



Εθνικό και Καποδιστριακό Πανεπιστήμιο Αθηνών  
Τμήμα Φυσικής  
Τομέας Φυσικής Συμπυκνωμένης Ύλης

Διπλωματική Εργασία

---

Προσομοιώσεις Monte Carlo κλασικού  
σιδηρομαγνήτη Heisenberg σε  
εδροκεντρωμένο κυβικό πλέγμα

Μαρία – Άννα Χλιάρα

Επιβλέπων Καθηγητής: Κωνσταντίνος Σιμσερίδης

Αθήνα, Ιανουάριος, 2020

<b>Περιεχόμενα</b>	1
<b>Περίληψη</b>	2
<b>Abstract</b>	2
<b>1. Στοιχεία Θεωρίας</b>	3
1.1 Πλέγμα Bravais και εδροκεντρωμένο κυβικό πλέγμα	3
1.2 Μαγνητικά υλικά	4
1.2.1 Διαμαγνητισμός, παραμαγνητισμός, σιδηρομαγνητισμός	4
1.2.2 Εξίσωση Schrödinger για δύο ηλεκτρόνια	7
1.2.3 Σιδηρομαγνήτης Heisenberg, το μοντέλο του Ising και αλληλεπιδράσεις Μέσου Πεδίου	8
1.3 Υπολογιστικές μέθοδοι	10
1.3.1 Μέθοδος Monte Carlo	10
1.3.2 Ο αλγόριθμος Metropolis	10
1.4 Υπολογισμός μεγεθών	11
1.4.1 Συνάρτηση επιμερισμού	11
1.4.2 Μέση ενέργεια	12
1.4.3 Ειδική θερμότητα	12
1.4.4 Μαγνήτιση	12
1.4.5 Κρίσιμη θερμοκρασία αλλαγής φάσης	13
1.4.6 Μαγνητική επιδεκτικότητα	14
<b>2. Πρόγραμμα</b>	14
2.1 Χρήση της μεθόδου Monte Carlo στο μοντέλο του Heisenberg	14
2.2 Εφαρμογή του αλγόριθμου στις απαιτήσεις του πειράματος	15
2.2.1 Σταθερές του πειράματος	15
2.2.2 Βήματα Monte Carlo	16
2.2.3 Ορισμός εύρους θερμοκρασιών	16
2.2.4 Αλληλεπιδράσεις Heisenberg – Dirac	16
<b>3. Αποτελέσματα Προσομοιώσεων</b>	17
3.1 Μεγάλο πλήθος βημάτων Monte Carlo	17
3.1.1 Μέση ενέργεια ανά σπιν	17
3.1.2 Μαγνήτιση ανά σπιν	19
3.1.3 Μαγνητική επιδεκτικότητα ανά σπιν	20
3.1.4 Ειδική θερμότητα	21
3.2 Μικρότερο πλήθος βημάτων Monte Carlo	23
<b>4. Συμπεράσματα</b>	26
<b>5. Βιβλιογραφία</b>	27

## **Περίληψη**

Η διπλωματική εργασία περιέχει αριθμητικούς κυρίως υπολογισμούς, στα πλαίσια του προτύπου Heisenberg, για την αλληλεπίδραση μεταξύ σπιν. Αφορά την πραγματοποίηση προσομοιώσεων Monte Carlo σε πλήρως κατειλημμένο με σπιν πλέγμα fcc, λαμβάνοντας υπ' όψιν μόνο τους πρώτους γείτονες, για διάφορα πλήθη σπιν, δηλαδή για διάφορα μεγέθη του προσομοιούμενου συστήματος. Συγκεκριμένα, μελετήσαμε τη συμπεριφορά της μαγνήτισης, της μέσης ενέργειας, της μαγνητικής επιδεκτικότητας και της ειδικής θερμότητας καθώς και το κρίσιμο σημείο της μετάβασης από σιδηρομαγνήτη σε παραμαγνήτη.

## **Abstract**

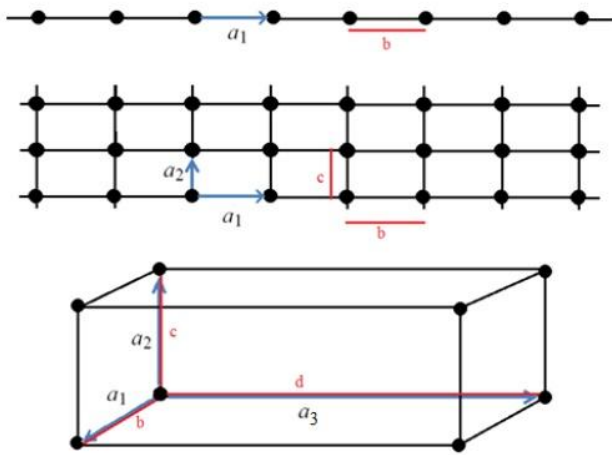
This thesis mainly includes numerical calculations on the classical Heisenberg model, of spin interactions. It involves the use of Monte Carlo simulations in a completely occupied with spins, face-centered cubic lattice, taking into account only first neighbor interactions, varying the number of spins. In other words, for different magnitude of the simulated system. Specifically, we studied the behavior of magnetization, mean energy, magnetic susceptibility and specific heat. We also studied the critical point of the paramagnetic to ferromagnetic transition.

# 1. Στοιχεία Θεωρίας

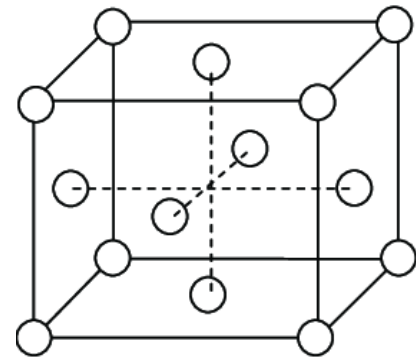
## 1.1 Εδροκεντρωμένο κυβικό πλέγμα [1]

Για να ορίσουμε οποιαδήποτε κατηγορία στερεών χρειάζεται να γνωρίζουμε το πλέγμα και τη βάση τους. Πλέγμα είναι ένα σύνολο μαθηματικών σημείων. Βάση ονομάζεται ο δομικός λίθος, δηλαδή το άτομο, το μόριο, το ιόν, ο οποίος τοποθετείται με καθορισμένο προσανατολισμό σε κάθε πλεγματοειδές σημείο. Το πλέγμα μαζί με τη βάση σχηματίζουν το στερεό.

Μία κατηγορία στερεών είναι οι περιοδικοί κρύσταλλοι. Αυτοί χαρακτηρίζονται από την ύπαρξη συμμετρίας μετατοπίσεως μακράς εμβέλειας, η οποία δεν εντοπίζεται σε άλλο είδος στερεών. Το κρυσταλλικό τους πλέγμα, ή αλλιώς πλέγμα Bravais, λοιπόν, είναι ένα σύνολο μαθηματικών σημείων  $\vec{r}$  με περιοδικότητα στο χώρο, που δημιουργείται παίρνοντας σε γραμμικό συνδυασμό, ακέραιες φορές  $(n_1, n_2, n_3)$ , τα γραμμικώς ανεξάρτητα, θεμελιώδη ανύσματα μετατοπίσεως του πλέγματος  $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ . Δηλαδή  $\vec{r} = n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2 + n_3\vec{a}_3$ .



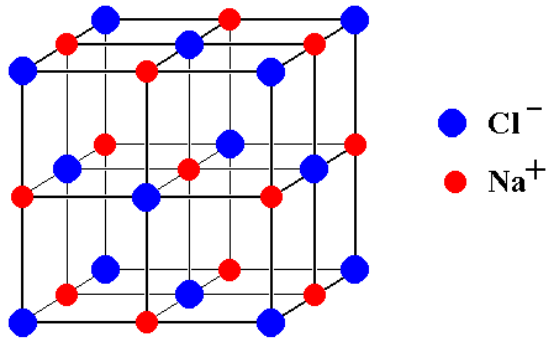
**Εικόνα 1.1** Παραδείγματα πλεγμάτων Bravais σε μία και δύο διαστάσεις, αλλά και μία κυψελίδα ενός πλέγματος Bravais σε τρεις διαστάσεις [1].

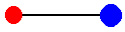


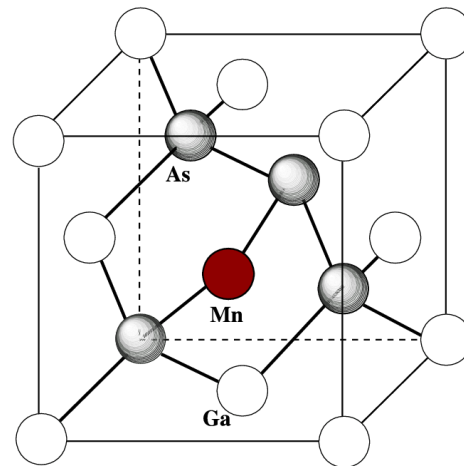
**Εικόνα 1.2** Συμβατική μοναδιαία κυψελίδα fcc η οποία έχει καθιερωθεί για την απεικόνιση του συγκεκριμένου πλέγματος και επαναλαμβανόμενη γεμίζει όλο το χώρο χωρίς κενά και επικαλύψεις.

Ένα παράδειγμα πλέγματος Bravais σε τρεις διαστάσεις είναι το εδροκεντρωμένο κυβικό (face – centered – cubic, fcc). Η συμβατική μοναδιαία κυψελίδα του πλέγματος αυτού, δεν είναι θεμελιώδης διότι περιέχει  $8 \times \frac{1}{8} + 6 \times \frac{1}{2} = 4$  πλεγματοειδή σημεία. Τα 8 πλεγματοειδή σημεία βρίσκονται στις κορυφές του κύβου και καθένα από αυτά διαμοιράζεται ισοτίμως μεταξύ 8 ιδίων κυψελίδων. Όμοια, τα υπόλοιπα 6 πλεγματοειδή σημεία που βρίσκονται στις έδρες του κύβου, διαμοιράζονται εξ ίσου σε δύο ίδιες συμβατικές μοναδιαίες κυψελίδες. (Εικόνα 1.2).

Η οργάνωση σε πλέγμα fcc παρατηρείται συχνά στη φύση. Χαρακτηριστικά παράδειγμα είναι το αλουμίνιο (Al), το χλωριούχο νάτριο (NaCl) και το αρσενικό γάλλιο (GaAs). Για το αλουμίνιο, η οργάνωση σε fcc έχει την χαμηλότερη δυνατή ενέργεια. Το χλωριούχο νάτριο αποτελείται από ίσο αριθμό ατόμων Na και Cl τοποθετημένα εναλλάξ στα σημεία ενός απλού κυβικού πλέγματος. Η δομή αυτή μπορεί να περιγραφεί σαν ένα εδροκεντρωμένο κυβικό πλέγμα Bravais με βάση που αποτελείται από ένα ιόν νατρίου στο  $(0,0,0)$  και ένα ιόν χλωρίου στη θέση  $(\frac{a}{2})(\hat{x} + \hat{y} + \hat{z})$ .



**Εικόνα 1.3** Η δομή του χλωριούχου νατρίου. Η βάση του πλέγματος είναι 



**Εικόνα 1.4** Η συμβατική μοναδιαία κυψελίδα του  $(Ga_{1-x}Mn_x)As$ , το Mn είναι συνήθως πρόσμιξη αντικαταστάσεως στο Ga [2].

Το αρσενικόχο γάλλιο είναι ημιαγωγός και έχει δομή θειούχου ψευδαργύρου (zinc-blende). Αποτελείται δηλαδή από δύο εδροκεντρωμένα κυβικά πλέγματα, το ένα μετατοπισμένο ως προς το άλλο. Ωστόσο η δομή αυτή δεν αποτελείται από πλέγμα Bravais διότι το περιβάλλον κάθε σημείου διαφέρει ως προς τον προσανατολισμό από το περιβάλλον του πλησιέστερου γειτονά του.

