Pokroky matematiky, fyziky a astronomie

Václav Janiš

Nobelova cena za fyziku 2021 – Giorgio Parisi

Pokroky matematiky, fyziky a astronomie, Vol. 67 (2022), No. 1, 17–23

Persistent URL: `http://dml.cz/dmlcz/150394`

Nobelova cena za fyziku 2021 – Giorgio Parisi

Václav Janiš

Abstrakt. Nobelova cena za fyziku za rok 2021 byla udělena za průkopnické příspěvky k všeobecnému porozumění komplexních systémů. Polovina ceny připadla prof. Giorgiu Parisimu z Univerzity La Sapienza v Římě za jeho objev vzájemného působení neuspořádanosti a fluktuací ve fyzikálních systémech od atomových po planetární škály.

1. Mikroskopická neuspořádanost a makroskopická komplexita – od mikrostruktur k makrosvětu

Neuspořádanost je v přírodě všudypřítomná. Její vliv na výsledné chování je o to větší, z čím různorodějších částí je systém složen. Mikroskopické systémy se skládají z téměř identických atomů, které jsou většinou v dobře definovaném stavu. V mikrosvětě se očekává, že se neuspořádanost bude projevovat minimálně. Silně zředěné slitiny atomů s výrazným magnetickým momentem v nemagnetické kovové matrici, spinová skla, se chovají jinak. Magnetické momenty vzájemně interagují, přičemž jak vzájemná vzdálenost tak znaménko interakce, kladné pro přitažlivou a záporné pro odpudivou interakci, jsou v zásadě náhodné. V důsledku toho charakteristické vlastnosti na atomární úrovni fluktuují. Tyto fluktuace probíhají velmi rychle a většinou nejsou v globálním celku přímo pozorovatelné, protože makroskopická měření probíhají na dlouhých časových škálách. Co ale vnímáme, je vliv těchto mikroskopických fluktuací na makroskopické vlastnosti komplexních systémů.

Objem a počet elementárních objektů makroskopických systémů jsou natolik velké vůči mikroskopickým škálám, že je lze považovat za limitně nekonečné. Ovšem přechod k takové limitě, nazývané ve statistické fyzice termodynamická, není vždy přímočarý. Podmínkou existence termodynamické limity je *ergodičnost* systému, kdy energie je jediný extenzivní makroskopický parametr, který chování makroskopického stavu kontroluje. Termodynamická limita v ergodickém systému nezávisí ani na tvaru hranice zkoumaného systému, ani na okrajových podmínkách nebo na termodynamickém okolí, ve kterém systém relaxuje do rovnovážného stavu. Spinová skla však mají natolik komplexní strukturu, že ani detailní znalost mikroskopických interakcí nevede k jednoznačnému určení makroskopického stavu popsaného pouze souborem měřitelných veličin odvozených z mikroskopických parametrů. Komplexní systémy s náhodností, jakou vykazují spinová skla, jsou charakterizovány kromě dynamiky elementárních interakcí ještě skrytými parametry, které nejsou součástí mikroskopického popisu a které kontrolují přechod od mikroskopické struktury k makroskopickému celku. Giorgiu Parisimu se podařilo na modelu středního pole spinového skla najít způsob, jakým tyto

Prof. RNDr. Václav Janiš, DrSc., Fyzikální ústav AV ČR, Na Slovance 1999/2, 182 21 Praha 8, e-mail: janis@fzu.cz

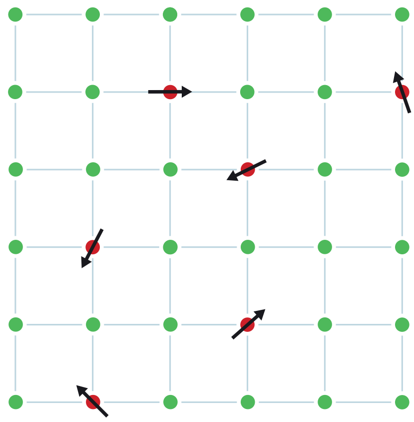
skryté parametry hledat a jak globální chování makroskopických komplexních systémů s náhodnými interakcemi věrohodně mikroskopicky modelovat.

