencije ugađanja. Pokazujemo i neke referentne vrijednosti iz literature [64], dobivene pod pretpostavkom efektivnog prijelaza drugog reda.

EIC računi			
	$\sqrt{R_m(L \rightarrow \infty)}$	ω	$R_m(L \rightarrow \infty)$
$q = 3, c = 12.5\%$	0.022(4)	0.4(1)	$5(2) \cdot 10^{-4}$
$q = 3, c = 25\%$	0.024(3)	≈ 0	$6(1) \cdot 10^{-4}$
$q = 8, c = 25\%$	0.10(1)	0.7(1)	$1.0(2) \cdot 10^{-2}$
	$\sqrt{R_x(L \rightarrow \infty)}$	ω'	$R_x(L \rightarrow \infty)$
$q = 3, c = 12.5\%$	0.09(1)	0.5(1)	$0.8(2) \cdot 10^{-2}$
$q = 3, c = 25\%$	0.10(1)	≈ 0	$1.0(2) \cdot 10^{-2}$
$q = 8, c = 25\%$	0.30(1)	1.3(1)	$9.0(6) \cdot 10^{-2}$
literatura[64]:			
$q = 2$	$R_m(L \rightarrow \infty) \approx 0.02$		
$q = 4$	$R_m(L \rightarrow \infty) \approx 0.04$		

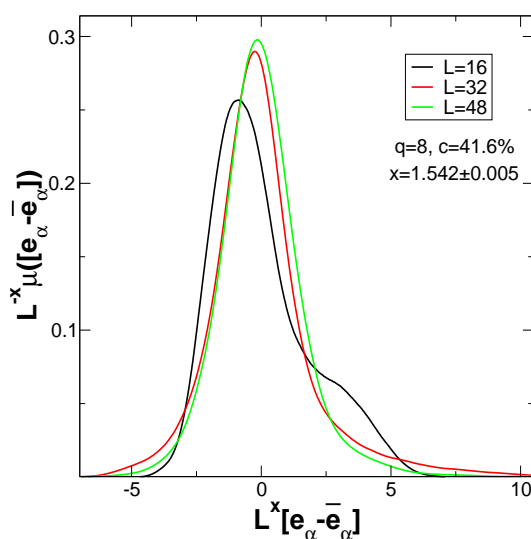
Prema argumentaciji iz odjeljka 3.4.3 rast fluktuacija u asimptotskom režimu ograničen je konvergencijom srednje vrijednosti parametra reda $[\overline{m}_\alpha], \propto L^{-\tilde{g}'}$. Stoga promatramo omjer samousrednjavanja $R_m(L)$ (3.53). Za $\sqrt{R_m(L)}$ očekujemo da će za slučajeve relevantnog nereda težiti u konstantu veću od nule. Na slici 6.15, prikazane su vrijednosti $\sqrt{R_m}$ u ovisnosti o $\frac{1}{L}$. Također računamo omjer samousrednjavanja magnetske susceptibilnosti R_χ (3.56). Zajedno s vrijednostima prikazujemo funkcije oblika f'_i koje daju najrobusnije ekstrapolacije vrijednosti u limes $L \rightarrow \infty$ na temelju metode "jack-nife binninga" uz pretpostavku da je limes konačan. Rezultati ugađanja su prikazani u tablici 6.14.

Naši rezultati parcijalno podupiru univerzalnost omjera samousrednjavanja, jer dobivamo da su R_m i R_χ invarijante na koncentraciju nereda u slučaju $q = 3$. S druge strane, vrijednosti koje dobivamo su čak i u slučaju najdrastičnijeg utjecaja nereda za $q = 8$, znatno manje od vrijednosti koje dobivaju Wiseman i Domany [64], a kojima se neki naši rezultati mogu usporediti. Takav rezultat u slaganju je s rezultatom Wisemana i Domanyja iz kasnije studije [66], koji pokazuje znatno smanjivanje omjera ako se vrijednosti usrednjuju pri vlastitim kritičnim temperaturama. Njihov rezultat odnosi se na 3d Isingov model pa ćemo ga komentirati u odjeljku 6.3.5

6.3 Slučajevi relevantnog nereda u 3D

6.3.1 Interes

Harrisov kriterij za relevantnost nereda kad je prijelaz u čistom slučaju drugog reda, nezavisan je o dimenziji. Stoga također u trodimenzionalnim slučajevima očekujemo relevantnost nereda uvijek kad je eksponent toplinskog kapaciteta $\alpha > 0$. Za razliku od toga, kad je prijelaz u čistom sustavu prvog reda, u trodimenzionalnom sustavu očekujemo konačan prag koncentracije nereda koji je potreban da bi se prijelaz zaokružilo u kontinuirani. Postojanje praga tumači se koreliranjem efektivnog nereda na skali veličine sustava pri nekoj netrivialnoj vrijednosti koncentracije nereda strogo većoj od nule [87]. Prema Imry-Ma [85] argumentu infinitezimalna količina nereda je irelevantna za fazni prijelaz prvog reda u 3d sustavu, za razliku od 2d slučajeva gdje Aizenman-Wehrov [42] teorem eksplicitno daje relevantnost infinitezimalne količine



Slika 6.16: Raspodjele termodinamičkih fluktuacija energije za $q = 8$ pri koncentraciji nereda $c = 41.6\%$ za 3d sustav reskalirane s eksponentom $x = 1.542 \pm 0.005$ (odjeljak 6.3.3). Vidljiv je ostatak strukture s dva maksimuma karakteristične za režim prijelaza prvog reda za najmanju rešetku.

nereda. Analogno s računima koje smo prezentirali u dvodimenzionalnim slučajevima, i u 3d želimo proučiti utjecaj relevantnog nereda za sustave s $q \geq 2$.

Fokusiramo se na dva slučaja koncentracije za sustav u kojemu je prijelaz u čistom modelu drugog reda $q = 2$ (Ising) i dva sustava gdje je fazni prijelaz u čistom modelu prvog reda, $q = 4$ i 8 . Raspon nama dostupnih rešetki za proučavanje 3d sustava s neredom seže do 80, a postojanje konačnog praga koncentracije nereda potencijalno vodi na postojanje snažnih efekata promjene režima. I za koncentracije pri kojima je u termodinamičkom limesu prijelaz zaokružen, postoji mogućnost da sustav pokazuje značajke faznog prijelaza prvog reda ako su sustavi mali. Za ilustraciju pokazujemo skaliranje raspodjele energije za $c = 41.6\%$ za $q = 8$, gdje je za male rešetke vidljiv ostatak strukture s dva maksimuma koja je tipična za fazni prijelaz prvog reda (slika 6.16).

6.3.2 Detalji simulacija

Kad su efekti promjene režima prisutni teško je postići dovoljnu preciznost rezultata za kritične eksponente. Zbog toga izabiremo veće koncentracije nereda, za koje smo preliminarnim računima procijenili da su dovoljne da bi efekti prijelaza bez nereda

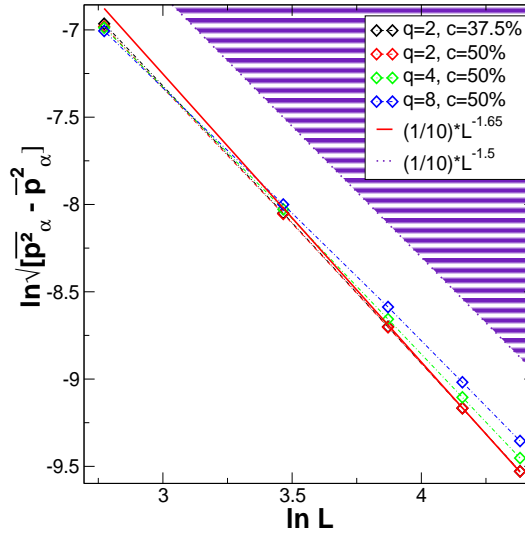
bili zanemarivi. Za slučaj u kojemu je prijelaz u čistom modelu drugog reda, ne očekujemo prag koncentracije. Slučajeve $q = 4$ i $q = 8$ promatramo s 50% nereda, a $q = 2$ (Ising) s 37.5% i 50% nereda. Parametri EIC algoritma su $\nu = \frac{1}{10} \cdot L^{-1.65}$ i $N_a = 1000$ za $q = 8$ i $N_a = 500$ za $q = 4$ i 2. Računanje dovoljne termodinamičke statistike (20000 MC koraka) za jednu konfiguraciju nereda za sustav s veličinom od $L = 80$ pri $N_a = 1000$ traje otprilike 24h, zajedno s termalizacijom na procesoru Intel Xeon E5405 (2.0GHz). Preliminarni računi su pokazali da je $N_a = 1000$ za $q = 8$ model s 50% nereda jedva dovoljna vrijednost parametra jer je autokorelacijsko vrijeme $\Theta \approx N_a$ za $L = 80$. Smanjivanje parametra N_a znatno smanjuje vrijeme izvršavanja simulacije pa se pokazuje da odabir $N_a = 500$ za $q = 2$ i 4 smanjuje vrijeme potrebno za izračunavanja 20000 MC koraka za jednu konfiguraciju nereda za oko 30%. Vrijeme potrebno za jedan MC korak (pri jednakom N_a) je otprilike proporcionalno s L^d što znači da ekvivalent dvodimenzionalnoj graničnoj rešetki od $L = 1000$ predstavlja $L = 100$ u 3d. U svim slučajevima koje promatramo koristimo rešetke veličina: $L = 16, 32, 48, 64$ i 80. Rezultate računa s neredom za 3d slučajeve navodimo u dodatku B.

Tablica 6.15: Analiza skaliranja standardne devijacije $\sqrt{[p_\alpha^2 - \bar{p}_\alpha^2]}$ linearnom regresijom. Pretpostavljamo funkcionalnu ovisnost f_1 s eksponentom trnjenja $-b$.

	$N_a, \nu = \frac{1}{10} L^{-1.65}$	b - sve točke	b $L = 64-80$
$q = 2, c = 37.5\%$	500	1.593	1.623
$q = 2, c = 50\%$	500	1.584	1.620
$q = 4, c = 50\%$	500	1.532	1.558
$q = 8, c = 50\%$	1000	1.457	1.508

Na slici 6.17 prikazane su fluktuacije p_α u termodinamičkom ansamblu. Puna linija označava nametnutu restrikciju, a zasjenjeno područje približno predstavlja područje u veličini $\sqrt{[p_\alpha^2 - \bar{p}_\alpha^2]}$ gdje se mogu očekivati neravnotežni efekti. Za razliku od 2d slučajeveva primjećujemo da za $q = 4$ i $q = 8$ postoji mala diskrepancija između restrikcije i vrijednosti $\sqrt{[p_\alpha^2 - \bar{p}_\alpha^2]}$, dok vrijednosti za $q = 2$ slijede restrikciju. Analiza standardne devijacije je u tablici 6.15.

Rezultati za $\sqrt{[p_\alpha^2 - \bar{p}_\alpha^2]}$ se mogu protumačiti premalim iznosom parametra N_a za slučajeve $q = 4$ i 8. Razmatranjem eksponenta konvergencije za najveće L vidi se da je premala vrijednost N_a kompenzirana smanjivanjem širine ν , tako da konvergencija standardne devijacije ostane u granicama RC raspodjele (tablica 6.15).



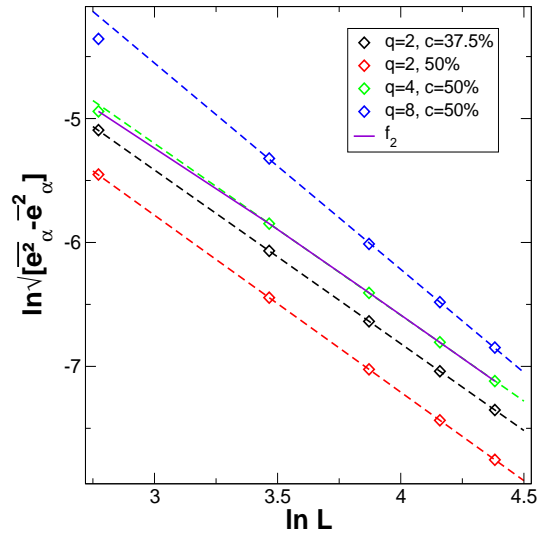
Slika 6.17: Skaliranje $\sqrt{[p^2_\alpha - \bar{p}^2_\alpha]}$ u odnosu na nametnutu restrikciju $\frac{1}{10} \cdot L^{-1.65}$. Šrafrano područje približno označava vrijednosti $\sqrt{[p^2_\alpha - \bar{p}^2_\alpha]}$ za koje treba očekivati neravnotežne efekte.

6.3.3 Fluktuacije termodinamičkog ansambla

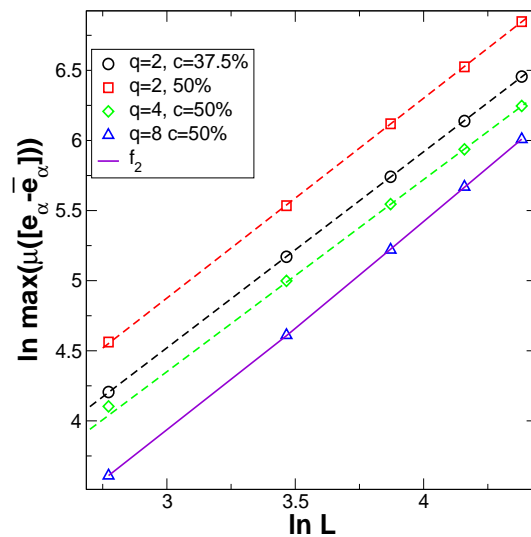
Tablica 6.16: Analiza raspodjela energija u termodinamičkom ansamblu za slučajeve relevantnog nereda u 3d. Koristi se jedno- i dvopotencijska ovisnosti tipa f_1 i f_2 . Za ocjenu preciznosti ugađanja koristimo normalizirane vrijednosti χ^2 po točki podataka zadane izrazom (6.6). Za usporedbu, navodimo da je odgovarajući eksponent čistog Isingovog modela u 3d $y_\tau = 1.587(1)$ [19], dok je efektivni eksponent za slučajeve faznog prijelaza prvog reda $q = 4$ i 8 u čistom slučaju trivijalan i iznosi d .

Standardne devijacije $\sqrt{[e^2_\alpha - \bar{e}^2_\alpha]}$							
	x, f_1 - sve	$\frac{\chi^2}{n}$	x, f_1 bez $L = 16$	$\frac{\chi^2}{n}$	x, f_2	$\frac{\chi^2}{n}$	y_τ
$q = 2, c = 37.5\%$	1.404(2)	$1.2e - 6$	1.402(1)	$1.9e - 7$	-	-	1.598(1)
$q = 2, c = 50\%$	1.430(2)	$2.0e - 6$	1.428(1)	$2.0e - 8$	-	-	1.572(1)
$q = 4, c = 50\%$	1.33(4)	$3.6e - 4$	1.383(5)	$6.3e - 6$	1.401(2)	$6.4e - 7$	1.599(2)
$q = 8, c = 50\%$	1.48(7)	$4.4e - 3$	1.678(7)	$7.6e - 5$	-	-	1.322(7)
Maksimumi normirane raspodjele $\mu([e_\alpha - \bar{e}_\alpha])$							
	x, f_1 - sve	$\frac{\chi^2}{n}$	x, f_1 bez $L = 16$	$\frac{\chi^2}{n}$	x, f_2	$\frac{\chi^2}{n}$	y_τ
$q = 2, c = 37.5\%$	1.401(3)	$1.2e - 5$	1.402(2)	$5.8e - 6$	-	-	1.598(3)
$q = 2, c = 50\%$	1.428(5)	$5.5e - 5$	1.431(3)	$6.3e - 6$	-	-	1.569(3)
$q = 4, c = 50\%$	1.36(1)	$4.8e - 4$	1.367(5)	$1.7e - 5$	-	-	1.633(5)
$q = 8, c = 50\%$	1.43(5)	$7.3e - 4$	1.533(7)	$2.7e - 5$	1.542(5)	$1.0e - 5$	1.458(5)