Αξίζει να σημειώσουμε πως το GaAs δεν έχει μαγνητικές ιδιότητες, ωστόσο αυτό διαφέρει όταν έχει προσμίξεις. Πιο συγκεκριμένα το  $(Ga_{1-x}Mn_x)As$  (Εικόνα 1.4), όπου  $x$  η συγκέντρωση του Μαγγανίου στον ημιαγωγό, διατηρεί τη μορφή του όταν  $x \ll 1$ , αλλά για μεγαλύτερες τιμές εμφανίζει περιοχές με σιδηρομαγνητικές ιδιότητες. Θα μπορούσαμε να πούμε πως η προσομοίωση, που έχει πραγματοποιηθεί στην παρούσα διπλωματική, είναι μία προσέγγιση αυτού του φαινομένου, στο ασυμπτωτικό όριο για  $x = 1$ .

## 1.2 Μαγνητικά Υλικά [3][4]

Από τον 19<sup>ο</sup> αιώνα, άρχισαν να πραγματοποιούνται συστηματικές μελέτες πάνω στις μαγνητικές ιδιότητες των υλικών. Τα μαγνητικά υλικά τότε κατηγοριοποιήθηκαν σε διαμαγνητικά, παραμαγνητικά και σιδηρομαγνητικά.

### 1.2.1 Διαμαγνητισμός, Παραμαγνητισμός, Σιδηρομαγνητισμός

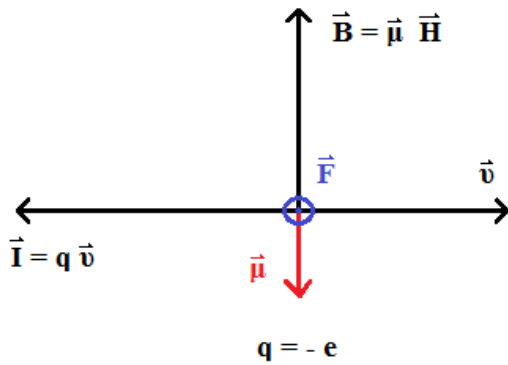
Η θεωρία του διαμαγνητισμού μπόρεσε να εξηγηθεί επιτυχώς χάρις στην δύναμη Lorentz

$$\vec{F} = q(\vec{E} + \vec{v} \times \vec{H})$$

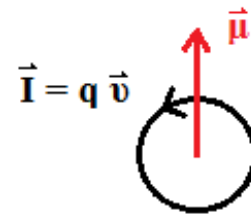
που ασκείται σε ηλεκτρόνιο, όταν εφαρμόζεται ηλεκτρικό πεδίο  $\vec{E}$  και μαγνητικό πεδίο  $\vec{H}$ . Όπου  $q$  ηλεκτρικό φορτίο και  $\vec{v}$  η ταχύτητά του. Όταν  $\vec{E} = 0$ , η δύναμη που ασκείται σε ένα ηλεκτρόνιο,  $q = -e$ , έχει το ρόλο κεντρομόλου δύναμης.

$$F = F_K = evB = \frac{mv^2}{r} = v = \frac{eBr}{m} = \omega r = \frac{eBr}{m} = \omega = \frac{eB}{m} \quad (1)$$

Με  $\omega$  την συχνότητα Larmor.



Εικόνα 1.5 Δύναμη Lorentz χωρίς ηλεκτρικό πεδίο.



Εικόνα 1.6 μαγνητική ροπή κυκλικού ρεύματος

Όπως παρατηρούμε ο διαμαγνητισμός προκύπτει από το γεγονός ότι  $\vec{\mu} \uparrow \downarrow \vec{H}$ .  
 Για  $N$  αριθμό ατόμων και  $Z$  τον αριθμό ηλεκτρονίων ανά άτομο έχουμε:

$$\mu = IA = \frac{eNZ}{T} \pi r^2 = \frac{eNZ\omega}{2\pi} \pi r^2 \overset{(1)}{\sim} \frac{NZe eB}{2m} r^2 = \frac{NZe^2 \mu_0 H r^2}{2m} = \mu_0 \frac{NZe^2}{2m} r^2 H$$

Επομένως, η μαγνητική επιδεκτικότητα υπολογίζεται:

$$\chi = \frac{\partial \vec{\mu}}{\partial \vec{H}} = -\mu_0 \frac{NZe^2}{2m} r^2 (2)$$

Σύμφωνα με τη θεωρία του Langevin για τον διαμαγνητισμό, ισχύει

$$r^2 = \langle x^2 \rangle$$

$$\langle r^2 \rangle = \langle x^2 + y^2 + z^2 \rangle = \langle x^2 \rangle + \langle y^2 \rangle + \langle z^2 \rangle$$

Και για σφαιρικά συμμετρική κατανομή

$$\langle x^2 \rangle = \langle y^2 \rangle = \langle z^2 \rangle$$

Επομένως, θα έχουμε:

$$\langle r^2 \rangle = 3\langle x^2 \rangle \Rightarrow \langle x^2 \rangle = \frac{1}{3} \langle r^2 \rangle$$

Σύμφωνα με τα παραπάνω, η σχέση (2) θα γίνει

$$\chi = -\mu_0 \frac{NZe^2}{6m} \langle r^2 \rangle$$

Εξαιτίας της δύναμης αυτής προκαλείται μεταβολή στη φορά του ηλεκτρικού ρεύματος με αποτέλεσμα να δίνει επαγόμενη μαγνήτιση

$$M = -\left(\frac{NZe^2}{6m}\right) \langle r^2 \rangle H,$$

όπου  $\sqrt{\langle r^2 \rangle}$  η μέση ακτίνα της τροχιάς του ηλεκτρονίου γύρω από το άτομο. Ο διαμαγνητισμός είναι ένα κοινό φαινόμενο το οποίο εμφανίζεται σε όλα τα υλικά, ωστόσο, όντας ασθενές, όταν συνυπάρχει με τον παραμαγνητισμό, θεωρείται αμελητέος.

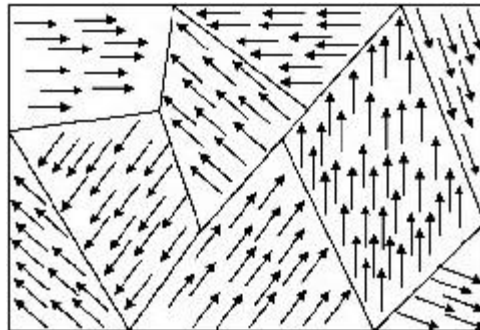
Ο παραμαγνητισμός οφείλεται στο γεγονός ότι κβαντομηχανικά, τα άτομα και τα μόρια, έχουν μαγνητικές ροπές.

$$\vec{\mu} = \frac{q}{2m} (\vec{L} + g\vec{S})$$

$$\text{Για } \vec{L} = 0, \vec{\mu} = \frac{q}{2m} g\vec{S} = \mu = \frac{e}{2m} g\hbar\Sigma = \mu = g \frac{e\hbar}{2m} \Sigma = \mu = g\mu_B \Sigma$$

Με τον τρόπο αυτό σχηματίζονται περιοχές ισχυρής πόλωσης διότι κάθε κινούμενο ηλεκτρόνιο συμπεριφέρεται σαν μαγνητικό δίπολο. Όπου η  $\vec{L}$ ,  $\vec{S}$  τροχιακή στροφορμή και το σπιν αντίστοιχα,  $\Sigma$  καθαρός αριθμός, καθώς και  $\mu_B = \frac{e\hbar}{2m}$  η μαγνητόνη του Bohr.

**Εικόνα 1.7** Αναπαράσταση των περιοχών ισχυρής πόλωσης, προς τυχαίες κατευθύνσεις, σε ένα παραμαγνητικό υλικό.



Παρόλα αυτά, ο σιδηρομαγνητισμός δεν μπορούσε να κατανοηθεί σε ατομική βάση μέχρι το 1920. Αυτό έγινε εφικτό από τον Heisenberg, αφού χρησιμοποίησε κβαντική μηχανική για τη μελέτη του φαινομένου. Είχε βρεθεί λοιπόν πως ορισμένα υλικά όπως ο σίδηρος, το κοβάλτιο, το νικέλιο κ.α., όταν ψύχονταν κάτω από μια συγκεκριμένη, κρίσιμη θερμοκρασία  $T_c$ , εμφάνιζαν αυθόρμητη μαγνήτιση, ακόμη και με απουσία εξωτερικού μαγνητικού πεδίου. Η θερμοκρασιακή εξάρτηση της μαγνητικής επιδεκτικότητας για θερμοκρασίες μεγαλύτερες από την κρίσιμη ακολουθεί το νόμο Curie - Weiss:

$$\chi_{ferr} = \frac{C}{T - T_C},$$

Ενώ ένας συνηθισμένος παραμαγνήτης ακολουθεί το νόμο Curie

$$\chi = \frac{C}{T}.$$

Το 1907, ο Weiss κατανόησε πως η συμπεριφορά αυτή οφείλεται σε ένα εσωτερικό μαγνητικό πεδίο  $H_f$ . Ως αποτέλεσμα, με την εφαρμογή ενός εξωτερικού μαγνητικού πεδίου  $H$ , κάθε άτομο στο υλικό, βρίσκεται σε ενεργό πεδίο

$$H_{eff} = H + H_f = H + aM,$$

όπου  $M = \sum \mu_i$  η μαγνήτιση ως το άθροισμα των μαγνητικών ροπών. Το φαινόμενο αυτό καταστρέφεται με την έκθεση σε υψηλές θερμοκρασίες. Οι υπολογισμοί για τη μαγνήτιση δείχνουν πως αν τα δίπολα μπορούν να πάρουν τιμές  $\uparrow$  και  $\downarrow$ , ισχύει:

$$M(H) = N\mu \cdot \tanh \left[ \mu \frac{(H + \alpha M)}{k_B T} \right].$$

Με την απουσία εξωτερικού μαγνητικού πεδίου ( $H = 0$ ) έχουμε:

$$M(H) = N\mu \cdot \tanh \left( \frac{\mu \alpha M}{k_B T} \right).$$

Αυτό δίνει μη μηδενική μαγνήτιση όταν  $T < T_c = \frac{N\mu^2 \alpha}{k_B}$ .

## 1.2.2 Εξίσωση Schrödinger για δύο ηλεκτρόνια

Σύμφωνα με τη θεωρία Heitler - London, αν έχουμε δύο άτομα, '1' και '2' που το καθένα έχει ένα ηλεκτρόνιο σε καταστάσεις 'j' και 'k', οι κυματοσυναρτήσεις του συστήματος είναι γραμμικός συνδυασμός  $\Psi_j(r_1)\Psi_k(r_2), \Psi_j(r_2)\Psi_k(r_1)$  όπου  $r_1, r_2$  οι θέσεις των ηλεκτρονίων στο χώρο. Οι πιθανές χωρικές κυματοσυναρτήσεις λοιπόν είναι

$$\Psi_{+(r_1, r_2)} = \Psi_j(r_1)\Psi_k(r_2) + \Psi_j(r_2)\Psi_k(r_1),$$

$$\Psi_{-(r_1, r_2)} = \Psi_j(r_1)\Psi_k(r_2) - \Psi_j(r_2)\Psi_k(r_1).$$

Θα πρέπει να λάβουμε υπ' όψιν και το σπιν των ηλεκτρονίων, επομένως έχουμε

$$S_1 = S(1, \uparrow)S(2, \uparrow) + S(1, \downarrow)S(2, \downarrow),$$

$$S_0 = S(1, \uparrow)S(2, \downarrow) - S(1, \downarrow)S(2, \uparrow).$$

Η συνολική κυματοσυνάρτηση πρέπει να είναι συνδυασμός του χωρικού μέρους και του σπιν, και σύμφωνα με την απαγορευτική αρχή του Pauli, αυτό μπορεί να συμβεί μόνο όταν

$$\Psi_1(r_1, r_2) = \Psi_{-(r_1, r_2)} S_1,$$

$$\Psi_0(r_1, r_2) = \Psi_{+(r_1, r_2)} S_0.$$

Για να βρούμε την ενέργεια του συστήματος θα πρέπει να λύσουμε την εξίσωση του Schrödinger.