2. Termodynamika spinových skel

Giorgio Parisi začal vědeckou kariéru pod vedením Nicoly Cabibba v oboru teorie elementárních částic, kde jeho společná práce s Guidem Altarellim je jedním z pilířů kvantové chromodynamiky. Nejvlivnější se však staly výsledky G. Parisiho z teorie neuspořádaných zředěných magnetických slitin, spinových skel. Jím zavedený koncept narušení replikové symetrie, který vedl na konzistentní řešení s komplikovanou hierarchickou strukturou zdánlivě jednoduchého modelu, našel uplatnění v celé řadě komplexních systémů ve fyzice, matematice, informatice, počítačové vědě, biologii, ekonomii a sociologii.

Spinová skla byla experimentálně objevena počátkem sedmdesátých let minulého století. Tyto neuspořádané materiály s efektivně náhodnou magnetickou interakcí nepreferují ani feromagnetické ani antiferomagnetické uspořádání. Přesto přecházejí v nízkých teplotách do specifického, makroskopicky uspořádaného stavu. Pochopení vzniku a vlastností uspořádaného stavu spinových skel stálo u zrodu Parisiho fundamentálního příspěvku k chápání komplexních systémů.

Obr. 1. Giorgio Parisi (autorka fotografie Laura Sbarbori, © Nobel Prize Outreach)



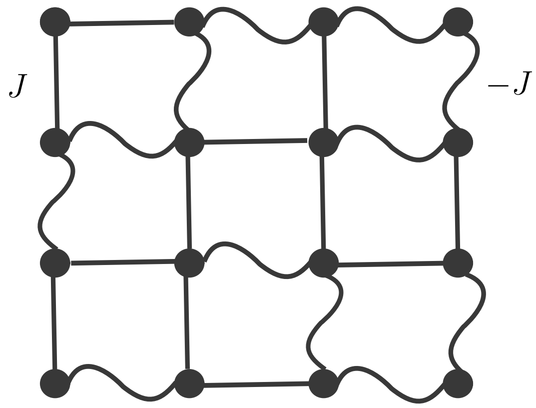
Obr. 2. Atomy železa (kolečka s magnetickým momentem znázorněným šipkou) jsou ve spinovém skle náhodně rozmístěny v pravidelné mřížce nemagnetických atomů zlata (kolečka bez šipky). Interakce mezi magnetickými momenty je zprostředkovávána elektrony zlata pohybujícími se po spojnicích uzlů mřížky. Převzato z `www.nobelprize.org` (© Johan Jarnestad / The Royal Swedish Academy of Sciences)

Atomová struktura spinového skla, zředěné slitiny železa ve zlatě, $\mathrm{Au}_{(1-x)}\mathrm{Fe}_x$ je schematicky znázorněna na obr. 2. Magnetické momenty železa jsou náhodně rozmístěny v pravidelné krystalické mřížce zlata tak, že vzdálenosti mezi nimi jsou víceméně náhodné. Síla vzájemné interakce rychle klesá se vzdáleností R jako

$$J(R) \propto \cos(2k_{\mathrm{F}}R + \phi_0)/R^3,$$

kde k_{F} je vlnový vektor vodivostních elektronů zlata s Fermiho energií. Interakce mění současně se vzdáleností ve zředěné slitině v zásadě náhodně také znaménko.

