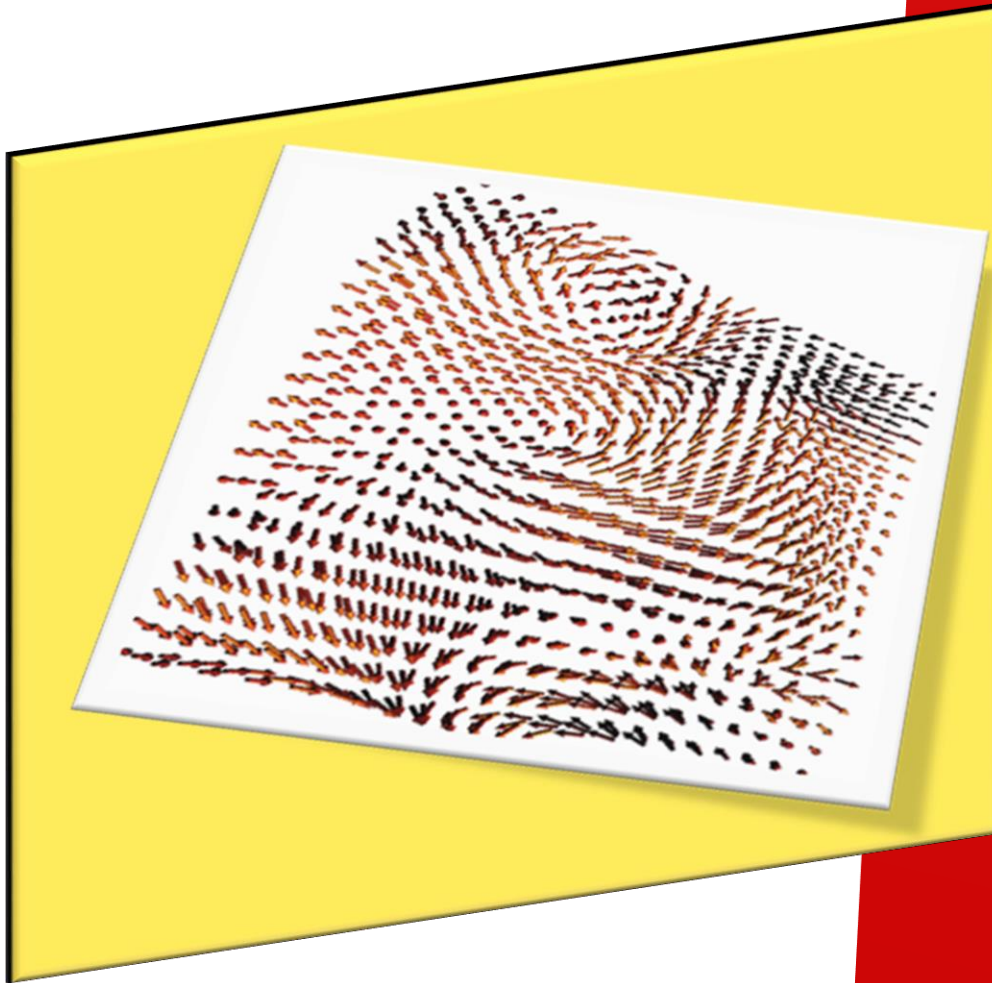


# ΜΕΛΕΤΗ ΤΟΥ ΔΙΣΔΙΑΣΤΑΤΟΥ ΠΡΟΤΥΠΟΥ HEISENBERG ΜΕ ΜΕΘΟΔΟΥΣ ΜΟΝΤΕ ΚΑΡΛΟ



**ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ**

*Σχολή Εφαρμοσμένων Μαθηματικών και Φυσικών Επιστημών*

*Διπλωματική εργασία στον τομέα της Υπολογιστικής Φυσικής*

**Όνοματεπώνυμο:** Καλλιστής Νικόλαος

**Επιβλέπων καθηγητής:** Αναγνωστόπουλος Κωνσταντίνος

Αν. Καθηγητής Ε.Μ.Π.





.....

Καλλιστής Νικόλαος

Διπλωματούχος Εφαρμοσμένων Μαθηματικών και Φυσικών Επιστημών Ε.Μ.Π.

Copyright © Καλλιστής Νικόλαος, 2013

Με επιφύλαξη παντός δικαιώματος. All rights reserved.

Απαγορεύεται η αντιγραφή, αποθήκευση και διανομή της παρούσας εργασίας, εξ ολοκλήρου ή τμήματος αυτής, για εμπορικό σκοπό. Επιτρέπεται η ανατύπωση, αποθήκευση και διανομή για σκοπό μη κερδοσκοπικό, εκπαιδευτικής ή ερευνητικής φύσης, υπό την προϋπόθεση να αναφέρεται η πηγή προέλευσης και να διατηρείται το παρόν μήνυμα. Ερωτήματα που αφορούν τη χρήση της εργασίας για κερδοσκοπικό σκοπό πρέπει να απευθύνονται προς τον συγγραφέα.

Οι απόψεις και τα συμπεράσματα που περιέχονται σε αυτό το έγγραφο εκφράζουν τον συγγραφέα και δεν πρέπει να ερμηνευθεί ότι αντιπροσωπεύουν τις επίσημες θέσεις του Εθνικού Μετσόβιου Πολυτεχνείου.

## **Ευχαριστίες**

Θα ήθελα να ευχαριστήσω κυρίως τον καθηγητή μου κ. Κωνσταντίνο Αναγνωστόπουλο για την προθυμία με την οποία δέχτηκε να αναλάβει την επίβλεψη της διπλωματικής μου εργασίας και την βοήθεια του καθ' όλη τη διάρκεια της συνεργασία μας.

Επίσης ευχαριστώ όλους τους καθηγητές μου, στη Σ.Ε.Μ.Φ.Ε., οι οποίοι με βοήθησαν και μου έδωσαν τις βάσεις να λειτουργώ με επιστημονική σκέψη.

Τέλος οφείλω να πω ένα μεγάλο ευχαριστώ για την στήριξη, όλα αυτά τα χρόνια, στην οικογένεια μου και στους φίλους μου.

## Περιγραφή Θέματος της διπλωματικής εργασίας

Σκοπός της διπλωματικής εργασίας είναι η περιγραφή του κλασικού σιδηρομαγνητικού μοντέλου Heisenberg στις δύο (2) διαστάσεις (τετραγωνικό πλέγμα με περιοδικές συνοριακές συνθήκες) και η μελέτη των ιδιοτήτων αυτού, με την μέθοδο Monte Carlo. Πιο συγκεκριμένα εξετάζουμε-καταλήγουμε στην άποψη ότι το μοντέλο δεν παρουσιάζει μετάβαση φάσης και μελετάμε τα χαρακτηριστικά μεγέθη του, όπως το μήκος συσχετισμού, στις χαμηλές θερμοκρασίες με την βοήθεια μεθόδων βάθμωσης πεπερασμένου μεγέθους (*Finite Size Scaling*). Επίσης μελετάμε το φαινόμενο asymptotic scaling του μήκους συσχετισμού και της μαγνητικής επιδεκτικότητας που παρουσιάζεται για μικρές θερμοκρασίες ( $T \rightarrow 0$ ).

Τέλος, στην εργασία αυτή κάνουμε μια σύντομη εισαγωγή στα βασικά στοιχεία της στατιστικής φυσικής, ενώ παρουσιάζουμε και τα κυριότερα σημεία των μεθόδων που χρησιμοποιούμε στον αλγόριθμο και στους μεθόδους εύρεσης των σφαλμάτων των μετρήσεων.

### **Abstract**

Objective of this thesis is the description of the classical ferromagnetic Heisenberg model in two (2) dimensions (square lattice with periodic conditions) and the study of its properties, using Monte Carlo methods. More specifically, we examine-conclude that the model exhibits phase transition and we study some properties, as the correlation length, at low temperatures using finite size scaling methods. Also we examine the presence of the phenomenon of asymptotic scaling of correlation length and magnetic susceptibility at low temperatures ( $T \rightarrow 0$ ).

Finally in this paper we do a brief introduction to the basics of statistical physics, and a reference in the algorithm and the methods of finding the errors of the measurements.

# Περιεχόμενα

## Περιεχόμενα

Περιγραφή θέματος της διπλωματικής εργασίας .....	5 -
Abstract.....	5 -
Περιεχόμενα .....	6 -
Εισαγωγή.....	8 -
1. Βασικά στοιχεία στατιστικής φυσικής:.....	9 -
1.1 Στατιστική Μηχανική - <i>Statistical Mechanics</i> .....	10 -
2. Θεωρητική περιγραφή του μοντέλου.....	11 -
2.1 Μοντέλο <i>Ising</i> .....	11 -
2.2 Μοντέλο <i>XY</i> (ή <i>O(2)model</i> ).....	12 -
2.3 <i>Heisenberg Model</i> (ή <i>O(3)model</i> ).....	12 -
2.4 Παραλλαγές των μοντέλων.....	13 -
2.5 Γενικές Ιδιότητες των μοντέλων .....	13 -
3. Μαθηματικά στοιχεία: .....	14 -
3.1 Ρυθμός Μετάβασης – Δεσπόζουσα Εξίσωση .....	14 -
3.2 Συνάρτηση Επιμερισμού.....	16 -
3.3 Μέση Τιμή .....	16 -
3.4 Διακυμάνσεις.....	19 -
3.5 Συναρτήσεις Συσχετισμού .....	21 -
4. Προσομοιώσεις <i>Monte Carlo</i> (MC).....	25 -
4.1 Δειγματοληψία με κριτήριο σημαντικότητας .....	25 -
4.2 Διαδικασία <i>Markov</i> .....	25 -
4.3 <i>Thermalization Time</i> .....	26 -
4.4 Συνθήκης της Εργοδικότητας .....	27 -
4.5 Συνθήκη Λεπτομερούς Ισοζύγησης .....	28 -
5. Ο αλγόριθμος <i>Metropolis</i> .....	30 -
6. Το μοντέλο <i>O(3)</i> ( <i>Heisenberg Model</i> ).....	34 -
6.1 Κλασική Περιγραφή.....	35 -
6.2 Ιδιότητες του μοντέλου.....	35 -
7. Ανάλυση Προγράμματος.....	36 -
7.1 Κατασκευή του πλέγματος και των τιμών των <i>spins</i> .....	36 -
7.2 Αρχικοποίηση του συστήματος .....	38 -

7.3	Μεταβολή του συστήματος σε νέα κατάσταση.....	- 40 -
7.4	Μέτρηση των ποσοτήτων .....	- 41 -
A.	Χρόνος για να βρεθεί το σύστημα σε κατάσταση θερμικής ισορροπίας ( <i>Thermalization Time</i> ) ..	- 41 -
B.	Χρόνος αυτοσυσχετισμού .....	- 43 -
Γ.	Ενέργεια Συστήματος .....	- 45 -
Δ.	Μαγνήτιση .....	- 46 -
ΣΤ.	Σφάλματα Μετρήσεων .....	- 46 -
8.	Επεξεργασία Μετρήσεων. ....	- 49 -
8.1	Ενέργεια του Συστήματος .....	- 50 -
8.2	Θεμελιώδης Κατάσταση – <i>Ground State</i> .....	- 51 -
8.3	Αυθόρμητο Σπάσιμο Συμμετρίας– <i>Spontaneous Symmetry Breaking</i> .....	- 56 -
8.4	Μαγνήτιση του Συστήματος .....	- 62 -
8.5	Ειδική Θερμότητα - Μαγνητική Επιδεκτικότητα .....	- 63 -
8.6	Ροπή 4 <sup>ης</sup> Τάξης - <i>Binder Cumulant</i> .....	- 67 -
8.7	Συνάρτηση Συσχετισμού.....	- 69 -
8.8	Μήκος Συσχετισμού .....	- 70 -
8.8.1	Μέθοδος Kim για την βάθμωση πεπερασμένου μεγέθους <i>Finite Size Scaling</i> ..	- 71 -
8.8.2	Μήκος συσχετισμού.....	- 73 -
8.8.3	Διακριτός μετασχηματισμός <i>Fourier (DFT)</i> .....	- 74 -
8.8.4	Βελτιωμένος Εκτιμητής για το Μήκος Συσχετισμού με τον αλγόριθμο <i>Wolff</i> .....	- 75 -
8.8.5	Ο αλγόριθμος <i>Wolff Single Cluster</i> .....	- 76 -
8.8.6	Επεξεργασία μετρήσεων .....	- 77 -
9.	Συμπεράσματα .....	- 83 -
	Πίνακας Εικόνων.....	- 84 -
	Βιβλιογραφία .....	- 86 -

## Εισαγωγή

Στο μεγαλύτερο μέρος των προβλημάτων που έχουν επιστημονικό ενδιαφέρον σήμερα, δεν υπάρχουν ακριβείς αναλυτικές λύσεις. Έτσι για να μελετήσουμε αυτά τα προβλήματα χρησιμοποιούμε προσεγγιστικές αριθμητικές μεθόδους, οι οποίες μπορεί να είναι είτε θεωρίες πεδίου, είτε προσεγγίσεις μέσω αριθμητικών σειρών είτε υπολογιστικές μέθοδοι. Στην εργασία αυτήν θα ασχοληθούμε με τις υπολογιστικές μεθόδους και συγκεκριμένα με την μέθοδο Monte Carlo.

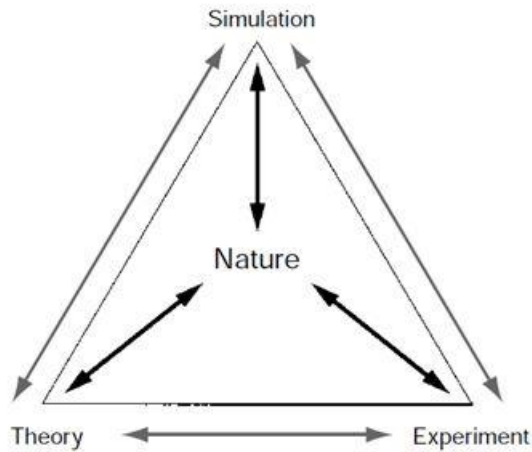
Οι μέθοδοι *Monte Carlo*, είναι ευρέως διαδεδομένοι για την χρήση τους σε προβλήματα στατιστικής φυσικής, ώστε να προσομοιώνονται καταστάσεις του συστήματος σε υπολογιστικό περιβάλλον και ταυτόχρονα να έχουμε το πλήρη έλεγχο των μεταβλητών οι οποίες μπορούν να επηρεάζουν το σύστημα μας.

Το μοντέλο Heisenberg, ουσιαστικά περιγράφει ένα σύστημα στο οποίο υπάρχουν διατεταγμένα στοιχεία τα οποία παρουσιάζουν μαγνητικές ιδιότητες, όπως το spin, και μπορούν να αλληλεπιδρούν με τους γείτονες τους, αλλά και με ένα πιθανό εφαρμοζόμενο εξωτερικό πεδίο. Διαφέρει από το μοντέλο Ising, και το μοντέλο XY, στο ότι η διεύθυνση των spins είναι ελεύθερη να «κινήθει» και στις τρεις (3) διαστάσεις του χώρου (x,y,z) με μόνο περιορισμό το μέτρο τους να είναι μοναδιαίο. Διακρίνουμε κυρίως δύο περιπτώσεις του μοντέλου. Η μία είναι το σιδηρομαγνητικό (*ferromagnetic*) μοντέλο Heisenberg και η άλλη το αντι-σιδηρομαγνητικό (*antiferromagnetic*) μοντέλο. Η διαφορά τους έγκειται στο ότι στο σιδηρομαγνητικό μοντέλο, τα spins του συστήματος τείνουν να ευθυγραμμιστούν προς την ίδια διεύθυνση με το μαγνητικό πεδίο της γύρω περιοχής που «αντιλαμβάνονται», ενώ αντίθετα στο αντι-σιδηρομαγνητικό μοντέλο, τείνουν να ευθυγραμμιστούν αντίθετα με την διεύθυνση του μαγνητικού πεδίου το οποίο «αντιλαμβάνονται». Οι διαφορές στις ιδιότητες του κάθε μοντέλου είναι αρκετά σημαντικές ώστε να τα κάνουν να αντιμετωπίζονται σαν διαφορετικά θέματα, για αυτό και σε αυτή την εργασία θα ασχοληθούμε μόνο με την περίπτωση του σιδηρομαγνητικού μοντέλου.

Με την εξέλιξη των ηλεκτρονικών υπολογιστών έγινε εφικτό να προσομοιώνουμε μοντέλα τα οποία ήταν δυσεπίλυτα με τις «κλασικές» θεωρητικές μεθόδους. Οι υπολογιστές λοιπόν βοήθησαν τους φυσικούς να ανακαλύψουνε νέα μοντέλα για τα διάφορα φαινόμενα της φύσης αλλά επίσης και να τα λύσουν χωρίς ουσιαστική απλοποίηση.

Σαν αποτέλεσμα οι υπολογιστικές προσομοιώσεις μετατράπηκαν σε μία ακόμη μέθοδο για την πραγματοποίηση έρευνας και οι υπολογιστικές μέθοδοι προσφέρουν σε μερικές περιπτώσεις την θεωρητική βάση για την επεξήγηση πειραματικών δεδομένων, ενώ σε άλλες περιπτώσεις προσφέρουν «πειραματικά δεδομένα» τα οποία συγκρίνονται με τα θεωρητικά.





**Εικόνα 1.** Σχηματική απεικόνιση της σχέσης μεταξύ της θεωρίας, του πειράματος και της υπολογιστικής προσομοίωσης ενός φυσικού φαινομένου.

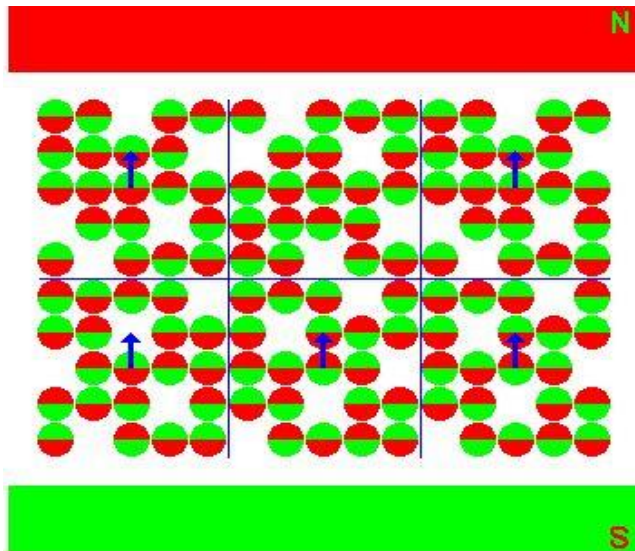
## **1. Βασικά στοιχεία στατιστικής φυσικής:**

Η στατιστική φυσική είναι ένας κλάδος της φυσικής, ο οποίος χρησιμοποιεί μεθόδους της θεωρίας πιθανοτήτων, της στατιστικής καθώς και των μαθηματικών εργαλείων για την μελέτη μεγάλων πληθυσμών και την εκτίμηση των ιδιοτήτων τους, ώστε να μελετούνται προβλήματα φυσικής. Το εύρος των εφαρμογών της στατιστικής φυσικής είναι αρκετά μεγάλο και λίγα παραδείγματα εφαρμογών είναι στην βιολογία, στην χημεία, ακόμα και στις κοινωνικές επιστήμες όπως η κοινωνιολογία.

Η στατιστική φυσική έχει σαν σκοπό την περιγραφή των τρόπων λειτουργίας συστημάτων με πολύ μεγάλο αριθμό ελευθερίας  $N$  και την ανάπτυξη των αποτελεσμάτων αυτών σε μακροσκοπική κλίμακα. Η στατιστική φυσική μπορούμε να πούμε δηλαδή ότι, συνδέει τις μικροσκοπικές ιδιότητες των συστημάτων (π.χ. αλληλεπιδράσεις μεταξύ μορίων, λόγο κίνησης ή ηλεκτρομαγνητικές δυνάμεις) με τις μακροσκοπικές ιδιότητες (η οποίες μπορεί να είναι η θερμοχωρητικότητα, η μαγνήτιση κ.α.).

Όπως είναι φυσικό σε ένα απλό σύστημα υπάρχουν πάρα πολλοί βαθμοί ελευθερίας ( $N = 10^{23} - 10^{24}$ ), πράγμα που κάνει αδύνατη την ακριβή λύση των εξισώσεων που περιγράφουν το σύστημα. Έτσι η στατιστική φυσική μας δίνει την δυνατότητα να περιγράψουμε τελικά το σύστημα αυτό με την χρήση μερικών σωστά ορισμένων “χονδροειδών ιδιοτήτων (*bulk properties*)”. Τέτοιες ιδιότητες μπορεί να είναι η μαγνήτιση και η εσωτερική ενέργεια για έναν μαγνήτη ή η πυκνότητα και η ενέργεια για ένα ρευστό, αποφεύγοντας όπως είπαμε να ασχοληθούμε με το κάθε σωματίδιο του σώματος ξεχωριστά (δηλαδή την ακριβή γνώση της θέσης, της ορμής, της στροφορμής και της ενέργειας του). Με άλλα λόγια μπορούμε να πούμε ότι όλες αυτές οι ιδιότητες και οι αλληλεπιδράσεις των δομικών στοιχείων ενός σώματος, αθροίζονται και μας δίνουν μακροσκοπικά μια μέση τιμή της ενέργειας τους ή οποιαδήποτε άλλης ιδιότητας τους (μαγνήτιση, αγωγιμότητα κτλ.).

Η στατιστική φυσική λοιπόν προσπαθεί να προβλέψει αυτήν την μακροσκοπική συμπεριφορά λαμβάνοντας υπόψη τις αλληλεπιδράσεις των ατόμων στο σύνολο τους, χωρίς να λύνει τις εξισώσεις κίνησης του κάθε ατόμου ξεχωριστά. Διαφορετικά, η λειτουργία της στατιστική φυσικής είναι, αντί να ψάχνει για την ακριβή λύση του συστήματος, να ασχολείται με την πιθανότητα να είναι το σύστημα σε μια κατάσταση A ή σε μια άλλη κατάσταση B, από τις πιθανές καταστάσεις του συστήματος, και έτσι ανάλογα να προβλέπει την ιδιότητες του σώματος.



Στην δομή του σχήματος υποθέτουμε ότι τα άτομα συμπεριφέρονται σαν μικρούς μαγνήτες οι οποίοι τείνουν να ευθυγραμμιστούν με το εξωτερικό πεδίο αλληλοεπιδρώντας μαζί του αλλά και μεταξύ τους. Παρατηρούμε ότι υπάρχουν περιοχές όπου η μέση τιμή της μαγνήτισης είναι διάφορη από το μηδέν, και τελικά το δείγμα μας στο σύνολο του παρουσιάζει μαγνήτιση.

Εικόνα 2. Σύστημα πολλών δίπολων

## 1.1 Στατιστική Μηχανική - Statistical Mechanics

Στην εργασία αυτή θα ασχοληθούμε με τον τομέα της στατιστικής φυσικής ο οποίος ασχολείται με μηχανικά συστήματα (*Statistical Mechanics*), τα οποία υπόκεινται σε δυνάμεις που περιγράφονται από την Χαμιλτονιανή (*Hamiltonian*). Σχεδόν όλα αυτά τα συστήματα, ακόμα και των πιο περίπλοκων, όταν αφεθούν για αρκετή ώρα σε κατάσταση ηρεμίας, περιγράφονται με πιθανοτική συμπεριφορά. Η στατιστική μηχανική, λοιπόν περιγράφει την συμπεριφορά των συστημάτων, τα οποία συνήθως αποτελούνται από πολλά σωματίδια, τα οποία αφού αφεθούν για όση ώρα χρειάζεται ώστε να φθάσουν σε κατάσταση θερμικής ισορροπίας, μας δίνουν πληροφορίες όπως της ελεύθερης ενέργειας  $F$ , της εντροπίας  $S$ , της μαγνήτισης  $M$  κ.α. του συστήματος σε αυτήν την κατάσταση. Αυτή η δυνατότητα της πρόβλεψης μακροσκοπικών ιδιοτήτων του συστήματος, βασιζόμενοι στις μικροσκοπικές ιδιότητες του, είναι η κύρια διαφορά με την κλασική θερμοδυναμική.

## 2. Θεωρητική περιγραφή του μοντέλου

Για την περιγραφή και την μελέτη των μαγνητικών ιδιοτήτων πολλών υλικών αλλά ακόμα και για την μελέτη νέων ιδεών και θεωριών όπως της κβαντικής χρωμοδυναμικής θεωρίας (*quantum chromodynamics - QCD*), χρησιμοποιούμε μαθηματικά μοντέλα spin, τα οποία στην ουσία είναι μαγνητικά δίπολα τα οποία είναι τοποθετημένα σε πλεγματικές θέσεις ώστε να μπορούν να αλληλεπιδρούν μεταξύ τους αλλά και με ένα εξωτερικό μαγνητικό πεδίο.