$$\hat{H}\Psi(r_1, r_2) = E\Psi(r_1, r_2), \text{ με}$$

$$\hat{H} = \frac{-\hbar^2}{2m} (\nabla_1^2 + \nabla_2^2) + [V(r_1) + V(r_2)] + \frac{e^2}{|r_1 - r_2|}.$$

Όπου  $\nabla$  ο τελεστής Laplace,  $V(r_1), V(r_2)$  τα δυναμικά στα δύο άτομα και ο τελευταίος όρος περιγράφει την αλληλεπίδραση Coulomb μεταξύ των ηλεκτρονίων. Αν 'j', 'k' οι ατομικές καταστάσεις με απουσία αλληλεπίδρασης έχουμε

$$\frac{-\hbar^2}{2m} [\nabla_1^2 + V(r_1)]\Psi_j(r_1) = E_j\Psi_j(r_1)$$

$$\frac{-\hbar^2}{2m} [\nabla_2^2 + V(r_2)]\Psi_k(r_2) = E_k\Psi_k(r_2)$$

Τότε οι καταστάσεις singlet και triplet της ενέργειας θα δίνονται



$$E_0 = (E_j + E_k) + C_{jk} + J_{jk},$$

$$E_1 = (E_j + E_k) + C_{jk} - J_{jk}.$$

Οι όροι  $C_{jk}$  και  $J_{jk}$  δίνονται από τα ολοκληρώματα

$$C_{jk} = \iint \Psi_j(r_1) \Psi_k(r_2) \frac{e^2}{|r_1 - r_2|} \Psi_j(r_1) \Psi_k(r_2) d^3 r_1 d^3 r_2,$$

$$J_{jk} = \iint \Psi_j(r_1) \Psi_k(r_2) \frac{e^2}{|r_1 - r_2|} \Psi_k(r_1) \Psi_j(r_2) d^3 r_1 d^3 r_2.$$

Ισχύει ότι ο όρος  $C_{jk}$  είναι η ενέργεια Coulomb από την αλληλεπίδραση των δύο ηλεκτρονίων και ο όρος  $J_{jk}$  ονομάζεται ολοκλήρωμα ανταλλαγής.

### 1.2.3 Σιδηρομαγνήτης Heisenberg, το μοντέλο του Ising και αλληλεπιδράσεις Μέσου Πεδίου

Ο Heisenberg ήταν ο πρώτος που έδειξε ότι η αλληλεπίδραση των ηλεκτρονίων  $J_{jk}$ , καλούμενη ενέργεια ανταλλαγής, ήταν η βάση για την κατανοήση του πεδίου Weiss. Ξεκίνησε να μελετάει συστήματα πολλών ηλεκτρονίων και παρατήρησε πως, όταν  $J_{jk} > 0$ , η κατάσταση triplet  $E_1$  είναι χαμηλότερη ενεργειακά, επομένως προτιμότερη. Σε αυτήν, τα σπιν των ηλεκτρονίων είναι ομόρροπα όπως φαίνεται στον σιδηρομαγνητισμό. Την ίδια περίοδο μελετούσε το σύστημα των δύο ηλεκτρονίων ο Dirac. Το αποτέλεσμα αυτών των μελετών μας δίνει την Hamiltonian Heisenberg - Dirac

$$\hat{H} = -k_B \sum_{j < k} J_{jk} \vec{S}_j \cdot \vec{S}_k$$

Ο τελεστής της Hamiltonian Heisenberg - Dirac είναι ιδιαίτερα χρήσιμος παρόλο που δεν περιγράφει παρά μία προσέγγιση του φυσικού προβλήματος. Ωστόσο με τις κατάλληλες προσεγγίσεις, η θεωρία μέσου πεδίου μπορεί να χρησιμοποιηθεί για την ακριβή επίλυση ορισμένων συστημάτων. Η θεωρία μέσου πεδίου μελετά την συμπεριφορά πολύπλοκων στοχαστικών συστημάτων, προσεγγίζοντας απλούστερα μοντέλα. Πιο συγκεκριμένα, δεν αντιμετωπίζει κάθε αλληλεπίδραση ξεχωριστά αλλά μελετάει το σύνολο, δηλαδή το μέσο πεδίο που επηρεάζει το πρόβλημα με τον ίδιο τρόπο και δίνει το ίδιο αποτέλεσμα

Το μοντέλο του Ising περιγράφει ένα σύστημα, στο οποίο σπιν είναι τοποθετημένα σε ένα πλέγμα. Κάθε σπιν μπορεί να πάρει δύο τιμές:  $+1, -1$ . Αν έχουμε  $N$  σημεία στο πλέγμα, τότε το σύστημα θα έχει  $2^N$  καταστάσεις, και η ενέργεια της κάθε κατάστασης δίνεται από την Ising Hamiltonian

$$\hat{H} = -J \sum_{i,j} s_i s_j - B \sum_i s_i$$

Όπου  $J$  το ολοκλήρωμα ανταλλαγής, μεταξύ των πλησιέστερων γειτόνων, και  $B$  το εξωτερικό μαγνητικό πεδίο.

Πραγματοποιώντας προσομοιώσεις στο μοντέλο αυτό, σε ένα πεπερασμένο σύστημα, χρησιμοποιώντας τη μέθοδο Monte Carlo, μπορούμε να υπολογίσουμε σημαντικές μεγέθη του συστήματος σε κάθε θερμοκρασία. Μεγάλο ενδιαφέρον υπάρχει και στην περίπτωση απουσίας μαγνητικού πεδίου  $B = 0$ , όπως πραγματοποιήθηκε στην παρούσα εργασία.

Αν τώρα  $\delta s_i = s_i - \langle s_i \rangle$  η διακύμανση του spin  $s_i$  τότε το γινόμενο γίνεται

$$s_i s_j = (\langle s_i \rangle + \delta s_i)(\langle s_j \rangle + \delta s_j) \langle s_i \rangle = \langle s_j \rangle = \langle s \rangle$$

$$s_i s_j = \langle s \rangle^2 + \langle s \rangle \delta s_j + \langle s \rangle \delta s_i + \delta s_i \delta s_j \quad \text{36}$$

Από την προσέγγιση μέσου πεδίου θεωρούμε το γινόμενο των διακυμάνσεων ίσο με το μηδέν. Άρα έχουμε

$$\begin{aligned} s_i s_j &= \langle s \rangle^2 + \langle s \rangle \delta s_j + \langle s \rangle \delta s_i \\ s_i s_j &= \langle s \rangle^2 + \langle s \rangle (s_j - \langle s \rangle) + \langle s \rangle (s_i - \langle s \rangle) \end{aligned}$$

$$s_i s_j = \langle s \rangle^2 + \langle s \rangle s_j - \langle s \rangle^2 + \langle s \rangle s_i - \langle s \rangle^2$$

$$s_i s_j = \langle s \rangle (s_i + s_j) - \langle s \rangle^2$$

Επομένως, η Hamiltonian σε προσέγγιση πρώτων γειτόνων, γίνεται

$$\hat{H} = -J \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^q (\langle s \rangle (s_i + s_j) - \langle s \rangle^2) - B \sum_{i=1}^N s_i$$

$$\hat{H} = -J \langle s \rangle q \sum_{i=1}^N s_i + \frac{JN \langle s \rangle^2 q}{2} - B \sum_{i=1}^N s_i$$

$$\hat{H} = -B_{eff} \sum_{i=1}^N s_i + \frac{JN \langle s \rangle^2 q}{2}.$$

Όπου  $N$  το πλήθος των spins,  $q$  ο αριθμός των πρώτων γειτόνων και  $B_{eff} = J \langle s \rangle q + B$ .

Αφού το σύστημα είναι ισότροπο και καμία διάσταση δεν είναι προτιμητέα, στη περίπτωση που έχουμε  $\vec{B} = B \hat{z}$  μπορούμε να γράψουμε

$$\langle s_x \rangle = \langle s_y \rangle = 0 \text{ και } \langle s_z \rangle = \langle s \rangle = \sigma$$

Επομένως, η Hamiltonian γίνεται

$$\hat{H} = -B_{eff} \sum_{i=1}^N \cos \theta_i + \frac{JN \sigma^2 q}{2}$$

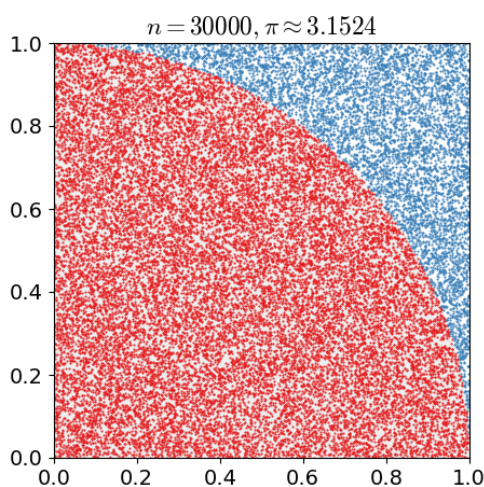
### 1.3 Υπολογιστικές Μέθοδοι [5][6]

Όπως αναφέρθηκε και προηγουμένως, τα περισσότερα φυσικά προβλήματα δεν είναι ακριβώς επιλύσιμα επομένως υπάρχει η ανάγκη εύρεσης κατάλληλων προσεγγίσεων ώστε να καταστεί δυνατή η λύση τους. Η υπολογιστική φυσική αποσκοπεί στην κατανόηση του προβλήματος και στην κατασκευή του βέλτιστου αλγορίθμου με σκοπό να φτάσουμε γρήγορα στη λύση του συστήματος.

### 1.3.1 Μέθοδος Monte Carlo

Η μέθοδος Monte Carlo είναι μια στοχαστική διαδικασία και περιλαμβάνει ένα ευρύ φάσμα υπολογιστικών αλγορίθμων, όπου με χρήση τυχαίων αριθμών και τη στατιστική γίνεται προσπάθεια για να επιλυθεί ένα πρόβλημα. Η κύρια ιδέα αυτής της μεθόδου είναι ότι βασίζεται σε γεννήτρια ψευδοτυχαίων αριθμών με σκοπό να πάρει πραγματικά αποτελέσματα. Η πρώτη εφαρμογή μίας εκδοχής του Monte Carlo πραγματοποιήθηκε στο πείραμα της βελόνας του Buffon το οποίο απέβλεπε στον υπολογισμό του  $\pi$ .

*Εικόνα 1.8 Προσεγγιστικός υπολογισμός της σταθεράς  $\pi$  με την μέθοδο Monte Carlo. Γίνεται χρήση ψευδοτυχαίων αριθμών  $x, y \in [0,1]$  οι οποίοι γίνονται αποδεκτοί όταν  $x^2 + y^2 \leq 1$ .*



### 1.3.2 Ο Αλγόριθμος Metropolis

Ο αλγόριθμος Metropolis αποτελεί τον πιο γνωστό και ευρέως διαδεδομένο αλγόριθμο Monte Carlo και η ιδέα του εισήχθη στην επιστήμη για πρώτη φορά από τον Nicolas Metropolis και τους συνεργάτες του το 1953 όπου πραγματοποίησαν προσομοιώσεις μοντέλου αερίου σκληρών σφαιρών. Η λειτουργία του αλγορίθμου βασίζεται στην επιλογή ενός συνόλου πιθανοτήτων  $g(\mu \rightarrow \nu)$ , μία για κάθε πιθανή μετάβαση από μία κατάσταση σε μία άλλη  $\mu \rightarrow \nu$ . Έπειτα επιλέγει ένα σύνολο αποδεκτών πιθανοτήτων  $A(\mu \rightarrow \nu)$ , σύμφωνα με τα κριτήρια του προβλήματος. Ο αλγόριθμος λειτουργεί επαναλαμβανόμενα, επιλέγοντας κάθε φορά νέα κατάσταση  $\nu$ , την οποία είτε απορρίπτει είτε δέχεται. Αν γίνει αποδεκτή, τότε το σύστημα αλλάζει στην κατάσταση αυτή. Στην αντίθετη περίπτωση το σύστημα παραμένει αμετάβλητο.