Experimentálně se pozorují makroskopické vlastnosti rovnovážného stavu. Makroskopické systémy mají tendenci relaxovat do rovnovážného stavu. Ten obecně nastává v maximu *entropie*, která je mírou počtu mikroskopických realizací stavu s danou celkovou energií. Rovnovážný termodynamický stav ekvivalentně odpovídá minimu termodynamického potenciálu, kterým při nenulové absolutní teplotě je *volná energie*. Jestliže $H[J, X]$ je hamiltonián závisející na fázových proměnných X a T je absolutní teplota, pak volná energie je $F[J] = -k_{\mathrm{B}}T \ln Tr_X \mathrm{e}^{-\beta H[J,X]}$, kde $\beta = 1/k_{\mathrm{B}}T$ a k_{B} je Boltzmannova konstanta. Symbolem Tr_X jsme označili sumu přes všechny konfigurace mikroskopické proměnné X, jež je spinový moment v magnetických látkách. V případě spinových skel ještě mikroskopický hamiltonián závisí na náhodné magnetické výměně J. Mikroskopické konfigurace magnetické interakce ve spinovém sklu nejsou makroskopicky rozlišitelné a výsledný rovnovážný makroskopický stav je zprůměrováním přes všechny přípustné mikroskopické konfigurace. Tomu odpovídá střední hodnota volné energie $\langle F[J]\rangle_J$ přes konfigurace interakce.



Obr. 3. Schematické znázornění náhodných interakcí spinů v Edwardsově–Andersonově modelu spinového skla. Přímá spojnice odpovídá kladnému a oscilující zápornému znaménku interakce, preferující paralelní, resp. antiparalelní uspořádání

Na základě těchto vlastností S. Edwards and P. W. Anderson navrhli model [1], který by měl simulovat chování spinových skel. Je to model magnetických momentů reprezentovaných Isingovými spiny S_i nabývajícími pouze hodnoty ± 1, rozmístěných na uzlech pravidelné mřížky, přičemž jejich vzájemná interakce je jen mezi nejbližšími sousedy (obr. 3) a je náhodně buďto feromagnetická, preferující paralelní uspořádání, nebo antiferomagnetická, preferující antiparalelní uspořádání. Nízkoteplotní, spinově skelná fáze je v tomto modelu charakterizována jediným parametrem $q = \langle m_i[J]^2\rangle_J$, přičemž $m_i[J] = \langle S_i[J] \rangle_T$ je magnetizace, vážená střední hodnota magnetického momentu S_i na atomu i při odpovídající teplotě T pro jednu konkrétní konfiguraci výměnné interakce J. Vzápětí D. Sherrington a S. Kirkpatrick našli řešení tohoto modelu v přiblížení tzv. statistického středního pole s gaussovským rozdělením magnetické interakce [11]. Třebaže vše bylo v tomto řešení formálně bezchybné, výsledkem bylo nefyzikální chování nízkoteplotní fáze, kde entropie Sherringtonova–Kirkpatrickova (SK) řešení v limitě nulové teploty vyšla záporná, $s(0) = -\sqrt{\frac{2}{\pi}} k_\mathrm{B} \approx -0{,}798 k_\mathrm{B}$. Jelikož entropie je mírou počtu mikroskopických konfigurací makroskopického stavu, musí být vždy nezáporná.

3. Repliky a narušení replikové symetrie

Problém s Edwardsovým–Andersonovým modelem je, že ve výsledku musíme volnou energii průměrovat přes náhodné interakce. To znamená, že průměrujeme logaritmus funkce náhodné proměnné. To lze provést jen rozvojem do mocninné řady, kdy průměrujeme pouze mocniny náhodné proměnné. Edwards s Andersonem ale přišli s myšlenkou definovat střední hodnotu logaritmu z limity

$$\langle \ln Z \rangle_{av} = \lim_{n \to 0} \frac{1}{n} \left(\langle Z^n \rangle_{av} - 1 \right) ,$$

což je tak zvaný *replikový trik* v tom smyslu, že pokud Z je partiční funkce původního systému, potom Z^n je partiční funkce n krát zreplikovaného systému. Problém v této definici je, jak správně provést limitu k nulovému počtu replik originálního systému. Závislost volné energie na počtu replik se standardně ve statistické fyzice provádí v diagramatickém rozvoji do mocnin náhodné proměnné, v tomto případě J^2. Příspěvek od každé uzavřené smyčky v n násobně replikovaném systému je lineárně úměrný počtu replik n. V limitě nulového počtu replik se pak v rozvoji volné energie ponechají pouze všechny jednosmyčkové diagramy. Tento postup byl použit v SK řešení.

