A projekt eredményeit 44 közleményben írtuk le, amelyből 39 már impakt faktorral rendelkező folyóiratban megjelent, és 3 van elbírálás alatt. A megjelent cikkek összesített impakt faktora: 112.701. A projekthez kapcsolódva egy PhD dolgozat és egy MSc diplomamunka készült el és került megvédésre az ELTE-n.

A záróbeszámolót a támogatott pályázat szerkezetét követve nyújtjuk be, a hivatkozások az OTKA közleménylistájának sorszámozását követik.

1. Kvantum rendszerek összefonódása

A transzverz-terű Ising lánc két azonos méretű darabjának összefonódási entrópiáját vizsgáltuk a rendszer kritikus pontjában, amikor a két alrendszer között lokalizált, vagy kiterjedt defekt teremt kapcsolatot. Mind az egyensúlyi mind a nemegyensúlyi entrópiát mértük, az utóbbi esetben a kölcsönhatás alakját időben hirtelen megváltoztattuk. Eredményeink szerint az entrópiát jellemző un. effektív centrális töltés általában a defekt erősség függvénye.[3]

Két szabad fermion spinlánc (XX modell és a transzverz-terű Ising modell) esetén a hellyel lineárisan változó kötéseket tekintettünk és vizsgáltuk a két alrendszer közötti összefonódási entrópia skálázását a rendszer kritikus pontjában. Az egyensúlyi entrópia a rendszerben kialakuló határfelület logaritmusával arányosan változik, míg a nemegyensúlyi entrópia esetén a növekedés időben logaritmikus az XX-modellnél és kvadratikus az Ising modellnél.[7]

Szabad fermion spinláncok esetén megmutattuk, hogy a redukált sürüség-mátrix a fermion- és a spin-reprezentáció esetén általában eltérő alakú, amennyiben az alrendszer nem egyszeresen összefüggő. A fenti jelenséget az XX és az XY lánc esetén két spinre vizsgáltuk, míg az XX és a transzverz-terű Ising lánc esetén az alrács entrópiát is meghatároztuk.[9]

A véletlen transzverz-terű Ising lánc esetén a nemegyensúlyi összefonódási entrópia időfüggését vizsgáltuk szabad fermion technika segítségével. Itt a kritikus pontban nagyon lassú l, dupla-logaritmikus időfüggést kaptunk, melyet az erős rendezetlenségi renormálási csoport módszer segítségével értelmeztünk[26].

A véletlen transzverz-terű Ising modell összefonódási entrópiáját az erős rendezetlenségi renormálási csoport egy nagyon hatékony új algoritmusával a létra-geometriában[1], valamint két-, három- és négydimenziós rácsokon vizsgáltuk[28]. Az összefonódási entrópia kritikus pontban mutatott szingularitását a rendszer méretével logaritmikusan növekedőnek találtuk. Ez a szingularitás minden dimenzióban univerzális, a rendezetlenség alakjától független és a minták sarkaival kapcsolatos[28].

2. Rendezetlen klasszikus és kvantumrendszerek fázisátalakulásai

Az erős rendezetlenségi renormálási csoport nagyon hatékony új algoritmusát fejlesztettük ki és segítségével numerikusan vizsgáltuk a rendezetlen kvantumrendszerek prototípusát jelentő véletlen transzverz-terű Ising modellt létra geometriában[1]. Két-dimenziós [12], illetve három- és négydimenziós rácsokon[20,21] a modell kritikus tulajdonságait nagy pontossággal meghatároztuk. Megmutattuk, hogy a kritikus viselkedést tetszőleges dimenzióban egy ún. végtelen rendezetlen fix-pont határozza meg[20,21]. Vizsgáltuk a rendszerek lokális kritikus viselkedését is felületek, élek és sarkok mentén és a megfelelő kritikus exponenseket nagy pontossággal meghatároztuk[36]. Kovács István sikeresen megvédte a témakörben készített doktori disszertációját.[30]

Vizsgáltuk a rendezetlen q-állapotú Potts modell kritikus viselkedését hierarchikus rácsokon, ahol a rendszer ferro- és paramágneses fázisokkal rendelkezik. A kritikus viselkedést négy nem-triviális fixpont szabályozza, melyek tulajdonságait a nagy "q" határesetben numerikusan egzaktul meghatároztuk[2]. Kettőnél magasabb effektív dimenzió esetén a multikritikus pont környezetében a fázishatárt önhasonlónak találtuk, ahol végtelen sok visszatérő (reentrant) fázis van jelen[37].

Összehasonlítottuk a véletlen-terű Ising modell és a rendezetlen ferromágneses nagy-"q" állapotú Potts modell határfelületi viselkedését négyzetrácson. Folytonos közelítés esetén a két probléma egymásba képezhető. A határfelületek tulajdonságait véges rácsokon és a rendezetlenség erősségének fokozatos növelése mellett határoztuk meg [14].