Είναι προφανές ότι η κατανομή των πιθανοτήτων εκλογής  $g(\mu \rightarrow \nu)$ , πρέπει να ικανοποιεί τη συνθήκη εργοδικότητας δηλαδή την απαίτηση ότι κάθε κατάσταση πρέπει να είναι προσβάσιμη από κάθε άλλη για άπειρο αριθμό βημάτων. Δεδομένης μίας αρχικής κατάστασης  $\mu$ , μπορούμε να κατασκευάσουμε οποιονδήποτε αριθμό υποψήφια καταστάσεων  $\nu$ , απλώς μεταβάλλοντας σπιν στο πλέγμα. Ωστόσο, σύμφωνα με τη στατιστική φυσική, το σύστημα θα κινείται σε μικρό εύρος ενεργειών αφού σπανίως γίνονται μεταβολές που αλλάζουν δραματικά την ενέργεια του συστήματος. Αυτό μας ωθεί στο συμπέρασμα πως στην προσομοίωση δεν θέλουμε να συμπεριλάβουμε μεταβολές σε καταστάσεις των οποίων η ενέργεια είναι πολύ διαφορετική από την

παρούσα. Ο απλούστερος τρόπος να υλοποιηθεί αυτό στο μοντέλο του Ising είναι συμπεριλάβουμε καταστάσεις που διαφέρουν κατά την αντιστροφή ενός μόνο σπιν. Ωστόσο, σε ένα πεπερασμένο σύστημα, μπορούμε να βασιστούμε και σε αντιστροφή πολλών σπιν αφού θα ικανοποιείται και πάλι η συνθήκη της εργοδικότητας.

Αυτό που χαρακτηρίζει τον αλγόριθμο Metropolis είναι ότι οι πιθανότητες εκλογής  $g(\mu \rightarrow \nu)$ , για κάθε πιθανή κατάσταση  $\nu$ , επιλέγονται να είναι ίσες. Αν υποθέσουμε πως στο προσομοιούμενο σύστημα έχουμε  $N$  αριθμό σπιν, με τη μέθοδο μονής αντιστροφής σπιν που αναφέρθηκε προηγουμένως, υπάρχουν  $N$  διαφορετικά σπιν που θα μπορούσαν αν μεταβληθούν. Επομένως  $N$  καταστάσεις  $\nu$  στις οποίες μπορούμε να φτάσουμε από την αρχική κατάσταση  $\mu$ , οι πιθανότητες των οποίων θα έχουν την τιμή

$$g(\mu \rightarrow \nu) = \frac{1}{N}$$

Τότε, η συνθήκη λεπτομερούς ισοζυγίου θα έχει τη μορφή

$$\frac{P(\mu \rightarrow \nu)}{P(\nu \rightarrow \mu)} = \frac{g(\mu \rightarrow \nu)A(\mu \rightarrow \nu)}{g(\nu \rightarrow \mu)A(\nu \rightarrow \mu)} = \frac{A(\mu \rightarrow \nu)}{A(\nu \rightarrow \mu)} = e^{-\beta(E_\nu - E_\mu)}$$

Όπου  $\beta = \frac{1}{k_B T}$ , και  $E_\nu, E_\mu$  οι ενέργειες για τις καταστάσεις  $\nu, \mu$  αντίστοιχα.

Για να ικανοποιούν αυτή την εξίσωση οι πιθανότητες αποδοχής πρέπει να ισχύει το εξής κριτήριο Metropolis

$$A(\mu \rightarrow \nu) = \begin{cases} e^{-\beta(E_\nu - E_\mu)}, & E_\nu > E_\mu \\ 1, & \text{Αλλιώς} \end{cases}$$

Με άλλα λόγια, η μετάβαση σε μία νέα κατάσταση, με ενέργεια μικρότερη ή ίση της παρούσας, πρέπει να γίνεται πάντα αποδεκτή. Στη διαφορετική περίπτωση όπου η ενέργεια είναι μεγαλύτερη, μπορούμε να την αποδεχτούμε, με την πιθανότητα που δίνεται παραπάνω.

## 1.4 Υπολογισμός Μεγεθών [7]

### 1.4.1 Συνάρτηση επιμερισμού

Αρχικά θα πρέπει να υπολογίσουμε τη συνάρτηση επιμερισμού η οποία είναι γνωστό ότι έχει τη μορφή

$$Z = \sum_{\mu} e^{-\beta E_{\mu}}$$

Όπου  $\mu$  οι πιθανές καταστάσεις του συστήματος.

$$Z = \sum_{\mu} e^{-\beta \left( -B_{eff} S \sum_{i=1}^N \cos \theta_i + \frac{JN\sigma^2 q}{2} \right)}$$

$$Z = e^{-\beta \frac{JN\sigma^2 q}{2}} \int e^{\beta B_{eff} S \cos \theta_i} d\Omega$$

$$Z = e^{-\beta \frac{JN\sigma^2 q}{2}} \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\pi} e^{\beta B_{eff} S \cos \theta_i} \sin \theta d\theta$$

$$Z = e^{-\beta \frac{JN\sigma^2 q}{2}} 4\pi \frac{\sinh(\beta B_{eff} S)}{\beta B_{eff} S}$$

Προκύπτει πως γνωρίζοντας τη συνάρτηση επιμερισμού και των παραμέτρων που επηρεάζουν το σύστημα, μπορούμε να υπολογίσουμε όλα τα μακροσκοπικά μεγέθη που μας ενδιαφέρουν για αυτό.

### 1.4.2 Μέση Ενέργεια

Η μέση τιμή ενός μεγέθους  $Q$  για ένα σύστημα σε ισορροπία είναι

$$\langle Q \rangle = \sum_{\mu} Q_{\mu} p_{\mu} = \frac{1}{Z} \sum_{\mu} Q_{\mu} e^{-\beta E_{\mu}}$$

Επομένως, η μέση τιμή της ενέργειας θα είναι

$$U = \frac{1}{Z} \sum_{\mu} E_{\mu} e^{-\beta E_{\mu}} = \frac{-1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \beta} = \frac{-\partial \log Z}{\partial \beta}$$

### 1.4.3 Ειδική Θερμότητα

Η ειδική θερμότητα δίνεται από την παράγωγο της εσωτερικής ενέργειας

$$C = \frac{\partial U}{\partial T} = -k_B \beta \frac{\partial U}{\partial \beta} = k_B \beta^2 \frac{\partial^2 \log Z}{\partial \beta^2}$$

### 1.4.4 Μαγνήτιση

Είναι γνωστό από τη θερμοδυναμική, ότι η ειδική θερμότητα σχετίζεται με την εντροπία με τον εξής τρόπο

$$C = T \frac{\partial S}{\partial T} = -\beta \frac{\partial S}{\partial \beta}$$

Συνεπώς, ολοκληρώνοντας ως προς  $\beta$  μπορούμε να υπολογίσουμε την εντροπία.

$$S = -k_B \beta \frac{\partial \log Z}{\partial \beta} + k_B \log Z$$

Για να υπολογίσουμε τη μαγνήτιση θα πρέπει να εισάγουμε την έννοια της ελεύθερης ενέργειας Helmholtz.

$$F = U - TS = -k_B T \log Z$$

Η μαγνήτιση μεταβάλλεται με εξάρτηση από το μαγνητικό πεδίο  $B$  του συστήματος. Ως αποτέλεσμα έχουμε

$$M = \frac{\partial F}{\partial B} = \frac{-1}{\beta} \frac{\partial \ln Z}{\partial B}$$

Αντικαθιστώντας την συνάρτηση επιμερισμού στην παραπάνω σχέση έχουμε

$$M = Ns$$

Ωστόσο, στην αρχή κάθε προσομοίωσης, το σύστημα βρίσκεται στη κατάσταση στην οποία για όλα τα spin ισχύει  $s_i = \sigma$ , με  $i = 1, 2, \dots, N$ .

Άρα η μαγνήτιση εισόδου είναι  $M_{\text{εισ}} = N\sigma$

### 1.4.5 Κρίσιμη θερμοκρασία αλλαγής φάσης

Εξισώνοντας τις δύο σχέσεις για τη μαγνήτιση έχουμε

$$\sigma = s \left( \coth(\beta s(Jq\sigma + B)) + \frac{1}{\beta s(Jq\sigma + B)} \right)$$

Η σχέση αυτή, για  $B = 0$ , γίνεται

$$\sigma = s \left( \coth(\beta sJq\sigma) + \frac{1}{\beta sJq\sigma} \right)$$

Μία λύση αυτής της εξίσωσης είναι η  $\sigma = 0$  που περιγράφει την παραμαγνητική φάση

Για την συνάρτηση  $f(\sigma) = s \left( \coth(\beta sJq\sigma) + \frac{1}{\beta sJq\sigma} \right)$  ισχύει ότι  $\lim_{\sigma \rightarrow +\infty} f(\sigma) = s$

Επομένως, για να έχουν και άλλα σημεία τομής, πρέπει

$$\frac{df}{d\sigma} \Big|_{\sigma=0} > 1$$

$$\lim_{\sigma \rightarrow 0} s \left( \beta sJq \left( \frac{\sinh^2(\beta sJq\sigma) - \cosh^2(\beta sJq\sigma)}{\sinh^2(\beta sJq\sigma)} + \frac{1}{(\beta sJq\sigma)^2} \right) \right) > 1$$

$$\lim_{\sigma \rightarrow 0} -s^2 \beta Jq \frac{1}{\sinh^2(\beta sJq\sigma)} + \frac{1}{(\beta sJq\sigma)^2} > 1$$

Αντικαθιστώντας το ανάπτυγμα

$$\frac{1}{\sinh^2 x} \approx \frac{1}{x^2} - \frac{1}{3}$$

Τότε έχουμε

$$s^2 \beta Jq \frac{1}{3} > 1$$

Στο όριο για το οποίο ισχύει

$$s^2 \beta_K Jq \frac{1}{3} = 1 \Leftrightarrow T_K = \frac{s^2 k_B Jq}{3}$$

Για τη διευκόλυνση του πειράματος έχουμε θέσει  $s = J = 1$  και  $k_B = K^{-1}$   
Επίσης γνωρίζουμε ότι για το εδροκεντρωμένο πλέγμα ισχύει  $q = 12$ .

Επομένως

$$T_K = 4K$$

## 1.4.6 Μαγνητική Επιδεκτικότητα

Παρατηρούμε πως στη Χαμιλτονιανή εμφανίζονται όροι της μορφής  $-XY$ , όπου  $Y$  είναι κάποιο «πεδίο», του οποίου την τιμή θεωρούμε σταθερή, και  $X$  η εξαρτημένη μεταβλητή που σχετίζεται με αυτό. Σύμφωνα και με τα παραπάνω, έχουμε λοιπόν

$$\langle X \rangle = \frac{1}{\beta} \frac{\partial \log Z}{\partial Y} = \frac{-\partial F}{\partial Y}$$

Η ποσότητα  $\chi = \frac{\partial \langle X \rangle}{\partial Y}$  ονομάζεται επιδεκτικότητα του  $X$  στο  $Y$ . Επομένως η μαγνητική επιδεκτικότητα έχει τη μορφή

$$\chi = \frac{\partial M}{\partial B}$$

## 2. Πρόγραμμα

Το πρόγραμμα με το οποίο πραγματοποιήθηκαν οι προσομοιώσεις είναι γραμμένο σε γλώσσα προγραμματισμού Fortran. Δόθηκε έτοιμο από τον επιβλέποντα καθηγητή και μπορεί να χρησιμοποιηθεί για πλήθος διαφορετικών προσομοιώσεων σε πλέγμα fcc.

