


# Περιεχόμενα

---

<b>Περίληψη</b>	<b>v</b>
<b>Abstract</b>	<b>vii</b>
<b>1 Στοιχεία Θεωρίας Κρίσιμων Φαινομένων</b>	<b>1</b>
1.1 Αλλαγές Φάσης . . . . .	1
1.2 Βασικές Σχέσεις από τη Στατιστική Μηχανική . . . . .	2
1.3 Συνεχείς Αλλαγές Φάσης . . . . .	5
1.3.1 Η Παράμετρος Τάξης . . . . .	5
1.3.2 Κρίσιμοι Εκθέτες . . . . .	6
1.3.3 Οικουμενικότητα . . . . .	10
1.4 Θεωρίες Κλιμάκωσης . . . . .	10
1.4.1 Η Υπόθεση Κλιμάκωσης . . . . .	10
1.4.2 Διαστατική Ανάλυση . . . . .	13
1.4.3 Κλιμάκωση Πεπερασμένου Μεγέθους . . . . .	15
<b>2 Μελέτη του Σιδηρομαγνήτη Heisenberg στη Θεωρία Μέσου Πεδίου</b>	<b>21</b>
2.1 Η Αλληλεπίδραση Ανταλλαγής και η Χαμιλτονιανή Heisenberg-Dirac . . . . .	21
2.1.1 Ορισμός του Κλασσικού Σιδηρομαγνήτη Heisenberg . . . . .	22
2.2 Προσέγγιση Μέσου Πεδίου . . . . .	23
2.3 Υπολογισμός της Συνάρτησης Επιμερισμού . . . . .	26
2.4 Αυτοσυνεπής Εξίσωση για τη Μαγνήτιση . . . . .	27
2.5 Κρίσιμη Συμπεριφορά στην Προσέγγιση Μέσου Πεδίου . . . . .	28
2.5.1 Κρίσιμη Θερμοκρασία Μετάβασης . . . . .	28
2.5.2 Θερμοδυναμικά Μεγέθη και Κρίσιμοι Εκθέτες . . . . .	30
2.6 Σύνοψη της Κρίσιμης Συμπεριφοράς . . . . .	36
2.6.1 Εγκυρότητα της Προσέγγισης Μέσου Πεδίου . . . . .	36

<b>3</b>	<b>Στοιχεία Θεωρίας Προσομοιώσεων και Αριθμητικών Τεχνικών</b>	<b>39</b>
3.1	Η Προσομοίωση Monte Carlo . . . . .	39
3.2	Βασικές Αρχές της Προσομοίωσης Monte Carlo . . . . .	40
3.2.1	Εκτιμητής . . . . .	40
3.2.2	Δειγματοληψία Σημαντικότητας . . . . .	41
3.2.3	Διαδικασίες Markov . . . . .	41
3.2.4	Εργοδικότητα . . . . .	42
3.2.5	Λεπτομερές Ισοζύγιο . . . . .	43
3.2.6	Λόγος Αποδοχής . . . . .	43
3.3	Ο Αλγόριθμος Metropolis . . . . .	45
3.4	Υλοποίηση του Αλγόριθμου Metropolis στο $O(3)$ Πρότυπο Heisenberg . . . . .	46
3.5	Χρόνος Εξισορρόπησης . . . . .	49
3.6	Υπολογισμός Θερμοδυναμικών Μεγεθών . . . . .	50
3.7	Αυτοσυσχετίσεις . . . . .	52
3.8	Εκτίμηση των Σφαλμάτων με τη Μέθοδο Jackknife . . . . .	55
3.9	Προσομοιώσεις στην Κρίσιμη Περιοχή . . . . .	57
3.10	Η Μέθοδος του Ενός Ιστογράμματος . . . . .	59
3.10.1	Εφαρμογή της Μεθόδου στην Κρίσιμη Περιοχή . . . . .	64
<b>4</b>	<b>Αποτελέσματα Προσομοιώσεων</b>	<b>67</b>
4.1	Εκτίμηση του Χρόνου Εξισορρόπησης . . . . .	67
4.2	Θερμοδυναμικά Μεγέθη . . . . .	69
4.2.1	Μαγνήτιση ανά spin . . . . .	70
4.2.2	Μέση Ενέργεια ανά spin . . . . .	71
4.2.3	Μαγνητική Επιδεκτικότητα ανά spin . . . . .	72
4.2.4	Ειδική Θερμότητα ανά spin . . . . .	73
4.2.5	4 <sup>ης</sup> Τάξης Συσσωρευτής για τη Μαγνήτιση ανά spin . . . . .	75
4.3	Προσδιορισμός της Κρίσιμης Συμπεριφοράς . . . . .	76
4.3.1	Εκθέτης $\nu$ . . . . .	76
4.3.2	Εκθέτης $\gamma$ . . . . .	80
4.3.3	Κρίσιμη Θερμοκρασία Μετάβασης . . . . .	81
4.3.4	Κλιμάκωση Πεπερασμένου Μεγέθους στο Κρίσιμο Σημείο . . . . .	85
4.3.5	Εκτίμηση των εκθετών $\alpha$ , $\beta$ , $\delta$ και $\eta$ από τους Νόμους Κλιμάκωσης . . . . .	87
4.4	Κρίσιμη Συμπεριφορά του Κλασικού Σιδηρομαγνήτη Heisenberg . . . . .	87
<b>5</b>	<b>Σύνοψη-Συμπεράσματα</b>	<b>91</b>
	<b>A' Διαγράμματα Εκτίμησης του Χρόνου Εξισορρόπησης για hcc και fcc Πλέγματα</b>	<b>95</b>





## Περίληψη

---

Στην εργασία αυτή μελετήθηκε η συνεχής αλλαγή φάσης για τον κλασικό  $O(3)$  σιδηρομαγνήτη Heisenberg σε sc, bcc και fcc πλέγματα. Εφόσον για το συγκεκριμένο πρότυπο δεν υπάρχει διαθέσιμη αναλυτική λύση στις τρεις διαστάσεις, τα χαρακτηριστικά της κρίσιμης συμπεριφοράς μελετήθηκαν:

- (i) *Ποιοτικά*, στα πλαίσια της προσέγγισης μέσου πεδίου (mean field approximation), με αριθμητικό προσδιορισμό των σημαντικότερων θερμοδυναμικών μεγεθών, μέσω επίλυσης της αυτοσυνεπούς εξίσωσης για τη μαγνήτιση του συστήματος.
- (ii) *Ποσοτικά*, αξιοποιώντας τη μέθοδο προσομοίωσης Monte Carlo, σε συνδυασμό με τη θεωρία κλιμάκωσης πεπερασμένου μεγέθους (finite size scaling) και την υπολογιστική μέθοδο επαναπροσδιορισμού του ενός ιστογράμματος (single histogram reweighting method).

Οι κρίσιμοι εκθέτες  $\nu$  και  $\gamma$  υπολογίστηκαν μελετώντας την κλιμάκωση θερμοδυναμικών μεγεθών από προσομοιώσεις στην κρίσιμη περιοχή κάθε διαφορετικού τύπου πλέγματος. Η κρίσιμη θερμοκρασία μετάβασης εκτιμήθηκε με τη μέθοδο τομής των συσσωρευτών και τη μελέτη της κλιμάκωσης των ψευδοκρίσιμων θερμοκρασιών διαφορετικών θερμοδυναμικών ποσοτήτων. Ειδικά στην περίπτωση του sc, προσδιορίστηκε επιπρόσθετα και ο κρίσιμος εκθέτης  $\beta$ , μελετώντας την κλιμάκωση της μαγνήτισης ανά spin στο εκτιμώμενο κρίσιμο σημείο. Οι υπόλοιποι εκθέτες προσδιορίστηκαν έμμεσα, μέσω των νόμων κλιμάκωσης για κάθε τύπο πλέγματος. Τα αποτελέσματα τόσο των κρίσιμων σημείων, όσο και των κρίσιμων εκθετών, βρίσκονται σε συμφωνία με αντίστοιχες μελέτες προσομοιώσεων Monte Carlo και μεθόδων ανάπτυξης σε σειρές, στα πλαίσια των υπολογιζόμενων σφαλμάτων. Επιπλέον, τα αριθμητικά αποτελέσματα που αφορούν τους κρίσιμους εκθέτες στα sc, bcc και fcc πλέγματα, συμφωνούν μεταξύ τους, γεγονός που επιβεβαιώνει τα οικουμενικά χαρακτηριστικά της κρίσιμης συμπεριφοράς.



# Abstract

---

In this thesis the continuous phase transition of classical  $O(3)$  Heisenberg ferromagnet was studied in sc, bcc and fcc lattices. Since no analytical solution is available in three dimensions for this model, the critical behavior was studied:

- (i) *Qualitatively*, via numerical calculations of the self consistent equation for the magnetization and other important thermodynamic quantities, in the context of mean field approximation.
- (ii) *Quantitatively*, by making use of Monte Carlo simulations, finite size scaling theory and the single histogram reweighting method.

The critical exponents  $\nu$  and  $\gamma$  were calculated by studying the scaling properties of various thermodynamic quantities from simulations covering the critical region of each lattice type. The critical temperature was estimated via the cumulant crossing method and the scaling properties of pseudocritical transition points of various thermodynamic quantities. Moreover, in the case of sc lattice, the critical exponent  $\beta$  was determined from the scaling behavior of magnetization per spin in the estimated critical point. The other critical exponents were extracted indirectly, by means of scaling laws for each lattice type. Both the results for the estimated transition points and the critical exponents, are in good agreement with other Monte Carlo studies and series expansion methods with respect to the calculated errors. Furthermore, the values of critical exponents for sc, bcc and fcc lattices agree with each other, which verifies the universal aspects of critical behavior.





# Κεφάλαιο 1

## Στοιχεία Θεωρίας Κρίσιμων Φαινομένων

---

### 1.1 Αλλαγές Φάσης

Τα περισσότερα φυσικά συστήματα μπορούν να υπάρξουν σε διαφορετικές φάσεις, ανάλογα με τους δυνατούς τύπους τάξης των δομικών λίθων τους. Στην περίπτωση για παράδειγμα του νερού, η αέρια φάση δεν παρουσιάζει τάξη, η υγρή παρουσιάζει τάξη σε επίπεδο συμπλεγμάτων μικρής εμβέλειας (cluster ordering), ενώ η στερεή εκδηλώνει τάξη μακράς εμβέλειας με τη δημιουργία πλέγματος (lattice ordering) [1]. Ένα απλό παράδειγμα στο οποίο η αλλαγή φάσης χαρακτηρίζεται από τάξη προσανατολισμού, είναι ο σιδηρομαγνητισμός στα μαγνητικά υλικά, όπου οι μαγνητικές ροπές των δομικών λίθων ευθυγραμμίζονται. Φυσικά, πέρα από τα απλά μαγνητικά συστήματα όπου εκδηλώνεται μόνο η σιδηρομαγνητική τάξη, υπάρχουν και άλλα περισσότερο περίπλοκα, όπως τα σιδηρομαγνητικά, τα οποία μπορεί να εμφανίζουν πληθώρα μαγνητικών φάσεων. Χαρακτηριστικό παράδειγμα αποτελεί το αντιμονιούχο δημήτριο (CeSb) για το οποίο έχουν αναγνωριστεί 14 διαφορετικές φάσεις, μέσω πειραμάτων σκέδασης νετρονίων (Fisher et al. 1978) και ανάλυσης ειδικής θερμότητας (Rossat-Mignod et al. 1980). Η εμφάνιση διαφορετικών φάσεων, ως αποτέλεσμα διαφορετικών τύπων τάξης, συναντάται και στους υγρούς κρυστάλλους με την εκδήλωση της νηματικής, σημηκτικής και κιονοειδούς φάσης.

Μια αλλαγή φάσης σηματοδοτείται όταν σε ένα φυσικό σύστημα, υπό ορισμένες συνθήκες, μία τουλάχιστον από τις παραγώγους ενός θερμοδυναμικού δυναμικού παρουσιάζει ιδιόμορφα σημεία (singular points). Μικροσκοπικά, οι αλλαγές φάσης συνδέονται με τη συλλογική αλλαγή της συμπεριφοράς των δομικών λίθων του φυσικού συστήματος, γι' αυτό και συχνά χαρακτηρίζονται ως φαινόμενα συνεργασίας. Αυτό το γεγονός γίνεται φανερό μακροσκοπικά από απότομες αλλαγές στις ιδιότητες του υλικού. Οι μεταβάσεις ενός υγρού σε αέριο, ενός κοινού αγωγού σε υπεραγωγό ή ενός παραμα-

γνήτη σε σιδηρομαγνήτη, είναι κοινά παραδείγματα δραματικής αλλαγής των ιδιοτήτων των υλικών κατά την αλλαγή φάσης [2].

Συστηματικές έρευνες από τα τέλη του 19<sup>ου</sup> αιώνα έχουν δείξει ότι πληθώρα αλλαγών φάσης σε διάφορα υλικά παρουσιάζουν, τόσο ομοιότητες, όσο και διαφορές. Η πρώτη προσπάθεια για συστηματική ταξινόμηση των αλλαγών φάσης πραγματοποιήθηκε από τον Ehrenfest το 1933, με βάση την τάξη της παραγωγού του θερμοδυναμικού δυναμικού στην οποία παρουσιάζονται ασυνέχειες. Ωστόσο, είναι πλέον ευρέως γνωστό ότι πολλές αλλαγές φάσης δεν μπορούν να κατηγοριοποιηθούν με βάση αυτό το κριτήριο και για το λόγο αυτό υιοθετείται μέχρι και σήμερα η ταξινόμηση των αλλαγών φάσης όπως προτάθηκε από τον Fisher το 1967.

Σύμφωνα με τη σύγχρονη ταξινόμηση των αλλαγών φάσης, όταν η μετάβαση από μία περιοχή του φασικού διαγράμματος σε μία άλλη συνοδεύεται από ασυνέχεια στην πρώτη παράγωγο κάποιου θερμοδυναμικού δυναμικού χαρακτηρίζεται ως *αλλαγή φάσης πρώτης τάξης*. Από την άλλη πλευρά, όταν η μετάβαση από μια περιοχή του φασικού διαγράμματος σε μια άλλη γίνεται με συνεχή μεταβολή των πρώτων παραγώγων ενός θερμοδυναμικού δυναμικού, ενώ ανώτερης τάξης παράγωγοι παρουσιάζουν ασυνέχειες ή αποκλίσεις, ονομάζεται *συνεχής αλλαγή φάσης* (continuous phase transition) ή *αλλαγή φάσης ανώτερης τάξης* (higher order phase transition). Η κρυσταλλοποίηση του νερού κατά την ψύξη του, συνοδεύεται από ασυνέχεια στην πυκνότητα η οποία αποτελεί την παράμετρο τάξης και χαρακτηρίζεται ως αλλαγή φάσης πρώτης τάξης, ενώ ο σιδηρομαγνητισμός στον σίδηρο πραγματοποιείται με συνεχή μεταβολή της αντίστοιχης παραμέτρου τάξης (μαγνήτιση) και ταυτόχρονη απόκλιση της μαγνητικής επιδεκτικότητας και χαρακτηρίζεται ως συνεχής αλλαγή φάσης. Το αντικείμενο της εργασίας αυτής είναι η μελέτη μιας συνεχούς αλλαγής φάσης, οπότε η ανάλυση από το σημείο αυτό κι έπειτα θα επικεντρωθεί αποκλειστικά στις συνεχείς αλλαγές φάσης σε μαγνητικά συστήματα.

## 1.2 Βασικές Σχέσεις από τη Στατιστική Μηχανική

Στη συνέχεια, προκειμένου να μελετηθεί ποσοτικά η κρίσιμη συμπεριφορά των θερμοδυναμικών μεγεθών σε μία συνεχή αλλαγή φάσης, θα πραγματοποιηθεί μια σύντομη αναφορά στα βασικά μεγέθη της στατιστικής μηχανικής. Αρχικά, πρέπει να αναφερθεί ότι η στατιστική μηχανική μελετά φυσικά συστήματα στο θερμοδυναμικό όριο. Το τελευταίο ορίζεται για ένα σύστημα που χαρακτηρίζεται από πολύ μεγάλο αριθμό δομικών λίθων,  $N \rightarrow \infty$ , του οποίου ο όγκος λαμβάνεται  $V \rightarrow \infty$ , ούτως ώστε η πυκνότητα του συστήματος  $n = N/V$  να παραμένει σταθερή. Σημειώνεται σε αυτό το σημείο ότι η μη αναλυτικότητα των θερμοδυναμικών μεγεθών που εκδηλώνεται σε μια αλλαγή φάσης με αποκλίσεις ή ασυνέχειες, είναι χαρακτηριστικό μόνο των συστημάτων στο θερμοδυναμικό όριο. Σε πεπερασμένα συστήματα, που αποτελούν αντικείμενα μελέτης προσομοιώσεων Monte Carlo ή πειραμάτων, όλες οι θερμοδυναμικές ποσότητες είναι αναλυτικές συναρτήσεις.

Το βασικότερο μέγεθος στη στατιστική μηχανική είναι η συνάρτηση επιμερισμού (partition function)  $\mathcal{Z}$ , η οποία περιέχει όλες τις πληροφορίες για τους μικροσκοπικούς βαθμούς ελευθερίας του συστήματος σε θερμοδυναμική ισορροπία. Εν γένει, η συνάρτηση επιμερισμού είναι μια συνάρτηση της θερμοκρασίας  $T$  και άλλων παραμέτρων που χαρακτηρίζουν το σύστημα, όπως για παράδειγμα του όγκου  $V$ , για την περίπτωση ενός ρευστού ή του μαγνητικού πεδίου  $\vec{H}$ , για την περίπτωση ενός μαγνητικού συστήματος. Υπάρχουν διάφορες διατυπώσεις της συνάρτησης επιμερισμού ανάλογα με τη στατιστική συλλογή η οποία θεωρείται για την περιγραφή του συστήματος. Όλα τα θερμοδυναμικά μεγέθη μπορούν να προσδιοριστούν άμεσα εάν είναι γνωστή η μορφή της συνάρτησης επιμερισμού μέσω κατάλληλων παραγώγων της. Ωστόσο, για τα περισσότερα φυσικά συστήματα ο υπολογισμός της συνάρτησης επιμερισμού είναι αδύνατος χωρίς κατάλληλες προσεγγίσεις. Στα πλαίσια της κανονικής συλλογής, η πιθανότητα μιας συγκεκριμένης μικροκατάστασης<sup>1</sup>, δίνεται από τη σχέση

$$p_r \equiv \frac{e^{-\beta E_r}}{\mathcal{Z}}, \quad (1.1)$$

όπου ο δείκτης  $r$  αναφέρεται στις μικροκαταστάσεις του συστήματος,  $E_r$  είναι η ενέργεια της συγκεκριμένης μικροκατάστασης, ενώ με  $\beta$  ορίζεται η ποσότητα  $\beta \equiv 1/k_B T$  και  $k_B$  η σταθερά του Boltzmann. Η συνάρτηση επιμερισμού προσδιορίζεται από τη συνθήκη κανονικοποίησης των πιθανοτήτων  $p_r$ , μέσω της σχέσης

$$\sum_r p_r = 1 \Leftrightarrow \mathcal{Z} = \sum_r e^{-\beta E_r}. \quad (1.2)$$

Η αναμενόμενη τιμή μιας οποιασδήποτε θερμοδυναμικής ποσότητας μπορεί να προσδιοριστεί μέσω της κανονικής πιθανότητας σύμφωνα με τη γενική σχέση

$$\langle Q \rangle = \sum_r Q_r p_r = \frac{1}{\mathcal{Z}} \sum_r Q_r e^{-\beta E_r}. \quad (1.3)$$

Κατά συνέπεια, η εσωτερική ενέργεια  $U$  του συστήματος προσδιορίζεται ως ακολούθως

$$U \equiv \langle E \rangle = \sum_r E_r p_r = -\frac{\partial \ln(\mathcal{Z})}{\partial \beta}. \quad (1.4)$$

Ο 1<sup>ος</sup> θερμοδυναμικός νόμος για ένα μαγνητικό σύστημα<sup>2</sup> γράφεται

$$dU = TdS - MdH \quad (1.5)$$

<sup>1</sup>Για ένα μαγνητικό σύστημα, μικροκατάσταση θεωρείται μια συγκεκριμένη διαμόρφωση (configuration) των μαγνητικών ροπών που συνιστούν το πλέγμα.

<sup>2</sup>Έχει γίνει η υπόθεση ότι ο όγκος  $V$  του συστήματος παραμένει σταθερός, ώστε να παραλείπεται ο συνήθως εμφανιζόμενος όρος  $-PdV$  στον 1<sup>ο</sup> θερμοδυναμικό νόμο.

Θεωρώντας κατάλληλο μετασχηματισμό Legendre

$$\begin{aligned} dU = TdS - MdH &\Leftrightarrow d(U - TS) = -SdT - MdH \Leftrightarrow \\ dF = -SdT - MdH, \end{aligned} \quad (1.6)$$

προκύπτει το διαφορικό της ελεύθερης ενέργειας Helmholtz, η οποία αποτελεί το θερμοδυναμικό δυναμικό που ελαχιστοποιείται στην ισορροπία. Η ελεύθερη ενέργεια συνδέεται με τη συνάρτηση επιμερισμού μέσω της σχέσης

$$\mathcal{Z} = e^{-\beta F} \Leftrightarrow F = -k_B T \ln \mathcal{Z}. \quad (1.7)$$

Σύμφωνα με τη σχέση (1.6) ορίζονται τα υπόλοιπα θερμοδυναμικά μεγέθη:

$$\langle M \rangle = - \left( \frac{\partial F}{\partial H} \right)_T, \quad S = - \left( \frac{\partial F}{\partial T} \right)_H \quad (1.8)$$

Επιπλέον, μπορούν να οριστούν και ροπές ανώτερης τάξης για τη μαγνήτιση και την ενέργεια

$$\langle M^k \rangle = \frac{1}{\mathcal{Z}} \sum_r M_r^k e^{-\beta E_r} \quad (1.9)$$

$$\langle E^k \rangle = \frac{1}{\mathcal{Z}} \sum_r E_r^k e^{-\beta E_r}, \quad (1.10)$$

μέσω των οποίων ορίζονται αντίστοιχα διαφορών τάξεων συσσωρευτές (cumulants) [3]. Άξιος αναφοράς αποτελεί ο 4<sup>ης</sup> τάξης συσσωρευτής του Binder [4]

$$U_4 = 1 - \frac{\langle M^4 \rangle}{3 \langle M^2 \rangle^2}, \quad (1.11)$$

ο οποίος παρά το γεγονός ότι δεν αποτελεί φυσικά μετρούμενη ποσότητα, παρουσιάζει ιδιαίτερο ενδιαφέρον στον τομέα της υπολογιστικής φυσικής και των προσομοιώσεων.

Οι συναρτήσεις απόκρισης (επιδεκτικότητες), που αποτελούν μέτρο των θερμικών διακυμάνσεων των αντίστοιχων θερμοδυναμικών μεγεθών, δίνονται από τις σχέσεις

$$\chi_T = \left( \frac{\partial M}{\partial H} \right)_T = - \left( \frac{\partial^2 F}{\partial H^2} \right)_T \quad (1.12)$$

$$C_H = \left( \frac{\partial U}{\partial T} \right)_H = -T \left( \frac{\partial^2 F}{\partial T^2} \right)_H. \quad (1.13)$$

Με  $\chi_T$  συμβολίζεται η (ισόθερμη) μαγνητική επιδεκτικότητα, ενώ με  $C_H$  συμβολίζεται η ειδική θερμότητα (υπό σταθερό μαγνητικό πεδίο)<sup>3</sup>. Με κατάλληλες παραγωγίσεις της συνάρτησης επιμερισμού, οι επιδεκτικότητες των σχέσεων (1.12) και (1.13) γράφονται

$$\chi = \frac{1}{k_B T} (\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2) = \frac{1}{k_B T} (\delta M)^2 \quad (1.14)$$

$$C = \frac{1}{k_B T^2} (\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2) = \frac{1}{k_B T^2} (\delta E)^2, \quad (1.15)$$

όπου με  $\delta E$  και  $\delta M$  συμβολίζονται οι διακυμάνσεις των αντίστοιχων θερμοδυναμικών μεγεθών. Ολοκληρώνοντας τη σύντομη αναφορά στα βασικά μακροσκοπικά μεγέθη της στατιστικής φυσικής, κρίνεται σκόπιμο να εισαχθεί μια ακόμα ποσότητα, αυτή τη φορά μικροσκοπική, η οποία αποτελεί μέτρο των συσχετίσεων των διακυμάνσεων των spin από τις μέσες τιμές τους και ονομάζεται συνδεδεμένη συνάρτηση συσχέτισης δύο σημείων (two point connected correlation function). Η τελευταία για δύο πλεγματικά σημεία  $i$  και  $j$  ορίζεται σύμφωνα με τη σχέση

$$\Gamma(\vec{r}_i, \vec{r}_j) \equiv \left\langle \left( \vec{S}_i - \langle \vec{S}_i \rangle \right) \left( \vec{S}_j - \langle \vec{S}_j \rangle \right) \right\rangle, \quad (1.16)$$

όπου  $\vec{r}_i$  ( $\vec{r}_j$ ) είναι το διάνυσμα θέσης του πλεγματικού σημείου  $i$  ( $j$ ). Για συστήματα τα οποία είναι αναλλοίωτα σε πλεγματικές μετατοπίσεις, ισχύει  $\langle \vec{S}_i \rangle = \langle \vec{S}_j \rangle$  και η συνδεδεμένη συνάρτηση συσχέτισης εξαρτάται μόνο από το σχετικό διάνυσμα θέσης  $\vec{r} = \vec{r}_i - \vec{r}_j$ . Σύμφωνα με τα προαναφερθέντα η συνδεδεμένη συνάρτηση συσχέτισης γράφεται



$$\Gamma(\vec{r}) = \langle \vec{S}(0) \vec{S}(\vec{r}) \rangle - \langle \vec{S}(0) \rangle \langle \vec{S}(\vec{r}) \rangle. \quad (1.17)$$

Η σημασία της συνδεδεμένης συνάρτησης συσχέτισης στη θεωρία των κρίσιμων φαινομένων είναι μεγάλη, αφού μόνο η μακροσκοπική περιγραφή ενός φυσικού συστήματος μέσω των μεγεθών  $\langle M \rangle$ ,  $\langle E \rangle$ ,  $C$  και  $\chi$  δεν επαρκεί για την κατανόηση μιας συνεχούς αλλαγής φάσης όπως θα αναδειχθεί στη συνέχεια.

## 1.3 Συνεχείς Αλλαγές Φάσης

### 1.3.1 Η Παράμετρος Τάξης

Το πρώτο βήμα στην ποσοτική μελέτη μιας συνεχούς αλλαγής φάσης απαιτεί τον προσδιορισμό μιας φυσικής ποσότητας η οποία ονομάζεται *παράμετρος τάξης* (order parameter) και αποτελεί μέτρο της μακροσκοπικής τάξης που εκδηλώνει το σύστημα. Η

<sup>3</sup> Από αυτό το σημείο κι έπειτα οι δείκτες  $T$  και  $H$  θα υπονοούνται στις αντίστοιχες επιδεκτικότητες, εκτός και αν αναφέρεται διαφορετικά.

ποσότητα αυτή παρουσιάζει μια ξεχωριστή ιδιότητα, αφού ανεξαρτήτως φυσικού συστήματος που μελετάται, λαμβάνει τιμές διάφορες του μηδενός κάτω από μια θερμοκρασία, ενώ μεταβαίνει συνεχώς σε μηδενική τιμή πάνω από τη θερμοκρασία αυτή [5]. Αυτό έχει σαν αποτέλεσμα να ορίζει το θερμοκρασιακό σημείο στο οποίο λαμβάνει χώρα μια συνεχής αλλαγή φάσης, το οποίο καλείται *κρίσιμη θερμοκρασία μετάβασης* ή *κρίσιμο σημείο* και συμβολίζεται ως  $T_C$ . Η παράμετρος τάξης για ένα φυσικό σύστημα μπορεί να είναι μονόμετρο, διανυσματικό ή τανυστικό μέγεθος, ακόμα και μιγαδικός αριθμός, γεγονός που καθιστά την εύρεσή της μια δύσκολη και απαιτητική διαδικασία, η οποία απαιτεί την πλήρη κατανόηση των μικροσκοπικών ιδιοτήτων του φυσικού συστήματος που μελετάται.

Στην περίπτωση του σιδηρομαγνητισμού, η παράμετρος τάξης είναι η μαγνήτιση  $\langle M \rangle$  του συστήματος. Οι δύο φάσεις (παραμαγνητισμός- σιδηρομαγνητισμός) εκατέρωθεν του κρίσιμου σημείου  $T_C$  παρουσιάζουν διαφορετικές συμμετρίες προσανατολισμού<sup>4</sup>. Στην παραμαγνητική φάση ( $T > T_C$ ), απουσία εξωτερικού πεδίου, η μαγνήτιση είναι μηδενική και το σύστημα χαρακτηρίζεται από πλήρη συμμετρία στροφών. Όλες οι διευθύνσεις είναι ισοδύναμες και κάθε μαγνητική ροπή μπορεί να έχει οποιονδήποτε προσανατολισμό. Από την άλλη πλευρά, καθώς το σύστημα μεταβαίνει στη σιδηρομαγνητική φάση ( $T < T_C$ ), απουσία εξωτερικού πεδίου, η μαγνήτιση απότομα λαμβάνει μη μηδενικές τιμές και το διάνυσμά της ορίζει προτιμητέο προσανατολισμό στο χώρο. Η πλήρης περιστροφική συμμετρία της παραμαγνητικής φάσης, απότομα αλλάζει σε συμμετρία στροφών μόνο γύρω από τον άξονα της μαγνήτισης κατά τη μετάβαση στη σιδηρομαγνητική φάση [7, 8]. Το φαινόμενο της απότομης αλλαγής συμμετρίας του συστήματος, επειδή λαμβάνει χώρα απουσία κάποιου εξωτερικού αιτίου ( $H = 0$ ), συχνά αναφέρεται ως “*αυθόρμητο σπάσιμο συμμετρίας*” (spontaneous symmetry breaking). Η επιλογή του προσανατολισμού πραγματοποιείται τυχαία με την επιβολή κάποιας διακύμανσης και το σύστημα αυθόρμητα υιοθετεί μια σύμφωνη συμπεριφορά, εκδηλώνοντας μακροσκοπική τάξη [9].

### 1.3.2 Κρίσιμοι Εκθέτες

Κοντά στο κρίσιμο σημείο μιας συνεχούς αλλαγής φάσης, οι θερμοδυναμικές ποσότητες χαρακτηρίζονται από ιδιόμορφη (singular) συμπεριφορά ή από ιδιόμορφες παραγώγους. Ορίζεται η ποσότητα

$$t \equiv \frac{T - T_C}{T_C}, \quad (1.18)$$

η οποία ονομάζεται ανηγμένη θερμοκρασία και αποτελεί αδιάστατο μέτρο της θερμοκρασιακής απόστασης από το κρίσιμο σημείο  $T_C$ . Στο όριο που η ανηγμένη θερμοκρασία

<sup>4</sup>Ένα φυσικό σύστημα χαρακτηρίζεται από συγκεκριμένη συμμετρία, όταν η Χαμιλτονιανή  $\mathcal{H}$  που το περιγράφει, παραμένει αναλλοίωτη κάτω από μετασχηματισμούς της ομάδας.

μηδενίζεται, μια οποιαδήποτε θερμοδυναμική ποσότητα  $Q$  μπορεί να περιγραφεί μέσω ενός αναλυτικού μέρους, που παραμένει πεπερασμένο και ενός μη αναλυτικού, το οποίο μπορεί να αποκλίνει ή να παρουσιάζει ασυνέχεια [6, 10]. Τα παραπάνω συνοψίζονται στη σχέση

$$\lim_{t \rightarrow 0} Q(t) = Q_r(t) + Q_s(t). \quad (1.19)$$

Το μη αναλυτικό μέρος  $Q_s(t)$ , μπορεί να περιγραφεί από ένα νόμο τύπου δύναμης στο παραπάνω όριο σύμφωνα με τη σχέση<sup>5</sup>

$$Q_s(t \rightarrow 0) \sim t^\mu, \quad (1.20)$$

Η σχέση (1.20) δεν αποτελεί απλά μια σχέση αναλογίας, αλλά την κυρίαρχη ασυμπτωτική συμπεριφορά του μη αναλυτικού μέρους μιας θερμοδυναμικής ποσότητας. Εν γένει, περιγράφεται από πιο πολύπλοκες εκφράσεις που περιέχουν και διορθωτικούς όρους, σύμφωνα με τη γενική έκφραση [11, 12]

$$\lim_{t \rightarrow 0} Q_s(t) = At^\mu(1 + Bt^w \dots). \quad (1.21)$$

Ο εκθέτης  $\mu$  που περιγράφει την κυρίαρχη συμπεριφορά του μη αναλυτικού μέρους  $Q_s$  μιας θερμοδυναμικής ποσότητας, ορίζεται μέσω της σχέσης

$$\mu \equiv \lim_{t \rightarrow 0} \frac{\log(Q_s(t))}{\log(t)}. \quad (1.22)$$

και ονομάζεται *κρίσιμος εκθέτης*<sup>6</sup>. Η προσέγγιση του κρίσιμου σημείου μπορεί να γίνει είτε από τη φάση “σπασμένης συμμετρίας” ( $T \rightarrow T_C^-$ ) και οι κρίσιμοι εκθέτες συμβολίζονται κατά σύμβαση με τόνο, είτε από τη συμμετρική φάση ( $T \rightarrow T_C^+$ ), όπου οι κρίσιμοι εκθέτες συμβολίζονται με το ίδιο γράμμα αλλά χωρίς τόνο<sup>7</sup>. Τα κυριότερα θερμοδυναμικά μεγέθη των οποίων τα μη αναλυτικά μέρη περιγράφονται με νόμους τύπου δύναμης μέσω κατάλληλων κρίσιμων εκθετών είναι:

(i) *Μαγνήτιση (παράμετρος τάξης)*

$$M(t, H = 0) \sim (-t)^\beta, \quad T \rightarrow T_C^- \quad (1.23)$$

(ii) *Μαγνητική επιδεκτικότητα*

$$\chi(t, H = 0) \sim \begin{cases} (-t)^{-\gamma'} & , \quad T \rightarrow T_C^- \\ (t)^{-\gamma} & , \quad T \rightarrow T_C^+ \end{cases} \quad (1.24)$$

<sup>5</sup>π.χ. για  $t > 0$

<sup>6</sup>Στη σχέση (1.22) έχει γίνει η υπόθεση ότι το όριο υπάρχει.

<sup>7</sup>Εξαίρεση αποτελεί η περίπτωση της παραμέτρου τάξης, όπου ο εκθέτης ορίζεται μόνο για  $T < T_C$  και συμβολίζεται απλώς  $\beta$ .

(iii) *Ειδική θερμότητα*

$$C(t, H = 0) \sim \begin{cases} (-t)^{-\alpha'} & , \quad T \rightarrow T_C^- \\ (t)^{-\alpha} & , \quad T \rightarrow T_C^+ \end{cases} \quad (1.25)$$

(iv) Επιπλέον, ένας ακόμα νόμος δύναμης, περιγράφει την *καμπύλωση της κρίσιμης ισοθέρμου* (καταστατική εξίσωση στο κρίσιμο σημείο) και δίνεται από τη σχέση

$$M(0, H) \sim H^{1/\delta} \text{sgn}(H) \quad , \quad T = T_C \quad \text{και} \quad H \rightarrow 0. \quad (1.26)$$

Πέρα από τους εκθέτες  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$  και  $\delta$  που περιγράφουν την κρίσιμη συμπεριφορά των μακροσκοπικών μεγεθών, δύο ακόμα εκθέτες, οι  $\eta$  και  $\nu$  είναι μεγάλης σημασίας για τη θεωρία των κρίσιμων φαινομένων και συνδέονται με μικροσκοπικές ποσότητες. Προκειμένου να αναδειχθεί η σημασία τους, απαιτείται μια λεπτομερέστερη ανάλυση του ρόλου της συνδεδεμένης συνάρτησης συσχέτισης στις συνεχείς αλλαγές φάσης. Οι διακυμάνσεις της μαγνήτισης δίνονται από τη σχέση

$$\langle (M - \langle M \rangle)^2 \rangle = \left\langle \sum_i (\vec{S}_i - \langle \vec{S}_i \rangle) \sum_j (\vec{S}_j - \langle \vec{S}_j \rangle) \right\rangle = \sum_{i,j} \Gamma(\vec{r}_i, \vec{r}_j). \quad (1.27)$$

Όπως είναι προφανές, οι διακυμάνσεις της μαγνήτισης είναι άμεσα συνδεδεμένες με τη συνάρτηση συσχέτισης όπως ορίστηκε στη σχέση (1.16). Για ένα σύστημα αναλλοίωτο στις πλεγματικές μετατοπίσεις η παραπάνω σχέση γράφεται

$$\chi k_B T = N \sum_i \Gamma(0, \vec{r}_i). \quad (1.28)$$


Η  $\Gamma(0, \vec{r}_i)$  δεν είναι τίποτα άλλο παρά η συνδεδεμένη συνάρτηση συσχέτισης όπως δίνεται από τη σχέση (1.17) και στο αριστερό μέλος έχει αντικατασταθεί η μαγνητική επιδεικτικότητα. Στο όριο όπου το σύστημα προσεγγίζει την κρίσιμη θερμοκρασία, η δομή του κρυσταλλικού πλέγματος δεν έχει σημασία [2], με αποτέλεσμα το παραπάνω άθροισμα να μπορεί να γραφτεί σαν ολοκλήρωμα:

$$\chi \sim \frac{1}{k_B T} \int \Gamma(r) d^3 r. \quad (1.29)$$

Η παραπάνω σχέση είναι γνωστή και ως *θεώρημα διακύμανσης - διασκόρπισης* (fluctuation - dissipation theorem). Η απόκλιση της μαγνητικής επιδεικτικότητας καθώς το σύστημα προσεγγίζει το κρίσιμο σημείο (σχέση (1.24)) θα πρέπει να συνδέεται με τη μη ολοκληρωσιμότητα της συνδεδεμένης συνάρτησης συσχέτισης. Από την άλλη πλευρά, μακριά από το κρίσιμο σημείο, οι διακυμάνσεις της μαγνήτισης είναι μικρές και η  $\Gamma(\vec{r})$  φθίνει εκθετικά καθώς αυξάνεται το  $\vec{r}$ . Δυστυχώς η μορφή της συνάρτησης συσχέτισης



δεν είναι γνωστή στα περισσότερα φυσικά συστήματα. Ωστόσο, σε μεγάλες αποστάσεις αναμένεται να φθίνει εκθετικά σύμφωνα με τη σχέση



$$\lim_{r \rightarrow \infty} \Gamma(\vec{r}) \sim r^{-p} e^{-r/\xi}. \quad (1.30)$$

Η παραπάνω εξίσωση ορίζει ένα πολύ σημαντικό μέγεθος για τη στατιστική φυσική που ονομάζεται **μήκος συσχέτισης (correlation length)** και αποτελεί μέτρο της εμβέλειας των διακυμάνσεων. Σύμφωνα με τα παραπάνω, το μαθηματικό σενάριο που περιγράφει την απόκλιση της μαγνητικής επιδεκτικότητας γίνεται ολοένα και πιο ξεκάθαρο. Όσο το σύστημα βρίσκεται μακριά από το κρίσιμο σημείο, το μήκος συσχέτισης είναι πεπερασμένο και η συνδεδεμένη συνάρτηση συσχέτισης ακολουθεί έναν εκθετικό νόμο μείωσης με αποτέλεσμα το ολοκλήρωμα της σχέσης (1.29) να συγκλίνει. Ωστόσο, καθώς το σύστημα προσεγγίζει την κρίσιμη θερμοκρασία, το μήκος συσχέτισης αποκλίνει σύμφωνα με ένα νόμο δύναμης

$$\xi(t, H = 0) \sim \begin{cases} (-t)^{-\nu'} & , \quad T \rightarrow T_C^- \\ (t)^{-\nu} & , \quad T \rightarrow T_C^+ \end{cases} \quad (1.31)$$

και η ασυμπτωτική συμπεριφορά της συνδεδεμένης συνάρτησης συσχέτισης όπως δίνεται από τη σχέση (1.30), χάνει την ισχύ της. Πειραματικά αποτελέσματα [12] και λύσεις από ακριβώς επιλύσιμα πρότυπα [2] υποδεικνύουν ότι η συμπεριφορά της συνδεδεμένης συνάρτησης συσχέτισης στο κρίσιμο σημείο περιγράφεται από έναν ακόμα νόμο δύναμης της μορφής

$$\Gamma(\vec{r}) \sim r^{-d+2-\eta}, \quad T = T_C \quad \text{και} \quad r \rightarrow \infty. \quad (1.32)$$

Με  $d$  συμβολίζεται η διάσταση του χώρου, ενώ με  $\eta$  ένας ακόμα κρίσιμος εκθέτης. Τέλος, αξίζει να αναφερθεί ότι οι κρίσιμοι εκθέτες ικανοποιούν ανισοτικές σχέσεις, ορισμένες από τις οποίες αποδεικνύονται με θερμοδυναμικά επιχειρήματα, άλλες προκύπτουν στα πλαίσια της **θεωρίας επανακανονικοποίησης (renormalization group)**, ενώ κάποιες ισχύουν κάτω από επιπλέον προϋποθέσεις οι οποίες δεν έχουν αποδειχθεί αυστηρά<sup>8</sup>. Οι σπουδαιότερες ανισοτικές σχέσεις συνοψίζονται στις εξής:

(i) η ανισότητα *Rushbrooke*

$$\alpha' + 2\beta + \gamma' \geq 2, \quad (1.33)$$

(ii) οι ανισότητες *Griffiths*

$$\alpha' + \beta(1 + \delta) \geq 2 \quad (1.34)$$

$$\gamma' \geq \beta(\delta - 1), \quad (1.35)$$

<sup>8</sup> Για τις αποδείξεις των ανισοτικών σχέσεων μεταξύ των κρίσιμων εκθετών ο αναγνώστης παραπέμπεται στο περίφημο βιβλίο του *H. E. Stanley*, "Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena" [11].