A négyzetrácson értelmezett Ashkin-Teller modell kritikus viselkedését egy hibavonal mentén numerikusan vizsgáltuk. Megállapitottuk, hogy a kritikus viselkedés erős illetve gyenge defekt csatolások esetén különböző és eredmenyünk rámutatott egy korábbi térelméleti vizsgálat problémáira is[22].

Kétdimenziós kritikus perkoláció esetén vizsgáltuk azon fürtök, N, számát, melyek egy adott, G, görbét elmetszenek. A G-n található sarkok következtében N-hez univerzális, logaritmikus korrekciók járulnak, melyek aszimptótikus értékét konform invariancia segítségével kiszámítottuk. Az egzakt formulákat intenzív Monte Carlo szimulációkkal ellenőriztük[29]. A fenti vizsgálatokat általánosítottuk a q-állapotú Potts modellben fellépő Fortuin-Kasteleyn és geometriai fürtök esetére is. A Fortuin-Kasteleyn-féle fürtök esetében a konform eredmények nagy pontossággal teljesültek, míg a geometriai fürtök esetén a szokásos analitikus folytatás módszerével számolt kifejezések nem egyeztek meg a numerikus szimulációk eredményeivel [43].

3. <u>Fázisátalakulások és dinamikai folyamatok nemegyensúlyi rendszerekben</u>

Kvantum rendszerek nemegyensúlyi relaxációs folyamatait vizsgáltuk, amikor a rendszert leíró Hamilton operátornak egy paraméterét, pl. a transzverz tér erősségét hirtelen megváltoztatjuk és utána vizsgáljuk pl. a lokális mágnesezettség, spin-spin korrellációs függvény, összefonódási entrópia, stb. időfüggését. Két kvantum spin láncot tanulmányoztunk: a transzverz-terű Ising modell[17] és az XY modellt transzverz mágneses térben[25]. Szabad fermion technikát alkalmazó numerikus számolások eredményeit a szemiklasszikus elmélet eredményeivel vetettük össze[19].

A lokális kvencs (local quench) technikájával a kvantumrendszer eredetileg különálló részrendszerei között csatolást létesítettünk. A transzverz-terű Ising modell esetén a mágnesezettségi profilt, a korrelációs és az autokorrellációs függvényeket számoltuk ki. A kritikus pontban az eredményeket a konform térelméleti jóslatokkal vetettük össze, míg a rendezett fázisban szemiklasszikus számolást is végeztünk[24]. A fenti számolásokat általánosítottuk olyan esetre, amikor a lokális kvencs előtt és után különböző alakú defekt-csatolások találhatók a részrendszerek között. Ebben az esetben a lokális mágnesezettség időfüggését általánosított defekt-exponensek szabályozzák, melyek értékeit egzaktul meghatároztuk.[42]

A kvázi-periodikus csatolású transzverz-terű Ising lánc nemegyensúlyi dinamikáját numerikusan vizsgáltuk. Az összefonódási entrópia az idővel hatványfüggvény-szerűen növekszik, míg a mágnesezettség nyújtott-exponenciális lecsengést mutat. Ezeket a tulajdonságokat anomális diffúziót végző kvázi-részecskék segítségével megmagyaráztuk. Nemegyensúlyi mágnesezettség esetén dinamikai fázisátalakulást találtunk[35]. Roósz Gergő a kvázi-periodikus csatolású transzverz-terű Ising lánc témakörben MSc szakdolgozatot készített [27].

Kétdimenziós teljesen frusztrált Ising modellek nemegyensúlyi viselkedését vizsgáltuk, amikor egy rendezetlen kezdőállapotból a nulla hőmérsékletű kritikus állapotba hűtöttük le a rendszereket. Mértük az egyes mintákra jellemző karakterisztikus időskálát, és vizsgáltuk annak a rendszer lineáris méretével történő növekedését. Hasonlóképpen vizsgáltuk az autokorrelációs függvényt és annak lecsengési exponensét a külső tértől függőnek találtuk.[4]

A mágneses súrlódás jelenségét két q-állapotú Potts-modellt tartalmazó rendszer mozgatásával modelleztük. Vizsgáltuk ezen nemegyensúlyi állapotban létrejövő fázisátalakulás tulajdonságait attól függően, hogy az egyensúlyi rendszerben folytonos vagy elsőrendű az átalakulás[18].

Egydimenziós, véletlen modellek renormálása során felmerülő koagulációs modellt vizsgáltunk, melyben a legkisebb tömegű részecske egyesül két másik részecskével. Módszert adtunk az általánosított tömeg és mágneses momentum növekedését leíró exponensek pontos numerikus számítására [5].