Při zkoumání, co je špatně na takovém poruchovém způsobu průměrování, se zjistilo, že nelze repliky originálního systému chápat jako ekvivalentní a že je třeba narušit replikovou symetrii zavedením specifické metriky v prostoru replik. Narušení replikové symetrie navrhl G. Parisi v sérii článků z konce sedmdesátých let minulého století [4], [5], [6], [7], [8], [9]. Zavedl nové parametry uspořádání, kterými jsou překryvy lokálních magnetizací mezi různými replikami

$$q^{ab} = \langle m_i^a m_i^b \rangle_{av}, \quad a \neq b,$$

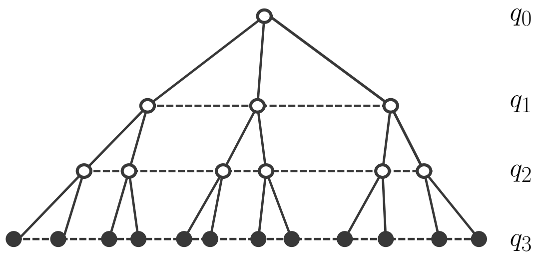
kde indexy a, b označují replikované proměnné. V replikově symetrickém SK řešení platí rovnost všech překryvů, $q^{ab} = q$. Problém analytického prodloužení počtu replik do nuly, $n \to 0$, je v tom, že pokud parametr n zůstane přirozené číslo, SK řešení je lokálně stabilní. Parisiho přelomová idea byla v nalezení cesty k zobecnění konstrukce zprůměrované volné energie replikovým trikem a analytickým prodloužením $n \to 0$ s obecně *pozitivním, reálným replikovým indexem* $n > 0$. To je možné jen pro určitou strukturu $n \times n$ matic q^{ab}. Parisi navrhl hierarchickou strukturu narušující symetrii jednotlivých replik $\chi^{ab} = q^{ab} - q \geqq 0$, jejíž typický tvar pro $n = 8$ je

$$\begin{pmatrix} 0 & \chi_1 & \chi_2 & \chi_2 & \chi_3 & \chi_3 & \chi_3 & \chi_3 \\ \chi_1 & 0 & \chi_2 & \chi_2 & \chi_3 & \chi_3 & \chi_3 & \chi_3 \\ \chi_2 & \chi_2 & 0 & \chi_1 & \chi_3 & \chi_3 & \chi_3 & \chi_3 \\ \chi_2 & \chi_2 & \chi_1 & 0 & \chi_3 & \chi_3 & \chi_3 & \chi_3 \\ \chi_3 & \chi_3 & \chi_3 & \chi_3 & 0 & \chi_1 & \chi_2 & \chi_2 \\ \chi_3 & \chi_3 & \chi_3 & \chi_3 & \chi_1 & 0 & \chi_2 & \chi_2 \\ \chi_3 & \chi_3 & \chi_3 & \chi_3 & \chi_2 & \chi_2 & 0 & \chi_1 \\ \chi_3 & \chi_3 & \chi_3 & \chi_3 & \chi_2 & \chi_2 & \chi_1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Parisiho $n \times n$ matice χ^{ab} má pouze $K < n$ nezávislých parametrů $\chi_1, \chi_2, \ldots, \chi_K$, přičemž parametr χ_l pro $l = 1, 2, \ldots, K$ má četnost μ_l, se sumačním pravidlem $\sum_{l=1}^{K} \mu_l = n - 1$. Obecně lze Parisiho matice charakterizovat podmínkami

$$\chi^{aa} = 0, \qquad \chi^{ab} = \chi^{ba}, \qquad \sum_c \left(\chi^{ac} - \chi^{bc}\right) = 0.$$