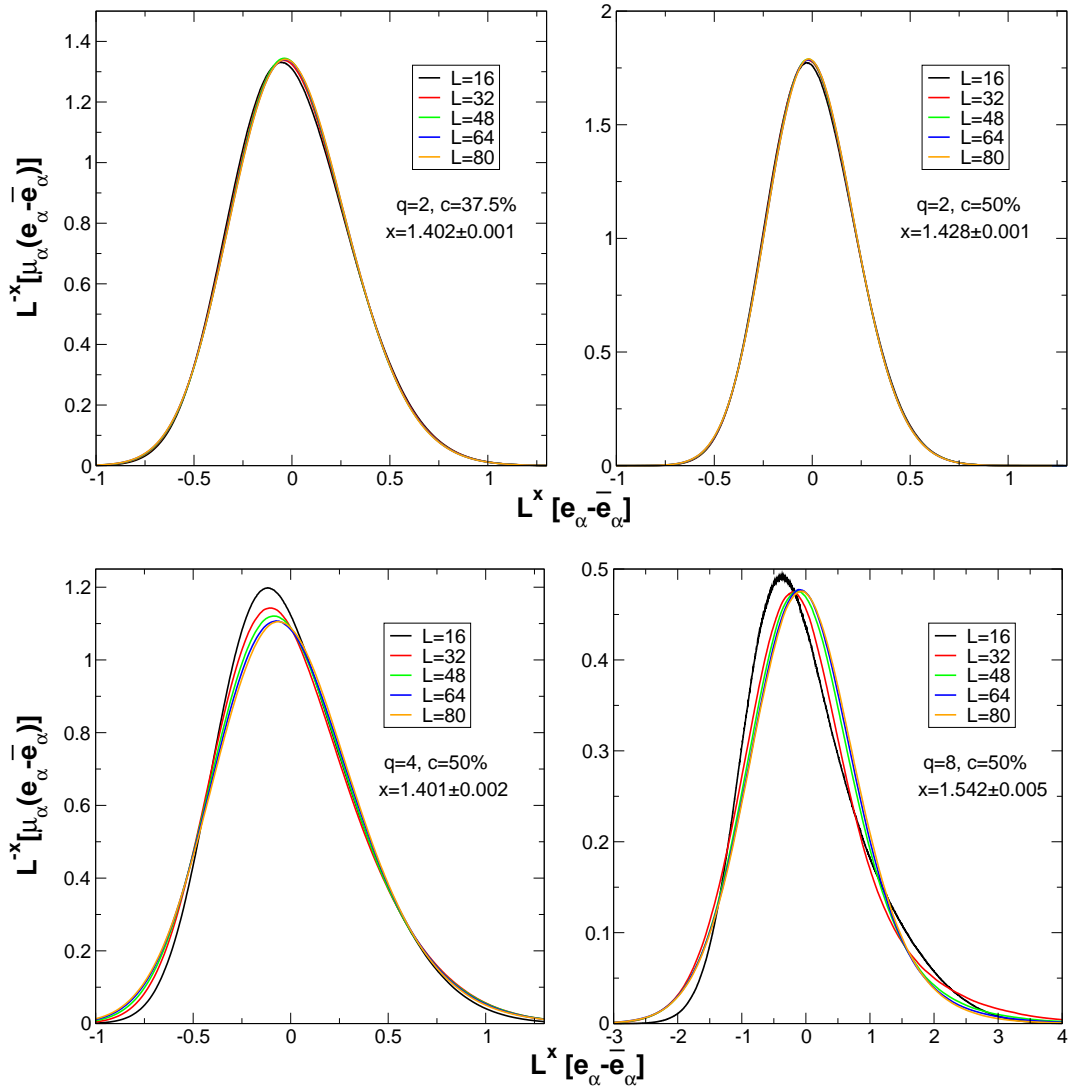
Skaliranje varijance termodinamičkih fluktuacija gustoće energije $[e^2_\alpha - \bar{e}^2_\alpha]$, u termodinamičkom limesu određuje skaliranje toplinskog kapaciteta, prema izrazu



Slika 6.18: Fluktuacije termodinamičkog ansambla energije $\sqrt{[e_\alpha^2 - \bar{e}_\alpha^2]}$. U slučaju $q = 2$ pravac linearne regresije (crtkano) je povučen kroz sve točke, za ostale slučajeve najmanja rešetka $L = 16$ je izostavljena. Za $q = 4$ je također bilo moguće postići dobru konvergenciju na funkciju f_2 (puna crta).



Slika 6.19: Skaliranje maksimuma normirane raspodjele $\mu([e_\alpha - \bar{e}_\alpha])$. Crtane linije predstavljaju linearnu regresiju s najmanjom rešetkom izbačenom, a puna linija predstavlja dvopotencijsku ovisnost oblika f_2 koja dobro opisuje podatke za $q = 8$.



Slika 6.20: Raspodjele od $[e_{\alpha} - \bar{e}_{\alpha}]$ reskalirane pripadnim eksponentima x za različite slučajeve parametra Pottsovog modela q i koncentracije nereda c u 3d.

(3.40). Standardna devijacija $\sqrt{[e_{\alpha}^2 - \bar{e}_{\alpha}^2]}$ dominantno se skalira s eksponentom $-x = -(d - y_{\tau})$. Maksimum normalizirane raspodjele $\mu([e_{\alpha} - \bar{e}_{\alpha}])$ dominantno se skalira s eksponentom $x = d - y_{\tau}$. Mogućnost određivanja istog eksponenta na dva različita načina omogućuje kontrolu konzistentnosti određene vrijednosti. Standardna devijacija i maksimumi, skupovi su podataka koji poprimaju znatno različite vrijednosti i da bismo usporedili preciznost ugađanja funkcija na podatke za ta dva skupa,

koristimo normalizirane vrijednosti χ^2 po točki podataka, koje označavamo s:

$$\frac{\chi_N^2}{n} = \frac{1}{n} \sum_i^n \frac{(y_i - f(i))^2}{f(i)^2}. \quad (6.6)$$

U tom izrazu y_i označava n vrijednosti koje su ugođene na funkciju $f(i)$ koja ih najbolje opisuje. Kvaliteta podataka dovoljna da je postupak određivanja eksponenta preko maksimuma statistički otprilike jednako precizan kao i preko standardne devijacije.

Analiza konvergencija $\sqrt{[e_\alpha^2 - \bar{e}_\alpha^2]}$ i maksimuma normalizirane raspodjele $\mu([e_\alpha - \bar{e}_\alpha])$, prikazana je u tablici 6.16. U njoj uspoređujemo rezultate ugađanja na funkcijske ovisnosti f_1 i f_2 i na temelju najbolje vrijednosti normalizirane vrijednosti χ^2 po točki podataka, određujemo najbolju procjenu kritičnog eksponenta x , koja je istaknuta masnim brojevima. S najboljim vrijednostima eksponenta x reskaliramo raspodjele energije i njihov kolaps prikazujemo na slici 6.20.

Vrijednosti eksponenta x dobivene promatranjem različitih karakterističnih veličina raspodjele u dobrom su slaganju za sve slučajeve osim $q = 8$. Za taj slučaj dobivamo znatne razlike između eksponenta izračunatog iz konvergencije standardne devijacije i onog iz maksimuma normalizirane raspodjele. Naime, funkcija raspodjele energije mijenja oblik u ovisnosti o veličini sustava L . I preciznost ugađanja i kolaps raspodjela fluktuacija energije prikazan na slici 6.20, idu u prilog zaključku da je eksponent određen skaliranjem maksimuma raspodjele za $q = 8$ slučaj, bolja procjena od onog određenog iz konvergencije standardne devijacije.

Za $q = 2$ slučajeve eksponenti y_τ za različite koncentracije nereda vrlo su blizu eksponentu čistoga sustava koji iznosi 1.587(1) [19]. Statistička preciznost svakog od ta dva eksponenta izrazito je velika što potvrđuje i iznimno dobar kolaps pripadnih raspodjela energije prikazanih na slici 6.20, ali prisutne su razlike ovisne o koncentraciji koje nam nisu do kraja jasne. Sličnost eksponenata s vrijednošću čistog modela daje indiciju da je utjecaj nemagnetičnog nereda na korelacije u sustavu znatno slabiji nego što se do sada smatralo. Relevantnost nereda se vidi po fluktuacijama kvazikritičnih temperatura koje karakterizira eksponent \tilde{y}_τ , koji je relevantniji od y_τ . U odjeljku 3.2.3 takav rezultat povezujemo s postojanjem prostornih nehomogenosti u sustavu, na skali veličine samog sustava, koje su relevantne za kritično ponašanje. Radi topologije 3d prostora moguće je pojavljivanje duljine ζ , dominantnije od kore-

lacijske duljine ξ , a da pri tome potonja ostane nepromijenjena. U 2d prostoru takav scenarij nije moguć jer nije moguće postojanje dvije nezavisne duljine skale veličine sustava, a da jedna ne predstavlja ograničenje drugoj [148].

Za $q = 4$ eksponent y_τ pokazuje vrijednost koja je bliska vrijednosti za čisti Isingov model. Ovakav scenarij tumačimo postojanjem mehanizma ograničavanja simetrije parametra reda sustava zbog utjecaja nereda na točki prijelaza. Tenzorski karakter Pottsovog parametra reda, kao da se reducira na dva efektivna stanja spinova na rešetci "uređeno" i "neuređeno", koja su zbog nereda zamrznuta na nekom mjestu na rešetci. Termodinamika fluktuirajućeg domenskog zida tada producira ponašanje korelacijske duljine slično Isingovom modelu. Jedino za $q = 8$ slučaj y_τ eksponent se svodi na vrijednost manju od $\frac{d}{2}$. Slika ograničavanja simetrije parametra reda može se proširiti i na ovaj slučaj uz uvođenje necjelobrojnog broja stanja $1 < q < 2$.

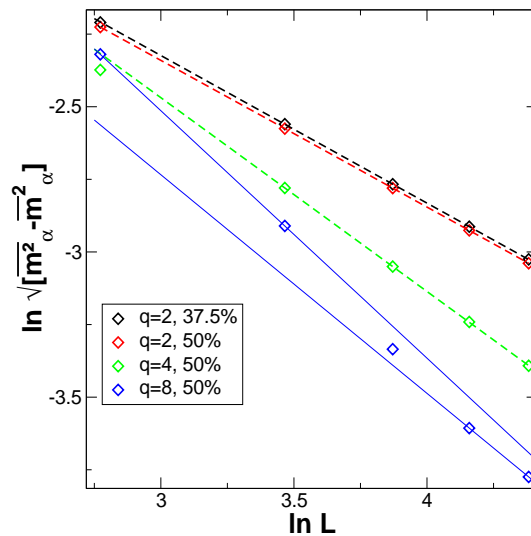
Tablica 6.17: Analiza skaliranja standardne devijacije $\sqrt{[m_\alpha^2 - \bar{m}_\alpha^2]}$. Koristi se jednopotencijska ovisnosti oblika f_1 . Za usporedbu, navodimo da je odgovarajući eksponent čistog Isingovog modela u 3d $\frac{\beta}{v} = 0.5182(3)$ [19], što odgovara $y_h = 2.4818(3)$. Efektivni eksponent za slučajeve faznog prijelaza prvog reda $q = 4$ i 8 u čistom slučaju je trivijalan i iznosi d .

	β/v - sve točke	$\beta/v, L \geq 16$	$\beta/v, L \geq 32$	y_h
$q = 2, c = 37.5\%$	0.507(1)	0.508(2)	0.507(2)	2.493(1)
$q = 2, c = 50\%$	0.506(2)	0.507(2)	0.506(3)	2.493(2)
$q = 4, c = 50\%$	0.634(9)	0.667(4)	0.668(7)	2.332(4)
$q = 8, c = 50\%$	-	-	(samo 64 i 80) 0.7*	2.3*

Skaliranje standardne devijacije termodinamičkih fluktuacija magnetizacije $\sqrt{[m_\alpha^2 - \bar{m}_\alpha^2]}$, prikazano je na slici 6.21. Ova standardna devijacija, povezana je s magnetskom susceptibilnosti sustava izrazom (3.43). Eksponent skaliranja y ima značenje $\frac{\beta}{v} = d - y_h$ prema izrazu (3.41).

Analiza skaliranja $\sqrt{[m_\alpha^2 - \bar{m}_\alpha^2]}$ sažeta je u tablici 6.17 s najboljom procjenom istaknutom masnim brojevima. Kolaps raspodjela s pripadnim eksponentima prikazan je na slici 6.22. Eksponenti se dobivaju kao rezultat ugađanja na jednopotencijsku ovisnost oblika f_1 . Za ovaj skup podataka pokazuje se da korekcije skaliranju, kada su prisutne, nisu potencijskog oblika.

Za obje koncentracije u sustavu $q = 2$ skaliranje je gotovo idealno jednopotencijsko i precizno se dobivaju eksponenti koji se podudaraju (0.507(1) za 37.5% i 0.507(2) za 50%). Za usporedbu, vrijednost koja odgovara čistom Isingovom modelu u 3d iznosi

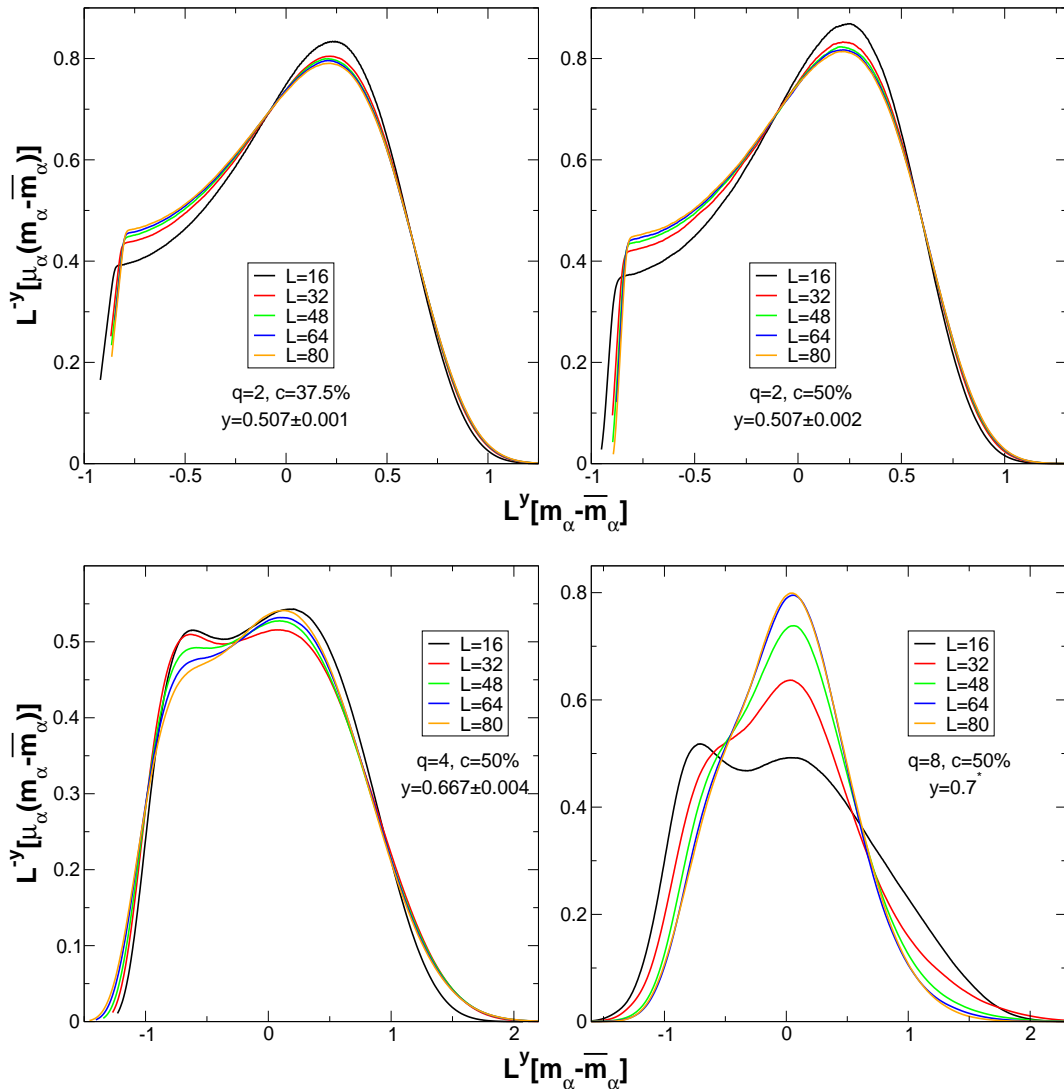


Slika 6.21: Fluktuacije termodinamičkog ansambla parametra reda $\sqrt{[m_\alpha^2 - \bar{m}_\alpha^2]}$. Za slučajeve $q = 2$ i 4 linearna regresija kroz sve točke osim najmanje $L = 16$ (crtkana linija) daje pouzdane rezultate za eksponent. U slučaju $q = 8$ vidljiva je snažna promjena režima pa se na temelju dvije najveće rešetke može procijeniti da je eksponent konvergencije ≈ 0.7 .

0.5182(3)[19].

Ponašanje magnetskog termodinamičkog eksponenta $\frac{\beta}{v}$ u usporedbi s eksponentom konvergencije srednje vrijednosti magnetizacije $[\bar{m}_\alpha]$, $\tilde{\beta}'_v$ još je intrigantnije. Vrijednosti $\tilde{\beta}'_v$ se podudaraju u granicama pogreške (vidjeti odjeljak 6.3.5, 0.519(3) za 37.5% i 0.519(2) za 50%) s vrijednosti $\frac{\beta}{v}$ za čisti slučaj koja iznosi 0.5182(3)[19]. S druge strane termodinamički eksponenti $\frac{\beta}{v}$ se podudaraju za dvije različite konfiguracije nereda i njegova vrijednost u odnosu na čisti slučaj iznosi 0.507(2) što je relevantnije ponašanje od pripadnog eksponenta konvergencije $\tilde{\beta}'_v$.