(iii) η ανισότητα Fisher

$$(2 - \eta)\nu \geq \gamma \quad (1.36)$$

(iv) και οι ανισότητες Josephson

$$d\nu' \geq 2 - \alpha' \quad (1.37)$$

$$d\nu \geq 2 - \alpha. \quad (1.38)$$

### 1.3.3 Οικουμενικότητα

Έχοντας ορίσει τους σπουδαιότερους κρίσιμους εκθέτες, γεννιέται το ερώτημα γιατί παρουσιάζουν τόσο ενδιαφέρον στη θεωρία των κρίσιμων φαινομένων εφόσον περιγράφουν τη συμπεριφορά των θερμοδυναμικών μεγεθών μόνο σε μια μικρή περιοχή του φασικού διαγράμματος. Η απάντηση βρίσκεται στο γεγονός ότι ενώ πολλά συστήματα διαφέρουν σημαντικά ως προς τις μικροσκοπικές λεπτομέρειες των αλληλεπιδράσεων των δομικών τους λίθων, στο κρίσιμο σημείο δεν υπάρχει η έννοια της χαρακτηριστικής κλίμακας μήκους και η εμβέλεια των διακυμάνσεων διαμορφώνει την κρίσιμη συμπεριφορά. Για το λόγο αυτό, πολύ διαφορετικά συστήματα εμφανίζουν τους ίδιους κρίσιμους εκθέτες, γεγονός το οποίο αναδεικνύει άλλο ένα εντυπωσιακό χαρακτηριστικό της θεωρίας των κρίσιμων φαινομένων, την έννοια της *οικουμενικότητας*. Υπάρχουν ορισμένα χαρακτηριστικά τα οποία επιτρέπουν την κατηγοριοποίηση διαφορετικών συστημάτων σε κλάσεις οικουμενικότητας και συνοψίζονται στα εξής:

- η διάσταση  $d$  του χώρου,
- η συμμετρία και η διάσταση  $D$  της παραμέτρου τάξης και
- η φύση των αλληλεπιδράσεων μακράς εμβέλειας εάν υπάρχουν.



Η σπουδαιότητα της οικουμενικότητας έγκειται στο γεγονός ότι η διερεύνηση της κρίσιμης συμπεριφοράς ενός πολύπλοκου φυσικού συστήματος, ανάγεται στη μελέτη ενός κατάλληλου και απλουστευμένου προτύπου που να μοιράζεται τα παραπάνω χαρακτηριστικά. Ωστόσο, αξίζει να σημειωθεί ότι η θερμοκρασία μετάβασης, σε αντίθεση με τους κρίσιμους εκθέτες, εξαρτάται αποκλειστικά από τις μικροσκοπικές λεπτομέρειες της Χαμιλτονιανής, με αποτέλεσμα να διαφέρει μεταξύ συστημάτων που ανήκουν στην ίδια κλάση οικουμενικότητας.

## 1.4 Θεωρίες Κλιμάκωσης

### 1.4.1 Η Υπόθεση Κλιμάκωσης

Πειραματικά αποτελέσματα και πολλές θεωρητικές εργασίες πάνω στα κρίσιμα φαινόμενα υποστηρίζουν τις ανισοτικές σχέσεις των κρίσιμων εκθετών, ενώ στα περισσότερα φυσικά συστήματα φαίνεται να ικανοποιούνται και ως ισότητες. Η πρώτη απόπειρα



θεμελίωσης μιας θεωρίας κλιμάκωσης δύο μεταβλητών έγινε το 1965 από τον Widom και ανεξάρτητα από τους Domb και Hunter. Παρά το γεγονός ότι προβλέπει ισότητες μεταξύ εκθετών οι οποίες φαίνεται να είναι σε πολύ καλή συμφωνία με πειραματικά ευρήματα, στηρίζεται σε μία “επί τούτω” υπόθεση και μέχρι σήμερα δεν έχει αποδειχθεί αυστηρά.

Πολύ κοντά στο κρίσιμο σημείο, το μόνο χαρακτηριστικό μήκος του συστήματος είναι το μήκος συσχέτισης που αποκλίνει με το νόμο δύναμης της σχέσης (1.31), γεγονός που καθιστά το σύστημα αναλλοίωτο στην επιλογή της κλίμακας (scale invariant). Σύμφωνα με την υπόθεση κλιμάκωσης του Widom, το μη αναλυτικό μέρος της ελεύθερης ενέργειας  $F_s$  είναι μία γενικευμένη ομογενής συνάρτηση των παραμέτρων που χαρακτηρίζουν το σύστημα και γράφεται στη μορφή [11]

$$F_s(\lambda^{a_t} t, \lambda^{a_H} H) = \lambda F_s(t, H), \quad \forall \lambda \in \mathfrak{R}. \quad (1.39)$$

Με κατάλληλες παραγωγίσεις και των δύο μελών της σχέσης (1.39), προκύπτουν τα θερμοδυναμικά μεγέθη σύμφωνα με τις σχέσεις που αναφέρθηκαν στην ενότητα 1.2. Επομένως:

$$-\frac{\partial}{\partial H} F_s(\lambda^{a_t} t, \lambda^{a_H} H) = -\lambda \frac{\partial}{\partial H} F_s(t, H) \Leftrightarrow \quad (1.40)$$

$$M(t, H) = \lambda^{(a_H-1)} M(\lambda^{a_t} t, \lambda^{a_H} H), \quad (1.41)$$

με τις παραμέτρους  $a_t$  και  $a_H$  να παραμένουν άγνωστες. Αφού υπάρχει ελευθερία στην επιλογή της παραμέτρου  $\lambda$ , σύμφωνα με τις ιδιότητες των ομογενών συναρτήσεων, θα ισχύει και για τις συγκεκριμένες επιλογές  $\lambda = (-t)^{-1/a_t}$  και  $\lambda = (H)^{-1/a_H}$ .

Υπάρχουν δύο κρίσιμοι εκθέτες που περιγράφουν την ασυμπτωτική συμπεριφορά της μαγνήτισης. Ο εκθέτης  $\beta$ , που αναφέρεται στην περίπτωση  $t \rightarrow 0$  απουσία εξωτερικού πεδίου ( $H = 0$ ) και ο εκθέτης  $\delta$ , για την περίπτωση  $t = 0$  και  $H \rightarrow 0$  που περιγράφει την καμπύλωση της κρίσιμης ισοθέρμου.

Επομένως, για  $t \rightarrow 0$ ,  $H = 0$  και  $\lambda = (-t)^{-1/a_t}$ :

$$M(t \rightarrow 0, 0) = (-t)^{(1-a_H)/a_t} M(-1, 0). \quad (1.42)$$

Συγκρίνοντας με το νόμο δύναμης  $M(t \rightarrow 0, 0) \sim (-t)^\beta$ , προκύπτει:

$$\beta = \frac{1 - a_H}{a_t}. \quad (1.43)$$

Αντίστοιχα, για  $t = 0$ ,  $H \rightarrow 0$  και  $\lambda = (H)^{-1/a_H}$ :

$$M(0, H \rightarrow 0) = H^{(1-a_H)/a_H} M(0, 1). \quad (1.44)$$

Συγκρίνοντας με το νόμο δύναμης  $M(0, H \rightarrow 0) \sim H^{1/\delta} \text{sgn}(H)$  προκύπτει:

$$\delta = \frac{a_H}{1 - a_H}. \quad (1.45)$$

Παραγωγίζοντας μία ακόμα φορά τη σχέση (1.40) ως προς το πεδίο  $H$  προκύπτει η μαγνητική επιδεκτικότητα:

$$\chi(t, H) = \lambda^{(2a_H-1)} \chi(\lambda^{a_t} t, \lambda^{a_H} H). \quad (1.46)$$

Επιλέγοντας την τιμή της παραμέτρου  $\lambda = (-t)^{-1/a_t}$ , για  $t \rightarrow 0$  και  $H = 0$ , έπεται ότι

$$\chi(t \rightarrow 0, 0) = (-t)^{(1-2a_H)/a_t} \chi(-1, 0). \quad (1.47)$$

Συγκρίνοντας με το νόμο δύναμης  $\chi(t \rightarrow 0, 0) \sim (-t)^{-\gamma'}$  προκύπτει

$$\gamma' = \frac{2a_H - 1}{a_t}. \quad (1.48)$$

Αντίστοιχα, αν επιλεγεί η παράμετρος  $\lambda = (t)^{-1/a_t}$  στο όριο  $t \rightarrow 0$ , απουσία εξωτερικού πεδίου, ο εκθέτης  $\gamma$  συνδέεται με τις παραμέτρους  $a_t$  και  $a_H$  σύμφωνα με τη σχέση

$$\gamma = \frac{2a_H - 1}{a_t}. \quad (1.49)$$

Επομένως, στα πλαίσια της υπόθεσης κλιμάκωσης του Widom, προβλέπεται η ισότητα των κρίσιμων εκθετών

$$\gamma' = \gamma = \frac{2a_H - 1}{a_t}. \quad (1.50)$$

Σύμφωνα με τη σχέση (1.13), με δύο φορές παραγωγή και των δύο μελών της σχέσης (1.39) ως προς τη θερμοκρασία, προκύπτει η ειδική θερμότητα υπό σταθερό πεδίο

$$C(t, H) = \lambda^{(2a_t-1)} C(\lambda^{a_t} t, \lambda^{a_H} H). \quad (1.51)$$

Για  $t \rightarrow 0$ ,  $H = 0$  και  $\lambda = (-t)^{-1/a_t}$ :

$$C(t \rightarrow 0, 0) = (-t)^{(1-2a_t)/a_t} C(-1, 0), \quad (1.52)$$

ενώ για  $\lambda = (t)^{-1/a_t}$  στα ίδια όρια:

$$C(t \rightarrow 0, 0) = (t)^{(1-2a_t)/a_t} C(1, 0). \quad (1.53)$$

Αντιπαραβάλλοντας τους νόμους δύναμης της σχέσης (1.25) με τις σχέσεις (1.52) και (1.53), προκύπτει

$$\alpha' = \alpha = 2 - \frac{1}{a_t}. \quad (1.54)$$

Οι σχέσεις των εκθετών  $\beta$ ,  $\delta$ ,  $\gamma'$ ,  $\gamma$ ,  $\alpha$  και  $\alpha'$  με τις άγνωστες παραμέτρους  $a_t$  και  $a_H$  συνοψίζονται στις εξής:

$$\begin{aligned} \beta &= \frac{1 - a_H}{a_t} & \delta &= \frac{a_H}{1 - a_H} \\ \gamma' = \gamma &= \frac{2a_H - 1}{a_t} & \alpha' = \alpha &= 2 - \frac{1}{a_t} \end{aligned} \quad (1.55)$$

Συνδυάζοντας κατάλληλα τις παραπάνω σχέσεις προκύπτει η ανισότητα του Rushbrooke σε μορφή ισότητας

$$\alpha' + 2\beta + \gamma' = 2, \quad (1.56)$$

καθώς και οι ανισότητες του Griffiths σε μορφή ισότητας

$$\alpha' + \beta(1 + \delta) = 2 \quad (1.57)$$

$$\gamma' = \beta(\delta - 1). \quad (1.58)$$

Σημειώνεται σε αυτό το σημείο ότι στα πλαίσια της υπόθεσης κλιμάκωσης του Widom, δεν προβλέπονται σχέσεις μεταξύ των κρίσιμων εκθετών  $\nu$  και  $\eta$ , αφού οι τελευταίοι συνδέονται με μικροσκοπικές ποσότητες, το μήκος συσχέτισης  $\xi$  και τη συνδεδεμένη συνάρτηση συσχέτισης  $\Gamma(r)$ .

## 1.4.2 Διαστατική Ανάλυση



Ο Kadanoff το 1966 παρουσίασε ορισμένα επιχειρήματα σύμφωνα με τα οποία όχι μόνο υποστηρίζεται η υπόθεση κλιμάκωσης του Widom, αλλά προβλέπονται και σχέσεις μεταξύ των εκθετών  $\eta$  και  $\nu$ . Η δουλειά του Kadanoff αποτέλεσε έναυσμα για την ανάπτυξη της θεωρίας επανακανονικοποίησης, στα πλαίσια της οποίας η ομοιογένεια του μη αναλυτικού μέρους της ελεύθερης ενέργειας  $F_s(t, H)$  προκύπτει από πρώτες αρχές [13]. Ωστόσο, ξεφεύγει από τα πλαίσια της παρούσας εργασίας και θα επιχειρηθεί μία διαφορετική προσέγγιση, χρησιμοποιώντας διαστατικά επιχειρήματα.

Κοντά στο κρίσιμο σημείο όπου η κρίσιμη συμπεριφορά διαμορφώνεται μόνο από το χαρακτηριστικό μήκος  $\xi$ , μια ποσότητα  $Q$  που έχει διαστάσεις [μήκος<sup>-x</sup>] είναι ανάλογη του  $\xi^{-x}$ . Έτσι, για την αδιάστατη πυκνότητα ελεύθερης ενέργειας  $f = F/k_BTV$  θα ισχύει

$$f \sim \xi^{-d}. \quad (1.59)$$

Η θεώρηση της πυκνότητας ελεύθερης ενέργειας γίνεται γιατί στο θερμοδυναμικό όριο παραμένει πεπερασμένη, σε αντίθεση με την ελεύθερη ενέργεια  $F$ , η οποία αποκλίνει και μακριά από την κρίσιμη περιοχή [6, 10]. Αντικαθιστώντας στην παραπάνω σχέση το νόμο δύναμης που περιγράφει την απόκλιση του μήκους συσχέτισης προκύπτει:

$$f \sim t^{d\nu}. \quad (1.60)$$

Η ειδική θερμότητα ανά μονάδα όγκου δίνεται από τη σχέση

$$C/V = -T \frac{\partial^2(F/V)}{\partial T^2}. \quad (1.61)$$

Θεωρώντας μόνο την κυρίαρχη συμπεριφορά της παραπάνω σχέσης και συγκρίνοντας με το νόμο δύναμης για την ειδική θερμότητα προκύπτουν οι σχέσεις

$$\alpha = 2 - d\nu, \quad \alpha' = 2 - d\nu', \quad (1.62)$$

που αποτελούν τις ανισότητες του Josephson σε μορφή ισότητας. Δεδομένου ότι οι εκθέτες  $\alpha$  και  $\alpha'$  είναι ίσοι σύμφωνα με την υπόθεση κλιμάκωσης του Widom, προκύπτει και η ισότητα  $\nu = \nu'$  για τους εκθέτες του μήκους συσχέτισης<sup>9</sup>.

Αντίστοιχα, για τη συνδεδεμένη συνάρτηση συσχέτισης  $\Gamma(\vec{r})$  στο κρίσιμο σημείο ισχύει

$$\Gamma(\vec{r}) \sim \xi^{-d+2-\eta} \sim |t|^{\nu(d-2+\eta)}. \quad (1.63)$$

Σύμφωνα με το θεώρημα διακύμανσης- διασκόρπισης (σχέση (1.29)), η κυρίαρχη συμπεριφορά της μαγνητικής επιδεκτικότητας περιγράφεται από την έκφραση

$$k_B T \chi \sim \xi^{2-\eta} \sim |t|^{-\nu(2-\eta)}. \quad (1.64)$$

Λαμβάνοντας υπόψη το νόμο δύναμης για τη μαγνητική επιδεκτικότητα, προκύπτει η σχέση

$$\gamma = \nu(2 - \eta), \quad (1.65)$$

η οποία δεν είναι τίποτα άλλο παρά η ανισότητα του Fisher σε μορφή ισότητας. Τέλος, εάν ληφθεί υπόψη το γεγονός ότι οι διαστάσεις της μαγνήτισης είναι  $[\langle M \rangle / V] = [\sqrt{\Gamma(\vec{r})}] \sim t^{\nu(d-2+\eta)}$ , καθώς και ο νόμος δύναμης της σχέσης (1.23), προκύπτει μία ακόμα σχέση μεταξύ των κρίσιμων εκθετών

<sup>9</sup> Από αυτό το σημείο κι έπειτα καταργείται η διάκριση των κρίσιμων εκθετών κατά την προσέγγιση του κρίσιμου σημείου  $t \rightarrow 0^\pm$ . Έτσι, οι νόμοι δύναμης θα γράφονται στη γενική μορφή

$$Q \sim |t|^\mu, \quad t \rightarrow 0$$

$$2\beta = \nu(d - 2 + \eta). \quad (1.66)$$

Οι σχέσεις μεταξύ των κρίσιμων εκθετών παρά το γεγονός ότι δεν μπορούν να αποδειχθούν αυστηρά, αλλά στηρίζονται όλες σε “επί τούτω” υποθέσεις, υποστηρίζονται από τα πειραματικά δεδομένα και γι’ αυτό το λόγο συχνά καλούνται *νόμοι κλιμάκωσης*. Φυσικά, με αντίστοιχα διαστατικά επιχειρήματα μπορούν να εξαχθούν και άλλες σχέσεις μεταξύ των κρίσιμων εκθετών. Οι νόμοι δύναμης των θερμοδυναμικών μεγεθών, καθώς και οι κυριότεροι νόμοι κλιμάκωσης που συνδέουν τους κρίσιμους εκθέτες μεταξύ τους, συνοψίζονται στους Πίνακες 1.1i και 1.1ii.

Νόμος δύναμης			Νόμος κλιμάκωσης		
$\langle M \rangle$	$\sim  t ^\beta$	$t \rightarrow 0, H = 0$	$\alpha = \alpha'$		
$\langle M \rangle$	$\sim H^{1/\delta} \text{sgn}(H)$	$t = 0, H \rightarrow 0$	$\gamma = \gamma'$		
$\chi$	$\sim  t ^{-\gamma}$	$t \rightarrow 0, H = 0$	$\nu = \nu'$		
$C$	$\sim  t ^{-\alpha}$	$t \rightarrow 0, H = 0$	$\alpha + 2\beta + \gamma = 2$		
$\xi$	$\sim  t ^{-\nu}$	$t \rightarrow 0, H = 0$	$\alpha + \beta(1 + \delta) = 2$		
$\Gamma(\vec{r})$	$\sim r^{-d+2-\eta}$	$t = 0, H = 0,$ $r \rightarrow \infty$	$\gamma = \nu(2 - \eta)$		
			$2 - \alpha = \nu d$		
			$2\beta = \nu(d - 2 + \eta)$		
<b>(i)</b>			<b>(ii)</b>		

**Πίνακας 1.1:** Κρίσιμη συμπεριφορά των θερμοδυναμικών μεγεθών (1.1i) και νόμοι κλιμάκωσης των κρίσιμων εκθετών (1.1ii.)

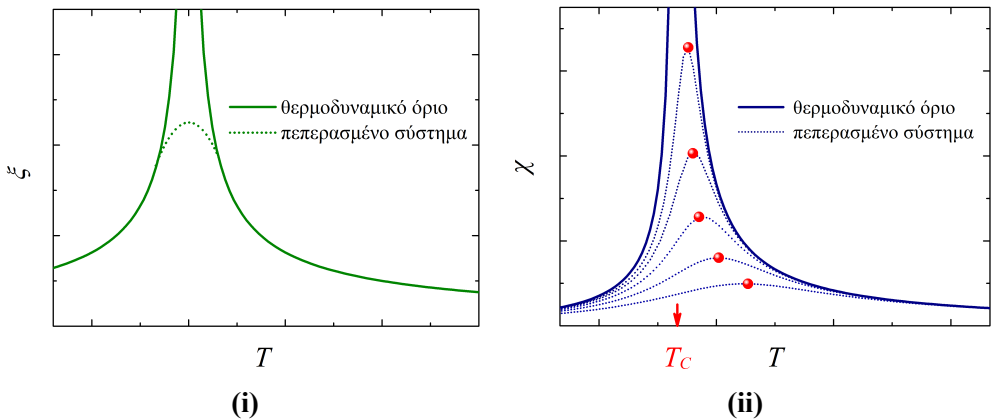
### 1.4.3 Κλιμάκωση Πεπερασμένου Μεγέθους

Σε ένα πειραματικά εξεταζόμενο σύστημα ο αριθμός των δομικών λίθων είναι της τάξης  $N \sim 10^{23}$ , ενώ στην περίπτωση των προσομοιώσεων,  $N \sim 10^2-10^6$ . Το ερώτημα που ανακύπτει στο σημείο αυτό είναι πως καθίσταται δυνατός ο προσδιορισμός της κρίσιμης συμπεριφοράς ενός φυσικού συστήματος στο θερμοδυναμικό όριο, μέσω μελέτης πεπερασμένων και συχνά μικρών συστημάτων.

Την απάντηση έρχονται να δώσουν μέθοδοι όπως η κλιμάκωση πεπερασμένου μεγέθους, η ανάπτυξη σε δυναμοσειρές και η επανακανονικοποίηση Monte Carlo. Η κλιμάκωση πεπερασμένου μεγέθους (finite size scaling), όπως μαρτυρά και το όνομά της, στηρίζεται στη συστηματική μελέτη της μεταβολής των θερμοδυναμικών μεγεθών, συ-

ναρτήσει του μεγέθους  $L$  του συστήματος<sup>10</sup> και εξαγωγή των κρίσιμων ιδιοτήτων με κατάλληλη προεκβολή (extrapolation) στο θερμοδυναμικό όριο (άπειρο σύστημα).

Σε ένα πεπερασμένο σύστημα, καθώς το κρίσιμο σημείο προσεγγίζεται, η εμβέλεια των διακυμάνσεων, όπως εκφράζεται μέσω του μήκους συσχέτισης, περιορίζεται αποκόπτεται από τη γραμμική διάσταση  $L$  του πλέγματος (Εικόνα 1.1i). Αυτό έχει σαν αποτέλεσμα το μήκος συσχέτισης να παρουσιάζει πλήρως αναλυτική συμπεριφορά, χαρακτηριστικό το οποίο αποτυπώνεται σε όλες τις θερμοδυναμικές ποσότητες. Για το λόγο αυτό δεν ορίζεται κρίσιμη θερμοκρασία μετάβασης, αλλά ψευδοκρίσιμες θερμοκρασίες στα σημεία που οι θερμοδυναμικές συναρτήσεις παρουσιάζουν ακρότατα, λόγω φαινομένου κύρτωσης (rounding). Οι ψευδοκρίσιμες θερμοκρασίες εξαρτώνται τόσο από το μέγεθος  $L$  του συστήματος, όσο και από τη θερμοδυναμική ποσότητα που παρουσιάζει ακρότατο, αλλά στο θερμοδυναμικό όριο ( $L \rightarrow \infty$ ), όλες συγκλίνουν στο πραγματικό κρίσιμο σημείο (Εικόνα 1.1ii).



**Εικόνα 1.1:** Σχηματική απεικόνιση της επίδρασης του πεπερασμένου του μεγέθους στις θερμοδυναμικές ποσότητες. Εικόνα 1.1i: κύρτωση (rounding) του μήκους συσχέτισης. Εικόνα 1.1ii: μετατόπιση (shifting) των ψευδοκρίσιμων θερμοκρασιών προς το πραγματικό κρίσιμο σημείο  $T_C$  για την περίπτωση της μαγνητικής επιδεκτικότητας.

Η μαγνητική επιδεκτικότητα ανά δομικό λίθο<sup>11</sup> μπορεί να εκφραστεί μέσω του μήκους συσχέτισης ως

$$\chi/N \sim \xi^{\gamma/\nu}, \quad t \rightarrow 0. \quad (1.67)$$

<sup>10</sup>Ένα πεπερασμένο σύστημα συνήθως περιγράφεται από έναν υπερκύβο διάστασης  $d$  του οποίου η γραμμική διάσταση είναι  $L = V^{1/d}$ .

<sup>11</sup>Επιλέγονται τα θερμοδυναμικά μεγέθη ανά δομικό λίθο γιατί παραμένουν πεπερασμένα ακόμα και στο θερμοδυναμικό όριο.



Μακριά από το κρίσιμο σημείο ισχύει ότι  $\xi \ll L$  και η μαγνητική επιδεκτικότητα έχει την ίδια τιμή με αυτή του άπειρου συστήματος, ενώ καθώς το σύστημα προσεγγίζει την κρίσιμη θερμοκρασία, υπάρχει ένα σημείο στο οποίο λαμβάνει χώρα ο περιορισμός του μήκους συσχέτισης και είναι εκείνο για το οποίο ισχύει  $\xi > L$  [14]. Το γεγονός αυτό μπορεί να εκφραστεί μαθηματικά μέσω της σχέσης

$$\chi/N = \xi^{\gamma/\nu} \chi_0(L/\xi), \quad (1.68)$$

όπου η συνάρτηση  $\chi_0(q)$  έχει την εξής ιδιότητα:

$$\chi_0(q) \sim \begin{cases} \text{σταθ.} & , \quad q \gg 1 \\ (q)^{\gamma/\nu} & , \quad q \rightarrow 0 \end{cases} . \quad (1.69)$$

Σημειώνεται ότι ο ακριβής τρόπος με τον οποίο η επιδεκτικότητα αποκόπτεται κοντά στην κρίσιμη θερμοκρασία  $T_C$ , περιέχεται στη συνάρτηση  $\chi_0(L/\xi)$ . Η σχέση (1.68) παρά το γεγονός ότι περιγράφει με ακριβή τρόπο τη συμπεριφορά της μαγνητικής επιδεκτικότητας καθώς μεταβάλλεται η γραμμική διάσταση του συστήματος, είναι σε δύσκολη μορφή, αφού περιέχει το μήκος συσχέτισης σε θερμοκρασία  $t$  του άπειρου συστήματος. Για το λόγο αυτό εισάγεται μια καινούργια αδιάστατη συνάρτηση, μέσω της σχέσης

$$\tilde{\chi}(q) = q^{-\gamma} \chi_0(q^\nu) \Leftrightarrow \chi_0(q^\nu) = q^\gamma \tilde{\chi}(q). \quad (1.70)$$

Με κατάλληλη αλλαγή μεταβλητής  $q \rightarrow q^{1/\nu}$ , η σχέση γράφεται:

$$\chi_0(q) = q^{\gamma/\nu} \tilde{\chi}(q^{1/\nu}). \quad (1.71)$$

Αντικαθιστώντας τη συνάρτηση  $\chi_0(q = L/\xi)$  στη σχέση (1.68) και λαμβάνοντας υπόψη το νόμο δύναμης για το μήκος συσχέτισης, προκύπτει:

$$\chi/N = L^{\gamma/\nu} \tilde{\chi}(L^{1/\nu}|t). \quad (1.72)$$

Στην πραγματικότητα υπάρχουν δύο συναρτήσεις  $\tilde{\chi}_\pm(L^{1/\nu}|t)$  για την επιδεκτικότητα, ανάλογα με την προσέγγιση του κρίσιμου σημείου. Κάτι τέτοιο όμως μπορεί να παρακαμφθεί, μέσω μιας γενικευμένης συνάρτησης κλιμάκωσης, προεκτείνοντας τα όρια αυτής και σε αρνητικές τιμές της παραμέτρου κλιμάκωσης  $L^{1/\nu}t$ :

$$\chi/N = L^{\gamma/\nu} \tilde{\chi}(L^{1/\nu}t). \quad (1.73)$$

Η παραπάνω διαδικασία εξαγωγής της σχέσης κλιμάκωσης πεπερασμένου μεγέθους για τη μαγνητική επιδεκτικότητα δεν αποτελεί σε καμία περίπτωση επαρκή μαθηματική

τεκμηρίωση. Κάτι τέτοιο μπορεί να γίνει μόνο στα πλαίσια της θεωρίας επανακανονικοποίησης, εκκινώντας από τη βασική σχέση κλιμάκωσης της ελεύθερης ενέργειας ανά δομικό λίθο [15]:

$$F/N \equiv f(t, H) = L^{-(2-\alpha)/\nu} \mathcal{F}(L^{1/\nu}t, L^{(\beta+\gamma)/\nu}H). \quad (1.74)$$

Με κατάλληλη παραγωγή και των δύο μελών ως προς το πεδίο, προκύπτει η μαγνήτιση ανά δομικό λίθο

$$M/N \equiv m(t, H) = L^{(\alpha+\beta+\gamma-2)/\nu} \tilde{\mathcal{M}}(L^{1/\nu}t, L^{(\beta+\gamma)/\nu}H). \quad (1.75)$$

Λαμβάνοντας υπόψη το νόμο κλιμάκωσης  $\alpha + 2\beta + \gamma = 2$ , η σχέση (1.75) γράφεται:

$$m(t, H) = L^{-\beta/\nu} \tilde{\mathcal{M}}(L^{1/\nu}t, L^{(\beta+\gamma)/\nu}H). \quad (1.76)$$

Παραγωγίζοντας μία ακόμα φορά την παραπάνω σχέση, προκύπτει η μαγνητική επιδεκτικότητα ανά δομικό λίθο:

$$\chi/N(t, H) = L^{\gamma/\nu} \tilde{\mathcal{X}}(L^{1/\nu}t, L^{(\beta+\gamma)/\nu}H). \quad (1.77)$$

Αντίστοιχα, με δύο φορές παραγωγή της ελεύθερης ενέργειας ως προς τη θερμοκρασία, προκύπτει η ειδική θερμότητα ανά δομικό λίθο

$$C/N \equiv c(t, H) = L^{\alpha/\nu} \tilde{\mathcal{C}}(L^{1/\nu}t, L^{(\beta+\gamma)/\nu}H). \quad (1.78)$$

Στην περίπτωση όπου  $H = 0$ , οι σχέσεις κλιμάκωσης πεπερασμένου μεγέθους για τα βασικά θερμοδυναμικά μεγέθη δίνονται από τις σχέσεις

$$m = L^{-\beta/\nu} \tilde{\mathcal{M}}(L^{1/\nu}t) \quad (1.79)$$

$$\chi/N = L^{\gamma/\nu} \tilde{\mathcal{X}}(L^{1/\nu}t) \quad (1.80)$$

$$c = L^{\alpha/\nu} \tilde{\mathcal{C}}(L^{1/\nu}t). \quad (1.81)$$

Οι συναρτήσεις  $\tilde{\mathcal{M}}$ ,  $\tilde{\mathcal{X}}$  και  $\tilde{\mathcal{C}}$  ονομάζονται συναρτήσεις κλιμάκωσης (scaling functions) και έχουν την ξεχωριστή ιδιότητα να είναι σχεδόν ανεξάρτητες από το μέγεθος του συστήματος υπό μελέτη. Σύμφωνα με την προηγούμενη ανάλυση, εάν οι διάφορες θερμοδυναμικές ποσότητες απεικονιστούν σε λογαριθμικούς (log-log) άξονες συναρτήσεων του μεγέθους  $L$  του συστήματος, θα πρέπει να προκύψουν ευθείες γραμμές, οι κλίσεις των οποίων θα δίνουν εκτιμήσεις των κρίσιμων εκθετών.

Η μέθοδος της κλιμάκωσης πεπερασμένου μεγέθους στηρίζεται στον ακριβή προσδιορισμό της θέσης και της τιμής του μεγίστου κάποιας θερμοδυναμικής ποσότητας π.χ. μαγνητικής επιδεκτικότητας για διάφορα μεγέθη  $L$  του συστήματος. Σε ένα πεπερασμένο

σύστημα, η θέση της κορυφής αυτής αντιστοιχεί στην ψευδοκρίσιμη θερμοκρασία που παρουσιάζει ακρότατο η αντίστοιχη συνάρτηση κλιμάκωσης ( $\tilde{\mathcal{X}}(L^{1/\nu}t)$ ), σύμφωνα με τη σχέση

$$\left. \frac{d\tilde{\mathcal{X}}(q_t)}{dq_t} \right|_{q_t=q_t^*} = 0, \quad q_t = L^{1/\nu}t. \quad (1.82)$$

Επομένως, η σχέση που εκφράζει την κλιμάκωση των ψευδοκρίσιμων θερμοκρασιών, προκύπτει

$$T_L^* = T_C + uL^{-1/\nu}, \quad u = q_t^*T_C. \quad (1.83)$$

Σημειώνεται σε αυτό το σημείο ότι οι σχέσεις (1.79), (1.80), (1.81) και (1.83), ισχύουν μόνο για αρκούντως μεγάλα συστήματα και για θερμοκρασίες αρκετά κοντά στην κρίσιμη. Σε περίπτωση που το υπό μελέτη σύστημα είναι μικρό, πρέπει να συμπεριληφθούν διορθώσεις στις εκφράσεις αυτές της γενικής μορφής [16–18]

$$\sim (1 + bL^{-w} + \dots). \quad (1.84)$$

Όπως γίνεται προφανές από τις παραπάνω σχέσεις, ο υπολογισμός τόσο των κρίσιμων εκθετών, όσο και της κρίσιμης θερμοκρασίας, απαιτεί ακριβή προσδιορισμό του κρίσιμου εκθέτη  $\nu$ . Ο υπολογισμός του τελευταίου, στα πλαίσια μιας προσομοίωσης Monte Carlo, αποτελούσε για χρόνια πρόκληση εξαιτίας της έλλειψης θερμοδυναμικών μεγεθών που να επιτρέπουν τον απευθείας υπολογισμό του. Όπως έδειξαν όμως ο K. Binder [4] και οι A. M. Ferrenberg και D. P. Landau [16], απευθείας εκτιμήσεις του κρίσιμου εκθέτη  $\nu$ , μπορούν να πραγματοποιηθούν μέσω

- της κλιμάκωσης του μεγίστου της κλίσης του 4<sup>ης</sup> τάξης συσσωρευτή (σχέση (1.11)):

$$\left. \frac{\partial U_4}{\partial \beta} \right|_{\max} \sim L^{1/\nu}, \quad (1.85)$$

- της κλιμάκωσης του μεγίστου των λογαριθμικών παραγώγων της  $k$ -ροπής της παραμέτρου τάξης:

$$\left. \frac{\partial \ln(M^k)}{\partial \beta} \right|_{\max} \sim L^{1/\nu}. \quad (1.86)$$

Οι προσομοιώσεις Monte Carlo με τη βοήθεια κατάλληλων υπολογιστικών τεχνικών, αποτελούν τα πλέον βασικά εργαλεία για τη μελέτη της κλιμάκωσης των θερμοδυναμικών μεγεθών και τη μετατόπιση των ψευδοκρίσιμων θερμοκρασιών. Τα τελευταία, σε

συνδυασμό με τη θεωρία κλιμάκωσης πεπερασμένου μεγέθους, μπορούν να παρέχουν μια ολοκληρωμένη εικόνα της κρίσιμης συμπεριφοράς, με ακριβή προσδιορισμό των κρίσιμων εκθετών και της κρίσιμης θερμοκρασίας μετάβασης.

# Κεφάλαιο 2

## Μελέτη του Σιδηρομαγνήτη Heisenberg στη Θεωρία Μέσου Πεδίου

---

### 2.1 Η Αλληλεπίδραση Ανταλλαγής και η Χαμιλτονιανή Heisenberg-Dirac

Η πρώτη προσπάθεια για να δοθεί φυσική ερμηνεία στο φαινόμενο της αυθόρμητης μαγνήτισης και στην εκδήλωση του σιδηρομαγνητισμού, πραγματοποιήθηκε το 1907 από τον P. Weiss. Ο τελευταίος υπέθεσε ότι σε μια σιδηρομαγνητική περιοχή, κάθε μαγνητική ροπή αλληλεπιδρά με ένα “μοριακό” πεδίο (molecular field) που οφείλεται σε όλες τις γειτονικές μαγνητικές ροπές. Παρά το γεγονός ότι η θεωρία του Weiss εξηγούσε με επιτυχία τις βασικές ιδιότητες ενός σιδηρομαγνήτη, εισήγαγε φαινομενολογικά την έννοια του μοριακού πεδίου, αφού η έντασή του δεν μπορούσε να εξηγηθεί στα πλαίσια της κλασικής φυσικής. Τυπικά, οι ενεργειακές διαφορές που οφείλονται στην κλασική αλληλεπίδραση διπόλου-διπόλου είναι της τάξης των

$$\frac{\vec{\mu}_1 \vec{\mu}_2}{r^3} \approx \frac{\mu_B^2}{\alpha_0^3} \approx 10^{-4} \text{ eV}, \quad (2.1)$$

όπου  $\mu_B$  η μαγνητόνη και  $\alpha_0$  η ακτίνα του Bohr αντίστοιχα. Οι ενεργειακές αυτές διαφορές αντιστοιχούν σε θερμοκρασίες μόλις  $\approx 1$  K. Ωστόσο, τα περισσότερα σιδηρομαγνητικά υλικά παρουσιάζουν μακροσκοπική τάξη σε θερμοκρασίες  $\approx 10^2$ - $10^3$  K.

Πρώτος ο W. Heisenberg κατανόησε ότι η φύση των μαγνητικών αλληλεπιδράσεων έχει αποκλειστικά κβαντική προέλευση και είναι αποτέλεσμα της συνήθους ηλεκτροστατικής αλληλεπίδρασης Coulomb σε συνδυασμό με την απαγορευτική αρχή του Pauli. Η προκύπτουσα ενεργός αλληλεπίδραση δεν έχει κλασικό ανάλογο και ονομάζεται *αλληλεπίδραση ανταλλαγής* (exchange interaction) [9].

Το 1926, ο Heisenberg και σχεδόν ανεξάρτητα ο Dirac, πρότειναν μία Χαμιλτονιανή για την περιγραφή ενός μαγνητικού συστήματος με τη χρήση διανυσματικών τελεστών του spin  $\vec{S}_i$ . Η Χαμιλτονιανή αυτή, είναι γνωστή και ως Χαμιλτονιανή Heisenberg-Dirac και δίνεται από τη σχέση

$$\hat{\mathcal{H}} = - \sum_{i,j} \mathcal{J}_{i,j} \hat{S}_i \hat{S}_j. \quad (2.2)$$

Με  $\mathcal{J}_{i,j}$  συμβολίζεται το ολοκλήρωμα ή αλληλεπίδραση ανταλλαγής και είναι μια συνάρτηση πραγματικών τιμών που εξαρτάται από τα πλεγματικά σημεία  $i, j$  μόνο μέσω της διαφοράς  $(\vec{R}_i - \vec{R}_j)$ . Επιπλέον, ικανοποιεί ορισμένες απλές ιδιότητες συμμετρίας [19]:

$$\mathcal{J}_{i,j}^* = \mathcal{J}_{j,i} = \mathcal{J}_{i,j} \quad \text{και} \quad \mathcal{J}_{i,i} = 0. \quad (2.3)$$

Με  $\hat{S}_i$  ( $\vec{S}_j$ ) συμβολίζονται οι διανυσματικοί τελεστές του spin για τις πλεγματικές θέσεις  $i(j)$ . Οι τελευταίοι ικανοποιούν τις γνωστές μεταθετικές σχέσεις

$$[\hat{S}^k, \hat{S}^l] = i\hbar \varepsilon_{klm} \hat{S}^m. \quad (2.4)$$

Από τη Χαμιλτονιανή της σχέσης (2.2) γίνεται φανερό ότι για  $\mathcal{J}_{i,j} > 0$ , ευνοείται ο παράλληλος προσανατολισμός των spin στη θεμελιώδη κατάσταση (σιδηρομαγνητικό σύστημα), ενώ για  $\mathcal{J}_{i,j} < 0$ , ο αντιπαράλληλος προσανατολισμός (αντισιδηρομαγνητικό σύστημα).

Παρά το γεγονός ότι η Χαμιλτονιανή Heisenberg αποτελεί προσέγγιση του κατά πολύ συνθετότερου προβλήματος κβαντομηχανικής πολλών σωμάτων, παραμένει ένα εξαιρετικά δύσκολο πρόβλημα το οποίο είναι ακόμα και σήμερα μη ακριβώς επιλύσιμο σε περισσότερες από μία διαστάσεις. Για το λόγο αυτό συχνά πραγματοποιούνται ορισμένες υποθέσεις, οι οποίες απλοποιούν περεταίρω το πρόβλημα και θα χρησιμοποιηθούν στην παρούσα εργασία.

### 2.1.1 Ορισμός του Κλασσικού Σιδηρομαγνήτη Heisenberg

Πρώτη προσέγγιση στη Χαμιλτονιανή Heisenberg αποτελεί η υπόθεση ότι το ολοκλήρωμα ανταλλαγής λαμβάνει την ίδια, μη αμελητέα τιμή, μόνο για πλησιέστερα γειτονικά spin. Η τελευταία υπόθεση μπορεί να εκφραστεί μαθηματικά μέσω της σχέσης

$$\mathcal{J}_{i,j} = \begin{cases} J & , \text{ εάν } i, j \text{ πλησιέστεροι γείτονες} \\ 0 & , \text{ αλλιώς.} \end{cases} \quad (2.5)$$

Επιπλέον, οι διανυσματικοί τελεστές του spin αντικαθίστανται από κλασικά διανύσματα των οποίων οι συνιστώσες λαμβάνουν συνεχείς τιμές εντός μιας σφαίρας μοναδιαίου μέτρου:

$$\begin{aligned} \hat{S}^i \text{ με } [\hat{S}^k, \hat{S}^l] &= i\hbar \varepsilon_{klm} \hat{S}^m \\ \Downarrow \\ \vec{S} \text{ με } (S^x)^2 + (S^y)^2 + (S^z)^2 &= 1. \end{aligned} \quad (2.6)$$

Σύμφωνα με τις παραπάνω προσεγγίσεις, η Χαμιλτονιανή του κλασικού σιδηρομαγνητικού προτύπου Heisenberg γράφεται στη μορφή

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S}_i \vec{S}_j \quad \text{με } J > 0, \quad (2.7)$$

όπου με  $\langle i, j \rangle$  συμβολίζεται η άθροιση στους πλησιέστερους γείτονες.

Τέλος, αξίζει να σημειωθεί ότι το κλασικό πρότυπο Heisenberg ανήκει στη γενικότερη κατηγορία κλασικών προτύπων  $O(n)$ , τα οποία διαφοροποιούνται ανάλογα με τη διάσταση  $n = 1, 2, 3$  του spin [20]. Τα αντιπροσωπευτικά πρότυπα της γενικότερης ομάδας  $O(n)$  είναι:

$$\begin{aligned} O(1) &\rightarrow \text{πρότυπο Ising} \\ O(2) &\rightarrow \text{πρότυπο } XY \\ O(3) &\rightarrow \text{πρότυπο Heisenberg.} \end{aligned} \quad (2.8)$$

## 2.2 Προσέγγιση Μέσου Πεδίου

Η προσέγγιση μέσου πεδίου για τα μαγνητικά συστήματα πρωτοδιατυπώθηκε από τον Weiss (1907), γι' αυτό στη βιβλιογραφία συχνά αναφέρεται ως θεωρία του Weiss για το σιδηρομαγνητισμό. Η τελευταία, μαζί με την παλιότερη θεωρία του Van der Waals (1871) για τα ρευστά, σήμερα ονομάζονται θεωρίες μέσου πεδίου και εντάσσονται στη γενικότερη θεωρία μέσου πεδίου για την περιγραφή των συνεχών αλλαγών φάσης του L. D. Landau. Στην ανάλυση που ακολουθεί, με αφετηρία το κλασικό σιδηρομαγνητικό πρότυπο Heisenberg και χωρίς καμιά φαινομενολογική υπόθεση για το “μοριακό πεδίο” του Weiss, προκύπτουν ποιοτικά τα βασικά χαρακτηριστικά του σιδηρομαγνητισμού καθώς και η κρίσιμη συμπεριφορά.