### 2.1 Μοντέλο Ising

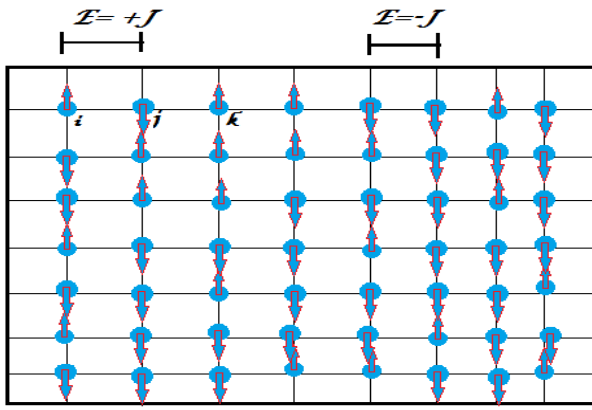
Στην πιο απλή περίπτωση, στο μοντέλο Ising, έχουμε ένα πλέγμα στο οποίο σε κάθε σημείο του αντιστοιχούμε ένα άτομο, το οποίο έχει την ιδιότητα να έχει το spin του σε δύο δυνατές κατευθύνσεις (“πάνω” ή “κάτω”), έτσι η Χαμιλτονιανή του συστήματος γράφεται:

$$H_{\text{Ising}} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j - H \sum_{i=1} S_i \quad , \quad S_i = \pm 1, \quad (1)$$

όπου το spin  $S_i$ , στην θέση  $i$  μπορεί να δείχνει “πάνω” ή “κάτω” προς την διεύθυνση του ευνοϊκού άξονα (*easy axis*) μαγνητισμού, το  $J$  ονομάζεται σταθερά σύζευξης και χαρακτηρίζει την αλληλεπίδραση των spins ενώ το  $H$  είναι το εξωτερικό μαγνητικό πεδίο που εφαρμόζεται στο σύστημα. Το  $J$  μπορεί να πάρει είτε θετικές τιμές ( $J > 0$ ) είτε αρνητικές ( $J < 0$ ) ανάλογα με αν το σύστημα μας είναι σιδηρομαγνητικό (*ferromagnetic*) ή αντι-σιδηρομαγνητικό (*anti-ferromagnetic*)<sup>1</sup>. Η αλληλεπίδραση των spins, περιορίζεται στα γειτονικά ζεύγη spins  $\langle i, j \rangle$ . Παρατηρούμε ότι στο σιδηρομαγνητικό μοντέλο, κάθε δεσμός που ενώνει ομόρροπα spin έχει ενέργεια  $-J$  που είναι κατά  $2J$  μικρότερη από ένα δεσμό με αντίρροπα spin. Το σιδηρομαγνητικό μοντέλο, ενεργειακά προτιμά καταστάσεις με δεσμούς ομόρροπους, δηλαδή τα spin να είναι όλα προσανατολισμένα προς την ίδια κατεύθυνση. Η ελάχιστη ενέργεια – θεμελιώδης κατάσταση (*Ground State*) αντιστοιχεί στην μοναδική κατάσταση με όλα τα spin προσανατολισμένα προς την ίδια κατεύθυνση με αυτήν του  $H^2$ .

<sup>1</sup> Για  $J=0$  τα spins δεν αλληλεπιδρούν μεταξύ τους και το μοντέλο χαρακτηρίζεται ως non-ferromagnetic.

<sup>2</sup> Στην περίπτωση του αντι-σιδηρομαγνητικού συστήματος η θεμελιώδης ενέργεια (*Ground State*), είναι εκφυλισμένη και οι αντίστοιχες καταστάσεις είναι πιο πολύπλοκο να περιγραφούν.



Σχηματική αναπαράσταση του μοντέλου Ising σε 2 διαστάσεις (8x7). Τα spin μπορούν να πάρουν 2 διευθύνσεις με χαμηλότερη ενέργεια αυτή στην οποία θα είναι ομόρροπα με τα γειτονικά τους (σιδηρομαγνητικό μοντέλο).

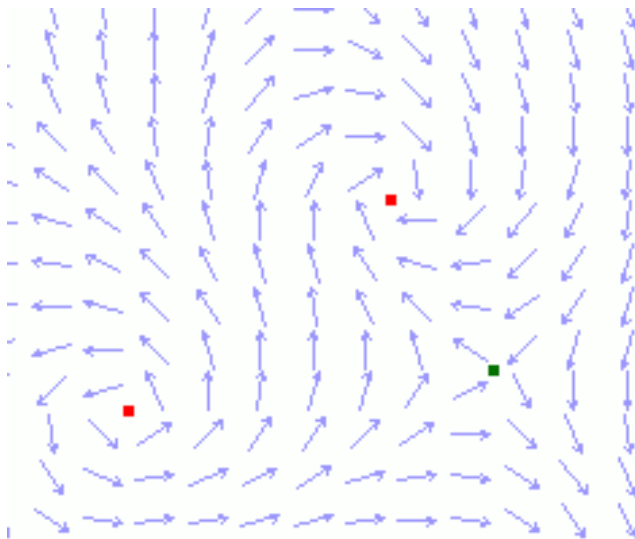
Εικόνα 3. Σχηματική αναπαράσταση του μοντέλου Ising.

## 2.2 Μοντέλο XY (ή O(2)model)

Αντίστοιχα στο μοντέλο XY (ή O(2)model), τα spins είναι ελεύθερα να πάρουν κατευθύνσεις στο επίπεδο XY. Η Χαμιλτονιανή που περιγράφει το σύστημα είναι η:

$$H_{XY} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} (S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y) - H_x \sum_i S_i^x, \quad (2)$$

$$(S_i^x)^2 + (S_i^y)^2 = 1$$



Χάρη στην περιοδικότητα της ενέργειας αλληλεπίδρασης του μοντέλου XY, παρατηρούμε περιοχές με τοπολογίες οι οποίες παρουσιάζουν μια συγκεκριμένη συμπεριφορά. Έτσι έχουμε περιοχές στις οποίες τα spins σχηματίζουν “δίνες” (Vortex) και άλλες στις οποίες σχηματίζουν “άντι-δίνες” (anti-Vortex)

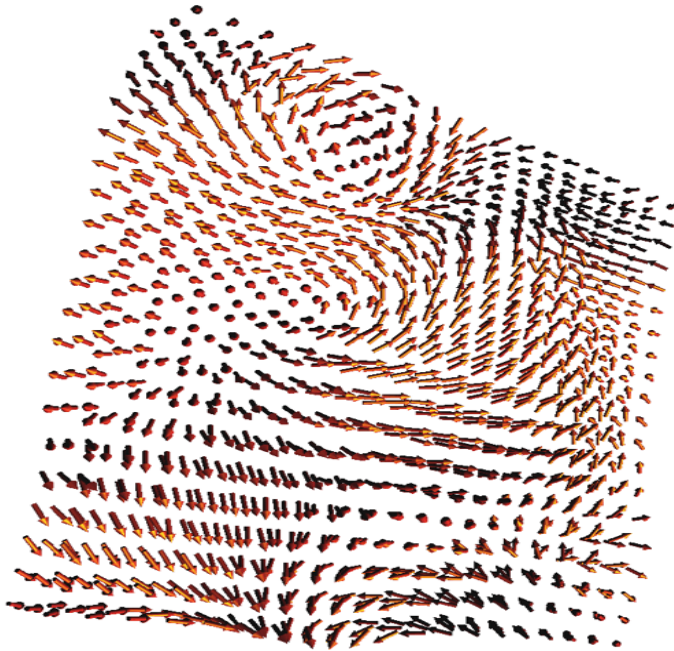
Εικόνα 4. Σχηματική αναπαράσταση του O(2)model [13]

## 2.3 Heisenberg Model (ή O(3)model)

Ενώ τέλος για το μοντέλο Heisenberg, όπου οι διευθύνσεις των spins είναι ελεύθερες να πάρουν οποιαδήποτε κατεύθυνση στον τρις-διάστατο χώρο (3D), η Χαμιλτονιανή γράφεται:

$$H_{\text{Heisenberg}} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} (S_i \cdot S_j) - H_z \sum_i S_i^z, \quad (3)$$

$$(S_i^x)^2 + (S_i^y)^2 + (S_i^z)^2 = 1$$



Το μοντέλο Heisenberg, στο οποίο τα spins είναι ελεύθερα να πάρουν οποιαδήποτε κατεύθυνση στον 3D-χώρο.

Εικόνα 5. Το μοντέλο Heisenberg. [14]

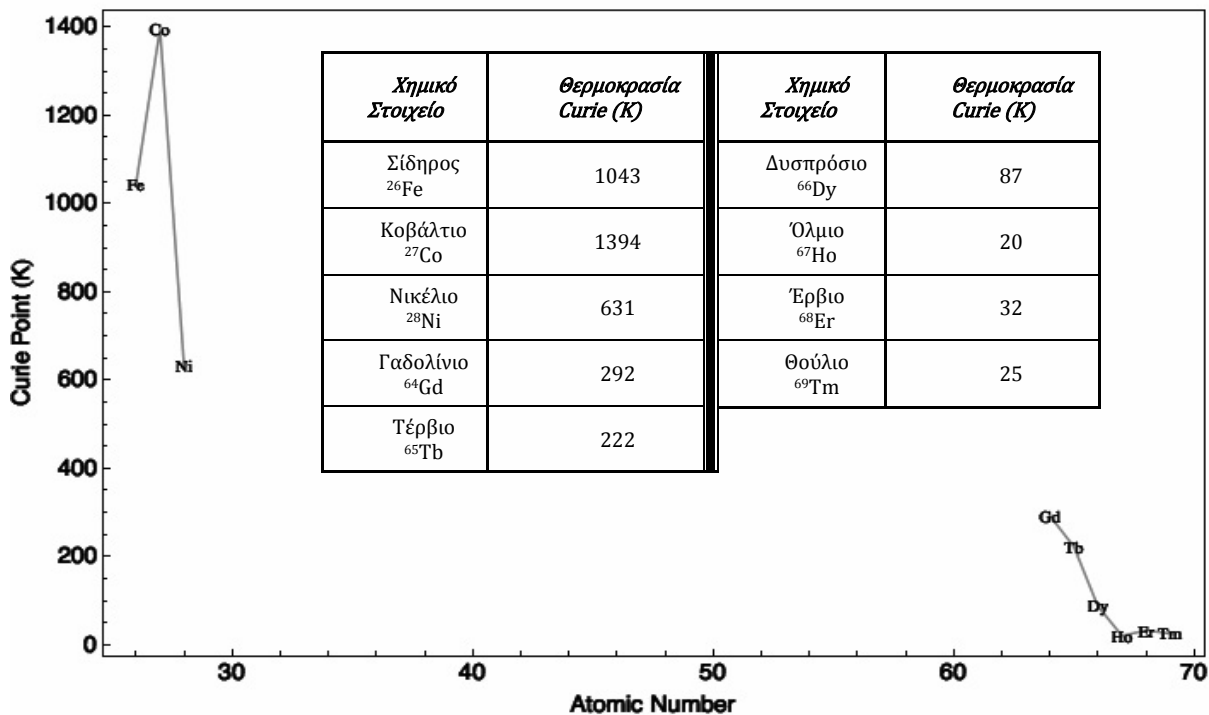
## 2.4 Παραλλαγές των μοντέλων

Βέβαια οι παραλλαγές των παραπάνω 3 βασικών μοντέλων είναι θεωρητικά άπειρες. Για παράδειγμα μπορούμε να επιλέξουμε η αλληλεπίδραση των spins να μην περιορίζεται στους κοντινότερους “γείτονες”, αλλά να περιλαμβάνει και τους μακρινότερους ( $\alpha=2,3,4\dots$ ), ή να έχουμε διαφορετική γεωμετρία ή/και τοπολογία του πλέγματος. Για αυτό και στο θέμα της εργασίας, θα μελετήσουμε το μοντέλο Heisenberg με την ιδιαιτερότητα ότι τα spins είναι τοποθετημένα σε ένα δις-διαστατο (2D) πλέγμα (σχήμα εξωφύλλου), χωρίς την παρουσία εξωτερικού μαγνητικού πεδίου. Άλλες παραλλαγές αφορούν διαφορετικά  $J$  ή  $H$  για ολόκληρο το σύστημα ή ακόμα και για υποπεριοχές αυτού

## 2.5 Γενικές Ιδιότητες των μοντέλων

Να επισημάνουμε εδώ, ότι εξετάζουμε το σύστημα μας πως συμπεριφέρεται σε σχέση με την θερμοκρασία, γιατί προσδίδοντας ενέργεια στα συστήματα αυτά μέσω της θερμότητας-αύξηση θερμοκρασίας, τους δίνουμε αρκετή ενέργεια ώστε να μεταπηδήσουν από τις στάθμες χαμηλότερης ενεργειακής στάθμης, όπως παραδείγματος χάρη την στάθμη θεμελιώδης ενέργειας (*ground state*) σε υψηλότερες ενεργειακές στάθμες. Έτσι στο σύστημα μας, το οποίο βρίσκεται στην θεμελιώδη ενέργεια και όλα τα spin του είναι ευθυγραμμισμένα ομόρροπα (σιδηρομαγνητικό σύστημα), αν του δώσουμε αρκετή ενέργεια δίνουμε την δυνατότητα σε μερικά spins να αλλάξουν φορά με αποτέλεσμα να χάσει την ομοιογένεια του και άρα να χαθεί η μαγνήτιση του, καταλήγοντας έτσι σταδιακά σε ένα παραμαγνητικό μοντέλο. Η κρίσιμη θερμοκρασία πάνω από την οποία έχουμε αλλαγή φάσης (σιδηρομαγνητικό σε παραμαγνητικό) ονομάζεται θερμοκρασία Curie. Αντίστοιχα για ένα αντι-σιδηρομαγνητικό μοντέλο η αλλαγή

της φάσης από αντισιδιρομαγνητικό σε παραμαγνητικό πραγματοποιείται πέρα από την κρίσιμη θερμοκρασία Néel.



Εικόνα 6. Οι θερμοκρασίες Curie για τα χημικά στοιχεία .[12]

### 3. Μαθηματικά στοιχεία:

Για να καθορίσουμε την κατάσταση του συστήματος μας λοιπόν, πρέπει να προσδιορίσουμε την μαγνήτιση του, την ενέργεια του και σε συνδυασμό με κάποια άλλα χαρακτηριστικά μεγέθη, όπως η μαγνητική επιδεκτικότητα ή η ειδική θερμότητα, να δούμε τελικά το σύστημα μας, πως συμπεριφέρεται με την μεταβολή της θερμοκρασίας.

#### 3.1 Ρυθμός Μετάβασης – Δεσπόζουσα Εξίσωση

Αν υποθέσουμε ότι το σύστημα μας βρίσκεται σε μια κατάσταση  $\mu$ , ορίζουμε την πιθανότητα  $R(\mu \rightarrow \nu)dt$  το σύστημα να βρεθεί στην κατάσταση  $\nu$  μετά από χρόνο  $dt$ . Το  $R(\mu \rightarrow \nu)$  δίνει τον **ρυθμό μετάβασης** (*transition rate*) από την κατάσταση  $\mu$  στην  $\nu$  ( $\mu \rightarrow \nu$ ). Ο ρυθμός μετάβασης συνήθως θεωρείται ανεξάρτητος του χρόνου. Μπορούμε να θεωρήσουμε μία πιθανότητα μετάβασης  $R(\mu \rightarrow \nu)dt$  για κάθε ξεχωριστή κατάσταση  $\nu$  που μπορεί να φθάσει το σύστημα από την κατάσταση  $\mu$ . Έτσι το σύστημα μας, μπορεί να μεταβεί σε οποιαδήποτε από τις επιτρεπτές καταστάσεις  $\nu$ , ανάλογα με την πιθανότητα μετάβασης της. Εδώ είναι λοιπόν που παίζει ρόλο η πιθανοτική αντιμετώπιση του προβλήματος, καθώς μπορούμε να καθορίσουμε τα βάρη  $W_\mu(t)$ , τα οποία μας αντιπροσωπεύουν την πιθανότητα του συστήματος να βρίσκεται στην κατάσταση  $\mu$  τη χρονική στιγμή  $t$ . Η στατιστική

μηχανική ασχολείται με αυτά τα βάρη, και η γνώση αυτών μπορεί να μας καθορίσει όλη την συμπεριφορά του συστήματος που θέλουμε να μελετήσουμε.

Ορίζουμε την **‘Δεσπόζουσα Εξίσωση’** (*Master Equation*):

$$\frac{dw_\mu}{dt} = \sum_\nu [w_\nu(t)R(\nu \rightarrow \mu) - w_\mu(t)R(\mu \rightarrow \nu)] \quad (4)$$

$$\sum_\mu w_\mu(t) = 1 \quad (5)$$

Η πρώτη από τις παραπάνω εξισώσεις μας λέει απλά ότι η μεταβολή του βάρους  $w_\mu(t)$  είναι ίση με τον ρυθμό που το σύστημα εισέρχεται στην κατάσταση  $\mu$  από οποιαδήποτε άλλη  $\nu$  μείον το ρυθμό με τον οποίο φεύγει από την κατάσταση  $\mu$  για οποιαδήποτε άλλη κατάσταση  $\nu$ . Η δεύτερη εκφράζει ότι τα βάρη  $w_\mu(t)$  ερμηνεύονται ως πιθανότητες και φυσικά η πιθανότητα να είναι το σύστημα σε κάποια κατάσταση είναι ίση με 1.

Οι ρυθμοί μετάβασης  $R(\mu \rightarrow \nu)$  προκύπτουν από την θερμική φύση της αλληλεπίδρασης του συστήματος με τη θερμική δεξαμενή. Δηλαδή όπως αναφέραμε και πριν, προσδίδοντας αρκετή ενέργεια-θερμότητα στο σύστημα μας μέσω της θερμικής δεξαμενής, του δίνουμε την δυνατότητα να μεταβεί σε μια άλλη κατάσταση διαφορετική από αυτής που βρίσκεται, και έτσι ουσιαστικά ο ρυθμός μετάβασης (πιθανότητα μετάβασης) μεγαλώνει. Στην πράξη οι ρυθμοί μετάβασης προσομοιώνονται με κατάλληλες επιλογές κατά τη διάρκεια των υπολογισμών Monte Carlo. Τα  $R(\mu \rightarrow \nu)$  θεωρούνται ανεξάρτητα του χρόνου οπότε το παραπάνω σύστημα εξισώσεων για τα  $w_\mu(t)$  είναι γραμμικό, και ο περιορισμός  $0 \leq w_\mu(t) \leq 1$  οδηγεί στο (μη τετριμμένο) συμπέρασμα ότι σε άπειρο χρόνο τα  $w_\mu(t)$  συγκλίνουν γρήγορα (για μεγάλα συστήματα) σε αριθμούς  $p_\mu$ , τις πιθανότητες κατάληψης ισορροπίας. Δηλαδή μετά από κάποιο χρόνο τα δεξιά μέλη της σχέσης (4) αλληλοαναιρούνται και έτσι έχουμε

$$\frac{dw_\mu(t)}{dt} = 0 \text{ (κατάστη θερμικής ισορροπίας)} \quad (6)$$

$$p_\mu = \lim_{t \rightarrow \infty} w_\mu(t) \quad \sum_\mu p_\mu = 1 \quad (7)$$

Οι πιθανότητες  $p_\mu$  για σύστημα σε θερμική ισορροπία με δεξαμενή θερμοκρασίας  $\beta = 1/kT$ , μπορεί να δειχθεί (*Gibbs 1902*) ότι ακολουθούν την κατανομή Boltzman

$$p_\mu = \frac{1}{Z} e^{-E_\mu/kT} = \frac{1}{Z} e^{-\beta E_\mu} \quad (8)$$

,όπου  $E_\mu$  είναι η ενέργεια του συστήματος στην κατάσταση  $\mu$  και το  $k$  είναι η σταθερά Boltzmann ( $1.38 \times 10^{-23} \text{JK}^{-1}$ ). Η παράμετρος  $\beta$  θα αναφέρεται απλά ως η θερμοκρασία του συστήματος και βλέπουμε ότι μέσω του εκθετικού στην εξίσωση (8) καθορίζει μια χαρακτηριστική ενέργεια για το σύστημα.

### 3.2 Συνάρτηση Επιμερισμού

Η σταθερά  $Z$  στην (8) είναι η **συνάρτηση επιμερισμού** (*partition function*) του συστήματος και είναι η σταθερά κανονικοποίησης (*normalization constant*) της κατανομής  $p_\mu$ . Από την σχέση  $\sum_\mu p_\mu = 1$  υπολογίζουμε την

$$Z(\beta) = \sum_\mu e^{-\beta E_\mu} \quad (9)$$

Η συνάρτηση επιμερισμού μας δίνει πολλές περισσότερες πληροφορίες από ότι μια απλή σταθερά κανονικοποίησης. Όπως θα δούμε και στη συνέχεια της εργασίας, η γνώση της συνάρτησης επιμερισμού σε σχέση με την θερμοκρασία και τους άλλους παράγοντες που επηρεάζουν το σύστημα, μπορεί να μας δώσει σχεδόν ολόκληρη τη συμπεριφορά του μακροσκοπικού συστήματος.

### 3.3 Μέση Τιμή

Γυρνώντας στον αρχικό μας σκοπό, ο οποίος είναι να προσδιορίσουμε το σύστημα μας σε μακροσκοπικό επίπεδο, μπορούμε να υπολογίσουμε τη **μέση τιμή** μιας ποσότητας του συστήματος (ενέργεια, εντροπία, ειδική θερμοχωρητικότητα, κ.α.) με την χρήση των βαρών από τη σχέση

$$\langle Q \rangle = \sum_\mu Q_\mu w_\mu(t) \quad (10)$$

,όπου  $Q_\mu$  είναι η τιμή που παίρνει η ποσότητα που εξετάζουμε στην κατάσταση  $\mu$ .

Για παράδειγμα αν το σύστημα μας βρίσκεται μονίμως σε μια κατάσταση  $\tau$  τότε η μέση τιμή της ποσότητας  $Q$ ,  $\langle Q \rangle$ , θα ισούται με την τιμή της ποσότητας στην κατάσταση  $\tau$ ,  $Q_\tau$ . Διαφορετικά αν υποθέσουμε ότι το σύστημα μας, μπορεί να βρίσκεται σε 3 διαφορετικές ισοπίθανες καταστάσεις, και σε καμία άλλη εκτός αυτών, τότε αντίστοιχα η μέση τιμή της ποσότητας που μας ενδιαφέρει θα ισούται με την μέση τιμή των ποσοτήτων  $Q$  σε αυτές τις 3 καταστάσεις. Ουσιαστικά μπορούμε να πούμε ότι καταγράφουμε την τιμή της ποσότητας  $Q$  για κάθε δευτερόλεπτο καθώς το σύστημα μας περνάει από τις διάφορες φάσεις  $\mu$  (με βάρος



$w_\mu$ ), για ένα μεγάλο χρονικό διάστημα και στο τέλος βρίσκουμε την μέση τιμή όλων αυτών των μετρήσεων υπολογίζοντας έτσι την μέση τιμή της ποσότητας  $Q$ . Σημειώνουμε ότι όσο περισσότερες είναι οι μετρήσεις που καταγράφουμε τόσο πιο κοντά είμαστε και στην πραγματική τιμή της ποσότητας  $Q$ .

Η **τυπική απόκλιση**  $\Delta Q$  για ένα τυπικό θερμοδυναμικό σύστημα είναι τέτοια ώστε

$$\frac{\Delta Q}{Q} \sim \frac{1}{\sqrt{N}} \quad (11)$$

,όπου  $N$  ο αριθμός των στοιχείων που χρησιμοποιούμε για να υπολογίσουμε την μέση τιμή του μεγέθους  $Q$ . Το ποσοστό αυτό είναι αμελητέο για συνήθη μακροσκοπικά συστήματα. Για τον λόγο αυτό όταν το σύστημα είναι μεγάλο οι διακυμάνσεις μπορούν να αγνοηθούν. Το όριο  $N \rightarrow \infty$  ονομάζεται **θερμοδυναμικό όριο** (*thermodynamic limit*) και το ενδιαφέρον μας συνήθως εστιάζεται στην συμπεριφορά του συστήματος στο όριο αυτό.

Το πρόβλημα που μπορεί να αντιμετωπίσουμε στην παραπάνω μεθοδολογία είναι κυρίως το ότι δεν γνωρίζουμε από ποιες φάσεις περνάει το σύστημα και με τι ρυθμό γίνονται αυτές οι αλλαγές. Έτσι για παράδειγμα μπορεί το σύστημα μας να αλλάζει κατάσταση μετά από αρκετή ώρα, με αποτέλεσμα αν εμείς πήραμε μετρήσεις για μικρό χρονικό διάστημα, να βλέπαμε μια σταθερή ποσότητα. Το ίδιο θα συνέβαινε και αν το σύστημα μας άλλαζε μεν καταστάσεις γρήγορα αλλά η διαφορά της ποσότητας που μετράμε είναι πολύ μικρή από κατάσταση σε κατάσταση και για να παρατηρήσουμε μια σημαντική διαφορά θα έπρεπε να περιμένουμε αρκετή ώρα. Τέλος μπορεί και τα βάρη  $w_\mu$  να αλλάζουν κατά την διάρκεια των μετρήσεων οπότε η σχέση (10) δεν ισχύει<sup>1</sup>. Στη εργασία αυτή θα προσπαθήσουμε όσο γίνεται καλύτερα να αποφύγουμε αυτές τις καταστάσεις, κάνοντας κάποιους επιπλέον ελέγχους για την συμπεριφορά του συστήματος.

Συνδυάζοντας τις σχέσεις (7),(8),(9) και (10) καταλήγουμε για την μέση τιμή της ποσότητας στην σχέση

$$\langle Q \rangle = \sum_{\mu} Q_{\mu} p_{\mu} = \frac{1}{Z} \sum_{\mu} Q_{\mu} e^{-\beta E_{\mu}} \quad (12)$$

<sup>1</sup> Αυτό το πρόβλημα το αντιμετωπίζουμε κυρίως σε συστήματα στα οποία δεν έχουμε θερμική ισορροπία (non-equilibrium systems)

Έτσι για παράδειγμα αν θέλουμε να υπολογίσουμε την **ενεργεία τους συστήματος** (εσωτερική ενέργεια) τότε η σχέση (12) γράφεται

$$U \equiv \langle E \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\mu} E_{\mu} e^{-\beta E_{\mu}} \quad (13)$$

Παρατηρούμε από τη σχέση (9) ότι η παραπάνω σχέση μπορεί να γραφεί σαν διαφορικό της συνάρτησης επιμερισμού

$$\begin{aligned} U \equiv \langle E \rangle &= \frac{1}{Z} \sum_{\mu} E_{\mu} e^{-\beta E_{\mu}} = -\frac{1}{Z} \sum_{\mu} \frac{\partial}{\partial \beta} e^{-\beta E_{\mu}} = -\frac{1}{Z} \frac{\partial}{\partial \beta} \sum_{\mu} e^{-\beta E_{\mu}} \Leftrightarrow \\ \Leftrightarrow U &= -\frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \beta} = -\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta} \end{aligned} \quad (14)$$

Γνωρίζουμε ότι για την **ειδική θερμότητα** (*specific heat*) ισχύει

$$C = \frac{\partial U}{\partial T} = \frac{\partial \beta}{\partial T} \frac{\partial U}{\partial \beta} = (-k\beta^2) \left( -\frac{\partial^2 \ln Z}{\partial \beta^2} \right) = k\beta^2 \frac{\partial^2 \ln Z}{\partial \beta^2} \quad (15)$$

Οπότε την υπολογίζουμε και αυτήν μέσω της συνάρτησης επιμερισμού, επιβεβαιώνοντας έτσι και τον σημαντικό ρόλο που παίζει η συνάρτηση επιμερισμού στις ιδιότητες του μακροσκοπικού συστήματος, όπως προαναφέραμε.