Ovakav rezultat kvalitativno je drugačiji od svih drugih slučajeva koje smo razmatrali u ovom radu u kojima su svi eksponenti fluktuacija svih observabli po ansamblu nereda uvijek dominantni nad termodinamičkim eksponentima. Iako je nered očito relevantan za $q = 2$, termodinamičke fluktuacije parametra reda skaliraju se eksponentom koji je dominantan nad eksponentom konvergencije srednje vrijednosti, koja je određena u ansamblu nereda. Postoji mogućnost da se eksponent konvergencije $[\bar{m}_\alpha]$ promjeni za znatno veće rešetke. Iako je eksponent konvergencije $\sqrt{[m_\alpha^2 - \bar{m}_\alpha^2]}$ dominantniji od eksponenta konvergencije $[\bar{m}_\alpha]$, vrijednosti potonje veličine su za $L = 10$



Slika 6.22: Raspodjele $\mu(m - \bar{m}_\alpha)$ reskalirane pripadnim eksponentima $y = \beta/\nu$ za različite slučajeve parametra Pottsovog modela q i koncentracije nereda c u 3d.

otprilike duplo veće nego standardne devijacije, prema našim rezultatima. Prema konvergenciji $\sqrt{[\overline{m^2_\alpha} - \overline{m_\alpha}^2]}$ i $[\overline{m_\alpha}]$ iz raspoloživih rezultata može se stoga procijeniti vrijednost L_1 kad fluktuacije u termodinamičkom ansamblu prerastaju srednje vrijednosti parametra reda u ansamblu nereda. Jednostavnim računom, uzimajući u obzir samo dominantno ponašanje dobiva se da je ta točka otprilike za $\ln L_1 \approx 60$, a usporedbom najbolje ugođenih funkcija na podatke dobiva se otprilike $\ln L_1 \approx 55(4)$. U

svakom slučaju te vrijednosti su daleko veće od bilo kojeg eksperimentalnog sustava pa nije plauzibilno da predstavljaju stvarnu karakterističnu skalu u sustavu. Na temelju rezultata, očekujemo da je ponašanje konvergencije termodinamičkih fluktuacija $\sqrt{[\overline{m^2}_\alpha - \overline{m}_\alpha^2]}$ i $[\overline{m}_\alpha]$ određeno jednakim eksponentima.

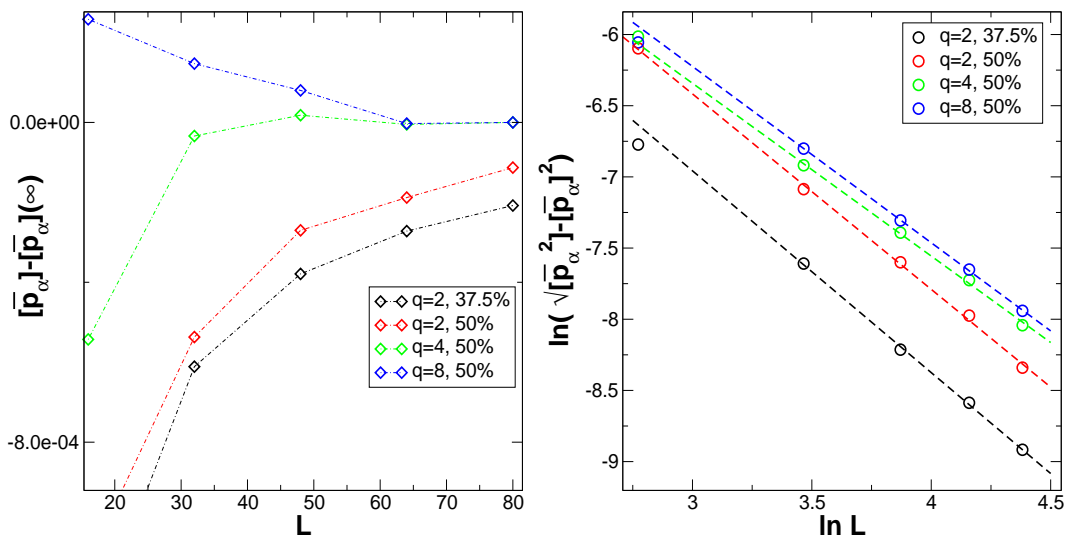
Za $q = 4$ postoje tragovi promjene režima rješenja za $L = 16$, ali skaliranje većih sustava konzistentno daje $\beta/\nu = 0.667(4)$. Rezultati za $q = 8$ pokazuju jaku promjenu režima. Raspodjele parametra reda u termodinamičkom ansamblu $[m - \overline{m}_\alpha]$ objašnjavaju probleme koji se javljaju za $q = 8$ slučaj. Prijelazni režim se vidi kao snažna promjena oblika raspodjele reskaliranjem (slika 6.22). Razmatrajući raspodjele, dolazimo do zaključka da je moguće utvrditi eksponent reskaliranja kojim se postiže gotovo idealni kolaps raspodjela za najveće dvije rešetke, $L = 64$ i 80 . Međutim kako se na temelju dvije veličine sustava ne može odrediti nepouzdanost, navodimo procjenu $\beta/\nu = 0.7^*$ (sa zvjezdicom). Na histogramu za $q = 4$ (slika 6.22) također se mogu primijetiti korekcije skaliranja. Analiza skaliranja raspodjela $\sqrt{[\overline{m^2}_\alpha - \overline{m}_\alpha^2]}$ pokazana je u tablici 6.17. U slučaju zaokruživanja prijelaza prvog reda, primjećujemo razlike između termodinamičkog eksponenta y_h i eksponenta koji određuje konvergenciju $[\overline{m}_\alpha]$, \tilde{y}'_h . Radi efekata konačnosti, na temelju podataka s kojima raspoložemo, ne može se zaključiti da su ti eksponenti različiti u limesu $L \rightarrow \infty$.

Svi drugi eksponenti osim y_τ , pa tako i magnetski, za slučajeve $q = 4$ i 8 pokazuju iznenađujuću razinu univerzalnosti. Takav rezultat implicira znatne sličnosti između zaokruženog prijelaza za bilo kakav slučaj faznog prijelaza prvog reda u 3d. Ovaj rezultat također zahtjeva dodatno istraživanje.

6.3.4 Fluktuacije kvazikritičnih temperatura

Konvergencija i fluktuacije kvazikritičnih temperatura u 3d daju indiciju da je priroda zaokruživanja prijelaza drugačija u 3d u odnosu na 2d slučajeve. Slika 6.23 prikazuje konvergencije $[\overline{p}_\alpha](L)$ i skaliranje standardnih devijacija $\sqrt{[\overline{p}_\alpha^2] - [\overline{p}_\alpha]^2}$.

Za kontinuirani fazni prijelaz očekivano ponašanje konvergencije $[\overline{p}_\alpha](L)$ u $[\overline{p}_\alpha](\infty)$ je s manjih vrijednosti prema većim. Manje vrijednosti p odgovaraju višim temperaturama. Iz razloga što su na točki kontinuiranog prijelaza dugovalne korelacije bitne, povećavanjem veličine sustava L , povećava se entropija fluktuacija na kvazikritičnoj



Slika 6.23: Lijevo: konvergencija $[\bar{p}_\alpha](L)$; desno: konvergencija $\sqrt{[\bar{p}_\alpha]^2 - [\bar{p}_\alpha]^2}$ za slučajeve relevantnog nereda u 3d. Pravac linearne regresije (crtano) je provučen kroz sve točke osim $L = 16$.

točki. Zbog toga bi kvazikritične temperature većih sustava trebale biti niže. Ponašanje $[\bar{p}_\alpha](L)$ slijedi gore navedenu argumentaciju za Isingov model (i za sve slučajeve u 2d). Suprotno tome, konvergencije temperatura za zaokruženi prijelaz prvog reda pokazuju saturaciju u slučaju $q = 4$ i čak konvergenciju sa suprotne strane za $q = 8$ za male vrijednosti L . Ovakvo ponašanje nazivamo "degeneriranim". Zaključak je da iako je prijelaz kontinuiran, povećavanje sustava ne rezultira povećavanjem termodinamičke entropije usrednjene po ansamblu nereda na točki prijelaza. Ovakvo čudno ponašanje implicira da na srednje entropije, osim termodinamike, imaju utjecaj i dodatni efekti koji dolaze isključivo od utjecaja nereda. Prevladavanje efekata nereda može učiniti da promjena termodinamičke entropije reskaliranjem sustava postane nebitna u usporedbi s njenom varijacijom zbog utjecaja nereda.

Za $q = 4$ i 8 vrijednost $[\bar{p}_\alpha](\infty)$ i pripadna greška su procijenjene rezultatima za dvije najveće rešetke. Približna analiza moguća je samo za $q = 2$, iako rezultati za eksponente pokazuju znatne promjene u ovisnosti o veličini sustava (pogledati tablicu 6.18). Rezultati pokazuju snažne korekcije skaliranja i zbog malog broja točaka nije moguće dobiti preciznu ocjenu konvergencijskog eksponenta. Vidljiva je tendencija znatnog povećavanja konvergencijskog eksponenta ako se uzimaju u obzir samo veće rešetke. Detalji analize su u tablici 6.18.

Tablica 6.18: Rezultati konvergencije $[\bar{p}_\alpha]$ za slučajeve relevantnog nereda u 3d. Koristi se jednopotencijska ovisnost tipa f'_1 . Za $q = 4$ i 8 vrijednosti $[\bar{p}_\alpha](L)$ pokazuju saturaciju za velike rešetke i asimptotska vrijednost i pripadna pogreška su procijenjene rezultatima za dvije najveće rešetke.

	sve točke: $[\bar{p}_\alpha](\infty); \tilde{y}'_\tau$	$\frac{\chi^2}{n}$	bez $L = 16$: $[\bar{p}_\alpha](\infty); \tilde{y}'_\tau$	$\frac{\chi^2}{n}$
$q = 2, c = 37.5\%$	0.52464(5); 1.05(7)	$0.5 \cdot 10^{-11}$	0.52460(8); 1.17(6)	$0.4 \cdot 10^{-13}$
$q = 2, c = 50\%$	0.6219(8); 0.8(3)	$0.26 \cdot 10^{-9}$	0.62171(4); 1.6(2)	$0.4 \cdot 10^{-10}$
$q = 4, c = 50\%$	$[\bar{p}_\alpha](\infty) = 0.72136(4)$			
$q = 8, c = 50\%$	$[\bar{p}_\alpha](\infty) = 0.79821(5)$			

EkspONENTI skaliranja $\sqrt{[\bar{p}_\alpha^2] - [\bar{p}_\alpha]^2}$ u slučaju 3d predstavljaju pouzdanu varijablu sa slabim korekcijama skaliranja (slika 6.23, desno) što se može vidjeti iz analize konvergencije koja je navedena u tablici 6.19. Pripadne termodinamičke fluktuacije observable p_α zanemarivo su male u odnosu na fluktuacije u ansamblu nereda što smanjuje efekte konačnosti. U svim slučajevima korekcije skaliranja su vidljive za najmanju rešetku koja zbog toga vidljivo odstupa s asimptotskog pravca.

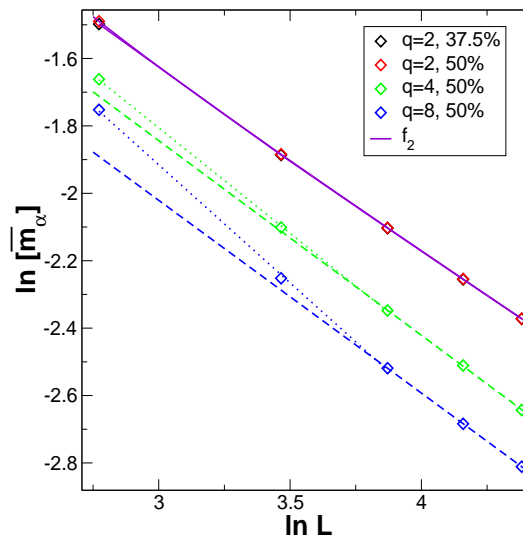
Tablica 6.19: Analiza skaliranja standardne devijacije $\sqrt{[\bar{p}_\alpha^2] - [\bar{p}_\alpha]^2}$ za slučajeve relevantnog nereda u 3d. Koristi se jednopotencijska ovisnosti tipa f_1 .

	\tilde{y}_τ , sve	$\tilde{y}_\tau, L \geq 16$	$\tilde{y}_\tau, L \geq 32$
$q = 2, c = 37.5\%$	1.34(7)	1.42(4)	1.37(6)
$q = 2, c = 50\%$	1.37(3)	1.35(5)	1.4(1)
$q = 4, c = 50\%$	1.24(3)	1.23(4)	1.26(5)
$q = 8, c = 50\%$	1.17(5)	1.24(2)	1.23(4)

Unatoč degeneriranoj konvergenciji $[\bar{p}_\alpha](L)$ za neke slučajeve, smatramo da eksponent fluktuacija kritičnih temperatura u ansamblu nereda \tilde{y}_τ , možemo povezati s eksponentom y_τ iz literature koja koristi pretpostavku efektivnog prijelaza drugog reda i za trodimenzionalne slučajeve. Prema argumentu Pázmándija i ostalih [65], temperaturna ovisnost slobodne energije (3.7), direktan je rezultat fluktuacija kritičnih temperatura.

Tablica 6.20: Usporedba kritičnih eksponenata \tilde{y}_τ s vrijednostima y_τ iz literature za trodimenzionalne slučajeve. Reference koje se odnose na pojedine vrijednosti eksponenata navedene su uz njihovu vrijednost.

	\tilde{y}_τ	y_τ - literatura
3d	$q = 2, c = 37.5\%$	1.464(4)[56]
	$q = 2, c = 50\%$	1.467(5)[66]
	$q = 4, c = 50\%$	1.33(3)[59]
	$q = 8, c = 50\%$	$q \rightarrow \infty$: 1.37(1)[60]



Slika 6.24: Konvergencija prosjeka parametra reda $[\overline{m}_\alpha]$. Za $q = 2$ postignuta je dobra konvergencija rezultata na funkciju f_2 (puna crta). Za slučajeve $q = 4$ i 8 rezultati pokazuju da je sustav postigao asimptotski režim za $L \geq 48$ i pravci linearne regresije (crtkano) opisuju te veličine sustava. Za $L \leq 48$ $q = 4$ i 8 sustavi pokazuju prisutnost utjecaja termodinamičkih fluktuacija.

Usporedba vrijednosti \tilde{y}_τ za 3d slučajeve i vrijednosti y_τ iz literature dana je u tablici 6.20. Slaganje je dobro iako su naše vrijednosti eksponenta niže, što implicira relevantnije ponašanje. Bilo bi također potrebno provesti dodatnu sistematsku studiju računa eksponenata u konačnom sustavu mijenjanjem koncentracija nereda.

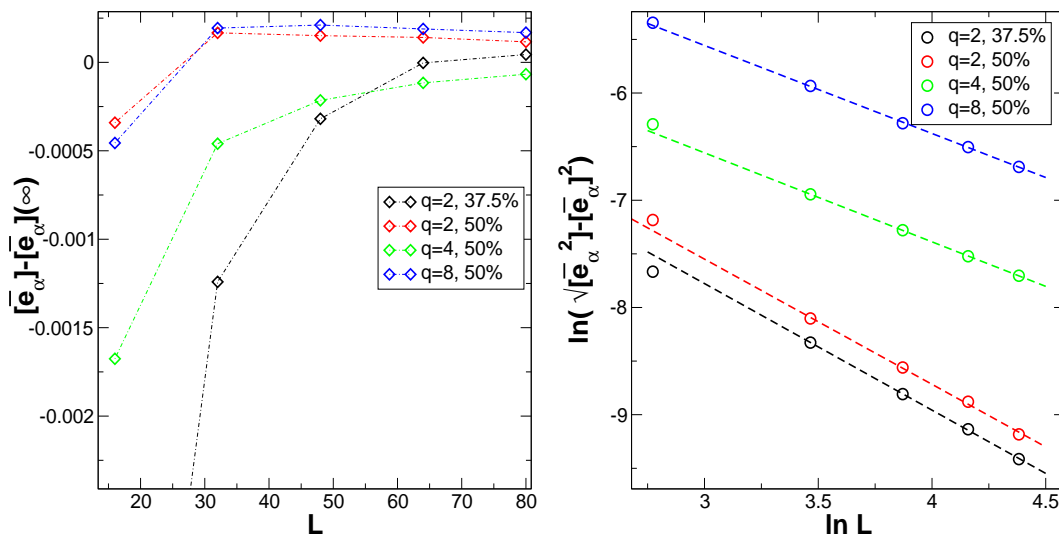
6.3.5 Ponašanje srednjih vrijednosti

Konvergencija $[\overline{m}_\alpha]$ s veličinom sustava je prikazana na slici 6.24. Za $q = 2$ konvergencija je dosljedno opisana dvopotencijskom funkcijom f_2 . Za $q = 4$ i 8 korekcije skaliranja nisu potencijskog tipa nego konvergencija $[\overline{m}_\alpha]$ pokazuje oštar lom. Rezultate za $q = 4$ i 8 stoga odvojeno analiziramo u dva raspona veličina $L \leq 48$ i $L \geq 48$. Eksponent \tilde{y}' za $L \leq 48$ pokazuje sličnosti s eksponentom $y = \frac{\beta}{\nu}$ određenim u odjeljku 6.3.3 pa vjerujemo da ponašanje za male L možemo opisati objasniti efektom konačnosti koji dolazi od od fluktuacija termodinamičkog ansambla. Za $L \geq 48$ eksponent pokazuje saturaciju za oba slučaja, u vrlo slične vrijednosti. Kompletana analiza sumirana je u tablici 6.21.