Ένα σιδηρομαγνητικό σύστημα με  $N$  εντοπισμένες μαγνητικές ροπές σε εξωτερικό μαγνητικό πεδίο  $\vec{H}$ , μπορεί να περιγραφεί μέσω του κλασικού προτύπου Heisenberg σύμφωνα με τη σχέση<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Σημειώνεται ότι στο εξωτερικό πεδίο  $\vec{H}$  έχουν ενσωματωθεί οι μονάδες της μαγνητικής ροπής ( $\mu_B$ ), ούτως ώστε το “μαγνητικό πεδίο” να έχει διαστάσεις ενέργειας.

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S}_i \vec{S}_j - \vec{H} \sum_{i=1}^N \vec{S}_i. \quad (2.9)$$

Προκειμένου να υπολογιστεί η συνάρτηση επιμερισμού του συστήματος θα χρησιμοποιηθεί η προσέγγιση μέσου πεδίου. Ο όρος  $\vec{S}_i \vec{S}_j$  στο άθροισμα της σχέσης (2.9) μπορεί να γραφτεί συναρτήσει της μέσης τιμής και της διακυμάνσης ως

$$\vec{S}_i \vec{S}_j = (\langle \vec{S}_i \rangle + \delta \vec{S}_i)(\langle \vec{S}_j \rangle + \delta \vec{S}_j) \Leftrightarrow \quad (2.10)$$

$$\vec{S}_i \vec{S}_j = \langle \vec{S}_i \rangle \langle \vec{S}_j \rangle + \langle \vec{S}_i \rangle \delta \vec{S}_j + \langle \vec{S}_j \rangle \delta \vec{S}_i + \delta \vec{S}_i \delta \vec{S}_j. \quad (2.11)$$

Με  $\delta \vec{S}_i$  και  $\delta \vec{S}_j$  συμβολίζονται οι διακυμάνσεις των spin των πλεγματικών σημείων  $i$  και  $j$  αντίστοιχα:

$$\delta \vec{S}_i = \vec{S}_i - \langle \vec{S}_i \rangle, \quad \delta \vec{S}_j = \vec{S}_j - \langle \vec{S}_j \rangle. \quad (2.12)$$

Στην προσέγγιση μέσου πεδίου (mean field approximation) αγνοούνται οι αλληλεπιδράσεις των διακυμάνσεων όπως εκφράζονται από τον τελευταίο όρο της σχέσης (2.11). Επομένως το εσωτερικό γινόμενο  $\vec{S}_i \vec{S}_j$  γράφεται:

$$\vec{S}_i \vec{S}_j \approx \vec{S}_i \langle \vec{S}_j \rangle + \vec{S}_j \langle \vec{S}_i \rangle - \langle \vec{S}_i \rangle \langle \vec{S}_j \rangle. \quad (2.13)$$

Επιπλέον, εάν θεωρηθεί ότι κάθε πλεγματικό σημείο είναι πανομοιότυπο, δηλαδή  $\langle \vec{S}_i \rangle = \langle \vec{S}_j \rangle = \langle \vec{S} \rangle$ ,  $\forall i, j \in [1, N]$ , η σχέση (2.13) γράφεται

$$\vec{S}_i \vec{S}_j \approx (\vec{S}_i + \vec{S}_j) \langle \vec{S} \rangle - \langle \vec{S} \rangle^2. \quad (2.14)$$

Σύμφωνα με τα προαναφερθέντα, η Χαμιλτονιανή της σχέσης (2.9) στην προσέγγιση μέσου πεδίου, γράφεται ως

$$\mathcal{H}_{MF} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \left[ (\vec{S}_i + \vec{S}_j) \langle \vec{S} \rangle - \langle \vec{S} \rangle^2 \right] - \vec{H} \sum_{i=1}^N \vec{S}_i. \quad (2.15)$$

Επιπροσθέτως, το άθροισμα στα πλησιέστερα γειτονικά spin μπορεί να εκφραστεί σύμφωνα με το συμβολισμό

$$\sum_{\langle i,j \rangle} \rightarrow \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j \in nn(i)}^q. \quad (2.16)$$

Ο παράγοντας  $1/2$  εισάγεται για να μη μετράται διπλά η αλληλεπίδραση κάθε πλεγματικού σημείου με τα γειτονικά, ενώ το άθροισμα  $\sum_{j \in nn(i)}^q$  αναφέρεται στους πλησιέστερους γείτονες (nearest neighbours) του  $i$ -οστού πλεγματικού σημείου. Σημειώνεται ότι



με  $q$  συμβολίζεται ο αριθμός σύνταξης του υπό μελέτη πλέγματος και ισούται με τον αριθμό των πλησιέστερων γειτόνων. Υιοθετώντας τον παραπάνω συμβολισμό, η Χαμιλτονιανή της σχέσης (2.15) γράφεται

$$\mathcal{H}_{MF} = -\frac{J}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j \in nn(i)}^q \left[ (\vec{S}_i + \vec{S}_j) \langle \vec{S} \rangle - \langle \vec{S} \rangle^2 \right] - \vec{H} \sum_{i=1}^N \vec{S}_i = \quad (2.17)$$

$$= -\frac{J}{2} \langle \vec{S} \rangle \sum_{i=1}^N \sum_{j \in nn(i)}^q (\vec{S}_i + \vec{S}_j) + \frac{J}{2} \langle \vec{S} \rangle^2 \sum_{i=1}^N \sum_{j \in nn(i)}^q - \vec{H} \sum_{i=1}^N \vec{S}_i \Leftrightarrow \quad (2.18)$$

$$\mathcal{H}_{MF} = -Jq \langle \vec{S} \rangle \sum_{i=1}^N \vec{S}_i + \frac{JNq}{2} \langle \vec{S} \rangle^2 - \vec{H} \sum_{i=1}^N \vec{S}_i \quad (2.19)$$

Εάν οριστεί ως

$$\vec{H}_{eff} = Jq \langle \vec{S} \rangle + \vec{H}, \quad (2.20)$$

η Χαμιλτονιανή μπορεί να γραφτεί σε συμπαγή μορφή σύμφωνα με τη σχέση

$$\mathcal{H}_{MF} = -\vec{H}_{eff} \sum_{i=1}^N \vec{S}_i + \frac{JNq}{2} \langle \vec{S} \rangle^2. \quad (2.21)$$

Συμπερασματικά, η αγνόηση της αλληλεπίδρασης των διακυμάνσεων των spin σύμφωνα με την προσέγγιση μέσου πεδίου, οδήγησε στην αποσύζευξη των όρων  $\vec{S}_i \vec{S}_j$ , με αποτέλεσμα η Χαμιλτονιανή του σιδηρομαγνητικού συστήματος να μη διαφέρει με αυτή ενός παραμαγνητικού<sup>2</sup> υπό την επίδραση ενός εξωτερικού πεδίου  $\vec{H}_{ext}$ . Η διαφορά στην υπό μελέτη περίπτωση έγκειται στο γεγονός ότι κάθε πλεγματοειδές spin του συστήματος βρίσκεται υπό την επίδραση ενός “ενεργού” μαγνητικού πεδίου  $\vec{H}_{eff}$ , αποτελούμενου από το εξωτερικό πεδίο  $\vec{H}$  και ενός “μέσου” πεδίου  $\vec{H}_{MF} = qJ \langle \vec{S} \rangle$  που οφείλεται στα πλησιέστερα γειτονικά πλεγματοειδή spin. Επιπλέον, η Χαμιλτονιανή στην προσέγγιση μέσου πεδίου περιέχει την άγνωστη μεταβλητή  $\langle \vec{S} \rangle$ . Στην ανάλυση που ακολουθεί, θεωρείται απλά παράμετρος του προβλήματος χωρίς να επηρεάζεται ο υπολογισμός της συνάρτησης επιμερισμού. Σημειώνεται τέλος, ότι ο επιπρόσθετος όρος  $-JNq \langle \vec{S} \rangle^2 / 2$  στη Χαμιλτονιανή της σχέσης (2.21), απλά μετατοπίζει τις δυνατές τιμές της ενέργειας χωρίς να επηρεάζει τη στατιστική συμπεριφορά του συστήματος.

<sup>2</sup> Η Χαμιλτονιανή ενός παραμαγνητικού συστήματος, αποτελούμενο από  $N$  μη αλληλεπιδρούσες μαγνητικές ροπές, υπό την επίδραση ενός εξωτερικού πεδίου  $\vec{H}_{ext}$ , περιγράφεται σύμφωνα με τη σχέση

$$\mathcal{H}_{para} = -\vec{H}_{ext} \sum_{i=1}^N \vec{S}_i.$$

### 2.3 Υπολογισμός της Συνάρτησης Επιμερισμού

Για ένα ισότροπο σύστημα, του οποίου ο άξονας  $z$  του συστήματος αναφοράς τοποθετείται στη διεύθυνση του εξωτερικού πεδίου  $\vec{H}$ , ισχύει

$$\langle S_i^x \rangle = \langle S_i^y \rangle = 0 \quad \text{και} \quad \langle S_i^z \rangle = \sigma \neq 0, \quad \forall i \in [1, N]. \quad (2.22)$$

Επομένως και το “ενεργό” πεδίο  $\vec{H}_{eff}$  βρίσκεται στη διεύθυνση  $z$ . Σύμφωνα με τις παρατηρήσεις αυτές, η Χαμιλτονιανή της σχέσης (2.21) γίνεται

$$\mathcal{H}_{MF} = -H_{eff}S \sum_{i=1}^N \cos(\theta_i) + \frac{JNq}{2}\sigma^2, \quad (2.23)$$

με  $\theta_i$ , τη γωνία που σχηματίζει το spin του  $i$ -οστού πλεγματοειδούς σημείου με το μαγνητικό πεδίο  $\vec{H}_{eff}$ . Με  $S$ , συμβολίζεται το μέτρο του διανύσματος  $\vec{S}$  που για το κλασικό πρότυπο Heisenberg είναι  $S = 1$ . Ωστόσο, για λόγους πληρότητας διατηρείται ο συμβολισμός στην ανάλυση που ακολουθεί.

Οι δυνατές μικροκαταστάσεις του συστήματος ορίζονται κατά συνεχή τρόπο σύμφωνα με τους δυνατούς συνδυασμούς των γωνιών που σχηματίζουν τα spin με τον άξονα του πεδίου  $H_{eff}$  (άξονας  $z$ ). Η συνάρτηση επιμερισμού του συστήματος δίνεται από τη σχέση

$$\mathcal{Z}_{MF} = \int \{d\Omega\} \exp(-\beta\mathcal{H}_{MF}) \Leftrightarrow \quad (2.24)$$

$$\mathcal{Z}_{MF} = e^{-\frac{\beta J N q \sigma^2}{2}} \int d\Omega_1 \int d\Omega_2 \dots \int d\Omega_N \prod_{i=1}^N \exp(\beta H_{eff} S \cos(\theta_i)). \quad (2.25)$$

Όμως, οι δείκτες στα παραπάνω ολοκληρώματα είναι βουβοί, αφού η ολοκλήρωση πραγματοποιείται σε όλες τις δυνατές τιμές της στερεάς γωνίας  $\Omega_i \forall i \in [1, N]$ . Συνεπώς, κάθε ένα ολοκλήρωμα είναι πανομοιότυπο, με αποτέλεσμα η συνάρτηση επιμερισμού να δίνεται από τη σχέση

$$\mathcal{Z}_{MF} = e^{-\frac{\beta N J q \sigma^2}{2}} Z^N \quad (2.26)$$

με

$$Z = \int d\Omega \exp(\beta H_{eff} S \cos(\theta)). \quad (2.27)$$

Η συνάρτηση επιμερισμού του κάθε υποσυστήματος-πλεγματοειδούς spin υπολογίζεται απλά:

$$Z = \int_0^\pi \int_0^{2\pi} d\theta d\phi \sin(\theta) \exp(\beta H_{\text{eff}} S \cos(\theta)) \Leftrightarrow \quad (2.28)$$

$$Z = 4\pi \frac{\sinh(\beta H_{\text{eff}} S)}{\beta H_{\text{eff}} S}. \quad (2.29)$$

Επομένως η συνάρτηση επιμερισμού για το κλασικό πρότυπο Heisenberg, στην προσέγγιση μέσου πεδίου προκύπτει

$$\mathcal{Z}_{MF} = e^{-\frac{\beta N J q \sigma^2}{2}} \left( 4\pi \frac{\sinh(\beta S (J q \sigma + H))}{\beta S (J q \sigma + H)} \right)^N. \quad (2.30)$$

## 2.4 Αυτοσυνεπής Εξίσωση για τη Μαγνήτιση

Η μαγνήτιση του συστήματος δίνεται από τη σχέση

$$\langle M \rangle = - \left( \frac{\partial F}{\partial H} \right)_T = - \frac{1}{\beta} \frac{\partial \ln(\mathcal{Z}_{MF})}{\partial H} \Leftrightarrow \quad (2.31)$$

$$\langle M \rangle = - \frac{1}{\beta} \frac{\partial \ln(\mathcal{Z}_{MF})}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial H}. \quad (2.32)$$

Αντικαθιστώντας τη συνάρτηση επιμερισμού της σχέσης (2.30), προκύπτει η μαγνήτιση του συστήματος

$$\langle M \rangle = N S \left( \coth(x) - \frac{1}{x} \right), \quad \text{με} \quad x = \beta S (J q \sigma + H). \quad (2.33)$$

Σημειώνεται σε αυτό το σημείο ότι η συνάρτηση

$$\mathcal{L}(x) = \coth(x) - \frac{1}{x}, \quad (2.34)$$

είναι γνωστή στη βιβλιογραφία ως συνάρτηση Langevin. Η τελευταία προκύπτει ως κλασικό όριο της συνάρτησης Brillouin που περιγράφει την εξάρτηση της μαγνήτισης από τη θερμοκρασία για ένα παραμαγνητικό σύστημα.

Από την άλλη πλευρά, εφόσον έχει γίνει η υπόθεση ότι η “παράμετρος εισόδου”  $\sigma$  είναι γνωστή, η μαγνήτιση του συστήματος δίνεται από τη σχέση

$$\langle M \rangle = \left\langle \sum_{i=1}^N S_i^z \right\rangle = \sigma \sum_{i=1}^N = N \sigma. \quad (2.35)$$

Η επιβολή της ισότητας για τη “μαγνήτιση εισόδου”  $N\sigma$  (σχέση (2.35)) και τη “μαγνήτιση εξόδου”  $N\mathcal{L}(x)$  (σχέση (2.33)), οδηγεί σε μια αυτοσυνεπή (self consistent) εξίσωση για τη μαγνήτιση του συστήματος που δίνεται από τη σχέση

$$\sigma = S\mathcal{L}(\beta S(Jq\sigma + H)). \quad (2.36)$$

## 2.5 Κρίσιμη Συμπεριφορά στην Προσέγγιση Μέσου Πεδίου

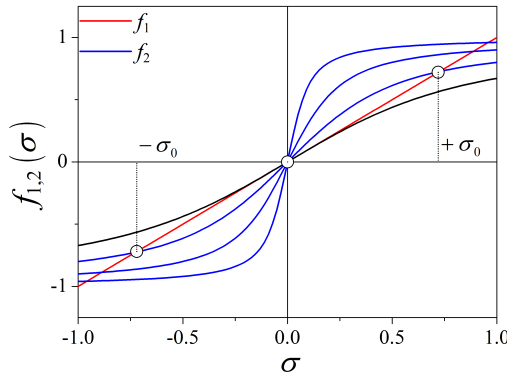
### 2.5.1 Κρίσιμη Θερμοκρασία Μετάβασης

Με απομάκρυνση του εξωτερικού πεδίου ( $H = 0$ ), η αυτοσυνεπής εξίσωση για τη μαγνήτιση του συστήματος γίνεται

$$\sigma = S\mathcal{L}(\beta S J q \sigma). \quad (2.37)$$

Η παραπάνω εξίσωση μπορεί να επιλυθεί μόνο αριθμητικά για κάθε θερμοκρασία. Ωστόσο, μπορούν να εξαχθούν ορισμένα ποιοτικά χαρακτηριστικά μέσω γραφικής επίλυσης αυτής (Εικόνα 2.1). Ορίζονται οι συναρτήσεις

$$f_1(\sigma) = \sigma \quad \text{και} \quad f_2(\sigma) = S\mathcal{L}(\beta S J q \sigma). \quad (2.38)$$



**Εικόνα 2.1:** Γραφική επίλυση της εξίσωσης αυτοσυνέπειας (σχέση (2.37)) απουσία εξωτερικού πεδίου με τη βοήθεια των συναρτήσεων  $f_1(\sigma)$  και  $f_2(\sigma)$ . Με  $\pm\sigma_0$  απεικονίζονται οι λύσεις “σπασμένης” συμμετρίας, ενώ με μαύρο χρώμα η οριακή περίπτωση για  $T = T_C$ .

Όπως φαίνεται στην Εικόνα 2.1, οι συναρτήσεις  $f_1(\sigma)$  και  $f_2(\sigma)$  έχουν πάντα ένα κοινό σημείο τομής, το  $\sigma = 0$ , που αντιστοιχεί στην παραμαγνητική φάση. Το σύστημα χαρακτηρίζεται από πλήρη περιστροφική συμμετρία, με αποτέλεσμα να μην υπάρχει προτιμητέος προσανατολισμός.

Από την άλλη πλευρά, υπάρχει μία θερμοκρασία  $T_C$  κάτω από την οποία οι συναρτήσεις  $f_1(\sigma)$  και  $f_2(\sigma)$  εμφανίζουν μη μηδενικά σημεία τομής, τα  $\sigma = \pm\sigma_0$ . Οι λύσεις αυτές αντιστοιχούν σε αντίθετες αυθόρμητες μαγνητίσεις και αποτελούν τις λύσεις “σπασμένης συμμετρίας” της σιδηρομαγνητικής φάσης. Η επιλογή μεταξύ των θερμοδυναμικά ισοδύναμων λύσεων<sup>3</sup>  $\pm\sigma_0$  γίνεται τυχαία και το σύστημα εκδηλώνει μακροσκοπική τάξη απουσία εξωτερικού πεδίου. Η συνθήκη εκδήλωσης αυθόρμητης μαγνήτισης μπορεί να εκφραστεί μαθηματικά μέσω της ανισότητας

$$\left. \frac{df_1(\sigma)}{d\sigma} \right|_{\sigma=0} < \left. \frac{df_2(\sigma)}{d\sigma} \right|_{\sigma=0} \Leftrightarrow \quad (2.39)$$

$$1 < \beta S^2 J q \lim_{\sigma \rightarrow 0} \left( -\frac{1}{\sinh^2(\beta S J q \sigma)} + \frac{1}{(\beta S J q \sigma)^2} \right) \Leftrightarrow \quad (2.40)$$

$$\frac{\beta S^2 J q}{3} > 1. \quad (2.41)$$

Σημειώνεται ότι για τον υπολογισμό της παραγώγου της συνάρτησης Langevin στο  $\sigma = 0$ , χρησιμοποιήθηκε το ανάπτυγμα

$$\lim_{x \rightarrow 0} \frac{1}{\sinh^2(x)} \approx \frac{1}{\left(x + \frac{x^3}{3!} + \mathcal{O}(x^5)\right)^2} \approx \frac{1}{x^2} - \frac{1}{3}. \quad (2.42)$$

Στην περίπτωση της ισότητας, προκύπτει η κρίσιμη θερμοκρασία μετάβασης σύμφωνα με τη σχέση

$$T_C = \frac{J q S^2}{3 k_B}. \quad (2.43)$$

Όπως είναι εμφανές, η θερμοκρασία μετάβασης στην προσέγγιση μέσου πεδίου εξαρτάται μόνο από το μέγεθος της αλληλεπίδρασης ανταλλαγής  $J$  και τον αριθμό σύνταξης  $q$  του εκάστοτε πλέγματος. Έτσι, η θερμοκρασία μετάβασης για ένα απλό κυβικό (simple cubic) πλέγμα προκύπτει  $T_C^{\text{sc}} = 2(J/k_B)$ , ενώ για ένα χωροκεντρωμένο (base centered cubic) και ένα εδωροκεντρωμένο (face centered cubic),  $T_C^{\text{bcc}} = 2.6(J/k_B)$  και  $T_C^{\text{fcc}} = 4(J/k_B)$  αντίστοιχα<sup>4</sup>.

<sup>3</sup>Στην πραγματικότητα το σύστημα πρέπει να επιλέξει και μεταξύ της παραμαγνητικής λύσης  $\sigma = 0$ , αλλά αποδεικνύεται στα πλαίσια της θεωρίας Landau ότι η λύση αυτή δεν ελαχιστοποιεί την ελεύθερη ενέργεια.

<sup>4</sup>Σημειώνεται ότι για το sc, ο αριθμός σύνταξης είναι  $q = 6$ , ενώ για τα bcc και fcc,  $q = 8$  και  $q = 12$  αντίστοιχα.

### 2.5.2 Θερμοδυναμικά Μεγέθη και Κρίσιμοι Εκθέτες

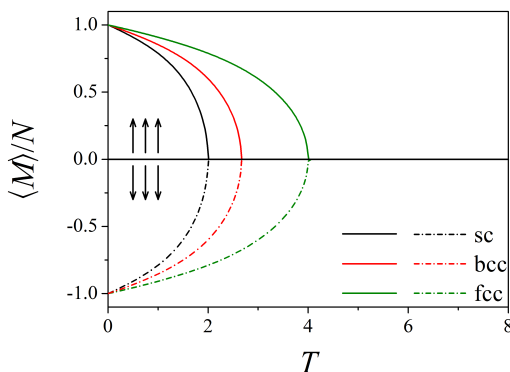
Η μορφή της σχέσης (2.37) δεν επιτρέπει τον αναλυτικό προσδιορισμό των θερμοδυναμικών μεγεθών σε οποιαδήποτε θερμοκρασία. Για το λόγο αυτό, αρχικά πραγματοποιήθηκε αριθμητικός υπολογισμός της εξίσωσης αυτοσυνέπειας

$$\sigma(T) - S \coth\left(\frac{S J q \sigma(T)}{k_B T}\right) + \frac{k_B T}{J q \sigma(T)} = 0, \quad (2.44)$$

από την οποία προσδιορίζεται η θερμοκρασιακή εξάρτηση της μαγνήτισης ανά spin,  $\langle M \rangle(T)/N = \sigma(T)$ . Στα πλαίσια της προσέγγισης μέσου πεδίου όλες οι θερμοδυναμικές ποσότητες είναι συναρτήσεις της μαγνήτισης και κατά συνέπεια, αφηρητική εξίσωση για τον προσδιορισμό τους αποτελεί η σχέση (2.44). Σημειώνεται ότι οι αριθμητικοί υπολογισμοί πραγματοποιήθηκαν σε κατάλληλο σύστημα μονάδων όπου  $k_B = 1$ , ενώ η αλληλεπίδραση ανταλλαγής τέθηκε  $J = 1$ . Τέλος, αξίζει να τονιστεί ότι ο προσδιορισμός της κρίσιμης συμπεριφοράς δεν προϋποθέτει αριθμητική επίλυση της σχέσης αυτοσυνέπειας, όπως θα φανεί στην ανάλυση που ακολουθεί.

### Μαγνήτιση

Στην Εικόνα 2.2 παρουσιάζεται η μαγνήτιση ανά spin  $\langle M \rangle/N$  όπως προέκυψε από την αριθμητική επίλυση της εξίσωσης (2.44).



**Εικόνα 2.2:** Μαγνήτιση ανά spin στην προσέγγιση μέσου πεδίου, όπως προσδιορίστηκε αριθμητικά από την επίλυση της εξίσωσης (2.44). Με μαύρο, κόκκινο και πράσινο χρώμα απεικονίζονται τα αποτελέσματα για απλό (sc), χωροκεντρωμένο (bcc) και εδωκεντρωμένο (fcc) κυβικό πλέγμα αντίστοιχα. Με βέλη  $\uparrow\uparrow\uparrow$  σημειώνονται οι θετικές λύσεις “σπασμένης” συμμετρίας, ενώ με  $\downarrow\downarrow\downarrow$  οι αρνητικές λύσεις, σε αντιστοιχία με τη γραφική επίλυση της Εικόνας 2.1.

Η κρίσιμη συμπεριφορά της μαγνήτισης προκύπτει στο όριο  $T \rightarrow T_C^-$ , για το οποίο ισχύει ότι  $\sigma \rightarrow 0^+$ . Λαμβάνοντας το ανάπτυγμα της συνάρτησης Langevin

$$\lim_{x \rightarrow 0} \mathcal{L}(x) \approx \frac{x}{3} - \frac{x^3}{45} + \mathcal{O}(x^5), \quad (2.45)$$

η αυτοσυνεπής εξίσωση για τη μαγνήτιση γίνεται

$$\sigma \approx \frac{pS}{3} \sigma - \frac{p^3 S}{45} \sigma^3, \quad \text{με } p = \beta S J q. \quad (2.46)$$

Εκφράζοντας τη μεταβλητή  $p$  συναρτήσει της κρίσιμης θερμοκρασίας μετάβασης

$$p = \frac{3T_C}{TS}, \quad (2.47)$$

η σχέση (2.46) γράφεται

$$\sigma^2 = \frac{5}{3} \left( \frac{ST}{T_C} \right)^2 \left( \frac{T_c - T}{T_c} \right). \quad (2.48)$$

Χρησιμοποιώντας την ανηγμένη θερμοκρασία  $t = (T - T_C)/T_C$  (σχέση (1.18)), η κυρίαρχη συμπεριφορά της μαγνήτισης ανά spin προκύπτει

$$\sigma \sim \pm S \sqrt{\frac{5}{3}} (-t)^{1/2}, \quad T \rightarrow T_C^-. \quad (2.49)$$

Επομένως, η προσέγγιση μέσου πεδίου προβλέπει την κρίσιμη συμπεριφορά της μαγνήτισης με νόμο δύναμης που χαρακτηρίζεται από τον εκθέτη  $\beta = 1/2$ .

### **Κρίσιμη Ισόθερμος**

Για τον προσδιορισμό της κρίσιμης ισοθέρμου ( $T = T_C$ ), χρησιμοποιείται η σχέση (2.36) για μικρές τιμές του πεδίου ( $H \rightarrow 0$ ). Σύμφωνα με το ανάπτυγμα της συνάρτησης Langevin (σχέση (2.45)), η αυτοσυνεπής εξίσωση γράφεται

$$\sigma \approx S \left( \beta_C S \frac{(Jq\sigma + H)}{3} - \beta_C^3 S^3 \frac{(Jq\sigma + H)^3}{45} \right), \quad (2.50)$$

με  $\beta_C = 3/(JqS^2)$ . Κατά συνέπεια, η σχέση (2.50) γράφεται

$$\frac{H}{Jq} = \beta_C^3 S^4 \frac{(Jq\sigma + H)^3}{45}. \quad (2.51)$$

Στο όριο  $H \rightarrow 0$ , προκύπτει η κυρίαρχη συμπεριφορά της κρίσιμης ισοθέρμου

$$\sigma \sim H^{1/3}, \quad \text{για } T = T_C \text{ και } H \rightarrow 0. \quad (2.52)$$

Επομένως στην προσέγγιση μέσου πεδίου, ο εκθέτης της κρίσιμης ισοθέρμου προκύπτει  $\delta = 3$ .

### Μαγνητική Επιδεκτικότητα για $H = 0$

Η μαγνητική επιδεκτικότητα δίνεται από τη σχέση

$$\chi = \left( \frac{\partial \langle M \rangle}{\partial H} \right)_T = N \frac{\partial \sigma}{\partial H}. \quad (2.53)$$

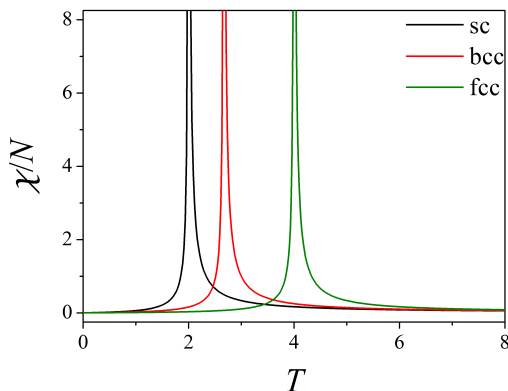
Για τον υπολογισμό της παραγώγου  $\partial \sigma / \partial H$ , χρησιμοποιείται η αυτοσυνεπής εξίσωση της σχέσης (2.36):

$$\frac{\partial \sigma}{\partial H} = \beta S^2 \mathcal{L}'(x) \left( Jq \frac{\partial \sigma}{\partial H} + 1 \right), \quad \text{με } x = \beta S(Jq\sigma + H). \quad (2.54)$$

Δεδομένου του αριθμητικού προσδιορισμού της μαγνήτισης, η μαγνητική επιδεκτικότητα προσδιορίζεται αριθμητικά (Εικόνα 2.3) για  $H = 0$ , μέσω της μερικής παραγώγου

$$\frac{\partial \sigma}{\partial H} = \frac{\beta S^2 \mathcal{L}'(x)}{1 - \beta S^2 Jq \mathcal{L}'(x)}, \quad (2.55)$$

$$\text{με } \mathcal{L}'(x) = -\frac{1}{\sinh^2(x)} + \frac{1}{x^2} \quad \text{και} \quad x = \beta S Jq \sigma. \quad (2.56)$$



**Εικόνα 2.3:** Μαγνητική επιδεκτικότητα ανά spin στην προσέγγιση μέσου πεδίου, όπως προσδιορίστηκε αριθμητικά από τις εξισώσεις (2.55) και (2.56). Με μαύρο, κόκκινο και πράσινο χρώμα απεικονίζονται τα αποτελέσματα για sc, bcc και fcc πλέγματα αντίστοιχα.

Η κρίσιμη συμπεριφορά της μαγνητικής επιδεκτικότητας προκύπτει στα όρια  $T \rightarrow T_C^-$  και  $T \rightarrow T_C^+$ . Για  $T \rightarrow T_C^-$  ισχύει ότι  $\sigma \rightarrow 0^+$ . Επιπλέον, για τον προσδιορισμό της επιδεκτικότητας του συστήματος απουσία εξωτερικού πεδίου λαμβάνεται το όριο



$H \rightarrow 0$ . Στα προαναφερθέντα όρια, η συνάρτηση Langevin αναπτύσσεται σύμφωνα με τη σχέση (2.45), επομένως η παράγωγός της προκύπτει

$$\mathcal{L}'(x) \approx \frac{1}{3} - \frac{x^2}{15} + \mathcal{O}(x^4). \quad (2.57)$$

Αντικαθιστώντας τη (2.57) στη σχέση (2.55), προκύπτει

$$\frac{\partial \sigma}{\partial H} = \lim_{H \rightarrow 0} \frac{\frac{\beta S^2}{3} \left(1 - \frac{x^2}{5}\right)}{1 - \frac{\beta S^2 J q}{3} \left(1 - \frac{x^2}{5}\right)}, \quad \text{με } x = \beta S(Jq\sigma + H). \quad (2.58)$$

Επιπροσθέτως, αν ληφθεί υπόψη η οριακή συμπεριφορά της μαγνήτισης όπως δίνεται από τη σχέση (2.48), η επιδεκτικότητα μετά από κάποια άλγεβρα προκύπτει

$$\frac{\partial \sigma}{\partial H} \approx \frac{\left(-2 + \frac{3T}{T_C}\right) S^2}{2(T_C - T) 3k_B}. \quad (2.59)$$

Δεδομένου ότι  $T = T_C(1 + t)$ , η κυρίαρχη συμπεριφορά της επιδεκτικότητας περιγράφεται από το νόμο δύναμης

$$\frac{\chi}{N}(T \rightarrow T_C^-) \sim (-t)^{-1}. \quad (2.60)$$

Από την άλλη πλευρά, στο όριο  $T \rightarrow T_C^+$  ισχύει ότι  $\sigma = 0$ . Κατά συνέπεια,  $x = 0$  και η επιδεκτικότητα προκύπτει απευθείας από τη σχέση (2.58)

$$\frac{\partial \sigma}{\partial H} = \frac{1}{T - T_C} \frac{S^2}{3k_B}. \quad (2.61)$$

Η κυρίαρχη συμπεριφορά της περιγράφεται από το νόμο δύναμης

$$\frac{\chi}{N}(T \rightarrow T_C^+) \sim (t)^{-1}. \quad (2.62)$$

Συνοψίζοντας, η κρίσιμη συμπεριφορά της μαγνητικής επιδεκτικότητας ανά spin στην προσέγγιση μέσου πεδίου είναι

$$\frac{\chi}{N} \sim \begin{cases} (-t)^{-1} & , \quad T \rightarrow T_C^- \\ (t)^{-1} & , \quad T \rightarrow T_C^+ \end{cases}. \quad (2.63)$$

με κρίσιμους εκθέτες  $\gamma' = \gamma = 1$ .

### Εσωτερική ενέργεια

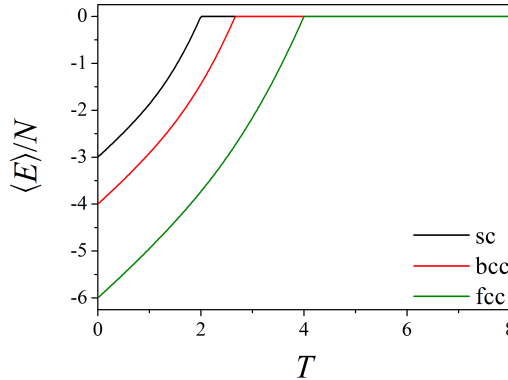
Η εσωτερική ενέργεια απουσία πεδίου δίνεται από τη σχέση

$$\langle E \rangle = -\frac{\partial \ln(Z_{MF})}{\partial \beta} \Leftrightarrow \quad (2.64)$$

$$\langle E \rangle = N \left[ \frac{Jq\sigma^2}{2} + \beta Jq\sigma \frac{\partial \sigma}{\partial \beta} - \mathcal{L}(\beta S J q \sigma) \left( S J q \sigma + \beta S J q \frac{\partial \sigma}{\partial \beta} \right) \right]. \quad (2.65)$$

Λαμβάνοντας υπόψη την αυτοσυνεπή εξίσωση της σχέσης (2.37), η εσωτερική ενέργεια ανά spin προσδιορίζεται αριθμητικά (Εικόνα 2.4) μέσω της σχέσης

$$\begin{aligned} \frac{\langle E \rangle}{N} &= \frac{Jq\sigma^2}{2} + \beta Jq\sigma \frac{\partial \sigma}{\partial \beta} - Jq\sigma^2 - \beta Jq\sigma \frac{\partial \sigma}{\partial \beta} \Leftrightarrow \\ \frac{\langle E \rangle}{N} &= -\frac{Jq}{2}\sigma^2. \end{aligned} \quad (2.66)$$



**Εικόνα 2.4:** Εσωτερική ενέργεια ανά spin στην προσέγγιση μέσου πεδίου, όπως προσδιορίστηκε αριθμητικά από τη σχέση (2.66). Με μαύρο, κόκκινο και πράσινο χρώμα απεικονίζονται τα αποτελέσματα για sc, bcc και fcc πλέγματα αντίστοιχα.

Επιπλέον, χρησιμοποιώντας την κρίσιμη συμπεριφορά για τη μαγνήτιση (σχέση (2.48)) και ότι  $T = T_C(1+t)$ , η κυρίαρχη συμπεριφορά της εσωτερικής ενέργειας ανά spin προκύπτει

$$\frac{\langle E \rangle}{N} \sim \begin{cases} -\frac{5}{2}k_B T_C \left( \frac{T_C - T}{T_C} \right) & , \quad T \rightarrow T_C^- \\ 0 & , \quad T \rightarrow T_C^+ \end{cases} \quad (2.67)$$

### Ειδική Θερμότητα

Η ειδική θερμότητα ανά spin δίνεται από τη σχέση

$$\frac{C}{N} = \frac{\partial(\langle E \rangle / N)}{\partial T} \stackrel{(2.66)}{=} -Jq\sigma \frac{\partial \sigma}{\partial T}. \quad (2.68)$$

Κατ' αντιστοιχία με τη μαγνητική επιδεκτικότητα, η μερική παράγωγος  $\partial \sigma / \partial T$  προσδιορίζεται από την εξίσωση αυτοσυνέπειας:

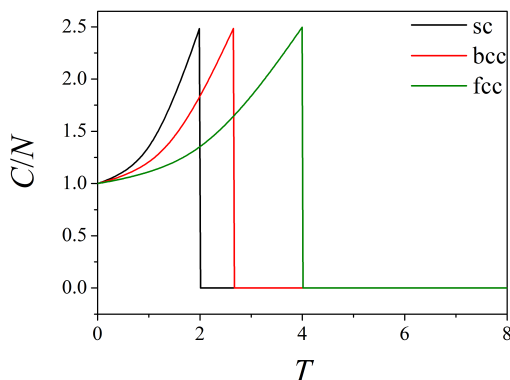
$$\frac{\partial \sigma}{\partial T} = S^2 Jq \mathcal{L}'(x) \left( -k_B \beta^2 \sigma + \beta \frac{\partial \sigma}{\partial T} \right) \Leftrightarrow \quad (2.69)$$

$$\frac{\partial \sigma}{\partial T} = \frac{-k_B \beta^2 S^2 Jq \sigma \mathcal{L}'(x)}{1 - \beta S^2 Jq \mathcal{L}'(x)}, \quad \text{με } x = \beta S Jq \sigma. \quad (2.70)$$

Επομένως, η ειδική θερμότητα προσδιορίζεται αριθμητικά (Εικόνα 2.5) μέσω των σχέσεων

$$\frac{C}{N} = \frac{k_B x^2 \mathcal{L}'(x)}{1 - \beta S^2 Jq \mathcal{L}'(x)} \quad (2.71)$$

$$\text{με } \mathcal{L}'(x) = -\frac{1}{\sinh^2(x)} + \frac{1}{x^2} \quad \text{και } x = \beta S Jq \sigma \quad (2.72)$$



**Εικόνα 2.5:** Ειδική θερμότητα ανά spin στην προσέγγιση μέσου πεδίου, όπως προσδιορίστηκε αριθμητικά μέσω των σχέσεων (2.71) και (2.72). Με μαύρο, κόκκινο και πράσινο χρώμα απεικονίζονται τα αποτελέσματα για sc, bcc και fcc πλέγματα αντίστοιχα.

Από την άλλη πλευρά, αν χρησιμοποιηθεί απλά η οριακή συμπεριφορά της εσωτερικής ενέργειας ανά spin όπως δίνεται από τη σχέση (2.67), η κρίσιμη συμπεριφορά της ειδικής θερμότητας ανά spin προκύπτει

$$\frac{C}{N} \sim \begin{cases} \frac{5}{2}k_B & , \quad T \rightarrow T_G^- \\ 0 & , \quad T \rightarrow T_G^+ \end{cases} \quad (2.73)$$

Επομένως, στα πλαίσια της προσέγγισης μέσου πεδίου, η ειδική θερμότητα παρουσιάζει πεπερασμένη ασυνέχεια και όχι νόμο τύπου δύναμης. Οι κρίσιμοι εκθέτες είναι  $\alpha = \alpha' = 0$ .

## 2.6 Σύνοψη της Κρίσιμης Συμπεριφοράς

Στα πλαίσια της θεωρίας μέσου πεδίου που αναπτύχθηκε στα προηγούμενα εδάφια δεν μπορούν να εξαχθούν οι κρίσιμοι εκθέτες  $\nu$  και  $\eta$  που συνδέονται με τη συνάρτηση συσχέτισης  $\Gamma(r)$ . Κάτι τέτοιο μπορεί να γίνει μόνο στα πλαίσια της γενικότερης θεωρίας μέσου πεδίου του Landau συμπεριλαμβάνοντας συσχετίσεις μακράς εμβέλειας, όπου οι εκθέτες προκύπτουν  $\nu = 1/2$  και  $\eta = 0$ . Στον Πίνακα 2.1 συνοψίζονται οι κρίσιμοι εκθέτες για το κλασικό  $O(3)$  σιδηρομαγνήτη Heisenberg στη προσέγγιση μέσου πεδίου (MFA), συγκριτικά με προβλέψεις της θεωρίας επανακανονικοποίησης και πειραματικά αποτελέσματα.

	$\nu$	$\beta$	$\gamma$	$\delta$	$\alpha$	$\eta$
MFA	1/2	1/2	1	3	0	0
[21] <sup>†</sup>	0.705(3)	0.3645(25)	1.386(4)	4.808(22)	-0.115(9)	0.033(4)
[22] <sup>‡</sup>	-	0.365(5)	1.392(8)	4.80(25)	-	-

<sup>†</sup>Θεωρία επανακανονικοποίησης      <sup>‡</sup>Πείραμα

**Πίνακας 2.1:** Αποτελέσματα της κρίσιμης συμπεριφοράς στην προσέγγιση μέσου πεδίου (MFA) συγκριτικά με θεωρητικές [21] και πειραματικές [22] εκτιμήσεις των κρίσιμων εκθετών.

Όπως εύκολα συμπεραίνεται από τον Πίνακα 2.1, οι τιμές των κρίσιμων εκθετών όπως προκύπτουν από θεωρητικές μελέτες και πειραματικά δεδομένα, διαφέρουν σημαντικά σε σχέση με αυτούς που προβλέπει η θεωρία μέσου πεδίου. Στη συνέχεια, σχολιάζεται η εγκυρότητα της θεωρίας μέσου πεδίου και υπό ποιες προϋποθέσεις μπορεί να χρησιμοποιηθεί με ασφάλεια για την εκτίμηση της κρίσιμης συμπεριφοράς.

### 2.6.1 Εγκυρότητα της Προσέγγισης Μέσου Πεδίου

Η βασική αιτία για την αποτυχία της θεωρίας μέσου πεδίου να ερμηνεύσει ποσοτικά την κρίσιμη συμπεριφορά του κλασικού σιδηρομαγνήτη Heisenberg, βρίσκεται στην

αγνόηση των διακυμάνσεων, δηλαδή στην αφετηριακή υπόθεση βάσει της οποίας θεμελιώνεται. Επομένως, η θεωρία μέσου πεδίου μπορεί να είναι έγκυρη μόνο όταν οι διακυμάνσεις δεν είναι σημαντικές. Με βάση το τελευταίο επιχείρημα μπορεί να δοθεί μια εκτίμηση του κριτηρίου εγκυρότητας της θεωρίας μέσου πεδίου.