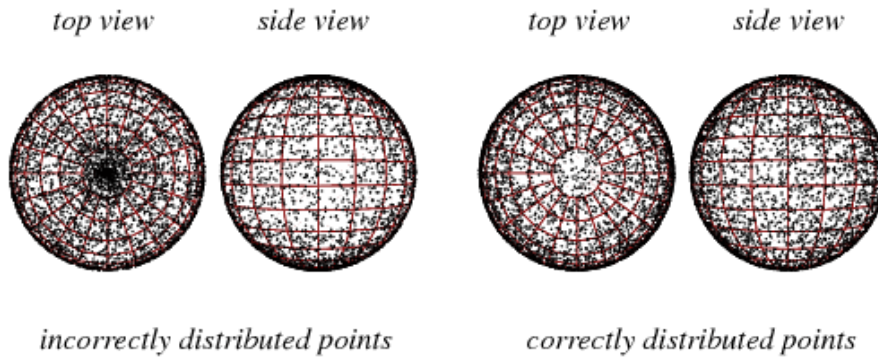
### 2.1 Χρήση της μεθόδου Monte Carlo στο μοντέλο του Heisenberg [8][9]

Με βάση ό,τι ειπώθηκε παραπάνω, είναι κατανοητό πως η μέθοδος Monte Carlo λειτουργεί επιλέγοντας τυχαίους αριθμούς. Επομένως, στη περίπτωση που θέλουμε να επιλέξουμε ένα τυχαίο σπιν, αρχικά, θα πρέπει να μελετήσουμε το πρόβλημα σε σφαιρικές συντεταγμένες.

Για να επιλέξουμε ένα τυχαίο σημείο στην επιφάνεια μοναδιαίας σφαίρας δεν μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε να χρησιμοποιήσουμε τις σφαιρικές συντεταγμένες,  $\theta \in [0, 2\pi)$ ,  $\varphi \in [0, \pi]$ , διαλέγοντας τυχαίους αριθμούς στα διαστήματα που ορίζονται. Αυτό θα είχε ως αποτέλεσμα τον συνωστισμό των σημείων στους πόλους διότι η μεταβολή της στερεάς γωνίας είναι συνάρτηση του  $\varphi$ ,  $d\Omega = \sin\varphi d\theta d\varphi$ . Με σκοπό να επιτευχθεί η επιλογή ομοιόμορφα κατανεμημένων σημείων, θεωρούμε  $u, v$  τυχαίους αριθμούς στο διάστημα  $(0, 1)$ . Έτσι έχουμε:

$$\begin{aligned}\theta &= 2\pi u \\ \varphi &= \cos^{-1}(2v - 1)\end{aligned}$$

Που δίνουν τις σφαιρικές συντεταγμένες σημείων ομοιόμορφα κατανεμημένων στο  $S^2$  αφού βλέπουμε και ότι  $d\Omega = \sin\varphi d\theta d\varphi = -d\theta d(\cos\varphi)$ . Με τον τρόπο αυτό, ο αλγόριθμος επιλέγει τις θέσεις των τυχαίων σπιν.



Εικόνα 2.1 [8]

## 2.2 Εφαρμογή του αλγόριθμου στις απαιτήσεις των προσομοιώσεων

### 2.2.1 Οι σταθερές των προσομοιώσεων

Αρχικά, για την εκκίνηση του προγράμματος είναι αναγκαίο να ορίσουμε το μέγεθος του πλέγματος  $fcc$ . Επιπλέον, εφόσον μελετάμε πυκνό πλέγμα  $fcc$ , δηλαδή κάθε σημείο του πλέγματος είναι κατειλημμένο, μπορούμε εύκολα να υπολογίσουμε τον αριθμό των σπιν. Το πρόβλημα που μελετάμε αφορά την αλληλεπίδραση μεταξύ των σπιν, αλλά λαμβάνουμε υπ όψιν τις αλληλεπιδράσεις των πρώτων μόνο γειτόνων, όπως φαίνεται παρακάτω στην Εικόνα 2.2. Είναι σημαντικό να αναφέρουμε πως για την ταχύτερη λήψη αποτελεσμάτων από το πρόγραμμα, όλες οι φυσικές σταθερές έχουν θεωρηθεί αδιάστατες, δηλαδή  $k_B = 1$ .

```

program fccUL
implicit none

! Declarations...
! Parameters...
integer, parameter :: nT=30          ! the number of Temperature points
integer, parameter :: dopants=108000 ! the number of dopants
integer, parameter :: nms=dopants*1 ! WHAT IS THIS
integer, parameter :: upto=1         ! up to which order nearest neighbors
integer, parameter :: dimk=55        ! 2*dimk+1 = number of points in each
direction
double precision, parameter :: pi = 4.0d0*datan(1.0d0)
double precision, parameter :: S = 1.0d0 ! norm of each spin
double precision, parameter :: HEx = 15.0d0 ! Half Edge of the periodicity
box along x
double precision, parameter :: HEy = 15.0d0 ! Half Edge of the periodicity
box along y
double precision, parameter :: HEz = 15.0d0 ! Half Edge of the periodicity
box along z

```

**Εικόνα 2.2** Φαίνεται η αρχή του προγράμματος, όπου ορίζουμε τον αριθμό των θερμοκρασιακών σημείων ( $nT$ ) στα οποία θα γίνουν προσομοιώσεις, τις διαστάσεις του συστήματος (*half edge*) και τον αριθμό των προσμίξεων (*dopants*) με μαγνητική ροπή, αριθμός που στην παρούσα εργασία είναι όλα τα σημεία του πλέγματος (100%), καθώς και μέχρι ποιους γείτονες (*upto*) λαμβάνονται υπ' όψιν οι αλληλεπιδράσεις Heisenberg (στην παρούσα εργασία μόνο μέχρι πρώτους γείτονες).

### 2.2.2 Βήματα Monte Carlo

Το πρόγραμμα, λοιπόν, όπως το ορίσαμε, περιλαμβάνει μία συνάρτηση Monte Carlo η οποία στρέφει τα σπιν σε τυχαίες θέσεις, στη συνέχεια λαμβάνονται μετρήσεις για διάφορα



θερμοδυναμικά μεγέθη και στη συνέχεια η διαδικασία επαναλαμβάνεται. Ο αριθμός των βημάτων Monte Carlo που αφήνουμε να περάσουν ώστε το σύστημα να φτάσει σε θερμοδυναμική ισορροπία ορίζεται από την ποσότητα  $neq$ . Ο αριθμός των βημάτων Monte Carlo, τα οποία χρησιμοποιούνται ώστε να ληφθούν αποτελέσματα ώστε να εξαχθούν μέσες τιμές, καθορίζεται από το μέγεθος  $nT$  (Εικόνα 2.3). Είναι προφανές ότι όσο μεγαλύτερα είναι αυτά τα μεγέθη, τόσο μεγαλύτερη ακρίβεια θα έχουμε στα αποτελέσματα. Ωστόσο οφείλουμε να επιλέγουμε νούμερα που δεν θα καταστήσουν το πρόγραμμα περισσότερο χρονοβόρο χωρίς να μας προσφέρει ιδιαίτερες βελτιώσεις.

### 2.2.3 Ορισμός εύρους θερμοκρασιών

Για να μελετήσουμε τη συμπεριφορά του συστήματος, είναι προφανές, ότι θα πρέπει να ορίσουμε το εύρος θερμοκρασιών, στο οποίο πραγματοποιούνται οι προσομοιώσεις, γύρω από το κρίσιμο σημείο. Για το σκοπό αυτό, πραγματοποιήσαμε κάποιες προσομοιώσεις αναγνώρισης σε μεγάλο εύρος θερμοκρασιών και με βάση τα αποτελέσματα αυτά επιλέξαμε  $T_{min} = 0K, T_{max} = 10K$ . Ταυτόχρονα, οφείλουμε να ορίσουμε και το πλήθος βημάτων  $nT$  για τα οποία θα κάνουμε υπολογισμούς στο διάστημα θερμοκρασιών  $[0,10]$ . Ικανοποιητικό βήμα είναι το  $\delta T = 0.1K$ , επομένως ορίσαμε  $nT = 100$ . Ωστόσο, στις προσομοιώσεις με  $HE > 11$  πλεγματικά σημεία, για να λάβουμε αποτελέσματα ταχύτερα, χωρίσαμε το εύρος θερμοκρασιών σε μέρη, ανάλογα με τις εκάστοτε ανάγκες, όπως φαίνεται στην Εικόνα 2.2 και 2.3.

```
call random_seed()
-----
neq=2000    ! 200
nav=200000 ! 20000
Tmin=4.1d0;Tmax=7.0d0
dT=(Tmax-Tmin)/dble(nT-1)
```

*Εικόνα 2.3* Φαίνεται η συνέχεια του προγράμματος της Εικόνας 2.2. Πραγματοποιείται προσομοίωση για  $HE = 15$  πλεγματικά σημεία επομένως χωρίζουμε  $[0,10]$  σε επιμέρους κομμάτια. Το  $nT$  ορίστηκε 30 διότι μελετάται εύρος θερμοκρασιών  $T_{min} = 4.1K, T_{max} = 7.0K$  και θέλουμε το βήμα  $\delta T = 0.1K$  να παραμείνει σταθερό.

### 2.2.4 Αλληλεπιδράσεις Heisenberg – Dirac

Αφού αναλύθηκε η αλληλεπίδραση Heisenberg – Dirac,  $\hat{H} = -J \sum_{i,j} s_i s_j - B \sum_i s_i$ , καθώς και το γεγονός ότι θα λάβουμε αλληλεπιδράσεις μόνο μεταξύ πρώτων γειτόνων, ήταν απαραίτητο να ορίσουμε κατάλληλα το ολοκλήρωμα ανταλλαγής  $J$ . Λήφθηκε υπ' όψιν μόνο η αλληλεπίδραση  $1^{ov}$  γειτόνων με  $J = 1$ .

```

!**** Monte carlo simulations *****
!**** Exchange integrals *****
!      JN(1)= 27.3684d0 !K ~      meV ! 12 1st neighbors in fcc
!      JN(2)=  1.8190d0 !K ~      meV !  6 2nd neighbors in fcc
!      JN(3)=  2.9216d0 !K ~      meV ! 24 3rd neighbors in fcc
!      JN(4)=  2.6552d0 !K ~      meV ! 12 4th neighbors in fcc
!      JN(5)=  0.1258d0 !K ~      meV ! 24 5th neighbors in fcc
!      JN(6)=  0.3661d0 !K ~      meV !  8 6th neighbors in fcc
!      JN(7)=  0.2544d0 !K ~      meV ! 48 7th neighbors in fcc
!      JN(8)=  0.0046d0 !K ~      meV !  6 8th neighbors in fcc
!      JN(9)=  0.0772d0 !K ~      meV ! 36 9th neighbors in fcc
!      JN(10)= 0.0219d0 !K ~      meV ! 24 10th neighbors in fcc
!      JN(11)= 0.0514d0 !K          ! 24 11th neighbors in fcc
!      JN(12)= 0.0300d0 !K          ! 24 12th neighbors in fcc
!      JN(13)= 0.0198d0 !K          ! 72 13th neighbors in fcc
!      JN(14)= 0.0029d0 !K          ! 48 14th neighbors in fcc
!      JN(15)= 0.0197d0 !K          ! 12 15th neighbors in fcc
!      JN(16)= 0.0063d0 !K          ! 48 16th neighbors in fcc
!      do el=1,uptonn
!      write(*,7777) el,JN(el)
!7777  format('JN(',i2,')=',f12.8,' K')
!      enddo
!      JN(1)=1.0d0
!      do j=2,uptonn
!      JN(j)=0.0d0
!      enddo
!**** end of Exchange integrals *****

```

**Εικόνα 2.4** Έχουμε παραλείψει τους υπολογισμούς για αλληλεπιδράσεις μεταξύ πολλών γειτόνων οι οποίοι είχαν πραγματοποιηθεί για τις ανάγκες άλλης προσομοίωσης. Έχουμε θεωρήσει για τους πρώτους γείτονες  $J = 1$  και  $J = 0$  για δεύτερους γείτονες και πάνω, με σκοπό τη διευκόλυνση των πράξεων.

### 3. Αποτελέσματα Προσομοιώσεων [10]

#### 3.1 Μεγάλο πλήθος βημάτων Monte Carlo

Για ικανοποιητική ακρίβεια στις μετρήσεις, επιλέχθηκαν οι τιμές  $n_{eq} = 2000$  και  $n_{av} = 200000$ . Αυτό σημαίνει ότι ο αλγόριθμος θα πραγματοποιηθεί 200000 φορές κατά τις οποίες η κάθε μέτρηση θα γίνει 2000, φορές όταν το σύστημα βρίσκεται σε ισορροπία.