Konvergencija $[\overline{e}_\alpha]$ za 3d slučajeve vrlo je snažna, i znak je saturacije u skladu s po-

Tablica 6.21: Analiza skaliranja $[\overline{m}_\alpha]$. Koristi se jedno- i dvopotencijske ovisnosti tipa f_1 i f_2 . Eksponent koreskcije skaliranja za funkciju f_2 označen je s \tilde{y}'_1 .

	\tilde{y}' , iz f_1 - sve točke	\tilde{y}' iz f_1 , $L \geq 48$	\tilde{y}' iz f_1 , $L \leq 48$	\tilde{y}' ; \tilde{y}'_1 iz f_2
$q = 2$, $c = 37.5\%$	0.543(5)	0.531(7)	-	0.519(3) ; 2.2(2)
$q = 2$, $c = 50\%$	0.548(4)	0.532(5)	-	0.519(2) ; 2.4(2)
$q = 4$, $c = 50\%$	0.61(2)	0.58(1)	0.63(1)	-
$q = 8$, $c = 50\%$	0.66(3)	0.57(1)	0.70(2)	-



Slika 6.25: Lijevo: konvergencija $[\overline{e}]$, funkcijska ovisnost je oblika f'_2 (4.37), ali zbog malog broja točaka nije bilo moguće odrediti eksponente; desno: konvergencija fluktuacija srednjih vrijednosti energije $\sqrt{[\overline{e}_\alpha^2] - [\overline{e}_\alpha]^2}$, crtkane linije predstavljaju pravce linearne regresije povučene kroz točke $L > 16$.

Tablica 6.22: Analiza skaliranja standardne devijacije $\sqrt{[\overline{e}_\alpha^2] - [\overline{e}_\alpha]^2}$. Koristi se jednopotencijska ovisnosti tipa f_1 .

	\tilde{x} , sve	\tilde{x} , $L \geq 16$	\tilde{x} , $L \geq 32$
$q = 2$, $c = 37.5\%$	1.09(6)	1.18(1)	1.18(2)
$q = 2$, $c = 50\%$	1.22(4)	1.17(2)	1.21(3)
$q = 4$, $c = 50\%$	0.88(4)	0.83(1)	0.83(2)
$q = 8$, $c = 50\%$	0.84(5)	0.82(2)	0.80(4)

našanjem vrijednosti $[\overline{p}_\alpha]$. Naime, ako gustoća entropije pokazuje saturaciju kako smo argumentirali prije, za očekivati je da pri točki prijelaza u konačnom sustavu i gustoća energije pokazuje saturaciju, pošto su energija i entropija (pomnožena s temperaturom) istog reda. Ugađanjem na dvopotencijsku funkciju oblika f'_2 nije moguće dobiti

smislen rezultat zbog premalog broja točaka. Interesantno je i da veća koncentracija nereda za $q = 2$ pokazuje sličan plato u konvergenciji energije iako konvergencija $[p_\alpha]$ nije degenerirana kao za $q = 4$ i 8 slučajeve. Usredotočujemo se stoga na fluktuacije $\sqrt{[\bar{e}_\alpha^2]} - [\bar{e}_\alpha]^2$ koje omogućavaju pouzdano određivanje eksponenta konvergencije jer analiza pokazuje da nema znatnih korekcija skaliranja za $L > 16$. Analiza skaliranja je izložena u tablici 6.22.

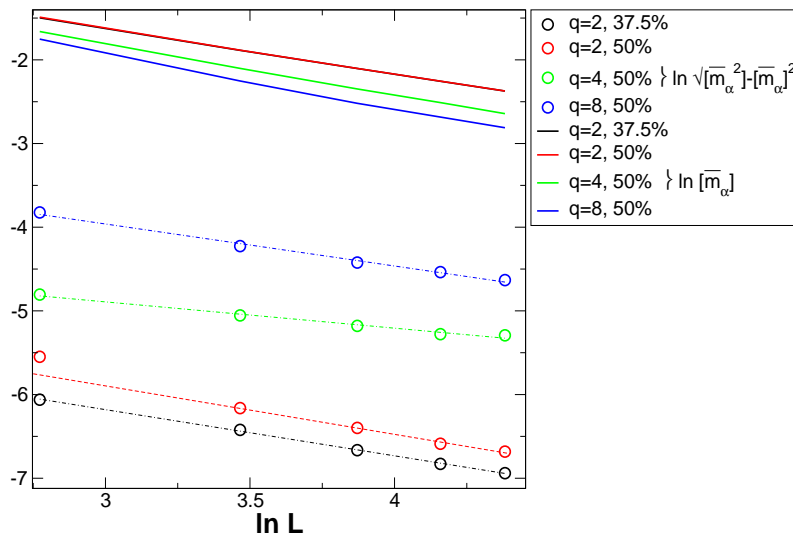
Ponašanje fluktuacija gustoće energije u termodinamičkom ansamblu u potpunoj je analogiji s 2d slučajevima, i sve iznesene opaske vrijede i za 3d. U svim slučajevima, fluktuacije energije u ansamblu nereda opisane su drugim po veličini relevantnim eksponentom $d - \tilde{x}$ i nije ih moguće objasniti oblikom slobodne energije efektivnog translacijski invarijantnog sustava (3.7).

Za razliku od 2d sustava, za sustave u 3d u literaturi u glavnom nisu navedeni rezultati za fluktuacije gustoće energije koje bismo mogli usporediti s našima. Unatoč brojnim studijama 3d Isingovog modela s neredom [66, 57, 140], niti jedna od njih ne navodi ponašanje fluktuacije gustoće energije. Studije zaokruživanja faznog prijelaza prvog reda za velike q nisu brojne i također ne navode ovu veličinu [60].

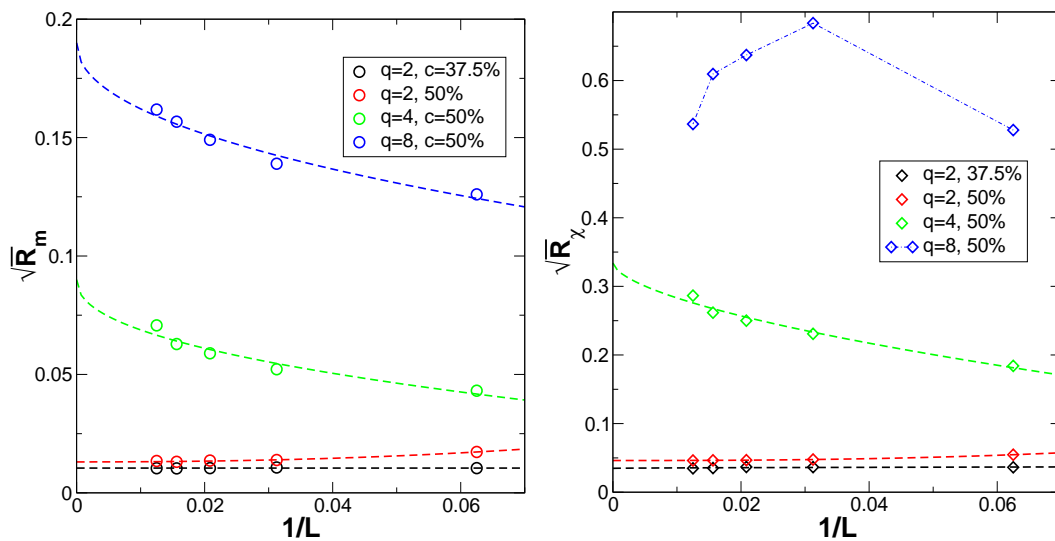
Jedini rezultat koji smo u mogućnosti usporediti s odgovarajućim našim jest onaj za fluktuacije gustoće energije za $q = 4$ sustav u 3d iz studije Chatelaina i ostalih [59]. Autori dobivaju eksponent κ fluktuacija gustoće energije određen usrednjavanjem pri jedinstvenoj temperaturi za konačne rešetke do veličina $L = 128$. Njihovi rezultati pokazuju da eksponent znatno ovisi o koncentraciji nereda i varira u rasponu od $0.63 \leftrightarrow 1.07$ promjenom koncentracije od 44% do 68%. Te njihove vrijednosti vode na vrijednosti eksponenta $d - \kappa$ u rasponu od $1.93 \leftrightarrow 2.57$. U slici efektivnog faznog prijelaza drugog reda, taj eksponent bi trebao biti jednak eksponentu " y_τ " koji također određuju i za koji dobivaju vrijednost 1.33(3). Jasno je da, u još većoj mjeri nego za dvodimenzionalne slučajeve, ta dva eksponenta ne korespondiraju jedan s drugom.

6.3.6 Omjeri samousrednjavanja

Fluktuacije srednje magnetizacije u ansamblu nereda pokazuju jednake kvalitativne karakteristike kao u 2d slučajevima. U nekim slučajevima konvergencija za male L je prema eksponentu koji je dominantniji od eksponenta trnjenja srednje vrijednosti. Smatramo, da je to utjecaj konačnosti i da standardna devijacija $\sqrt{[\bar{m}_\alpha^2]} - [\bar{m}_\alpha]^2$ nije



Slika 6.26: Konvergencija fluktuacija srednjih vrijednosti parametra reda $\sqrt{[\bar{m}_\alpha^2]} - [\bar{m}_\alpha]^2$. Na istoj slici prikazane su i vrijednosti $[\bar{m}_\alpha]$.



Slika 6.27: ovisnosti $\sqrt{R_m}$ (lijevo) i $\sqrt{R_x}$ (desno) o $\frac{1}{L}$, crtane linije prikazuju funkciju tipa f_1 koja najbolje aproksimira točke pod uvjetom da omjeri imaju konačan $L \rightarrow \infty$ limes. Za $q = 8$ slučaj omjer R_x pokazuje nepravilnu konvergenciju kao posljedica snažnog prijelaznog režima (odjeljak 6.3.3) pa je moguće samo grubo procijeniti limes.

dostigla asimptotski režim za razliku od $[\bar{m}_\alpha]$. Na slici 6.26 uspoređujemo vrijednosti $\sqrt{[\bar{m}_\alpha^2]} - [\bar{m}_\alpha]^2$ s $[\bar{m}_\alpha]$.

Limese $L \rightarrow \infty$ od $\sqrt{R_m}$ i $\sqrt{R_x}$ procjenjujemo na jednak način kao i za 2d slučajeve, a rezultate konvergencije prikazujemo u tablici 6.23. Omjeri samousrednjavanja koje dobivamo, više su redova veličine manji od odgovarajućih rezultata koji se dobivaju usrednjavanjem pri jedinstvenoj temperaturi. Jedini pokušaj računanja omjera R_x usrednjavanjem pri vlastitim kvazikritičnim temperaturama za 3d Isingov model do sada [66], vodi na limes koji je ≈ 50 puta manji od odgovarajuće vrijednosti koja se dobiva usrednjavanjem pri jedinstvenoj temperaturi. Njihov rezultat blizak je našima, pogotovo onome za slučaj s 50% nereda.

Za dvije različite koncentracije za $q = 2$, ekstrapolirane vrijednosti omjera samousrednjavanja pokazuju znatnije razlike nego u 2d za $q = 3$. Iako su statističke nepouzdanosti male, prisutnost perzistentnih korekcija zbog koncentracije može stvoriti nepravilnu konvergenciju za velike L pa zbog toga ne možemo zaključiti da su omjeri različiti u limesu $L \rightarrow \infty$. Konvergencija omjera R_x je za $q = 8$ slučaj nepravilna. To posljedica prijelaznog režima u termodinamičkim fluktuacijama koji je opisan u odjeljku 6.3.3. Pripadni rezultati za termodinamičke fluktuacije parametra reda pokazali su izlazak iz prijelaznog režima za najveće dvije rešetke pa stoga smatramo da možemo procijeniti asimptotsku vrijednost na temelju rezultata za najveću rešetku $L = 80$.

Tablica 6.23: Analiza skaliranja omjera $\sqrt{R_m(L)}$ i $\sqrt{R_x(L)}$ za slučajeve relevantnog nereda u 3d. Koristimo potencijalnu ovisnost oblika f_1' . S ω i ω' označavamo eksponent konvergencije ugađanja. Pokazujemo i neke referentne vrijednosti iz literature.

EIC računi			
	$\sqrt{R_m(L \rightarrow \infty)}$	ω	$R_m(L \rightarrow \infty)$
$q = 2, c = 37.5\%$	0.0104(1)	≈ 0	$1.08(2) \cdot 10^{-4}$
$q = 2, c = 50\%$	0.0130(3)	2.2(3)	$1.69(8) \cdot 10^{-4}$
$q = 4, c = 50\%$	0.09(1)	0.4(1)	$0.8(2) \cdot 10^{-2}$
$q = 8, c = 50\%$	0.19(2)	0.5(2)	$3.6(8) \cdot 10^{-2}$
	$\sqrt{R_x(L \rightarrow \infty)}$	ω'	$R_x(L \rightarrow \infty)$
$q = 2, c = 37.5\%$	0.035(1)	0.6(2)	$1.23(7) \cdot 10^{-3}$
$q = 2, c = 50\%$	0.059(1)	2.0(2)	$2.4(1) \cdot 10^{-3}$
$q = 4, c = 50\%$	0.33(2)	0.6(1)	0.11(1)
$q = 8, c = 50\%$	0.5(1)*	?	0.3(1)*
literatura			
$q = 2$	kan. ner. $c = 40\%$ [120]: $R_m(\infty) \approx 0.022(2)$; $R_x(\infty) \approx 0.062(4)$ velekan. ner. $c = 40\%$ i 20% [120]: $R_m(L = 80) \approx 0.058(4)$; $R_x(L = 80) \approx 0.106(4)$ velekan. ner. $c = 20\%$ [66], usrednjavanje pri $T_\alpha^C(L)$: $R_x(L \rightarrow \infty) \approx 2.2(2) \cdot 10^{-3}$		
$q = 4$	kanonski nered $c = 44\%$ i 56% [59]: $R_x(\infty) \approx 1.3(1)$		

7. Zaključci i rasprava

7.1 Sažetak

Tema ovog rada jest proučavanje faznog prijelaza modificiranog zamrznutim nemagnetičnim neredom. Stavljamo težište na implikacije translacijske neinvarijantnosti pri točki prijelaza na kritično ponašanje. Unatoč postojanju analitičkih rezultata za mali broj modela s neredom, koji uzimaju u obzir translacijsku neinvarijantnost [62, 9], prevladavajući pristup faznom prijelazu u općenitom sustavu jest preko konstrukcije ekvivalentnog translacijski invarijantnog sustava [61, 52, 59]. Takva konstrukcija omogućuje primjenu perturbativnog računa renormalizacijske grupe, ali i znatno olakšava numeričke račune.

Postavljamo hipotezu za homogeni oblik slobodne energije u konačnom sustavu, u kojoj prostorne nehomogenosti uzimamo u obzir preko fluktuacija kvazikritičnih temperatura sustava s različitim konfiguracijama nereda. Pojavu prostorne nehomogenosti na svim skalama povezujemo s dominantnošću fluktuacija kvazikritičnih temperatura nad područjem zaokruživanja. Na temelju uvedene hipoteze homogenosti argumentiramo da se informacija o termodinamičkim fluktuacijama energije u sustavu gubi konstrukcijom efektivnog translacijski invarijantnog sustava, u slučajevima kad je raspon fluktuacija kvazikritičnih temperatura veći od širine područja zaokruživanja.

Za račun kritičnog ponašanja koristimo EIC algoritam, koji je razvijen i proučen tijekom izrade ove disertacije. On je jedinstven po svojstvu generiranja ravnotežnih konfiguracija konačnog sustava pri kvazikritičnoj temperaturi sustava. Ovaj postupak nam omogućuje račun kritičnog ponašanja pri vlastitoj kvazikritičnoj točki svake konfiguracije nereda. Na taj način, eksplicitno dozvoljavamo prostorne nehomogenosti u sustavu na točki prijelaza.