Καθώς η κρίσιμη θερμοκρασία προσεγγίζεται, η τυπική ενέργεια μιας διακύμανσης είναι της τάξης του  $k_B T$ , ενώ αντίστοιχα το τυπικό “μέγεθος” της μπορεί να εκτιμηθεί μέσω του μήκους συσχέτισης ως  $\xi^d$ , αφού το τελευταίο είναι το μόνο χαρακτηριστικό φυσικό μήκος. Κατά συνέπεια, η συνεισφορά μιας διακύμανσης στην πυκνότητα ελεύθερης ενέργειας μπορεί να εκτιμηθεί ως [2]

$$f_{\text{fluc}} \sim \frac{k_B T}{\xi^d} \sim |t|^{d\nu}. \quad (2.74)$$

Στην παραπάνω σχέση χρησιμοποιήθηκε ο νόμος δύναμης (1.31) για το μήκος συσχέτισης. Από την άλλη πλευρά, θεωρώντας το νόμο δύναμης (1.25) της ειδικής θερμότητας και ολοκληρώνοντας δύο φορές προκύπτει η πυκνότητα ελεύθερης ενέργειας  $f \sim |t|^{2-\alpha}$ . Για να είναι συνεπής η θεωρία μέσου πεδίου ως προς τις υποθέσεις της (αγνοήσιμες διακυμάνσεις) πρέπει να ισχύει

$$\frac{f_{\text{fluc}}}{f} < 1 \quad (2.75)$$

Επομένως, στην κρίσιμη περιοχή όπου  $t \rightarrow 0$ , θα πρέπει να ισχύει

$$d\nu < -\alpha + 2. \quad (2.76)$$

Αντικαθιστώντας τις τιμές των κρίσιμων εκθετών που προβλέπονται από τη θεωρία μέσου πεδίου,  $\nu = 1/2$  και  $\alpha = 0$ , προκύπτει

$$d > 4. \quad (2.77)$$

Δηλαδή η θεωρία μέσου πεδίου είναι συνεπής και οι εκθέτες που προβλέπει είναι σωστοί για  $d > 4$ . Η διάσταση πάνω από την οποία η θεωρία μέσου πεδίου είναι έγκυρη ονομάζεται *ανώτερη κρίσιμη διάσταση* (upper critical dimension).

Επιπροσθέτως, η συνεισφορά των διακυμάνσεων μειώνεται καθώς οι πλησιέστεροι γείτονες (για αλληλεπιδράσεις μικρής εμβέλειας) αυξάνονται και η θεωρία μέσου πεδίου δίνει συνεχώς καλύτερα αποτελέσματα. Το γεγονός αυτό αναδεικνύεται μέσα από τους λόγους  $T_C^{\text{MFA}}/T_C$  του Πίνακα 2.2, όπου παρουσιάζονται οι προβλέψεις της θεωρίας μέσου πεδίου για την κρίσιμη θερμοκρασία μετάβασης σε κυβικά πλέγματα (sc, bcc και fcc), συγκριτικά με αντίστοιχες προβλέψεις από προσομοιώσεις Monte Carlo και μεθόδους ανάπτυξης σε σειρές.

Πλέγμα	$q$	$T_C (J/k_B)$			$T_C^{\text{MFA}}/T_C$
		MFA	[23] <sup>†</sup>	[24] <sup>‡</sup>	
sc	6	2	1.44293(7)	-	1.386
bcc	8	$2\bar{6}$	2.05424(5)	-	1.298
fcc	12	4	-	3.1757(20)	1.260

<sup>†</sup>Προσομοιώσεις Monte Carlo

<sup>‡</sup>Μέθοδοι ανάπτυξης σε σειρές

**Πίνακας 2.2:** Κρίσιμη θερμοκρασία μετάβασης για κυβικά πλέγματα (sc, bcc και fcc), όπως προβλέπεται από τη θεωρία μέσου πεδίου (MFA) σε σύγκριση με προσομοιώσεις Monte Carlo [23] και μεθόδους ανάπτυξης σε σειρές [24].

Αξίζει να σημειωθεί σε αυτό το σημείο ότι η θεωρία μέσου πεδίου εκτός από το γεγονός ότι αποτυγχάνει να προβλέψει ποσοτικά σωστά την κρίσιμη συμπεριφορά όλων των κλασικών  $O(n)$  προτύπων, αποτυγχάνει σε αρκετές περιπτώσεις και ποιοτικά. Το γνωστότερο παράδειγμα είναι η περίπτωση του 1- $d$  Ising, όπου προβλέπει μη μηδενική θερμοκρασία μετάβασης, σε πλήρη αντίθεση με τη διαθέσιμη αναλυτική λύση με τη μέθοδο του πίνακα μεταφοράς (transfer matrix method), όπου αποδεικνύεται ότι το σύστημα παρουσιάζει αλλαγή φάσης μόνο σε  $T = 0$  K.

Επιπλέον, δεν πρέπει να παραλειφθεί το γεγονός ότι σε ένα βαθμό εισάγει την έννοια της οικουμενικότητας. Η μελέτη των κυβικών πλεγμάτων στην περίπτωση του κλασικού σιδηρομαγνήτη Heisenberg, παρουσιάζουν τους ίδιους κρίσιμους εκθέτες. Επιπροσθέτως, τόσο οι θεωρίες Weiss και Van der Waals, όσο και η γενικότερη θεωρία Landau προβλέπουν τους ίδιους κρίσιμους εκθέτες για διαφορετικά συστήματα (μαγνήτες, ρευστα), εντούτοις δεν διακρίνουν μεταξύ της διάστασης του χώρου  $d$  και τη διάσταση της παραμέτρου τάξης, όπως προκύπτει από το γεγονός ότι όλα τα  $O(n)$  κλασικά πρότυπα μοιράζονται τους ίδιους κρίσιμους εκθέτες.

Καταληκτικά, η θεωρία μέσου πεδίου προβλέπει ποιοτικά σωστά την κρίσιμη συμπεριφορά του κλασικού  $O(3)$  σιδηρομαγνήτη Heisenberg στις 3 διαστάσεις. Παρέχει αναλυτικές εκφράσεις τόσο για την κρίσιμη θερμοκρασία μετάβασης, όσο και τιμές για τους κρίσιμους εκθέτες. Όμως σε όλες τις περιπτώσεις κάτω από την ανώτερη κρίσιμη διάσταση αποτυγχάνει να προβλέψει ποσοτικά σωστά την κρίσιμη συμπεριφορά, ενώ σε ορισμένες περιπτώσεις αποτυγχάνει ακόμα και ποιοτικά. Ωστόσο, η θεωρία μέσου πεδίου είναι εξαιρετικά χρήσιμο εργαλείο ως πρώτη προσέγγιση σύνθετων προβλημάτων, αφού παρέχει μια πρώτη εικόνα για τα ποιοτικά χαρακτηριστικά της αλλαγής φάσης και σε ορισμένες περιπτώσεις τη μόνη διαθέσιμη.

# Κεφάλαιο 3

## Στοιχεία Θεωρίας Προσομοιώσεων και Αριθμητικών Τεχνικών

---

### 3.1 Η Προσομοίωση Monte Carlo

Η ανάπτυξη των ηλεκτρονικών υπολογιστών τις τελευταίες δεκαετίες έχει αναδείξει τις προσομοιώσεις σε ένα νέο και αναπόσπαστο κομμάτι της επιστήμης και της έρευνας, συνδέοντας τη θεωρία με το πείραμα. Ο λόγος για τον οποίο τα “υπολογιστικά πειράματα”, όπως συχνά αναφέρονται οι προσομοιώσεις, έχουν κεντρίσει το ενδιαφέρον της επιστημονικής κοινότητας, είναι ότι προσφέρουν ακριβείς πληροφορίες για τα μελετώμενα πρότυπα, ειδικά σε περιπτώσεις όπου αναλυτικές λύσεις δεν είναι διαθέσιμες χωρίς δραστηκές προσεγγίσεις. Επιπροσθέτως, όσο η διαθέσιμη υπολογιστική ισχύς και μνήμη αυξάνεται, τόσο διευρύνεται η δυνατότητα προσομοίωσης όλο και συνθετότερων μοντέλων με πολύπλοκες αλληλεπιδράσεις και δομές.

Στα πλαίσια της στατιστικής μηχανικής η πλέον διαδεδομένη και κατάλληλη μέθοδος για την προσομοίωση ενός συστήματος πολλών βαθμών ελευθερίας, είναι η μέθοδος Monte Carlo. Η βασική ιδέα πίσω από τη μέθοδο αυτή είναι η προσομοίωση των τυχαίων θερμικών διακυμάνσεων του συστήματος, κατά τη μετάβασή του μεταξύ των δυνατών μικροκαταστάσεων που συνιστούν το φασικό του χώρο. Τα θεωρητικά εργαλεία που χρησιμοποιούνται για την υλοποίηση της διαδικασίας αυτής σε έναν ηλεκτρονικό υπολογιστή, είναι η θεωρία πιθανοτήτων και οι τυχαίοι αριθμοί. Βάσει αυτών και της χρήσης κατάλληλης δυναμικής προσομοίωσης, κατασκευάζεται ένα σύνολο διαθέσιμων μικροκαταστάσεων μεταξύ των οποίων δύναται να μεταβεί το σύστημα, με πιθανότητες που ισούνται με τα αντίστοιχα στατιστικά βάρη των μικροκαταστάσεων στο πραγματικό σύστημα.

## 3.2 Βασικές Αρχές της Προσομοίωσης Monte Carlo

### 3.2.1 Εκτιμητής

Ο σκοπός για τον οποίο χρησιμοποιείται συνήθως η προσομοίωση Monte Carlo είναι ο υπολογισμός των αναμενόμενων τιμών ενός παρατηρήσιμου φυσικού μεγέθους. Τέτοια μεγέθη για ένα μαγνητικό σύστημα μπορεί να είναι η μαγνήτιση, η εσωτερική ενέργεια κ.α. Σύμφωνα με τη στατιστική μηχανική, η αναμενόμενη τιμή ενός παρατηρήσιμου φυσικού μεγέθους  $Q$  δίνεται από τη σχέση

$$\langle Q \rangle = \frac{\sum_r Q_r \exp(-\beta E_r)}{\sum_r \exp(-\beta E_r)}, \quad (3.1)$$

όπου  $E_r$  είναι η ενέργεια του συστήματος στη μικροκατάσταση  $r$  και  $Q_r$  η τιμή του παρατηρήσιμου φυσικού μεγέθους στη συγκεκριμένη μικροκατάσταση. Ο απευθείας υπολογισμός της παραπάνω αναμενόμενης τιμής σε όλες τις δυνατές μικροκαταστάσεις μπορεί να είναι δυνατός σε συγκεκριμένα συστήματα, αλλά πάντα μόνο για πολύ μικρά πλέγματα<sup>1</sup>. Σημειώνεται παρόλα αυτά ότι στο θερμοδυναμικό όριο οι δυνατές μικροκαταστάσεις είναι άπειρες, με αποτέλεσμα η αναμενόμενη τιμή να δίνεται από ένα άπειρο άθροισμα για οποιοδήποτε μελετώμενο σύστημα.

Σε μια προσομοίωση Monte Carlo, η εκτίμηση ενός παρατηρήσιμου φυσικού μεγέθους μπορεί να πραγματοποιηθεί μόνο προσεγγιστικά, επιλέγοντας ένα υποσύνολο από τις διαθέσιμες μικροκαταστάσεις. Προφανώς, η προσέγγιση αυτή εισάγει αναπόφευκτα στατιστικά σφάλματα στους υπολογισμούς και για το λόγο αυτό πρέπει το υποσύνολο να είναι αντιπροσωπευτικό της γενικότερης συμπεριφοράς του συστήματος. Η μέθοδος Monte Carlo λειτουργεί επιλέγοντας τυχαία τις “αντιπροσωπευτικές” μικροκαταστάσεις  $\mu$  για το σύστημα, μέσω μιας κατάλληλα ορισμένης κατανομής πιθανότητας  $p_\mu$ . Έστω ότι το υποσύνολο αυτό είναι  $\mathcal{N} = \{\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_N\}$  και οι αντίστοιχες πιθανότητες επιλογής των μικροκαταστάσεων αυτών είναι  $p_\mu = \{p_{\mu_1}, p_{\mu_2}, \dots, p_{\mu_N}\}$ . Έπεται ότι η καλύτερη εκτίμηση του παρατηρήσιμου μεγέθους  $Q$  είναι

$$\langle Q \rangle_{\mathcal{N}} = \frac{\sum_{\mu_i} Q_{\mu_i} p_{\mu_i}^{-1} \exp(-\beta E_{\mu_i})}{\sum_{\mu_i} p_{\mu_i}^{-1} \exp(-\beta E_{\mu_i})}. \quad (3.2)$$

Η ποσότητα  $\langle Q \rangle_{\mathcal{N}}$  ονομάζεται *εκτιμητής* (estimator) του παρατηρήσιμου μεγέθους  $Q$  και έχει την ιδιότητα να δίνει συνεχώς πιο αξιόπιστα αποτελέσματα καθώς αυξάνεται το υποσύνολο  $\mathcal{N}$  του φασικού χώρου από το οποίο επιλέγονται οι μικροκαταστάσεις. Στο όριο φυσικά που το υποσύνολο  $\mathcal{N}$  αυξάνεται απεριόριστα, δηλαδή

<sup>1</sup>Η περίπτωση του κλασικού προτύπου Heisenberg, δεν είναι μία από τις περιπτώσεις αυτές, αφού το ενεργειακό φάσμα του συστήματος είναι συνεχές, με αποτέλεσμα ακόμα και στην περίπτωση του ενός βαθμού ελευθερίας, ο φασικός χώρος να χαρακτηρίζεται από άπειρο πλήθος μικροκαταστάσεων.



$$\lim_{\mathcal{N} \rightarrow \infty} \langle Q \rangle_{\mathcal{N}} = \langle Q \rangle, \quad (3.3)$$

ο εκτιμητής ταυτίζεται με την αναμενόμενη τιμή  $\langle Q \rangle$  και τα στατιστικά σφάλματα εξελίφονται. Ωστόσο, η οριακή αυτή περίπτωση δεν μπορεί να πραγματοποιηθεί στα πλαίσια μιας προσομοίωσης Monte Carlo.

### 3.2.2 Δειγματοληψία Σημαντικότητας

Ο κατάλληλος προσδιορισμός της κατανομής πιθανότητας  $p_{\mu}$  με την οποία επιλέγονται οι μικροκαταστάσεις από το φασικό χώρο του συστήματος, είναι ουσιαστικής σημασίας για μια προσομοίωση Monte Carlo, αφού καθορίζει το βαθμό συμφωνίας του εκτιμητή  $\langle Q \rangle_{\mathcal{N}}$  με την πραγματική αναμενόμενη τιμή  $\langle Q \rangle$ .

Παρά το γεγονός ότι ο υπολογισμός της αναμενόμενης τιμής όπως δίνεται από τη σχέση (3.1), λαμβάνει υπόψη όλο το διαθέσιμο φασικό χώρο, υπάρχει ένας πολύ μικρός αριθμός μικροκαταστάσεων οι οποίες συνεισφέρουν ουσιαστικά στο στατιστικό άθροισμα. Η τεχνική με την οποία επιλέγεται το υποσύνολο  $\mathcal{N}$  του φασικού χώρου, με τέτοιο τρόπο ώστε να λαμβάνονται υπόψη μόνο εκείνες οι μικροκαταστάσεις που συνεισφέρουν σημαντικά στον προσδιορισμό της αναμενόμενης τιμής, ονομάζεται *δειγματοληψία σημαντικότητας* (importance sampling). Σύμφωνα με τα προαναφερθέντα, εάν οι μικροκαταστάσεις επιλέγονται με πιθανότητα που να δίνεται από την κατανομή Boltzmann, δηλαδή

$$p_{\mu_i} = \frac{e^{-\beta E_{\mu_i}}}{\mathcal{Z}}, \quad (3.4)$$

τότε ο εκτιμητής της σχέσης (3.2) γίνεται

$$\langle Q \rangle_{\mathcal{N}} = \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{\mu_i} Q_{\mu_i}. \quad (3.5)$$

Η χρήση του απλού αριθμητικού μέσου<sup>2</sup> για την εκτίμηση του θερμοδυναμικού μεγέθους  $Q$ , προϋποθέτει βέβαια ότι η κάθε μια από τις “σημαντικές” μικροκαταστάσεις, εμφανίζεται σύμφωνα με την αντίστοιχη πιθανότητα Boltzmann.

### 3.2.3 Διαδικασίες Markov

Η ουσιαστική πρόκληση σε μια προσομοίωση Monte Carlo είναι η κατάλληλη δημιουργία ενός τυχαίου συνόλου μικροκαταστάσεων ούτως ώστε αυτές να εμφανίζονται

<sup>2</sup>Από αυτό το σημείο κι έπειτα καταργείται ο συμβολισμός  $\langle Q \rangle_{\mathcal{N}}$  για τους εκτιμητές των θερμοδυναμικών ποσοτήτων και χρησιμοποιείται απλά ο ίδιος με την αναμενόμενη τιμή  $\langle Q \rangle$ .

σύμφωνα με την κατανομή Boltzmann. Όλες οι προσομοιώσεις Monte Carlo στηρίζονται στις διαδικασίες Markov για το σκοπό αυτό.

Η διαδικασία Markov (Markov process) είναι ο μηχανισμός με τον οποίο δεδομένου ότι το σύστημα βρίσκεται σε μια κατάσταση  $\mu$ , δημιουργείται μια νέα κατάσταση  $\nu$ . Σημειώνεται ότι η διαδικασία αυτή είναι στοχαστική και κάθε φορά που η αρχική κατάσταση είναι η  $\mu$ , η παραγόμενη κατάσταση δεν θα είναι κατ' ανάγκη η  $\nu$ . Η πιθανότητα  $P(\mu \rightarrow \nu)$  δημιουργίας μιας κατάστασης  $\nu$ , δεδομένης της κατάστασης  $\mu$ , ονομάζεται πιθανότητα μετάβασης (transition probability) και σε μια διαδικασία Markov όλες οι πιθανότητες μετάβασης ικανοποιούν τις εξής συνθήκες:

- (i) Δεν μεταβάλλονται με το χρόνο.
- (ii) Εξαρτώνται μόνο από τις ιδιότητες των καταστάσεων  $m$  και  $n$  και όχι από οποιαδήποτε άλλη κατάσταση στην οποία ενδεχομένως είχε βρεθεί το σύστημα.
- (iii) Ισχύει ότι

$$\sum_{\nu} P(\mu \rightarrow \nu) = 1, \quad (3.6)$$

αφού σε μια διαδικασία Markov, δεδομένης της αρχικής κατάστασης  $\mu$ , θα πρέπει να παραχθεί η τελική μικροκατάσταση  $\nu$ .

Αξίζει να σημειωθεί ότι σύμφωνα με τη σχέση (3.6), η πιθανότητα μετάβασης  $P(\mu \rightarrow \mu)$ , δηλαδή η πιθανότητα παραμονής του συστήματος στην αρχική κατάσταση, δεν είναι κατ' ανάγκη μηδενική.

Σε μια προσομοίωση Monte Carlo, οι διαδικασίες Markov επαναλαμβάνονται διαδοχικά με αποτέλεσμα να δημιουργείται μια αλυσίδα Markov. Επιπλέον, οι διαδικασίες Markov επιλέγονται κατάλληλα έτσι ώστε όταν η προσομοίωση διαρκέσει αρκετό χρόνο, δεδομένης της τυχαίας αρχικής κατάστασης, να δημιουργηθούν διαδοχικές καταστάσεις με πιθανότητες οι οποίες δίνονται από την κατανομή Boltzmann. Ο χαρακτηριστικός χρόνος που απαιτείται για την επίτευξη θερμοδυναμικής ισορροπίας, ονομάζεται χρόνος ισορροπίας (equilibration time)  $\tau_{\text{eq}}$ . Η διαδικασία αυτή αποτελεί προσομοίωση της διαδικασίας με την οποία ένα πραγματικό φυσικό σύστημα θα οδηγούνταν σε ισορροπία. Προκειμένου να επιτευχθεί όμως θερμοδυναμική ισορροπία, πρέπει να ικανοποιούνται δύο ακόμα συνθήκες, η εργοδικότητα και το λεπτομερές ισοζύγιο.

### 3.2.4 Εργοδικότητα

Η συνθήκη εργοδικότητας (ergodicity), είναι η απαίτηση οποιαδήποτε κατάσταση του συστήματος να είναι προσβάσιμη από οποιαδήποτε άλλη, δεδομένου ότι η προσομοίωση διαρκεί αρκετό χρόνο. Το γεγονός αυτό επιτρέπει τον επιλεκτικό μηδενισμό ορισμένων πιθανοτήτων μετάβασης, με την προϋπόθεση όμως να υπάρχει πάντα τουλάχιστον μία διαδρομή που να συνδέει δύο οποιεσδήποτε καταστάσεις του φασικού χώρου.

### 3.2.5 Λεπτομερές Ισοζύγιο

Η συνθήκη που εξασφαλίζει ότι οι μικροκαταστάσεις του συστήματος θα εμφανίζονται σύμφωνα με την κατανομή Boltzmann, δοδομένου ότι το σύστημα βρίσκεται σε ισορροπία, είναι η συνθήκη του λεπτομερούς ισοζυγίου (detailed balance). Εν γένει, η πιθανότητα ένα σύστημα να βρίσκεται σε μια μικροκατάσταση  $\mu$  θα υπακούει σε μια διαφορική εξίσωση master, σύμφωνα με τη σχέση

$$\frac{dp_{\mu}(t)}{dt} = \sum_{\nu} [R(\nu \rightarrow \mu)p_{\nu} - R(\mu \rightarrow \nu)p_{\mu}], \quad (3.7)$$

όπου  $R(\nu \rightarrow \mu)$  και  $R(\mu \rightarrow \nu)$  είναι οι ρυθμοί μετάβασης από και προς τη μικροκατάσταση  $\mu$ . Εάν γίνει η υπόθεση ότι ο χρόνος μετράται σε διακριτά βήματα κατά μήκος μιας αλυσίδας Markov, οι ρυθμοί μετάβασης  $R(\nu \rightarrow \mu)$  και  $R(\mu \rightarrow \nu)$  θα πρέπει να αντικατασταθούν από τις αντίστοιχες πιθανότητες μετάβασης  $P(\nu \rightarrow \mu)$  και  $P(\mu \rightarrow \nu)$ . Εάν ληφθούν υπόψη τα προαναφερθέντα και το γεγονός ότι στη στάσιμη κατάσταση (κατάσταση ισορροπίας) το δεξί μέλος της σχέσης (3.7) πρέπει να μηδενίζεται, προκύπτει

$$\sum_{\nu} P(\nu \rightarrow \mu)p_{\nu} = \sum_{\nu} P(\mu \rightarrow \nu)p_{\mu}. \quad (3.8)$$

Μία απλή λύση της παραπάνω εξίσωσης είναι αυτή του λεπτομερούς ισοζυγίου, δηλαδή

$$P(\nu \rightarrow \mu)p_{\nu} = P(\mu \rightarrow \nu)p_{\mu}. \quad (3.9)$$

Είναι σημαντικό να τονιστεί ότι οποιοσδήποτε συνδυασμός πιθανοτήτων μετάβασης που ικανοποιεί τη συνθήκη λεπτομερούς ισοζυγίου (σχέση (3.9)), είναι και λύση της στάσιμης κατάστασης (σχέση (3.8)) αλλά όχι αντίστροφα.

Εάν η επιθυμητή κατανομή ισορροπίας είναι η κατανομή Boltzmann, τότε οι πιθανότητες  $p_{\mu,\nu}$  δίνονται από τη σχέση (3.4) και η συνθήκη λεπτομερούς ισοζυγίου υπαγορεύει

$$\frac{P(\nu \rightarrow \mu)}{P(\mu \rightarrow \nu)} = e^{-\beta(E_{\mu} - E_{\nu})}. \quad (3.10)$$

Επομένως, εάν εξασφαλιστεί το γεγονός ότι οι πιθανότητες μετάβασης ικανοποιούν τον περιορισμό (3.10), καθώς και τη συνθήκη εργοδικότητας, τότε μετά από την πάροδο του χαρακτηριστικού χρόνου  $\tau_{eq}$ , η κατανομή των μικροκαταστάσεων κατά μήκος μιας αλυσίδας Markov θα είναι η κατανομή Boltzmann.

### 3.2.6 Λόγος Αποδοχής

Ο περιορισμός των πιθανοτήτων μετάβασης από τη συνθήκη λεπτομερούς ισοζυγίου προσδίδει αρκετή ευελιξία στην επιλογή των τιμών που θα τους αποδοθούν. Για  $\mu = \nu$ , η πιθανότητα παραμονής του συστήματος στην αρχική κατάσταση όπως δίνεται από την

πιθανότητα μετάβασης  $P(\mu \rightarrow \mu)$ , ικανοποιεί εκ ταυτότητος τη σχέση (3.10) ( $1 = 1$ ). Επομένως, η συνθήκη λεπτομερούς ισοζυγίου ικανοποιείται για οποιαδήποτε τιμή της πιθανότητας  $P(\mu \rightarrow \mu)$ . Το γεγονός αυτό επιτρέπει την κατάλληλη “ρύθμιση” των πιθανοτήτων μετάβασης  $P(\mu \rightarrow \mu)$  για  $\mu = \mu$  και  $P(\mu \rightarrow \nu)$  για  $\mu \neq \nu$ , υπό την προϋπόθεση βέβαια ότι ικανοποιούνται ταυτόχρονα οι περιορισμοί

$$P(\mu \rightarrow \mu) \in [0, 1]$$

και

$$\sum_{\nu} P(\mu \rightarrow \nu) = 1.$$

Προφανώς η κατάλληλη ρύθμιση των πιθανοτήτων μετάβασης  $P(\mu \rightarrow \mu)$  και  $P(\mu \rightarrow \nu)$  υπό τους παραπάνω περιορισμούς, συνοδεύεται και από αντίστοιχη ρύθμιση στην πιθανότητα  $P(\nu \rightarrow \mu)$ , ούτως ώστε να ικανοποιείται η συνθήκη λεπτομερούς ισοζυγίου. Προκειμένου να κατανοηθεί η τεχνική με την οποία υλοποιείται η διαδικασία αυτή μέσω ενός αλγόριθμου σε ηλεκτρονικό υπολογιστή, επαναδιατυπώνεται η πιθανότητα μετάβασης σύμφωνα με τη σχέση

$$P(\mu \rightarrow \nu) = g(\mu \rightarrow \nu)A(\mu \rightarrow \nu). \quad (3.11)$$

Η ποσότητα  $g(\mu \rightarrow \nu)$  ονομάζεται *πιθανότητα εκλογής* (selection probability) και εκφράζει την πιθανότητα ο αλγόριθμος προσομοίωσης να γεννήσει μια κατάσταση  $\nu$ , δεδομένου ότι το σύστημα βρίσκεται αρχικά στην κατάσταση  $\mu$ . Η ποσότητα  $A(\mu \rightarrow \nu)$  ονομάζεται *λόγος αποδοχής* (acceptance ratio) και εκφράζει την πιθανότητα αποδοχής της κατάστασης  $\nu$  που δημιουργήσε ο αλγόριθμος για το ευρισκόμενο στην κατάσταση  $\mu$ , σύστημα. Με την εισαγωγή των ποσοτήτων  $g(\mu \rightarrow \nu)$  και  $A(\mu \rightarrow \nu)$ , η συνθήκη λεπτομερούς ισοζυγίου γράφεται

$$\frac{P(\mu \rightarrow \nu)}{P(\nu \rightarrow \mu)} = \frac{g(\mu \rightarrow \nu)A(\mu \rightarrow \nu)}{g(\nu \rightarrow \mu)A(\nu \rightarrow \mu)} = e^{-\beta(E_{\mu} - E_{\nu})}. \quad (3.12)$$

Σημειώνεται ότι ο λόγος  $A(\mu \rightarrow \nu)/A(\nu \rightarrow \mu) \in [0, \infty)$ , υπό τον περιορισμό ότι  $A(\mu \rightarrow \nu) \in [0, 1]$ , γεγονός το οποίο προσδίδει ελευθερία στην επιλογή των πιθανοτήτων εκλογής  $g(\mu \rightarrow \nu)$ .

Σύμφωνα με τα προαναφερθέντα, η κατασκευή του αλγόριθμου προσομοίωσης βασίζεται στη δημιουργία τυχαίων μικροκαταστάσεων  $\nu$ , σύμφωνα με μια κατανομή πιθανοτήτων εκλογής  $g(\mu \rightarrow \nu)$  και εν συνεχεία αποδοχή ή απόρριψη αυτών, σύμφωνα με μια κατανομή  $A(\mu \rightarrow \nu)$ , η οποία θα ικανοποιεί τη σχέση (3.12). Επιπλέον, για να είναι αποτελεσματικός ο αλγόριθμος, πρέπει ο λόγος αποδοχής να είναι όσο το δυνατό μεγαλύτερος. Εάν εξασφαλιστεί κάτι τέτοιο, το σύνολο των παραγόμενων μικροκαταστάσεων θα καλύπτει όσο το δυνατό μεγαλύτερο μέρος του φασικού χώρου γίνεται και

το σύστημα δεν θα εγκλωβίζεται επιλεκτικά σε μικροκαταστάσεις, δαπανώντας υπολογιστικό χρόνο.

### 3.3 Ο Αλγόριθμος Metropolis

Ο πιο διάσημος και περισσότερο χρησιμοποιούμενος αλγόριθμος σε μια προσομοίωση Monte Carlo, είναι ο αλγόριθμος Metropolis. Παρουσιάστηκε για πρώτη φορά το 1953 από τους N. Metropolis et al. [25] για την προσομοίωση ενός μοντέλου αερίου σκληρών σφαιρών.

Ο αλγόριθμος αυτός λειτουργεί επιλέγοντας κάθε φορά μια κατάσταση  $\nu$  τυχαία, σύμφωνα με μια κατάλληλη κατανομή πιθανοτήτων εκλογής  $g(\mu \rightarrow \nu)$ , η οποία ικανοποιεί τη συνθήκη εργοδικότητας. Στη συνέχεια, εφαρμόζεται ένα κριτήριο αποδοχής της νέας κατάστασης, σύμφωνα με την κατανομή πιθανότητας  $A(\mu \rightarrow \nu)$ , ικανοποιώντας πάντα τη συνθήκη λεπτομερούς ισοζυγίου (3.12). Εάν η νέα κατάσταση γίνει αποδεκτή, ο αλγόριθμος αλλάζει το σύστημα στην νέα κατάσταση, ειδάλλως η κατάσταση του συστήματος παραμένει αμετάβλητη. Η διαδικασία αυτή επαναλαμβάνεται συνεχώς, έως ότου ολοκληρωθεί η προσομοίωση.

Η ικανοποίηση απλά της συνθήκης εργοδικότητας από την κατανομή πιθανοτήτων  $g(\mu \rightarrow \nu)$ , προσφέρει αρκετή ελευθερία στην υλοποίηση της διαδικασίας αυτής στον υπολογιστή. Δεδομένης μιας τυχαίας αρχικής κατάστασης  $\mu$ , μπορεί να κατασκευαστεί μεγάλος αριθμός υποψήφιων καταστάσεων  $\nu$ , με τη μεταβολή κάθε φορά διαφορετικών υποσυνόλων spin στο πλέγμα. Ωστόσο, όπως είναι γνωστό από τη στατιστική μηχανική, ένα σύστημα σε θερμοδυναμική ισορροπία, περνά τον περισσότερο χρόνο του μεταξύ καταστάσεων που διαφέρουν ελάχιστα ενεργειακά και σπάνια πραγματοποιεί μεταβάσεις που συντελούν σε δραματικές αλλαγές της ενέργειάς του. Το γεγονός αυτό υποδεικνύει ότι ο αλγόριθμος πρέπει να είναι κατασκευασμένος έξυπνα, ώστε να δημιουργεί καταστάσεις που προσομοιώνουν όσο καλύτερα γίνεται το φαινόμενο αυτό. Η πιο απλή υλοποίηση της συμπεριφοράς αυτής είναι η επιλογή καταστάσεων που διαφέρουν μεταξύ τους μόνο κατά μία μεταβολή (ή αντιστροφή) ενός spin. Ο αλγόριθμος Metropolis υλοποιεί τη διαδικασία αυτή και χαρακτηρίζεται ως αλγόριθμος με *δυναμική μεμονωμένων αντιστροφών spin* (single spin-flip dynamics)<sup>3</sup>. Προφανώς, οποιοσδήποτε αλγόριθμος χαρακτηρίζεται από αυτή τη δυναμική είναι εργοδικός, αφού οποιαδήποτε κατάσταση σε ένα πεπερασμένο πλέγμα μπορεί να δημιουργηθεί με διαδοχικές μεταβολές μεμονωμένων spin.

Στην περίπτωση του αλγόριθμου Metropolis, όλες οι πιθανότητες εκλογής  $g(\mu \rightarrow \nu)$  επιλέγονται ίσες, για οποιαδήποτε νέα κατάσταση  $\nu$ . Κατά συνέπεια, σε ένα πλέγμα απο-

<sup>3</sup> Η ορολογία αυτή για το χαρακτηρισμό της δυναμικής προσομοίωσης δεν είναι δόκιμη στην περίπτωση του κλασικού  $O(3)$  προτύπου Heisenberg, όπου μια διαφορετική κατάσταση του συστήματος μπορεί να προκύψει απλά με στοιχειώδη μεταβολή της διεύθυνσης του spin και όχι αντιστροφή αυτού, όπως π.χ. στην περίπτωση του  $O(1)$  κλασικού προτύπου Ising.

τελούμενο από  $N$  spin, δεδομένης της αρχικής κατάστασης  $\mu$ , υπάρχουν  $N$  διαφορετικά spin τα οποία μπορούν να μεταβληθούν για τη δημιουργία των καταστάσεων  $\nu$ . Σύμφωνα με τα προαναφερθέντα, η πιθανότητα εκλογής προκύπτει  $g(\mu \rightarrow \nu) = 1/N$  και η συνθήκη λεπτομερούς ισοζυγίου γίνεται

$$\frac{P(\mu \rightarrow \nu)}{P(\nu \rightarrow \mu)} = \frac{NA(\mu \rightarrow \nu)}{NA(\nu \rightarrow \mu)} = e^{-\beta(E_\mu - E_\nu)}. \quad (3.13)$$

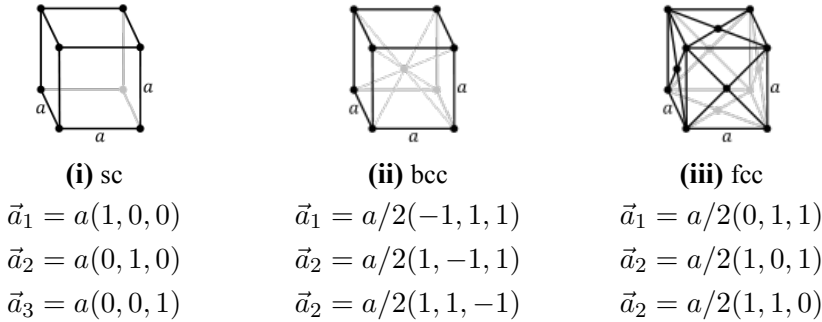
Ο λόγος αποδοχής ή κριτήριο Metropolis στην περίπτωση αυτή είναι

$$A(\mu \rightarrow \nu) = \begin{cases} e^{-\beta(E_\nu - E_\mu)} & , \quad E_\nu > E_\mu \\ 1 & , \quad \text{αλλιώς.} \end{cases} \quad (3.14)$$

Συμπερασματικά, εάν η νέα κατάσταση  $\nu$  έχει ενέργεια μικρότερη ή το πολύ ίση με την αρχική κατάσταση  $\mu$ , τότε γίνεται αποδεκτή από τον αλγόριθμο, διαφορετικά ενδέχεται να γίνει αποδεκτή σύμφωνα με την πιθανότητα  $e^{-\beta(E_\nu - E_\mu)}$ . Αξίζει να σημειωθεί ότι όλοι οι αλγόριθμοι που χρησιμοποιούν λόγους αποδοχής όπως αυτός της σχέσης (3.14), χαρακτηρίζονται ως αλγόριθμοι τύπου Metropolis.

### 3.4 Υλοποίηση του Αλγόριθμου Metropolis στο $O(3)$ Πρότυπο Heisenberg

Το πρώτο βήμα στην εφαρμογή του αλγόριθμου Metropolis σε ένα συγκεκριμένο πρότυπο, είναι ο ορισμός του πλέγματος στο οποίο θα τοποθετηθούν τα spin. Σε μια προσομοίωση Monte Carlo, ένα πλέγμα χωρικής διάστασης  $d$ , συνήθως περιγράφεται από έναν υπερκύβο γραμμικής διάστασης  $L$  και όγκου  $V = L^d$ . Σημειώνεται ότι η γραμμική διάσταση χαρακτηρίζει το μέγεθος του συστήματος προσομοίωσης και αποδίδεται πάντα αδιάστατη, υπονώντας τον αριθμό των μοναδιαίων κυψελίδων επί της μίας εκ των διαστάσεων. Στην παρούσα εργασία μελετήθηκαν κυβικά πλέγματα, κατά συνέπεια ο ορισμός τους σε κάθε περίπτωση έγινε με βάση τα θεμελιώδη ανύσματα της Εικόνας 3.1.



**Εικόνα 3.1:** Μοναδιαίες κυψελίδες πλεγμάτων sc, bcc και fcc και τα αντίστοιχα μοναδιαία ανύσματα.

Ο συνολικός αριθμός των spin συναρτῆσει της γραμμικής διάστασης  $L$  για τα κυβικά πλέγματα της εικόνας 3.1, προκύπτει σύμφωνα με τη σχέση

$$N_{sc} = L^3 \quad N_{bcc} = 2L^3 \quad N_{fcc} = 4L^3 \quad (3.15)$$

Το τελευταίο είναι απόρροια του αριθμού των πλεγματικών σημείων στη μοναδιαία κυψελίδα του κάθε είδους. Σε περιπτώσεις όπου δεν μελετώνται επιφανειακά φαινόμενα, αλλά bulk ιδιότητες του συστήματος, εφαρμόζονται επιπλέον και *περιοδικές συνοριακές συνθήκες*. Με αυτόν τον τρόπο εξασφαλίζεται ότι κάθε spin έχει τον ίδιο αριθμό γειτόνων και ίδια τοπική συμμετρία. Επομένως, όλα τα spin είναι ισοδύναμα και το σύστημα χαρακτηρίζεται από πλήρη συμμετρία μετατόπισης (translationally invariant).

Επόμενο βήμα είναι ο ορισμός της αρχικής διαμόρφωσης των spin στο πλέγμα, η οποία αποτελεί την αρχική κατάσταση βάσει της οποίας θα δημιουργηθούν οι επόμενες. Υπάρχουν δύο αρχικές διευθετήσεις των spin που συνηθίζεται να χρησιμοποιούνται σε μια προσομοίωση Monte Carlo:

- (i) Η διευθέτηση που λαμβάνει χώρα σε θερμοκρασία “ $T = 0$ ” και αντιστοιχεί στη θεμελιώδη κατάσταση, όπου κάθε spin στο πλέγμα έχει την ίδια διεύθυνση.
- (ii) Η διευθέτηση που λαμβάνει χώρα σε θερμοκρασία “ $T = \infty$ ” και αντιστοιχεί στην πλήρως άτακτη κατάσταση.

Ανάλογα φυσικά με τη θερμοκρασία στην οποία πραγματοποιείται η προσομοίωση, κάθε μία από τις παραπάνω διευθετήσεις μπορεί να προσεγγίζει λιγότερο ή περισσότερο την κατάσταση ισορροπίας.

Έχοντας ορίσει κατάλληλα τόσο τις συνοριακές συνθήκες, όσο και την αρχική διευθέτηση των spin στο πλέγμα, μπορεί να ξεκινήσει η προσομοίωση του συστήματος. Το πρώτο βήμα στην εφαρμογή του αλγόριθμου Metropolis είναι η επιλογή ενός τυχαίου spin  $\vec{S}_k$  της διευθέτησης  $\mu$ , προκειμένου να εφαρμοστεί η δυναμική της προσομοίωσης.

σης. Η επιλογή πραγματοποιείται με τη βοήθεια μιας γεννήτριας τυχαίων αριθμών. Στη συνέχεια προσδιορίζεται η ενέργεια της αρχικής διαμόρφωσης, έστω  $E_\mu$ , βάσει της Χαμιλτονιανής του κλασικού σιδηρομαγνήτη Heisenberg, για  $H = 0$ , που δίνεται από τη σχέση

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S}_i \vec{S}_j = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \left( S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y + S_i^z S_j^z \right). \quad (3.16)$$

Υπενθυμίζεται σε αυτό το σημείο ότι η παραπάνω Χαμιλτονιανή αναφέρεται σε μικρής εμβέλειας αλληλεπιδράσεις κάθε πλεγματοκού spin με τους πλησιέστερους γείτονες  $q$ . Εφαρμόζοντας το συμβολισμό που χρησιμοποιήθηκε στη σχέση (2.16) του Κεφαλαίου 2, η ενέργεια  $E_\mu$  της κατάστασης  $\mu$  του συστήματος προσδιορίζεται

$$E_\mu = -\frac{J}{2} \sum_{\mu_i=1}^N \sum_{\mu_j \in nn(\mu_i)}^q \left( S_{\mu_i}^x S_{\mu_j}^x + S_{\mu_i}^y S_{\mu_j}^y + S_{\mu_i}^z S_{\mu_j}^z \right). \quad (3.17)$$

Έπειτα εφαρμόζεται η δυναμική μεταβολής του spin  $\vec{S}_k(\theta, \phi) \rightarrow \vec{S}'_k(\theta', \phi')$ . Για την υλοποίηση τυχαίων στροφών ενός διανύσματος εντός σφαιράς ακτίνας  $S$ , μπορεί να χρησιμοποιηθεί η μέθοδος που αναφέρεται στο [26] και πραγματοποιείται ως εξής:

(i) Παράγονται δύο τυχαίοι αριθμοί  $u, w \in [0, 1]$ .