Αντίστοιχα γνωρίζοντας ότι η ειδική θερμότητα  $C$  συνδέεται άμεσα με την **εντροπία  $S$**  του συστήματος μέσω της σχέσης

$$C = T \frac{\partial S}{\partial T} = -\beta \frac{\partial S}{\partial \beta} \quad (16)$$

,εξισώνοντας τις δύο σχέσεις και ολοκληρώνοντας ως προς το  $\beta$ , καταλήγουμε στην σχέση για την εντροπία<sup>1</sup>

$$S = -k\beta \frac{\partial \ln Z}{\partial \beta} + k \ln Z \quad (17)$$

Τέλος μπορούμε να γράψουμε και την **ελεύθερη ενέργεια Helmholtz  $F$** , με όρους της συνάρτησης επιμερισμού. Έτσι από τις σχέσεις (14) και (17), έχουμε

$$F = U - TS = -kT \ln Z = -\frac{1}{\beta} \ln Z \quad (18)$$

<sup>1</sup>Η σταθερά ολοκλήρωσης είναι 0 εφόσον από τον τρίτο θερμοδυναμικό νόμο γνωρίζουμε ότι η εντροπία του συστήματος τείνει στο 0 όσο και η θερμοκρασία τείνει στο 0.

### 3.4 Διακυμάνσεις

Προχωρώντας την ανάλυση μας, μελετάμε τις διακυμάνσεις των παρατηρούμενων ποσοτήτων, οι οποίες όπως θα δούμε θα μας βοηθήσουν ώστε να προσδιορίσουμε και να υπολογίσουμε σημαντικές ποσότητες του συστήματος μας με ποιο γρήγορο και αποτελεσματικό τρόπο.

Κάθε παρατηρούμενη ποσότητα  $Q$  έχει στοχαστική συμπεριφορά με μια κατανομή πιθανότητας  $p(Q)$  που προκύπτει από την κατανομή Boltzman (σχέση 8). Μια τέτοια κατανομή χαρακτηρίζεται πλήρως από τη μέση τιμή  $\langle Q \rangle$  και τις **ροπές ανώτερης τάξης**, δηλαδή τις μέσες τιμές  $\langle (Q - \langle Q \rangle)^n \rangle$ ,  $n=1,2,3,\dots$ . Η πιο χρήσιμη ποσότητα από αυτές είναι η **διακύμανση** γύρω από τη μέση τιμή για  $n=2$

$$(\Delta Q)^2 \equiv \langle (Q - \langle Q \rangle)^2 \rangle = \langle Q^2 \rangle - \langle Q \rangle^2 \quad (19)$$

Η ποσότητα αυτή δίνει τις περισσότερες φορές ένα μέτρο απόκλισης της  $Q$  από τη μέση τιμή της  $\langle Q \rangle$ . Για την περίπτωση της ενέργειας (εσωτερικής)  $E$  έχουμε

$$(\Delta E)^2 \equiv \langle (E - \langle E \rangle)^2 \rangle = \langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2 \quad (20)$$

Το  $\langle E^2 \rangle$ , μπορούμε να το υπολογίσουμε από τα διαφορικά της συνάρτησης επιμερισμού με τον ίδιο τρόπο που υπολογίσαμε και το  $\langle E \rangle$

$$\langle E^2 \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\mu} E_{\mu}^2 e^{-\beta E_{\mu}} = \frac{1}{Z} \frac{\partial^2}{\partial \beta^2} \sum_{\mu} e^{-\beta E_{\mu}} = \frac{1}{Z} \frac{\partial^2 Z}{\partial \beta^2} \quad (21)$$

και από την

$$\langle E \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\mu} E_{\mu} e^{-\beta E_{\mu}} = -\frac{1}{Z} \sum_{\mu} \frac{\partial}{\partial \beta} e^{-\beta E_{\mu}} = -\frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \beta} \quad (14)$$

προκύπτει τελικά η διακύμανση της ενέργειας να υπολογίζεται από την σχέση

$$(\Delta E)^2 = \langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2 = \frac{1}{Z} \frac{\partial^2 Z}{\partial \beta^2} - \left( -\frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \beta} \right)^2 = \frac{\partial^2 \ln Z}{\partial \beta^2} \quad (22)$$

Παρατηρούμε από την σχέση (15) ότι η ειδική θερμότητα μπορεί να γραφτεί

$$C = k\beta^2 \frac{\partial^2 \ln Z}{\partial \beta^2} = k\beta^2 (\Delta E)^2 \quad (23)$$

Καταλήγουμε στο ενδιαφέρον συμπέρασμα ότι η ειδική θερμότητα ενός συστήματος (θερμοδυναμική ποσότητα) συνδέεται άμεσα με τις μικροσκοπικές στατιστικές διακυμάνσεις της ενέργειας του συστήματος. Αυτό είναι γνωστό σαν το **Θεώρημα γραμμικής απόκρισης** (linear response theorem) και ισχύει γενικά για οποιαδήποτε ποσότητα έχει γραμμική σύζευξη με το σύστημα.

Μια τέτοια ποσότητα για ένα μαγνητικό σύστημα που βρίσκεται μέσα σε ομογενές μαγνητικό πεδίο  $B$  είναι η μαγνήτιση  $M$ . Αν  $M_\mu$  είναι η μαγνήτιση του συστήματος στην κατάσταση  $\mu$  και υποθέσουμε ότι είναι στην διεύθυνση  $\vec{B}$  τότε η Χαμιλτονιανή του συστήματος γράφεται

$$H = E - BM \quad (24)$$

και η συνάρτηση επιμερισμού

$$Z = \sum_{\mu} e^{-\beta E_{\mu} + \beta B M_{\mu}} \quad (25)$$

Ο όρος **‘γραμμική σύζευξη’** οφείλεται στη γραμμική απόκριση του συστήματος στο μαγνητικό πεδίο δηλαδή στον όρο  $BM$  που είναι γραμμικός στη μαγνήτιση  $M$ . Οι ποσότητες  $B$  και  $M$  ονομάζονται συζυγείς (*conjugate*). Παρόμοια σχέση έχουν η όγκος/πίεση ( $V/P$ ) σε ένα αέριο ή το χημικό δυναμικό/αριθμός σωματιδίων ( $\mu/N$ ) στη μεγαλοκανονική συλλογή.

Εξαιτίας αυτής της γραμμικής σύζευξης παίρνουμε

$$\langle M \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\mu} E_{\mu} e^{-\beta E_{\mu} + \beta B M_{\mu}} = \frac{1}{\beta Z} \frac{\partial Z}{\partial B} = - \frac{\partial F}{\partial B} \quad (26)$$

Και αντίστοιχα για την διακύμανση της έχουμε

$$(\Delta M)^2 = \langle (M - \langle M \rangle)^2 \rangle = \langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2 \quad (27)$$

όπου

$$\langle M^2 \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\mu} M_{\mu}^2 e^{-\beta E_{\mu} + \beta B M_{\mu}} = \frac{1}{\beta^2 Z} \frac{\partial^2 Z}{\partial B^2} \quad (28)$$

Οπότε η σχέση (27) γράφεται

$$(\Delta M)^2 = \frac{1}{\beta^2} \left\{ \frac{1}{Z} \frac{\partial^2 Z}{\partial B^2} - \frac{1}{Z^2} \left( \frac{\partial Z}{\partial B} \right)^2 \right\} = \frac{1}{\beta^2} \frac{\partial^2 \ln Z}{\partial B^2} = \frac{1}{\beta} \frac{\partial \langle M \rangle}{\partial B} \quad (29)$$

Η **μαγνητική επιδεκτικότητα X** ορίζεται από τη σχέση

$$X = \frac{1}{N} \frac{\partial \langle M \rangle}{\partial B} = \frac{\beta}{N} \langle (M - \langle M \rangle)^2 \rangle = \frac{\beta}{N} (\Delta M)^2 \quad (30)$$

η οποία σχετίζεται άμεσα με τις διακυμάνσεις της μαγνήτισης.

Γενικά για ένα σύστημα στο οποίο έχουμε ένα μέγεθος  $Y$  και τη συζυγή του ποσότητα  $X$  μπορούμε να υπολογίσουμε την μέση τιμή της ποσότητας  $X$  μέσω της σχέσης

$$\langle X \rangle = \frac{1}{\beta Z} \sum_{\mu} X_{\mu} e^{-\beta E_{\mu}} = \frac{1}{\beta Z} \frac{\partial}{\partial Y} \sum_{\mu} e^{-\beta E_{\mu}} \quad (31)$$

,όπου το  $X_{\mu}$  είναι η τιμή της ποσότητας  $X$  στην κατάσταση  $\mu$ . Μπορούμε να γράψουμε την παραπάνω σχέση με όρους της ελεύθερης ενέργειας<sup>1</sup>

$$\langle X \rangle = \frac{1}{\beta} \frac{\partial \log Z}{\partial Y} = - \frac{\partial F}{\partial Y} \quad (32)$$

Μια ακόμη παραγωγή του  $\log Z$  ως προς το  $Y$ , μας παράγει ακόμα ένα παράγοντα  $X_{\mu}$  στο άθροισμα όλων των καταστάσεων. Έτσι γράφουμε

$$- \frac{1}{\beta} \frac{\partial^2 F}{\partial Y^2} = \frac{1}{\beta} \frac{\partial \langle X \rangle}{\partial Y} = \langle X^2 \rangle - \langle X \rangle^2 \quad (33)$$

Δηλαδή η παραπάνω σχέση μας λέει ότι μπορούμε να υπολογίσουμε τη διακύμανση της ποσότητας  $X$ , απλά παίρνοντας τη δεύτερη παράγωγο της ελεύθερης ενέργειας ως προς το κατάλληλο πεδίο. Το διαφορικό  $\partial \langle X \rangle / \partial Y$ , το οποίο μετράει την ισχύ της αντίδρασης του μεγέθους  $X$  στις διακυμάνσεις του  $Y$  το ονομάζουμε **επιδεκτικότητα** (*susceptibility*) του  $X$  ως προς  $Y$ .

### 3.5 Συναρτήσεις Συσχετισμού

Προχωρώντας ένα βήμα παραπέρα, ενδιαφερόμαστε να βρούμε τι σχέση υπάρχει ανάμεσα στα στοιχεία του συστήματος τα οποία βρίσκονται σε διαφορετικές θέσεις. Δηλαδή ψάχνουμε να βρούμε τι αποτέλεσμα θα έχει μια μεταβολή σε ένα σημείο (πλεγματική θέση) του συστήματος μας, σε μια άλλη θέση του συστήματος και το πόσο αλληλένδετα είναι τα στοιχεία αυτών των θέσεων.

<sup>1</sup> Αυτή είναι μια χρήσιμη τεχνική για υπολογίσουμε την μέση τιμή μιας ποσότητας (συζυγής), ακόμα και αν δεν έχουμε το αντίστοιχο πεδίο της στην Χαμιλτονιανή του συστήματος.

Υποθέτουμε ένα πεδίο το οποίο αλλάζει χωρικά και έχει τιμή  $Y_i$  στη θέση  $i$  του πλέγματος. Ορίζουμε τη συζυγής ποσότητα σε αυτό το πεδίο,  $x_i$ , και όπως γνωρίζουμε σχετίζονται με τον όρο  $-\sum_i x_i Y_i$  στην Χαμιλτονιανή του συστήματος. Από την σχέση (31) γράφουμε για την μέση τιμή της ποσότητας  $x_i$

$$\langle x_i \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\mu} x_i^{\mu} e^{-\beta E_{\mu}} = \frac{1}{\beta} \frac{\partial \log Z}{\partial Y_i} \quad (34)$$

,όπου  $x_i^{\mu}$  είναι η τιμή της ποσότητας  $x_i$  στην κατάσταση  $\mu$ . Στη συνέχεια ορίζουμε την γενικευμένη επιδεκτικότητα  $x_{ij}$  η οποία μετρά την αντίδραση της  $\langle x_i \rangle$  στις μεταβολές του πεδίου  $Y_j$  σε διαφορετικό σημείο του πλέγματος.

$$x_{ij} = \frac{\partial \langle x_i \rangle}{\partial Y_j} = \frac{1}{\beta} \frac{\partial^2 \log Z}{\partial Y_i \partial Y_j} \quad (35)$$

Αν κάνουμε την υπόθεση πάλι ότι  $Z = \sum_{\mu} e^{-\beta E_{\mu}}$  καταλήγουμε στην σχέση

$$\begin{aligned} x_{ij} &= \frac{\beta}{Z} \sum_{\mu} x_i^{\mu} x_j^{\mu} e^{-\beta E_{\mu}} - \beta \left[ \frac{1}{Z} \sum_{\mu} x_i^{\mu} e^{-\beta E_{\mu}} \right] \left[ \frac{1}{Z} \sum_{\nu} x_j^{\nu} e^{-\beta E_{\nu}} \right] = \\ &= \beta (\langle x_i x_j \rangle - \langle x_i \rangle \langle x_j \rangle) = \beta G_c^{(2)}(i, j) \end{aligned} \quad (36)$$

Η ποσότητα  $G_c^{(2)}(i, j)$  ονομάζεται **συνάρτηση συσχετισμού** (*correlation function*) δύο (2) σημείων του  $x$  μεταξύ των σημείων  $i$  και  $j$ . Όπως φανερώνει και το όνομα της, είναι μια σχέση η οποία μετράει την συσχέτιση της μεταβλητής  $x$  στα δύο σημεία, και συγκεκριμένα παίρνει θετική τιμή αν η τιμές της ποσότητας  $x$  στα δύο σημεία διακυμαίνονται με τον ίδιο τρόπο, και αρνητική αν διακυμαίνονται αντίθετα. Έτσι η παραπάνω συνάρτηση έχει μεγάλη θετική τιμή όταν οι τιμές  $x_i, x_j$  είναι ισχυρά συσχετισμένες, δηλαδή μεταβάλλονται μαζί' στα τυχαία δείγματα που παίρνουμε από το σύστημα, ενώ αντίθετα είναι σχεδόν μηδέν όταν η τιμή της  $x_i$  εξαρτάται ελάχιστα από την  $x_j$  (ασυσχέτιστες τυχαίες μεταβλητές). Τέλος αν οι  $x_i$  και  $x_j$  είναι ισχυρά αντι-συσχετισμένες, η συνάρτηση συσχετισμού είναι αρνητική.

Η συνάρτηση συσχετισμού  $G_c^{(2)}(i, j)$  παίρνει τη μέγιστη τιμή της για  $i=j$  και στη συνέχεια πέφτει κατά απόλυτη τιμή. Για ένα σύνηθες σύστημα ισχύει

$$G_c^{(2)}(i, j) \sim e^{-\frac{|x_{ij}|}{\xi}} \quad (37)$$

,όπου  $|x_{ij}|$  η απόσταση των σημείων  $i, j$ . Ενώ  $\xi$  ονομάζεται το **μήκος συσχετισμού** (*correlation length*) και είναι ένα χαρακτηριστικό μήκος για το σύστημα που δίνει ένα μέτρο της απόστασης στην οποία υπάρχει ουσιαστικός συσχετισμός μεταξύ των τιμών της ποσότητας σε δύο πλεγματικές θέσεις. Εξαρτάται από τις παραμέτρους που ορίζουν το σύστημα  $\xi = \xi(\beta, B, N, \dots)$ . Το μήκος συσχετισμού ορίζει μια κλίμακα μήκους που προκύπτει δυναμικά και όχι από τον ορισμό του συστήματος όπως λ.χ. το μέγεθος  $L$  του συστήματος ή την απόσταση  $a$  μεταξύ δύο πλεγματικών σημείων (πλεγματική σταθερά). Συνήθως το  $\xi$  είναι της τάξης μεγέθους της πλεγματικής σταθεράς  $a$  και το σύστημα δεν παρουσιάζει συσχετισμούς σε μακροσκοπικές κλίμακες (δηλ. τη τάξης του  $L$ ).

Πολύ ενδιαφέρουσα φυσική προκύπτει όταν ρυθμίσουμε με λεπτότητα τις παραμέτρους από τις οποίες εξαρτάται το  $\xi$  έτσι ώστε  $\xi \rightarrow \infty$  (στη πράξη  $\xi \approx L$ ). Αυτό γίνεται στην περιοχή μιας συνεχούς μετάβασης φάσης. Στην περίπτωση αυτή η εκθετική συμπεριφορά χάνεται και έχουμε πολύ βραδύτερη πτώση της  $G_c^{(2)}(i, j)$ , συνήθως

$$G_c^{(2)}(i, j) \sim \frac{1}{|x_{ij}|^\eta} \quad (38)$$

Καθώς πλησιάζουμε την περίπτωση αυτή, συμβαίνει οι συσχετισμοί να εκτελούνται σε αποστάσεις  $|x_{ij}| \gg a$ . Τότε το σύστημα παύει να 'βλέπει' τις λεπτομέρειες του πλέγματος και συμπεριφέρεται με πολύ καλή προσέγγιση σαν το πλέγμα να ήταν ένας συνεχής χώρος. Το όριο αυτό αναφέρεται ως το **'συνεχές όριο'** (*continuum limit*) μιας θεωρίας που ορίζεται σε ένα πλέγμα. Εξαιτίας του ότι οι λεπτομέρειες του πλέγματος γίνονται ασήμαντες στο όριο αυτό, θεωρίες που ορίζονται μικροσκοπικά με διαφορετικό τρόπο (λ.χ. μια σε τετραγωνικό πλέγμα και μια σε εξαγωνικό) έχουν το ίδιο συνεχές όριο. Το φαινόμενο αυτό ονομάζεται **παγκοσμιότητα** (*universality*) και παίζει κεντρικό ρόλο στη μελέτη στατιστικών συστημάτων καθώς και στην κβαντική θεωρία πεδίου. Πειραματικά δεδομένα δείχνουν ότι πολλές θερμοδυναμικές ιδιότητες των συστημάτων μπορούν να περιγραφούν από απλές εκθετικές σχέσεις στην γειτονιά της κρίσιμης θερμοκρασίας, και μάλιστα χωρίς να παίζουν ρόλο οι τοπικές ιδιότητες των συστημάτων. Έτσι τα συστήματα που έχουν τους ίδιους εκθέτες στις σχέσεις των θερμοδυναμικών ιδιοτήτων τους, λέμε ότι ανήκουν στην ίδια κλάση παγκοσμιότητας. Για τα χαρακτηριστικά μεγέθη που μελετάμε ισχύουν οι σχέσεις (Stanley, 1971, Fisher, 1974):

$$M \propto |t|^\beta \quad (39)$$

$$\chi \propto |t|^{-\gamma} \quad (40)$$

$$C \propto |t|^{-a} \quad (41)$$

$$\xi \propto |t|^{-\nu} \quad (42)$$

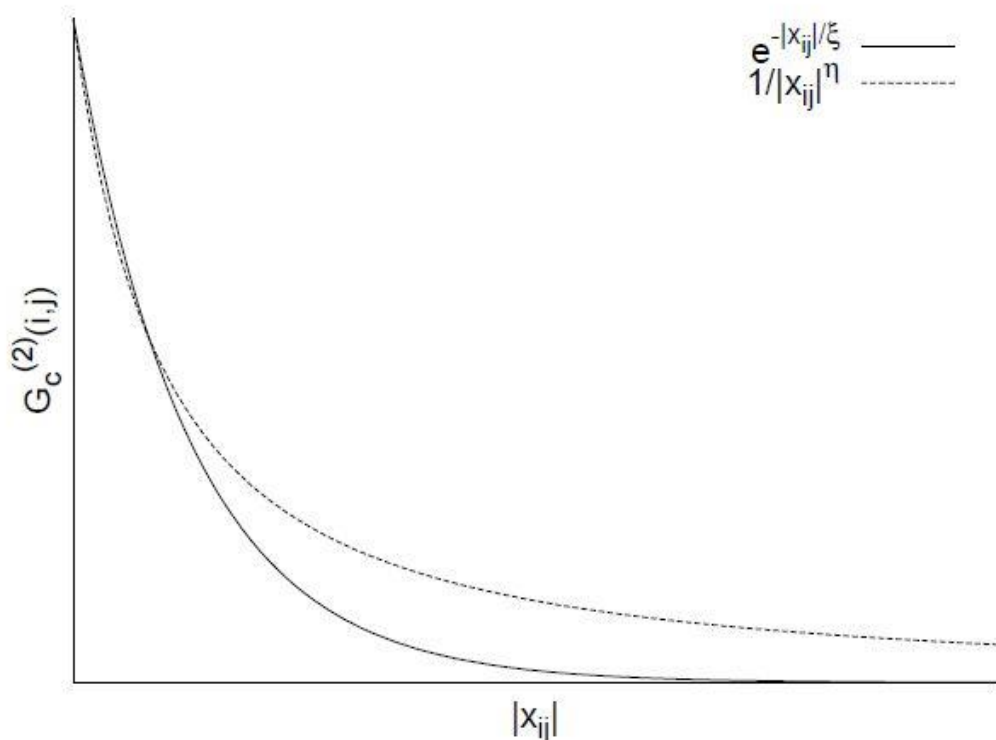
Για  $t = \frac{T-T_c}{T_c} = \frac{\beta_c - \beta}{\beta_c}$  και θερμοκρασίες κοντά στην κρίσιμη θερμοκρασία. Οι εκθέτες που παρουσιάζονται στις παραπάνω σχέσεις ονομάζονται **κρίσιμοι εκθέτες** ή εκθέτες βάρθρωσης (*critical* ή *scaling exponents*) και οι τιμές τους παρουσιάζουν την ιδιότητα της παγκοσμιότητας (Fisher, 1974).

Παρόλο ότι δεν χρησιμοποιούνται συχνά στις εφαρμογές, υπάρχουν και συναρτήσεις συσχετισμού μεγαλύτερης τάξης, οι οποίες εξετάζουν τις συσχετίσεις των ποσοτήτων που μελετάμε σε περισσότερες από 2 πλεγματικές θέσεις. Έτσι έχουμε τις σχέσεις:

$$G_c^{(3)}(i, j, k) = \frac{1}{\beta^3} \frac{\partial^3 \log Z}{\partial Y_i \partial Y_j \partial Y_k} \quad (43)$$

$$G_c^{(4)}(i, j, k, l) = \frac{1}{\beta^4} \frac{\partial^4 \log Z}{\partial Y_i \partial Y_j \partial Y_k \partial Y_l} \quad (44)$$

για 3 και 4 πλεγματικές θέσεις αντίστοιχα. Επίσης μπορούμε να έχουμε συναρτήσεις συσχετισμού οι οποίες εξαρτώνται και από τον χρόνο.



Εικόνα 7. Η συνάρτηση συσχετισμού  $G_c^{(2)}(i, j)$  για  $\xi < \infty$  και  $\xi \rightarrow \infty$ . [1]



## 4. Προσομοιώσεις Monte Carlo (MC)

Η βασική ιδέα των προσομοιώσεων *Monte Carlo*, είναι η δημιουργία ενός συστήματος με τυχαίες διακυμάνσεις, στο οποίο οι καταστάσεις του να αντιπροσωπεύουν και να προσομοιώνουν όσο καλύτερα και αποδοτικότερα γίνεται το πραγματικό σύστημα.

Στο θέμα μας λοιπόν, θα χρησιμοποιήσουμε τη μέθοδο *Monte Carlo* για να προσομοιώσουμε τις τυχαίες θερμικές διακυμάνσεις και κατά συνέπεια τις ιδιότητες του συστήματος, καθώς περνά από μια κατάσταση σε άλλη λόγω της θερμικής ενέργειας (εσωτερικής ενέργειας) που παίρνει/χάνει. Έτσι από την μέση τιμή αυτών των καταστάσεων υπολογίζουμε την μέση τιμή της ποσότητας που μας ενδιαφέρει.

Το δυσκολότερο κομμάτι των προσομοιώσεων *Monte Carlo*, είναι να κάνουμε το σύστημα να περνά από όλες τις πιθανές φάσεις γρήγορα, πράγμα το οποίο είναι τις περισσότερες φορές αδύνατο. Παρ' όλα αυτά με διάφορες μεθόδους όπως θα δούμε, μπορούμε να βγάλουμε τα συμπεράσματα-αποτελέσματα που μας ενδιαφέρουν με την χρήση δειγμάτων πολύ μικρότερων του συνολικού χώρου των καταστάσεων.

### 4.1 Δειγματοληψία με κριτήριο σημαντικότητας

Η μέθοδος που θα χρησιμοποιήσουμε είναι αντί να προσπαθούμε να περάσει το σύστημα μας (στην προσομοίωση), από όλες τις καταστάσεις (με ίση πιθανότητα), να επιλέγουμε τις καταστάσεις οι οποίες θα συνεισφέρουν σημαντικά στην μεταβολή της ως προς εξέτασης ποσότητας με πιθανότητες  $p_\mu$ . Αυτή η μέθοδος ονομάζεται **δειγματοληψία με κριτήριο σημαντικότητας** (*Importance Sampling*) και είναι ο τρόπος ο οποίος χρησιμοποιείται για προσομοιώσεις στατιστικών συστημάτων στην κανονική συλλογή. Την ίδια επιλογή κάνουν και τα περισσότερα πραγματικά συστήματα, δηλαδή οι καταστάσεις τους επιλέγονται σύμφωνα με την κατανομή Boltzmann (αναλογικοί υπολογιστές).