Studiju provodimo na primjeru Pottsovog modela u 2 i 3d s nemagnetičnim zamrznutim neredom. U svim slučajevima kad je nered relevantan, dobivamo da su fluktuacije kvazikritičnih temperatura dominantne u odnosu na područje zaokruživanja. Računom prostorne raspodjele parametra reda, pokazujemo da takav ishod uzrokuje prostorne nehomogenosti na svim skalama.

Kad je nered irelevantan, dobivamo da prostorne nehomogenosti u sustavu nestaju u granici $L \rightarrow \infty$. Kad je nered relevantan dobivamo da pri točki prijelaza u sustavu postoje nehomogenosti na svim skalama u svim slučajevima koje promatramo. To se odražava u kompliciranijem kritičnom ponašanju. Osim dva kritična eksponenta, kojima pripisujemo uobičajeno termodinamičko značenje, promatramo i fluktuacije srednjih vrijednosti observabli i kvazikritičnih temperatura u ansamblu nereda. Te veličine također pokazuju potencijско ponašanje, ali različito od termodinamičkog. Smatramo zbog toga da su ti eksponenti ansambla nereda povezani s još nerazjašnjenim optimizacijskim procesom slobodne energije sustava pri prijelazu u nametnutoj konfiguraciji nereda. U ovom radu uspjeli smo nezavisno izračunati i jedne i druge eksponente.

Pottsov model je paradigma faznih prijelaza i predstavlja model sa spinovima diskretne simetrije, koji u ovisnosti parametra modela q opisuje širok spektar klasa univerzalnosti prijelaza drugog reda, kao i prijelaz prvog reda. Smatramo da se naši zaključci o prirodi faznog prijelaza s relevantnim neredom mogu poopćiti na sustave koji imaju svojstvo neekstenzivnosti slobodne energije u realnom prostoru, na točki prijelaza. Na takve sustave se i odnosi opis prijelaza preko slobodne energije homogenog oblika. Neki primjeri klasa prijelaza na koje se naša argumentacija odnosi su: feromagnetski prijelaz u sustavima s jednom osi, fazni prijelazi u fluidima, ali i sustave s prijelazom prvog reda.

7.2 Kritično ponašanje prijelaza s neredom

EIC algoritam nam omogućuje separaciju termodinamičkih fluktuacija observabli oko srednjih vrijednosti od fluktuacija srednjih vrijednosti u ansamblu nereda. Te dvije vrste fluktuacija definiraju dvije vrste raspodjela:

- **Termodinamičke raspodjele μ :** reskaliranje termodinamičkih raspodjela energije i magnetizacije daje informaciju o termodinamičkim eksponentima.

- **Raspodjele srednjih vrijednosti observabli i kvazikritičnih temperatura u ansamblu nereda $\tilde{\mu}$:** njihovo reskaliranje daje informaciju o fluktuacijama u ansamblu nereda pojedinih observabli.

Tablica 7.1: Značenje kritičnih eksponenata u faznom prijelazu u sustavu s relevantnim neredom i korespondencija s kritičnim ponašanjem sustava u kojemu je nered irelevantan.

raspodjela	eksponent reskaliranja	
	relevantan nered	irelevantan nered
$\mu(e_\alpha - \bar{e}_\alpha)$	$x = d - y_\tau$	$d - y_\tau$
$\tilde{\mu}(\bar{e}_\alpha - [\bar{e}_\alpha])$	\tilde{x}	
$\tilde{\mu}(T_\alpha^C - [T_\alpha^C])$	\tilde{y}_τ	$\frac{d}{2}$
$\mu(m_\alpha - \bar{m}_\alpha)$	$\frac{\beta}{v} = d - y_h$	$d - y_h$
konvergencija $[\bar{m}_\alpha]$	$d - y'_h$	

U tablici 7.1 sumirane su raspodjele/veličine koje daju najbolju informaciju o prijelazu u asimptotskom režimu i s njima povezani eksponenti. U slučaju kad je nered relevantan, fluktuacije u ansamblu nereda *a priori* su opisane različitim eksponentima od onih koji opisuju termodinamičke fluktuacije. Kad je utjecaj nereda irelevantan, prijelaz ostaje opisan dvama netrivialnim kritičnim eksponentima, kao i u čistom slučaju (y_τ i y_h).

7.2.1 Termalni eksponenti

U odjeljku 3.2 postavili smo hipotezu homogenosti slobodne energije (3.4), u kojoj smo uveli opis prostornih nehomogenosti preko fluktuacija kvazikritičnih temperatura u ansamblu nereda, kao veličine razvezane od termodinamičkih fluktuacija u sustavu. Eksponent s kojim se skalira raspodjela kvazikritičnih temperatura označavamo s \tilde{y}_τ , a termalni eksponent, koji određuje širinu područja zaokruživanja označavamo s y_τ . Napominjemo da eksponent $y_\tau - d$ opisuje fluktuacije gustoće energije u termodinamičkom ansamblu i shodno s tim je povezan s eksponentom toplinskog kapaciteta $\alpha/v = 2y_\tau - d$.

U slučajevima kada je nered irelevantan prema Harrisovom kriteriju, vrijedi $y_\tau < \tilde{y}_\tau$ i uzimanje u obzir prostornih nehomogenosti ne daje nikakvu novu informaciju o prijelazu. Dobiva se da su fluktuacije kvazikritičnih temperatura slučajne i da se

skaliraju prema Gaussovoj raspodjeli s eksponentom $\tilde{y}_\tau = \frac{d}{2}$ (odjeljak 6.1). Prijelaz u granici $L \rightarrow \infty$ ostaje opisan eksponentima čistog slučaja i translacijski invarijantnim oblikom slobodne energije ekvivalentnim čistom slučaju (odjeljak 5.3.1).

U svim slučajevima u kojima je nered relevantan, koje smo promatrali, dobivamo da vrijedi nejednakost:

$$y_\tau > \tilde{y}_\tau. \quad (7.1)$$

Prema argumentaciji iz odjeljka 3.2, u odjeljku 5.3.2 pokazali smo da takav ishod implicira perzistiranje prostornih nehomogenosti u sustavu, na svim skalama.

Tablica 7.2: Usporedba kritičnih eksponenata y_τ u termodinamičkom ansamblu s rezultatima za eksponent fluktuacija kvazikritičnih temperatura \tilde{y}_τ dobivenim EIC računom. U trećem stupcu prikazani su i eksponenti koji se u literaturi nazivaju termalnim eksponentima, a koje u ovom radu povezujemo s eksponentom fluktuacija kvazikritičnih temperatura u ansamblu nereda.

		EIC		literatura
		y_τ	\tilde{y}_τ	" y_τ " ($\equiv \tilde{y}_\tau$)
2d	$q = 3, c = 12.5\%$	1.105(2)	0.88(2)	0.96(4)[52]
	$q = 3, c = 25\%$	1.068(1)	0.95(1)	
	$q = 8, c = 25\%$	1.084(1)	0.84(3)	0.99(1)[52] 0.99(5)[54]
3d	$q = 2, c = 37.5\%$	1.598(1)	1.42(4)	1.464(4)[56];
	$q = 2, c = 50\%$	1.572(1)	1.37(3)	1.467(5)[66]
	$q = 4, c = 50\%$	1.599(2)	1.24(3)	1.33(3)[59]
	$q = 8, c = 50\%$	1.458(3)	1.24(2)	$q \rightarrow \infty$: 1.37(1)[60]

U tablici 7.2 uspoređujemo rezultate računa EIC algoritmom, za eksponente fluktuacija kvazikritičnih temperatura \tilde{y}_τ s termodinamičkim eksponentom y_τ kojeg dobivamo iz fluktuacija energije u termodinamičkom ansamblu. Rezultati za termodinamički eksponent y_τ još ne postoje u prijašnjim radovima, koliko znamo. Statističke pogreške eksponenata \tilde{y}_τ ovise znatno jače o statistici nereda od termodinamičkih eksponenata. Usto nije niti provedena analiza perzistentnih korekcija skaliranjem zbog nereda, mijenjanjem koncentracije. Unatoč nepouzdanostima, u svim slučajevima, eksponent fluktuacija kvazikritičnih temperatura u ansamblu nereda je dominantan u odnosu na pripadni termodinamički eksponent y_τ .

U tablici 7.2 navodimo također i vrijednosti eksponenta " y_τ " iz literature (pojedine reference su navedene u tablici). Vrijednosti eksponenata \tilde{y}_τ koje mi određujemo, bliže su rezultatima iz prijašnjih radova. U ovoj oglednoj studiji nismo bili u mogućnosti

Tablica 7.3: Eksponent konvergencije $\sqrt{[\bar{e}_\alpha^2] - [\bar{e}_\alpha]^2}$, \tilde{x} izračunat u ovom radu usrednjavanjem pri vlastitim kvazikritičnim temperaturama uspoređen s eksponentom konvergencije $\sqrt{\langle \bar{e}_\alpha^2 \rangle - \langle \bar{e}_\alpha \rangle^2}$ označenim kao κ , određenim usrednjavanjem pri jedinstvenoj temperaturi. Eksponent konvergencije iz prijašnjih radova označavamo s κ . Radi usporedbe navodimo također i eksponent koji se naziva termičkim eksponentom u literaturi y_τ i koji odgovara eksponentu \tilde{y}_τ određenom u ovom radu.

	EIC	literatura:			
		\tilde{x}	κ	$d - \kappa$	$y_\tau (\equiv \tilde{y}_\tau)$
2d	$q = 3, c = 12.5\%$	0.62(2)	0.91(1)[52]	1.09(1)	0.96(4)
	$q = 3, c = 25\%$	0.82(2)	0.927(1)($q = 2$) \leftrightarrow 0.86(1)($q = 4$)[64]	1.073(1) \leftrightarrow 1.14(1)	$\approx 1^+$
	$q = 8, c = 25\%$	0.62(5)	0.65(1)[52]	1.35(1)	0.99(1)
3d	$q = 2, c = 37.5\%$	1.18(1)	-	-	-
	$q = 4, c = 50\%$	0.83(1)	0.63 \leftrightarrow 1.07[59]	1.93 \leftrightarrow 2.57	1.33(3)
	$q = 8, c = 50\%$	0.82(2)	-	-	-

dosljedno proučiti utjecaj mijenjanja koncentracije na račun eksponenata u konačnom sustavu.

7.2.2 Fluktuacije energije u ansamblu nereda

U svim slučajevima kad je nered relevantan koje promatramo, dobivamo da su termodinamičke fluktuacije energije subdominantne fluktuacijama energije u ansamblu nereda. Ovakav rezultat je nemoguće opisati faznim prijelazom drugog reda u efektivnom translacijski invarijantnom sustavu. Oblik slobodne energije (3.7) nije u mogućnosti razlučiti termodinamičke fluktuacije i fluktuacije u ansamblu nereda. Slika prijelaza u efektivnom translacijski invarijantnom sustavu, za eksponent reskaliranja gustoće energije daje $\tilde{y}_\tau - d$. Čak i u radovima koji zastupaju sliku prijelaza u efektivnom translacijski invarijantnom sustavu, autori nisu u mogućnosti objasniti podrijetlo eksponenta reskaliranja gustoće energije κ [52, 59].

U tablici 7.3 sumiramo rezultate izračunate u ovom radu EIC algoritmom, za eksponent \tilde{x} koji opisuje fluktuacije srednjih vrijednosti gustoće energije u ansamblu nereda, s eksponentom κ iz prijašnjih radova, koji opisuje fluktuacije energije pri jedinstvenoj temperaturi. Za usporedbu navodimo i vrijednosti eksponenta \tilde{y}_τ iz istih radova koji određuju eksponent κ iz kojih se vidi da ti eksponenti nisu povezani.

Ovi rezultati odražavaju činjenicu da su fluktuacije energije u ansamblu nereda razvezane od termodinamičkih fluktuacija. Energetska skala fluktuacija u ansamblu nereda dominantna je nad energetska skalom termodinamičkih fluktuacija energije.

Tablica 7.4: Usporedba magnetskih eksponenata y_h i \tilde{y}'_h određenih u ovom radu s odgovarajućim vrijednostima iz literature.

		EIC		literatura
		y_h	\tilde{y}'_h	y_h
2d	$q = 3, c = 12.5\%$	1.868(2)	1.870(4)	1.8653(1)[52]
	$q = 3, c = 25\%$	1.868(3)	1.872(3)	
	$q = 8, c = 25\%$	1.862(4)	1.869(3)	1.858(4)[52] 1.873(2)[54]
3d	$q = 2, c = 37.5\%$	2.493(1)	2.481(2)	2.482(1)[56]
	$q = 2, c = 50\%$	2.493(2)	2.481(3)	
	$q = 4, c = 50\%$	2.332(4)	2.42(1)	2.35(5)[59]
	$q = 8, c = 50\%$	2.3(1)	2.43(1)	-

7.2.3 Magnetski eksponenti

Eksponent y_h , odgovoran je za termodinamičke fluktuacije parametra reda oko točke prijelaza sustava za bilo koju konfiguraciju nereda i shodno tome za divergenciju magnetske susceptibilnosti, koja je određena eksponentom $\gamma/\nu = 2y_h - d$. U prijašnjim radovima, magnetska kritična svojstva određuju se iz konvergencije parametra reda usrednjene pri jedinstvenoj temperaturi $\langle \overline{m}_\alpha \rangle$.

U tablici 7.4 prikazujemo usporedbu termodinamičkog magnetskog eksponenta y_h , koji opisuje divergenciju susceptibilnosti χ i eksponenta \tilde{y}'_h koji opisuje konvergenciju srednje vrijednosti parametra reda u ansamblu nereda $[\overline{m}_\alpha]$ određenih s EIC algoritmom, s vrijednosti eksponenta " y_h " određenih u literaturi usrednjavanjem pri jedinstvenoj temperaturi. Slaganje eksponenta y_h iz prijašnjih radova s eksponentom \tilde{y}'_h određenim u ovom radu, vrlo je dobro.

Eksponenti y_h i \tilde{y}'_h određeni u ovom radu se podudaraju do na statističku nepouzdanost u svim slučajevima relevantnog utjecaja nereda u 2d. Za 3d Ising s neredom, numerički rezultat za termodinamički eksponent y_h je dominantan u odnosu na eksponent \tilde{y}'_h , za dovoljno mali iznos da prema argumentaciji iz odjeljka 6.3.3 smatramo da su oni u granici $L \rightarrow \infty$ jednaki.

Slučajevi zaokruživanja prijelaza prvog reda u 3d pokazuju znatniju numeričku razliku između eksponenata y_h i \tilde{y}'_h . Zbog efekata promjene režima koji su u tim slučajevima prisutni, ne može se zaključiti postoji li razlika između tim eksponentima i u granici $L \rightarrow \infty$ sustava.

Ti eksponenti se u našem postupku određuju nezavisno i na temelju slike kritičnog

ponašanja iz odjeljka 3.4 nema *a priori* razloga zašto bi bili jednaki. Eventualno podudaranje eksponenata y_h i \tilde{y}'_h , daje uvid u fazni prijelaz s neredom. U odjeljku 5.3.2 iznijeli smo sliku po kojoj se uređivanje događa na fiksnom fraktalnom volumenu \tilde{V}_α . Jednakost eksponenata, u toj slici znači da termodinamičke fluktuacije mogu stvoriti konfiguracije u kojima iznos volumena od \tilde{V}_α fluktuiraju za iznos proporcionalan samom volumenu.

7.2.4 Omjer samousrednjavanja

Tablica 7.5: Usporedba omjera samousrednjavanja za magnetizaciju R_m i susceptibilnost R_χ u limesu $L \rightarrow \infty$, izračunatih EIC algoritmom usrednjavanjem observabli pri vlastitim kvazikritičnim temperaturama s vrijednostima iz literature. Pojedine reference navedene su pokraj pripadnih vrijednosti. Ističemo jedinstven rezultat iz literature za vrijednost R_χ za 3D Ising koji je dobiven [66] usrednjavanjem pri vlastitim kvazikritičnim temperaturama.