(ii) Οι γωνίες  $\phi'$  και  $\theta'$  που ορίζουν τη νέα διεύθυνση του spin  $\vec{S}'_k$  προσδιορίζονται με τη βοήθεια των τυχαίων αριθμών  $u$  και  $w$  μέσω των σχέσεων

$$\phi' = 2\pi u, \quad (3.18)$$

$$\theta' = \arccos(2w - 1). \quad (3.19)$$

(iii) Οι συντεταγμένες του spin  $\vec{S}'_k$  προσδιορίζονται συναρτήσει των τυχαίων αριθμών  $u$  και  $w$  σύμφωνα με τις σχέσεις

$$(S'_k)^x = S \sqrt{1 - (2w - 1)^2} \cos(2\pi u) \quad (3.20)$$

$$(S'_k)^y = S \sqrt{1 - (2w - 1)^2} \sin(2\pi u) \quad (3.21)$$

$$(S'_k)^z = S(2w - 1). \quad (3.22)$$

Ακολούθως, προσδιορίζεται η ενέργεια  $E_\nu$  της νέας κατάστασης που περιλαμβάνει τη νέα διεύθυνση του spin  $\vec{S}'_k$  και υπολογίζεται η διαφορά  $E_\nu - E_\mu$ . Έπειτα, με χρήση της γεννήτριας τυχαίων αριθμών, παράγεται ένας τυχαίος αριθμός  $r \in [0, 1]$  και πραγματοποιείται ο εξής έλεγχος:

$$\text{Εάν } E_\nu - E_\mu < 0 \text{ ή } e^{-\beta(E_\nu - E_\mu)} > r, \quad (3.23)$$



η νέα κατάσταση  $\nu$ , γίνεται αποδεκτή από τον αλγόριθμο, ειδάλλως η μεταβολή του spin απορρίπτεται και η κατάσταση του συστήματος παραμένει αμετάβλητη ( $\nu = \mu$ ).

Η διαδικασία επιλογής τυχαίων spin του συστήματος, η υλοποίηση της δυναμικής μεμονωμένης μεταβολής και η εφαρμογή του κριτηρίου Metropolis για την αποδοχή ή την απόρριψη νέων καταστάσεων, συνεχίζεται για όσο χρόνο διαρκεί η προσομοίωση. Με αυτόν τον τρόπο χτίζεται η αλυσίδα Markov των παραγόμενων μικροκαταστάσεων. Σημειώνεται ότι ο χρόνος διεξαγωγής της προσομοίωσης συνήθως μετράται σε μεμονωμένα βήματα εφαρμογής της δυναμικής (update steps) ή σε  $N$  τέτοια βήματα, ολοκληρώνοντας κατά μέσο όρο μία σάρωση του πλέγματος<sup>4</sup> και η μονάδα μέτρησης του χρόνου ονομάζεται sweep. Στην παρούσα εργασία ως μονάδα μέτρησης του χρόνου επιλέχθηκε το sweep. Τέλος, πρέπει να αναφερθεί ότι οι υπολογισμοί πραγματοποιήθηκαν σε κατάλληλο σύστημα μονάδων όπου  $k_B = 1$  και  $J = 1$ .

### 3.5 Χρόνος Εξισορρόπησης

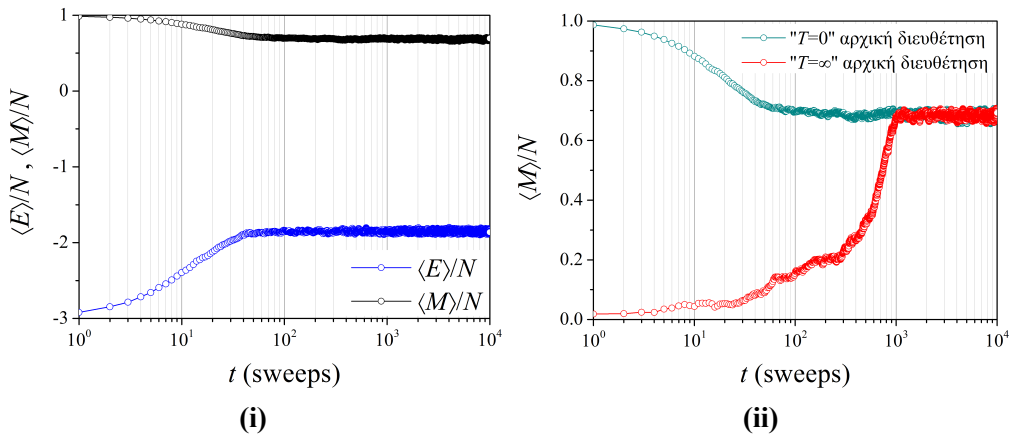
Για να πραγματοποιηθεί ο προσδιορισμός των θερμοδυναμικών μεγεθών, ο οποίος είναι συνήθως και ο σκοπός για τον οποίο πραγματοποιείται μια προσομοίωση Monte Carlo, απαιτείται η εκτίμηση του χρόνου ισορροπίας ή χρόνου εξισορρόπησης  $\tau_{eq}$ . Το γεγονός αυτό εξασφαλίζει ότι οι παραγόμενες μικροκαταστάσεις στην αλυσίδα Markov, αντιστοιχούν σε καταστάσεις ισορροπίας και μάλιστα σε εκείνες τις “σημαντικές” μικροκαταστάσεις για τις οποίες οι εκτιμητές δίνονται από απλούς αριθμητικούς μέσους στα πλαίσια της δειγματοληψίας σημαντικότητας.

Η εκτίμηση του χρόνου εξισορρόπησης μπορεί να πραγματοποιηθεί αξιοποιώντας το γεγονός ότι στις καταστάσεις ισορροπίας τα θερμοδυναμικά μεγέθη παρουσιάζουν μικρές σχετικά διακυμάνσεις<sup>5</sup> γύρω από την μέση τιμή τους. Έστω ότι πραγματοποιείται μια προσομοίωση Monte Carlo σε θερμοκρασία  $T$  με κάποια από τις προαναφερθείσες αρχικές διευθετήσεις και υπολογίζεται σε κάθε sweep κάποιο θερμοδυναμικό μέγεθος  $Q(t)$ . Οι προκύπτουσες τιμές  $Q(1), Q(2), \dots, Q(N)$ , για κάθε sweep  $t = 1, 2, \dots, N$  συνιστούν μια *χρονοσειρά* (time series) της θερμοδυναμικής ποσότητας  $Q$ , συναρτήσεως των χρονικών βημάτων που έχουν επιλεγεί. Εάν πραγματοποιηθεί απεικόνιση της χρονοσειράς, μπορεί να εκτιμηθεί ο χρόνος ισορροπίας σε sweeps, παρατηρώντας από ποιο χρονικό βήμα κι έπειτα το θερμοδυναμικό μέγεθος συγκλίνει σε μια συγκεκριμένη τιμή παρουσιάζοντας μόνο διακυμάνσεις γύρω από αυτή (Εικόνα 3.2). Όλες οι μετρήσεις του θερμοδυναμικού μεγέθους  $Q(t)$  για  $t < \tau_{eq}$  δεν μπορούν να χρησιμοποιηθούν για τον προσδιορισμό του, αφού δεν αντιστοιχούν σε καταστάσεις ισορροπίας γι' αυτό και απορ-

<sup>4</sup> Η παραγωγή τυχαίων αριθμών για την επιλογή του spin όπου θα εφαρμοστεί η δυναμική δεν εξασφαλίζει ότι μετά από  $N$  τέτοια βήματα θα έχει πραγματοποιηθεί κατ' ανάγκη μία σαφής σάρωση ολόκληρου του πλέγματος.

<sup>5</sup> Στην κρίσιμη περιοχή οι διακυμάνσεις είναι εντονότερες αλλά μια χοντρική εκτίμηση του χρόνου εξισορρόπησης είναι και σε αυτή την περίπτωση δυνατή.

ρίπτονται. Σημειώνεται ότι διαφορετικά θερμοδυναμικά μεγέθη συγκλίνουν με διαφορετικές “ταχύτητες” στις καταστάσεις ισορροπίας και κατά συνέπεια ως χρόνος εξισορρόπησης λαμβάνεται η μέγιστη τιμή συνεκτιμώντας όλες τις θερμοδυναμικές ποσότητες  $\tau_{\text{eq}} = \max [\tau_{\text{eq}}(Q)]$ . Τέλος, αξίζει να αναφερθεί ότι σημαντικό ρόλο στην ελαχιστοποίηση του χρόνου εξισορρόπησης παίζει η αρχική διεύθετηση, όπως γίνεται εμφανές στην Εικόνα 3.2ii: για τη διεύθετηση που αντιστοιχεί σε “ $T = 0$ ” (κυανό χρώμα), ο χρόνος εξισορρόπησης είναι  $\tau_{\text{eq}} \approx 200\text{-}300$  sweeps, σε αντίθεση με τη διεύθετηση που αντιστοιχεί σε “ $T = \infty$ ” (κόκκινο χρώμα), που ο χρόνος εξισορρόπησης εκτιμάται  $\tau_{\text{eq}} \approx 1000\text{-}2000$  sweeps.



**Εικόνα 3.2:** Διαγράμματα εκτίμησης του χρόνου εξισορρόπησης. Στην Εικόνα 3.2i απεικονίζονται με μαύρο και μπλε χρώμα οι χρονοσειρές της μαγνήτισης και της ενέργειας ανά spin αντίστοιχα. Στην Εικόνα 3.2ii απεικονίζεται η χρονοσειρά της μαγνήτισης ανά spin για διαφορετικές αρχικές διευθετήσεις (κυανό: “ $T = 0$ ” και κόκκινο: “ $T = \infty$ ”). Η προσομοίωση πραγματοποιήθηκε σε sc πλέγμα, γραμμικής διάστασης  $L = 20$ , σε θερμοκρασία  $T = 1$  ( $J = 1$ ,  $k_B = 1$ ).

### 3.6 Υπολογισμός Θερμοδυναμικών Μεγεθών

Αφού ολοκληρωθεί η απόρριψη των μετρήσεων των θερμοδυναμικών μεγεθών για  $t < \tau_{\text{eq}}$ , η προκύπτουσα χρονοσειρά μπορεί να χρησιμοποιηθεί για την εκτίμηση των αναμενόμενων τιμών. Ο υπολογισμός της αναμενόμενης τιμής μιας οποιαδήποτε θερμοδυναμικής ποσότητας  $\langle Q \rangle$  δίνεται από τη σχέση

$$\langle Q \rangle = \frac{1}{N} \sum_{\mu=1}^N Q_{\mu}. \quad (3.24)$$

Με  $\mathcal{N}$  συμβολίζεται ο συνολικός αριθμός των sweeps που χρησιμοποιούνται για την εκτίμηση της αναμενόμενης τιμής και με  $\mu$  συμβολίζονται οι καταστάσεις ισορροπίας που αντιστοιχούν στην ολοκλήρωση ενός sweep. Σε πολλές περιπτώσεις είναι απαραίτητος ο υπολογισμός μιας θερμοδυναμικής ποσότητας ανά spin, προκειμένου να υπάρχει σύγκριση των αποτελεσμάτων μεταξύ συστημάτων διαφορετικής γραμμικής διάστασης. Στην περίπτωση αυτή, η αναμενόμενη τιμή  $\langle q \rangle \equiv \langle Q \rangle / N$  δίνεται από τη σχέση

$$\langle q \rangle = \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{\mu=1}^{\mathcal{N}} \left( \frac{Q}{N} \right)_{\mu}. \quad (3.25)$$

Τα σπουδαιότερα μεγέθη που προσδιορίζονται σε μια προσομοίωση Monte Carlo είναι η μαγνήτιση και η ενέργεια. Βάσει αυτών μπορούν να υπολογιστούν ροπές ανώτερης τάξης και κατά συνέπεια, οι αντίστοιχες επιδεκτικότητες ή διαφορών τάξεων συσσωρευτές (cumulants). Η χρονοσειρά της ενέργειας  $E(t)$  προκύπτει από τον υπολογισμό της σχέσης

$$E_{\mu} = -\frac{J}{2} \sum_{i_{\mu}=1}^N \sum_{j_{\mu} \in nn(i_{\mu})}^q \left( S_{i_{\mu}}^x S_{j_{\mu}}^x + S_{i_{\mu}}^y S_{j_{\mu}}^y + S_{i_{\mu}}^z S_{j_{\mu}}^z \right), \quad (3.26)$$

για κάθε κατάσταση  $\mu$  που αντιστοιχεί στην ολοκλήρωση ενός sweep. Σύμφωνα με τα προαναφερθέντα, οι εκτιμήσεις των αναμενόμενων τιμών  $\langle E \rangle$  και  $\langle \varepsilon \rangle \equiv \langle E \rangle / N$  δίνονται από τις σχέσεις

$$\langle E \rangle = \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{\mu=1}^{\mathcal{N}} E_{\mu} \quad (3.27)$$

και

$$\langle \varepsilon \rangle = \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{\mu=1}^{\mathcal{N}} \frac{E_{\mu}}{N}. \quad (3.28)$$

Η χρονοσειρά της μαγνήτισης προκύπτει από τον υπολογισμό του μέτρου της  $|\vec{M}(t)| = M(t)$  μέσω της σχέσης

$$M_{\mu} = \sqrt{(M_{\mu}^x)^2 + (M_{\mu}^y)^2 + (M_{\mu}^z)^2} \quad (3.29)$$

όπου

$$M_{\mu}^x = \sum_{i_{\mu}=1}^N S_{i_{\mu}}^x, \quad M_{\mu}^y = \sum_{i_{\mu}=1}^N S_{i_{\mu}}^y \quad \text{και} \quad M_{\mu}^z = \sum_{i_{\mu}=1}^N S_{i_{\mu}}^z. \quad (3.30)$$

Σε αντιστοιχία με την περίπτωση της ενέργειας, η χρονοσειρά προκύπτει από τον υπολογισμό της σχέσης (3.29) για τις καταστάσεις  $\mu$  που αντιστοιχούν στην ολοκλήρωση ενός sweep. Οι εκτιμήσεις των αναμενόμενων τιμών  $\langle M \rangle$  και  $\langle m \rangle \equiv \langle M \rangle / N$  δίνονται από τις σχέσεις

$$\langle M \rangle = \frac{1}{N} \sum_{\mu=1}^N M_{\mu} \quad (3.31)$$

και

$$\langle m \rangle = \frac{1}{N} \sum_{\mu=1}^N \frac{M_{\mu}}{N}. \quad (3.32)$$

Οι αντίστοιχες επιδεκτικότητες ανά spin υπολογίζονται από τις σχέσεις

$$C/N \equiv c = \frac{\beta^2}{N} (\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2) \quad (k_B = 1), \quad (3.33)$$

$$\chi/N = \frac{\beta}{N} (\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2). \quad (3.34)$$

Τέλος, μπορεί να υπολογιστεί ο 4<sup>ης</sup> τάξης συσσωρευτής του Binder για τη μαγνήτιση ανά spin

$$U_4 = 1 - \frac{\langle m^4 \rangle}{3\langle m^2 \rangle^2}, \quad \text{με} \quad \langle m^k \rangle = \frac{1}{N} \sum_{\mu=1}^N \left( \frac{M_{\mu}}{N} \right)^k, \quad k = 2, 4. \quad (3.35)$$

### 3.7 Αυτοσυσχετίσεις

Σε μια προσομοίωση Monte Carlo η εκτίμηση των αναμενόμενων τιμών πραγματοποιείται με χρήση μόνο εκείνων των καταστάσεων που συνεισφέρουν σημαντικά στα στατιστικά αθροίσματα, με αποτέλεσμα να εισάγονται αναπόφευκτα σφάλματα στους υπολογισμούς. Κατά συνέπεια, ο υπολογισμός των σφαλμάτων στον προσδιορισμό των εκτιμώμενων αναμενόμενων τιμών πρέπει πάντα να συνοδεύει τα αποτελέσματα μιας προσομοίωσης.

Στο σημείο αυτό, προκειμένου να είναι σαφής η διάκριση μεταξύ εκτιμώμενης και πραγματικής αναμενόμενης τιμής, χρησιμοποιείται ο συμβολισμός  $\bar{Q}$ , για τον εκτιμητή της ποσότητας  $Q$ . Επιπροσθέτως, πρέπει να είναι ξεκάθαρο ότι σε αντίθεση με την αναμενόμενη τιμή  $\langle Q \rangle$ , η οποία είναι απλά ένας αριθμός, ο εκτιμητής  $\bar{Q}$ , είναι ένας τυχαίος αριθμός ο οποίος εμφανίζει διακυμάνσεις γύρω από την θεωρητική τιμή  $\langle Q \rangle$  [27]. Στην

πράξη βέβαια δεν προσδιορίζονται ποτέ οι διακυμάνσεις του εκτιμητή επαναλαμβάνοντας την προσομοίωση πολλές φορές, αλλά εκτιμώνται μέσω της διακύμανσης της κατανομής των τιμών  $Q_\mu$ . Στην περίπτωση όπου η κατανομή αποτελείται από  $\mathcal{N}$  στατιστικά ανεξάρτητες τιμές, η διακύμανση του εκτιμητή  $(\delta\bar{Q})^2$  δίνεται από τη σχέση

$$(\delta\bar{Q})^2 = \langle \bar{Q}^2 \rangle - \langle \bar{Q} \rangle^2 = \frac{(\delta Q_\mu)^2}{\mathcal{N}} \quad (3.36)$$

με

$$(\delta Q_\mu)^2 = \langle Q_\mu^2 \rangle - \langle Q_\mu \rangle^2. \quad (3.37)$$

Ωστόσο, η εφαρμογή της δυναμικής μεμονωμένης μεταβολής σε μια προσομοίωση Monte Carlo οδηγεί σε διευθετήσεις οι οποίες είναι συσχετισμένες. Το γεγονός αυτό αντανakλάται και στις τιμές μιας ποσότητας  $Q(t)$  κατά μήκος μιας αλυσίδας Markov. Στην περίπτωση αυτή, αποδεικνύεται [15] ότι η διακύμανση  $(\delta\bar{Q})^2$  δίνεται από τη σχέση

$$(\delta\bar{Q})^2 = (\delta Q_\mu)^2 \frac{2\tau_{\text{int}}}{\mathcal{N}}. \quad (3.38)$$

Με  $\tau_{\text{int}}$  συμβολίζεται η ποσότητα

$$\tau_{\text{int}} \equiv \frac{1}{2} + \sum_{t=1}^{\mathcal{N}} G_Q(t), \quad (3.39)$$

η οποία ονομάζεται *ολοκληρωμένος χρόνος αυτοσυσχέτισης* (integrated autocorrelation time) και εκφράζει τον αριθμό χρονικών βημάτων που απαιτούνται για τη μετάβαση του συστήματος από μια αρχική διευθέτηση σε μια άλλη σημαντικά διαφορετική. Η άθροιση στη σχέση (3.39) πραγματοποιείται σε χρονικά βήματα sweeps κατά μήκος της αλυσίδας Markov και με  $\mathcal{N}$  συμβολίζεται ο συνολικός αριθμός των sweeps που λαμβάνουν χώρα κατά την προσομοίωση. Επιπλέον, εισάγεται η ποσότητα

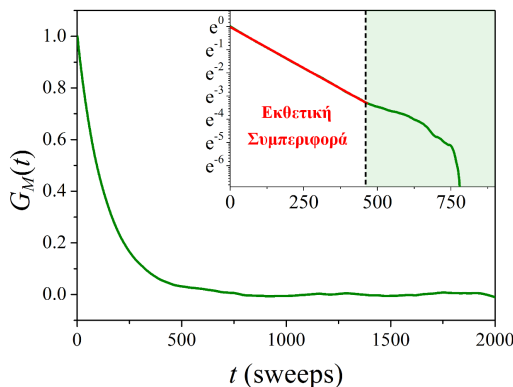
$$G_Q(t) \equiv \frac{\langle Q(0)Q(t) \rangle - \langle Q^2 \rangle}{\langle Q^2 \rangle - \langle Q \rangle^2}, \quad (3.40)$$

η οποία ονομάζεται *συνάρτηση αυτοσυσχέτισης* (autocorrelation function) και χρησιμοποιείται για την ποσοτικοποίηση των συσχετίσεων μεταξύ διαδοχικών μετρήσεων της ποσότητας  $Q(t)$ . Επιπλέον, η κυρίαρχη συμπεριφορά της περιγράφεται από την έκφραση

$$G_Q(t) \sim e^{-t/\tau_{\text{exp}}}. \quad (3.41)$$

Για μικρά χρονικά βήματα η προσέγγιση αυτή είναι αρκετά ικανοποιητική, όπως γίνεται εμφανές στην Εικόνα ???. Σε μεγάλα χρονικά βήματα όμως, η συνάρτηση αυτοσυσχέτισης συνοδεύεται από στατιστικό θόρυβο, γεγονός που καθιστά αδύνατη την περιγραφή

της από ένα απλό εκθετικό. Η χαρακτηριστική ποσότητα  $\tau_{\text{exp}}$ , ονομάζεται *εκθετικός χρόνος αυτοσυσχέτισης* (exponential autocorrelation time) και αντιστοιχεί στο χρονικό βήμα κατά το οποίο η συνάρτηση αυτοσυσχέτισης εάν περιγράφεται μόνο από εκθετική συμπεριφορά έχει εξασθενήσει κατά τον παράγοντα  $1/e$ .



**Εικόνα 3.3:** Συνάρτηση αυτοσυσχέτισης για τη μαγνήτιση. Στο ένθετο απεικονίζεται η ίδια συνάρτηση σε  $\ln$ -άξονα, όπου διακρίνεται το χρονικό εύρος για το οποίο περιγράφεται ικανοποιητικά από τη σχέση (3.41). Η προσομοίωση πραγματοποιήθηκε σε bcc πλέγμα, γραμμικής διάστασης  $L = 16$ , σε θερμοκρασία  $T = 2.1$ .

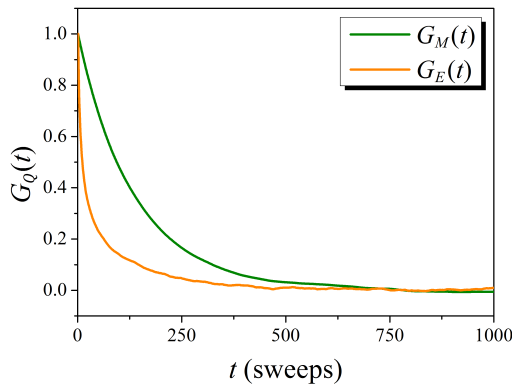
Σύμφωνα με τα προαναφερθέντα, συμπεραίνεται ότι η αγνόηση των συσχετίσεων μπορεί να οδηγήσει σε σοβαρές υποεκτιμήσεις των στατιστικών σφαλμάτων. Συγκεκριμένα, η “αφελής” εκτίμηση του σφάλματος  $(\delta Q_\mu)^2$  ενισχύεται ακριβώς κατά έναν παράγοντα

$$\mathcal{N}_{\text{eff}} = \frac{\mathcal{N}}{2\tau_{\text{int}}}, \quad (3.42)$$

που ονομάζεται *ενεργό δείγμα* (effective sample) και συνιστά το πλήθος των στατιστικά ανεξάρτητων μετρήσεων της ποσότητας  $Q$  σε μια προσομοίωση Monte Carlo με συνολικό αριθμό μετρήσεων  $\mathcal{N}$ , η οποία συνοδεύεται από την παρουσία συσχετίσεων. Δυστυχώς, η εκτίμηση του ολοκληρωμένου χρόνου αυτοσυσχέτισης  $\tau_{\text{int}}$ , είναι μια εξαιρετικά απαιτητική αριθμητική διαδικασία που δύσκολα αυτοματοποιείται σε μια προσομοίωση Monte Carlo. Παρόλα αυτά, προκειμένου να υπάρχει συνέπεια στην ακρίβεια των εκτιμήσεων των θερμοδυναμικών μεγεθών μεταξύ διαφορετικών προσομοιώσεων Monte Carlo, απαιτείται τουλάχιστον μια εκτίμηση της τάξης μεγέθους των συσχετίσεων. Στην παρούσα εργασία η ποσότητα  $\tau_{\text{int}}$  εκτιμάται με αυτοσυνεπή σύγκλιση [28–30] της σχέσης

$$\tau_{\text{int}} \approx \frac{1}{2} + \sum_{t=1}^{6\tau_{\text{int}}} G_Q(t). \quad (3.43)$$

Τέλος, αξίζει να τονιστεί ότι διαφορετικές θερμοδυναμικές ποσότητες  $Q$ , ενδέχεται να παρουσιάζουν διαφορετικούς χρόνους αυτοσυσχέτισης (Εικόνα 3.4). Για το λόγο αυτό είναι βολικό στην αυτοματοποίηση της διαδικασίας να λαμβάνεται υπόψη ως χρόνος αυτοσυσχέτισης, ο μέγιστος που παρουσιάζεται μεταξύ των θερμοδυναμικών ποσοτήτων, δηλαδή  $\tau_{\text{int}} = \max[\tau_{\text{int}}(Q)]$ ,  $\forall Q$ .



**Εικόνα 3.4:** Συνάρτηση αυτοσυσχέτισης για τη μαγνήτιση ( $G_M(t)$ ) και την ενέργεια ( $G_E(t)$ ). Η προσομοίωση πραγματοποιήθηκε σε bcc πλέγμα, γραμμικής διάστασης  $L = 16$ , σε θερμοκρασία  $T = 2.1$ .

### 3.8 Εκτίμηση των Σφαλμάτων με τη Μέθοδο Jackknife

Η πολυπλοκότητα προσδιορισμού των σφαλμάτων σε μια προσομοίωση Monte Carlo, όπως αυτή εκφράζεται μέσα από την αδυναμία ακριβούς ποσοτικοποίησης των συσχετίσεων, επιβάλει την αξιοποίηση εναλλακτικών τεχνικών για την εκτίμησή τους. Οι γενικότερες μέθοδοι επαναδειγματοποίησης, όπως είναι οι μέθοδοι bootstrap και jackknife αξιοποιούν τα αποτελέσματα μιας προσομοίωσης δημιουργώντας συστηματικά τροποποιημένα “αντίγραφα” των πρωταρχικών χρονοσειρών. Αυτά μπορούν να χρησιμοποιηθούν για την εκτίμηση των σφαλμάτων χωρίς τον ακριβή προσδιορισμό των συσχετίσεων που μπορεί να παρουσιάζονται. Σημειώνεται ότι οι μέθοδοι επαναδειγματοποίησης χρησιμοποιούνται με επιτυχία εξαιτίας της σχετικά εύκολης αυτοματοποίησής τους, γεγονός το οποίο κατέστη δυνατό μόνο με την ανάπτυξη των ηλεκτρονικών υπολογιστών. Στη συνέχεια περιγράφεται συνοπτικά η μέθοδος jackknife, η οποία χρησιμοποιήθηκε στην παρούσα εργασία.

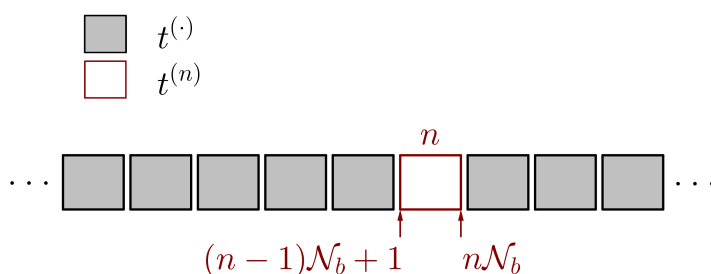
Έστω ότι μετά το πέρας μιας προσομοίωσης Monte Carlo προκύπτει μια χρονοσειρά  $Q(t)$ , από τον υπολογισμό κάποιας θερμοδυναμικής ποσότητας, για συνολικό αριθμό sweeps  $\mathcal{N}$  (μετά την επίτευξη θερμοδυναμικής ισορροπίας). Αρχικά χωρίζεται η χρονοσειρά σε  $n$  επιμέρους τμήματα (blocks) πλήθους τιμών  $\mathcal{N}_b$  το καθένα, με αποτέλεσμα το συνολικό πλήθος τιμών της χρονοσειράς να είναι  $\mathcal{N} = n\mathcal{N}_b$ . Η μέθοδος jackknife λειτουργεί δημιουργώντας  $n$  νέες “τροποποιημένες” χρονοσειρές, καθεμία αποτελούμενη από ακριβώς  $\mathcal{N} - \mathcal{N}_b$  τιμές.

Κάτι τέτοιο πραγματοποιείται ως εξής: αρχικά αφαιρείται το πρώτο τμήμα ( $n = 1$ ) τιμών της χρονοσειράς, οπότε προκύπτει μια νέα χρονοσειρά με  $\mathcal{N} - \mathcal{N}_b$  τιμές. Στη συνέχεια το πρώτο τμήμα επαναφέρεται στην πρωταρχική χρονοσειρά και αφαιρείται το δεύτερο τμήμα ( $n = 2$ ) κ.ο.κ. Το αποτέλεσμα αυτής της διαδικασίας οδηγεί στη δημιουργία ακριβώς  $n$  νέων χρονοσειρών και για κάθε μία από αυτές εκτιμάται η θερμοδυναμική ποσότητα  $Q_{\text{jack}}^{(n)}$  σύμφωνα με τη σχέση

$$Q_{\text{jack}}^{(n)} = \frac{1}{(\mathcal{N} - \mathcal{N}_b)} \sum_{t^{(\cdot)}} Q_{t^{(\cdot)}}. \quad (3.44)$$

Με  $\mathcal{N} - \mathcal{N}_b$  συμβολίζεται το πλήθος των τιμών που αντιστοιχούν στη νέα χρονοσειρά, απουσία του  $n$ -οστού block. Σημειώνεται επίσης ότι ο δείκτης  $t^{(\cdot)}$  αναφέρεται σε όλες τις τιμές της νέας χρονοσειράς, χωρίς να λαμβάνονται υπόψη οι τιμές  $t^{(n)}$  που εμπεριέχονται στο  $n$ -οστό block (Εικόνα 3.5):

$$(n - 1)\mathcal{N}_b + 1 \leq t^{(n)} \leq n\mathcal{N}_b. \quad (3.45)$$



**Εικόνα 3.5:** Σχηματική απεικόνιση της μεθόδου jackknife.

Επομένως, προκύπτουν  $n$  διαφορετικές εκτιμήσεις της ποσότητας  $Q_{\text{jack}}^{(n)}$ . Στη συνέχεια υπολογίζεται η μέση τιμή των  $n$  διαφορετικών εκτιμήσεων σύμφωνα με τη σχέση

$$\bar{Q}_{\text{jack}} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n Q_{\text{jack}}^{(i)}. \quad (3.46)$$



Η συστηματική αυτή διαδικασία οδηγεί σε ικανοποιητική εκτίμηση του σφάλματος  $\delta\bar{Q}$ , το οποίο δίνεται από τη σχέση

$$\delta\bar{Q} = \sqrt{\frac{n-1}{n} \sum_{i=1}^n \left[ Q_{\text{jack}}^{(i)} - \bar{Q}_{\text{jack}} \right]^2}. \quad (3.47)$$

Πρέπει να τονιστεί ότι για συνεπή σφάλματα ως προς την επιθυμητή ακρίβεια, απαιτείται επιπλέον μια διερεύνηση για την κατάλληλη επιλογή των παραμέτρων  $n$  και  $\mathcal{N}_b$  που εμπλέκονται στην εφαρμογή της μεθόδου jackknife. Μια συνήθης πρακτική περιγράφεται στο άρθρο [27] και είναι αυτή που εφαρμόστηκε στην εργασία αυτή. Για κάθε προσομοίωση εξασφαλίζεται ότι το πλήθος τιμών  $\mathcal{N}$  των χρονοσειρών, ικανοποιεί το κριτήριο

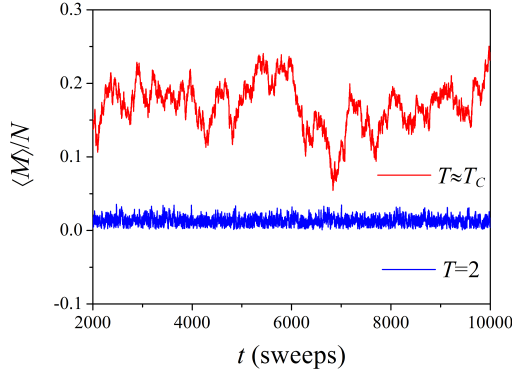
$$\mathcal{N} \geq 10000\tau_{\text{int}}. \quad (3.48)$$

Τότε επιλέγεται το πλήθος των τμημάτων (blocks) για την εφαρμογή της μεθόδου jackknife στο διάστημα  $n \in [100, 500]$ . Εάν ο εκτιμώμενος χρόνος αυτοσυσχέτισης δεν πληροί το παραπάνω κριτήριο, η προσομοίωση επαναλαμβάνεται για μεγαλύτερο χρόνο.

### 3.9 Προσομοιώσεις στην Κρίσιμη Περιοχή

Τα πιο ενδιαφέροντα φαινόμενα στη μελέτη της θερμοδυναμικής συμπεριφοράς ενός προτύπου με προσομοιώσεις Monte Carlo, λαμβάνουν χώρα καθώς το σύστημα προσεγγίζει την κρίσιμη περιοχή ( $T \rightarrow T_C^\pm$ ). Για ένα πεπερασμένο σύστημα, η θερμοκρασία αυτή αντιστοιχεί στην ψευδοκρίσιμη θερμοκρασία  $T_L^*$  που παρουσιάζει μέγιστο κάποια από τις επιδεκτικότητες ( $\chi$  ή  $C$ ), εξαιτίας του περιορισμού του μήκους συσχέτισης  $\xi$  από το μέγεθος του συστήματος.

Συγκεκριμένα, καθώς το σύστημα προσεγγίζει την κρίσιμη περιοχή, δημιουργούνται μεγάλα συμπλέγματα (clusters) με spin τα οποία παρουσιάζουν την ίδια κυρίαρχη διεύθυνση. Αποτέλεσμα της δημιουργίας των συμπλεγμάτων αυτών, είναι η εκδήλωση έντονων διακυμάνσεων στις χρονοσειρές της μαγνήτισης (Εικόνα 3.6) οι οποίες ονομάζονται *κρίσιμες διακυμάνσεις* (critical fluctuations). Αφού οι επιδεκτικότητες συνδέονται άμεσα με τις διακυμάνσεις των αντίστοιχων θερμοδυναμικών μεγεθών, είναι λογικό το φαινόμενο αυτό να γίνεται αισθητό με την εκδήλωση μεγίστου (ή απόκλισης στο θερμοδυναμικό όριο) στις ποσότητες αυτές καθώς το κρίσιμο σημείο προσεγγίζεται. Φυσικά το γεγονός αυτό οδηγεί σε αύξηση των στατιστικών σφαλμάτων στην εκτίμηση των αναμενόμενων τιμών. Οι κρίσιμες διακυμάνσεις όμως, είναι εγγενές χαρακτηριστικό του συστήματος στην κρίσιμη περιοχή και ένας αλγόριθμος ο οποίος λειτουργεί σωστά, οφείλει να παρουσιάζει κρίσιμες διακυμάνσεις.



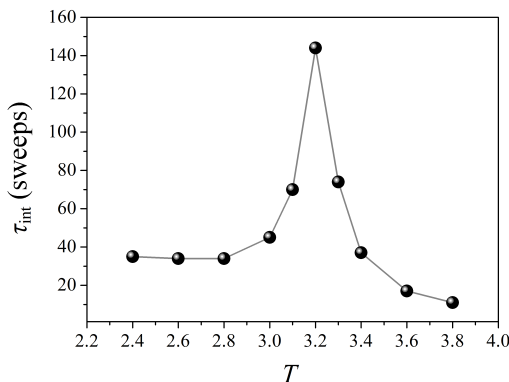
**Εικόνα 3.6:** Το φαινόμενο των κρίσιμων διακυμάνσεων (critical fluctuations) για τη χρονοσειρά της μαγνήτισης ανά spin  $\langle M \rangle / N$ . Με κόκκινο χρώμα απεικονίζεται η χρονοσειρά για  $T \approx T_C$ , ενώ με μπλε χρώμα η χρονοσειρά για  $T = 2$  ( $J = 1$ ,  $k_B = 1$ ). Οι προσομοιώσεις πραγματοποιήθηκαν σε sc πλέγμα, γραμμικής διάστασης  $L = 30$ .

Από την άλλη πλευρά, υπάρχει ακόμα ένα φαινόμενο που οδηγεί σε μεγάλα στατιστικά σφάλματα και ονομάζεται *κρίσιμη επιβράδυνση* (critical slowing down). Το φαινόμενο αυτό γίνεται αισθητό με απότομη αύξηση του χρόνου αυτοσυσχέτισης  $\tau_{\text{int}}$ , καθώς το σύστημα προσεγγίζει την κρίσιμη περιοχή και σε αντίθεση με τις κρίσιμες διακυμάνσεις, είναι αποτέλεσμα της δυναμικής που χρησιμοποιεί ο αλγόριθμος και όχι φυσικό χαρακτηριστικό του συστήματος. Σύμφωνα με τη σχέση (3.38), όσο αυξάνεται ο χρόνος αυτοσυσχέτισης, τόσο αυξάνεται και το σφάλμα στην εκτίμηση μιας θερμοδυναμικής ποσότητας. Μάλιστα, στο θερμοδυναμικό όριο, ο χρόνος αυτοσυσχέτισης αποκλίνει σύμφωνα με τον νόμο δύναμης

$$\tau_{\text{int}} \sim \xi^z, \quad T \rightarrow T_C. \quad (3.49)$$

και ο εκθέτης  $z$  ονομάζεται δυναμικός εκθέτης. Επομένως, καθώς το χαρακτηριστικό μέγεθος των συμπλεγμάτων αποκλίνει ( $\xi \rightarrow \infty$ ), το ίδιο συμβαίνει και στο χρόνο αυτοσυσχέτισης. Στην πράξη βέβαια, εξαιτίας του πεπερασμένου μεγέθους των συστημάτων στις προσομοιώσεις, ποτέ δεν παρατηρείται απόκλιση του χρόνου αυτοσυσχέτισης αλλά απότομη αύξηση (Εικόνα 3.7). Στην περίπτωση αυτή ο νόμος δύναμης λαμβάνει τη μορφή

$$\tau_{\text{int}} \sim L^z, \quad T \rightarrow T_C. \quad (3.50)$$



**Εικόνα 3.7:** Το φαινόμενο της κρίσιμης επιβράδυνσης (critical slowing down). Οι προσομοιώσεις πραγματοποιήθηκαν σε εδροκεντρωμένο κυβικό πλέγμα (fcc) γραμμικής διάστασης  $L = 12$ .

Ο δυναμικός εκθέτης  $z$  για την περίπτωση του αλγόριθμου Metropolis στις τρεις διαστάσεις είναι  $z = 2.02(2)$  [14]. Εν γένει, διαφορετικοί αλγόριθμοι χαρακτηρίζονται από διαφορετικούς δυναμικούς εκθέτες, ανάλογα με τη δυναμική προσομοίωσης που χρησιμοποιεί ο καθένας. Επομένως, για τη μελέτη της κρίσιμης συμπεριφοράς, πρέπει να χρησιμοποιούνται αλγόριθμοι που ελαχιστοποιούν όσο γίνεται το φαινόμενο της κρίσιμης επιβράδυνσης, προκειμένου να μειώνεται ο υπολογιστικός χρόνος που απαιτείται για την επιθυμητή ακρίβεια. Οι πιο αποτελεσματικοί αλγόριθμοι για τη μελέτη της κρίσιμης περιοχής, χρησιμοποιούν δυναμική συλλογικής μεταβολής συμπλεγμάτων spin (cluster update algorithms). Οι γνωστότεροι αλγόριθμοι cluster είναι οι αλγόριθμοι Swendsen-Wang [31] και Wolff [32], με δυναμικούς εκθέτες στις τρεις διαστάσεις,  $z = 0.54(2)$  και  $z = 0.33(1)$  αντίστοιχα [14].

Δυστυχώς, ο μόνος τρόπος για να μειωθούν τα στατιστικά σφάλματα που οφείλονται στο φαινόμενο της κρίσιμης επιβράδυνσης στην περίπτωση του αλγόριθμου Metropolis, είναι η σημαντική αύξηση του χρόνου προσομοίωσης για θερμοκρασίες κοντά στην κρίσιμη περιοχή.

### 3.10 Η Μέθοδος του Ενός Ιστογράμματος

Η μέθοδος του ενός ιστογράμματος (single histogram method) είναι μια τεχνική επαναπροσδιορισμού (reweighting) που επιτρέπει την πραγματοποίηση μιας προσομοίωσης σε μια συγκεκριμένη θερμοκρασία  $T_0$  και την προεκβολή των αποτελεσμάτων σε κοντινές θερμοκρασίες. Είναι προφανές ότι το γεγονός αυτό εξοικονομεί πολύτιμο υπολογιστικό χρόνο, σε αντίθεση με την πραγματοποίηση πολλαπλών προσομοιώσεων για την εξαγωγή των ίδιων αποτελεσμάτων. Επιπροσθέτως, είναι ιδιαίτερα αποτελεσματική μέθοδος στον ακριβή υπολογισμό της θέσης και της τιμής του μεγίστου μιας θερμοδυναμι-

κής ποσότητας στην κρίσιμη περιοχή. Κατά συνέπεια, η αξιοποίηση της μεθόδου αυτής σε συνδυασμό με τη θεωρία κλιμάκωσης πεπερασμένου μεγέθους, μπορεί να παρέχει όλες τις απαραίτητες πληροφορίες για τον ακριβή προσδιορισμό της κρίσιμης συμπεριφοράς. Η αποτελεσματικότητα της μεθόδου παρουσιάστηκε για πρώτη φορά από τους A. M. Ferrenberg και R. H. Swendsen, στην εργασία τους [33] και έκτοτε αποτελεί βασικό εργαλείο στον προσδιορισμό της κρίσιμης συμπεριφοράς με μεθόδους Monte Carlo.

Η ουσία της μεθόδου είναι ιδιαίτερα απλή και βασίζεται στην αξιοποίηση της κατανομής των πιθανοτήτων εμφάνισης  $p_{\mu_i}$  των καταστάσεων  $\mu_i$ , στην αντίστροφη θερμοκρασία  $\beta_0$ , για την προεκβολή της αντίστοιχης κατανομής σε κοντινές θερμοκρασίες. Ο εκτιμητής μιας ποσότητας  $Q$  στην αντίστροφη θερμοκρασία  $\beta$  σύμφωνα με τη σχέση (3.2) είναι

$$\langle Q \rangle(\beta) = \frac{\sum_{\mu_i}^{\mathcal{N}} Q_{\mu_i} p_{\mu_i}^{-1} \exp(-\beta E_{\mu_i})}{\sum_{\mu_i}^{\mathcal{N}} p_{\mu_i}^{-1} \exp(-\beta E_{\mu_i})}. \quad (3.51)$$

Εάν οι πιθανότητες εμφάνισης  $p_{\mu_i}$  δεν επιλεγούν με βάση την κατανομή Boltzmann στην αντίστροφη θερμοκρασία  $\beta$ , αλλά σύμφωνα με την κατανομή Boltzmann σε μια κοντινή θερμοκρασία  $\beta_0$ , δηλαδή

$$p_{\mu_i} = \frac{e^{-\beta_0 E_{\mu_i}}}{\mathcal{Z}_0}, \quad (3.52)$$

τότε ο εκτιμητής της ποσότητας  $Q$  γράφεται

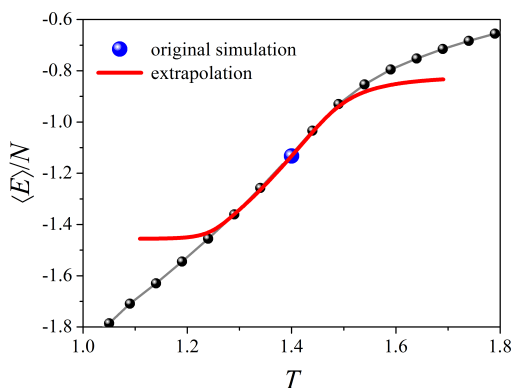
$$\langle Q \rangle(\beta) = \frac{\sum_{\mu_i}^{\mathcal{N}} Q_{\mu_i} \exp(-(\beta - \beta_0) E_{\mu_i})}{\sum_{\mu_i}^{\mathcal{N}} \exp(-(\beta - \beta_0) E_{\mu_i})}. \quad (3.53)$$

Η σχέση αυτή αποτελεί τη θεμελιώδη εξίσωση της μεθόδου του ενός ιστογράμματος στην πιο απλή της μορφή και λειτουργεί εκμεταλλευόμενη τη χρονοσειρά ενός θερμοδυναμικού μεγέθους  $Q(t)$  στην αντίστροφη θερμοκρασία  $\beta_0$ , για την εκτίμηση της αναμενόμενης τιμής  $\langle Q \rangle(\beta)$  στην αντίστροφη θερμοκρασία  $\beta$ .