### 4.2 Διαδικασία Markov

Συνεχίζοντας την ανάλυση μας, προκύπτει ακόμα ένα πρόβλημα, το οποίο είναι ότι αν επιλέξουμε μία τυχαία κατάσταση  $\nu$  για την μετάβαση από την κατάσταση  $\mu$ , τότε το πιθανότερο είναι να μην πραγματοποιηθεί η μετάβαση λόγω της μεγάλης διαφοράς στην ενέργεια των 2 καταστάσεων η οποία δεν θα επέτρεπε αυτήν την μετάβαση. Το συγκεκριμένο πρόβλημα λύνεται, με την χρήση μιας **διαδικασίας Markov**, η οποία δεδομένου της κατάστασης  $\mu$  του συστήματος,

παράγει με στοχαστικό τρόπο μια νέα κατάσταση  $\nu$ . Έτσι δημιουργείται μια αλυσίδα καταστάσεων

$$\mu_0 \rightarrow \mu_1 \rightarrow \mu_2 \rightarrow \dots \rightarrow \mu_M \quad (45)$$

η οποία θα αποτελέσει το ζητούμενο δείγμα  $\{\mu_i\} \equiv \{\mu_0, \mu_1, \mu_2, \dots, \mu_M\}$ . Φανταζόμαστε ότι η επιλογή της κατάστασης  $\mu_i$  γίνεται στο 'χρόνο'  $i$ .

Η πιθανότητα μετάβασης  $P(\mu \rightarrow \nu)$  (*transition probability*) στην κατάσταση  $\nu$  όταν το σύστημα είναι στην κατάσταση  $\mu$  πρέπει να ικανοποιεί τις παρακάτω συνθήκες:

- 1) Είναι ανεξάρτητη του 'χρόνου'.
- 2) Εξαρτάται μόνο από τις καταστάσεις  $\mu, \nu$  και όχι από τη διαδρομή που κάναμε μέχρι την κατάσταση  $\mu$ .
- 3) Ικανοποιούν τη σχέση

$$\sum_{\nu} P(\mu \rightarrow \nu) = 1 \quad (46)$$

Προσοχή, συνήθως  $P(\mu \rightarrow \mu) > 0$  και το σύστημα έχει πιθανότητα να παραμείνει στην ίδια κατάσταση.

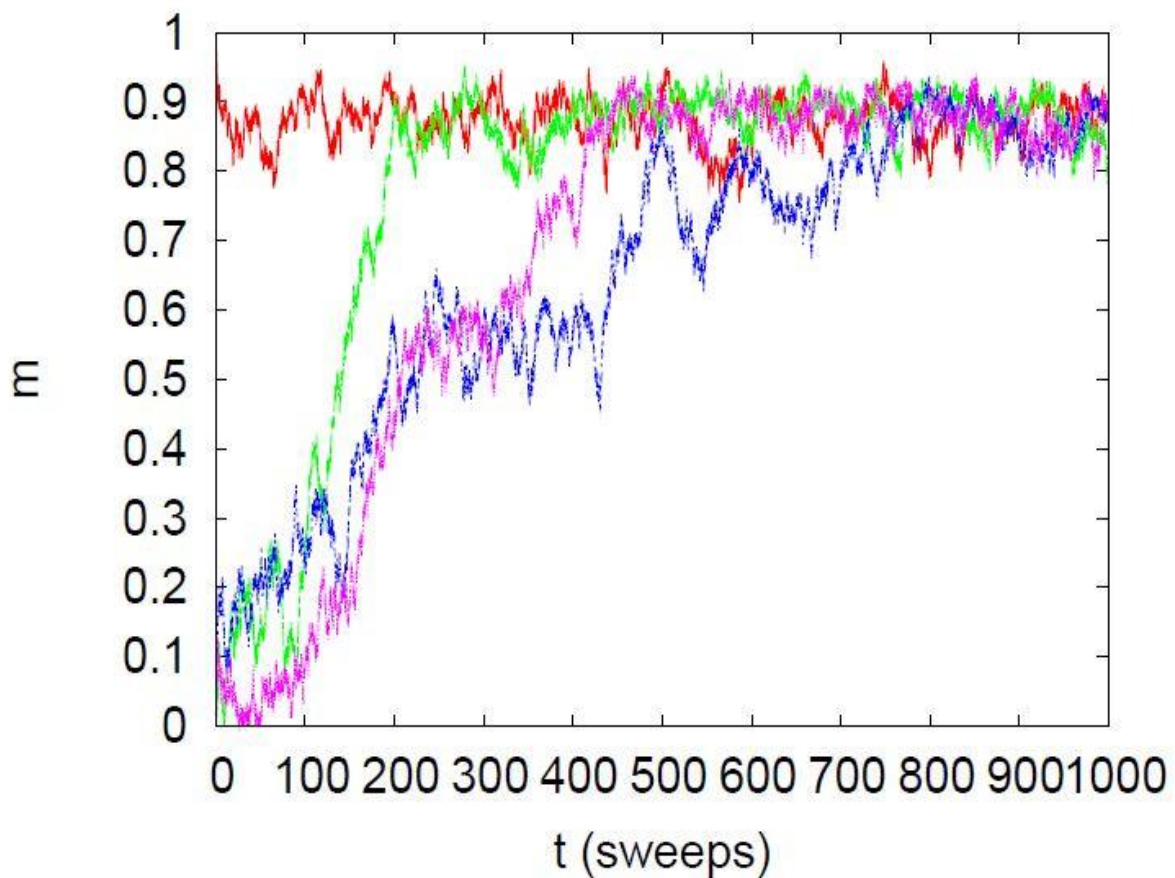
- 4) Για  $t \rightarrow \infty$  το δείγμα  $\{\mu_i\}$  ακολουθεί την κατανομή  $P_{\mu}$ .

Η προσομοίωση *Monte Carlo* με τον τρόπο αυτό γίνεται επιλέγοντας κατάλληλα μια αρχική κατάσταση  $\mu_0$  για το σύστημα και εφαρμόζοντας την παραπάνω διαδικασία. Η μεγαλύτερη προσπάθεια επικεντρώνεται στο προσδιορισμό των πιθανοτήτων μετάβασης  $P(\mu \rightarrow \nu)$  έτσι ώστε η σύγκλιση 4) να επιτυγχάνεται γρήγορα.

### 4.3 **Thermalization Time**

Σημαντική είναι και η επιλογή της αρχικής κατάστασης  $\mu_0$ . Αν αυτή δεν είναι μια τυπική κατάσταση του τελικού δείγματος θα πρέπει να περάσει κάποιος χρόνος μέχρι το σύστημα να βρεθεί σε 'κατάσταση θερμικής ισορροπίας' όπου πια η διαδικασία Markov δειγματοληπτεί μέσα στη σωστή κατανομή. Ο χρόνος που απαιτείται (***thermalization time***) μπορεί να γίνει σημαντικό μέρος της προσπάθειας μας αν γίνει λάθος επιλογή της  $\mu_0$  η/και των  $P(\mu \rightarrow \nu)$ . Αυτό συμβαίνει γιατί αν το σύστημα μας βρίσκεται σε θερμική ισορροπία με μια δεδομένη θερμοκρασίας δεξαμενή θερμότητας, τότε βρίσκεται κυρίως σε καταστάσεις με ενέργεια που πολύ λίγο διαφέρει από μια μέση τιμή, ενώ καταστάσεις με ενέργεια που διαφέρουν κατά πολύ τις επισκέπτεται πολύ σπάνια.

Έτσι αν η αρχική κατάσταση που θα επιλέξουμε δεν είναι μια τυπική κατάσταση θα πρέπει το σύστημα μας να κάνει ένα τυχαίο περίπατο στο χώρο των καταστάσεων μέχρι να 'βρει' την περιοχή των καταστάσεων εκείνη που αντιστοιχεί στη θερμοκρασία που έχουμε επιλέξει. Αυτή είναι η διαδικασία της εύρεσης της κατάστασης θερμικής ισορροπίας (*thermalization*). Η συνήθης τακτική επιλογής της αρχικής κατάστασης είναι να επιλέξουμε μία από τις τρεις αρχικές καταστάσεις: α) παγωμένη, β) καυτή, γ) σε μια άλλη – πιθανώς γειτονική – θερμοκρασία από μια προηγούμενη προσομοίωση. Φυσικά είναι κατανοητό πως αν επιλέξουμε την αρχική κατάσταση να είναι λ.χ. καυτή για να προσομοιώσουμε το σύστημα σε χαμηλή θερμοκρασία, τότε θα αργήσει περισσότερο το σύστημα μας να βρεθεί σε θερμική ισορροπία από ότι αν επιλέγαμε παγωμένη αρχική κατάσταση (ή σε μια κοντινή κατάσταση).



**Εικόνα 8.** Η μαγνήτιση ανά πλεγματική θέση για το πρότυπο *Ising* για διαφορετικές αρχικές συνθήκες. Φαίνεται η διαδικασία εύρεσης θερμικής ισορροπίας για μια αρχική κατάσταση παγωμένη και τρεις αρχικές καταστάσεις καυτές. Επαναλαμβάνοντας τη διαδικασία αυτή για την δεύτερη περίπτωση φαίνεται πως για να είμαστε σίγουροι πως το σύστημα είναι σε κατάσταση θερμικής ισορροπίας χρειαζόμαστε περισσότερα από ~1000 sweeps. (με  $L=40$ ,  $\beta=0.48$ ) [1]

#### 4.4 Συνθήκης της Εργοδικότητας

Η διαδικασία που θα ακολουθήσουμε πρέπει να ικανοποιεί κάποιες συνθήκες - κριτήρια, η σημαντικότερη από αυτές είναι η **συνθήκης της εργοδικότητας** (*ergodicity*). Δηλαδή από οποιαδήποτε κατάσταση και αν ξεκινήσουμε, τότε μετά από ένα πεπερασμένο αριθμό βημάτων να μπορούμε να καταλήξουμε σε κάθε άλλη δυνατή κατάσταση  $\nu$ , η αλλιώς κάθε κατάσταση  $\nu$  να είναι προσβάσιμη από

οποιαδήποτε άλλη κατάσταση  $\mu$ . Στην πράξη υπάρχουν αλγόριθμοι οι οποίοι εσκεμμένα παραβιάζουν το κριτήριο της εργοδικότητας, και αυτό γίνεται γιατί οι καταστάσεις που δεν είναι προσβάσιμες αποτελούν σύνολο 'μέτρου μηδέν' στο χώρο των καταστάσεων και έτσι η παραβίαση δεν επηρεάζει τα αποτελέσματα μας. Αντίθετα υπάρχουν περιπτώσεις όπου η συνθήκη δεν παραβιάζεται αλλά η πιθανότητα να φτάσω σε κάποιες περιοχές του χώρου των καταστάσεων είναι στην πράξη απαγορευτικά μικρή (π.χ. σε μια μετάβαση φάσης πρώτης τάξης). Τέλος το κριτήριο της εργοδικότητας μας επιτρέπει να μηδενίσουμε όλες τις πιθανότητες μετάβασης της διαδικασίας Markov, κρατώντας όμως τουλάχιστον έναν δρόμο για την μετάβαση από μια οποιαδήποτε κατάσταση  $\mu$  σε μια οποιαδήποτε άλλη κατάσταση  $\nu$ .

#### 4.5 Συνθήκη Λεπτομερούς Ισοζύγησης

Το δεύτερο κριτήριο που πρέπει να ικανοποιείται σε μια διαδικασία Markov είναι να βεβαιωνόμαστε ότι μετά από πεπερασμένο χρόνο θα φτάσουμε σε μια κατάσταση η οποία είναι η κατάσταση ισορροπίας και ότι φτιάξαμε μια κατανομή Boltzmann και όχι μια οποιαδήποτε κατανομή. Αυτή η συνθήκη ονομάζεται **συνθήκη λεπτομερούς ισοζύγησης** (*detailed balance condition*).

Όπως είδαμε και πιο πριν, σχέση (6), για να πούμε ότι το σύστημα μας βρίσκεται σε κατάσταση θερμικής ισορροπίας θα πρέπει ο ρυθμός με τον οποίο το σύστημα μεταβαίνει από την κατάσταση  $\mu$  σε κάποια άλλη  $\nu$ , να είναι ο ίδιος με το ρυθμό με τον οποίο το σύστημα μεταβαίνει στην κατάσταση  $\mu$  από κάποια άλλη.

$$\sum_{\nu} p_{\mu} P(\mu \rightarrow \nu) = \sum_{\mu} p_{\nu} P(\nu \rightarrow \mu) \quad (47)$$

Από την σχέση (46) έχουμε:

$$p_{\mu} = \sum_{\mu} p_{\nu} P(\nu \rightarrow \mu) \quad (48)$$

Η παραπάνω συνθήκη είναι αναγκαία αλλά δεν είναι ικανή λόγω του ότι μπορεί να μας οδηγήσει σε μια κατάσταση στην οποία η διαδικασία Markov κάνει ατέρμονους κύκλους (*limit cycles*) γύρω από μια κατάσταση με αποτέλεσμα να είμαστε φαινομενικά σε μια κατάσταση ισορροπίας (*dynamic equilibrium*) [5]. Ικανή, αλλά όχι αναγκαία συνθήκη είναι η συνθήκη λεπτομερούς ισοζύγησης η οποία όταν ικανοποιείται από τις πιθανότητες μετάβασης τότε είναι δυνατόν να δείξει κανείς ότι το σύστημα αργά ή γρήγορα θα φθάσει σε κατάσταση θερμικής ισορροπίας.

$$p_{\mu}P(\mu \rightarrow \nu) = p_{\nu}P(\nu \rightarrow \mu) \quad (49)$$

Αθροίζοντας και τα δύο μέλη της (49) προκύπτει η συνθήκη ισορροπίας (47).

Για την κατανομή της κανονικής συλλογής όπως έχουμε ήδη πει οι πιθανότητες είναι  $p_{\mu} = \frac{1}{Z} e^{-\beta E_{\mu}}$  και άρα η συνθήκη λεπτομερούς ισοζύγησης γράφεται:

$$\frac{P(\mu \rightarrow \nu)}{P(\nu \rightarrow \mu)} = \frac{p_{\nu}}{p_{\mu}} = e^{-\beta(E_{\nu}-E_{\mu})} \quad (50)$$

Συνοψίζοντας καταλήγουμε ότι σύμφωνα με τις σχέσεις (46) και (50) συν το κριτήριο της εργοδικότητας οι καταστάσεις θερμικής ισορροπίας θα ακολουθούν την κατανομή Boltzmann.

Ο αλγόριθμος μας λοιπόν θα υλοποιείται αρχικά διαλέγοντας μια κατάλληλη επιλογή των πιθανοτήτων μετάβασης  $P(\mu \rightarrow \nu)$  με τις οποίες θα εκτελείται η διαδικασία Markov, και αφού περιμένουμε ώσπου το σύστημα μας φθάσει στην κατάσταση θερμικής ισορροπίας (*thermalization time*), συλλέγουμε τα δεδομένα από τις παρατηρούμενες ποσότητες και υπολογίζουμε την εκτίμησή τους.

Σημειώνουμε ότι η σχέση (50) μας αφήνει αρκετές επιλογές για τις πιθανότητες μετάβασης, και το ποια θα επιλέξουμε εξαρτάται από την αποδοτικότητα τους σε ένα συγκεκριμένο πρόβλημα. Για ακόμη μεγαλύτερη αποδοτικότητα των πιθανοτήτων μετάβασης, τις σπάμε σε μέρη, έτσι ώστε:

$$P(\mu \rightarrow \nu) = g(\mu \rightarrow \nu)A(\mu \rightarrow \nu) \quad (51)$$

τα οποία αντιστοιχούν σε διακριτά βήματα στον αλγόριθμο.

Η ποσότητα  $g(\mu \rightarrow \nu)$  ονομάζεται **πιθανότητα επιλογής** (*selection probability*), η οποία είναι η πιθανότητα η οποία μιας δεδομένης κατάστασης  $\mu$  θα παράγει μια νέα κατάσταση  $\nu$ . Το πρώτο βήμα δηλαδή είναι να επιλέξουμε μια κατάσταση  $\nu \neq \mu$  με πιθανότητα  $g(\mu \rightarrow \nu)$ .

Η ποσότητα  $A(\mu \rightarrow \nu)$  ονομάζεται **λόγος αποδοχής** (ή πιθανότητα αποδοχής) (*acceptance ratio*) και μας λέει αν θα αποδεχτούμε την αλλαγή κατάστασης  $\nu$  την οποία μας παράγει ο αλγόριθμος δεδομένου της αρχικής κατάστασης  $\mu$ , ή αν θα παραμείνουμε στην ίδια κατάσταση  $\mu$ . Το δεύτερο βήμα είναι λοιπόν να επιλέξουμε με πιθανότητα  $A(\mu \rightarrow \nu)$  αν το σύστημα μας θα μεταβεί στην κατάσταση  $\nu$ . Είμαστε ελεύθεροι να επιλέξουμε του ρυθμούς αποδοχής μεταξύ των

τιμών  $0$  έως  $1$ , βέβαια η τιμή  $0$  δεν θα είναι καθόλου χρήσιμη, αφού το σύστημα μας θα παραμένει συνεχώς στην ίδια κατάσταση. Η επιλογή για τους λόγους αποδοχής μας δίνει την δυνατότητα να επιλέξουμε ότι τιμή θέλουμε για τις πιθανότητες επιλογής  $g(\mu \rightarrow \nu)$ .

Ο στόχος μας επικεντρώνεται ώστε να επιλέξουμε τις πιθανότητες επιλογής, που να δίνουν τους μέγιστους δυνατούς λόγους αποδοχής για καταστάσεις  $\nu$  ασυσχετίστες κατά το μέγιστο δυνατόν από την κατάσταση  $\mu$ . Έτσι θα αποφύγουμε αλγόριθμους οι οποίοι παραμένουν για πολύ ώρα σε μια συγκεκριμένη κατάσταση κάνοντας τους μη αποδοτικούς. Η ιδανική περίπτωση είναι ένας αλγόριθμος ο οποίος θα επιλέγει καταστάσεις με τις ακριβείς πιθανότητες επιλογής και οι λόγοι αποδοχής θα είναι πάντα μονάδες (1). Ένας καλός αλγόριθμος έχει τους λόγους αποδοχής κοντά στην μονάδα.

## 5. Ο αλγόριθμος Metropolis

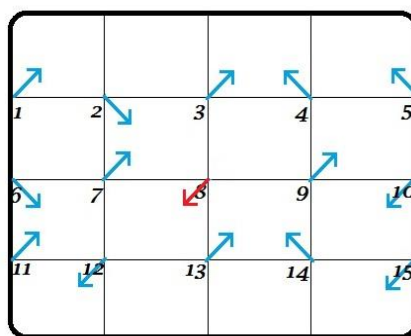
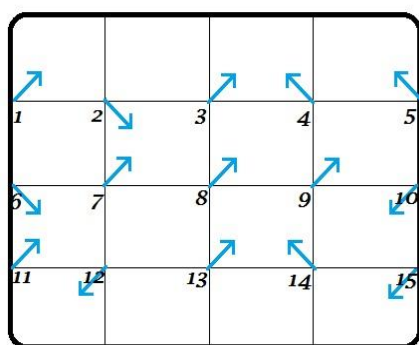
Ο αλγόριθμος *Metropolis*<sup>1</sup> είναι ο πιο διάσημος και πολυχρησιμοποιημένος αλγόριθμος στις εφαρμογές με μεθόδους *Monte Carlo*, και αυτό γιατί είναι αρκετά απλός στην λειτουργία του και αξιόπιστος. Το συγκριτικό του μειονέκτημα σε σχέση με άλλους αλγόριθμους όπως ο Wolff, είναι ότι είναι σχετικά αργός σε μεγάλα συστήματα και με πολλούς βαθμούς ελευθερίας.

Η λογική του αλγορίθμου *Metropolis* είναι αυτή που αναλύσαμε και παραπάνω, δηλαδή διαλέγουμε ένα σει από πιθανότητες επιλογής  $g(\mu \rightarrow \nu)$ , μία για κάθε πιθανή μετάβαση από την κατάσταση  $\mu$  στην κατάσταση  $\nu$ , και στη συνέχεια διαλέγουμε ένα σει από τις πιθανότητες αποδοχής (λόγους αποδοχής)  $A(\mu \rightarrow \nu)$ , έτσι ώστε να ικανοποιείται η συνθήκη λεπτομερούς ισοζύγησης, σχέση (50). Ο αλγόριθμος δουλεύει με το να διαλέγει επανειλημμένα καινούριες καταστάσεις  $\nu$ , και στην συνέχεια να αποδέχεται ή να απορρίπτει την μετάβαση σε αυτήν την κατάσταση, τυχαία, σύμφωνα με τους λόγους αποδοχής. Αν η νέα κατάσταση γίνει αποδεκτή τότε το σύστημα μεταβαίνει στην νέα κατάσταση και ξαναρχίζει η διαδικασία από την αρχή με την νέα αρχική κατάσταση  $\nu$ . Ενώ αν δεν γίνει αποδεκτή η νέα κατάσταση, τότε το σύστημα παραμένει στην ίδια κατάσταση  $\mu$  και η διαδικασία επαναλαμβάνεται για μια καινούρια νέα κατάσταση  $\nu$ . Βέβαια προσοχή θέλει στις πιθανότητες επιλογής  $g(\mu \rightarrow \nu)$ , ώστε να ικανοποιείται και το κριτήριο της εργοδικότητας (*ergodicity*).

---

<sup>1</sup> Παρουσιάστηκε από τον Nicolas Metropolis και τους συνεργάτες του το 1953.

Συνήθως μια καινούρια κατάσταση  $\nu$  του συστήματος δημιουργείται με την αλλαγή ενός  $spin$  του συστήματος, αλλά η τυχαία αλλαγή ενός  $spin$ , συνήθως καταλήγει στην μικρή μεταβολή της συνολικής ενέργειας του συστήματος με αποτέλεσμα το σύστημα να αμφιταλαντεύεται σε μια μικρή περιοχή των ενεργειών, και έτσι να μην μπορούμε να περάσουμε σε όλες τις καταστάσεις που έχουν ενδιαφέρον αρκετά γρήγορα. Αντιμετωπίζοντας αυτό το πρόβλημα φτιάξαμε αλγόριθμους οι οποίοι επιλέγουν συγκεκριμένα  $spins$  για να μεταβάλουν, ώστε να αλλάξει δραματικά η ενέργεια του συστήματος και να προχωρήσει το σύστημα σε μία διαφορετική κατάσταση. Αυτή η μέθοδος ονομάζεται **single-spin-flip dynamics**.



Παρατηρούμε στα διπλανά πλέγματα, ότι μία αντιστροφή του  $spin$  στην πλεγματική θέση 8 θα είχε σαν αποτέλεσμα την αύξηση της ενέργειας του

Εικόνα 9. Single-Spin-Flip dynamics

Στον αλγόριθμο *Metropolis*, οι πιθανότητες επιλογής  $g(\mu \rightarrow \nu)$ , για την κάθε πιθανή επιλογή μιας κατάστασης  $\nu$ , επιλέγεται να είναι με την ίδια πιθανότητα για όλες, ενώ για όλες τις άλλες καταστάσεις, οι πιθανότητες επιλογής ορίζονται ως μηδενικές. Για παράδειγμα αν θεωρήσουμε για το σύστημα μας ότι έχουμε  $N$   $spins$ , τότε έχουμε  $N$  διαφορετικές καταστάσεις  $\nu$  τις οποίες μπορούμε να φτάσουμε με την αλλαγή ενός μόνο  $spin$ . Έτσι έχουμε για τις πιθανότητες επιλογής τις μη-μηδενικές πιθανότητες:

$$g(\mu \rightarrow \nu) = \frac{1}{N} \quad (52)$$

Με αυτές τις πιθανότητες επιλογής, η συνθήκη λεπτομερούς ισοζύγησης παίρνει την μορφή:

$$\frac{P(\mu \rightarrow \nu)}{P(\nu \rightarrow \mu)} = \frac{g(\mu \rightarrow \nu)A(\mu \rightarrow \nu)}{g(\nu \rightarrow \mu)A(\nu \rightarrow \mu)} = \frac{A(\mu \rightarrow \nu)}{A(\nu \rightarrow \mu)} = e^{-\beta(E_\nu - E_\mu)} \quad (53)$$

Τελικά το μόνο που μας απομένει είναι να επιλέξουμε τους λόγους αποδοχής  $A$ , έτσι ώστε να ικανοποιείται η σχέση (53). Μια καλή επιλογή θα ήταν η:

$$A(\mu \rightarrow \nu) = A_0 e^{-\frac{1}{2}\beta(E_\nu - E_\mu)} \quad (54)$$

,η σταθερά  $A_0$  μπορεί να πάρει ότι τιμή θέλουμε αφού απλοποιείται στην σχέση (53), αρκεί να μην παίρνει ο λόγος αποδοχής τιμή μεγαλύτερη από τη μονάδα. Όμως η μεγαλύτερη διαφορά ενεργειών  $E_\nu - E_\mu$  που μπορεί να έχουμε ανάμεσα σε 2 καταστάσεις είναι  $2zJ$ , όπου το  $z$  είναι ο αριθμός των γειτονικών *spins* με τα οποία αλληλοεπιδρά το κάθε *spin* (*lattice coordination number*). Αυτό σημαίνει ότι η μεγαλύτερη τιμή του  $e^{-\frac{1}{2}\beta(E_\nu - E_\mu)}$  είναι  $e^{\beta z J}$ .