		EIC		literatura	
		$R_m(L \rightarrow \infty)$	$R_\chi(L \rightarrow \infty)$	$R_m(L \rightarrow \infty)$	$R_\chi(L \rightarrow \infty)$
2d	$q = 3, c = 12.5\%$	$5(2) \cdot 10^{-4}$	$0.8(2) \cdot 10^{-2}$	0.02 ↔ 0.04[64]	-
	$q = 3, c = 25\%$	$6(1) \cdot 10^{-4}$	$1.0(2) \cdot 10^{-2}$		-
	$q = 8, c = 25\%$	$1.0(2) \cdot 10^{-2}$	$9.0(6) \cdot 10^{-2}$	-	-
3d	$q = 2, c = 37.5\%$	$1.08(2) \cdot 10^{-4}$	$1.23(7) \cdot 10^{-3}$	0.02 ↔ 0.06[66]	0.06 ↔ 0.10[66]
	$q = 2, c = 50\%$	$1.69(8) \cdot 10^{-4}$	$2.4(1) \cdot 10^{-3}$		$T_\alpha^c(L): 2.2(2) \cdot 10^{-3}$ [66]
	$q = 4, c = 50\%$	$0.8(2) \cdot 10^{-2}$	0.11(1)	-	1.3 ↔ 1.7[59]
	$q = 8, c = 50\%$	$3.6(8) \cdot 10^{-2}$	0.3(1)*	-	-

U tablici 7.5 rezimiramo rezultate koje dobivamo za omjere samousrednjavanja određene postupkom EIC kao i rezultate iz literature s kojima se naši rezultati mogu usporediti. Rezultati za omjere samousrednjavanja koje dobivamo za 3d Ising, relativno su bliski s jedinim rezultatom iz literature za omjer samousrednjavanja R_χ izračunat pri kvazikritičnim temperaturama za svaku pojedinu konfiguraciju nereda.

Usporedba vrijednosti omjera samousrednjavanja s rezultatima iz prijašnjih radova koji koriste usrednjavanje pri jedinstvenoj temperaturi otkriva razlike od po nekoliko redova veličine. Računanje termodinamičkih fluktuacija nam omogućuje činjenica da su fluktuacije vrijednosti dobivene usrednjavanjem pri vlastitim kvazikritičnim temperaturama svake konfiguracije nereda više redova veličine manje nego pri usrednjavanju pri jedinstvenoj temperaturi.

7.3 Eksperimentalna predikcija divergencije toplinskog kapaciteta

Mogućnost pozitivnog kritičnog eksponenta toplinskog kapaciteta $\alpha > 0$, u sustavima koji sadrže zamrznuti nemagnetični nered, najzanimljivija je kao eksperimentalna predikcija ovog rada. Takav efekt može se opaziti jedino direktnim kalorimetrijskim mjerenjem toplinskog kapaciteta na sustavu u kojemu su dodatni efekti (od na primjer fonona) zanemarivi pri prijelazu.

Indirektna procjena toplinskog kapaciteta, optičkim mjerenjima daje informaciju o prostorno zamrznutim varijacijama energije, nametnutim specifičnom konfiguracijom nereda, a ne o termodinamičkim fluktuacijama. Na primjer, dvolomnost Δn , koja se koristi u indirektnom mjerenju toplinskog kapaciteta halida može se povezati sa spinskim stupnjevima slobode preko izraza [110]:

$$\Delta n \propto \sum_{\vec{r}} g(\vec{r})[\sigma_0 \sigma_{\vec{r}}], \quad (7.2)$$

gdje je $g(\vec{r})$ prostorno ovisna funkcija. Korelacijska funkcija koji ulazi u račun dvolomnosti je srednja korelacijska funkcija po ansamblu nereda (5.14), za koju su naši računi pokazali da opada s duljinom uređivanja ζ i čije je ponašanje drugačije od korelacijske duljine ξ , kada je nered relevantan. Optička mjerenja polučuju dominantnu duljinu, a to je varijacija srednjih vrijednosti u ansamblu nereda koja je fiksirana u vremenu i koja ne doprinosi toplinskom kapacitetu jer je razvezana od termodinamičkih fluktuacija. Karakteristična duljina koju optička mjerenja mjere jest duljina uređivanja (Chayesova duljina) ζ , koja reflektira prostorne nehomogenosti u sustavu zbog neperturbativnog učinka nereda.

Dodatan tehnički problem u mjerenju kritičnih eksponenta u eksperimentalnim sustavima jest u tome što je iznimno teško postići da duljina uređivanja sustava bude veličine samog sustava i u pravilu je više redova veličine manja. Razlog je postojanje dodatnih efekata koji su snažniji od efekta koji može uzrokovati nemagnetični zamrznuti nered, kao na primjer gradijenti koncentracije nereda ili mikrofrakture u uzorku. Za primjer, u eksperimentalnim realizacijama Isingovog modela s neredom, teško je postići da korelacijska duljina za bilo koju temperaturu bude veća od ≈ 1000 kons-

tanti rešetke [99]. Takva konačna korelacijska duljina uzrokuje konačnost toplinskog kapaciteta u eksperimentalnom mjerenju, ali to ne znači da je intrinzični eksponent $\alpha < 0$.

Pri svakoj temperaturi na kojoj se mjeri potrebno je odrediti duljinu uređivanja ζ optičkim mjerenjem. Nakon toga potrebno je kalorimetrijskom metodom mjeriti toplinski kapacitet. Odnos specifičnog toplinskog kapaciteta i duljine uređivanja određen je potencijskim zakonom:

$$c \propto \zeta^{\frac{\alpha}{v}}. \quad (7.3)$$

Ovakav postupak mjerenja toplinskog kapaciteta nije nikada proveden za sustav sa zamrznutim nemagnetičnim neredom koliko znamo iako su kalorimetrijska mjerenja korištena za računanje eksponenata u ekvivalentnim čistim modelima. Kalorimetrijsko mjerenje je problematično zbog fononskih utjecaja i u čistom slučaju, a prisutnost nereda još dodatno smanjuje njegovu preciznost. Kada se u sustav uvede nered, teško postići da se uzorak kompletno ne uništi [106, 107]. U svakom slučaju se događa smanjivanje maksimalne duljine uređivanja u odnosu na čisti sustav što smanjuje efekte koje se promatra u odnosu na šum. Također ako nered koji je uveden nije nasumičan nego ako sadrži, na primjer gradijente koncentracije, nered više nije nekoreliran. Takvi efekti mogu promijeniti eksponente prijelaza, ali smatramo da slika koju smo izložili o faznim prijelazima vrijedi. Indirektna optička mjerenja veličine za koju se smatra da je toplinski kapacitet, uvijek daju numerički precizniji rezultat. Zbog toga svi radovi za koje znamo koriste isključivo optička mjerenja.

7.4 Otvorena pitanja

U ovom radu smo se fokusirali na stjecanje opće slike o faznom prijelazu s zamrznutim nemagnetičnim neredom. Kao posljedica loma translacijske invarijantnosti kada je nered relevantan, kritično ponašanje pokazuje se znatno kompliciranijim od prijelaza drugog reda u efektivnom translacijski invarijantnom sustavu. Naš rad daje naznake nekih općenitih principa, ali istraživanje koje smo iznijeli otvara brojna dodatna pitanja.

- A:** S velikom preciznosti smo odredili termodinamičke eksponente, koji do sada niti u jednom radu za koji znamo nisu računati. Otvara se pitanje o prirodi klase univerzalnosti koja ih određuje. Očito pojam "nasumične kritične točke" do koje se dolazi pretpostavkom faznog prijelaza drugog reda u efektivnom translacijski invarijantnom sustavu, nije u stanju opisati njihovu pojavu.
- B:** Koji je razlog što su odgovarajući termodinamički kritični eksponenti za sve slučajeve koje smo odredili u 2d gotovo jednaki? Smatramo da razlog treba tražiti u topološkim specifičnostima 2d prostora. Ako je konačni učinak nereda na eksponente gotovo nezavisan o vrijednosti q Pottsovog modela, slika zaokruživanja faznog prijelaza u 2d Aizenmana i Wehra možda također može dati vrijedne uvide i u mehanizam kako se modificira prijelaz drugog reda.
- C:** Mnogo ostaje za reći o prirodi zamrznutih fluktuacija u ansamblu nereda, pogotovo fluktuacijama energije koje su potpuno zanemarene u prijašnjim radovima. Iz naših rezultata je jasno da ne postoji način da se one opišu u okviru "nasumične kritične točke". Zamrznuta priroda fluktuacija u ansamblu nereda implicira da je prijelaz određen netrivialnom fiksnom točkom pri $T = 0$ iako se prijelaz događa pri konačnoj temperaturi. U literaturi postoji primjer takvog opisa, koji se odnosi na kvalitativno i kvantitativno različit slučaj Isingovog modela u nasumičnom polju [149, 150]. Analogiju s tim modelom je moguće povući upravo na primjeru fluktuacija gustoće energije, koje imaju komponentu koja nije konjugirana temperaturi i za opis kojih je potrebno uvesti dodatni kritični eksponent "hrapavosti površine".
- D:** Koje je značenje praga koncentracije nereda koji je potreban da se fazni prijelaz prvog reda u 3d sustavu zaokruži?
- E:** Naši rezultati za utjecaj nereda na kontinuirani fazni prijelaz u 3d pokazuju da se termodinamički eksponenti Isingovog modela gotovo ne mijenjaju uvođenjem nereda, iako su fluktuacije u ansamblu nereda netrivialne. Taj rezultat je ostao "skriven" u dosadašnjim istraživanjima zbog postojanja eksponenta \tilde{y}_τ koji upravlja fluktuacijama kvazikritičnih temperatura i koji je povezan s prostornom skalom ζ . Ta skala, koju nazivamo Chayesovom duljinom ili duljinom uređivanja, dominantna je nad korelacijskom duljinom ξ , čija divergencija je određena termalnim eksponentom y_τ . U našim rezultatima također dobivamo \tilde{y}_τ pa na taj

način dovodimo u vezu naša istraživanja s dosadašnjima. Postojanje netrivialnog \tilde{g}_τ znači relevantnost u smislu Harrisovog kriterija, jer govori o pojavljivanju dodatnog kritičnog eksponenta koji opisuje korelacije efektivnog nereda.

A. Tablice s rezultatima proračuna za 2d

Tablica A.1: Rezultati računa za slučaj $q = 1$, $c = 25\%$ u 2D.

L	W	$\sqrt{[\bar{p}_{\{\sigma\},\alpha}^2 - \bar{p}_{\{\sigma\},\alpha}^2]}$	$[\bar{p}]$	$\sqrt{[\bar{p}_{\{\sigma\},\alpha}^2] - [\bar{p}_{\{\sigma\},\alpha}]^2}$
64	300	$9.36958 \cdot 10^{-4}$	0.659264	$1.60016 \cdot 10^{-3}$
128	300	$4.56131 \cdot 10^{-4}$	0.661664	$7.60092 \cdot 10^{-4}$
256	300	$2.17806 \cdot 10^{-4}$	0.663477	$3.87167 \cdot 10^{-4}$
512	300	$1.02853 \cdot 10^{-4}$	0.664733	$1.90929 \cdot 10^{-4}$
768	221	$6.61734 \cdot 10^{-5}$	0.665224	$1.23456 \cdot 10^{-4}$
L	W	$\sqrt{[\bar{s}_{\alpha}^2 - \bar{s}_{\alpha}^2]}$	$[\bar{s}]$	$\sqrt{[\bar{s}_{\alpha}^2] - [\bar{s}_{\alpha}]^2}$
64	300	525.541	2360.44	14.3183
128	300	2065.420	8591.65	39.5266
256	300	7966.330	31574.20	119.4590
512	300	30287.800	116716.00	392.9700
768	221	65959.000	251203.00	727.7050

Tablica A.2: Rezultati računa za slučaj $q = 3$, $c = 12.5\%$ u 2D.

L	W	$\sqrt{[\bar{p}_{\{\sigma\},\alpha}^2 - \bar{p}_{\{\sigma\},\alpha}^2]}$	$[\bar{p}]$	$\sqrt{[\bar{p}_{\{\sigma\},\alpha}^2] - [\bar{p}_{\{\sigma\},\alpha}]^2}$
64	400	$9.43787 \cdot 10^{-4}$	0.695031	$4.60865 \cdot 10^{-4}$
128	400	$4.60073 \cdot 10^{-4}$	0.696604	$2.49002 \cdot 10^{-4}$
256	400	$2.19764 \cdot 10^{-4}$	0.697422	$1.39041 \cdot 10^{-4}$
512	400	$1.03935 \cdot 10^{-4}$	0.697799	$8.04621 \cdot 10^{-5}$
768	400	$6.67753 \cdot 10^{-5}$	0.697935	$4.8872 \cdot 10^{-5}$
L	W	$\sqrt{[\bar{e}_{\alpha}^2 - \bar{e}_{\alpha}^2]}$	$[\bar{e}]$	$\sqrt{[\bar{e}_{\alpha}^2] - [\bar{e}_{\alpha}]^2}$
64	400	$1.1311 \cdot 10^{-2}$	0.70425	$1.05845 \cdot 10^{-3}$
128	400	$6.11218 \cdot 10^{-3}$	0.70855	$6.57379 \cdot 10^{-4}$
256	400	$3.28570 \cdot 10^{-4}$	0.711584	$4.28735 \cdot 10^{-4}$
512	400	$1.76553 \cdot 10^{-4}$	0.713427	$2.77852 \cdot 10^{-4}$
768	399	$1.22159 \cdot 10^{-4}$	0.714147	$2.16493 \cdot 10^{-4}$
L	W	$\sqrt{[\bar{m}_{\alpha}^2 - \bar{m}_{\alpha}^2]}$	$[\bar{m}]$	$\sqrt{[\bar{m}_{\alpha}^2] - [\bar{m}_{\alpha}]^2}$
64	400	$1.62814 \cdot 10^{-1}$	0.451231	$5.73712 \cdot 10^{-3}$
128	400	$1.49040 \cdot 10^{-1}$	0.401895	$5.84837 \cdot 10^{-3}$
256	400	$1.36200 \cdot 10^{-1}$	0.362118	$5.74509 \cdot 10^{-3}$
512	400	$1.24055 \cdot 10^{-1}$	0.328475	$6.36315 \cdot 10^{-3}$
768	399	$1.17255 \cdot 10^{-1}$	0.310137	$5.74232 \cdot 10^{-3}$

Tablica A.3: Rezultati računa za slučaj $q = 3$, $c = 25\%$ u 2D.

L	W	$\sqrt{[\bar{p}_{\{\sigma\},\alpha}^2 - \bar{p}_{\{\sigma\},\alpha}^2]}$	$[\bar{p}]$	$\sqrt{[\bar{p}_{\{\sigma\},\alpha}^2] - [\bar{p}_{\{\sigma\},\alpha}]^2}$
64	600	$9.34785 \cdot 10^{-4}$	0.772826	$1.31224 \cdot 10^{-3}$
128	600	$4.57862 \cdot 10^{-4}$	0.774950	$6.72377 \cdot 10^{-4}$
384	594	$1.41623 \cdot 10^{-4}$	0.776485	$2.41660 \cdot 10^{-4}$
640	625	$8.14064 \cdot 10^{-5}$	0.776793	$1.45589 \cdot 10^{-4}$
896	605	$5.64553 \cdot 10^{-5}$	0.776937	$1.06665 \cdot 10^{-4}$
L	W	$\sqrt{[\bar{e}_{\alpha}^2 - \bar{e}_{\alpha}^2]}$	$[\bar{e}]$	$\sqrt{[\bar{e}_{\alpha}^2] - [\bar{e}_{\alpha}]^2}$
64	600	$7.06289 \cdot 10^{-3}$	0.633824	$1.82586 \cdot 10^{-3}$
128	600	$3.69276 \cdot 10^{-3}$	0.637224	$9.88693 \cdot 10^{-4}$
384	594	$1.33090 \cdot 10^{-3}$	0.640382	$3.97642 \cdot 10^{-4}$
640	625	$8.25489 \cdot 10^{-4}$	0.641173	$2.63520 \cdot 10^{-4}$
896	605	$6.03398 \cdot 10^{-4}$	0.641550	$1.96380 \cdot 10^{-4}$
L	W	$\sqrt{[\bar{m}_{\alpha}^2 - \bar{m}_{\alpha}^2]}$	$[\bar{m}]$	$\sqrt{[\bar{m}_{\alpha}^2] - [\bar{m}_{\alpha}]^2}$
64	600	$1.56627 \cdot 10^{-1}$	0.454084	$1.11197 \cdot 10^{-2}$
128	600	$1.44699 \cdot 10^{-1}$	0.404833	$9.35941 \cdot 10^{-3}$
384	594	$1.26755 \cdot 10^{-1}$	0.342853	$8.04218 \cdot 10^{-3}$
640	625	$1.18642 \cdot 10^{-1}$	0.319306	$7.67816 \cdot 10^{-3}$
896	605	$1.13577 \cdot 10^{-1}$	0.304318	$7.10553 \cdot 10^{-3}$

Tablica A.4: Rezultati računa za slučaj $q = 8$, $c = 25\%$ u 2D.