Pokud budeme chápat maticové elementy χ^{ab} jako souřadnice bodů v prostoru, pak vzdálenosti mezi jednotlivými body tohoto prostoru mají tak zvanou *ultrametrickou strukturu*. Ultrametrický prostor je speciální metrický prostor, ve kterém je standardní trojúhelníková nerovnost pro vrcholy trojúhelníka xyz nahrazena silnějším omezením $d(x, y) \leqq \max\{d(x, z), d(y, z)\}$. Typická stromová struktura ultrametrického prostoru je ilustrována na obr. 4. Novými parametry uspořádání ve spinově skelné fázi Parisiho hierarchické konstrukce je K dvojic parametrů (χ_l, μ_l) pro $l = 1, 2, \ldots, K$, které se určí z *extremalizace* odpovídající volné energie. Podstatné na Parisiho konstrukci je, že četnosti překryvů hierarchií replik μ_l, které vstupují do volné energie, již mohou být libovolná kladná čísla. Tím se otevřela cesta ke skutečnému analytickému prodloužení $n \to 0$ s libovolně malým kladným parametrem n. Parisiho hierarchická konstrukce skutečně odstranila nefyzikálnost SK řešení a vedla k novému termodynamicky stabilnímu stavu v libovolné teplotě bez narušení fundamentálních fyzikálních principů. Později byl nalezen rigorózní důkaz, že Parisiho hierarchická konstrukce je úplným řešením SK modelu [2], [13].



Obr. 4. Grafické znázornění souvislého tříúrovňového ultrametrického prostoru bodů (plné kroužky na nejnižší hladině) s metrikou, kde vzdálenost je dána počtem uzlů z vyšších hladin (prázdné kroužky), skrze které musí projít plné linie propojující vybrané body

4. Interpretace parametrů uspořádání Parisiho konstrukce

Parisiho konstrukce vede na úplné řešení SK modelu spinového skla. Parametry uspořádání, které z této konstrukce získáme, musí tedy mít měřitelné důsledky a nemohou být závislé na způsobu průměrování přes náhodné konfigurace magnetické interakce. Matematické repliky, které Parisi použil v replikovém triku, jsou jen pomocné veličiny bez přímého fyzikálního významu. Ukazuje se ale, že bez replik originálního systému Parisiho řešení nelze odvodit. Přirozenou otázkou je, jaký je skutečný význam replikací fyzikálních proměnných a jakou roli hraje analytické prodloužení počtu replik do nuly.

Komplexní systémy, kterými spinová skla jsou, se vyznačují velkým množstvím kvazirovnovážných stavů s makroskopicky nerozlišitelnou energií. Někdy se hovoří o existenci velkého množství čistých stavů s blízkou volnou energií, které jsou sice odděleny energetickou bariérou, ale nejsou nezávislé. Můžeme si například představit, že každý čistý stav má vlastní magnetické pole, kterým se odlišuje od ostatních. Na konci výpočtu se všechna magnetická pole srovnají s hodnotou reálného magnetického pole v systému. Fyzikální hodnoty, například magnetizace, v jednom čistém stavu mohou záviset na hodnotách v jiných čistých stavech. Parisi zavedl *reálné repliky*, kdy každá replika odpovídá jednomu čistému stavu, lokálnímu extrému volné energie [10]. Zavedl nový parametr pro překryv magnetizací mezi jednotlivými čistými stavy, reálnými replikami α, β,

$$q_{\alpha\beta} = \frac{1}{N} m_i^\alpha m_i^\beta .$$

Jelikož Parisiho řešení má množinu parametrů uspořádání, potom pravděpodobnost, že v rovnovážném stavu spinového skla změříme vybranou hodnotu q parametru uspořádání Edwardsova–Andersonova modelu, je

$$P(q) = \sum_{\alpha,\beta} P_\alpha P_\beta \delta(q - q_{\alpha\beta}),$$

kde P_α je termodynamická váha čistého stavu α. Takovou pravděpodobnostní funkci můžeme zavést pro libovolný model. V případě SK řešení je $P(q) = 0$ kromě jediné hodnoty $q = q_{SK}$, kdy $P(q_{SK}) = 1$. Stabilní Parisiho řešení vede k monotónní spojité funkci na intervalu $(0, q_{EA})$, kde q_{EA} je maximální parametr, který při dané teplotě můžeme zjistit.