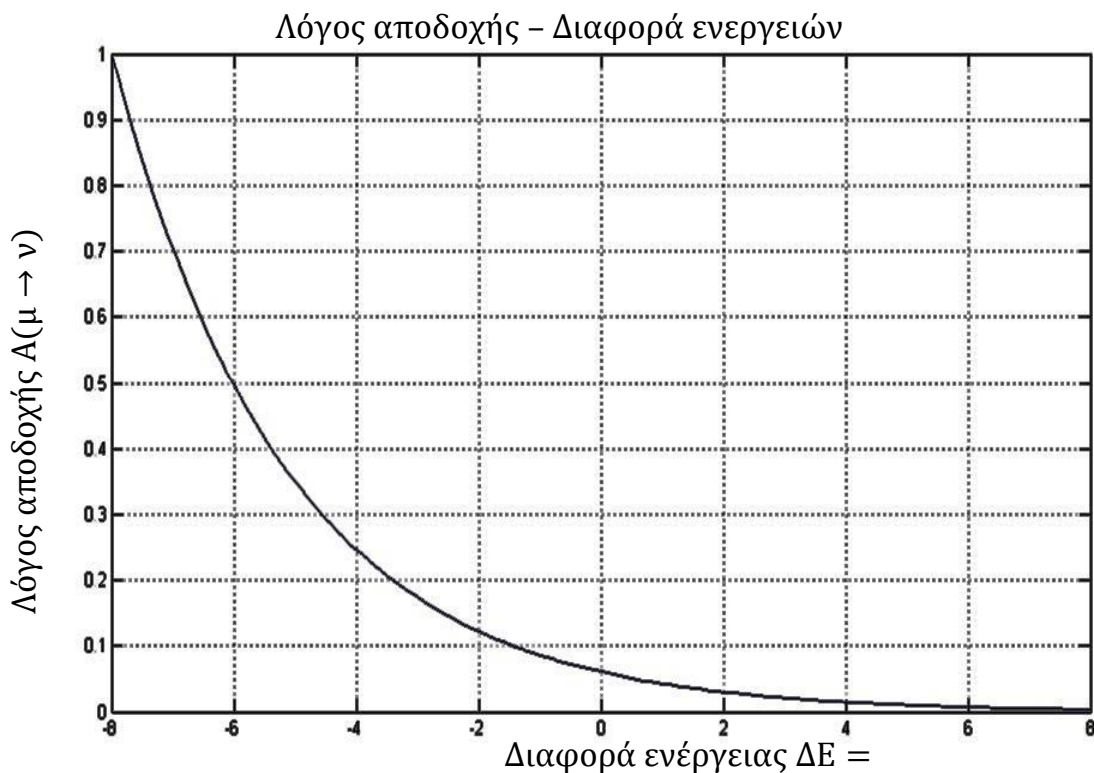
Άρα για να σιγουρευτούμε ότι ο λόγος αποδοχής  $A(\mu \rightarrow \nu) \leq 1$ , επιλέγουμε για την σταθερά  $A_0$  την τιμή:

$$A_0 \leq e^{-\beta z J} \quad (55)$$

Τέλος επειδή θέλουμε ο αλγόριθμος μας να είναι όσο αποδοτικός γίνεται, επιδιώκουμε να έχουμε μεγάλες πιθανότητες αποδοχής, έτσι παίρνουμε για  $A_0$  την μεγαλύτερη τιμή που μας επιτρέπει γράφοντας τον λόγο αποδοχής ως:

$$A(\mu \rightarrow \nu) = e^{-\frac{1}{2}\beta(E_\nu - E_\mu + 2zJ)} \quad (56)$$

Ακόμη και έτσι όμως ο λόγος αποδοχής είναι πολύ μικρός και το σύστημα καταλήγει να μην αποδέχεται καμία αλλαγή κατάστασης ή οι αλλαγές να πραγματοποιούνται σε μια μικρή περιοχή ενεργειών. Χαρακτηριστική είναι η εικόνα 10 η οποία παρουσιάζει τους λόγους αποδοχής σε σχέση με την διαφορά ενέργειας ενέρργειας των καταστάσεων.



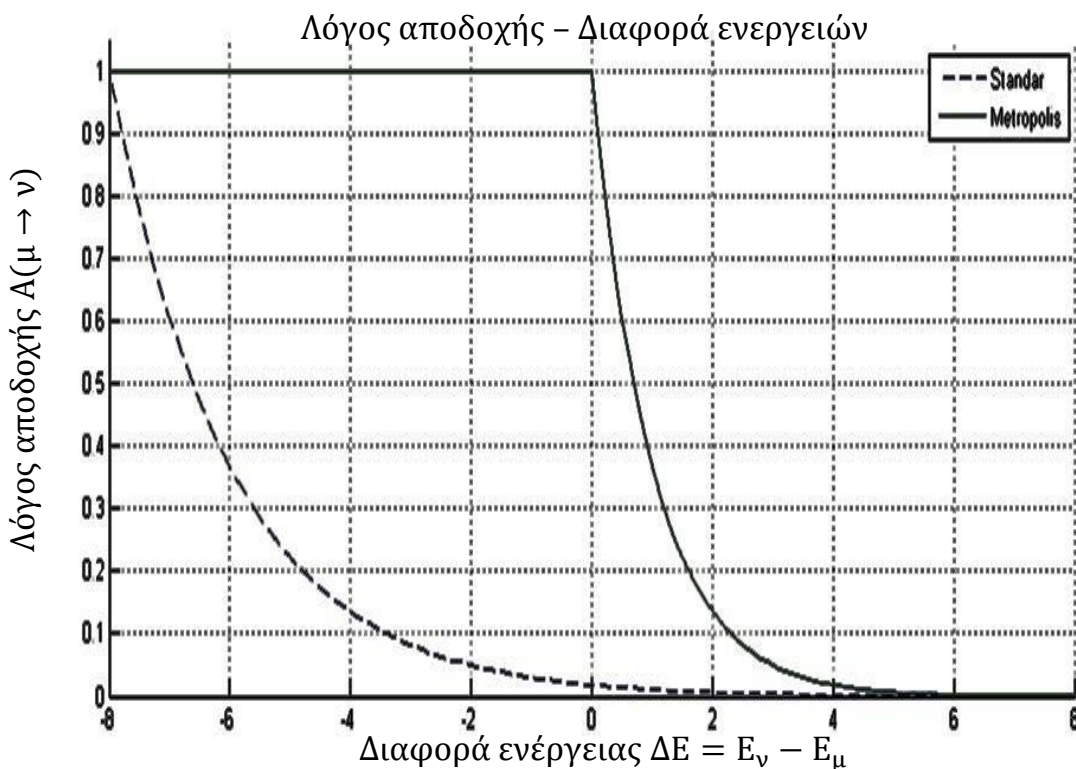
**Εικόνα 10.** Λόγος αποδοχής συναρτήσει της διαφοράς ενέργειας. Παρατηρούμε πόσο γρήγορα μειώνεται ο λόγος αποδοχής σε σχέση με την διαφορά ενέργειας μεταξύ της καινούριας κατάστασης και της αρχικής. Έτσι για μια διαφορά  $\Delta E=0$  η πιθανότητα να γίνει δεκτή η κατάσταση αγγίζει το 0,05. ( $\beta=0.7$ ,  $J=1$ ,  $z=4$ )



Παρατηρώντας όμως ξανά την σχέση (53), βλέπουμε ότι μπορούμε να προσεγγίσουμε και αλλιώς τις σχέσεις για τους λόγους αποδοχής. Αυτή η νέα προσέγγιση είναι ουσιαστικά η μέθοδος *Metropolis*. Σε αυτήν την μέθοδο λοιπόν θεωρούμε τον έναν από τους 2 λόγους αποδοχής της σχέσης (53), ίσο με την μονάδα (1) και προσαρμόζουμε τον άλλον ώστε να ικανοποιείται η σχέση. Για παράδειγμα αν θεωρήσουμε τις 2 καταστάσεις  $\mu$  και  $\nu$ , και η κατάσταση  $\mu$  έχει την μικρότερη ενέργεια από τις 2, δηλαδή  $E_\mu < E_\nu$ , τότε ο μεγαλύτερος λόγος αποδοχής είναι ο  $A(\nu \rightarrow \mu)$  και άρα τον θέτουμε ίσο με 1. Για να ικανοποιείται όμως και η σχέση (53) θέτουμε τον λόγο αποδοχής  $A(\mu \rightarrow \nu) = e^{-\beta(E_\nu - E_\mu)}$ . Συνοψίζοντας καταλήγουμε για τον βέλτιστο αλγόριθμο με τους λόγους αποδοχής να παίρνουν τις τιμές:

$$A(\mu \rightarrow \nu) = \begin{cases} e^{-\beta(E_\nu - E_\mu)} & \text{αν } E_\nu > E_\mu \\ 1 & \text{αλλιώς} \end{cases} \quad (57)$$

Δηλαδή με αυτήν την μέθοδο (*Metropolis*)<sup>1</sup>, αν η νέα κατάσταση μας έχει ενέργεια μικρότερη από την υπάρχουσα τότε την αποδεχόμαστε με πιθανότητα 1 (πάντα), ενώ αν έχει μεγαλύτερη ενέργεια τότε την αποδεχόμαστε με πιθανότητα  $e^{-\beta(E_\nu - E_\mu)}$ . Στην εικόνα 11 βλέπουμε και το συγκριτικό πλεονέκτημα της μεθόδου *Metropolis* σε σχέση με την απλή μέθοδο (σχέση 56).



Εικόνα 11. Η διαφορά της μεθόδου *Metropolis* σε σχέση με της απλής μεθόδου στους λόγους αποδοχής  $A$  ( $\beta=1, J=1, z=4$ )

<sup>1</sup> Η επιλογή (57) των λόγων αποδοχής είναι αυτή που χαρακτηρίζει έναν αλγόριθμο *Metropolis*.

Τέλος να σημειώσουμε ότι και πολλά *spins* να μεταβάλουμε ταυτόχρονα, πάλι ο αλγόριθμος μας θα είναι ένας αλγόριθμος *Metropolis*, γιατί η ιδιότητα που χαρακτηρίζει τον αλγόριθμο αυτόν είναι η συγκεκριμένη επιλογή των λόγων αποδοχής, και όχι το αν μεταβάλουμε ένα *spin* ή πολλά με την μία.

## 6. Το μοντέλο O(3) (Heisenberg Model).

Γενικά τα  $n$ -διανυσματικά μοντέλα ή  $O(n)$  μοντέλα είναι μερικά από τα πολύ απλοποιημένα μοντέλα στο κλάδο της φυσικής γνωστός σαν στατιστική φυσική. Στα μοντέλα αυτά, έχουμε μοναδιαίου μέτρου 'κλασικά spins' τα οποία είναι τοποθετημένα στις κορυφές ενός πλέγματος.

Η χαμιλτονιανή τους συστήματος αυτού είναι:

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} s_i \cdot s_j \quad (58)$$

,όπου το άθροισμα πραγματοποιείται ανάμεσα σε όλα τα γειτονικά ζευγάρια των *spins*  $\langle i,j \rangle$  και το  $\cdot$  ορίζει έναν εσωτερικό πολλαπλασιασμό μεταξύ των διανυσμάτων των *spins*. Τέλος το  $J$  ορίζει το μέτρο της αλληλεπίδρασης και κατά συνέπεια, το αν το μοντέλο μας είναι σιδηρομαγνητικό (*ferromagnetic*) ή αντι-σιδηρομαγνητικό (*anti-ferromagnetic*).

Ανάλογα λοιπόν με τις περιπτώσεις των  $n$ -διανυσμάτων έχουμε και τα διαφορετικά είδη μοντέλων, έτσι διακρίνουμε τις περιπτώσεις:

- $n=0$  : Αυτοαποφεύγων Τυχαίος Περιπατητής (*Self-Avoiding Random Walk –SAW*)
- $n=1$  : Το μοντέλο *Ising*
- $n=2$  : Το μοντέλο *XY*
- $n=3$  : Το μοντέλο *Heisenberg*
- $n=4$  : Το *Toy Model* (π.χ. για τον τομέα του Higgs του καθιερωμένου πρότυπου - *Standar Model*)

Στην εργασία αυτή θα ασχοληθούμε με το *Heisenberg Model* ή *O(3) model*. Διακρίνουμε 2 περιπτώσεις του μοντέλου αυτού, την κλασική περιγραφή και την κβαντομηχανική περιγραφή.

## 6.1 Κλασική Περιγραφή

Στην κλασική περιγραφή το μοντέλο προσομοιώνεται με την χρήση μοναδιαίου μέτρου διανυσμάτων των *spins*, με οποιαδήποτε διεύθυνση στο χώρο, δηλαδή

$$\vec{s}_i \in \mathbb{R}^3, |\vec{s}_i| = 1 \quad (59)$$

τα οποία είναι τοποθετημένα στις κορυφές του πλέγματος.

Η Χαμιλτονιανή του μοντέλου αυτού είναι η

$$H_{\text{Heisenberg}} = -J_{ij} \sum_{\langle i,j \rangle} (\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j) - H_z \sum_i S_i^z, \quad (60)$$

$$(S_i^x)^2 + (S_i^y)^2 + (S_i^z)^2 = 1$$

όπου

$$J_{ij} = \begin{cases} J & \text{αν } i, j \text{ είναι γειτονικά} \\ 0 & \text{αλλιώς} \end{cases}$$

## 6.2 Ιδιότητες του μοντέλου

Η φυσική του μοντέλου Heisenberg εξαρτάται από το πρόσημο της σταθεράς σύζευξης  $J$  και την διάσταση του χώρου. Για  $J$  θετικό, η θεμελιώδης κατάσταση (*ground state*) του συστήματος είναι πάντα σιδηρομαγνητική (*ferromagnetic*). Για αρνητικές τιμές του  $J$  η θεμελιώδης κατάσταση είναι αντι-σιδηρομαγνητική (*anti-ferromagnetic*), για τις δύο και τρεις διαστάσεις.

Στη μία διάσταση ή στις 2 ( $d \leq 2$ ), δεν παρατηρούμε μεταβάσεις φάσης, έχουμε μόνο φάσεις αταξίας (*disordered phase*) (*Mermin-Wagner-Hohenberg theorem*). Αντίθετα για διάσταση του πλέγματος μεγαλύτερη από 2 ( $d > 2$ ), παρατηρούμε και φάσεις τάξης αλλά και αταξίας.

Το μοντέλο αυτό παρουσιάζει καθολική συμμετρία (*global symmetry*) ως προς τις περιστροφές των *spins*<sup>1</sup>.

Το μοντέλο αυτό εξετάζεται ευρέως λόγω της ομοιότητας του με τις θεωρίες βαθμίδας (*gauge theories*), και λειτουργεί σαν ένα απλοποιημένο μοντέλο (*Toy model*) της κβαντικής χρωμοδυναμικής (*QCD*), όπου παρατηρείτε το φαινόμενο του *asymptotic freedom*.

---

<sup>1</sup> Στο μοντέλο Heisenberg και γενικά για  $n \geq 3$ , το σύστημα έχει μη-αβελιανή συμμετρία.

## 7. Ανάλυση Προγράμματος

Για την μελέτη του μοντέλου χρησιμοποιήσαμε το πρόγραμμα του Δρ. Ιωάννη Αποστολάκη[15].

### 7.1 Κατασκευή του πλέγματος και των τιμών των spins.

Αρχικά θα πρέπει να φτιάξουμε το σύστημα μας, ξεκινώντας από το πλέγμα μας και να του δώσουμε κάποιες χαρακτηριστικές ιδιότητες. Το σύστημα που χρησιμοποιούμε λοιπόν είναι ένα τετραγωνικό πλέγμα (2 διαστάσεων  $XY$  ανεξάρτητων μεταξύ τους) με περιοδικές συνοριακές συνθήκες (εικόνα 12). Η επιλογή των περιοδικών συνθηκών είναι μια καλή επιλογή για το πρόβλημα μας, αφού περιορίζει σημαντικά τα φαινόμενα πεπερασμένου μεγέθους του πλέγματος (*Finite Size Effect*) καθώς εγγυάται ότι όλα τα spins έχουν ακριβώς τον ίδιο αριθμό (πλησιέστερων) γειτόνων και την ίδια τοπική γεωμετρία.

Σε τοροειδείς συνοριακές συνθήκες, κινούμενοι οριζόντια ή κάθετα, συναντάμε ανά σταθερή περίοδο βημάτων ίση με  $\sqrt{N}$  την πλεγματική θέση από την οποία ξεκινήσαμε. Αντίστοιχα σε ελικοειδής συνοριακές συνθήκες κινούμενοι κάθετα συναντάμε την αρχική μας θέση ανά σταθερή περίοδο βημάτων  $\sqrt{N}$ , όμως οριζόντια θα πρέπει να κάνουμε  $\sqrt{N}$  βήματα συν 1 προς τα πάνω αλλοιώνοντας ελαφρά την περιοδικότητα. Το πλεονέκτημα της δεύτερης μεθόδου είναι να γίνεται γρηγορότερη προσπέλαση στις τιμές των spins από τον υπολογιστή, αλλά με την εισαγωγή ενός μικρού συστηματικού σφάλματος.

0	1	2	3	4
5	6	7	8	9
10	11	12	13	14
15	16	17	18	19
20	21	22	23	24

0	1	2	3	4
5	6	7	8	9
10	11	12	13	14
15	16	17	18	19
20	21	22	23	24

0	1	2	3	4
5	6	7	8	9
10	11	12	13	14
15	16	17	18	19
20	21	22	23	24

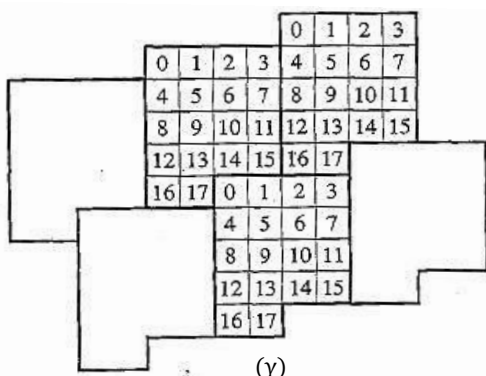
(α)

0	1	2	3	4
5	6	7	8	9
10	11	12	13	14
15	16	17	18	19
20	21	22	23	24

0	1	2	3	4
5	6	7	8	9
10	11	12	13	14
15	16	17	18	19
20	21	22	23	24

0	1	2	3	4
5	6	7	8	9
10	11	12	13	14
15	16	17	18	19
20	21	22	23	24

(β)

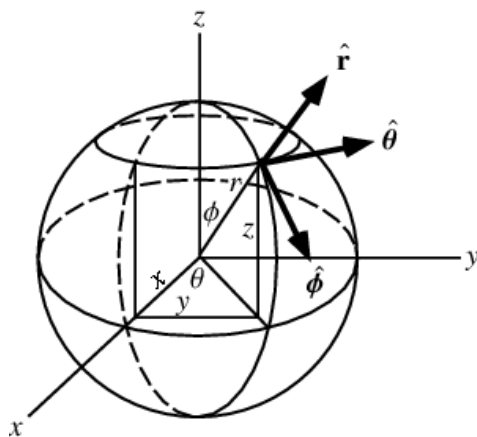


(γ)

(α) Τοροειδείς συνοριακές συνθήκες. [1] (β),(γ) Ελικοειδής συνοριακές συνθήκες. Είναι πιο εύκολες στην υλοποίησή τους και επίσης δεν χρειάζεται ο αριθμός των πλεγματικών θέσεων να είναι ακέραιο πολλαπλάσιο της διάστασης του πλέγματος, εισάγοντας όμως ένα συστηματικό σφάλμα. [1][5]

Η δημιουργία του πλέγματος μας υλοποιείται με την χρήση πινάκων οι οποίοι έχουν μέγεθος ίσο με το μέγεθος του πλέγματος και κάθε κελί του πίνακα αντιστοιχεί σε μια πλεγματική θέση (κορυφή – *vertex*) του πλέγματος. Το μέγεθος του πλέγματος είναι που θα καθορίσει το μέγεθος του πίνακα. Έτσι σε ένα πλέγμα για παράδειγμα  $L \times M$  θα πρέπει να χρησιμοποιήσουμε ένα πίνακα μεγέθους  $N=L \times M$ . Το μέγεθος του πλέγματος το καθορίζουμε στην αρχή της κάθε προσομοίωσης.

Στην συνέχεια θα πρέπει να θέσουμε σε κάθε πλεγματική θέση – κελί (του πίνακα) μια τιμή η οποία θα αντικατοπτρίζει την διεύθυνση του *spin*. Έτσι για παράδειγμα στο μοντέλο *Ising* θέτουμε τιμή +1 για τα spins που έχουν φορά προς τα πάνω και -1 για τα αντίστροφα. Αντίστοιχα στη μελέτη του μοντέλου *Heisenberg*, θέτουμε σε κάθε κελί 3 τιμές, οι οποίες αντικατοπτρίζουν την διεύθυνση των *spins* σε καρτεσιανές συντεταγμένες από τις σφαιρικές.



$$\begin{aligned} z &= r \cos(\varphi) \\ x &= r \sin(\varphi) \cos(\theta) \\ y &= r \sin(\varphi) \sin(\theta) \end{aligned} \quad (61)$$

,όπου  $\varphi \in [0, \pi]$  και  $\theta \in [0, 2\pi]$

**Εικόνα 12.** Η σχηματική αναπαράσταση της σχέσης των σφαιρικών συντεταγμένων σε καρτεσιανές.

Η μέτρηση της επιφάνειας υπολογίζεται από την  $d\Omega = \sin\theta d\varphi d\theta = -d(\cos\theta)d\varphi$ . Η πυκνότητα πιθανότητας πρέπει να είναι σταθερή για όλες τις στερεές γωνίες  $\Omega$ , π.χ.  $p(\Omega) = 1/4\pi$ . Επομένως το  $\cos\theta$  και  $\varphi$  πρέπει να έχουν μια ομοιόμορφη κατανομή, π.χ.

$$\begin{aligned} \cos\theta &\text{ ομοιόμορφο στο } [-1,1] \\ \varphi &\text{ ομοιόμορφο στο } [0,2\pi] \end{aligned}$$

το  $\sin\theta$  υπολογίζεται από την  $\sin\theta = \sqrt{1 - \cos^2\theta}$ . Δεν υπάρχει αμφιβολία καθώς  $\sin\theta \geq 0, \forall \theta \in [0, \pi]$ . Για ένα πιο αποτελεσματικό υπολογισμό του  $\sin\varphi$  και του  $\cos\varphi$  χρησιμοποιούμε τον παρακάτω αλγόριθμο:

Ορίζουμε  $v_1 = 2u_2 - 1$ ,  $v_2 = u_2$ , όπου  $u_1$  και  $u_2$  είναι κατανεμημένα ομοιόμορφα στο διάστημα  $[0,1]$ . Επαναλαμβάνουμε την διαδικασία έως  $r^2 = v_1^2 + v_2^2 < 1$ . Τελικά

$$\begin{cases} \sin \varphi = 2 \frac{v_1 v_2}{r^2} \\ \cos \varphi = \frac{v_1^2 - v_2^2}{r^2} \end{cases} \quad (62)$$

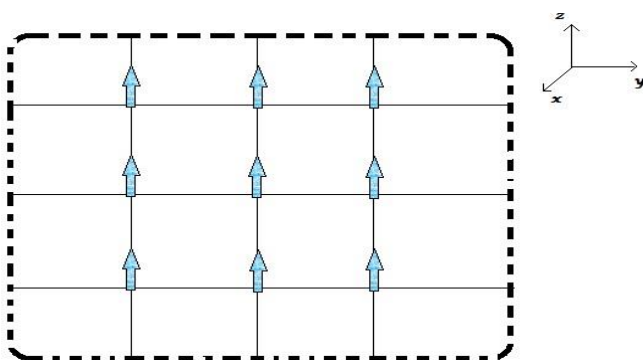
Έτσι ο πίνακας των spins έχει την μορφή  $\text{spin}[i][j][z,x,y]$ , όπου το  $i,j$  αντιπροσωπεύουν την θέση του spin στο πλέγμα και  $z,x,y$  είναι οι συντεταγμένες του διανύσματος της διεύθυνσης του spin. Σημειώνουμε επίσης ότι το μέτρο των διανυσμάτων των spins είναι σταθερό και ίσο με την μονάδα.

Προσοχή πρέπει να δείξουμε και στα όρια του πλέγματος, ώστε οι τιμές των spins να είναι σύμφωνες με τις περιοδικές συνθήκες του πλέγματος. Αυτό το καταφέρνουμε με τις συνθήκες που εισάγουμε στον αλγόριθμο μας, ώστε να ξέρουμε πότε κινούμαστε στα όρια του πλέγματος.

## 7.2 Αρχικοποίηση του συστήματος

Εφόσον φτιάχνουμε τους πίνακες των spins θα πρέπει να τους δώσουμε τιμές. Οι τιμές αυτές θα είναι οι αρχικές για την έναρξη της προσομοίωσης μας. Στον αλγόριθμο που χρησιμοποιούμε έχουν την δυνατότητα να επιλέξουμε ανάμεσα σε 3 διαφορετικές αρχικές καταστάσεις. Η διαδικασία αυτή πραγματοποιείται με την μέθοδο *init(flag)*.

I) Η πρώτη κατάσταση είναι να έχουμε το πλέγμα σε συνθήκες χαμηλής θερμοκρασίας (*cold start*), στην οποία τα spins του συστήματος μας είναι όλα ευθυγραμμισμένα ομόρροπα και μάλιστα στην διεύθυνση του  $z$ . Έτσι θέτουμε στον αλγόριθμο μας με την βοήθεια βρόγχων (*loops*), όλα τα spins με τιμή  $(1,0,0)$ <sup>1</sup>.