##### 3.1.1 Μέση Ενέργεια ανά σπιν

Η τιμή της ενέργειας τη ‘στιγμή’ (βήμα Monte Carlo)  $n \in [1, N]$  που το σύστημα βρίσκεται σε ισορροπία υπολογίζεται ως εξής:

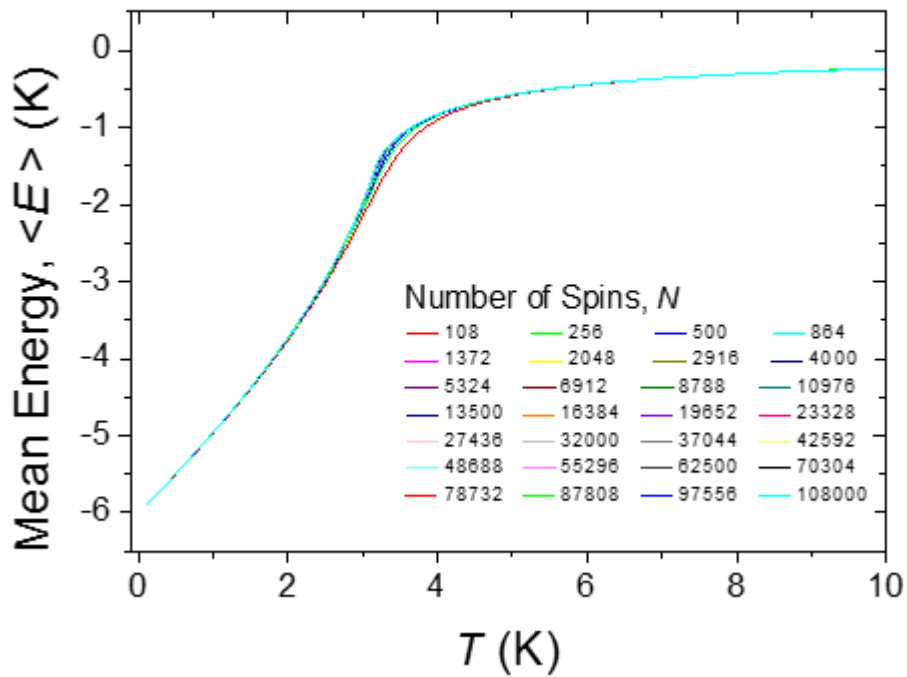
$$E_n = \frac{-J}{2} \sum_{i,j=1}^N (S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y + S_i^z S_j^z)$$

Όπου  $N$  ο συνολικός αριθμός των σπιν, δηλαδή των σημείων του πλέγματος.

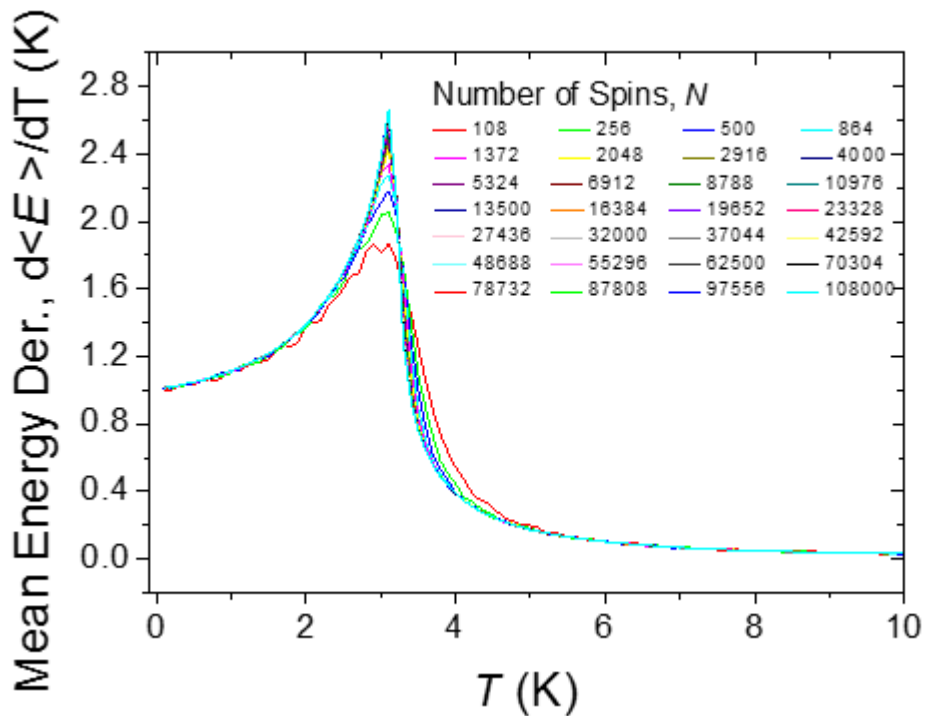
Άρα, η μέση ενέργεια ανά σπιν θα βρίσκεται από την σχέση:

$$\langle E \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{E_n}{N}$$

Όπου  $N$ , ο αριθμός των βημάτων Monte Carlo που χρησιμοποιούνται για την εξαγωγή μέσων τιμών. Το διάγραμμα, λοιπόν, της μέσης ενέργειας συναρτήσει του χρόνου παρουσιάζεται στην Εικόνα 3.1. Παρατηρούμε την μεταβολή στην κλίση της καμπύλης κατά το κρίσιμο σημείο, κάτι που φαίνεται πιο καθαρά στην παράγωγο της μέσης ενέργειας ανά σπιν, ως προς το χρόνο στην Εικόνα 3.2.



**Εικόνα 3.1** Μέση ενέργεια συναρτήσει της θερμοκρασίας για διαφορετικό αριθμό σπιν δηλαδή για διαφορετικό μέγεθος της προσομοιώσεως ( $n_{eq}=2000$  και  $n_{av}=200000$ ).



**Εικόνα 3.2** Η παράγωγος της μέσης ενέργειας ως προς τη θερμοκρασία συναρτήσει της θερμοκρασίας για διαφορετικό αριθμό σπιν δηλαδή για διαφορετικό μέγεθος της προσομοιώσεως ( $n_{eq}=2000$  και  $n_{av}=200000$ ).

### 3.1.2 Μαγνήτιση ανά σπιν

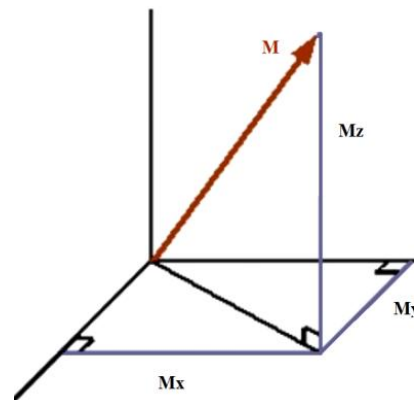
Η μαγνήτιση υπολογίζεται γενικά από τη σχέση  $M = \sum \vec{S}$ . Για το λόγο αυτό, για κάθε βήμα Monte Carlo  $\nu$ , το πρόγραμμα θα πάρει τιμές σε ισορροπία

$$M_{x\nu} = \sum_{i=1}^N S_{x_i}, M_{y\nu} = \sum_{i=1}^N S_{y_i}, M_{z\nu} = \sum_{i=1}^N S_{z_i}$$

$$M_\nu = \sqrt{M_{x\nu}^2 + M_{y\nu}^2 + M_{z\nu}^2}$$

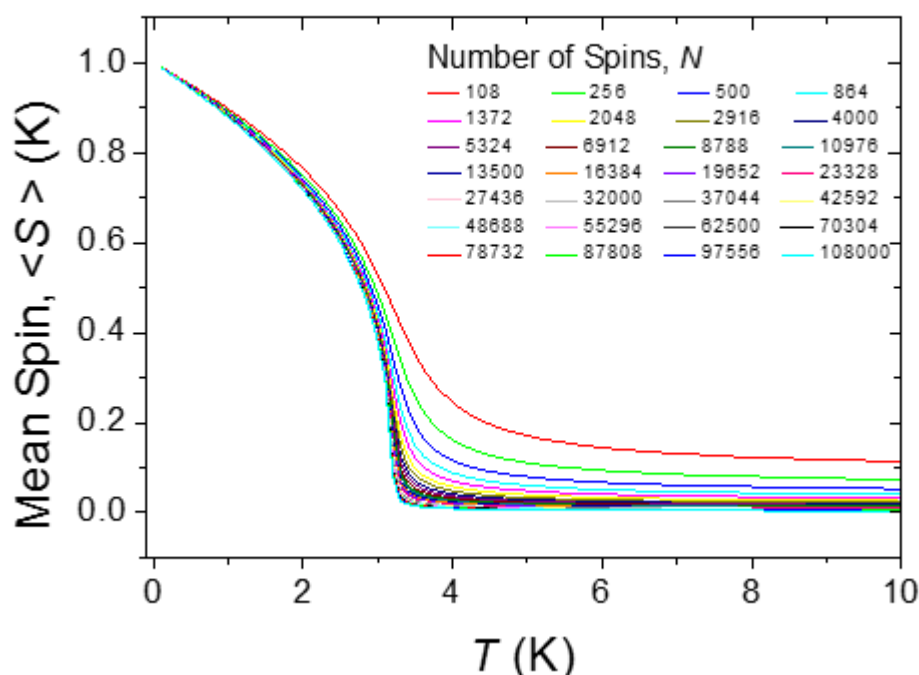
Επομένως, η μέση μαγνήτιση ανά σπιν, δηλαδή το μέσο σπιν θα υπολογίζεται:

$$\langle S \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{M_\nu}{N}$$



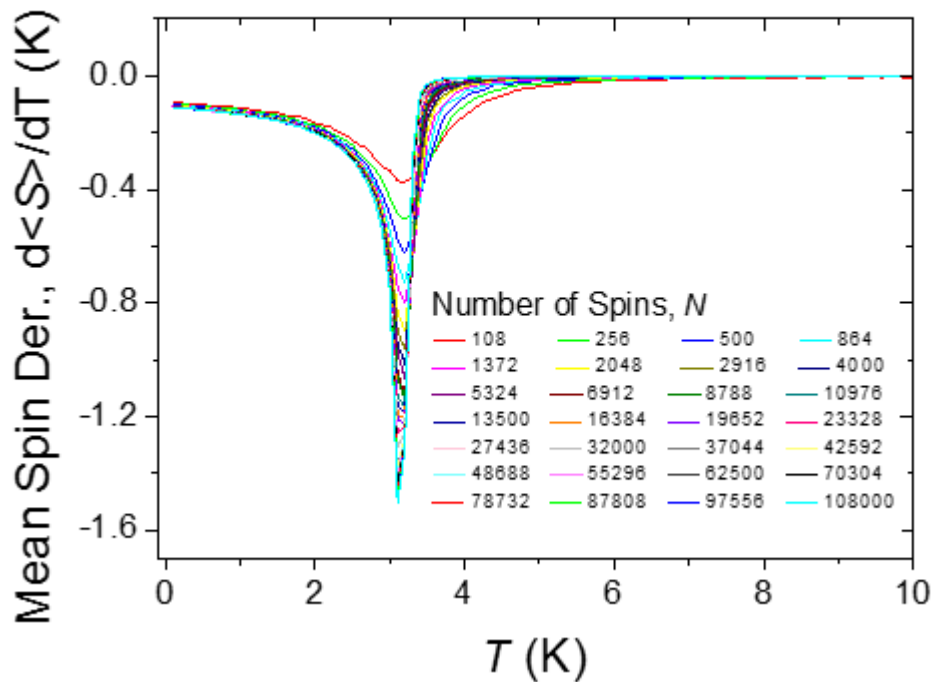
Εικόνα 3.3 Συντεταγμένες μαγνήτισης

Η μαγνήτιση ανά spin ή καλύτερα το μέσο σπιν, συναρτήσει της θερμοκρασίας, για διαφορετικό αριθμό σπιν, δηλαδή διαφορετικό μέγεθος προσομοιούμενου συστήματος, παρουσιάζεται στην Εικόνα 3.4, και η παράγωγος αυτού ως προς τη θερμοκρασία στην Εικόνα 3.5.