L	W	$\sqrt{[\bar{p}_{\{\sigma\},\alpha}^2 - \bar{p}_{\{\sigma\},\alpha}^2]}$	$[\bar{p}]$	$\sqrt{[\bar{p}_{\{\sigma\},\alpha}^2] - [\bar{p}_{\{\sigma\},\alpha}]^2}$
64	1200	$9.31907 \cdot 10^{-4}$	0.851119	$1.26838 \cdot 10^{-3}$
128	1250	$4.60395 \cdot 10^{-4}$	0.852436	$7.36633 \cdot 10^{-4}$
256	1200	$2.22321 \cdot 10^{-4}$	0.853071	$3.97051 \cdot 10^{-4}$
512	900	$1.06625 \cdot 10^{-4}$	0.853446	$2.35091 \cdot 10^{-4}$
768	1020	$6.94238 \cdot 10^{-5}$	0.853554	$1.56188 \cdot 10^{-4}$
L	W	$\sqrt{[\bar{e}_\alpha^2 - \bar{e}_\alpha^2]}$	$[\bar{e}]$	$\sqrt{[\bar{e}_\alpha^2] - [\bar{e}_\alpha]^2}$
64	1200	$1.07278 \cdot 10^{-2}$	0.565472	$5.16665 \cdot 10^{-3}$
128	1250	$5.66518 \cdot 10^{-3}$	0.571648	$3.75213 \cdot 10^{-3}$
256	1200	$3.01146 \cdot 10^{-3}$	0.575691	$2.41530 \cdot 10^{-3}$
512	900	$1.59500 \cdot 10^{-3}$	0.578541	$1.56200 \cdot 10^{-3}$
768	1020	$1.09902 \cdot 10^{-3}$	0.579600	$1.11733 \cdot 10^{-3}$
L	W	$\sqrt{[\bar{m}_\alpha^2 - \bar{m}_\alpha^2]}$	$[\bar{m}]$	$\sqrt{[\bar{m}_\alpha^2] - [\bar{m}_\alpha]^2}$
64	1200	$1.30718 \cdot 10^{-1}$	0.384186	$2.66222 \cdot 10^{-2}$
128	1250	$1.14941 \cdot 10^{-1}$	0.338566	$2.69368 \cdot 10^{-2}$
256	1200	$1.02125 \cdot 10^{-1}$	0.301303	$2.69583 \cdot 10^{-2}$
512	900	$9.20275 \cdot 10^{-2}$	0.270022	$2.55211 \cdot 10^{-2}$
768	1020	$8.63829 \cdot 10^{-2}$	0.253927	$2.40992 \cdot 10^{-2}$

B. Tablice s rezultatima proračuna za 3d

Tablica B.1: Rezultati računa za slučaj $q = 1$, $c = 50\%$ u 3D.

L	W	$\sqrt{[\bar{p}_{\{\sigma\},\alpha}^2 - \bar{p}_{\{\sigma\},\alpha}^2]}$	$[\bar{p}]$	$\sqrt{[\bar{p}_{\{\sigma\},\alpha}^2] - [\bar{p}_{\{\sigma\},\alpha}]^2}$
16	500	$9.37107 \cdot 10^{-4}$	0.501459	$1.87419 \cdot 10^{-3}$
32	500	$3.15809 \cdot 10^{-4}$	0.498854	$7.04805 \cdot 10^{-4}$
48	500	$1.64280 \cdot 10^{-4}$	0.498286	$4.11036 \cdot 10^{-4}$
64	500	$1.02910 \cdot 10^{-4}$	0.498899	$2.55267 \cdot 10^{-4}$
L	W	$\sqrt{[\bar{s}_\alpha^2 - \bar{s}_\alpha^2]}$	$[\bar{s}]$	$\sqrt{[\bar{s}_\alpha^2] - [\bar{s}_\alpha]^2}$
16	500	349.837	1131.95	9.7500
32	500	2136.600	6303.27	39.1834
48	500	6082.250	17384.40	98.8479
64	500	12733.300	35796.80	171.7150

Tablica B.2: Rezultati računa za slučaj $q = 2$, $c = 37.5\%$ u 3D. Korišteni su parametri EIC algoritma $\nu = \frac{1}{10} \cdot L^{-1.65}$ i $N_\alpha = 500MCS$.

L	W	$\sqrt{[\bar{p}_{\{\sigma\},\alpha}^2 - \bar{p}_{\{\sigma\},\alpha}^2]}$	$[\bar{p}]$	$\sqrt{[\bar{p}_{\{\sigma\},\alpha}^2] - [\bar{p}_{\{\sigma\},\alpha}]^2}$
16	700	$9.44203 \cdot 10^{-4}$	0.523294	$1.14462 \cdot 10^{-3}$
32	700	$3.19194 \cdot 10^{-4}$	0.523985	$4.96038 \cdot 10^{-4}$
48	700	$1.66505 \cdot 10^{-4}$	0.524217	$2.70943 \cdot 10^{-4}$
64	700	$1.04496 \cdot 10^{-4}$	0.524324	$1.86562 \cdot 10^{-4}$
80	697	$7.2747 \cdot 10^{-5}$	0.524388	$1.34096 \cdot 10^{-4}$
L	W	$\sqrt{[\bar{e}_\alpha^2 - \bar{e}_\alpha^2]}$	$[\bar{e}]$	$\sqrt{[\bar{e}_\alpha^2] - [\bar{e}_\alpha]^2}$
16	700	$6.13539 \cdot 10^{-3}$	0.455646	$4.68385 \cdot 10^{-4}$
32	700	$2.31640 \cdot 10^{-3}$	0.454996	$2.41751 \cdot 10^{-4}$
48	700	$1.31143 \cdot 10^{-3}$	0.454979	$1.49544 \cdot 10^{-4}$
64	700	$8.76524 \cdot 10^{-4}$	0.455001	$1.07712 \cdot 10^{-4}$
80	697	$6.41483 \cdot 10^{-4}$	0.455022	$8.15789 \cdot 10^{-5}$
L	W	$\sqrt{[\bar{m}_\alpha^2 - \bar{m}_\alpha^2]}$	$[\bar{m}]$	$\sqrt{[\bar{m}_\alpha^2] - [\bar{m}_\alpha]^2}$
16	700	$1.09720 \cdot 10^{-1}$	0.223590	$2.33122 \cdot 10^{-3}$
32	700	$7.73054 \cdot 10^{-2}$	0.151619	$1.62529 \cdot 10^{-3}$
48	700	$6.28599 \cdot 10^{-2}$	0.122042	$1.27485 \cdot 10^{-3}$
64	700	$5.43062 \cdot 10^{-2}$	0.104840	$1.08234 \cdot 10^{-3}$
80	697	$4.85301 \cdot 10^{-2}$	0.0932504	$9.68835 \cdot 10^{-4}$

Tablica B.3: Rezultati računa za slučaj $q = 2$, $c = 50\%$ u 3D. Korišteni su parametri EIC algoritma $\nu = \frac{1}{10} \cdot L^{-1.65}$ i $N_\alpha = 500MCS$.

L	W	$\sqrt{[\bar{p}_{\{\sigma\},\alpha}^2 - \bar{p}_{\{\sigma\},\alpha}^2]}$	$[\bar{p}]$	$\sqrt{[\bar{p}_{\{\sigma\},\alpha}^2] - [\bar{p}_{\{\sigma\},\alpha}]^2}$
16	1000	$9.29825 \cdot 10^{-4}$	0.620610	$2.25017 \cdot 10^{-3}$
32	1020	$3.17814 \cdot 10^{-4}$	0.621173	$8.36667 \cdot 10^{-4}$
48	1000	$1.66103 \cdot 10^{-4}$	0.621440	$5.00484 \cdot 10^{-4}$
64	1000	$1.04384 \cdot 10^{-4}$	0.621522	$3.44110 \cdot 10^{-4}$
80	1000	$7.27199 \cdot 10^{-5}$	0.621597	$2.38758 \cdot 10^{-4}$
L	W	$\sqrt{[\bar{e}_\alpha^2 - \bar{e}_\alpha^2]}$	$[\bar{e}]$	$\sqrt{[\bar{e}_\alpha^2] - [\bar{e}_\alpha]^2}$
16	1000	$4.28818 \cdot 10^{-3}$	0.385691	$7.58581 \cdot 10^{-4}$
32	1020	$1.58773 \cdot 10^{-3}$	0.385183	$3.02786 \cdot 10^{-4}$
48	1000	$8.90115 \cdot 10^{-4}$	0.385199	$1.91685 \cdot 10^{-4}$
64	1000	$5.90224 \cdot 10^{-4}$	0.385209	$1.39296 \cdot 10^{-4}$
80	1000	$4.29120 \cdot 10^{-4}$	0.385234	$1.02736 \cdot 10^{-4}$
L	W	$\sqrt{[\bar{m}_\alpha^2 - \bar{m}_\alpha^2]}$	$[\bar{m}]$	$\sqrt{[\bar{m}_\alpha^2] - [\bar{m}_\alpha]^2}$
16	1000	$1.07999 \cdot 10^{-1}$	0.225428	$3.89173 \cdot 10^{-3}$
32	1200	$7.61332 \cdot 10^{-2}$	0.151942	$2.10761 \cdot 10^{-3}$
48	1000	$6.20205 \cdot 10^{-2}$	0.122141	$1.66390 \cdot 10^{-3}$
64	1000	$5.36229 \cdot 10^{-2}$	0.104974	$1.37662 \cdot 10^{-3}$
80	1000	$4.78787 \cdot 10^{-2}$	0.093278	$1.25350 \cdot 10^{-3}$

Tablica B.4: Rezultati računa za slučaj $q = 4$, $c = 50\%$ u 3D. Korišteni su parametri EIC algoritma $\nu = \frac{1}{10} \cdot L^{-1.65}$ i $N_\alpha = 500MCS$.

L	W	$\sqrt{[\bar{p}_{\{\sigma\},\alpha}^2 - \bar{p}_{\{\sigma\},\alpha}^2]}$	$[\bar{p}]$	$\sqrt{[\bar{p}_{\{\sigma\},\alpha}^2] - [\bar{p}_{\{\sigma\},\alpha}]^2}$
16	1000	$9.22984 \cdot 10^{-4}$	0.720820	$2.44281 \cdot 10^{-3}$
32	1020	$3.26248 \cdot 10^{-4}$	0.721329	$9.89473 \cdot 10^{-4}$
48	1000	$1.73930 \cdot 10^{-4}$	0.721381	$6.16453 \cdot 10^{-4}$
64	1000	$1.11148 \cdot 10^{-4}$	0.721358	$4.41628 \cdot 10^{-4}$
80	1010	$7.85041 \cdot 10^{-5}$	0.721363	$3.21595 \cdot 10^{-4}$
L	W	$\sqrt{[\bar{e}_\alpha^2 - \bar{e}_\alpha^2]}$	$[\bar{e}]$	$\sqrt{[\bar{e}_\alpha^2] - [\bar{e}_\alpha]^2}$
16	1000	$7.13720 \cdot 10^{-3}$	0.312930	$1.85198 \cdot 10^{-3}$
32	1020	$2.88484 \cdot 10^{-3}$	0.311714	$9.63659 \cdot 10^{-4}$
48	1000	$1.65004 \cdot 10^{-3}$	0.311469	$6.89476 \cdot 10^{-4}$
64	1000	$1.10782 \cdot 10^{-3}$	0.311370	$5.40807 \cdot 10^{-4}$
80	1010	$8.09689 \cdot 10^{-4}$	0.311321	$4.51048 \cdot 10^{-4}$
L	W	$\sqrt{[\bar{m}_\alpha^2 - \bar{m}_\alpha^2]}$	$[\bar{m}]$	$\sqrt{[\bar{m}_\alpha^2] - [\bar{m}_\alpha]^2}$
16	1000	$9.31680 \cdot 10^{-2}$	0.189829	$8.18771 \cdot 10^{-3}$
32	1020	$6.20531 \cdot 10^{-2}$	0.122273	$6.38126 \cdot 10^{-3}$
48	1000	$4.73362 \cdot 10^{-2}$	0.0955837	$5.63212 \cdot 10^{-3}$
64	1000	$3.91166 \cdot 10^{-2}$	0.0811966	$5.10097 \cdot 10^{-3}$
80	1010	$3.36467 \cdot 10^{-2}$	0.0711404	$5.03012 \cdot 10^{-4}$

Tablica B.5: Rezultati računa za slučaj $q = 8$, $c = 50\%$ u 3D. Korišteni su parametri EIC algoritma $\nu = \frac{1}{10} \cdot L^{-1.65}$ i $N_a = 1000MCS$.

L	W	$\sqrt{[\bar{p}_{\{\sigma\},\alpha}^2 - \bar{p}_{\{\sigma\},\alpha}^2]}$	$[\bar{p}]$	$\sqrt{[\bar{p}_{\{\sigma\},\alpha}^2] - [\bar{p}_{\{\sigma\},\alpha}]^2}$
16	1200	$9.06448 \cdot 10^{-4}$	0.798465	$2.34467 \cdot 10^{-3}$
32	1200	$3.353346 \cdot 10^{-4}$	0.798354	$1.11237 \cdot 10^{-3}$
48	1200	$1.86461 \cdot 10^{-4}$	0.798287	$6.71436 \cdot 10^{-4}$
64	1380	$1.21181 \cdot 10^{-4}$	0.798204	$4.75634 \cdot 10^{-4}$
80	1369	$8.655719 \cdot 10^{-5}$	0.798207	$3.55891 \cdot 10^{-4}$
L	W	$\sqrt{[\bar{e}_{\alpha}^2 - \bar{e}_{\alpha}^2]}$	$[\bar{e}]$	$\sqrt{[\bar{e}_{\alpha}^2] - [\bar{e}_{\alpha}]^2}$
16	1200	$1.28077 \cdot 10^{-2}$	0.262515	$4.77317 \cdot 10^{-3}$
32	1200	$4.88166 \cdot 10^{-3}$	0.258093	$2.64733 \cdot 10^{-3}$
48	1200	$2.44911 \cdot 10^{-3}$	0.257171	$1.87003 \cdot 10^{-3}$
64	1380	$1.53087 \cdot 10^{-3}$	0.256855	$1.49653 \cdot 10^{-3}$
80	1369	$1.06116 \cdot 10^{-3}$	0.256808	$1.24418 \cdot 10^{-3}$
L	W	$\sqrt{[\bar{m}_{\alpha}^2 - \bar{m}_{\alpha}^2]}$	$[\bar{m}]$	$\sqrt{[\bar{m}_{\alpha}^2] - [\bar{m}_{\alpha}]^2}$
16	1200	$9.83015 \cdot 10^{-1}$	0.173379	$2.18489 \cdot 10^{-2}$
32	1200	$5.44495 \cdot 10^{-1}$	0.105171	$1.46141 \cdot 10^{-2}$
48	1200	$3.56162 \cdot 10^{-1}$	0.0805451	$1.20061 \cdot 10^{-2}$
64	1380	$2.71447 \cdot 10^{-1}$	0.0683026	$1.07040 \cdot 10^{-2}$
80	1369	$2.29467 \cdot 10^{-1}$	0.0601438	$9.73355 \cdot 10^{-3}$

Bibliografija

- [1] K.Wilson: Phys. Rev. B, 4, 3174 (1971)
- [2] K.Wilson: Phys. Rev. B, 4, 3184 (1971)
- [3] S-K. Ma: *Modern Theory of Critical Phenomena*, Westview, 2000
- [4] W.Lenz: Z.Phys. 21, 613 (1920)
- [5] E. Ising: Z. Phys. 31, 253 (1925)
- [6] L.Onsager: Phys. Rev. 65, 117 (1944)
- [7] M.Plischke i B.Bergersen: *Equilibrium Statistical Physics*, World Scientific, 2007
- [8] J.M.Ziman: *Models of disorder*, Cambridge, 1979
- [9] B.M.McCoy i T.T.Wu: Phys. Rev 176, 631 (1968)
- [10] R.B.Potts: Proc. Cambridge Philos. Soc. 48, 106 (1952)
- [11] I.Balog i K.Uzelac: Phys. Rev. E 77, 050101(R) (2008)
- [12] I.Balog i K. Uzelac: Phys. Rev. E 81, 041111 (2010)
- [13] J. Machta,Y. S. Choi,A. Lucke,T. Schweizer i L. V. Chayes, Phys. Rev. Lett. **75**, 2792 (1995); J. Machta,Y. S. Choi,A. Lucke,T. Schweizer i L. M. Chayes, Phys. Rev. E **54**, 1332 (1996).
- [14] H.E.Stanley: *Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena*, Oxford, 1971
- [15] J.Cardy: *Scaling and Renormalization in Statistical Physics*, Cambridge, 1997