Το μοντέλο Heisenberg σε ένα πλέγμα 3x3, σε κατάσταση πολύ μικρής θερμοκρασίας, στην περίπτωση της *cold start* αρχικής συνθήκης. Όλα τα spins ευθυγραμμίζονται προς την ίδια διεύθυνση, ελαχιστοποιώντας έτσι την ενέργεια του συστήματος

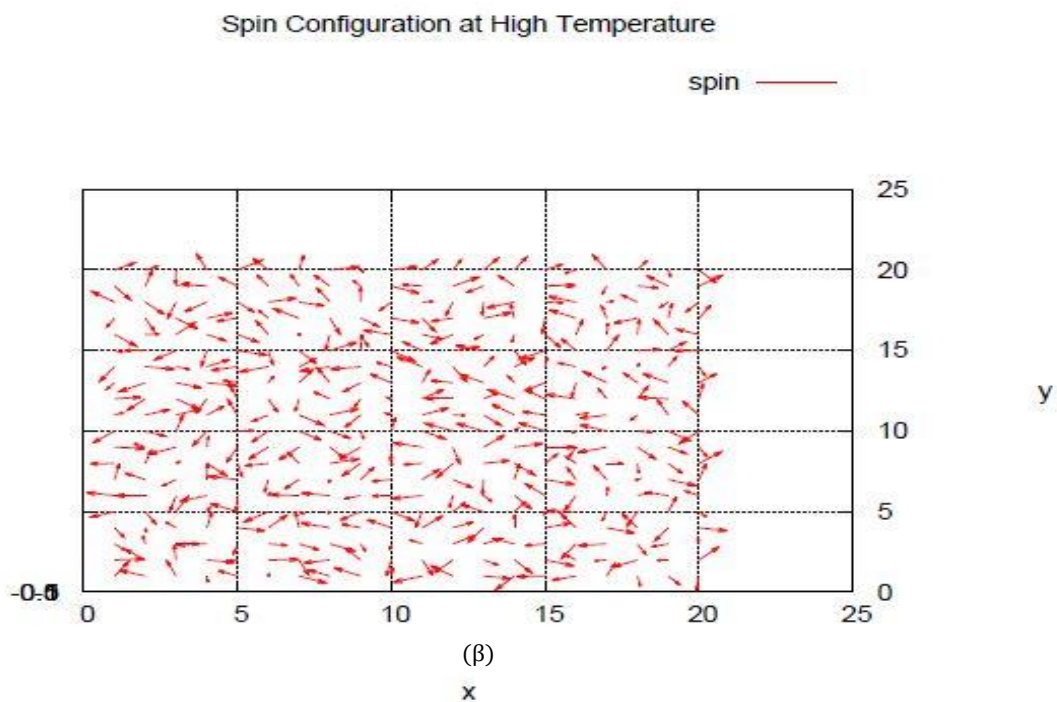
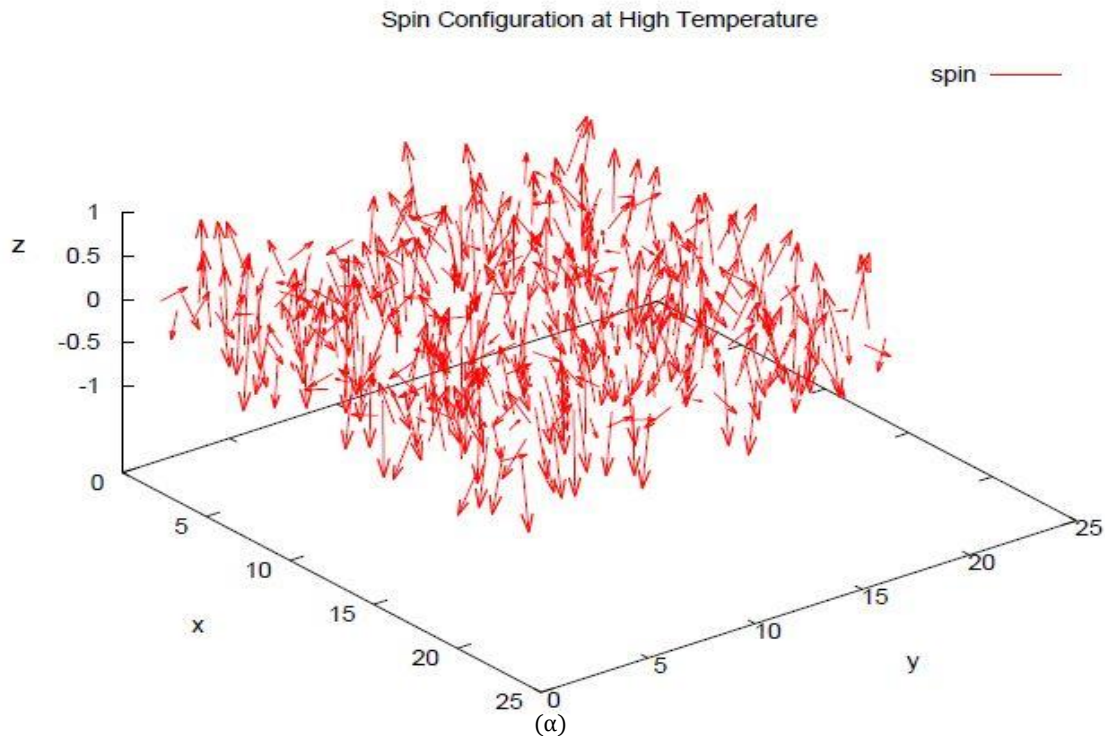
Εικόνα 13. Το μοντέλο Heisenberg, στην περίπτωση της *cold start* αρχικής συνθήκης.

II) Η δεύτερη επιλογή μας είναι να αρχικοποιούμε το σύστημα μας σε μια εντελώς τυχαία διάταξη των spins, θερμή κατάσταση (*hot start*). Σε αυτήν την περίπτωση χρησιμοποιούμε τις γεννήτριες τυχαίων αριθμών, όπως η *ranmar()*, η

<sup>1</sup> Σε αυτήν την κατάσταση το σύστημα μας είναι ουσιαστικά σε μία από τις θεμελιώδεις ενέργειες του (ground states).

οποίες παράγουν τυχαία αριθμούς στο διάστημα (0,1). Έτσι με έναν βρόγχο πάλι περνάμε από όλα τα *spins* και τους θέτουμε τυχαία τιμές στα διανύσματα της διεύθυνσης τους (z,x,y). Ένα απλό παράδειγμα είναι να επιλέξουμε τις σχέσεις:

$$\begin{aligned} z &= \cos(\pi \cdot \text{ranmar}()) \\ x &= \sin(\pi \cdot \text{ranmar}()) \cdot \cos(2\pi \cdot \text{ranmar}()) \\ y &= \sin(\pi \cdot \text{ranmar}()) \cdot \sin(2\pi \cdot \text{ranmar}()) \end{aligned} \quad (63)$$



**Εικόνα 14.** Το μοντέλο Heisenberg σε ένα πλέγμα 20x20 σε συνθήκες μεγάλης θερμοκρασίας (*Hot start*), από διάφορες οπτικές γωνίες (α),(β). Σε αυτήν την κατάσταση υποθέτουμε ότι όλα τα spins έχουν τόση ενέργεια ώστε η ενέργεια αλληλεπίδρασης τους με τα γειτονικά spins είναι αμελητέα.

Σημαντικός παράγοντας για την σωστή προσομοίωση του μοντέλου είναι η σωστή επιλογή του αλγόριθμου ο οποίος θα μας παράγει τους τυχαίους αριθμούς. Τα κριτήρια που διαφοροποιούν μία καλή γεννήτρια τυχαίων αριθμών από μια κακή είναι κυρίως:

- A) Οι αριθμοί να είναι ομοιόμορφα κατανεμημένοι.
- B) Να μην είναι συσχετισμένοι μεταξύ τους.
- Γ) Να μην επαναλαμβάνονται μετά από μικρές περιόδους.

Μια καλή λύση για να έχουμε καλή επιλογή τυχαίων αριθμών είναι να χρησιμοποιήσουμε συνδυασμό διαφορετικών γεννητριών.

III) Η τρίτη μας επιλογή για την αρχική κατάσταση του συστήματος είναι να χρησιμοποιήσουμε μια είδη υπάρχουσα κατάσταση που έχουμε φτιάξει με την μέθοδο *Metropolis* (ή οποιαδήποτε άλλη μέθοδο) η οποία θα μας βόλευε για την συνέχιση της μελέτης μας, π.χ. μια διάταξη *spins* η οποία είναι κοντά στην θερμοκρασία που θέλουμε να μελετήσουμε έτσι ώστε να ελαχιστοποιήσουμε τον χρόνο που χρειάζεται για να βρεθεί το σύστημα στην κατάσταση ισορροπίας του για μια δεδομένη θερμοκρασία.

Όπως έχουμε ήδη αναφέρει, η επιλογή της αρχικής συνθήκης του πλέγματος παίζει σημαντικό ρόλο στην εξέλιξη του συστήματος, καθώς είναι ένας από τους σημαντικούς παράγοντες οι οποίοι καθορίζουν το πόσο γρήγορα ή αργά θα φθάσει το σύστημα μας στην κατάσταση ισορροπίας που επιθυμούμε (Εικόνα 8).

### 7.3 Μεταβολή του συστήματος σε νέα κατάσταση

Το επόμενο βήμα της προσομοίωσης μας, αφού επιλέξαμε την αρχική κατάσταση του συστήματος μας, είναι με διαδοχικά βήματα να αλλάζουμε τις διευθύνσεις των *spins* έτσι ώστε να φθάσουμε στη καινούρια κατάσταση θερμοκτικής ισορροπίας, για την θερμοκρασία που έχουμε επιλέξει, σύμφωνα με όσα αναφέραμε πιο πάνω. Για να το επιτύχουμε αυτό χρησιμοποιούμε την μέθοδο *Metropolis*. Η διαδικασία υλοποιείται με το αρχείο *update.c* και την μέθοδο *update()*, καθώς και την μέθοδο *newsite()* του αρχείου *newsite.c* και έχει ως εξής:

A) Για κάθε *spin* του πλέγματος υπολογίζουμε το άθροισμα των συνιστωσών (x,y,z) των γειτονικών *spins* (4 διευθύνσεις) και τα αποθηκεύουμε σε μια λίστα *sumspin[3]*.

B) Με την μέθοδο *newsite* υπολογίζουμε το γινόμενο  $oldprod = \vec{s}_i \cdot \vec{s}_n$ , όπου  $s_n$  είναι το άθροισμα των γειτονικών *spins*.

Γ) Φτιάχνουμε μια τυχαία καινούρια διεύθυνση για το *spin*.

Δ) Υπολογίζουμε το νέο γινόμενο  $newprod = \vec{s}_i \cdot \vec{s}_n$ .

Ε) Ελέγχουμε την συνθήκη  $ndels = -beta * (newprod - oldprod)$ , και αν είναι αρνητική ή ισχύει  $exp(-dels) > ranmar()$ , τότε αποδεχόμαστε την νέα διεύθυνση του *spin*.



ΣΤ) Η διαδικασία επαναλαμβάνεται για τον αριθμό των sweeps που εμείς ορίζουμε.

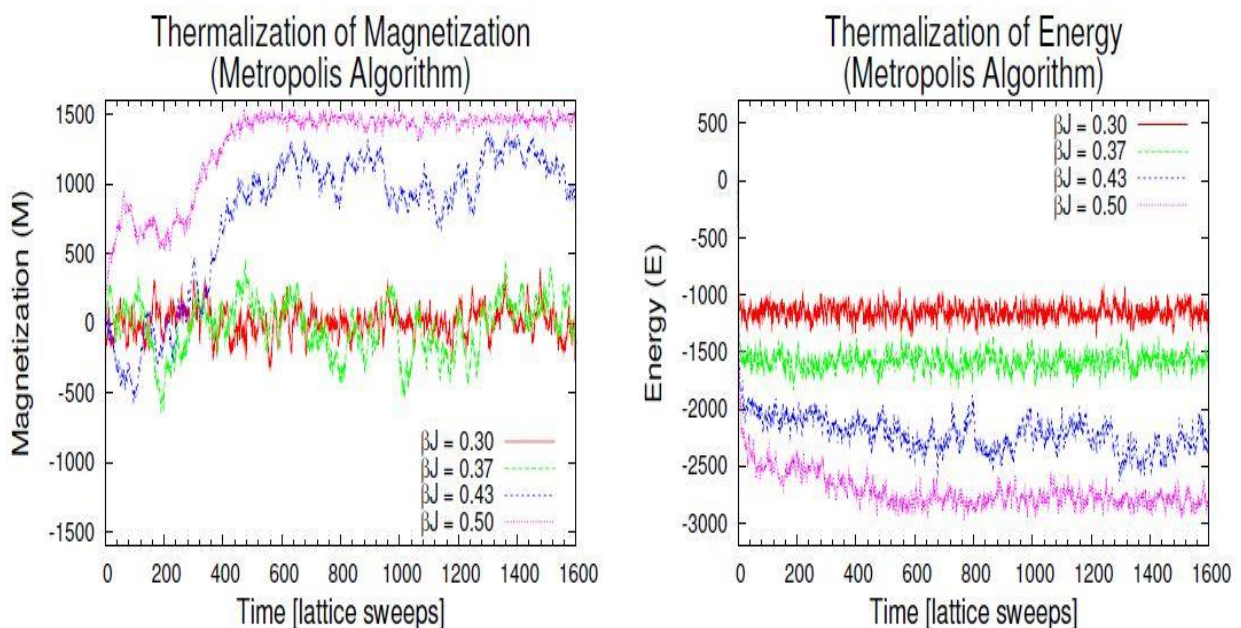
Σημαντικό στις παραπάνω διαδικασίες είναι να επανακαθορίζουμε τα όρια του πλέγματος ώστε να μην υπάρχουν ασυνέχειες.

#### 7.4 Μέτρηση των ποσοτήτων

##### A. Χρόνος για να βρεθεί το σύστημα σε κατάσταση θερμικής ισορροπίας (Thermalization Time)

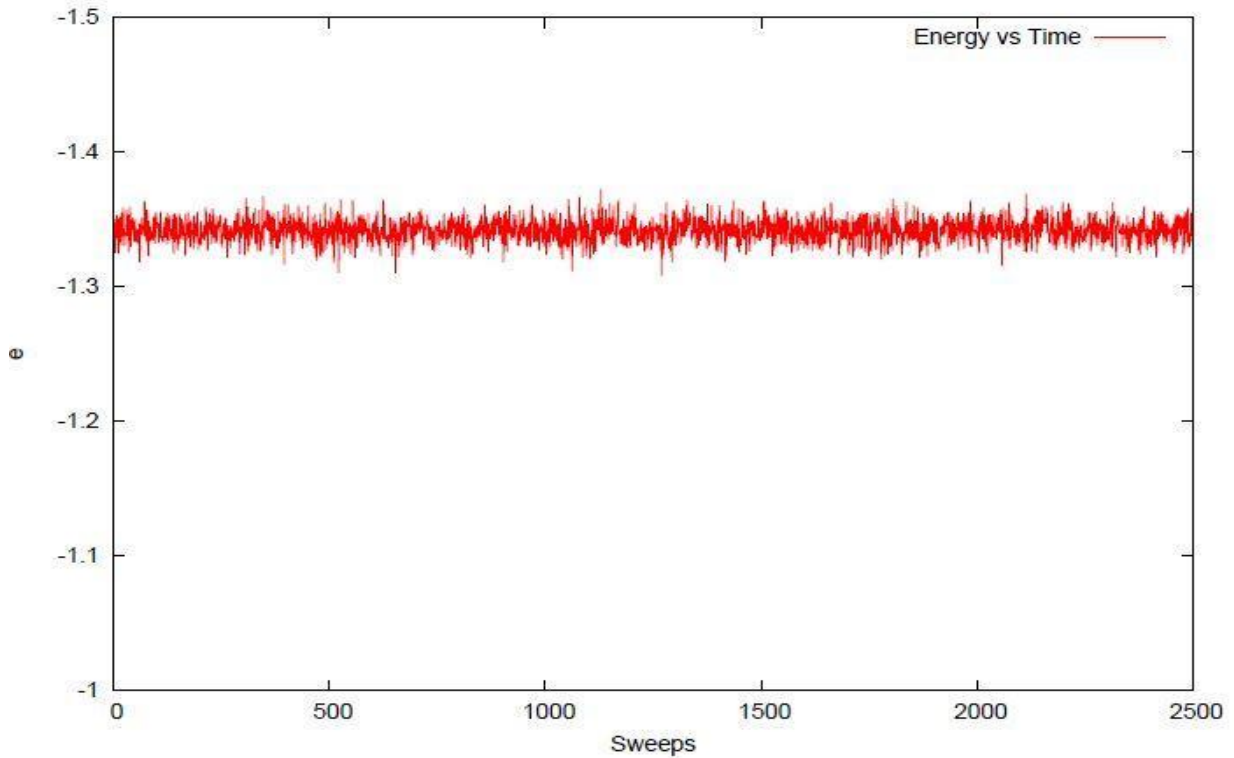
Αφού φθάσουμε στην κατάσταση θερμικής ισορροπίας, είμαστε έτοιμοι για να μετρήσουμε τις ποσότητες που μας ενδιαφέρουν για την συγκεκριμένη θερμοκρασία, τέτοιες ποσότητες μπορεί να είναι η ενέργεια του συστήματος (συνολική ή κατά πλεγματική θέση), η μαγνήτιση, η ειδική θερμότητα κ.α. Ο υπολογισμός αυτών των ποσοτήτων όπως έχουμε ήδη αναφέρει γίνεται με το να βγάζουμε τον μέσο όρο πολλών μετρήσεων. Υπάρχουν όμως κάποια σημαντικά ερωτήματα τα οποία πρέπει να ξεκαθαρίσουμε πριν αρχίσουμε να μετράμε τις ποσότητες. Έτσι πρέπει να ξεκαθαρίσουμε το ποιος είναι ο χρόνος για να φθάσουμε στην κατάσταση θερμικής ισορροπίας,  $\tau_{eq}$ , και μετά από αυτόν το χρόνο πόσες είναι οι μετρήσεις τις οποίες πρέπει να κάνουμε ώστε να έχουμε ένα σχετικά καλό, ακριβή αποτέλεσμα για την ποσότητα που μας ενδιαφέρει.

Στην κατάσταση θερμικής ισορροπίας το σύστημα μας περνά από καταστάσεις οι οποίες διαφέρουν πολύ λίγο όσο αφορά την ενέργεια τους, έτσι μια καλή λύση για να βρούμε τον χρόνο που χρειάζεται για να βρεθεί το σύστημα μας σε κατάσταση θερμική ισορροπίας είναι να παρατηρήσουμε την ενέργεια (ή μια ποσότητα) του συστήματος μας σε σχέση με τα *sweeps* (χρόνο). Όταν παρατηρήσουμε μικρές διαφορές στις τιμές της ποσότητας, ανάμεσα στα *sweeps*, και η ποσότητα φαίνεται να σταθεροποιείται σε μια τιμή, τότε έχουμε μια καλή ένδειξη ότι το σύστημα βρίσκεται σε κατάσταση θερμικής ισορροπίας.

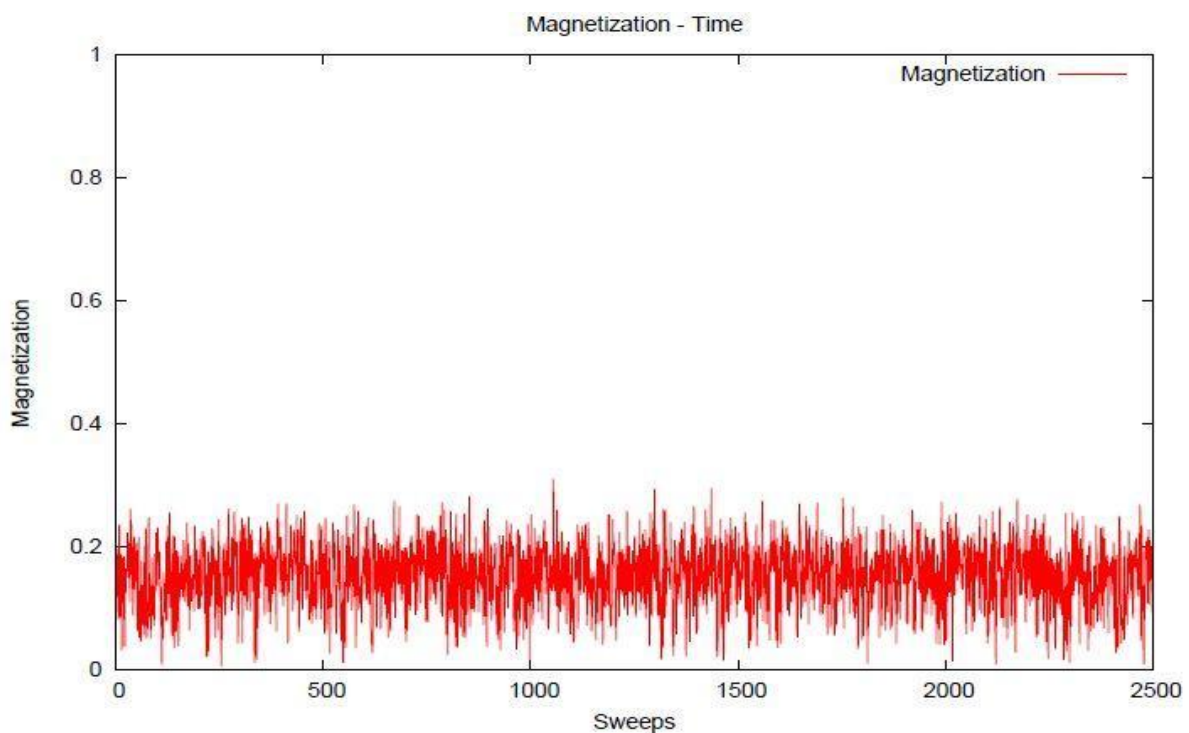


**Εικόνα 15.** Διαγράμματα της μαγνήτισης και της ενέργειας σε σχέση με τον χρόνο για διαφορετικές θερμοκρασίες στο μοντέλο Ising (40x40). Παρατηρούμε ότι στο διάγραμμα της μαγνήτισης φαίνεται καλύτερα ο χρόνος που χρειάζεται για να ωθάσει το σύστημα μας σε κατάσταση θερμικής ισορροπίας. [1]

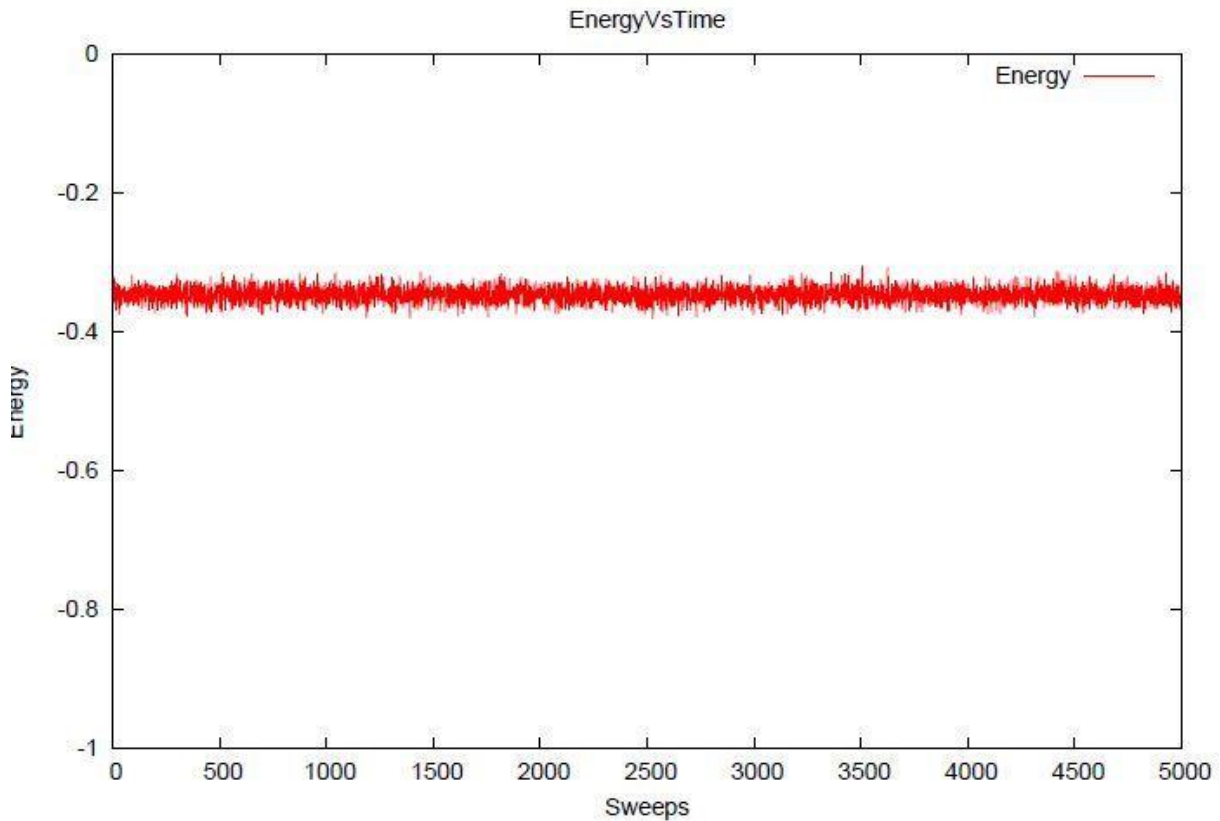
Στο μοντέλο *Heisenberg*, το οποίο μελετάμε με το πρόγραμμα μας, χρησιμοποιώντας τον αλγόριθμο *Metropolis*, ο χρόνος για να φθάσει το σύστημα μας σε κατάσταση θερμικής ισορροπίας είναι πολύ μικρός. Χαρακτηριστικά είναι τα παρακάτω διαγράμματα της ενέργειας και της μαγνήτισης του συστήματος. Επίσης στην εικόνα 20 φαίνεται ότι το σύστημα μας δεν αλλάζει κατάσταση μετά από αρκετά μεγάλο χρόνο (5000 *sweeps*), και έτσι απορρίπτουμε το ενδεχόμενο να μην βρισκόμαστε στην κατάσταση θερμικής ισορροπίας στα πρώτα *sweeps*.



**Εικόνα 16.** Οι διακυμάνσεις της ενέργειας ανά πλεγματική θέση με τον αλγόριθμο *Metropolis*. ( $b=1.725$ ,  $L=80$ )



**Εικόνα 17.** Οι διακυμάνσεις της μαγνήτισης με τον αλγόριθμο *Metropolis*. ( $\beta=1.725$ ,  $L=80$ )



**Εικόνα 18.** Η εξάρτηση της ενέργειας σε σχέση με τα sweeps, για το μοντέλο Heisenberg μεγέθους 80x80, για θερμοκρασία  $\beta=0.5$  (Metropolis).