Σε αυτό το σημείο μπορεί εσφαλμένα να εξαχθεί το συμπέρασμα ότι η πραγματοποίηση μιας προσομοίωσης σε μια θερμοκρασία  $T_0$ , αρκεί για την εκτίμηση των αναμενόμενων τιμών σε οποιαδήποτε θερμοκρασία. Στην πραγματικότητα η κατάσταση είναι πιο σύνθετη, αφού η προεκβολή σε θερμοκρασίες αρκετά μακριά από τη θερμοκρασία  $T_0$ , δίνει εσφαλμένα αποτελέσματα. Για τη διερεύνηση των επιτρεπτών ορίων προεκβολής απαιτείται λεπτομερέστερη ανάλυση που πάντα πρέπει να λαμβάνεται υπόψη στην εφαρμογή της μεθόδου, ούτως ώστε να μην εισάγονται επιπλέον συστηματικά σφάλματα στις εκτιμήσεις των θερμοδυναμικών μεγεθών.

Στην Εικόνα 3.8 παρουσιάζεται η εφαρμογή της μεθόδου του ενός ιστογράμματος για την ενέργεια ανά spin  $\langle E \rangle/N$ . Η προσομοίωση πραγματοποιήθηκε σε sc πλέγμα, γραμμικής διάστασης  $L = 10$ , σε θερμοκρασία  $T = 1.4$  (μπλε σφαίρα) και με κόκκινη

γραμμή απεικονίζονται τα αποτελέσματα της προεκβολής. Επιπλέον, πραγματοποιήθηκαν ανεξάρτητα προσομοιώσεις σε κατάλληλο εύρος θερμοκρασιών (μαύρες σφαίρες), προκειμένου να εκτιμηθεί η μέση ενέργεια ανά spin απευθείας. Φαίνεται ότι τα αποτελέσματα είναι σε καλή συμφωνία, όσο το εύρος προεκβολής περιορίζεται αρκετά κοντά στη θερμοκρασία  $T_0$  που πραγματοποιείται η αρχική προσομοίωση.



**Εικόνα 3.8:** Εφαρμογή της μεθόδου του ενός ιστογράμματος για την ενέργεια ανά spin  $\langle E \rangle / N$ . Η προσομοίωση (μπλε σφαίρα) πραγματοποιήθηκε σε sc πλέγμα, γραμμικής διάστασης  $L = 10$ , σε θερμοκρασία  $T_0 = 1.4$ . Με κόκκινο χρώμα απεικονίζονται τα αποτελέσματα της προεκβολής, ενώ με μαύρες σφαίρες, παρουσιάζονται συγκριτικά, τα αποτελέσματα ανεξάρτητων προσομοιώσεων στο θερμοκρασιακό εύρος  $T = 1.0$ -1.8.

Για την εύρεση του εύρους προεκβολής, θεωρείται ως παράδειγμα η περίπτωση της μέσης ενέργειας  $\langle E \rangle$ . Η θεμελιώδης εξίσωση (3.53) της μεθόδου του ενός ιστογράμματος για την ενέργεια μπορεί να γραφτεί στη μορφή

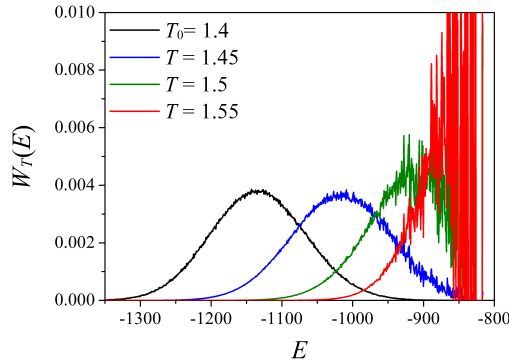
$$\langle E \rangle = \frac{\sum_E E N(E) \exp(-(\beta - \beta_0)E)}{\sum_E N(E) \exp(-(\beta - \beta_0)E)}, \quad (3.54)$$

όπου η άθροιση πραγματοποιείται σε όλες τις τιμές της ενέργειας και με  $N(E)$  συμβολίζεται το πλήθος των φορών εμφάνισης της τιμής  $E$ , κατά τη διάρκεια της προσομοίωσης. Κατά συνέπεια, η ποσότητα  $N(E)$  μπορεί να θεωρηθεί ως το ιστόγραμμα της κατανομής των ενεργειών  $E$ . Φυσικά, για την περίπτωση του προτύπου Heisenberg όπου το ενεργειακό φάσμα είναι συνεχές, η θεώρηση του ιστογράμματος  $N(E)$ , προϋποθέτει επιπλέον τη διαμέριση των τιμών της χρονοσειράς σε κατάλληλα τμήματα (bins). Το γεγονός αυτό εισάγει επιπρόσθετα σφάλματα τα οποία πρέπει να λαμβάνονται υπόψη στους υπολογισμούς. Ωστόσο, η εξίσωση (3.53) είναι το μόνο που απαιτείται για την εφαρμογή της μεθόδου και η έννοια του ιστογράμματος εισάγεται καθαρά για τον προσδιορισμό του εύρους προεκβολής.

Σύμφωνα με τα προαναφερθέντα, η σχέση (3.54) μπορεί να θεωρηθεί ως σταθμισμένος μέσος, με κατάλληλες συναρτήσεις βάρους που εξαρτώνται από τη διαφορά  $\beta - \beta_0$ , δηλαδή

$$\langle E \rangle = \sum_E EW(E), \quad \text{με} \quad W(E) = \frac{N(E) \exp(-(\beta - \beta_0)E)}{\sum_E N(E) \exp(-(\beta - \beta_0)E)}. \quad (3.55)$$

Στην Εικόνα 3.9 παρουσιάζονται οι συναρτήσεις βάρους  $W_T(E)$  μετά τη διαδικασία της προεκβολής, για θερμοκρασίες  $T = 1.45$  (μπλε γραμμή),  $1.5$  (πράσινη γραμμή) και  $1.55$  (κόκκινη γραμμή). Η μαύρη γραμμή αναφέρεται στην αρχική προσομοίωση, η οποία πραγματοποιήθηκε σε απλό κυβικό πλέγμα, γραμμικής διάστασης  $L = 10$ , σε θερμοκρασία  $T_0 = 1.4$ .



**Εικόνα 3.9:** Συναρτήσεις βάρους  $W_T(E)$  για θερμοκρασίες (από αριστερά προς τα δεξιά)  $T = 1.4, 1.45, 1.5$  και  $1.55$ . Η προσομοίωση πραγματοποιήθηκε σε sc πλέγμα, γραμμικής διάστασης  $L = 10$ , σε θερμοκρασία  $T_0 = 1.4$ .

Όπως εύκολα μπορεί να διαπιστωθεί, όταν το εύρος προεκβολής αυξάνεται αρκετά (κόκκινη γραμμή), η μέθοδος του ενός ιστογράμματος δεν μπορεί να παρέχει αξιόπιστα αποτελέσματα. Σύμφωνα με τη σχέση (3.55), όσο οι τιμές  $N(E) \gg 1$ , η συνάρτηση βάρους  $W_T(E)$ , μπορεί να προσδιορίζεται ικανοποιητικά και να παρέχει αξιόπιστες εκτιμήσεις των αναμενόμενων τιμών της ενέργειας. Εάν γίνει η υπόθεση ότι το μέσο της κατανομής  $W_{T_0}(E)$  αντιστοιχεί στη μέση ενέργεια  $\langle E \rangle_{T_0}$ , τότε για την αξιόπιστη εκτίμηση της αναμενόμενης τιμής σε θερμοκρασία  $T$ , πρέπει να ισχύει

$$|\langle E \rangle_T - \langle E \rangle_{T_0}| \leq \delta E_{T_0}, \quad (3.56)$$

ούτως ώστε να εξασφαλίζεται ότι ισχύει  $N(E) \gg 1$ . Με  $\delta E_{T_0}$ , συμβολίζεται η διακύμανση της κατανομής  $W_{T_0}(E)$ . Εάν χρησιμοποιηθεί επιπλέον το γεγονός ότι

$$(\delta E_{T_0})^2 = \langle E^2 \rangle_{T_0} - \langle E \rangle_{T_0}^2 = T_0^2 C(T_0), \quad (k_B = 1), \quad (3.57)$$

η σχέση (3.56) γράφεται συναρτήσει της ειδικής θερμότητας ως

$$|\langle E \rangle_T - \langle E \rangle_{T_0}|^2 \leq T_0^2 C(T_0). \quad (3.58)$$

Επιπροσθέτως, εάν αναπτυχθεί κατά Taylor η ποσότητα  $\langle E \rangle_T$  γύρω από τη θερμοκρασία  $T_0$ , προκύπτει

$$\langle E \rangle_T \approx \langle E \rangle_{T_0} + \left. \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial T} \right|_{T_0} (T - T_0) + \mathcal{O}((T - T_0)^2) \Rightarrow \quad (3.59)$$

$$\langle E \rangle_T - \langle E \rangle_{T_0} = C(T_0)(T - T_0) \quad (3.60)$$

και η σχέση (3.56) γράφεται

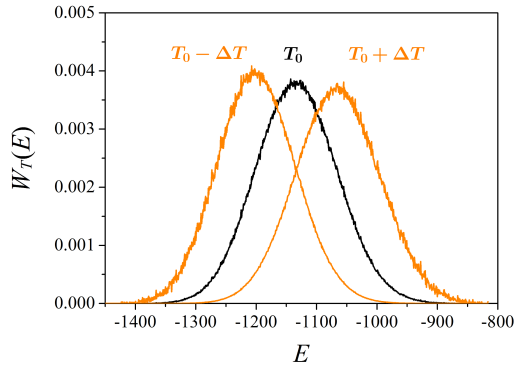
$$(T - T_0)^2 C(T_0) \leq T_0^2. \quad (3.61)$$

Συνεπώς, η μέθοδος του ενός ιστογράμματος μπορεί να παρέχει με βεβαιότητα αξιόπιστα αποτελέσματα για θερμοκρασίες που βρίσκονται στο διάστημα

$$-\frac{T_0}{\sqrt{C(T_0)}} \leq \Delta T \leq \frac{T_0}{\sqrt{C(T_0)}}. \quad (3.62)$$

Στην Εικόνα 3.10 παρουσιάζονται οι συναρτήσεις βάρους  $W_T(E)$  για τις οριακές περιπτώσεις  $T = T_0 \pm \Delta T$ , συγκριτικά με τη συνάρτηση βάρους  $W_{T_0}(E)$  της αρχικής προσομοίωσης. Όπως μπορεί να διαπιστωθεί, οι προεκβληθείσες συναρτήσεις βάρους παρουσιάζουν αρκετά ομαλή συμπεριφορά εντός του εύρους  $\Delta T$ . Κατά συνέπεια, η μέθοδος του ενός ιστογράμματος παρέχει αξιόπιστα αποτελέσματα.

Αξίζει να σημειωθεί ότι το κριτήριο της σχέσης (3.62), στην περίπτωση αρκετά μεγάλων χρονοσειρών ( $\mathcal{N} \sim 10^6$ - $10^7$  sweeps), είναι πολύ αυστηρό, συνεπώς η προεκβολή σε θερμοκρασιακό εύρος  $2\Delta T$  μπορεί να παρέχει επίσης πολύ αξιόπιστα αποτελέσματα [14]. Άλλο σύνηθες κριτήριο που χρησιμοποιείται στη βιβλιογραφία, είναι ο περιορισμός του εύρους προεκβολής, με την απαίτηση το μέγιστο της προεκβληθείσας συνάρτησης βάρους  $W_T(E)$ , να μην ξεπερνά την τιμή της ενέργειας για την οποία η αρχική συνάρτηση βάρους  $W_{T_0}(E)$ , έχει μειωθεί στο μισό ή στο ένα τρίτο της μέγιστης τιμής της [34]. Ωστόσο, στην εργασία αυτή χρησιμοποιήθηκε το κριτήριο της σχέσης (3.62).



**Εικόνα 3.10:** Συναρτήσεις βάρους  $W_T(E)$ , στο εύρος προεκβολής  $\Delta T = \pm T_0 / \sqrt{C(T_0)}$  (πορτοκαλί γραμμή), συγκριτικά με τη συνάρτηση βάρους  $W_{T_0}(E)$  (μαύρη γραμμή). Η προσομοίωση πραγματοποιήθηκε σε sc πλέγμα, γραμμικής διάστασης  $L = 10$ , σε θερμοκρασία  $T_0 = 1.4$ .

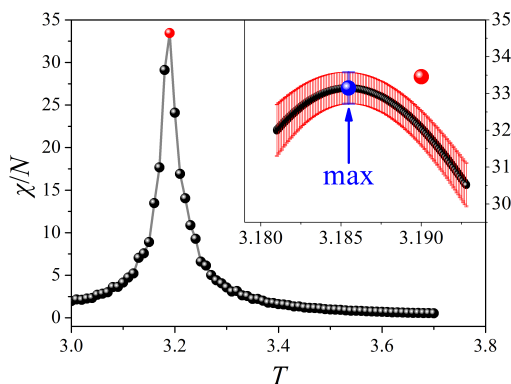
### 3.10.1 Εφαρμογή της Μεθόδου στην Κρίσιμη Περιοχή

Η δύναμη της μεθόδου του ενός ιστογράμματος αναδεικνύεται από την ακρίβεια που παρέχει στον προσδιορισμό της τιμής και της τοποθεσίας του μεγίστου κάποιας θερμοδυναμικής ποσότητας. Για ένα μη ακριβώς επιλύσιμο πρότυπο, όπως είναι η περίπτωση του κλασικού προτύπου Heisenberg, ο ακριβής προσδιορισμός του μεγίστου είναι μια εξαιρετικά δύσκολη διαδικασία, αφού απαιτεί την πραγματοποίηση πολλών προσομοιώσεων σε συστηματικά όλο και μικρότερα θερμοκρασιακά εύρη, με μεγάλο κόστος υπολογιστικού χρόνου. Από την άλλη πλευρά, η μέθοδος του ενός ιστογράμματος προσφέρει τεράστια ακρίβεια στη θερμοκρασιακή διαμέριση, αξιοποιώντας τα αποτελέσματα μόνο μιας προσομοίωσης, γεγονός που την καθιστά απαραίτητο εργαλείο στη μελέτη της κρίσιμης συμπεριφοράς.

Το γεγονός αυτό είναι εμφανές στην Εικόνα 3.11, όπου παρουσιάζονται τα αποτελέσματα προσομοιώσεων για την μαγνητική επιδεκτικότητα ανά spin  $\chi/N$  σε fcc πλέγμα, γραμμικής διάστασης  $L = 30$ , σε θερμοκρασίες αρκετά κοντά στην κρίσιμη<sup>6</sup>. Με κόκκινη σφαίρα απεικονίζεται η εκτιμώμενη τιμή του μεγίστου από τις προσομοιώσεις στο εύρος  $T = 3.0-3.7$ , ενώ στο ένθετο παρουσιάζεται σε μεγέθυνση η περιοχή του μεγίστου, μαζί με τα αποτελέσματα της μεθόδου του ενός ιστογράμματος. Σημειώνεται, ότι η προσομοίωση βάσει της οποίας εφαρμόστηκε η προεκβολή, πραγματοποιήθηκε σε θερμοκρασία  $T_0 = 3.1869$ .

<sup>6</sup>Εφόσον το κρίσιμο σημείο δεν είναι γνωστό από κάποια διαθέσιμη αναλυτική λύση, η εκτίμηση της κρίσιμης περιοχής πραγματοποιείται με δοκιμαστικές προσομοιώσεις.





**Εικόνα 3.11:** Μαγνητική επιδεκτικότητα ανά spin στο θερμοκρασιακό εύρος  $T = 3.0$ - $3.7$ . Στο ένθετο απεικονίζεται σε μεγέθυνση το μέγιστο (κόκκινη σφαίρα), συγκριτικά με τα αποτελέσματα της μεθόδου του ενός ιστογράμματος, για θερμοκρασία  $T_0 = 3.1869$ , στο εύρος προβολής  $T = T_0 \pm T_0 / \sqrt{C(T_0)}$ . Οι προσομοιώσεις πραγματοποιήθηκαν σε fcc πλέγμα, γραμμικής διάστασης  $L = 30$ .

Όπως εύκολα μπορεί να διαπιστωθεί, η μέθοδος του ενός ιστογράμματος παρέχει εξαιρετική ακρίβεια, τόσο στην τοποθεσία, όσο και στην τιμή του μεγίστου. Κατά συνέπεια, η συστηματική αξιοποίηση της μεθόδου αυτής για διαφορετικά μεγέθη πλεγμάτων, προσφέρει όλες τις απαραίτητες πληροφορίες για τον τρόπο με τον οποίο κλιμακώνονται οι τιμές των μεγίστων και οι αντίστοιχες ψευδοκρίσιμες θερμοκρασίες οποιασδήποτε θερμοδυναμικής ποσότητας. Το τελευταίο γεγονός σε συνδυασμό με τη θεωρία κλιμάκωσης πεπερασμένου μεγέθους, προσφέρει τη δυνατότητα λεπτομερούς μελέτης της κρίσιμης συμπεριφοράς, με ακριβή υπολογισμό τόσο της κρίσιμης θερμοκρασίας μετάβασης, όσο και των κρίσιμων εκθετών.



# Κεφάλαιο 4

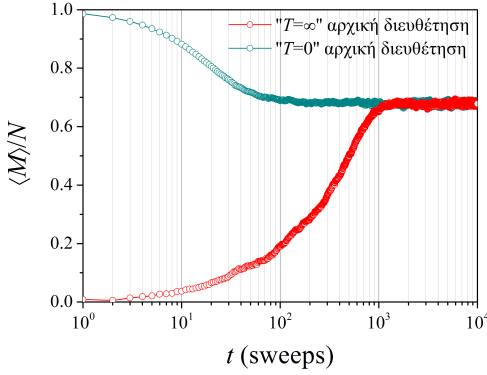
## Αποτελέσματα Προσομοιώσεων

---

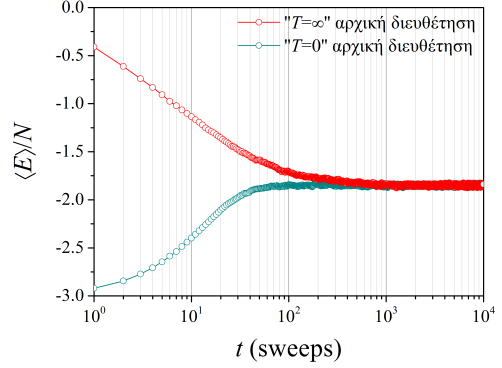
### 4.1 Εκτίμηση του Χρόνου Εξισορρόπησης

Το πρώτο βήμα στη λήψη αξιόπιστων αποτελεσμάτων με τη μέθοδο Monte Carlo, είναι η εκτίμηση του χρόνου εξισορρόπησης  $\tau_{\text{eq}}$  που απαιτείται ούτως ώστε οι καταστάσεις που λαμβάνονται υπόψη για τον προσδιορισμό των θερμοδυναμικών μεγεθών, να αντιστοιχούν σε καταστάσεις ισορροπίας. Κάτι τέτοιο καθίσταται δυνατό μέσω παρατήρησης των χρονοσειρών της μαγνήτισης (ανά spin) και της ενέργειας (ανά spin) που είναι οι βασικές ποσότητες οι οποίες υπολογίζονται σε μια προσομοίωση Monte Carlo. Επιπλέον, πρέπει να λαμβάνεται υπόψη ότι σε διαφορετικές θερμοκρασίες, το σύστημα προσεγγίζει με διαφορετικούς ρυθμούς τις καταστάσεις ισορροπίας, αναλόγως την αρχική διεύθυνση η οποία θεωρείται στην εκάστοτε προσομοίωση. Επιπροσθέτως, πρέπει να σημειωθεί ότι στην κρίσιμη περιοχή, ο προσδιορισμός του χρόνου εξισορρόπησης είναι δυσκολότερος, εξαιτίας του φαινομένου των κρίσιμων διακυμάνσεων, γεγονός το οποίο πρέπει να λαμβάνεται πάντα υπόψη. Κατά συνέπεια, προσεκτικές εκτιμήσεις του χρόνου εξισορρόπησης σύμφωνα με τα προαναφερθέντα, μπορούν σε πολλές περιπτώσεις να εξοικονομήσουν πολύτιμο υπολογιστικό χρόνο.

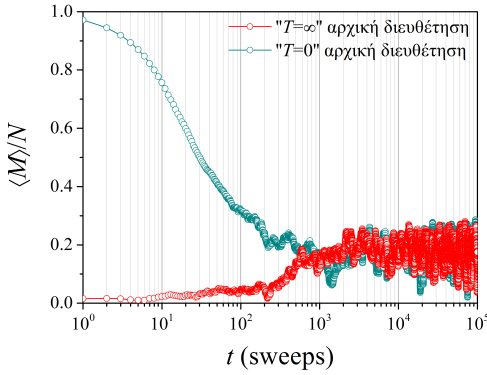
Στην εργασία αυτή, ο χρόνος εξισορρόπησης εκτιμήθηκε σε τρεις διαφορετικές θερμοκρασιακές περιοχές ( $T < T_C$ ,  $T \approx T_C$  και  $T > T_C$ ), βάσει του μεγαλύτερου προσομοιωμένου συστήματος ( $L = 30$ ), για κάθε τύπο πλέγματος (sc, bcc και fcc). Στις Εικόνες που ακολουθούν, παρουσιάζονται οι χρονοσειρές της μαγνήτισης και της ενέργειας ανά spin, για το sc πλέγμα, γραμμικής διάστασης  $L = 30$ , στις τρεις προαναφερθείσες θερμοκρασιακές περιοχές. Σε κάθε Εικόνα με κόκκινο χρώμα απεικονίζονται οι χρονοσειρές για αρχική διεύθυνση που αντιστοιχεί σε " $T = \infty$ ", ενώ με κυανό, οι χρονοσειρές για αρχική διεύθυνση που αντιστοιχεί σε " $T = 0$ ". Σημειώνεται ότι οι αντίστοιχες χρονοσειρές για τα bcc και fcc πλέγματα παρατίθενται στο Παράρτημα Α'.



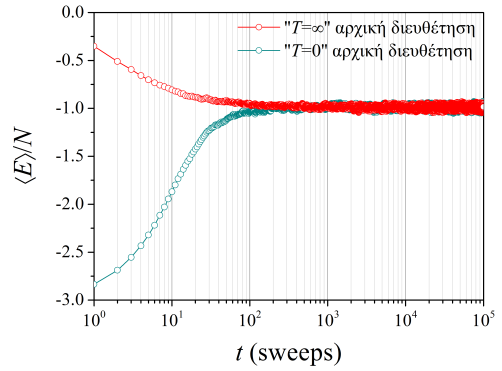
(i)



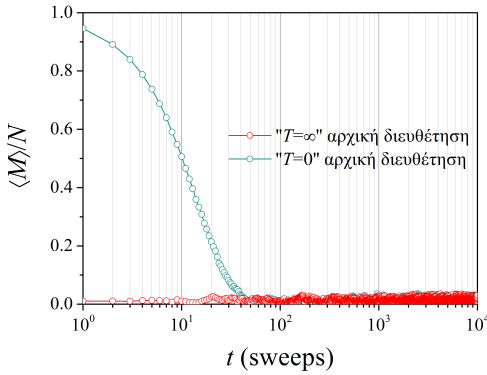
(ii)



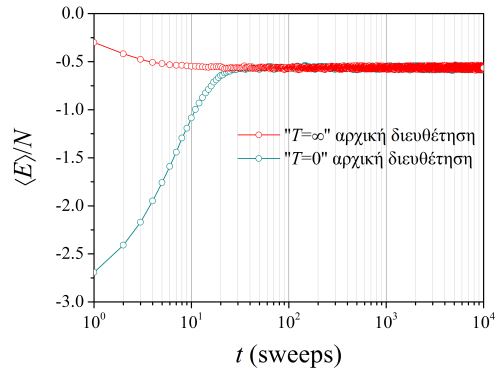
(iii)



(iv)



(v)



(vi)

**Εικόνα 4.1:** Χρονοσειρές της μαγνήτισης (πρώτη στήλη) και της ενέργειας (δεύτερη στήλη) ανά spin για δύο διαφορετικές αρχικές διευθετήσεις (κόκκινο: “ $T = \infty$ ”, κυανό “ $T = 0$ ”). Οι προσομοιώσεις πραγματοποιήθηκαν σε sc πλέγμα, γραμμικής διάστασης  $L = 30$ , σε θερμοκρασίες  $T = 1$  (Εικόνες 4.1i και 4.1ii),  $T \approx T_C$  (Εικόνες 4.1iii και 4.1iv) και  $T = 2$  (Εικόνες 4.1v και 4.1vi).

Σύμφωνα με τις Εικόνες 4.1i και 4.1ii εξάγεται το συμπέρασμα ότι για θερμοκρασίες  $T < T_C$ , η διευθέτηση που αντιστοιχεί σε “ $T = 0$ ”, χαρακτηρίζεται από χρόνο εξισορρόπησης  $\tau_{eq} \sim 1000$  sweeps, σε αντίθεση με τη διευθέτηση που αντιστοιχεί σε “ $T = \infty$ ”, που ο χρόνος εξισορρόπησης εκτιμάται σε  $\tau_{eq} \sim 2000-3000$  sweeps. Στις Εικόνες 4.1iii και 4.1iv, που αναφέρονται σε προσομοιώσεις στην κρίσιμη περιοχή ( $T \approx T_C$ ), δεν μπορεί να προσδιοριστεί ποια από τις διευθετήσεις χαρακτηρίζεται από μικρότερο χρόνο εξισορρόπησης, ο οποίος εκτιμάται σε  $\tau_{eq} \sim 10000$  sweeps. Τέλος, σύμφωνα με τις Εικόνες 4.1v και 4.1vi, για θερμοκρασίες  $T > T_C$ , προκύπτει ότι και οι δύο διευθετήσεις χαρακτηρίζονται από πολύ μικρό χρόνο εξισορρόπησης  $\tau_{eq} < 100$  sweeps.

Συνεκτιμώντας τα παραπάνω και αντίστοιχα τα διαγράμματα του Παραρτήματος Α', προκειμένου να αυτοματοποιείται η διαδικασία της προσομοίωσης, ως αρχική διευθέτηση για κάθε τύπο πλέγματος, σε κάθε θερμοκρασία, επιλέγεται αυτή που αντιστοιχεί σε “ $T = 0$ ”. Για θερμοκρασίες εκτός της κρίσιμης περιοχής, ο χρόνος εξισορρόπησης επιλέγεται  $\tau_{eq} = 2000$  sweeps. Στην κρίσιμη περιοχή, για το sc και το bcc πλέγμα, ο χρόνος εξισορρόπησης επιλέγεται  $\tau_{eq} = 10000$  sweeps, ενώ για το fcc πλέγμα,  $\tau_{eq} = 20000$  sweeps.

## 4.2 Θερμοδυναμικά Μεγέθη

Ο προσδιορισμός των θερμοδυναμικών μεγεθών για κάθε τύπο πλέγματος πραγματοποιήθηκε στο θερμοκρασιακό εύρος  $T = 0.1-6.0$ , το οποίο χωρίστηκε σε κατάλληλα επιμέρους διαστήματα, προκειμένου να συμπεριληφθούν σωστά οι διαφορετικές συνθήκες που σχετίζονται με την κρίσιμη περιοχή. Στη συνέχεια παρουσιάζονται οι συνθήκες στις οποίες έλαβαν χώρα οι προσομοιώσεις για κάθε τύπο πλέγματος.

- Απλό κυβικό πλέγμα (sc)

Για  $T \in [0.1, 1.0] \cup [2.1, 6.0]$ , οι προσομοιώσεις πραγματοποιήθηκαν με βήμα  $\delta T = 0.1$  και για κάθε θερμοκρασία το σύστημα αφήθηκε να εξισορροπήσει για  $\tau_{eq} = 2000$  sweeps, ενώ για  $T \in [1.01, 2.0]$ , οι προσομοιώσεις πραγματοποιήθηκαν με βήμα  $\delta T = 0.01$  και για κάθε θερμοκρασία, το σύστημα αφήθηκε να εξισορροπήσει για  $\tau_{eq} = 10000$  sweeps.

- Χωροκεντρωμένο κυβικό πλέγμα (bcc)

Για  $T \in [0.1, 1.6] \cup [2.7, 6.0]$ , οι προσομοιώσεις πραγματοποιήθηκαν με βήμα  $\delta T = 0.1$  και για κάθε θερμοκρασία το σύστημα αφήθηκε να εξισορροπήσει για  $\tau_{eq} = 2000$  sweeps, ενώ για  $T \in [1.61, 2.6]$ , οι προσομοιώσεις πραγματοποιήθηκαν με βήμα  $\delta T = 0.01$  και για κάθε θερμοκρασία, το σύστημα αφήθηκε να εξισορροπήσει για  $\tau_{eq} = 10000$  sweeps.

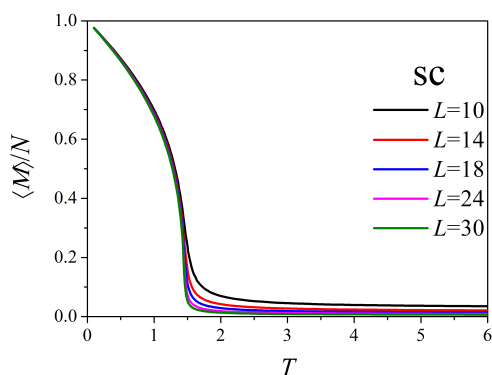
- Εδροκεντρωμένο κυβικό πλέγμα (fcc)

Για  $T \in [0.1, 2.7] \cup [3.8, 6.0]$ , οι προσομοιώσεις πραγματοποιήθηκαν με βήμα  $\delta T = 0.1$  και για κάθε θερμοκρασία το σύστημα αφήθηκε να εξισορροπήσει για  $\tau_{\text{eq}} = 2000$  sweeps, ενώ για  $T \in [2.71, 3.70]$ , οι προσομοιώσεις πραγματοποιήθηκαν με βήμα  $\delta T = 0.01$  και για κάθε θερμοκρασία, το σύστημα αφήθηκε να εξισορροπήσει για  $\tau_{\text{eq}} = 20000$  sweeps.

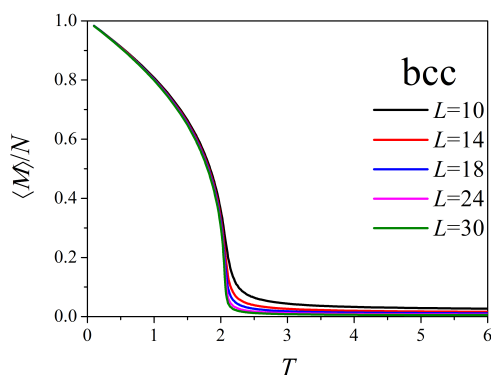
Για κάθε τύπο πλέγματος και σε κάθε θερμοκρασία, τα θερμοδυναμικά μεγέθη προσδιορίστηκαν χρησιμοποιώντας  $\mathcal{N} = 200000$  sweeps σε κατάλληλο σύστημα μονάδων όπου  $J = 1$  και  $k_B = 1$ . Ωστόσο, είναι σημαντικό να σημειωθεί ότι δεν υπολογίστηκαν τα σφάλματα στην εκτίμηση των θερμοδυναμικών μεγεθών και η παρουσίασή τους γίνεται μόνο για την ανάδειξη των ποιοτικών χαρακτηριστικών της αλλαγής φάσης σε πεπερασμένα συστήματα, για την περίπτωση του κλασικού σιδηρομαγνητικού προτύπου Heisenberg.

### 4.2.1 Μαγνήτιση ανά spin

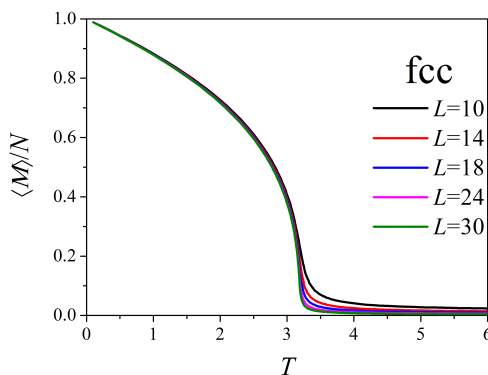
Η μαγνήτιση ανά spin προσδιορίστηκε σύμφωνα με τη σχέση (3.32) του Κεφαλαίου 3. Στις Εικόνες 4.2i, 4.2ii και 4.2iii, παρουσιάζονται τα αποτελέσματα των προσομοιώσεων για τη μαγνήτιση ανά spin σε sc, bcc και fcc πλέγματα αντίστοιχα, γραμμικής διάστασης  $L = 10, 14, 18, 24$  και 30.



(i)



(ii)



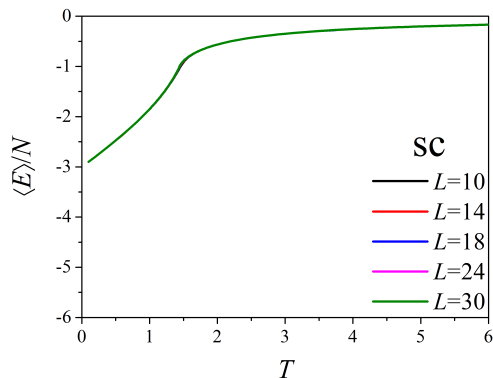
(iii)

**Εικόνα 4.2:** Μαγνήτιση ανά spin για κυβικά πλέγματα (sc, bcc και fcc) γραμμικής διάστασης  $L = 10, 14, 18, 24$  και  $30$ .

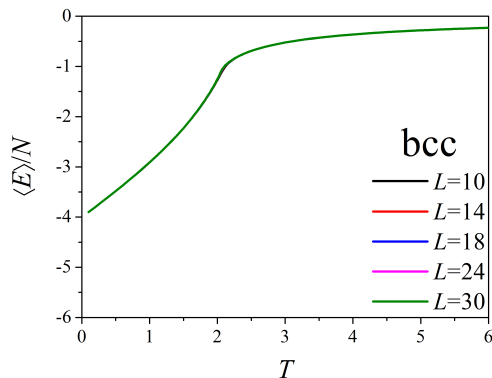
Όπως φαίνεται στις Εικόνες 4.2i, 4.2ii και 4.2iii, καθώς αυξάνεται η γραμμική διάσταση του πλέγματος, η μαγνήτιση ανά spin λαμβάνει όλο και πιο απότομα τιμές κοντά στο 0 πάνω από μια θερμοκρασία, χωρίς όμως να μηδενίζεται απόλυτα όπως αναμένεται για την παράμετρο τάξης. Το γεγονός αυτό είναι αποτέλεσμα του πεπερασμένου μεγέθους των πλεγμάτων και μόνο στο θερμοδυναμικό όριο η μαγνήτιση θα μηδενιζόταν απόλυτα στο πραγματικό κρίσιμο σημείο.

#### 4.2.2 Μέση Ενέργεια ανά spin

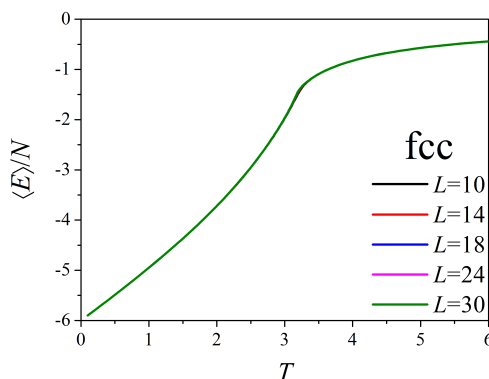
Η μέση ενέργεια ανά spin προσδιορίστηκε σύμφωνα με τη σχέση (3.28) του Κεφαλαίου 3. Στις Εικόνες 4.3i, 4.3ii και 4.3iii παρουσιάζονται τα αποτελέσματα των προσομοιώσεων για τη μέση ενέργεια ανά spin σε sc, bcc και fcc πλέγματα αντίστοιχα, γραμμικής διάστασης  $L = 10, 14, 18, 24$  και  $30$ .



(i)



(ii)



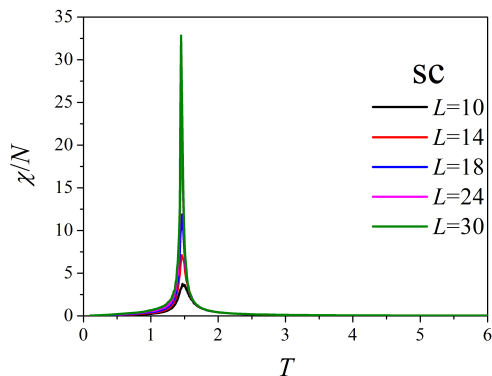
(iii)

**Εικόνα 4.3:** Μέση ενέργεια ανά spin για κυβικά πλέγματα (sc, bcc και fcc) γραμμικής διάστασης  $L = 10, 14, 18, 24$  και  $30$ .

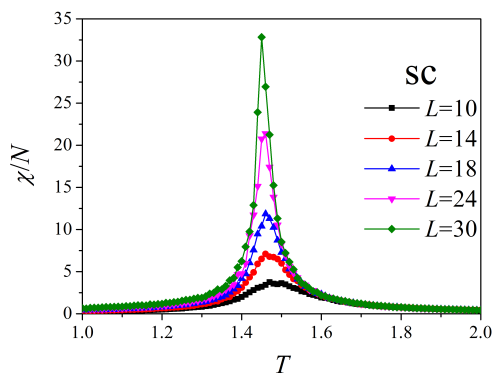
Σύμφωνα με τις παραπάνω Εικόνες, γίνεται εμφανές ότι η μέση ενέργεια ανά spin εξαρτάται ασθενώς από το μέγεθος των υπό μελέτη πλεγμάτων, σε αντίθεση με τη μαγνήτιση ανά spin, γεγονός το οποίο αναμένεται να αποτυπώνεται και στην κλιμάκωση της ειδικής θερμότητας ανά spin αντίστοιχα.

### 4.2.3 Μαγνητική Επιδεκτικότητα ανά spin

Η μαγνητική επιδεκτικότητα ανά spin υπολογίστηκε σύμφωνα με τη σχέση (3.34) του Κεφαλαίου 3. Στις Εικόνες 4.4i, 4.4iii και 4.4v παρουσιάζονται τα αποτελέσματα των προσομοιώσεων για sc, bcc και fcc πλέγματα αντίστοιχα, γραμμικής διάστασης  $L = 10, 14, 18, 24$  και  $30$ . Στις Εικόνες 4.4ii, 4.4iv και 4.4vi παρουσιάζονται σε μεγέθυνση οι περιοχές θερμοκρασιών στις οποίες οι προσομοιώσεις πραγματοποιήθηκαν με θερμοκρασιακή διαμέριση  $\delta T = 0.01$ .