A diffúzió jelenségét vizsgáltuk véletlen erőtér jelenlétében különféle struktúrákon.
(i) Egy K számú párhuzamos csatornából álló rendszerben a diffúzió anomális: a diffúzió-exponens a K paraméter és a v sávváltási ráta függvénye. A részecske mozgásiránya v változtatásával megfordítható [16].
(ii) Távoli pontokat összekötő élekkel kiegészített egydimenziós rácson (ún. általánosított kisvilág-hálózaton), az él-valószínűség lecsengési exponensének függvényében két fázis alakul ki, melyekben vagy a hosszú élek vagy a véletlen erőtér hatása irreleváns. A határpontban ultra-lassú (logaritmikus) dinamika figyelhető meg [31].
(iii) Tetszőleges hálózaton érvényes, egzakt összefüggést találtunk a (gyenge) rendezetlenség erőssége és a problémához társított ellenállás-hálózat ellenállása

között. A dinamika stabil a gyenge erőtérrel szemben, ha az ellenállás-exponens negatív. Amennyiben pozitív, általános a logaritmikus dinamika [32].

A kontakt-folyamat dinamikáját vizsgáltuk általánosított kisvilág-hálózatokon. Reguláris hálózatokon a kritikus viselkedést hatványtörvények írják le [6]. Véletlen hálózatokon a “topológiai” rendezetlenség Griffiths-effektusokhoz és logaritmikus kritikus dinamikához vezet, ahol a kritikus exponenseket kizárólag a hálózat topológiája szabja meg [11,13,34,41].

Részecskék egydimenziós transzportját (az ún. aszimmetrikus kizárási folyamatot) vizsgáltuk véletlen erőtérben. Az átlagtér-elmélet keretein belül kiszámítottuk az ellenirányú tartományok által megszabott stacionárius áramot. Az eredmények megerősítik a korábbi intuitív feltevéseket, melyek a modellt leíró fenomenológikus elmélet alapjául szolgálnak [23].

A kétsávos, bidirekcionális modellben, ahol a sávváltás inhomogén, az ellenirányú tartományokon a részecske-klaszterek nem lokalizálódnak, ami eltérő dinamikai viselkedést eredményez [15].

A részecske-klaszterek növekedésével járó durvulási folyamat fenomenológikus elméletét újragondolva, az extrémérték-statisztika pontosabb alkalmazásával a dinamikai törvénybeli logaritmikus korrekció korábbitól eltérő alakját kaptuk. A kétsávos modellben a durvulási folyamatot jellemző dinamikai exponens függ a részecske- sűrűségtől [33].

Renormálási csoport- és szimulációs vizsgálataink szerint az egydimenziós, inhomogén *kontakt-folyamatban* a lokális aszimmetria (a terjedés irányfüggő volta) irreleváns, ha a modell statisztikai értelemben szimmetrikus. Ha a terjedési ráták az egyik irányban szisztematikusan nagyobbak, két elkülönült fázis- átalakulás lép fel, melyek az aktivitás kedvező iránybeli ill. azzal ellentétes irányú terjedésével kapcsolatosak. Utóbbi átalakulási pontban a dinamika ultra-lassú, azaz logaritmikus időfüggés jellemzi, míg az előbbi ettől eltérő típusú és multi-skálázás jellemzi [39,40].

Dinamikai mennyiségek eloszlásait vizsgáltuk végtelenül rendezetlen fixpontokban. A kontakt-folyamat és a véletlen bolyongás perzisztencia valószínűsége valamint a transzverz-terű Ising lánc autokorrelációs függvénye multi-skálázást mutat, azaz a mintafüggő exponensek (univerzális) eloszlásával jellemezhető [44]

4. <u>Extrém érték statisztika</u>

Az extrém érték statisztika renormálási csoport (RG) leírását végeztük el, melynek során a régóta ismert határeloszlásokat egy RG fixpontjaiként állítottuk elő, míg a végesméret korrekciókat a fix-pont körüli sajátfüggvényből határoztuk meg. Továbbá vizsgáltuk az RG transzformáció invariáns sokaságainak viselkedését, melynek során a sajátfüggvényekhez különböző nemlineáris tagokat adtunk perturbációként.[10] Az előzőekben részletezett RG transzformáció infinitezimális generátorát konstruáltuk meg és az RG pályákra parciális differenciálegyenletet származtattunk. Az ismert fixpontok és a sajátfüggvények egy-egy közönséges differenciálegyenlet megoldásaként adódnak.[8]

Az anyagszerkezeti vizsgálatok során fellépő plasztikus megfolyás jelenségét nagyszámú, kölcsönható diszlokáció rendszerével modelleztük és két és három dimenzióban számítógépes szimulációkkal vizsgáltuk. Az egyes deformációkhoz tartozófeszültségek mind szimulációsan, mind kísérletileg jól illeszkednek az extrém statisztika Weibull-eloszlásához, mely a "leggyengébb láncszem" elvének statisztikai megfogalmazása.[38]