Εικόνα 3.4 Η μαγνήτιση ανά spin ή καλύτερα το μέσο σπιν συναρτήσει της θερμοκρασίας για

διαφορετικό αριθμό σπιν δηλαδή για διαφορετικό μέγεθος της προσομοιώσεως ( $n_{eq}=2000$  και  $n_{av}=200000$ ).



**Εικόνα 3.5** Η παράγωγος της μαγνήτισης ανά σπιν ή καλύτερα του μέσου σπιν ως προς τη θερμοκρασία συναρτήσει της θερμοκρασίας για διαφορετικό αριθμό σπιν δηλαδή για διαφορετικό μέγεθος της προσομοιώσεως ( $n_{eq}=2000$  και  $n_{av}=200000$ ).

### 3.1.3 Μαγνητική Επιδεκτικότητα ανά σπιν

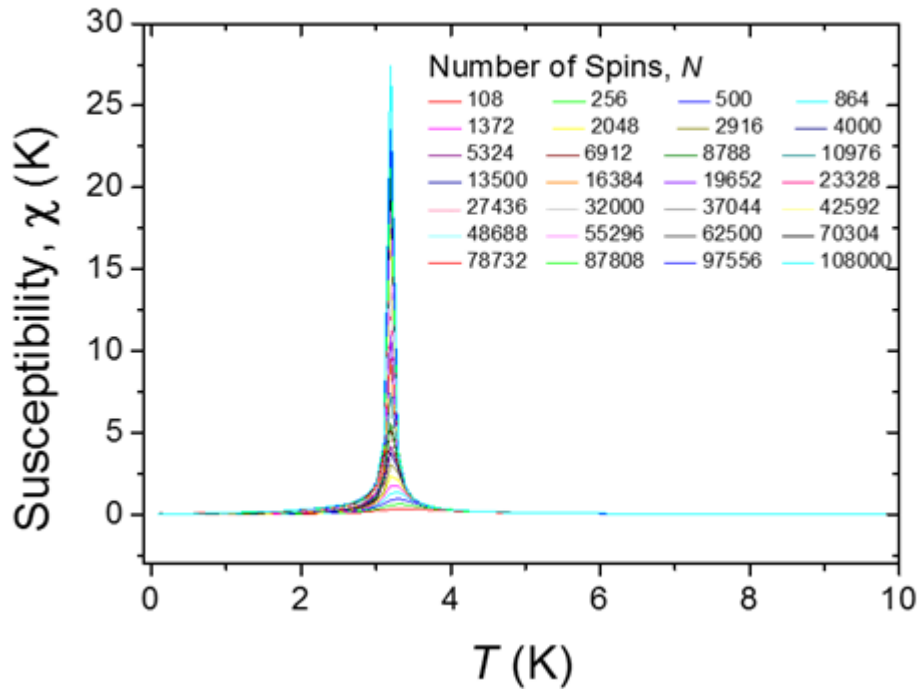
Η μαγνητική επιδεκτικότητα ανά σπιν υπολογίστηκε

$$\chi = \frac{1}{N} \beta (\langle S^2 \rangle + \langle S \rangle^2).$$

Από αυτή την καμπύλη (Εικόνα 3.6) μπορούμε να δούμε πιο καθαρά το κρίσιμο σημείο κατά το οποίο γίνεται η μετάβαση από σιδηρομαγνήτη σε παραμαγνήτη:

$$T_c = 3.20 \pm 0.05K$$

Το σφάλμα προκύπτει από το γεγονός ότι το βήμα που έχουμε θέσει στο πρόγραμμα για το χρόνο είναι 0.1K που σημαίνει πως είναι η μέγιστη διακριτική ικανότητα που έχουμε στους παραπάνω υπολογισμούς.



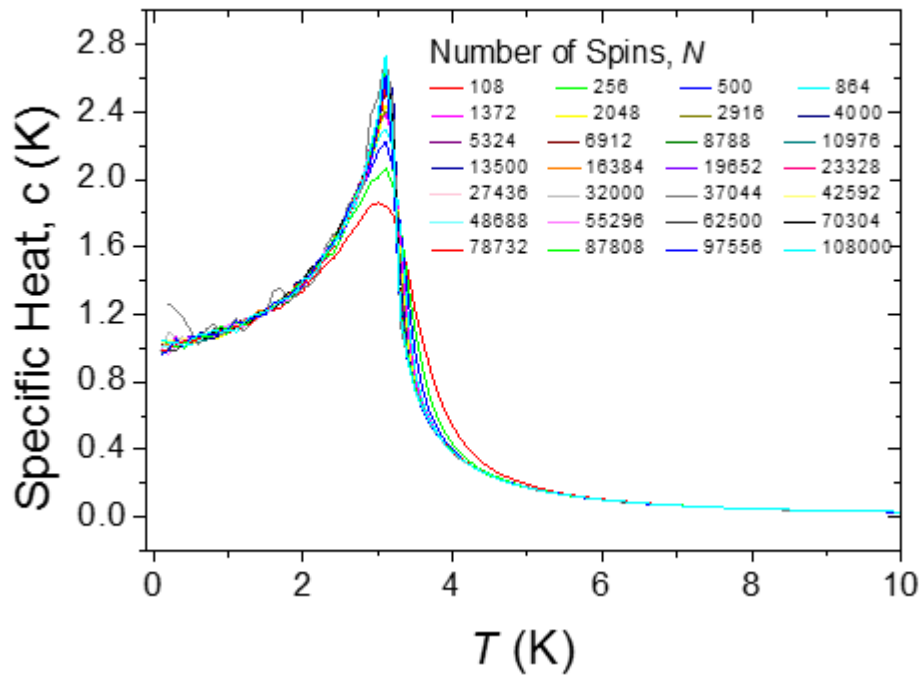
**Εικόνα 3.6** Η μαγνητική επιδεκτικότητα συναρτήσει της θερμοκρασίας για διαφορετικό αριθμό σπιν δηλαδή για διαφορετικό μέγεθος της προσομοίωσης ( $n_{eq}=2000$  και  $n_{av}=200000$ ).

### 3.1.4 Ειδική θερμότητα

Όμοια υπολογίστηκε η ειδική θερμότητα ανά σπιν

$$C = \frac{1}{N} \beta^2 (\langle E^2 \rangle + \langle E \rangle^2).$$

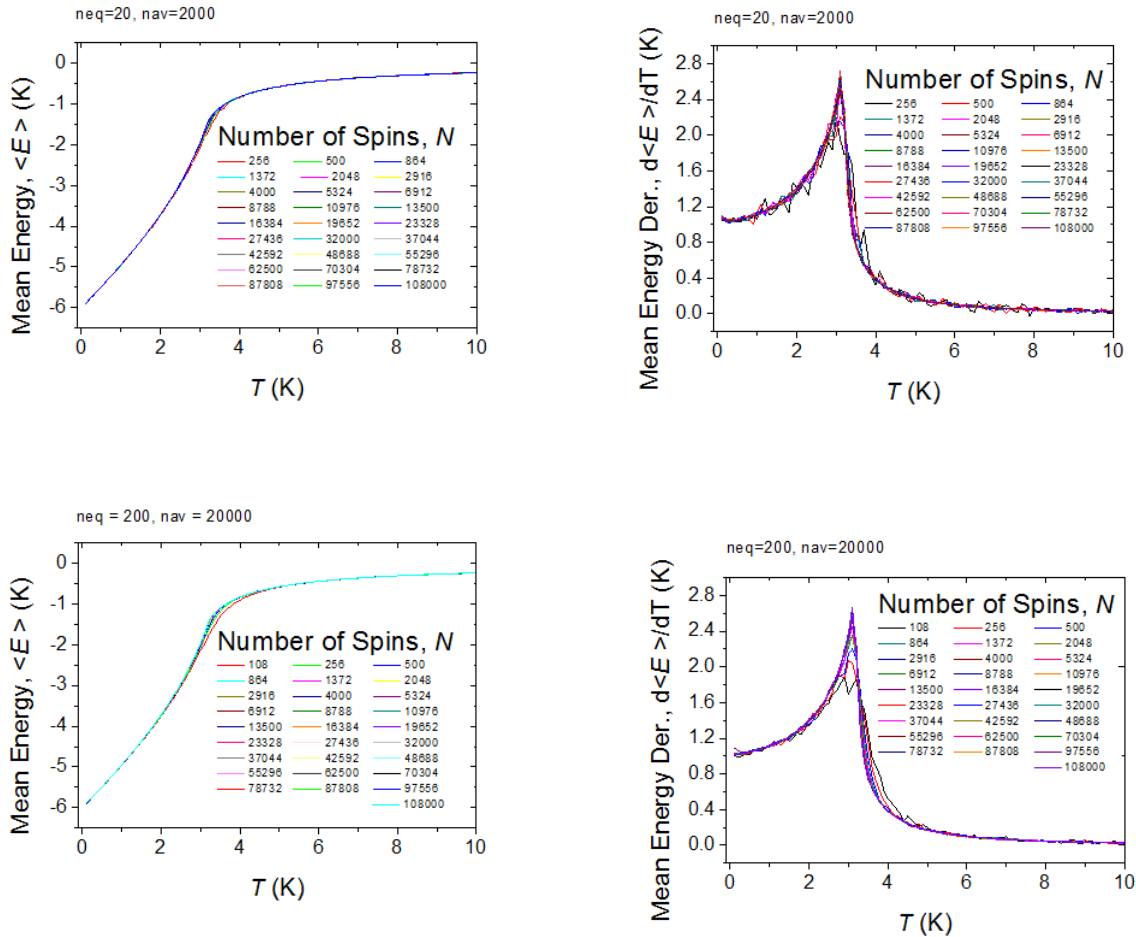
Η καμπύλη φαίνεται στην Εικόνα 3.7



**Εικόνα 3.7** Η ειδική θερμότητα συναρτήσει της θερμοκρασίας για διαφορετικό αριθμό σπιν δηλαδή για διαφορετικό μέγεθος της προσομοιώσεως ( $n_{eq}=2000$  και  $n_{av}=200000$ ).