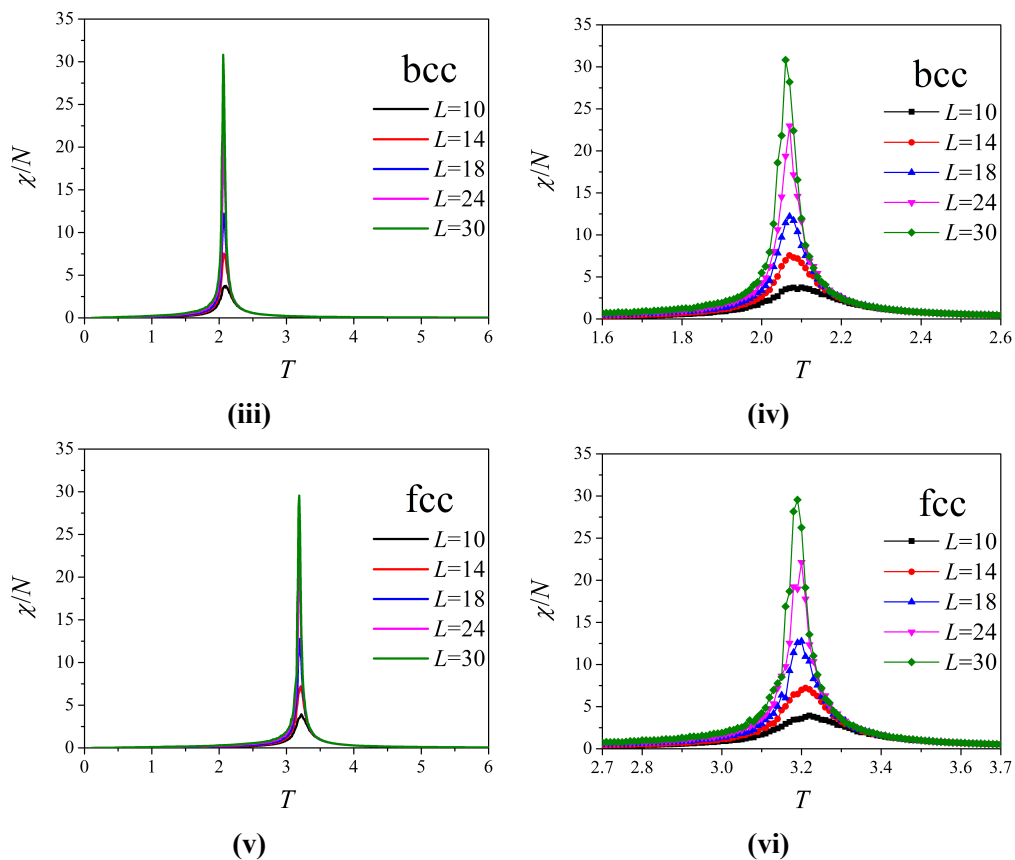


(i)



(ii)



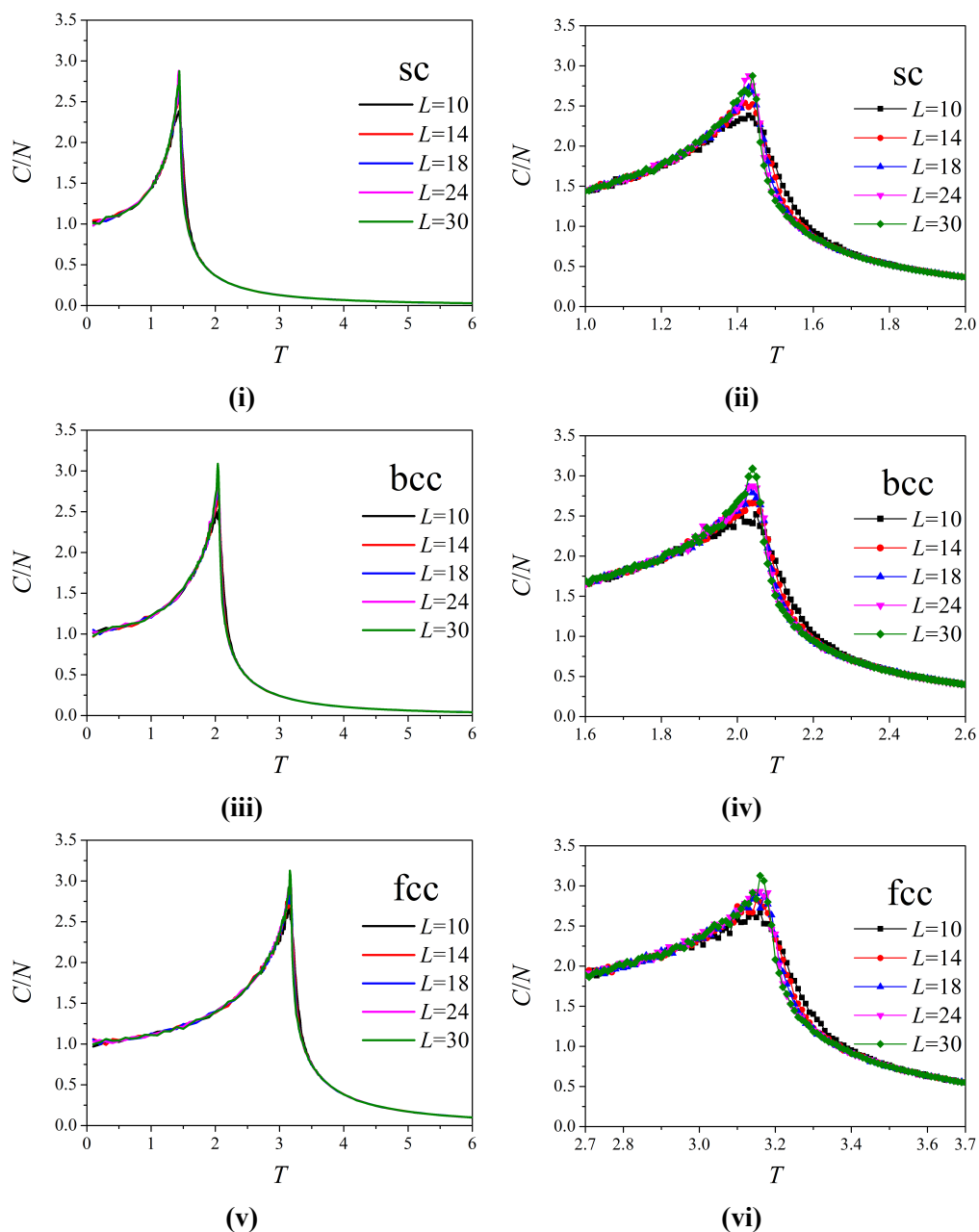


**Εικόνα 4.4:** Μαγνητική επιδεκτικότητα ανά spin για κυβικά πλέγματα (sc, bcc και fcc) γραμμικής διάστασης  $L = 10, 14, 18, 24$  και  $30$ .

Σύμφωνα με τις Εικόνες 4.4ii, 4.4iv και 4.4vi, εξάγεται το συμπέρασμα ότι αυξανόμενου του μεγέθους του πλέγματος, η μαγνητική επιδεκτικότητα ανά spin κλιμακώνεται σε ολοένα και μεγαλύτερες τιμές, ενώ οι αντίστοιχες ψευδοκρίσιμες θερμοκρασίες στις οποίες παρουσιάζει ακρότατο μετατοπίζονται σε συνεχώς μικρότερες τιμές.

#### 4.2.4 Ειδική Θερμότητα ανά spin

Η ειδική θερμότητα ανά spin υπολογίστηκε σύμφωνα με τη σχέση (3.33) του Κεφαλαίου 3. Στις Εικόνες 4.5i, 4.5iii και 4.5v παρουσιάζονται τα αποτελέσματα των προσομοιώσεων για sc, bcc και fcc πλέγματα αντίστοιχα, γραμμικής διάστασης  $L = 10, 14, 18, 24$  και  $30$ . Στις Εικόνες 4.5ii, 4.5iv και 4.5vi παρουσιάζονται σε μεγέθυνση οι περιοχές θερμοκρασιών στις οποίες οι προσομοιώσεις πραγματοποιήθηκαν με θερμοκρασιακή διαμέριση  $\delta T = 0.01$ .



**Εικόνα 4.5:** Ειδική θερμότητα ανά spin για κυβικά πλέγματα (sc, bcc και fcc) γραμμικής διάστασης  $L = 10, 14, 18, 24, 30$ .

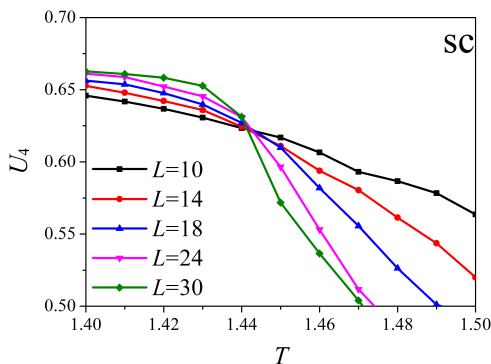
Όπως μπορεί να διαπιστωθεί από τις Εικόνες 4.5ii, 4.5iv και 4.5vi, η ειδική θερμότητα ανά spin κλιμακώνεται σε συνεχώς μεγαλύτερες τιμές καθώς αυξάνεται η γραμμική διάσταση του εκάστοτε πλέγματος. Ωστόσο, σε αντίθεση με τη μαγνητική επιδεκτικότητα ανά spin, η κλιμάκωση των ακρότατων είναι ασθενέστερη, ενώ οι ψευδοκρίσιμες θερμοκρασίες στην περίπτωση αυτή, μετατοπίζονται σε ολοένα και μεγαλύτερες τιμές.

Λαμβάνοντας υπόψη τις Εικόνες 4.4 και 4.5, μπορούν να εξαχθούν οι πρώτες εκτιμήσεις των κρίσιμων περιοχών για κάθε τύπο πλέγματος. Για το sc η κρίσιμη περιοχή εκτιμάται στο θερμοκρασιακό εύρος  $T_{sc} = 1.4-1.5$ , ενώ για το bcc και το fcc, στα θερμοκρασιακά εύρη  $T_{bcc} = 2.0-2.1$  και  $T_{fcc} = 3.1-3.2$  αντίστοιχα.

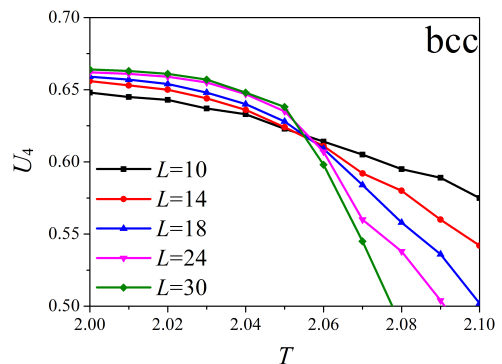
#### 4.2.5 4<sup>ης</sup> Τάξης Συσσωρευτής για τη Μαγνήτιση ανά spin

Μια πρώτη εκτίμηση του κρίσιμου σημείου στο θερμοδυναμικό όριο μπορεί να πραγματοποιηθεί με τη βοήθεια του συσσωρευτή 4<sup>ης</sup> τάξης ( $U_4$ ) για τη μαγνήτιση ανά spin. Όπως έδειξε ο K. Binder στην εργασία του [4], το κρίσιμο σημείο στο θερμοδυναμικό όριο μπορεί να εκτιμηθεί μέσω της μεθόδου τομής των συσσωρευτών (cumulant crossing method). Σύμφωνα με τη μέθοδο αυτή, εάν απεικονιστούν οι  $U_4$  για διαφορετικά μεγέθη πλεγμάτων  $L$  σε ένα θερμοκρασιακό εύρος που να καλύπτει την κρίσιμη περιοχή, παρουσιάζουν ένα μη τετριμμένο σημείο τομής ( $U^*, T_C$ ), το οποίο δίνει μια απευθείας εκτίμηση της κρίσιμης θερμοκρασίας μετάβασης [18]. Το σημείο τομής εξαρτάται από το υπό μελέτη πρότυπο, τις συνοριακές συνθήκες κ.α. [34], γεγονός το οποίο αποδίδει μόνο ασθενή οικουμενικά χαρακτηριστικά στο σημείο τομής ( $U^*, T_C$ ). Επιπροσθέτως, είναι σημαντικό να σημειωθεί ότι οι συσσωρευτές για διαφορετικά μεγέθη πλεγμάτων στην πραγματικότητα τέμνονται ανά δύο, ωστόσο η διασκόρπιση των διαφορετικών σημείων τομής είναι αρκετά ασθενής.

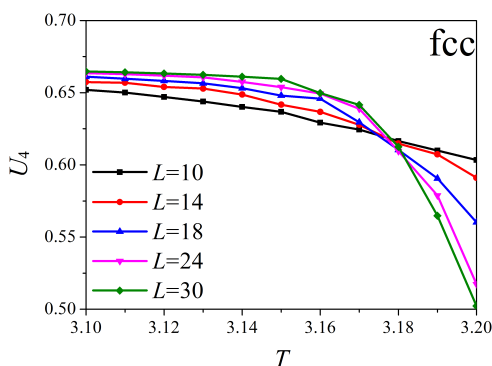
Ο 4<sup>ης</sup> τάξης συσσωρευτής για τη μαγνήτιση ανά spin υπολογίστηκε σύμφωνα με τη σχέση (3.35) του Κεφαλαίου 3. Στις Εικόνες 4.6i, 4.6ii και 4.6iii παρουσιάζονται τα αποτελέσματα των προσομοιώσεων για sc, bcc και fcc πλέγματα αντίστοιχα, γραμμικής διάστασης  $L = 10, 14, 18, 24$  και 30, στις εκτιμώμενες κρίσιμες περιοχές.



(i)



(ii)



(iii)

**Εικόνα 4.6:** Συσσωρευτές  $U_4^{\text{ns}}$  τάξης για τη μαγνήτιση ανά spin, στις εκτιμώμενες κρίσιμες περιοχές για sc (4.6i), bcc (4.6ii) και fcc (4.6iii) πλέγματα γραμμικής διάστασης  $L = 10, 14, 18, 24$  και  $30$ .

Όπως μπορεί να διαπιστωθεί από τις Εικόνες 4.6i, 4.6ii και 4.6iii, οι συσσωρευτές για διαφορετικά μεγέθη πλεγμάτων  $L$  τέμνονται στο ίδιο περίπου σημείο για κάθε τύπο πλέγματος. Στον Πίνακα 4.1, παρουσιάζονται οι εκτιμήσεις των κρίσιμων σημείων για κάθε τύπο πλέγματος, δεδομένης της θερμοκρασιακής διαμέρισης  $\delta T = 0.01$ , βάσει της οποίας πραγματοποιήθηκαν οι προσομοιώσεις.

Τύπος πλέγματος	$T_C$
sc	1.445(5)
bcc	2.055(5)
fcc	3.175(5)

**Πίνακας 4.1:** Εκτιμήσεις των κρίσιμων σημείων για κυβικά πλέγματα (sc, bcc και fcc), από τη μέθοδο τομής των συσσωρευτών.

## 4.3 Προσδιορισμός της Κρίσιμης Συμπεριφοράς

### 4.3.1 Εκθέτης $\nu$

Ο προσδιορισμός της κρίσιμης συμπεριφοράς του κλασικού σιδηρομαγνητικού προτύπου Heisenberg πραγματοποιήθηκε αξιοποιώντας τη θεωρία κλιμάκωσης πεπερασμένου μεγέθους και τη μέθοδο του ενός ιστογράμματος. Στην εργασία αυτή, στα πλαίσια της θεωρίας κλιμάκωσης πεπερασμένου μεγέθους, ο υπολογισμός του κρίσιμου εκθέτη

$\nu$  πραγματοποιήθηκε μελετώντας την κλιμάκωση των μεγίστων των ποσοτήτων

$$\left. \frac{dU_4}{d\beta} \right|_{\max} \sim L^{1/\nu}, \quad \text{με} \quad U_4 = 1 - \frac{\langle m^4 \rangle}{3\langle m^2 \rangle^2} \quad (4.1)$$

και

$$\left. \frac{d \ln \langle m \rangle}{d\beta} \right|_{\max} \sim L^{1/\nu}. \quad (4.2)$$

Για τον ακριβή υπολογισμό του εκθέτη  $\nu$ , σύμφωνα με τις παραπάνω σχέσεις κλιμάκωσης, απαιτείται ακριβής προσδιορισμός των μεγίστων, γεγονός το οποίο κατέστη δυνατό με τη μέθοδο του ενός ιστογράμματος. Στα πλαίσια της μεθόδου αυτής, οι εκτιμώμενες αναμενόμενες τιμές μιας θερμοδυναμικής ποσότητας,  $\langle Q \rangle$ , αποκτούν συνεχή χαρακτήρα μέσω της θεμελιώδους εξίσωσης του ενός ιστογράμματος (σχέση (3.53)). Κατά συνέπεια, η παράγωγος μιας ποσότητας  $\langle Q \rangle$  δίνεται από τη γενική έκφραση

$$\frac{d\langle Q \rangle}{d\beta} = \frac{d}{d\beta} \frac{\sum_{\mu_i}^{\mathcal{N}} Q_{\mu_i} \exp(-(\beta - \beta_0)E_{\mu_i})}{\sum_{\mu_i}^{\mathcal{N}} \exp(-(\beta - \beta_0)E_{\mu_i})} \Leftrightarrow \quad (4.3)$$

$$\frac{d\langle Q \rangle}{d\beta} = \langle Q \rangle \langle E \rangle - \langle QE \rangle. \quad (4.4)$$

Η παράγωγος της σχέσης (4.1) προκύπτει

$$\frac{dU_4}{d\beta} = -\frac{1}{3\langle m^2 \rangle^2} \frac{d\langle m^4 \rangle}{d\beta} + \frac{2\langle m^4 \rangle}{3\langle m^2 \rangle^3} \frac{d\langle m^2 \rangle}{d\beta}. \quad (4.5)$$

Χρησιμοποιώντας τη γενική έκφραση (4.4) για τις εμφανιζόμενες παραγώγους, η σχέση (4.5) γίνεται

$$\frac{dU_4}{d\beta} = \frac{\langle m^4 E \rangle + \langle m^4 \rangle \langle m^4 E \rangle}{3\langle m^2 \rangle^2} - \frac{2}{3} \frac{\langle m^4 \rangle \langle m^2 E \rangle}{\langle m^2 \rangle^3}. \quad (4.6)$$

Σε πλήρη αντιστοιχία με τα προαναφερθέντα, η παράγωγος της σχέσης (4.2), με χρήση της γενικής έκφρασης (4.4) προκύπτει

$$\frac{d \ln \langle m \rangle}{d\beta} = \frac{\langle m \rangle \langle E \rangle - \langle mE \rangle}{\langle m \rangle}. \quad (4.7)$$

Σύμφωνα με τις σχέσεις (4.6) και (4.7), γίνεται εμφανές ότι ο προσδιορισμός των παραγών δεν απαιτεί τη χρήση τεχνικών αριθμητικής παραγωγίσης. Ωστόσο, προκειμένου να ελεγχθεί η εγκυρότητα των σχέσεων αυτών, υπολογίστηκαν οι ποσότητες  $\frac{dU_4}{d\beta}$

και  $\frac{d \ln m}{d\beta}$  και με τους δύο τρόπους, όπου βρέθηκε ότι τα αποτελέσματα συμφωνούν στο όριο μικρών θερμοκρασιακών διαμερίσεων.

Ο ακριβής προσδιορισμός των μεγίστων πραγματοποιήθηκε με τη βοήθεια της μεθόδου του ενός ιστογράμματος. Οι αρχικές προσομοιώσεις βάσει των οποίων έλαβε χώρα η μέθοδος σε κάθε περίπτωση, επιλέχθηκαν κατάλληλα ώστε να περιλαμβάνονται τα μέγιστα των υπό μελέτη ποσοτήτων στο επιτρεπόμενο πάντα εύρος προεκβολής. Η μελέτη της κλιμάκωσης των μεγίστων πραγματοποιήθηκε για sc, bcc και fcc πλέγματα, γραμμικής διάστασης  $16 \leq L \leq 30$ , ενώ ο προσδιορισμός των σφαλμάτων στην εκτίμηση των αναμενόμενων τιμών έγινε με τη μέθοδο jackknife. Προκειμένου να υπάρχει συνέπεια στην ακρίβεια των εκτιμήσεων σε κάθε περίπτωση, ο συνολικός αριθμός των sweeps,  $\mathcal{N}$ , που επιλέχθηκαν για κάθε προσομοίωση ικανοποιούσε το κριτήριο  $\mathcal{N} \geq 10000\tau_{\text{int}}$ .

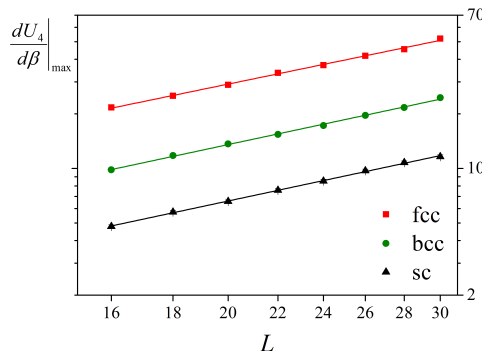
Σύμφωνα με τη θεωρία κλιμάκωσης πεπερασμένου μεγέθους, εάν τα προσδιοριζόμενα μέγιστα των παραγώγων των σχέσεων (4.1) και (4.2), απεικονιστούν συναρτήσσει της γραμμικής διάστασης  $L$  του πλέγματος, σε λογαριθμικούς άξονες, πρέπει να προκύψουν ευθείες γραμμές οι κλίσεις των οποίων θα δίνουν εκτιμήσεις του εκθέτη  $1/\nu$  σύμφωνα με τις σχέσεις

$$\log \left. \frac{dU_4}{d\beta} \right|_{\max} = C_1 + \frac{1}{\nu} \log L \quad (4.8)$$

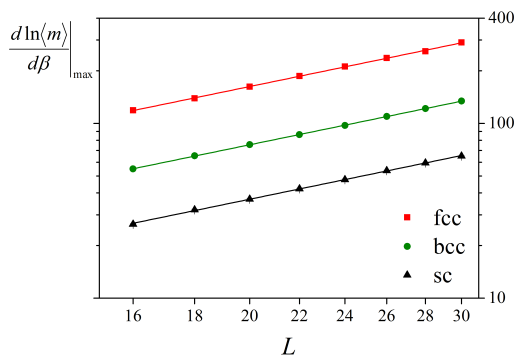
και

$$\log \left. \frac{d \ln \langle m \rangle}{d\beta} \right|_{\max} = C_2 + \frac{1}{\nu} \log L. \quad (4.9)$$

Στις Εικόνες 4.7i και 4.7ii παρουσιάζονται τα αποτελέσματα της κλιμάκωσης πεπερασμένου μεγέθους, των ποσοτήτων  $\left. \frac{dU_4}{d\beta} \right|_{\max}$  και  $\left. \frac{d \ln \langle m \rangle}{d\beta} \right|_{\max}$ , συναρτήσσει της γραμμικής διάστασης του πλέγματος  $L$ , σε λογαριθμικούς άξονες. Με κόκκινο, πράσινο και μαύρο χρώμα απεικονίζονται τα αποτελέσματα για fcc, bcc και sc πλέγματα αντίστοιχα, ενώ στις ίδιες εικόνες έχει εφαρμοστεί γραμμική προσαρμογή (linear fit), σύμφωνα με τις σχέσεις (4.8) και (4.9), προκειμένου να προσδιοριστεί ο εκθέτης  $1/\nu$  για κάθε τύπο πλέγματος.



(i)



(ii)

**Εικόνα 4.7:** Κλιμάκωση πεπερασμένου μεγέθους των ποσοτήτων  $\frac{dU_4}{d\beta}\Big|_{\max}$  (4.7i) και  $\frac{d \ln(m)}{d\beta}\Big|_{\max}$  (4.7i), συναρτήσει της γραμμικής διάστασης  $L$  του πλέγματος, σε λογαριθμικούς άξονες. Με συνεχείς γραμμές αποδίδονται οι γραμμικές προσαρμογές για κάθε τύπο πλέγματος σύμφωνα με τις σχέσεις (4.6) και (4.7).

Μια τελική εκτίμηση του εκθέτη  $1/\nu$ , μπορεί να προκύψει από το σταθμισμένο μέσο (weighted average) [36] των διαφορετικών μεθόδων υπολογισμού, για κάθε τύπο πλέγματος. Τα αποτελέσματα των γραμμικών προσαρμογών σύμφωνα με τις σχέσεις (4.8) και (4.9), καθώς και οι τελικές εκτιμήσεις του εκθέτη  $1/\nu$ , συνοψίζονται στον Πίνακα 4.2. Στην τελευταία γραμμή του Πίνακα παρουσιάζονται επιπλέον τα τελικά αποτελέσματα για τον κρίσιμο εκθέτη  $\nu$ .

Ποσότητα	sc	bcc	fcc
	$1/\nu$		
$\frac{dU_4}{d\beta}\Big _{\max}$	1.422(17)	1.422(21)	1.371(26)
$\frac{d \ln(m)}{d\beta}\Big _{\max}$	1.421(13)	1.417(5)	1.421(12)
Σταθμισμένος Μέσος	1.421(10)	1.417(5)	1.412(11)
Κρίσιμος εκθέτης $\nu$	0.704(5)	0.7055(25)	0.708(5)

**Πίνακας 4.2:** Εκτιμήσεις του εκθέτη  $1/\nu$  από την κλιμάκωση πεπερασμένου μεγέθους των ποσοτήτων  $\frac{dU_4}{d\beta}\Big|_{\max}$  και  $\frac{d \ln(m)}{d\beta}\Big|_{\max}$ , καθώς και τα τελικά αποτελέσματα για τον κρίσιμο εκθέτη  $\nu$  σε κυβικά πλέγματα (sc, bcc και fcc).

Από τον Πίνακα 4.2 φαίνεται ότι τα αποτελέσματα των εκτιμήσεων του εκθέτη  $1/\nu$  από τις δύο διαφορετικές μεθόδους συμφωνούν μεταξύ τους για τα πλέγματα sc και bcc στα πλαίσια των υπολογιζόμενων σφαλμάτων. Μόνη εξαίρεση αποτελεί η εκτίμηση του εκθέτη  $1/\nu$  για το fcc, μέσω της κλιμάκωσης πεπερασμένου μεγέθους της ποσότητας  $\left. \frac{dU_A}{d\beta} \right|_{\max}$ , η οποία βρίσκεται σε συμφωνία με τα αποτελέσματα για την ποσότητα  $\left. \frac{d \ln(m)}{d\beta} \right|_{\max}$ , στα πλαίσια όμως δύο τυπικών αποκλίσεων.

### 4.3.2 Εκθέτης $\gamma$

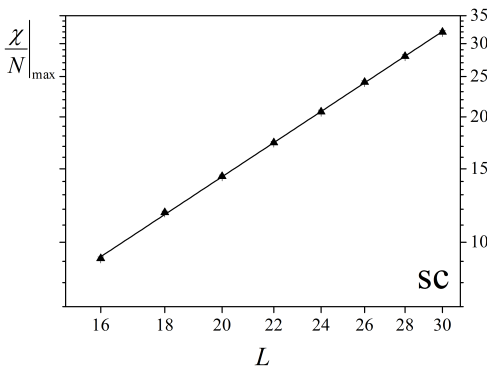
Μια ακόμα ποσότητα η οποία μπορεί να μελετηθεί στα πλαίσια της κλιμάκωσης πεπερασμένου μεγέθους, είναι η μαγνητική επιδεκτικότητα ανά spin, της οποίας τα μέγιστα κλιμακώνονται σύμφωνα με τη σχέση

$$\left. \frac{\chi}{N} \right|_{\max} \sim L^{\gamma/\nu}. \quad (4.10)$$

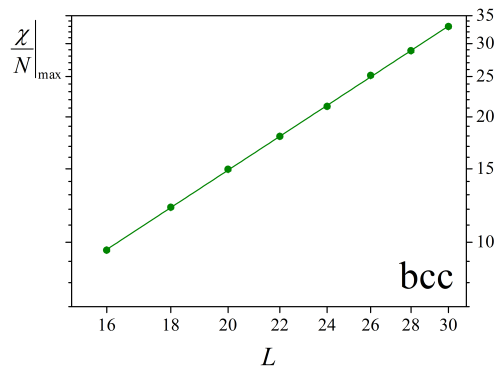
Σε αντιστοιχία με τις σχέσεις (4.8) και (4.9), ο προσδιορισμός του εκθέτη  $\gamma/\nu$  μπορεί να πραγματοποιηθεί με γραμμική προσαρμογή των απεικονιζόμενων μέγιστων συναρτήσεων της γραμμικής διάστασης  $L$  σε λογαριθμικούς άξονες, σύμφωνα με τη σχέση

$$\log \left. \frac{\chi}{N} \right|_{\max} = C_3 + \frac{\gamma}{\nu} \log L. \quad (4.11)$$

Ο ακριβής προσδιορισμός των μέγιστων και για την περίπτωση της μαγνητικής επιδεκτικότητας ανά spin, πραγματοποιήθηκε με τη μέθοδο του ενός ιστογράμματος, ενώ τα σφάλματα υπολογίστηκαν με τη μέθοδο jackknife. Στις Εικόνες 4.8i, 4.8ii και 4.8iii παρουσιάζεται η κλιμάκωση πεπερασμένου μεγέθους της μαγνητικής επιδεκτικότητας ανά spin, συναρτήσει της γραμμικής διάστασης  $L$  του πλέγματος σε λογαριθμικούς άξονες, για πλέγματα sc, bcc και fcc αντίστοιχα. Οι συνεχείς γραμμές σε κάθε Εικόνα είναι αποτέλεσμα γραμμικής προσαρμογής των αποτελεσμάτων σύμφωνα με τη σχέση (4.11).

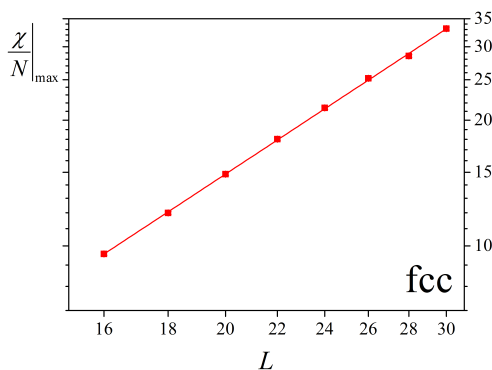


(i)



(ii)





(iii)

**Εικόνα 4.8:** Κλιμάκωση πεπερασμένου μεγέθους της ποσότητας  $\frac{\chi}{N}|_{\max}$ , συναρτήσει της γραμμικής διάστασης  $L$  του πλέγματος σε λογαριθμικούς άξονες. Οι Εικόνες 4.8i, 4.8ii και 4.8iii αναφέρονται στα αποτελέσματα για sc, bcc και fcc πλέγματα αντίστοιχα, ενώ με συνεχή γραμμή σε κάθε Εικόνα, αποδίδεται η γραμμική προσαρμογή σύμφωνα με τη σχέση (4.11).

Στον Πίνακα 4.3 συνοψίζονται οι εκτιμήσεις για τον εκθέτη  $\gamma/\nu$  από την κλιμάκωση πεπερασμένου μεγέθους της μαγνητικής επιδεκτικότητας ανά spin, καθώς και τα τελικά αποτελέσματα για τον κρίσιμο εκθέτη  $\gamma$  σε πλέγματα sc, bcc και fcc.

Εκθέτης	sc	bcc	fcc
$\gamma/\nu$	1.982(11)	1.966(8)	1.977(13)
$\gamma$	1.395(13)	1.387(8)	1.400(14)

**Πίνακας 4.3:** Αποτελέσματα των εκθετών  $\gamma/\nu$  και  $\gamma$  από την κλιμάκωση πεπερασμένου μεγέθους της μαγνητικής επιδεκτικότητας ανά spin σε κυβικά πλέγματα (sc, bcc και fcc).

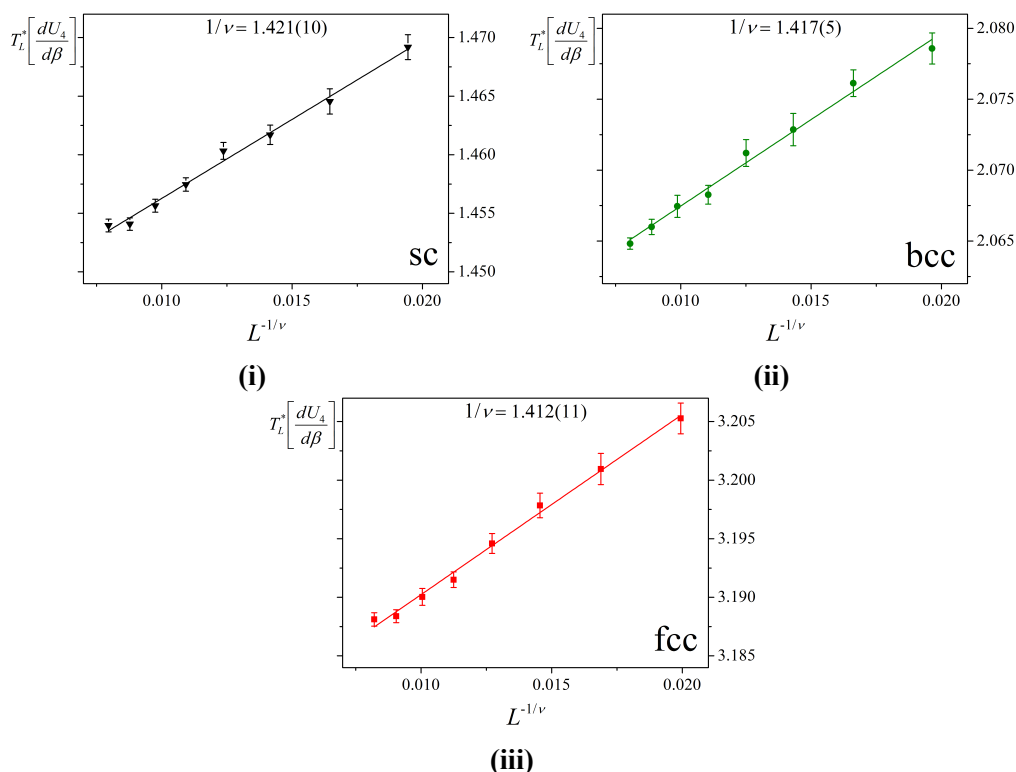
### 4.3.3 Κρίσιμη Θερμοκρασία Μετάβασης

Η θεωρία κλιμάκωσης πεπερασμένου μεγέθους πέρα από τις σχέσεις προσδιορισμού των κρίσιμων εκθετών, παρέχει και τα απαραίτητα θεωρητικά εργαλεία για τη μελέτη της μετατόπισης των ψευδοκρίσιμων θερμοκρασιών. Για αρκούντως μεγάλα συστήματα, οι ψευδοκρίσιμες θερμοκρασίες στις οποίες μια ποσότητα  $Q$  παρουσιάζει ακρότατο, λόγω φαινομένου κύρτωσης, κλιμακώνονται σύμφωνα με τη σχέση

$$T_L^*[Q] = T_C + bL^{-1/\nu}. \quad (4.12)$$

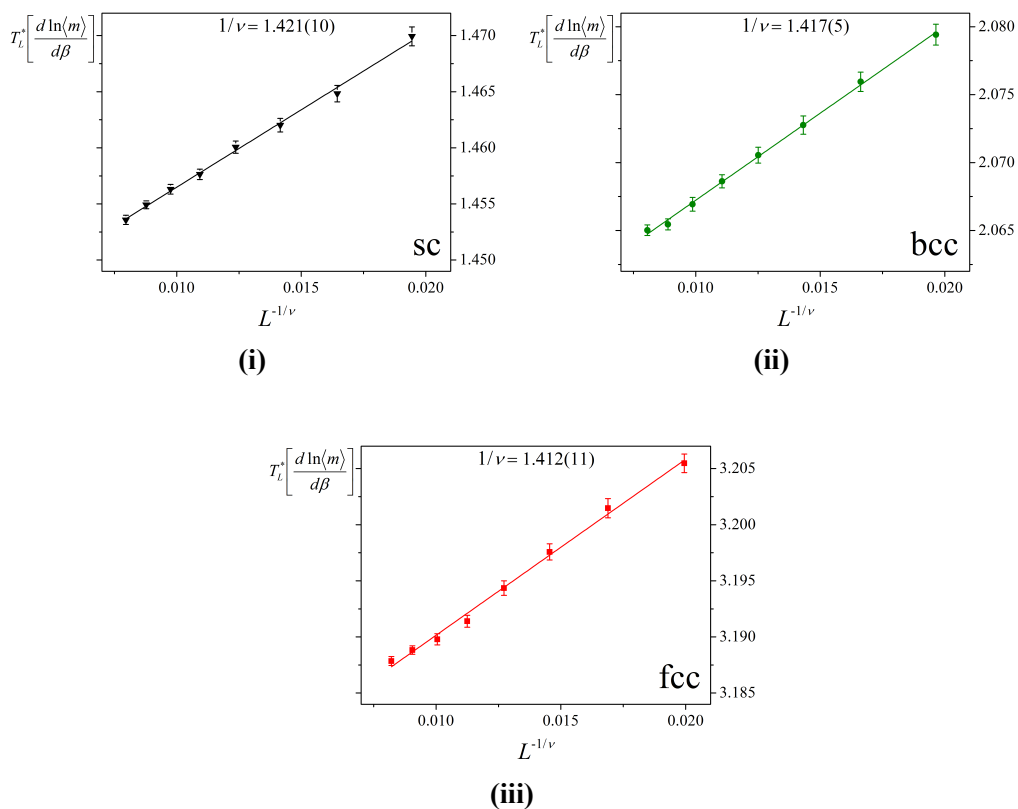
Κατά συνέπεια, οι απεικονιζόμενες ψευδοκρίσιμες θερμοκρασίες συναρτήσει του μεγέθους  $L^{-1/\nu}$ , θα πρέπει να παρουσιάζουν γραμμική τάση και η τεταγμένη επί την αρχή μπορεί να παρέχει μια εκτίμηση του κρίσιμου σημείου στο θερμοδυναμικό όριο.

Στην εργασία αυτή μελετήθηκε η κλιμάκωση των ψευδοκρίσιμων θερμοκρασιών των ποσοτήτων  $\frac{dU_A}{d\beta}$ ,  $\frac{d\ln\langle m \rangle}{d\beta}$  και  $\frac{\chi}{N}$ . Ο ακριβής προσδιορισμός των ψευδοκρίσιμων θερμοκρασιών πραγματοποιήθηκε με τη μέθοδο του ενός ιστογράμματος, ενώ τα σφάλματα στους υπολογισμούς εκτιμήθηκαν με τη μέθοδο jackknife. Στις Εικόνες 4.9i, 4.9ii και 4.9iii παρουσιάζεται η κλιμάκωση των ψευδοκρίσιμων θερμοκρασιών της ποσότητας  $\frac{dU_A}{d\beta}$  συναρτήσει του μεγέθους  $L^{-1/\nu}$ , σε sc, bcc και fcc πλέγματα αντίστοιχα. Για κάθε τύπο πλέγματος έχει χρησιμοποιηθεί η τελική εκτίμηση του εκθέτη  $1/\nu$  σύμφωνα με τον Πίνακα 4.2 (sc: 1.421(10), bcc: 1.417(5) και fcc: 1.412(11)). Οι συνεχείς γραμμές στις Εικόνες είναι αποτέλεσμα γραμμικής προσαρμογής σύμφωνα με τη σχέση (4.12).



**Εικόνα 4.9:** Κλιμάκωση ψευδοκρίσιμων θερμοκρασιών της ποσότητας  $\frac{dU_A}{d\beta}$  συναρτήσει του μεγέθους  $L^{-1/\nu}$ , σε sc (4.9i), bcc (4.9ii) και fcc (4.9iii) πλέγματα. Η συνεχής γραμμή σε κάθε Εικόνα είναι αποτέλεσμα γραμμικής προσαρμογής σύμφωνα με τη σχέση (4.12).

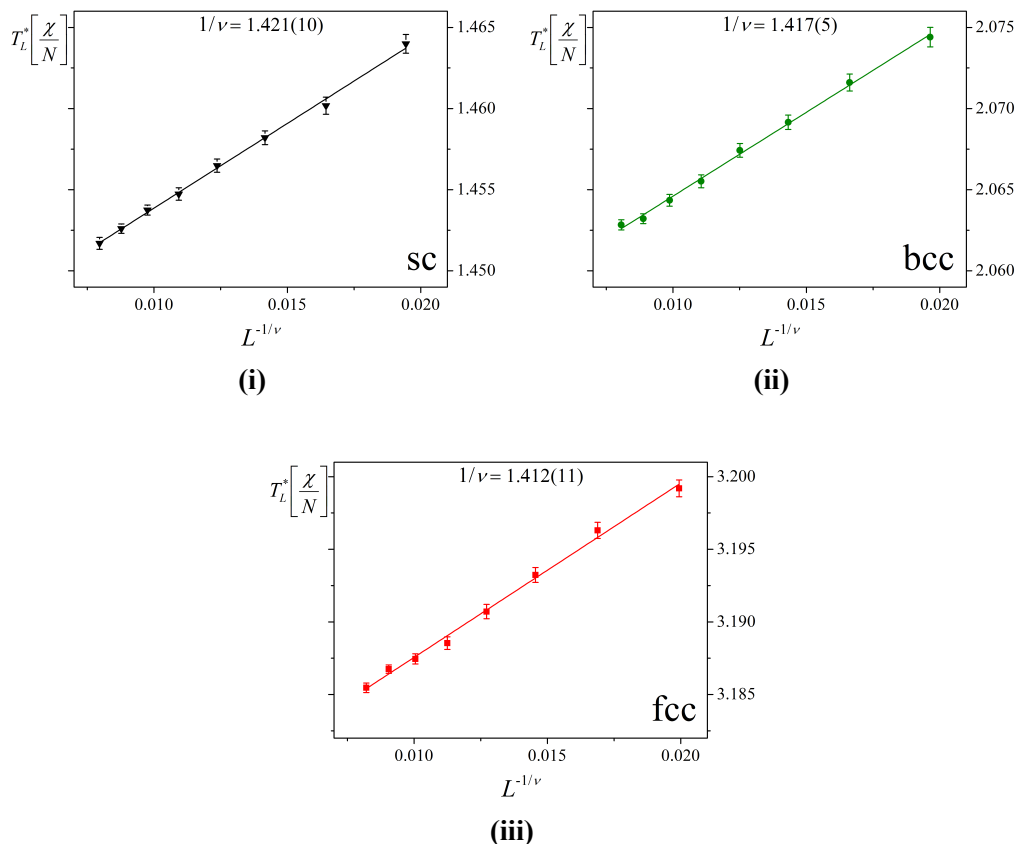
Στις Εικόνες 4.10i, 4.10ii και 4.10iii παρουσιάζεται η κλιμάκωση των ψευδοκρίσιμων θερμοκρασιών της ποσότητας  $\frac{d \ln \langle m \rangle}{d\beta}$  συναρτήσει του μεγέθους  $L^{-1/\nu}$ , σε sc, bcc και fcc πλέγματα αντίστοιχα. Για κάθε τύπο πλέγματος έχει χρησιμοποιηθεί η τελική εκτίμηση του εκθέτη  $1/\nu$  σύμφωνα με τον Πίνακα 4.2 (sc: 1.421(10), bcc: 1.417(5) και fcc: 1.412(11)). Οι συνεχείς γραμμές στις Εικόνες είναι αποτέλεσμα γραμμικής προσαρμογής σύμφωνα με τη σχέση (4.12).



**Εικόνα 4.10:** Κλιμάκωση ψευδοκρίσιμων θερμοκρασιών της ποσότητας  $\frac{d \ln \langle m \rangle}{d\beta}$  συναρτήσει του μεγέθους  $L^{-1/\nu}$  σε sc (4.10i), bcc (4.10ii) και fcc (4.10iii) πλέγματα. Η συνεχής γραμμή σε κάθε Εικόνα είναι αποτέλεσμα γραμμικής προσαρμογής σύμφωνα με τη σχέση (4.12).

Στις Εικόνες 4.11i, 4.11ii και 4.11iii παρουσιάζεται η κλιμάκωση των ψευδοκρίσιμων θερμοκρασιών της μαγνητικής επιδεκτικότητας ανά spin  $\frac{\chi}{N}$ , συναρτήσει του μεγέθους  $L^{-1/\nu}$ , σε sc, bcc και fcc πλέγματα αντίστοιχα. Για κάθε τύπο πλέγματος έχει χρησιμοποιηθεί η τελική εκτίμηση του εκθέτη  $1/\nu$  σύμφωνα με τον Πίνακα 4.2 (sc: 1.421(10), bcc: 1.417(5) και fcc: 1.412(11)). Οι συνεχείς γραμμές στις Εικόνες είναι αποτέλεσμα

γραμμικής προσαρμογής σύμφωνα με τη σχέση (4.12).