5. Česká stopa v teorii spinových skel a komplexních systémů

Parisiho konstrukce řešení SK modelu spinového skla měla ohromný vliv na chápání a modelování komplexních systémů s náhodně fluktuující interakcí elementárních objektů v mnoha oborech, nejen v přírodních vědách. Nesnadno pochopitelná a interpretovatelná struktura Parisiho řešení SK modelu iniciovala ohromný zájem o samotnou teorii středního pole spinových skel. Od roku 1975 do roku 2010, kdy byla teorie spinových skel jedním z nejatraktivnějších a nejsložitějších problémů magnetismu a teorie pevných látek vůbec, vycházelo ročně v průměru na pět set odborných publikací na tuto tematiku. Na většině pracovišť fyziky pevných látek existovala skupina, která se teorii spinových skel věnovala. V České republice se spinová skla teoreticky studovala od konce osmdesátých let minulého století hlavně ve Fyzikálním ústavu AV ČR, ze kterého vzešlo okolo dvou desítek prací věnujících se převážně odvození Parisiho konstrukce bez použití replikového triku a jeho fyzikální interpretaci jak v Sherringtonově–Kirkpatrickově, tak v dalších zobecňujících modelech [3]. Několik mladých kolegů začalo svoji vědeckou kariéru výzkumem v teorii spinových skel. F. Slanina byl v devadesátých letech minulého století studentem G. Parisiho a dlouhou dobu se věnoval aplikacím metod souvisejících s Parisiho konstrukcí nejen ve spinových sklech, ale i zcela mimo fyziku [12]. Originální přístup G. Parisiho a jeho ohromná invence při řešení fyzikálních problémů bezesporu inspirovaly nejen jeho spolupracovníky, ale i širokou vědeckou komunitu ve fyzice pevných látek a v teorii komplexních systémů.

L i t e r a t u r a

[1] Edwards, S. F., Anderson, P. W.: *Theory of spin glasses.* J. Phys. F Met. Phys. 5 (1975), 965–974.

[2] Guerra, F.: *Broken replica symmetry bounds in the mean field spin glass model.* Comm. Math. Phys. 233 (2003), 1–12.

[3] Janiš, V.: *Introduction to mean-field theory of spin glass models.* In: E. Pavarini, E. Koch, P. Coleman: Many-Body Physics: From Kondo to Hubbard. Verlag des Forschungszentrum Jülich, 2015, 8.1–8.28.

[4] Parisi, G.: *Toward a mean field theory for spin glasses.* Phys. Lett. A 73 (1979), 203–205.

[5] Parisi, G.: *Infinite number of order parameters for spin-glasses.* Phys. Rev. Lett. 43 (1979), 1754–1756.

[6] Parisi, G.: *A sequence of approximated solutions to the S-K model for spin-glasses.* J. Phys. A Math. Gen. 13 (1980), L115–L121.

[7] Parisi, G.: *Magnetic properties of spin glasses in a new mean field theory.* J. Phys. A Math. Gen. 13 (1980), 1887–1895.

[8] Parisi, G.: *Mean field theory for spin glasses.* Phys. Rep. 67 (1980), 25–28.

[9] Parisi, G.: *The order parameter for spin glasses: a function on the interval 0–1.* J. Phys. A Math. Gen. 13 (1980), 1101–1112.

[10] Parisi, G.: *Order parameter for spin-glasses.* Phys. Rev. Lett. 50 (1983), 1946–1948.

[11] Sherrington, D., Kirkpatrick, S.: *Solvable model of a spin-glass.* Phys. Rev. Lett. 35 (1975), 1792–1796.

[12] Slanina, F.: *Essentials of econophysics modelling.* Oxford University Press, 2013.

[13] Talagrand, M.: *The Parisi formula.* Ann. of Math. 163 (2006), 221–263.