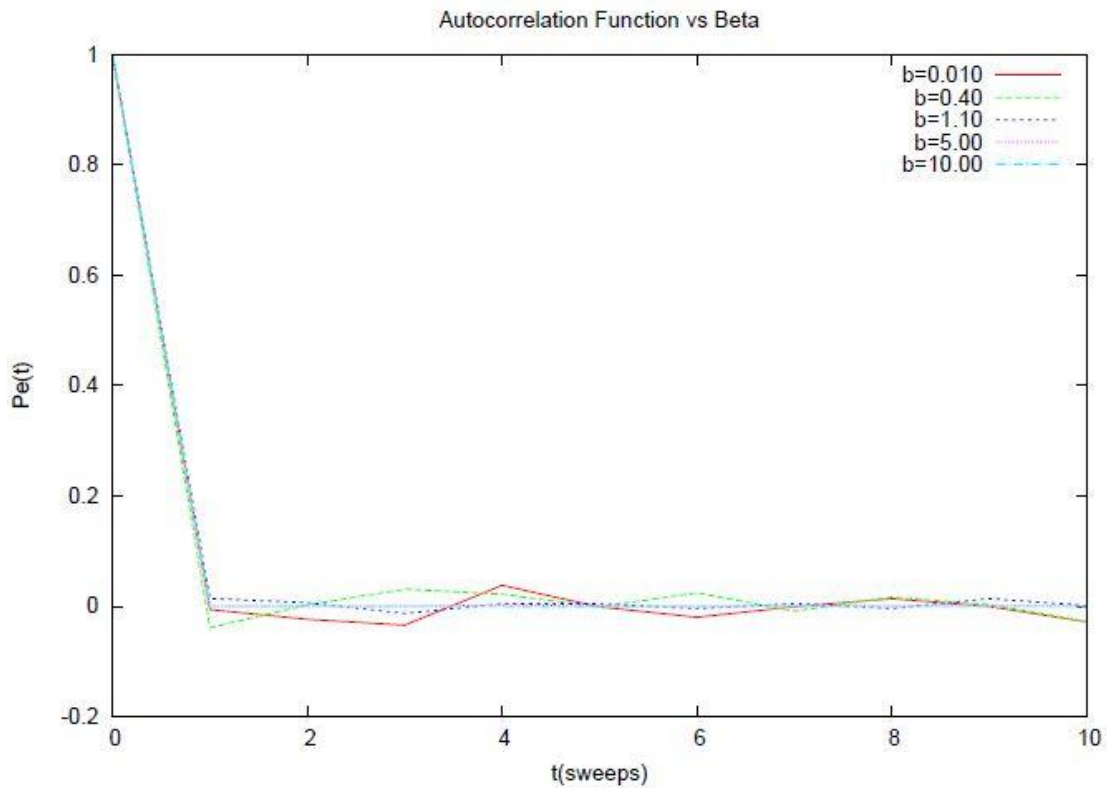
## B. Χρόνος αυτοσυσχετισμού

Εφόσον προσδιορίσουμε τον χρόνο που χρειάζεται για να βρεθεί το σύστημα μας στην κατάσταση θερμικής ισορροπίας, είμαστε έτοιμοι για να μετρήσουμε την ποσότητα που μας ενδιαφέρει μετά από αυτόν τον χρόνο. Στην περίπτωση μας, απορρίπτουμε τις πρώτες 10 μετρήσεις (*thermalization time*) και κρατάμε τις υπόλοιπες για να βγάλουμε τον τελικό μέσο όρο. Σε αυτό το στάδιο της προσομοίωσης μας, δημιουργείται ακόμα ένα ερώτημα, το οποίο διατυπώνεται στην ερώτηση: Πόσο ανεξάρτητες είναι οι μετρήσεις που παίρνουμε για να βγει το τελικό αποτέλεσμα; Καθώς στον αλγόριθμο *Metropolis* το επόμενο βήμα διαφέρει από το προηγούμενο κατά πολύ λίγο και άρα η επόμενη διάταξη των *spins* είναι πολύ ισχυρά συσχετισμένη με την προηγούμενη. Η απάντηση δίνεται με τον **χρόνο αυτοσυσχετισμού**, καθώς μας δίνει μία τάξη μεγέθους ώστε οι μετρήσεις μας να είναι ανεξάρτητες και να μην επηρεάζονται από το προηγούμενο sweep.

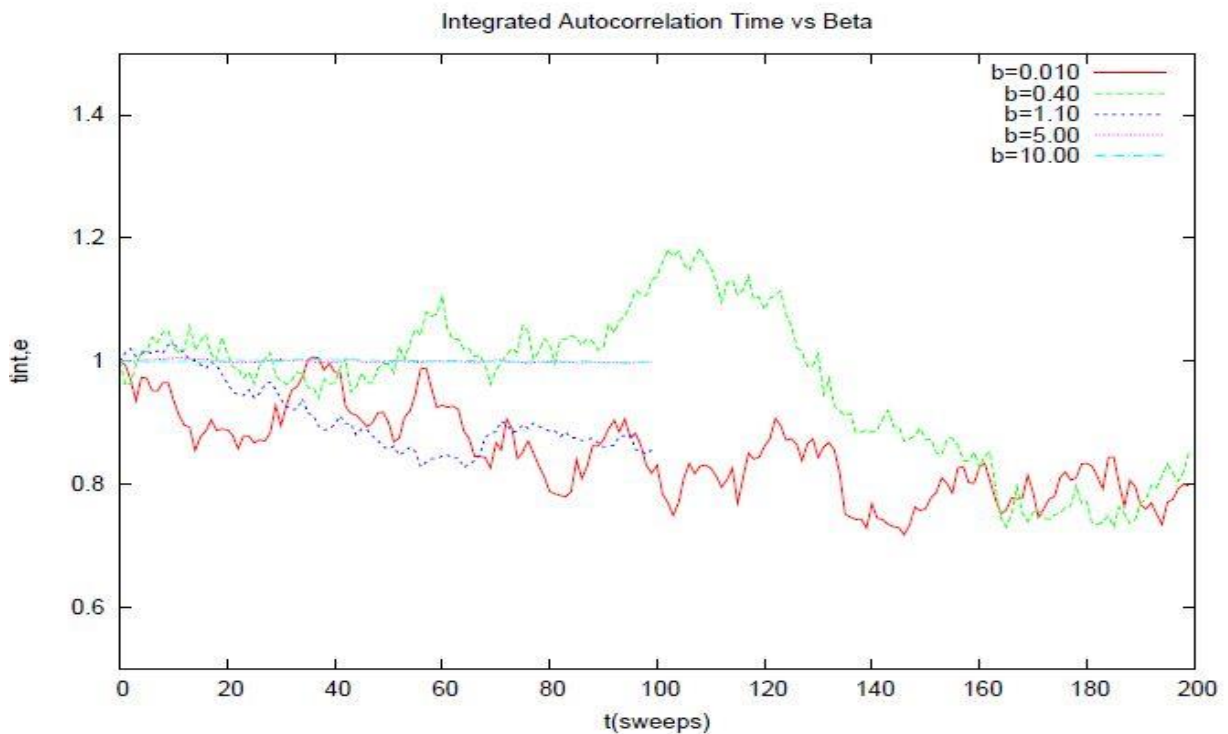
Χρησιμοποιούμε δύο μεθόδους για τον υπολογισμό του χρόνου αυτοσυσχετισμού.

- A) Τη Συνάρτηση Αυτοσυσχετισμού (autocorrelation function)  $\rho_o(t)$
- B) Τον Ολοκληρωμένο Χρόνο Αυτοσυσχετισμού (integrated autocorrelation time)  $\tau_{int,0}$

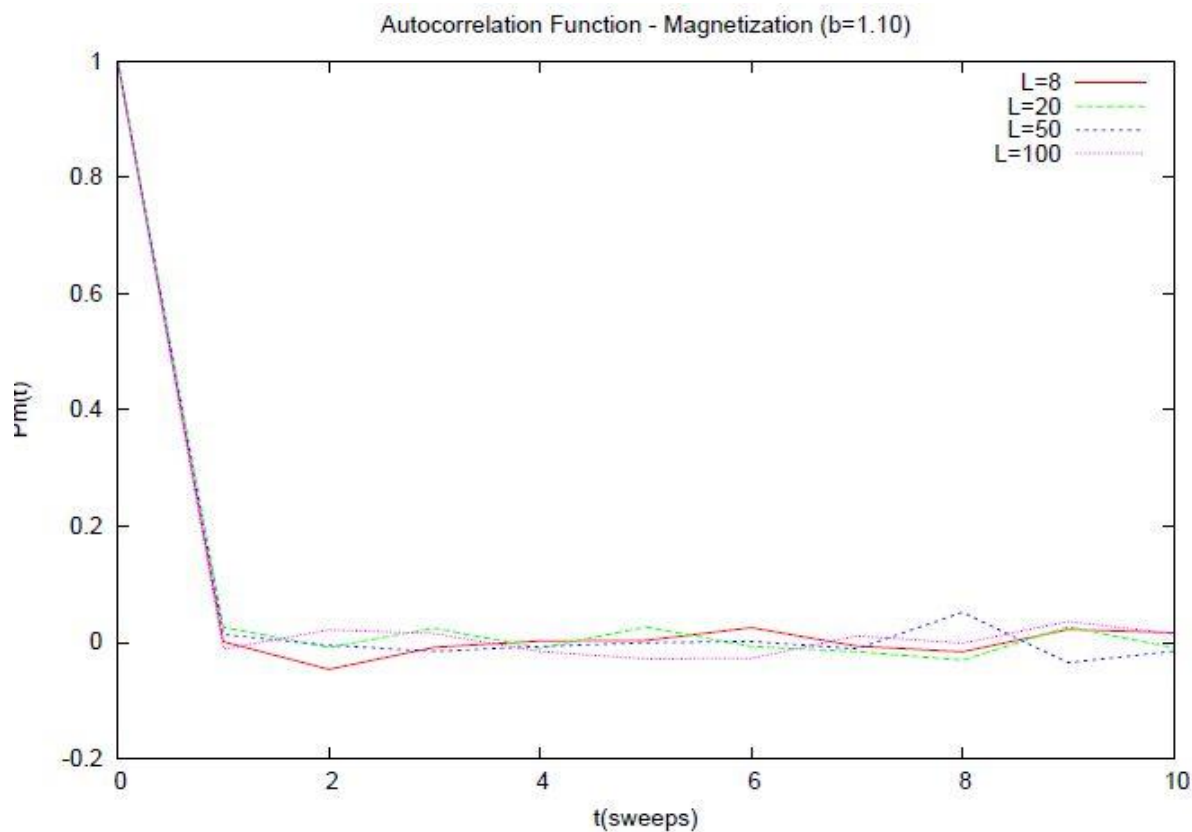
Και δύο μέθοδοι δίνουν για το σύστημα μας, έναν χρόνο αυτοσυσχετισμού ο οποίος δεν υπερβαίνει το 1 sweep. Σημειώνουμε ότι μεγάλους χρόνους αυτοσυσχετισμού παρατηρούμε σε θερμοκρασίες όπου έχουμε μετάβαση φάσης, και το μήκος συσχετισμού  $\xi$  (σχέση 42) γίνεται πολύ μεγαλύτερο από μια πλεγματική θέση.



**Εικόνα 19.** Η συνάρτηση αυτοσυσχετισμού της ενέργειας ανά πλεγματική θέση για διάφορες θερμοκρασίες με τον αλγόριθμο *Metropolis*. Παρατηρούμε ότι η εκθετική πτώση της συνάρτησης αυτοσυσχετισμού περιορίζεται σε κλάσμα του ενός sweep, καθώς και ότι δεν παρατηρούμε καμία εξάρτηση από την θερμοκρασία.



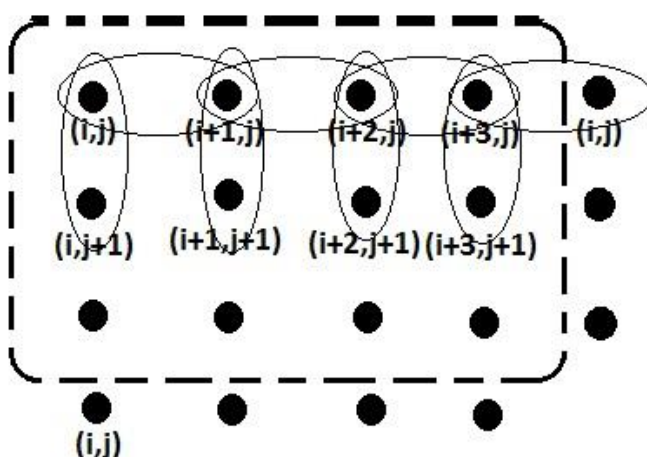
**Εικόνα 20.** Ο ολοκληρωμένος χρόνος αυτοσυσχετισμού του συστήματος για διάφορες θερμοκρασίες, με τον αλγόριθμο *Metropolis*. Η μέθοδος μας δίνει χρόνο αυτοσυσχετισμού ενός sweep. Οι διακυμάνσεις που παρατηρούνται οφείλονται στον «θόρυβο» της μεθόδου.



**Εικόνα 21.** Η συνάρτηση αυτοσυσχετισμού της μαγνήτισης ανά πλεγματική θέση του συστήματος μας για διάφορα μεγέθη πλέγματος, με τον αλγόριθμο *Metropolis*. Παρατηρούμε ότι το μέγεθος του πλέγματος δεν παίζει ρόλο στον χρόνο αυτοσυσχετισμού.

### Γ. Ενέργεια Συστήματος

Η διαδικασία της προσομοίωσης προχωρά με την ουσία της μεθόδου, η οποία δεν είναι άλλη από το να υπολογίσουμε τις ποσότητες που μας ενδιαφέρουν. Ξεκινάμε με τον υπολογισμό της ολικής ενέργειας του συστήματος με την μέθοδο *energy()*, του προγράμματος μας. Σε αυτήν την διαδικασία περνάμε από κάθε spin του πλέγματος μας και υπολογίζουμε το γινόμενο  $\vec{s}_i \cdot \vec{s}_n$ , όπου  $\vec{s}_i$  είναι το spin στο σημείο του πλέγματος που είμαστε και  $\vec{s}_n$  είναι το spin της γειτονικής πλεγματικής θέσης. Για να γίνει πιο γρήγορη η διαδικασία, σε κάθε πλεγματική θέση υπολογίζουμε 2 γινόμενα  $\vec{s}_i \cdot \vec{s}_n$ , το πρώτο είναι μεταξύ της αμέσως γειτονικής θέσης ως προς τη διεύθυνση  $i$  (δηλαδή  $(i+1)$ ) και το δεύτερο είναι μεταξύ της αμέσως γειτονικής θέσης ως προς τη διεύθυνση  $j$  (δηλαδή  $(j+1)$ ). Και σε αυτήν την διαδικασία πρέπει να προσέχουμε τις περιπτώσεις που κινούμαστε στα όρια του πλέγματος.



**Εικόνα 22.** Σχηματική αναπαράσταση του τρόπου υπολογισμού των γινομένων  $\vec{s}_i \cdot \vec{s}_n$ .

Έτσι από τη σχέση

$$H = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \vec{s}_i \cdot \vec{s}_j \quad (64)$$

υπολογίζουμε την ενέργεια του συστήματος. Τα αποτελέσματα των μετρήσεων μας τυπώνονται σε ξεχωριστά αρχεία για κάθε προσομοίωση έτσι ώστε να είναι εύκολα επεξεργάσιμα. Σημειώνουμε επίσης ότι αποθηκεύουμε την ενέργεια ανά πλεγματοκή θέση και όχι την συνολική ενέργεια.

#### Δ. Μαγνήτιση

Με την μέθοδο `measure()`, υπολογίζουμε την ολική μαγνήτιση στις 3 διευθύνσεις του πλέγματος και τυπώνουμε την ολική μαγνήτιση ανά πλεγματοκή θέση στο αρχείο που έχουμε ορίσει ως "Spinsquare distribution". Η διαδικασία έχει ως εξής:

Περνάμε από όλες τις πλεγματοκές θέσεις και αποθηκεύουμε τις συνιστώσες των spins σε 3 πίνακες αντίστοιχα με τις διευθύνσεις x,y και z. Η ολική μαγνήτιση ανά πλεγματοκή θέση υπολογίζεται από την σχέση  $S_{tot} = (s_x^2 + s_y^2 + s_z^2)/sites$ . Το πρόγραμμα με μια μικρή τροποποίηση μπορεί να μας τυπώσει και τις συνισταμένες της μαγνήτισης ανά πλεγματοκή θέση. Σημαντικό στους υπολογισμούς μας είναι να προτιμούμε να χρησιμοποιούμε την απόλυτη τιμή της μαγνήτισης, και αυτό γιατί λόγω του πεπερασμένου μεγέθους του συστήματος μας, η μαγνήτιση ακόμα και σε χαμηλές θερμοκρασίες μπορεί να αλλάζει πρόσημο<sup>1</sup> δίνοντας λανθασμένη τιμή στον υπολογισμό της μέσης τιμής της μαγνήτισης.

#### Ε. Ειδική θερμοχωρητικότητα – Μαγνητική Επιδεκτικότητα

Ο υπολογισμός άλλων ποσοτήτων γίνεται με την βοήθεια των διακυμάνσεων της ενέργειας και της μαγνήτισης του συστήματος.

Έτσι από τις σχέσεις

$$C = k\beta^2 \frac{\partial^2 \ln Z}{\partial \beta^2} = k\beta^2 (\Delta E)^2 \quad (23)$$

και

$$X = \frac{1}{N} \frac{\partial \langle M \rangle}{\partial B} = \frac{\beta}{N} (\langle (M - \langle M \rangle)^2 \rangle) = \frac{\beta}{N} (\Delta M)^2 \quad (30)$$

υπολογίζουμε την ειδική θερμότητα και τη μαγνητική επιδεκτικότητα του μοντέλου μας.

#### ΣΤ. Σφάλματα Μετρήσεων

Τέλος, σημαντική πληροφορία για τις μετρήσεις που λαμβάνουμε από μια προσομοίωση Monte Carlo, είναι η γνώση "του σφάλματος" της μέτρησης. Υπάρχουν 2 ειδών σφάλματα, τα στατιστικά (τυχαία) και τα συστηματικά σφάλματα. Η αρχή του στατιστικού σφάλματος βρίσκετε στις θερμικές διακυμάνσεις γύρω από τη μέση τιμή και έχουν συνήθως κατά πολύ καλή προσέγγιση Gaussian κατανομή. Χαρακτηριστικό των στατιστικών σφαλμάτων είναι ότι εξαλείφονται αυξάνοντας τον αριθμό των μετρήσεων<sup>2</sup>. Από την άλλη μεριά τα συστηματικά σφάλματα οφείλονται σε κακή λειτουργία των μεθόδων που

<sup>1</sup> Κάτι που δεν θα ίσχυε στο θερμοδυναμικό όριο.

<sup>2</sup> Μειώνονται αντιστρόφως ανάλογα με την τετραγωνική ρίζα του μεγέθους του δείγματος.

χρησιμοποιούμε, όπως για παράδειγμα μια κακή γεννήτρια τυχαίων αριθμών. Συστηματικό σφάλμα θεωρείτε επίσης και το πεπερασμένο μέγεθος του πλέγματος για την προσομοίωση συνεχών μοντέλων ή ότι δεν περιμένουμε απεριόριστο χρόνο για να βρεθεί το σύστημα μας σε κατάσταση θερμικής ισορροπίας. Στην τελευταία περίπτωση αναγκαζόμαστε να επιλέξουμε ανάμεσα στον χρόνο που θα μας πάρει μια προσομοίωση για να εκτελεστεί και στη ακρίβεια των μετρήσεων. Η επιλογή συνήθως βρίσκεται κάπου στη μέση.

Σύμφωνα με την υπόθεση ότι η πηγή των σφαλμάτων στις μετρήσεις μας είναι οι θερμικές διακυμάνσεις προκύπτει ότι η πραγματική τιμή εκτιμάται από τη μέση τιμή του δείγματος και ότι το σφάλμα θα είναι το σφάλμα της μέσης τιμής. Έτσι για ένα δείγμα από ανεξάρτητες μετρήσεις ισχύει:

$$\langle O \rangle = \frac{1}{n} \sum_{i=0}^{n-1} O_i \quad (65)$$

και

$$(\delta O)^2 \equiv \sigma_O^2 = \frac{1}{n-1} \left\{ \frac{1}{n} \sum_{i=0}^{n-1} (O_i - \langle O \rangle)^2 \right\} = \frac{1}{n-1} (\langle O^2 \rangle - \langle O \rangle^2) \quad (66)$$

Όμως σε μια προσομοίωση Monte Carlo, οι μετρήσεις είναι συσχετισμένες θεωρητικά μέχρι τον χρόνο αυτοσυσχετισμού  $\tau$ . Αποδεικνύεται ότι σε αυτήν την περίπτωση το σφάλμα υπολογίζεται από την σχέση:

$$(\delta O)^2 = \frac{1 + 2\tau}{n-1} (\langle O^2 \rangle - \langle O \rangle^2) \quad (67)$$

Παρατηρούμε ότι για τον υπολογισμό του σφάλματος χρειαζόμαστε πρώτα να βρούμε τον χρόνο αυτοσυσχετισμού. Επίσης δεν γνωρίζουμε τα αποτελέσματα που θα έχει στον υπολογισμό του σφάλματος η πραγματική κατανομή των μετρήσεων, ιδιαίτερα αν η ποσότητα που μετράμε δεν είναι μια απλή τοπική ποσότητα όπως λ.χ. η ενέργεια. Για παράδειγμα μπορούμε να πάρουμε τη μαγνητική επιδεκτικότητα  $\chi$ . Αυτό προϋποθέτει τη μέτρηση των  $\langle m \rangle$  και  $\langle m^2 \rangle$  (ή ακόμα καλύτερα την ποσότητα  $(m_i - \langle m \rangle)$  πάνω σε κάθε διάταξη  $i$  και δεν μπορεί να οριστεί πάνω σε μία μόνο διάταξη των spin. Αν υπολογίσουμε τις παραπάνω ποσότητες αφού συγκεντρώσουμε το δείγμα μπαίνει το ερώτημα πως θα υπολογιστεί το σφάλμα  $\delta\chi$ . Αυτό δεν είναι απλή συνάρτηση των  $\delta\langle m \rangle$  και  $\delta\langle m^2 \rangle$  λόγω του συσχετισμού των δύο ποσοτήτων<sup>1</sup>. Για να αντιμετωπίσουμε αυτό το πρόβλημα και να μπορέσουμε να πάρουμε μια καλή εκτίμηση των σφαλμάτων στα μεγέθη όπως η μαγνητική επιδεκτικότητα και η ειδική θερμότητα, καταφεύγουμε σε άλλες μεθόδους.

Υπάρχουν 3 βασικοί μέθοδοι υπολογισμού σφαλμάτων, αναφορικά είναι οι:

- α) Blocking ή Binning Method
- β) Bootstrap Method
- γ) Jackknife Method

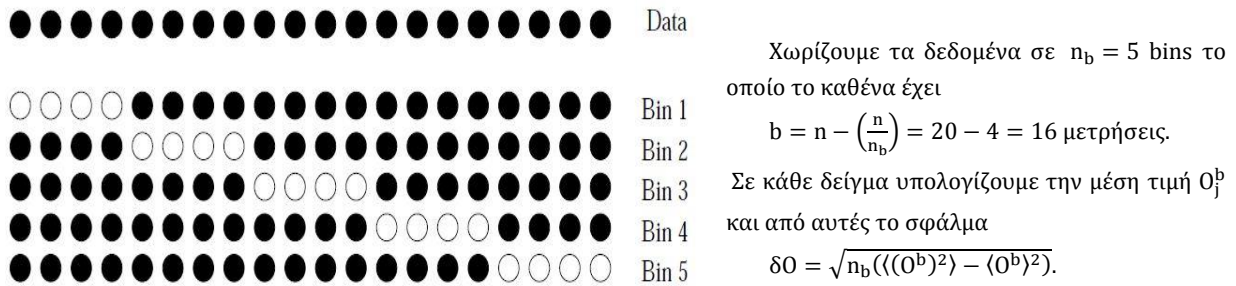
Η βασική ιδέα των μεθόδων είναι να χωρίσουμε τα δεδομένα μας, σε ομάδες και από κάθε ομάδα να βγάζουμε την μέση τιμή του μεγέθους που μας ενδιαφέρει. Στην συνέχεια υπολογίζουμε τη μέση τιμή του μεγέθους, από όλες τις

<sup>1</sup> Δεν ισχύει ο τύπος διάδοσης των σφαλμάτων.

ομάδες που έχουμε φτιάξει. Το πρόβλημα που αντιμετωπίζουμε κυρίως είναι η εκτίμηση του μεγέθους των ομάδων που θα φτιάξουμε για να χωρίσουμε τα δεδομένα μας. Στην εργασία, χρησιμοποιούμε την μέθοδο Jackknife (προτάθηκε από τους Quenouille and Tukey, 1956-1957), ή οποία είναι πιο διαδεδομένη σε αυτού του είδους εφαρμογές. Σε αυτήν την μέθοδο, χωρίζουμε τα δεδομένα μας σε  $n_b$  bins τα οποία περιέχουν από  $b = n - (n/n_b)$  στοιχεία ως εξής: Το bin  $j$  προκύπτει από τα αρχικά δεδομένα  $O_0, \dots, O_n$  αν διαγράψουμε τα περιεχόμενα του  $j$  καλάθι της μεθόδου. Σε κάθε bin υπολογίζουμε τη μέση τιμή της  $O$ . Προκύπτουν τότε οι μέσες τιμές  $O_0^b, O_1^b, \dots, O_{n_b-1}^b$ . Τότε το σφάλμα της μέτρησης είναι:

$$(\delta O)^2 = \sum_{j=0}^{n_b-1} (O_j^b - \langle O^b \rangle)^2 = n_b (\langle (O^b)^2 \rangle - \langle O^b \rangle^2) \quad (68)$$

Τα καλάθια είναι στην πράξη στατιστικά ανεξάρτητα όταν  $b \sim 2\tau_0$ . Αν δεν γνωρίζουμε τον  $\tau_0$  υπολογίζουμε επανειλημμένα το σφάλμα (68) μειώνοντας διαδοχικά τον αριθμό των καλάθιων  $n_b$ . Όταν το σφάλμα παύει να αυξάνεται και πάρει σταθερή τιμή, τότε θεωρούμε πως η μέθοδος συγκλίνει στη σωστή τιμή.