- [16] A.Z.Patashinskii i V.I.Pokrovskii: *Fluctuation Theory of Phase Transitions*, Pergamon, 1979
- [17] M. N. Barber: *Phase Transitions and Critical Phenomena*, Vol. 8, str. 145., Academic press, 1983
- [18] R.J.Baxter: J. Phys. C 6, L445 (1973)
- [19] A.Pelissetto i E.Vicari: Phys. Rept. 368, 549 (2002)
- [20] F.Y.Wu: Rev. Mod. Phys. 54, 235 (1982)
- [21] J.P.Straley i M.E.Fisher: J Phys. A 6, 1310 (1973)
- [22] R.G. Priest i T.C.Lubensky: Phys. Rev. B 13, 4159 (1976)
- [23] P.Di Francesco, P.Mathieu i D.Sénéchal: *Conformal Field Theory*, Springer, 1997
- [24] L.D.Landau i E.M.Lifshitz: *Statistical Physics Part 1*, Butterworth Heinemann, 2005
- [25] L.D.Landau i E.M.Lifshitz: *Statistical Physics Part 2*, Butterworth Heinemann, 2002
- [26] P. W. Kasteleyn, C. M. Fortuin, Jour. Phys. Soc. Japan 26, 11, (1969); C. M. Fortuin, P. W. Kasteleyn, Physica 57, 536 (1972); Physica 58, 393 (1972); Physica 59, 545 (1972).
- [27] J.W.Essam: Rep. Prog. Phys. 43, 53 (1980)
- [28] R.H. Swendsen, J.-S. Wang, Phys. Rev. Lett. 58, 86 (1987); J.-S. Wang, R. H. Swendsen, Physica A 167, 565 (1990).
- [29] U. Wolff, Phys. Rev. Lett. 62, 361 (1989).
- [30] T.C.Lubensky i J.Isaacson: Phys. Rev. Lett. 41, 829 (1978)
- [31] K.Uzelac, A.Hasmy, R.Jullien: Phys. Rev. Lett. 74, 422 (1995)
- [32] D.Sherrington and S.Kirkpatrick: Phys. Rev. Lett. 35, 1972 (1975)
- [33] S.F.Edwards and P.W.Anderson: J. Phys. F 5, 965 (1975)

- [34] M.Mezard, G.Parisi, M.A.Virasoro: *Spin Glass Theory and Beyond*, World Scientific, 1987
- [35] D.S.Fisher: Phys. Rev. B 51, 6411 (1995)
- [36] P.W.Anderson: Phys. Rev. 109, 1492 (1958)
- [37] R.L.Greenblat, M.Aizenman i J.L.Lebowitz: Phys. Rev. Lett. 103, 197201 (2009)
- [38] D.S.Fisher: Phys. Rev. Lett. 56, 1964 (1986)
- [39] K.Hui and N. Berker: Phys. Rev. Lett. 62, 2507 (1989)
- [40] Y.Imry: Jour. Stat. Phys. 34, 849 (1984)
- [41] A.B.Harris: J. Phys. C 7, 1671 (1974)
- [42] M. Aizenman i J. Wehr: Phys. Rev. Lett. 62, 2503 (1989); Commun. Math. Phys. 130, 489 (1990)
- [43] Y.Imry i S-k.Ma: Phys. Rev. Lett. 35, 1399 (1975)
- [44] N. Berker: J. Appl. Phys. 70, 5941 (1991)
- [45] B.Nienhuis, A.N.Berker, E.K.Riedel i M.Shick: Phys. Rev. Lett. 43, 11 (1979)
- [46] M.Blume, V.J.Emery i R.B.Griffiths: Phys. Rev. A 4, 1071 (1971)
- [47] T.Niemeijer i J.M.J. van Leeuwen: *Phase Transitions and Critical Phenomena*, Vol. 6, str. 425., Academic press, 1976
- [48] I.D.Lawrie i S.Sarbach, u *Phase Transitions and Critical Phenomena*, Vol. 9, str. 1., Academic Press, 1984
- [49] M.E.Fisher: Phys. Rev. 176, 257 (1968)
- [50] V.Dotshenko i V.Dotshenko: Adv. Phys. 32, 129 (1983)
- [51] A.B.Harris i T.C.Lubensky: Phys. Rev. Lett. 33, 1540 (1974)
- [52] J.L.Jacobsen i J. Cardy: Nuc. Phys. B 515, 701 (1998)
- [53] V.Dotshenko, M.Picco i P.Pujol: Nuc. Phys. B 455, 701 (1995)

- [54] S.Chen, A.M.Ferrenberg i D.P.Landau: Phys. Rev. Lett. 69, 1213 (1992); Phys. Rev. E 52, 1377 (1995)
- [55] R.Juhász, H.Rieger i F. Iglói: Phys. Rev. E 64, 056122 (2001)
- [56] M.Hasenbuch, F.P.Toldin, A.Pelissetto i E.Vicari: J. Stat. Mech. P02016, (2007)
- [57] H.G.Ballesteros *et al.*: Phys. Rev. B 61, 3215 (2000)
- [58] C.Chatelain, B.Berche, W.Janke i P.E.Berche: Phys. Rev. E 64, 036120 (2001)
- [59] C.Chatelain, B.Berche, W.Janke i P.E.Berche: Nuc. Phys. B 719, 275 (2005)
- [60] M.T.Mercaldo, J-Ch. Angèls d' Auriac i F. Iglói: Phys. Rev. E 73, 026126 (2006)
- [61] G.Grinstein i A. Luther: Phys. Rev. B 13, 1329 (1976)
- [62] R.B.Griffiths: Phys. Rev. Lett. 23, 17 (1969)
- [63] J.T.Chayes, L.Chayes, D.S.Fisher i T.Spencer: Phys. Rev. Lett. 57, 2999 (1986);
J.T.Chayes, L.Chayes, D.S.Fisher i T.Spencer: Commun. Math. Phys. 120, 501 (1989)
- [64] S.Wiseman i E. Domany: Phys. Rev. E 52, 3469 (1995)
- [65] F.Pázmándi, R.T.Scalettar i G.T.Zimányi: Phys. Rev. Lett. 79, 5130 (1997)
- [66] S. Wiseman i E. Domany: Phys. Rev. Lett. 81, 22 (1998); Phys. Rev. E 58, 2938 (1998)
- [67] M.I.Marqués i J.A.Gonzalo: Phys. Rev. E 65, 057104 (2002)
- [68] C.Monthus i T.Garel: J. Stat. Mech. P01008 (2007)
- [69] F.Iglói i C.Monthus: Phys. Rep. 412, 277 (2005)
- [70] B.M.McCoy i T.T.Wu: Phys. Rev. 188, 982 (1969)
- [71] B.M.McCoy i T.T.Wu: Phys. Rev. 188, 1014 (1969)
- [72] B.M.McCoy: Phys. Rev. B 2, 2795 (1970)
- [73] C.N.Yang i T.D.Lee: Phys. Rev. 87, 404 (1952)

- [74] C.N.Yang i T.D.Lee: Phys. Rev. 87, 410 (1952)
- [75] S.-k.Ma, C.Dasgupta i C.-k.Hu: Phys. Rev. Lett. 43, 1434 (1979); C.Dasgupta i S.-k.Ma: Phys. Rev. B 22, 1305 (1980)
- [76] R.Shankar i G.Murty: Phys. Rev. B 36, 536 (1987)
- [77] F.Iglói i I.A.Kovács: Phys. Rev. B 77, 144203 (2008)
- [78] T.C.Lubensky: Phys. Rev. B 11, 3573 (1975)
- [79] A.B.Harris i T.C.Lubensky: Phys. Rev. B 35, 6987 (1987)
- [80] V.Dotshenko, V.Dotshenko i M.Picco: Nuc. Phys. B 520, 633 (1998)
- [81] K.J.Wiese i P.Le Droussal: Markov Processes Relat. Fields 13, 777 (2007)
- [82] T.Davis i J.Cardy: Nucl. Phys. B 570, 713 (2000)
- [83] J.L.Jacobsen *et al.*: Phys. Rev. Lett. 102, 070601 (2009)
- [84] Y.Imry i M.Wortis: Phys. Rev. B 19, 3580 (1979)
- [85] Y.Imry i S.-k.Ma: Phys. Rev. Lett. 35, 1399 (1975)
- [86] J.Cardy i J.L.Jacobsen: Phys. Rev. Lett. 79, 4063 (1997)
- [87] A.N.Berker: Phys. A 194, 72 (1993)
- [88] K.Hui i A.N.Berker: Bull. Am. Phys. Soc. 33, 813 (1988)
- [89] K.Binder: Z. Phys. B 43, 119 (1981)
- [90] V.Privamn i M.E.Fisher: Phys. Rev. B 30, 322 (1984)
- [91] J.Ashkin i E.Teller: Phys. Rev. 64, 178 (1943)
- [92] A.Aharony i A.B.Harris: Phys. Rev. Lett. 77, 3700 (1996)
- [93] H.Chamati, E.Korutcheva i N.S.Tonchev: Phys. Rev. E 65, 026129 (2002)
- [94] N.G.Fytas, A.Malakos i I.A.Hadjiagapiou: J. Stat. Mech. P11009 (2008)

- [95] H.W.Blöte i M.P.Nightingale: Phys. A, 112, 405 (1982)
- [96] C.Chatelain i B.Berche: Phys. Rev. Lett. 80, 1670 (1998)
- [97] A.W.W.Ludwig: Nucl. Phys. B 330, 639 (1990)
- [98] C.Chatelain i B.Berche: Nucl. Phys. B 572, 626 (2000)
- [99] R.J.Birgenau, R.A.Cowley, G.Shirane i H.Yoshizawa: Jour. Stat. Phys. 34, 817 (1984)
- [100] H.Ikeda i K.Hirakawa: Solid State Commun. 14, 529 (1974)
- [101] A.Aharony: Europhys. Lett. 1, 617 (1986)
- [102] M.T.Hutchings, M.P.Schulhof i H.J.Guggenheim: Phys. Rev. B, 5, 154 (1972)
- [103] H.Frisch i J.L.Lebowitz: *The Equilibrium Theory of Classical Fluids*, Benjamin, 1964
- [104] R.J.Birgenau, H.Yoshizawa, R.A.Cowley, G.Shirane i H.Ikeda: Phys. Rev. B, 28, 1438, (1983)
- [105] H. Ikeda: J. Phys. Soc. Jpn. 50, 3215 (1981)
- [106] G.M.Meyer i O.W.Dietrich: J. Phys. C, 11, 1451 (1978)
- [107] R.J.Birgenau, R.A.Cowley, G.Shirane, H.Yoshizawa, D.P.Belanger, A.R.King i V.Jaccarino: Phys. Rev. B, 27, 6747 (1983)
- [108] G. Ahlers, A.Kornblit i M.B.Salamon: Phys. Rev. B, 9, 3932 (1974)
- [109] D.P.Belanger, P.Norblad, A.R.King, V.Jaccarino, L.Lundgren i O.Beckman: J. Magn. Magn. Mat. 31, 1095 (1983)
- [110] G.A.Gehring: J. Phys. C, 10, 531 (1977)
- [111] D.P.Belager, A.R.King i V.Jaccarino: Phys. Rev. B, 29, 2636 (1984)
- [112] V.Privman i M.E.Fisher: J. Stat. Phys. 33, 385 (1983)

- [113] B.Widom: *Phase Transitions and Critical Phenomena*, Vol. 2, str. 79., Academic press, 1972
- [114] R. Balian i G. Toulouse: *Ann. Phys. (Paris)*, 83, 28 (1974)
- [115] B. Derrida i H. Hilhorst: *J. Phys. C*, 14, L539 (1981)
- [116] R.J.Baxter: *Exactly Solved Models in Statistical Mechanics*, Dover, 2007
- [117] P.Pfeuty: *Ann. Phys.* 57, 79 (1970)
- [118] M. Suzuki, *Progr. Theor. Phys.* 56, 1454 (1976).
- [119] P.Pfeuty: *Phys. Lett.* 72A, 245 (1979)
- [120] A.Aharony, A.B.Harris i S.Wiseman: *Phys. Rev. Lett.* 81, 252 (1998)
- [121] K.Bernardet, F.Pázmándi i G.G.Batrouni: *Phys. Rev. Lett.* 84, 4477 (2000)
- [122] G.T. Barkema i M. E. J. Newman: *cond-mat/9703179* (1997)
- [123] N. Metropolis, A.W. Rosenbluth, M.N. Rosenbluth, A.H. Teller, E. Teller: *Jour. Chem. Phys.* 21, 1087 (1953)
- [124] K.Kawasaki: *Phase Transitions and Critical Phenomena*, Vol. 2, str. 443., Academic press, 1972
- [125] X-J. Li and A.D. Sokal, *Phys. Rev. Lett.* 63, 827 (1989)
- [126] C.F. Baillie i P.D. Coddington: *Phys. Rev. B* 43, 10617 (1991)
- [127] R. Matz, D.L. Hunter i N. Jan: *J. Stat. Phys.* 74, 903 (1994)
- [128] M.P. Nightingale i H.W.J. Blöte: *Phys. Rev. Lett.* 76, 4548 (1996)
- [129] D.Veljan: *Kombinatorna i diskretna matematika*, Algoritam, 2001
- [130] D. Wilkinson i J.F. Willemsen: *J. Phys. A* 16, 3365 (1983)
- [131] K.Moriarty, J.Machta i L.Y.Chayes: *Phys. Rev. E* 59, 1425 (1999)
- [132] I. Balog and K. Uzelac, neobjavljeno

- [133] H.-O. Georgii, J. Lorinczi i J. Lukkarinen: *J. Stat. Mech.* P06011 (2005)
- [134] A. M. Ferrenberg, D. P. Landau, *Phys. Rev. B*, 44, 5081 (1991)
- [135] D.P. Landau and K. Binder: *A Guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics* Cambridge University Press, 2000
- [136] G. Ossola and A. D. Sokal, *Nucl. Phys. B*, 691, 259 (2004)
- [137] Y. Deng, T. M. Garoni, J. Machta, G. Ossola, M. Polin and A. D. Sokal, *Phys. Rev. Lett.* 99, 055701 (2007)
- [138] A.Kolmogorov: *Math. Ann.*, 112, 155 (1936)
- [139] Y.Tomita i Y.Okabe: *Phys. Rev. Lett.* 86, 572 (2001)
- [140] Y.Tomita i Y.Okabe: *Phys. Rev. E*. 64, 036114 (2001)
- [141] U.L.Fulco, F.D.Nobre, L.R. da Silva, L.S.Lucena i G.M.Viswanathan: *Phys. A*, 284, 223 (2000)
- [142] A.Weinrib i B.I. Halperin: *Phys. Rev. B*, 27, 413 (1983)
- [143] D. Stauffer: *Phys. Rep.* 54, 1 (1979)
- [144] S.Havlin, D.Ben-Avraham i D.Movshovitz: *J. Stat. Phys.* 36, 831 (1984)
- [145] V.V. Prudnikov, P.V. Prudnikov, A.N. Vakilov, i A.S. Krinitsyn: *Jour. Eksp. Theor. Phys.* 105, 1063 (2007)
- [146] G. Grinstein: *Phys. Rev. Lett.* 37, 944 (1976)
- [147] Y.Deng i H.W.J.Blöte: *Phys. Rev. E*, 72, 016126 (2005)
- [148] M.Aizenman: *Nucl. Phys. B*, 485, 551 (1997)
- [149] A.J.Bray i M.A.Moore: *J. Phys. C*, 18, L927 (1985)
- [150] D.S.Fisher: *Phys. Rev. Lett.* 56, 416 (1986)

Životopis

Ivan Balog rođen je 17. ožujka 1981. godine u Zagrebu. Osnovnu i srednju školu pohađao je u Požegi. Tijekom srednje škole sve godine je sudjelovao na državnim natjecanjima za mlade fizičare i postizao zapažene rezultate. Godine 1999. upisao je istraživački smjer studija fizike na Prirodoslovno-matematičkom fakultetu u Zagrebu. Dobitnik je Rektorove nagrade za studentski rad *"Numerička simulacija faznog prijelaza drugog reda u 2d Pottsovom modelu"* koji je izradio u suradnji s Jurajem Szavits-Nossanom, pod supervizijom dr.sc. Katarine Uzelac. Tijekom studija ostvario je prosjek ocjena 4.82. Diplomirao je teorijsku fiziku 2004. godine s diplomskim radom pod naslovom *"Renormalizacijska grupa u realnom prostoru i fazni prijelaz 1. reda u Pottsovom modelu"* pod mentorstvom dr.sc. Katarine Uzelac.

Kao znanstveni novak Ministarstva znanosti, obrazovanja i športa zapošljava se na Institutu za fiziku 2005. godine gdje i danas radi. Iste godine započeo je poslijediplomski doktorski studij iz Fizike kondenzirane materije pod mentorstvom dr.sc. Katarine Uzelac. Istraživački interesi su mu statistička fizika i fazni prijelazi. Tijekom poslijediplomskog studija surađuje kao asistent u nastavi na Prirodoslovno-matematičkom fakultetu u Zagrebu na kolegijima "Fizički praktikum" za istraživački smjer i "Osnove fizike čvrstog stanja" za profesorske smjerove.

Popis radova

I. Balog and K. Uzelac: *Invaded cluster algorithm for a tricritical point in a diluted Potts model*, *Phys. Rev. E* **76**, 011103 (2007)

I. Balog and K. Uzelac: *Equilibriumlike extension of the invaded cluster algorithm*, *Phys. Rev. E* **77**, 050101 (2008)

I. Balog and K. Uzelac: *Equilibriumlike invaded cluster algorithm: Critical exponents and dynamical properties*, *Phys. Rev. E* **81**, 041111 (2010)