**Εικόνα 4.11:** Κλιμάκωση ψευδοκρίσιμων θερμοκρασιών της μαγνητικής επιδεκτικότητας ανά spin συναρτήσει του μεγέθους  $L^{-1/\nu}$ , σε sc (4.11i), bcc (4.11ii) και fcc (4.11iii) πλέγματα. Η συνεχής γραμμή σε κάθε Εικόνα είναι αποτέλεσμα γραμμικής προσαρμογής σύμφωνα με τη σχέση (4.12).

Μια τελική εκτίμηση για την κρίσιμη θερμοκρασία μετάβασης σε κάθε διαφορετικό τύπο πλέγματος μπορεί να προκύψει από το σταθμισμένο μέσο των διαφορετικών εκτιμήσεων από τις γραμμικές προσαρμογές των Εικόνων 4.11i, 4.11ii και 4.11iii.

Τα αποτελέσματα των γραμμικών προσαρμογών για τις ψευδοκρίσιμες θερμοκρασίες  $T_L^* \left[ \frac{dU_A}{d\beta} \right]$ ,  $T_L^* \left[ \frac{d \ln \langle m \rangle}{d\beta} \right]$  και  $T_L^* \left[ \frac{\chi}{N} \right]$  συναρτήσει του μεγέθους  $L^{-1/\nu}$ , σύμφωνα με τη γενική σχέση (4.12), για sc, bcc και fcc πλέγματα, συνοψίζονται στον Πίνακα 4.4. Στην τελευταία γραμμή του Πίνακα παρουσιάζονται επιπλέον οι τελικές εκτιμήσεις για τις κρίσιμες θερμοκρασίες μετάβασης κάθε τύπου πλέγματος, όπως προέκυψαν από το σταθμισμένο μέσο των διαφορετικών μεθόδων υπολογισμού.

Ποσότητα	$T_C$		
	sc	bcc	fcc
$\frac{dU_4}{d\beta}$	1.4428(6)	2.0553(6)	3.1749(6)
$\frac{d \ln \langle m \rangle}{d\beta}$	1.4427(4)	2.05441(28)	3.1745(6)
$\frac{\chi}{N}$	1.44342(28)	2.05427(26)	3.1756(5)
Σταθμισμένος μέσος	1.44315(22)	2.05441(19)	3.1751(3)

**Πίνακας 4.4:** Εκτιμήσεις των κρίσιμων σημείων από την κλιμάκωση των ψευδοκρίσιμων θερμοκρασιών των ποσοτήτων  $\frac{dU_4}{d\beta}$ ,  $\frac{d \ln \langle m \rangle}{d\beta}$  και  $\frac{\chi}{N}$  για sc, bcc και fcc πλέγματα.

Όπως μπορεί να διαπιστωθεί από τα αποτελέσματα του Πίνακα 4.4, οι εκτιμήσεις των κρίσιμων σημείων από τις διαφορετικές μεθόδους υπολογισμού για την περίπτωση των πλεγμάτων sc και fcc, συμφωνούν μεταξύ τους στα πλαίσια των υπολογιζόμενων σφαλμάτων. Εξάιρεση αποτελούν οι εκτιμήσεις των κρίσιμων σημείων από την κλιμάκωση των ψευδοκρίσιμων θερμοκρασιών των ποσοτήτων  $\frac{dU_4}{d\beta}$  και  $\frac{\chi}{N}$ , για το bcc, οι οποίες συμφωνούν στα πλαίσια όμως δύο τυπικών αποκλίσεων. Επιπροσθέτως, αξίζει να σημειωθεί ότι οι εκτιμήσεις των κρίσιμων σημείων από τη μέθοδο τομής των συσσωρευτών (Πίνακας 4.1), βρίσκονται σε πλήρη συμφωνία με τα αποτελέσματα του Πίνακα 4.4 στα πλαίσια των εκτιμώμενων σφαλμάτων σε κάθε περίπτωση.

#### 4.3.4 Κλιμάκωση Πεπερασμένου Μεγέθους στο Κρίσιμο Σημείο

Σύμφωνα με τη θεωρία κλιμάκωσης πεπερασμένου μεγέθους, θερμοδυναμικές ποσότητες όπως είναι η μαγνητική επιδεκτικότητα ανά spin ή η μαγνήτιση ανά spin, στο κρίσιμο σημείο κλιμακώνονται σύμφωνα με τις σχέσεις

$$\langle m \rangle(T_C) \sim L^{-\beta/\nu}, \quad (4.13)$$

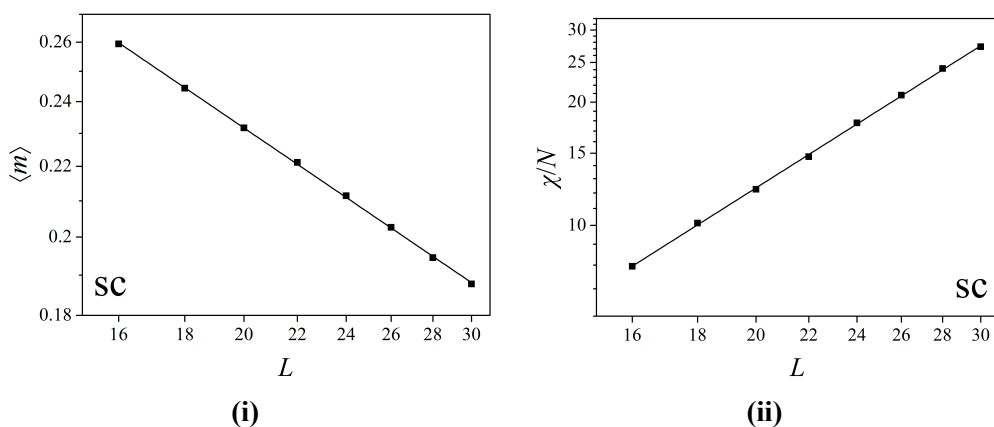
$$\frac{\chi}{N}(T_C) \sim L^{\gamma/\nu}. \quad (4.14)$$

Συνεπώς, οι απεικονιζόμενες τιμές των θερμοδυναμικών μεγεθών συναρτήσει της γραμμικής διάστασης του συστήματος σε λογαριθμικούς άξονες, πρέπει να παρουσιάζουν γραμμική τάση, με τις κλίσεις να παρέχουν εκτιμήσεις των εκθετών  $\gamma/\nu$  και  $\beta/\nu$  αντίστοιχα, σύμφωνα με τις σχέσεις

$$\log \langle m \rangle (T_C) = B_1 - \frac{\beta}{\nu} \log L \quad (4.15)$$

$$\log \frac{\chi}{N} (T_C) = B_2 + \frac{\gamma}{\nu} \log L. \quad (4.16)$$

Στην εργασία αυτή, ο προσδιορισμός των εκθετών  $\gamma/\nu$  και  $\beta/\nu$ , από την κλιμάκωση των θερμοδυναμικών μεγεθών στο κρίσιμο σημείο, κατέστη δυνατός μόνο για το sc. Στις Εικόνες 4.12i και 4.12ii παρουσιάζεται η κλιμάκωση πεπερασμένου μεγέθους των μεγεθών  $\langle m \rangle$  και  $\frac{\chi}{N}$  αντίστοιχα, συναρτήσει της γραμμικής διάστασης  $L$  σε λογαριθμικούς άξονες. Τα αποτελέσματα για τα θερμοδυναμικά μεγέθη ελήφθησαν από προσομοιώσεις οι οποίες πραγματοποιήθηκαν στο εκτιμώμενο κρίσιμο σημείο  $T_C = 1.44315(22)$  για το sc. Οι συνεχείς γραμμές στις Εικόνες είναι αποτέλεσμα γραμμικών προσαρμογών σύμφωνα με τις σχέσεις (4.15) και (4.16).



**Εικόνα 4.12:** Κλιμάκωση πεπερασμένου μεγέθους των ποσοτήτων  $\langle m \rangle$  και  $\frac{\chi}{N}$ , στο εκτιμώμενο κρίσιμο σημείο  $T_C = 1.44315(22)$  για το sc, συναρτήσει της γραμμικής διάστασης  $L$  σε λογαριθμικούς άξονες. Οι συνεχείς γραμμές στις Εικόνες είναι αποτέλεσμα γραμμικής προσαρμογής σύμφωνα με τις σχέσεις (4.15) και (4.16).

Οι κλίσεις των ευθειών από τις γραμμικές προσαρμογές των Εικόνων 4.12i και 4.12ii, προκύπτουν  $\beta/\nu = 0.514(3)$  και  $\gamma/\nu = 1.973(15)$  αντίστοιχα. Λαμβάνοντας υπόψη την εκτίμηση του εκθέτη  $\nu = 0.704(5)$  για το sc, οι κρίσιμοι εκθέτες προκύπτουν αντίστοιχα,  $\gamma = 1.388(14)$  και  $\beta = 0.361(3)$ . Όπως μπορεί να διαπιστωθεί, τα αποτελέσματα για τον εκθέτη  $\gamma$  από την κλιμάκωση πεπερασμένου μεγέθους της μαγνητικής επιδεκτικότητας ανά spin στο κρίσιμο σημείο είναι σε συμφωνία με τα αποτελέσματα του Πίνακα 4.3. Η τελική εκτίμηση του εκθέτη  $\gamma$ , από το σταθμισμένο μέσο των διαφορετικών μεθόδων υπολογισμού, προκύπτει  $\gamma = 1.392(9)$ .

### 4.3.5 Εκτίμηση των εκθετών $\alpha$ , $\beta$ , $\delta$ και $\eta$ από τους Νόμους Κλιμάκωσης

Σύμφωνα με τις θεωρίες κλιμάκωσης, οι κρίσιμοι εκθέτες συνδέονται μεταξύ τους με ισότητες οι οποίες ονομάζονται νόμοι κλιμάκωσης, γεγονός που έχει σαν αποτέλεσμα μόνο δύο εκ του συνόλου των κρίσιμων εκθετών να είναι ανεξάρτητοι μεταξύ τους. Στην εργασία αυτή, για κάθε τύπο πλέγματος υπολογίστηκαν οι εκθέτες  $\nu$  και  $\gamma$ , ενώ για το sc υπολογίστηκε επιπλέον και ο εκθέτης  $\beta$ . Οι υπόλοιποι κρίσιμοι εκθέτες προσδιορίστηκαν έμμεσα, μέσω κατάλληλων συνδυασμών των νόμων κλιμάκωσης (Πίνακας 1.ii του Κεφαλαίου 1). Συγκεκριμένα, οι κρίσιμοι εκθέτες  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\delta$  και  $\eta$ , προσδιορίστηκαν αντίστοιχα μέσω των σχέσεων

$$\alpha = 2 - d\nu \quad (4.17)$$

$$\beta = 1 - \frac{\gamma + \alpha}{2} \quad (4.18)$$

$$\delta = 1 + \frac{\gamma}{\beta} \quad (4.19)$$

$$\eta = 2 - \frac{\gamma}{\nu}. \quad (4.20)$$

## 4.4 Κρίσιμη Συμπεριφορά του Κλασικού Σιδηρομαγνήτη Heisenberg

Τα αποτελέσματα της εργασίας αυτής για την κρίσιμη συμπεριφορά του κλασικού  $O(3)$  σιδηρομαγνητικού προτύπου Heisenberg σε sc, bcc και fcc πλέγματα, συγκριτικά με αντίστοιχες μελέτες προσομοιώσεων Monte Carlo και μεθόδων ανάπτυξης σε σειρές, συνοψίζονται στους Πίνακες 4.5, 4.6 και 4.7 αντίστοιχα.

sc		
Κρίσιμο Μέγεθος	Παρούσα Εργασία	[36]
$T_C$	1.44315(22)	1.44300(21)
$\nu$	0.704(5)	0.704(6)
$\gamma$	1.392(9)	1.389(14)
$\beta$	0.361(3)	0.362(4)
$\alpha$	-0.111(15)	-0.112(18)
$\delta$	4.85(5)	4.84(6)
$\eta$	0.022(20)	0.027(2)

**Πίνακας 4.5:** Αποτελέσματα της κρίσιμης συμπεριφοράς για το sc, συγκριτικά με αντίστοιχα αποτελέσματα από προσομοιώσεις Monte Carlo.

bcc		
Κρίσιμο Μέγεθος	Παρούσα Εργασία	[23]
$T_C$	2.05441(19)	2.05424(5)
$\nu$	0.7055(24)	0.7059(37)
$\gamma$	1.387(8)	1.385(10)
$\beta$	0.365(5)	0.3664(54)
$\alpha$	-0.117(7)	-0.118(11)
$\delta$	4.80(6)	4.780(44)
$\eta$	0.034(13)	0.038(18)

**Πίνακας 4.6:** Αποτελέσματα της κρίσιμης συμπεριφοράς για το bcc, συγκριτικά με αντίστοιχα αποτελέσματα από προσομοιώσεις Monte Carlo.

fcc		
Κρίσιμο Μέγεθος	Παρούσα Εργασία	[24]
$T_C$	3.1751(3)	3.1757(20)
$\nu$	0.708(5)	0.72(1)
$\gamma$	1.400(14)	1.40(3)
$\beta$	0.362(11)	0.38(2)
$\alpha$	-0.125(16)	-0.16(3)
$\delta$	4.87(12)	4.68(27)
$\eta$	0.023(25)	0.06(5)

**Πίνακας 4.7:** Αποτελέσματα της κρίσιμης συμπεριφοράς για το fcc, συγκριτικά με αποτελέσματα από μεθόδους ανάπτυξης σε σειρές.

Όπως φαίνεται από τους Πίνακες 4.5, 4.6 και 4.7, τα αποτελέσματα της κρίσιμης συμπεριφοράς για το κλασικό σιδηρομαγνητικό πρότυπο Heisenberg, είναι σε συμφωνία με αντίστοιχες μελέτες από προσομοιώσεις Monte Carlo και μεθόδους ανάπτυξης σε σειρές, στα πλαίσια των εκτιμώμενων σφαλμάτων. Επιπλέον, είναι σημαντικό να σημειωθεί ότι τα αποτελέσματα των κρίσιμων εκθετών για το sc, bcc και fcc, συμφωνούν μεταξύ τους, γεγονός που επιβεβαιώνει ότι τα συστήματα αυτά ανήκουν στην ίδια κλάση οικουμενικότητας. Φυσικά το γεγονός αυτό είναι αναμενόμενο, δεδομένου ότι τόσο η διάσταση και η συμμετρία της παραμέτρου τάξης, όσο και η διάσταση του χώρου, δεν διαφέρουν μεταξύ διαφορετικών τύπων πλεγμάτων. Από την άλλη πλευρά, όπως αναφέρθηκε και στο Κεφάλαιο 1, η κρίσιμη θερμοκρασία μετάβασης διαφέρει μεταξύ sc, bcc και fcc



πλεγμάτων, αφού εξαρτάται από τις μικροσκοπικές λεπτομέρειες των αλληλεπιδράσεων (αριθμός σύνταξης στο εκάστοτε πλέγμα) που υπεισέρχονται στη Χαμιλτονιανή.

Λαμβάνοντας υπόψη το γεγονός ότι τα υπό μελέτη συστήματα ανήκουν στην ίδια κλάση οικουμενικότητας, μπορεί να δοθεί μια τελική εκτίμηση για την κρίσιμη συμπεριφορά του κλασικού  $O(3)$  σιδηρομαγνητικού προτύπου Heisenberg, από το σταθμισμένο μέσο των αποτελεσμάτων για κάθε διαφορετικό τύπο πλέγματος (Πίνακας 4.8). Όπως μπορεί να διαπιστωθεί από τα αποτελέσματα του Πίνακα 4.8, η εκτιμώμενη κρίσιμη συμπεριφορά, από προσομοιώσεις Monte Carlo της παρούσας εργασίας, είναι σε πολύ καλή συμφωνία και με τις προβλέψεις της θεωρίας επανακανονικοποίησης, στα πλαίσια των εκτιμώμενων σφαλμάτων.

Κρίσιμος Εκθέτης	Παρούσα Εργασία	Θεωρία Επανακανονικοποίησης [21]
$\nu$	0.7056(20)	0.705(3)
$\gamma$	1.391(5)	1.386(4)
$\beta$	0.3624(28)	0.3645(25)
$\alpha$	-0.117(7)	-0.115(9)
$\delta$	4.84(3)	4.808(22)
$\eta$	0.029(10)	0.033(4)

**Πίνακας 4.8:** Αποτελέσματα της παρούσας εργασίας για την κρίσιμη συμπεριφορά του κλασικού  $O(3)$  σιδηρομαγνητικού προτύπου Heisenberg, συγκριτικά με προβλέψεις της θεωρίας επανακανονικοποίησης.



# Κεφάλαιο 5

## Σύνοψη-Συμπεράσματα

---

Στα πλαίσια της παρούσας διπλωματικής εργασίας μελετήθηκε η συνεχής αλλαγή φάσης για το κλασικό  $O(3)$  σιδηρομαγνητικό πρότυπο Heisenberg, σε sc, bcc και fcc πλέγματα.

Αρχικά, πραγματοποιήθηκε ποιοτική μελέτη της κρίσιμης συμπεριφοράς του προτύπου, στα πλαίσια της προσέγγισης μέσου πεδίου. Στην προσέγγιση αυτή, η οποία στηρίζεται στην αγνόηση της αλληλεπίδρασης των διακυμάνσεων των spin, η συνάρτηση επιμερισμού του συστήματος μπορεί να προσδιοριστεί αναλυτικά. Εξήχθη η αυτοσυνεπής εξίσωση για τη μαγνήτιση, βάσει της οποίας μπορεί να προσδιοριστεί η κρίσιμη συμπεριφορά του συστήματος. Η κρίσιμη θερμοκρασία μετάβασης στην προσέγγιση αυτή για τα sc, bcc και fcc, προκύπτει αντίστοιχα  $T_C^{sc} = 2$ ,  $T_C^{bcc} = 2.6$  και  $T_C^{fcc} = 4$  ( $J = 1$ ,  $k_B = 1$ ).

Επιπροσθέτως, προσδιορίστηκαν η μαγνήτιση ανά spin, η μέση ενέργεια ανά spin, καθώς και οι αντίστοιχες συναρτήσεις απόκρισης για κάθε τύπο πλέγματος, μέσω αριθμητικής επίλυσης της εξίσωσης αυτοσυνέπειας. Από τα αποτελέσματα διαπιστώθηκε ότι στην προσέγγιση μέσου πεδίου προβλέπονται σωστά τα ποιοτικά χαρακτηριστικά μιας συνεχούς αλλαγής φάσης, όπως αυτά εκδηλώνονται από τον απότομο μηδενισμό της μαγνήτισης για  $T = T_C$ , την απόκλιση της μαγνητικής επιδεκτικότητας και την πεπερασμένη ασυνέχεια για την περίπτωση της ειδικής θερμότητας στο κρίσιμο σημείο. Οι κρίσιμοι εκθέτες προσδιορίστηκαν από την ασυμπτωτική συμπεριφορά της εξίσωσης αυτοσυνέπειας, όπου επιβεβαιώθηκε ότι δεν διαφοροποιούνται ανάμεσα σε διαφορετικούς τύπους πλεγμάτων, γεγονός το οποίο αναδεικνύει τον οικουμενικό χαρακτήρα της κρίσιμης συμπεριφοράς. Στα πλαίσια της προσέγγισης μέσου πεδίου, οι κρίσιμοι εκθέτες προκύπτουν  $\gamma = 1$ ,  $\beta = 1/2$ ,  $\alpha = 0$  και  $\delta = 3$ .

Πραγματοποιήθηκε σύγκριση της κρίσιμης συμπεριφοράς του προτύπου, όπως προσδιορίστηκε στα πλαίσια της προσέγγισης μέσου πεδίου με αποτελέσματα προσομοιώσεων, πειραματικών δεδομένων και θεωρητικών προβλέψεων, όπου εξήχθη το συμπε-

ρασμα ότι η θεμελιακή υπόθεση της αγνόησης των διακυμάνσεων συντελεί σε ποσοτικά εσφαλμένες προβλέψεις κάτω από την κρίσιμη διάσταση ( $d < 4$ ).

Η ποσοτική μελέτη της κρίσιμης συμπεριφοράς κατέστη δυνατή αξιοποιώντας τη μέθοδο προσομοίωσης Monte Carlo, με υλοποίηση του αλγόριθμου Metropolis για το κλασικό  $O(3)$  σιδηρομαγνητικό πρότυπο Heisenberg. Από τις προσομοιώσεις σε sc, bcc και fcc πλέγματα, διαπιστώθηκε ο μη απόλυτος μηδενισμός της μαγνήτισης στην κρίσιμη περιοχή, καθώς και τα φαινόμενα κύρτωσης των συναρτήσεων απόκρισης, τα οποία οφείλονται στο πεπερασμένο μέγεθος των υπό μελέτη συστημάτων.

Ο προσδιορισμός της κρίσιμης συμπεριφοράς στηρίχθηκε στη θεωρία κλιμάκωσης πεπερασμένου μεγέθους (finite size scaling theory) και στην υπολογιστική τεχνική επαναπροσδιορισμού με τη μέθοδο του ενός ιστογράμματος (single histogram reweighting method).

Ο προσδιορισμός του κρίσιμου εκθέτη  $\nu$  πραγματοποιήθηκε μελετώντας την κλιμάκωση των μεγίστων των ποσοτήτων  $\frac{dU_4}{d\beta}$  και  $\frac{d \ln \langle m \rangle}{d\beta}$  σε sc, bcc και fcc πλέγματα, γραμμικής διάστασης  $16 \leq L \leq 30$ . Τα αποτελέσματα της κλιμάκωσης πεπερασμένου μεγέθους για την κάθε ποσότητα είναι σε συμφωνία για την περίπτωση των πλεγμάτων sc και bcc στα πλαίσια των εκτιμώμενων σφαλμάτων, ενώ για την περίπτωση του fcc είναι σε συμφωνία στα πλαίσια δύο τυπικών αποκλίσεων. Η εκτίμηση του κρίσιμου εκθέτη  $\nu$  για τα sc, bcc και fcc πλέγματα προέκυψε αντίστοιχα: sc :  $\nu = 0.704(5)$ , bcc :  $\nu = 0.7055(25)$  και fcc :  $\nu = 0.708(5)$ .

Ο κρίσιμος εκθέτης  $\gamma$  υπολογίστηκε από την κλιμάκωση των μεγίστων της μαγνητικής επιδεκτικότητας ανά spin σε sc, bcc και fcc πλέγματα, γραμμικής διάστασης  $16 \leq L \leq 30$ . Τα αποτελέσματα για τα sc, bcc και fcc πλέγματα προέκυψαν αντίστοιχα: sc :  $\gamma = 1.395(13)$ , bcc :  $1.387(8)$  και fcc :  $1.400(14)$ .

Η κρίσιμη θερμοκρασία για τον κάθε τύπο πλέγματος προσδιορίστηκε:

- (i) Με τη μέθοδο τομής των συσσωρευτών (cumulant crossing method) σε sc, bcc και fcc πλέγματα, γραμμικής διάστασης  $L = 10, 14, 18, 24$  και  $30$ .
- (ii) Μέσω μελέτης της κλιμάκωσης των ψευδοκρίσιμων θερμοκρασιών των ποσοτήτων  $\frac{dU_4}{d\beta}$ ,  $\frac{d \ln \langle m \rangle}{d\beta}$  και  $\frac{\chi}{N}$  σε sc, bcc και fcc πλέγματα, γραμμικής διάστασης  $16 \leq L \leq 30$ .

Η εκτίμηση των κρίσιμων σημείων από τη μέθοδο τομής των συσσωρευτών προέκυψε: sc :  $T_C = 1.445(5)$ , bcc :  $T_C = 2.055(5)$  και fcc :  $3.175(5)$  ( $J = 1$ ,  $k_B = 1$ ). Τα αποτελέσματα για την κρίσιμη θερμοκρασία από την κλιμάκωση των ψευδοκρίσιμων θερμοκρασιών των ποσοτήτων  $\frac{dU_4}{d\beta}$ ,  $\frac{d \ln \langle m \rangle}{d\beta}$  και  $\frac{\chi}{N}$  είναι σε συμφωνία μεταξύ τους, για την περίπτωση των πλεγμάτων sc και fcc, στα πλαίσια των εκτιμώμενων σφαλμάτων, ενώ για την περίπτωση του bcc είναι σε συμφωνία στα πλαίσια δύο τυπικών αποκλίσεων. Η εκτίμηση του κρίσιμου σημείου  $T_C$  για τα sc, bcc και fcc πλέγματα, προέκυψε αντίστοιχα: sc :  $T_C = 1.44315(22)$ , bcc :  $T_C = 2.05441(19)$  και fcc :  $T_C = 3.1751(3)$

( $J = 1$ ,  $k_B = 1$ ). Διαπιστώθηκε ότι στα πλαίσια των υπολογιζόμενων σφαλμάτων, οι εκτιμήσεις των κρίσιμων σημείων από τη μέθοδο τομής των συσσωρευτών και την κλιμάκωση των ψευδοκρίσιμων θερμοκρασιών συμφωνούν μεταξύ τους.

Για την περίπτωση του sc, προσδιορίστηκε επιπλέον ο κρίσιμος εκθέτης  $\beta = 0.361(3)$ , μέσω της κλιμάκωσης της μαγνήτισης ανά spin στο εκτιμώμενο κρίσιμο σημείο  $T_C = 1.44315(22)$ . Μια εναλλακτική εκτίμηση του εκθέτη  $\gamma = 1.388(14)$  για την περίπτωση του sc, πραγματοποιήθηκε μέσω της κλιμάκωσης και της μαγνητικής επιδεκτικότητας ανά spin στο εκτιμώμενο κρίσιμο σημείο. Οι διαφορετικές εκτιμήσεις του κρίσιμου εκθέτη  $\gamma$  για το sc είναι σε συμφωνία μεταξύ τους στα πλαίσια των υπολογιζόμενων σφαλμάτων.

Οι κρίσιμοι εκθέτες  $\alpha$ ,  $\delta$  και  $\eta$  για κάθε τύπο πλέγματος προσδιορίστηκαν έμμεσα, μέσω των νόμων κλιμάκωσης, ενώ για την περίπτωση των πλεγμάτων bcc και fcc προσδιορίστηκε έμμεσα και ο κρίσιμος εκθέτης  $\beta$ .

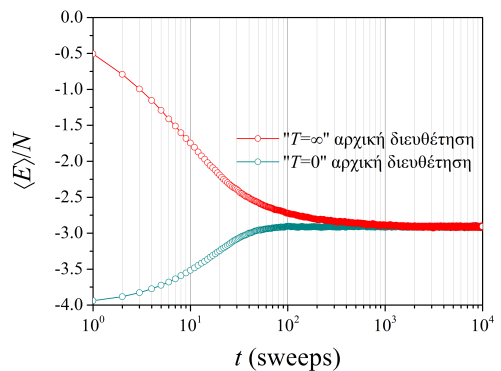
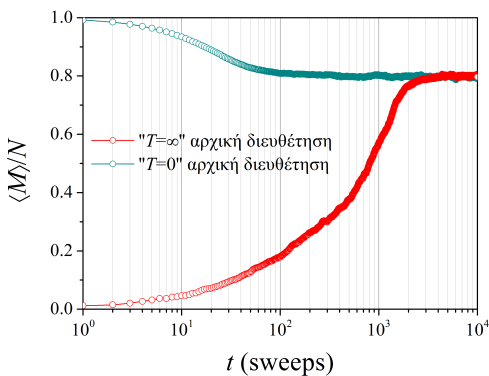
Διαπιστώθηκε ότι τα αποτελέσματα των κρίσιμων εκθετών είναι σε συμφωνία με αντίστοιχες μελέτες προσομοιώσεων Monte Carlo και μεθόδων ανάπτυξης σε σειρές για κάθε τύπο πλέγματος. Τέλος, οι κρίσιμοι εκθέτες για τα sc, bcc και fcc πλέγματα, όπως υπολογίστηκαν στην εργασία αυτή, συμφωνούν μεταξύ τους, γεγονός το οποίο επιβεβαιώνει και ποσοτικά τα οικουμενικά χαρακτηριστικά της κρίσιμης συμπεριφοράς.

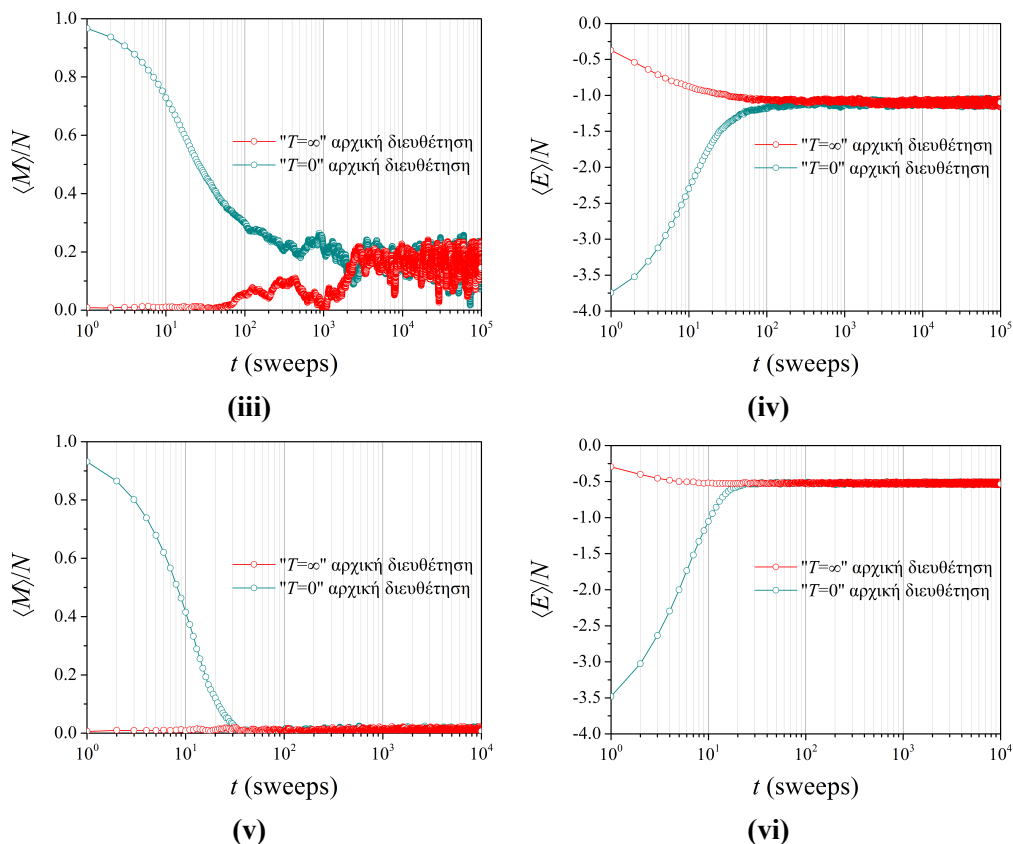


# Παράρτημα Α'

## Διαγράμματα Εκτίμησης του Χρόνου Εξισορρόπησης για bcc και fcc Πλέγματα

Ο χρόνος εξισορρόπησης για τα bcc και fcc πλέγματα, σε αντιστοιχία με όσα αναφέρονται στο Κεφάλαιο 4 για την περίπτωση του sc, εκτιμάται από τις χρονοσειρές της μαγνήτισης και της ενέργειας ανά spin σε τρεις θερμοκρασιακές περιοχές ( $T < T_C$ ,  $T \approx T_C$  και  $T > T_C$ ), βάσει του μεγαλύτερου προσομοιωμένου συστήματος ( $L = 30$ ). Στην Εικόνα Α'.1 παρουσιάζονται οι χρονοσειρές της μαγνήτισης και της ενέργειας ανά spin, για το bcc πλέγμα, γραμμικής διάστασης  $L = 30$ , σε τρεις θερμοκρασιακές περιοχές:  $T < T_C$  (Εικόνες Α'.1i και Α'.1ii),  $T \approx T_C$  (Εικόνες Α'.1iii και Α'.1iv) και  $T > T_C$  (Εικόνες Α'.1v και Α'.1vi). Επιπλέον, σε κάθε Εικόνα, με κόκκινο χρώμα απεικονίζεται η χρονοσειρά για αρχική διεύθυνση που αντιστοιχεί σε " $T = \infty$ ", ενώ με κυανό απεικονίζεται η χρονοσειρά για αρχική διεύθυνση που αντιστοιχεί σε " $T = 0$ ".

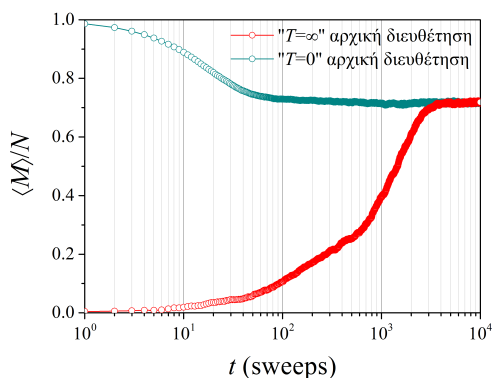




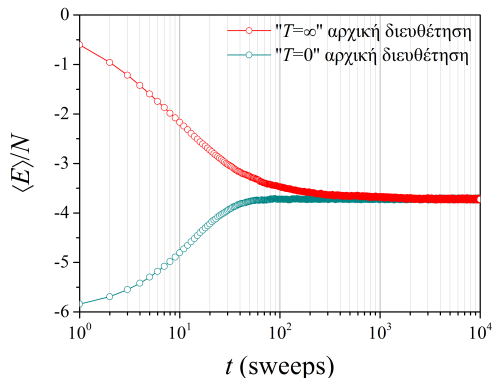
**Εικόνα Α' .1:** Χρονοσειρές της μαγνήτισης (πρώτη στήλη) και της ενέργειας (δεύτερη στήλη) ανά spin για δύο διαφορετικές αρχικές διευθετήσεις (κόκκινο: “ $T = \infty$ ”, κυανό “ $T = 0$ ”). Οι προσομοιώσεις πραγματοποιήθηκαν σε bcc πλέγμα, γραμμικής διάστασης  $L = 30$ , σε θερμοκρασίες  $T = 1$  (Εικόνες Α' .1i και Α' .1ii),  $T \approx T_C$  (Εικόνες Α' .1iii και Α' .1iv) και  $T = 3$  (Εικόνες Α' .1v και Α' .1vi).

Στην Εικόνα Α' .2 παρουσιάζονται οι χρονοσειρές της μαγνήτισης και της ενέργειας ανά spin, για το fcc πλέγμα, γραμμικής διάστασης  $L = 30$ , σε τρεις θερμοκρασιακές περιοχές:  $T < T_C$  (Εικόνες Α' .2i και Α' .2ii),  $T \approx T_C$  (Εικόνες Α' .2iii και Α' .2iv) και  $T > T_C$  (Εικόνες Α' .2v και Α' .2vi). Επιπλέον, σε κάθε Εικόνα, με κόκκινο χρώμα απεικονίζεται η χρονοσειρά για αρχική διευθέτηση που αντιστοιχεί σε “ $T = \infty$ ”, ενώ με κυανό απεικονίζεται η χρονοσειρά για αρχική διευθέτηση που αντιστοιχεί σε “ $T = 0$ ”.

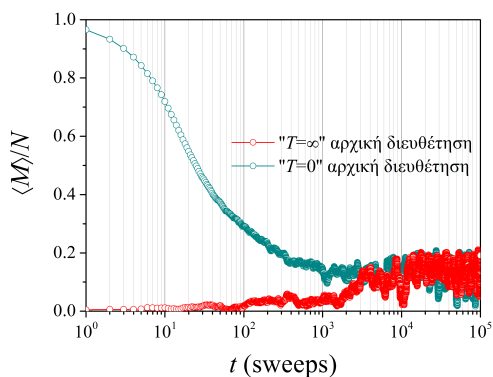




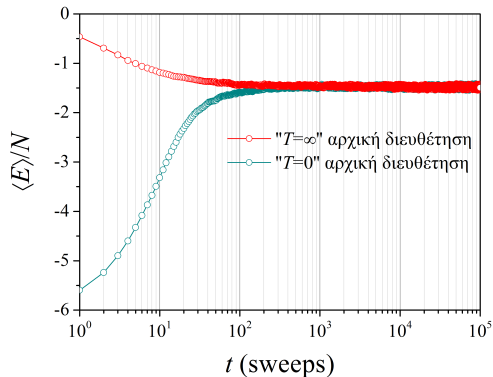
(i)



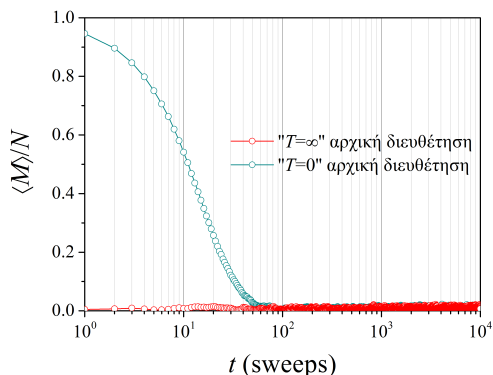
(ii)



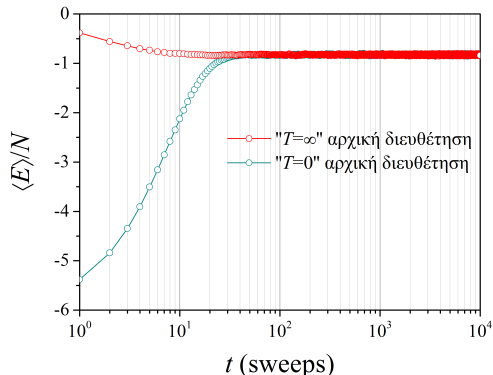
(iii)



(iv)



(v)



(vi)

**Εικόνα Α'.2:** Χρονοσειρές της μαγνήτισης (πρώτη στήλη) και της ενέργειας (δεύτερη στήλη) ανά spin για δύο διαφορετικές αρχικές διευθετήσεις (κόκκινο: “ $T = \infty$ ”, κυανό “ $T = 0$ ”). Οι προσομοιώσεις πραγματοποιήθηκαν σε fcc πλέγμα, γραμμικής διάστασης  $L = 30$ , σε θερμοκρασίες  $T = 2$  (Εικόνες Α'.2i και Α'.2ii),  $T \approx T_C$  (Εικόνες Α'.2iii και Α'.2iv) και  $T = 4$  (Εικόνες Α'.2v και Α'.2vi).

Σημειώνεται ότι ο χρόνος εξισορρόπησης που λαμβάνεται υπόψη στις προσομοιώσεις για κάθε τύπο πλέγματος, είναι αποτέλεσμα συνεκτίμησης των Εικόνων [Α'.1](#) και [Α'.2](#) του παρόντος Παραρτήματος, σε συνδυασμό με την Εικόνα [4.1](#) του Κεφαλαίου 4 που αφορά το sc .

## Βιβλιογραφία

---

- [1] D. A. Lavis and G. M. Bell, *Statistical Mechanics of Lattice Systems Volume 2: Exact, Series and Renormalization Group Methods*, Springer (1999).
- [2] J. M. Yeomans, *Statistical Mechanics of Phase Transitions*, Oxford University Press (1992).
- [3] S. H. Tsai and S. R. Salinas, *Brazilian Journal of Physics* **28**, 58 (1998).
- [4] K. Binder, *Zeitschrift für Physik B Condensed Matter*, **43**, 119 (1981).
- [5] J. J. Binney et al., *The Theory of Critical Phenomena: An Introduction to the Renormalization Group*, Clarendon Press (1992).
- [6] K. Huang, *Statistical Mechanics*, Willey (1987).
- [7] S. Blundell, *Magnetism in Condensed Matter Physics*, Oxford University Press (2001).
- [8] M. Le Bellac et al., *Equilibrium and Non-Equilibrium Statistical Thermodynamics*, Cambridge University Press (2004).
- [9] Α. Μαλάκης, *Σημειώσεις Φυσικής Στερεάς Κατάστασης*, Πανεπιστήμιο Αθηνών (1992).
- [10] E. Manousakis, *Lectures on Statistical Mechanics* (2012).
- [11] H. E. Stanley, *Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena*, Oxford University Press (1971).
- [12] M. E. Fisher, *The Theory of Equilibrium Critical Phenomena*, *Reports on Progress in Physics* **30.2**, 615 (1967).
- [13] M. Vojta, *Quantum Phase Transitions*, *Rep. Prog. Phys.* **66**, 2069 (2003).

- [14] M. E. J. Newman and G. T. Barkema, *Monte Carlo Methods in Statistical Physics*, Oxford University Press (1999).
- [15] D. P. Landau and K. Binder, *A Guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics*, Cambridge University Press (2000).
- [16] A. M. Ferrenberg and D. P. Landau, *Phys. Rev. B* **44**, 5081 (1991).
- [17] A. J. Liu and M. E. Fisher, *Journal of Statistical Physics*, **58**, 431 (1990).
- [18] K. Binder and D. W. Heermann, *Monte Carlo Simulations in Statistical Physics*, Springer (2010).
- [19] Γ. Χ. Ψαλτάκης, *Κβαντικά Συστήματα Πολλών Σωματιδίων*, Πανεπιστημιακές Εκδόσεις Κρήτης (2012).
- [20] H. E. Stanley, *Physical Review Letters* **20**, 589 (1968).
- [21] J. C. Le Guillou and J. Zinn-Justin, *Phys. Rev. B* **21**, 3976 (1980).
- [22] R. Reisser et al., *Phys. Rev. B* **52**, 3546 (1995).
- [23] K. Chen et al., *Phys. Rev. B* **48**, 3249 (1993).
- [24] M. Ferer and A. Hamid-Aidinejad, *Phys. Rev. B* **34**, 6481 (1986).
- [25] N. Metropolis et al., *J. Chem. Phys.* **21**, 1087 (1953)
- [26] E. W. Weisstein, “Sphere Point Picking.” From MathWorld—A Wolfram Web Resource. <http://mathworld.wolfram.com/SpherePointPicking.html>
- [27] M. Weigel and W. Janke, *Phys. Rev. E* **81**, 066701 (2010).
- [28] N. Madras and A. D. Sokal, *J. Stat. Phys.* **50**, 109 (1988).
- [29] M. B. Priestley, *Spectral Analysis and Time Series*, Academic Press (1981).
- [30] W. Anderson, *The Statistical Analysis of Time Series*, Wiley (1971).
- [31] R. H. Swendsen and J. S. Wang, *Phys. Rev. Lett.* **58**, 86 (1987).
- [32] U. Wolff, *Phys. Rev. Lett.* **62**, 361 (1989).
- [33] A. M. Ferrenberg and R. H. Swendsen, *Phys. Rev. Lett.* **61**, 2635 (1988).
- [34] H. Fehske et al., *Computational Many-Particle Physics*, Springer (2008).
- [35] P. Peczak et al., *Phys. Rev. B* **43**, 6087 (1991).
- [36] C. Holm and W. Janke, *Phys. Rev. B* **48**, 936 (1993).