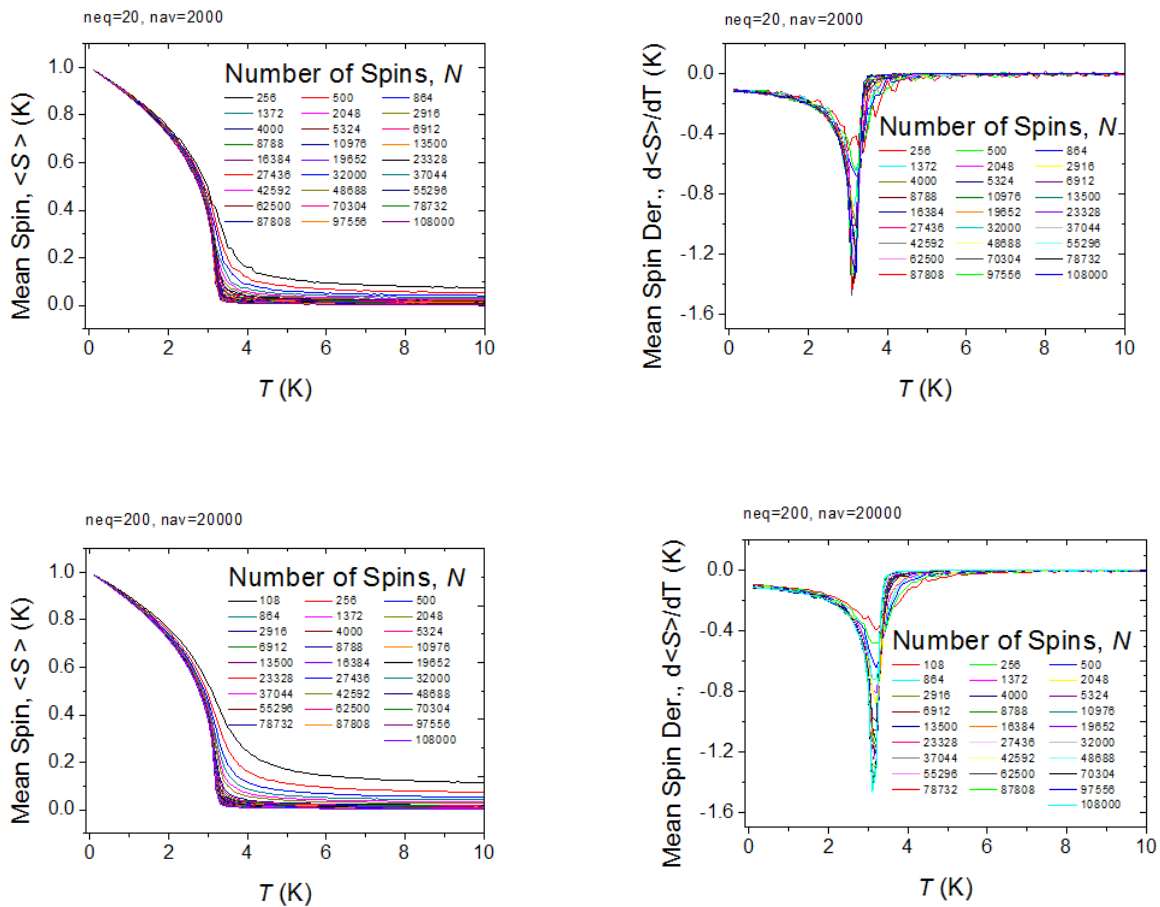
### 3.2 Μικρότερο πλήθος βημάτων Monte Carlo

Οι ίδιες μετρήσεις λήφθηκαν και για μικρότερο αριθμό βημάτων Monte Carlo. Παρακάτω παρουσιάζονται οι ίδιες γραφικές παραστάσεις, με ίδια κλίμακα, για  $n_{eq} = 20$  και  $n_{av} = 2000$  καθώς και για  $n_{eq} = 200$  και  $n_{av} = 20000$ .

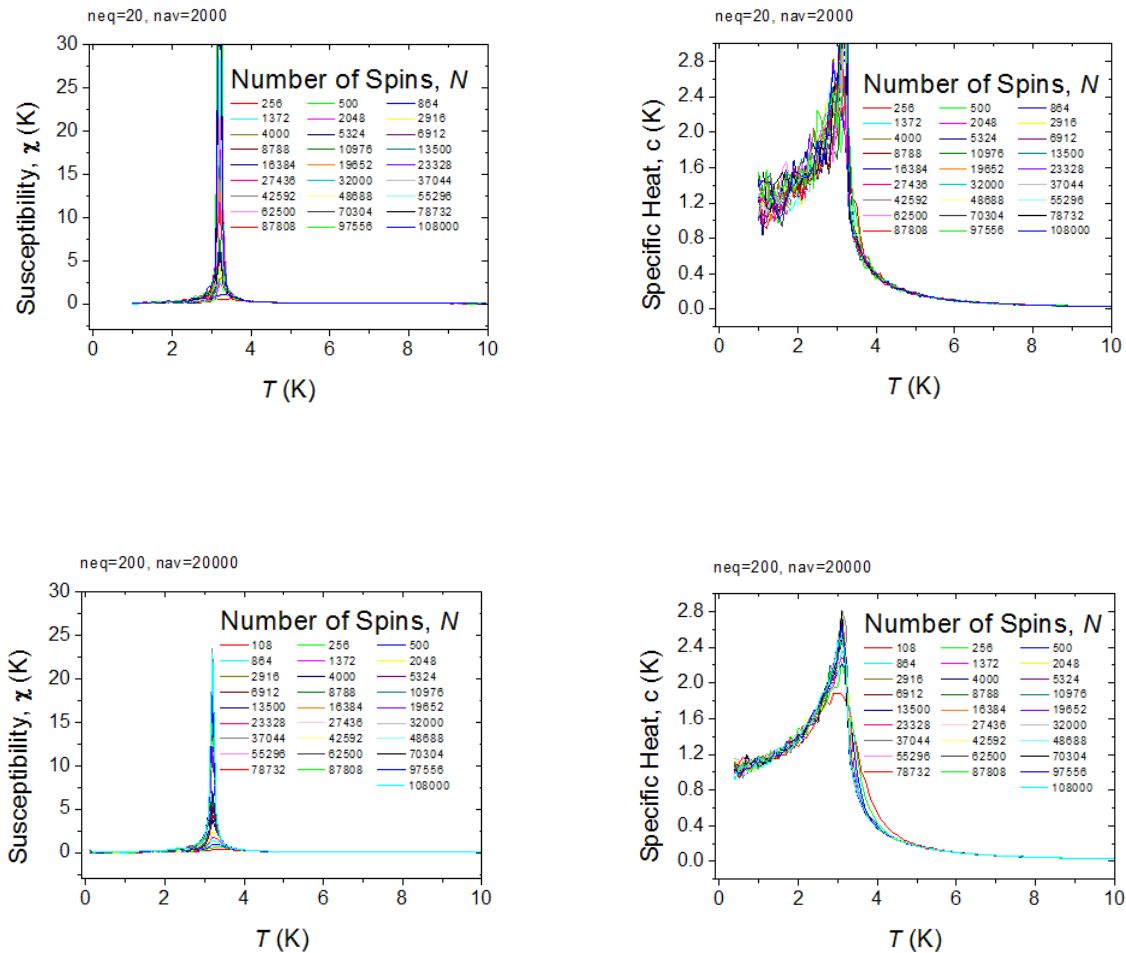


**Εικόνα 3.8** Φαίνεται η καμπύλη της μέσης ενέργειας συναρτήσει της θερμοκρασίας για  $n_{eq} = 20$  και  $n_{av} = 2000$  (πάνω αριστερά) καθώς και η παράγωγος της (πάνω δεξιά). Επίσης, οι αντίστοιχες καμπύλες για  $n_{eq} = 200$  και  $n_{av} = 20000$  (κάτω αριστερά και κάτω δεξιά).





**Εικόνα 3.9** Φαίνεται η καμπύλη, για  $neq = 20$  και  $nav = 2000$ , του μέσου spin συναρτήσει της θερμοκρασίας (πάνω αριστερά) καθώς και η παράγωγος αυτού (πάνω δεξιά). Επίσης, οι αντίστοιχες καμπύλες για  $neq = 200$  και  $nav = 20000$  (κάτω αριστερά και κάτω δεξιά).



**Εικόνα 3.10** Φαίνεται η καμπύλη της μαγνητικής επιδεκτικότητας συναρτήσει της θερμοκρασίας για  $neq = 20$  και  $nav = 2000$  (πάνω αριστερά). Έχουμε κόψει την καμπύλη για θερμοκρασίες κάτω από 1 K διότι υπήρχαν αριθμητικά προβλήματα. Όμοια έχουμε πράξει για την καμπύλη της ειδικής θερμότητας συναρτήσει της θερμοκρασίας για  $neq = 20$  και  $nav = 2000$  (πάνω δεξιά). Βλέπουμε ακόμη τις αντίστοιχες καμπύλες για  $neq = 200$  και  $nav = 20000$  (κάτω αριστερά και κάτω δεξιά). Στις δεύτερες, δεν χρειαζόταν η ίδια διόρθωση, παρά μόνο στην ειδική θερμότητα, για θερμοκρασίες κάτω από 0.4 K.

## 4. Συμπεράσματα

Στην παρούσα διπλωματική εργασία, μελετήθηκαν οι συμπεριφορές βασικών θερμοδυναμικών μεγεθών στην περιοχή γύρω από την αλλαγή φάσης ενός τριδιάστατου προτύπου, του κλασικού σιδηρομαγνήτη Heisenberg.

Αρχικά, πραγματοποιήθηκε θεωρητική μελέτη του συστήματος στα πλαίσια της προσέγγισης μέσου πεδίου. Με τον τρόπο αυτό η κρίσιμη θερμοκρασία μετάβασης υπολογίστηκε

$$T_c = 4K$$

Στη συνέχεια το μοντέλο εξετάστηκε υπολογιστικά με τη μέθοδο Monte Carlo. Πιο συγκεκριμένα, εξετάστηκαν, συναρτήσει της θερμοκρασίας, η μέση ενέργεια και η μαγνήτιση και οι παράγωγοι αυτών, καθώς και η μαγνητική επιδεκτικότητα και η ειδική θερμότητα. Παρατηρούμε ότι τα αποτελέσματα των προσομοιώσεων είναι κατά βάση σύμφωνα με τις θεωρητικές προβλέψεις. Από τις καμπύλες που προέκυψαν η κρίσιμη θερμοκρασία κατά την οποία το σύστημα αλλάζει φάση, βρέθηκε

$$T_c = 3.20 \pm 0.05K$$

Η διαφορά αυτή οφείλεται στις προσεγγίσεις που χρησιμοποιήθηκαν κατά τον υπολογισμό.

Τέλος, πραγματοποιώντας προσομοιώσεις για διαφορετικό αριθμό βημάτων Monte Carlo παρατηρήσαμε ότι για βήματα  $n_{eq} = 20$ ,  $n_{av} = 2000$  τα αποτελέσματα δεν μας έδιναν ξεκάθαρες τιμές και υπήρχαν αριθμητικά προβλήματα. Αυτό συμβαίνει γιατί το σύστημα δεν έχει προλάβει να ισορροπήσει πριν υποστεί περαιτέρω μεταβολή. Αντίθετα, για  $n_{eq} = 2000$ ,  $n_{av} = 200000$  είχαμε τη μεγαλύτερη δυνατή ακρίβεια στα πλαίσια της διπλωματικής αυτής εργασίας.

## 5. Βιβλιογραφία

- [1] Καταστάσεις της Ύλης, Κωνσταντίνος Σιμσερίδης, ISBN 978-960-603-289-9, Αθήνα 2015, 271 σελίδες, Σύνδεσμος Ελληνικών Ακαδημαϊκών Βιβλιοθηκών, Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο, Ηρώων Πολυτεχνείου 9, 15780 Ζωγράφου [www.kallipos.gr](http://www.kallipos.gr) Creative Commons Αναφορά δημιουργού - Μη εμπορική χρήση - Όχι παράγωγα έργα (CC BY-NC-ND) 3.0. <http://repository.kallipos.gr/handle/11419/2117> Eudoxus ID: 320167
- [2] Solid State Physics, N. W. Ashcroft & N. D. Mermin, ISBN-13 978-0030839931, ISBN-10 0030839939, Cengage Learning, January 2, 1976
- [3] ] Heisenberg and Ferromagnetism, article, S. Chatterjee, Indian Academy of Sciences, Resonance August 2004
- [4] Σημειώσεις μαθήματος: Φυσική Στερεάς Κατάστασης II, ΕΚΠΑ, τμήμα Φυσικής, Σπυρίδων Γλένης
- [5] Monte Carlo Methods in Statistical Physics, M. E. J. Newman & G. T. Barkema, ISBN-13 978-0198517979, ISBN-10 0198517871, Clarendon Press, April 15, 1999
- [6] Monte Carlo Simulation in Statistical Physics, An Introduction, K. Binder & D. W. Heermann, ISBN-13 978-3540432210, ISBN-10 3540432213, Springer, August 26, 2002
- [7] Statistical Physics of Particles, M. Kardar, ISBN-13 978-0521873420, ISBN-10 9780521873420, Cambridge University Press, June 25, 2007
- [8] <http://mathworld.wolfram.com/SpherePointPicking.html>
- [9] An introduction to Probability theory and its Applications, vol 2, 3<sup>rd</sup> edition, W. Feller, ISBN-13 978-0471257097, ISBN-10 9780471257097, John Wiley & Sons, Inc., January 1, 1971
- [10] «Magnetic Simulations», C. Simserides, National and Kapodistrian University of Athens, Department of Physics, Panepistimiopolis, 15784 Zografos, Athens, Greece, July 12, 2017