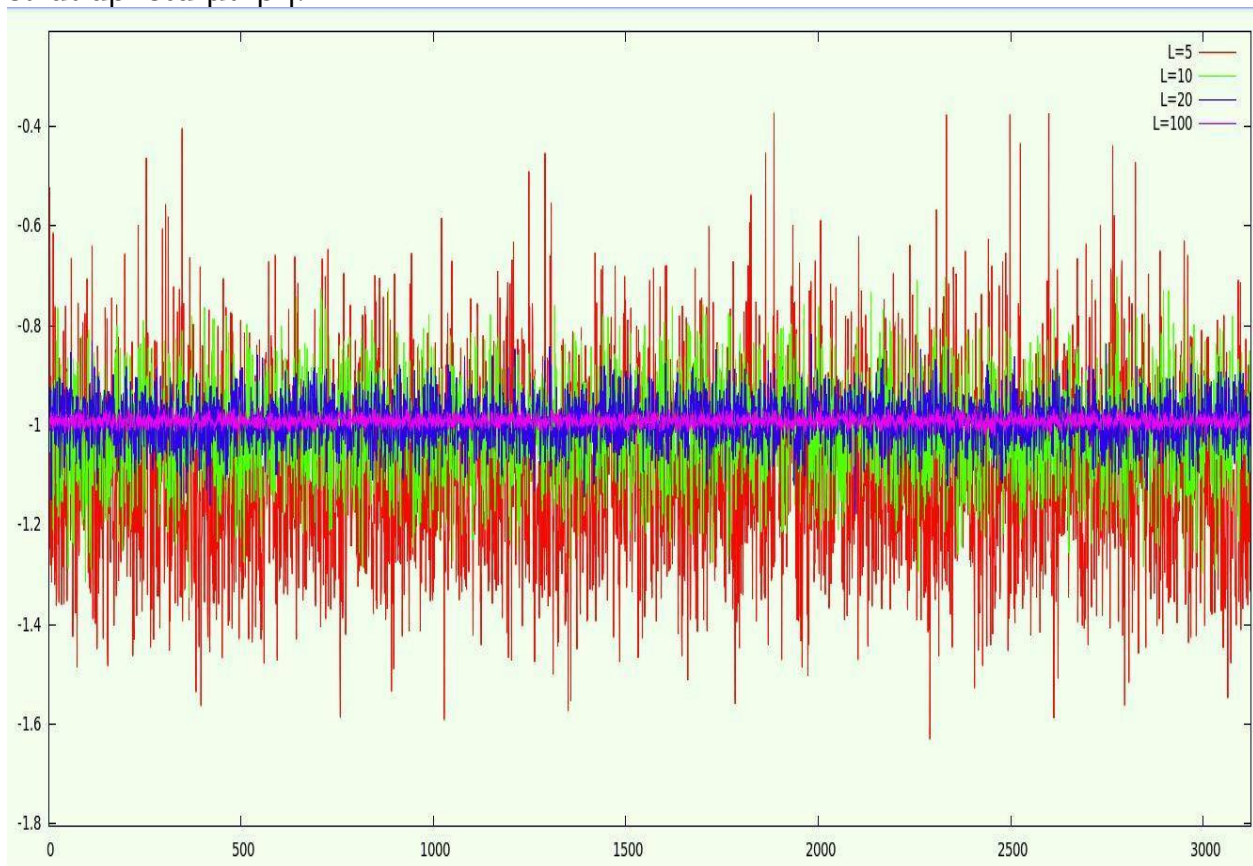
Εικόνα 23. Η μέθοδος Jackknife για ένα δείγμα από  $n=20$  μετρήσεις. [1]



## 8. Επεξεργασία Μετρήσεων.

Οι προσομοιώσεις που κάνουμε για να μελετήσουμε το μοντέλο πραγματοποιούνται με πολλές διαφορετικές παραμέτρους, με σημαντικότερη την αλλαγή του μεγέθους του πλέγματος. Χρησιμοποιήσαμε λοιπόν διαφορετικά μεγέθη πλέγματος έτσι ώστε να πάρουμε μια εικόνα για την συμπεριφορά του μοντέλου σε σχέση με το μέγεθος του πλέγματος, όπως και επίσης να μειώσουμε όσο μπορούμε τα σφάλματα λόγω πεπερασμένου μεγέθους του πλέγματος (*finite size effects*) αλλά και να βγάλουμε χρήσιμες σχέσεις για τη συμπεριφορά του μοντέλου στο θερμοδυναμικό όριο (*finite size scaling*). Έτσι πήραμε μετρήσεις για μεγέθη πλέγματος  $L= 8,20,40,50,60,80,100$  και  $200$ .

Παρατηρούμε ότι όσο μεγαλύτερο είναι το μέγεθος του πλέγματος, τόσο μικρότερες είναι οι διακυμάνσεις της ενέργειας του συστήματος σύμφωνα και με την σχέση  $\frac{\Delta E}{E} \sim \frac{1}{\sqrt{N}}$ . Χαρακτηριστικό είναι το παρακάτω γράφημα (εικόνα 25). Η εικόνα αυτή είναι λογική εφόσον με τον αλγόριθμο Metropolis, η μεταβολή ενός spin σε ένα μικρό πλέγμα έχει μεγάλη επίδραση στην ενέργεια του συστήματος, αντίθετα με την περίπτωση που θα είχαμε αν το πλέγμα ήταν μεγάλο, όπου η συνεισφορά της μεταβολής ενός spin στην συνολική ενέργεια του συστήματος είναι αρκετά μικρή.



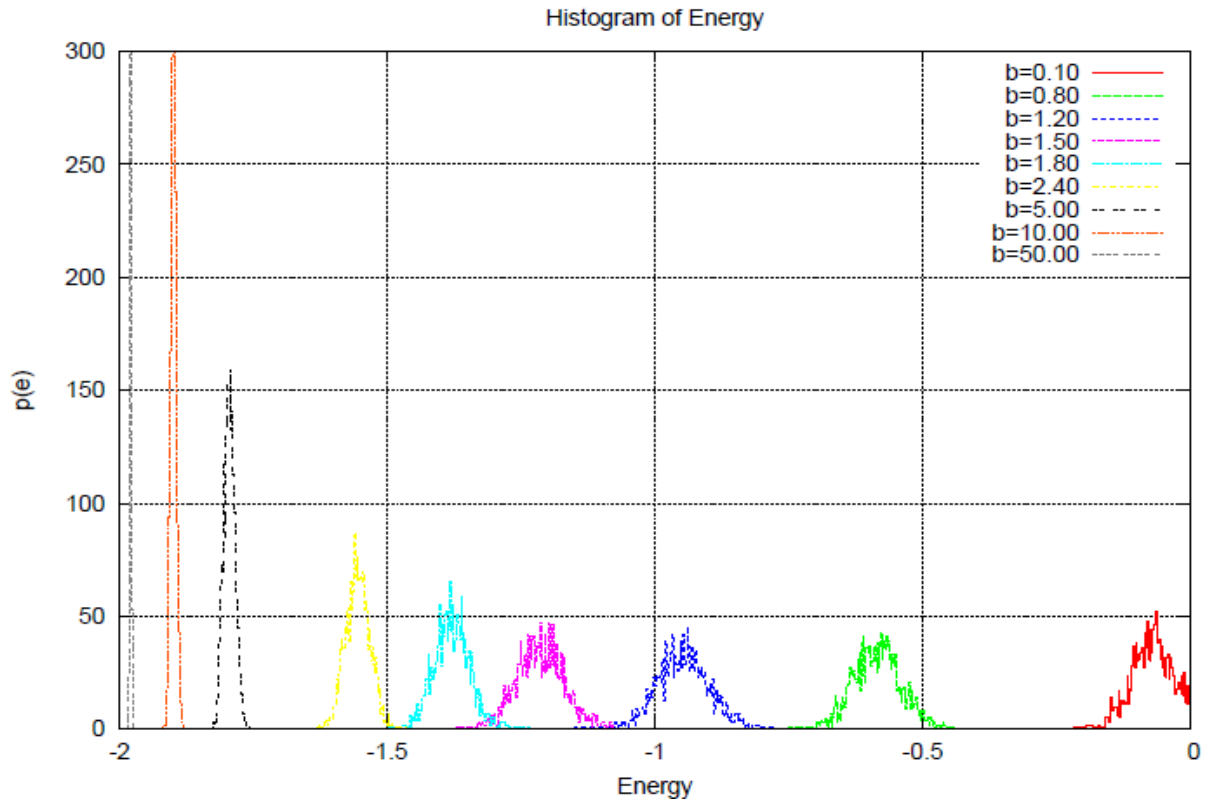
Εικόνα 24. Γράφημα της ενέργειας ανά πλεγματική θέση (spin) για διάφορα μεγέθη πλέγματος. ( $\beta=1,25$ ).

Ξεκινώντας λοιπόν από μια υψηλή θερμοκρασία ( $\beta=0,001$ ) και σταδιακά μειώνοντας την έως την τιμή  $\beta=1000$ , καταγράφουμε για κάθε θερμοκρασία την ενέργεια ανά δεσμό  $e$  και την μαγνήτιση ανά spin  $m$  (μέσες τιμές). Προσέχουμε να μην συμπεριλάβουμε στον υπολογισμό των μέσων τιμών, τις μετρήσεις οι οποίες "ανήκουν" στο thermalization time, δηλαδή τις μετρήσεις μέχρι να φθάσει το σύστημα μας σε κατάσταση θερμοκίνησης ισορροπίας, καθώς επίσης οι μετρήσεις που καταγράφουμε να είναι ανεξάρτητες. Σημειώνουμε ότι αποθηκεύουμε την διάταξη των spins μετά το τέλος της κάθε μέτρησης και συνεχίζουμε από αυτήν την

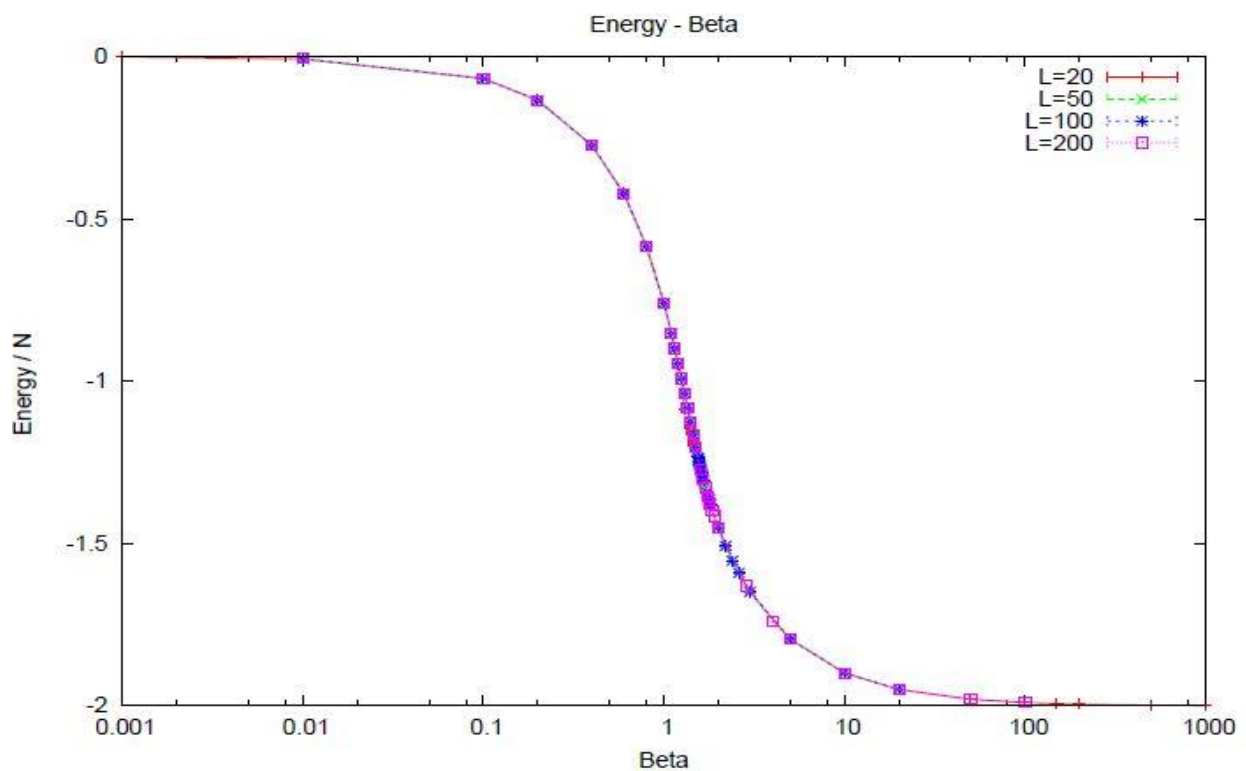
διάταξη για το υπολογισμό της καινούριας μέτρησης στην αμέσως επόμενη θερμοκρασία που μας ενδιαφέρει. Με αυτόν τον τρόπο ελαχιστοποιούμε τον χρόνο για να βρεθεί το σύστημα μας πάλι σε κατάσταση θερμικής ισορροπίας.

### 8.1 Ενέργεια του Συστήματος

Φτιάχνουμε τα ιστογράμματα της ενέργειας σε σχέση με την θερμοκρασία καθώς και το γράφημα της εξάρτησης της τιμής της ενέργειας από θερμοκρασία.



Εικόνα 25. Ιστογράμματα της ενέργειας σε σχέση με την θερμοκρασία.

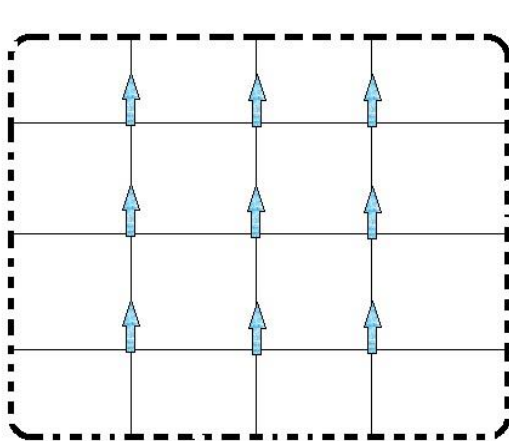


Εικόνα 26. Γραφική παράσταση της εξάρτησης της ενέργειας του συστήματος σε σχέση με την θερμοκρασία, για διάφορα μεγέθη πλέγματος.

Στην εικόνα 26, παρατηρούμε γκαουσιανές κατανομές για τις ενέργειες του συστήματος οι κορυφές των οποίων “κινούνται” από τα αριστερά του άξονα της ενέργειας προς τα δεξιά καθώς αυξάνεται η θερμοκρασία (μειώνεται το  $\beta$ ).

Από την εικόνα 27, βλέπουμε ότι η συμπεριφορά του συστήματος δεν επηρεάζεται από το μέγεθος του πλέγματος. Επίσης βλέπουμε μια ομαλή μετάβαση της ενέργειας, από τις υψηλές θερμοκρασίες προς τις χαμηλές, κάτι που υποδηλώνει την μη ύπαρξη μετάβασης φάσης όπως θα δούμε και στα επόμενα διαγράμματα της μαγνήτισης (παράμετρος τάξης). Τα σφάλματα των μετρήσεων, είναι τόσο μικρά έτσι ώστε καλύπτονται, από τα ίδια τα σημεία.

Παρατηρούμε ότι για υψηλές θερμοκρασίες ( $\beta=0.001$ ) το σύστημα μας έχει την μεγαλύτερη τιμή ενέργειας ενώ παρουσιάζει την ελάχιστη για μικρές θερμοκρασίες ( $\beta=1000$ ). Αυτό εξηγείται από την φύση του συστήματος όπου για μικρές θερμοκρασίες, όπως αναφέραμε, όλα τα spins του πλέγματος τείνουν να ευθυγραμμιστούν ομόρροπα έτσι ώστε να έχουμε την ελάχιστη ενέργεια (θεμελιώδης ενέργεια). Η ελάχιστη ενέργεια προσομοιώνεται σωστά στην τιμή  $-2$  ανά spin, εφόσον από την σχέση της Χαμιλτονιανής για όλα τα spins ομόρροπα υπολογίζεται εύκολα αυτή η τιμή.



Εικόνα 27. Διάταξη των spins στη θεμελιώδη κατάσταση

$$H = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \vec{s}_i \cdot \vec{s}_j \quad (69)$$

,όπου

$$\sum_{\langle i,j \rangle} \vec{s}_i \cdot \vec{s}_j = 1 \text{ και } J_{ij} = 1$$

για όλα τα γειτονικά ζευγάρια. Έτσι τελικά

$$H = -2N \Leftrightarrow \frac{H}{N} = -2,$$

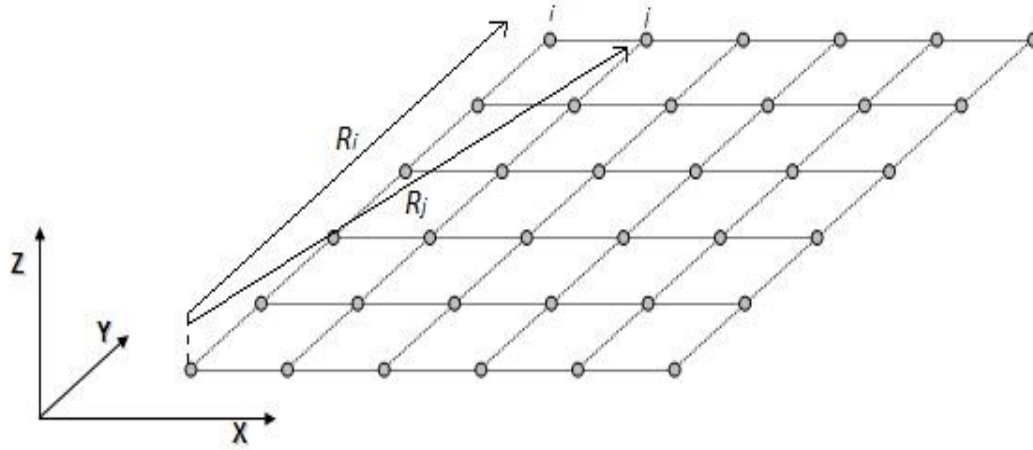
όπου  $N$  ο αριθμός των spins.

Σημαντικό είναι να αναφέρουμε ότι όπως θα δούμε παρακάτω, οι τιμές της ενέργειας για  $\beta > 1.80$  παρουσιάζουν προβλήματα λόγω πεπερασμένου μεγέθους του πλέγματος και δεν θα πρέπει να λαμβάνονται υπ' όψιν.

## 8.2 Θεμελιώδης Κατάσταση – Ground State [\[10\]](#)

Η θεμελιώδης κατάσταση λαμβάνεται ελαχιστοποιώντας την Χαμιλτονιανή  $H$  του συστήματος.

Θεωρούμε ένα πλέγμα (Bravais)  $\{\mathbf{R}_i\}$  με  $J_{ij}$  να εξαρτάται μόνο από το διάνυσμα  $J_{ij} = J_{ji} = J(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)$ .



Εικόνα 28. Πλέγμα Bravais σε 2-διαστάσεις

Ορίζουμε τον μετασχηματισμό Fourier

$$S_q := \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_i e^{-iqR_i} S_i \quad (70)$$

,όπου  $N$  είναι ο αριθμός των σημείων του πλέγματος. Επομένως

$$S_i = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_q e^{iqR_i} S_q \quad (71)$$

,όπου το άθροισμα πραγματοποιείται στην πρώτη ζώνη *Brillouin*. Αντικαθιστώντας στην Χαμιλτονιανή γράφουμε

$$\begin{aligned} H &= -\frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} \sum_{ij} \underbrace{J(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)}_{\Delta\mathbf{R}} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}_i} e^{i\mathbf{q}'\cdot\mathbf{R}_j} S_{\mathbf{q}} \cdot S_{\mathbf{q}'} \\ &= -\frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} \sum_{\Delta\mathbf{R}} J(\Delta\mathbf{R}) \underbrace{\sum_{\mathbf{R}_i} e^{i(\mathbf{q}+\mathbf{q}')\cdot\mathbf{R}_i}}_{N\delta_{\mathbf{q}+\mathbf{q}',0}} e^{i\mathbf{q}\cdot\Delta\mathbf{R}} S_{\mathbf{q}} \cdot S_{\mathbf{q}'} \\ &= -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q}} \sum_{\Delta\mathbf{R}} \underbrace{e^{-i\mathbf{q}\cdot\Delta\mathbf{R}} J(\Delta\mathbf{R})}_{=: J(\mathbf{q})} S_{\mathbf{q}} \cdot S_{-\mathbf{q}} \\ &= -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q}} J(\mathbf{q}) S_{\mathbf{q}} \cdot S_{-\mathbf{q}} \end{aligned} \quad (72)$$

Το  $J(\mathbf{q})$  είναι πραγματικός και άρτιος αφού  $J(\Delta\mathbf{R})$  είναι πραγματικός και άρτιος. Το  $S_{\mathbf{q}}$  πρέπει να ικανοποιεί την συνθήκη κανονικοποίησης ως προς το  $S_i$ :

$$S^2 = S_i \cdot S_i = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} e^{i(\mathbf{q}+\mathbf{q}')\cdot\mathbf{R}_i} S_{\mathbf{q}} \cdot S_{\mathbf{q}'} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} e^{i(\mathbf{q}-\mathbf{q}')\cdot\mathbf{R}_i} S_{\mathbf{q}} \cdot S_{-\mathbf{q}'} \quad (73)$$

Υποθέτουμε  $Q$  κυματοδιάνυση (*wavevector*) για το οποίο το  $J(q)$  παρουσιάζει ολικό μέγιστο (*global maximum*). Αναμένουμε χωρίς να το αποδεικνύουμε αυστηρά ότι η  $H$  ελαχιστοποιείται αν  $S_Q \neq 0$  και  $S_{-Q} \neq 0$  και για όλα τα άλλα  $S_q = 0$  για  $q \neq \pm Q$ .

*Περίπτωση 1:*  $Q = 0$ , οπότε  $S_i = N^{-1/2} S_{Q=0}$  για όλα τα  $i$ . Παίρνουμε ένα ομογενές πολωμένο σύστημα, π.χ. σιδηρομαγνητικό.

*Περίπτωση 2:*  $Q \neq 0$ . Η συνθήκη (73) γράφεται:

$$S^2 = \frac{1}{N} (2S_Q \cdot S_{-Q} + e^{2iQ\mathbf{R}_i} S_Q \cdot S_Q + e^{-2iQ\mathbf{R}_i} S_{-Q} \cdot S_{-Q}) \quad (74)$$

για όλα τα  $\mathbf{R}_i$ . Το δεξί μέρος της παράστασης πρέπει να είναι ανεξάρτητο από τα  $\mathbf{R}_i$ . Έτσι παίρνουμε  $S_Q \cdot S_Q = S_{-Q} \cdot S_{-Q} = 0$ . Το  $S_Q$  όμως είναι μετασχηματισμός Fourier και άρα είναι γενικά μιγαδικός. Γράφουμε

$$S_Q = \mathbf{R}_Q + i\mathbf{I}_Q, \quad (\mathbf{R}_Q, \mathbf{I}_Q \in \mathbb{R}^3) \quad (75)$$

Αφού το  $S_i$  είναι πραγματικό, έχουμε

$$S_{-Q} = S_Q^* = \mathbf{R}_Q - i\mathbf{I}_Q \quad (76)$$

έτσι

$$S_Q \cdot S_{-Q} = \mathbf{R}_Q^2 + \mathbf{I}_Q^2 \quad (77)$$

και

$$S_Q \cdot S_Q = \mathbf{R}_Q^2 - i\mathbf{I}_Q^2 + 2i\mathbf{R}_Q \cdot \mathbf{I}_Q = 0 \quad (78)$$

Έτσι

$$\mathbf{R}_Q^2 = \mathbf{I}_Q^2 \text{ και } \mathbf{R}_Q \cdot \mathbf{I}_Q = 0 \quad (79)$$

Αποδεικνύοντας έτσι ότι τα πραγματικά και τα φανταστικά μέρη των  $S_Q$  είναι ορθογώνια διανύσματα ίσου μεγέθους. Επιπλέον

$$S^2 = \frac{1}{N} 2S_Q \cdot S_{-Q} = \frac{2}{N} (\mathbf{R}_Q^2 + \mathbf{I}_Q^2) \quad (80)$$

έτσι ώστε

$$\mathbf{R}_Q^2 = \mathbf{I}_Q^2 = \frac{NS^2}{4} \quad (81)$$

Η θεμελιώδης κατάσταση είναι

$$H_0 = -\frac{1}{2}J(Q)S_Q \cdot S_{-Q} - \frac{1}{2}J(-Q)S_{-Q} \cdot S_Q = -J(Q)(\mathbf{R}_Q^2 + \mathbf{I}_Q^2) = -J(Q)\frac{NS^2}{2} \quad (82)$$

Ο αντίστροφος μετασχηματισμός Fourier

$$\begin{aligned} S_i &= \frac{1}{\sqrt{N}}(e^{iQR_i}S_Q + e^{-iQR_i}S_{-Q}) = \\ &= \frac{1}{\sqrt{N}}[e^{iQR_i}(\mathbf{R}_Q + i\mathbf{I}_Q) + e^{-iQR_i}(\mathbf{R}_Q - i\mathbf{I}_Q)] = \\ &= \frac{2}{\sqrt{N}}(\mathbf{R}_Q \cos Q \cdot \mathbf{R}_i - \mathbf{I}_Q \sin Q \cdot \mathbf{R}_i) \end{aligned} \quad (83)$$

Ορίζοντας τα μοναδιαία διανύσματα  $\mathbf{R}_Q$  και  $\mathbf{I}_Q$ ,  $\hat{\mathbf{R}} := \frac{\mathbf{R}_Q}{|\mathbf{R}_Q|}$ ,  $\hat{\mathbf{I}} := \frac{\mathbf{I}_Q}{|\mathbf{I}_Q|}$  με  $\hat{\mathbf{R}} \cdot \hat{\mathbf{I}} = 0$ , παίρνουμε

$$S_i = S(\hat{\mathbf{R}} \cos Q \cdot \mathbf{R}_i - \hat{\mathbf{I}} \sin Q \cdot \mathbf{R}_i) \quad (84)$$

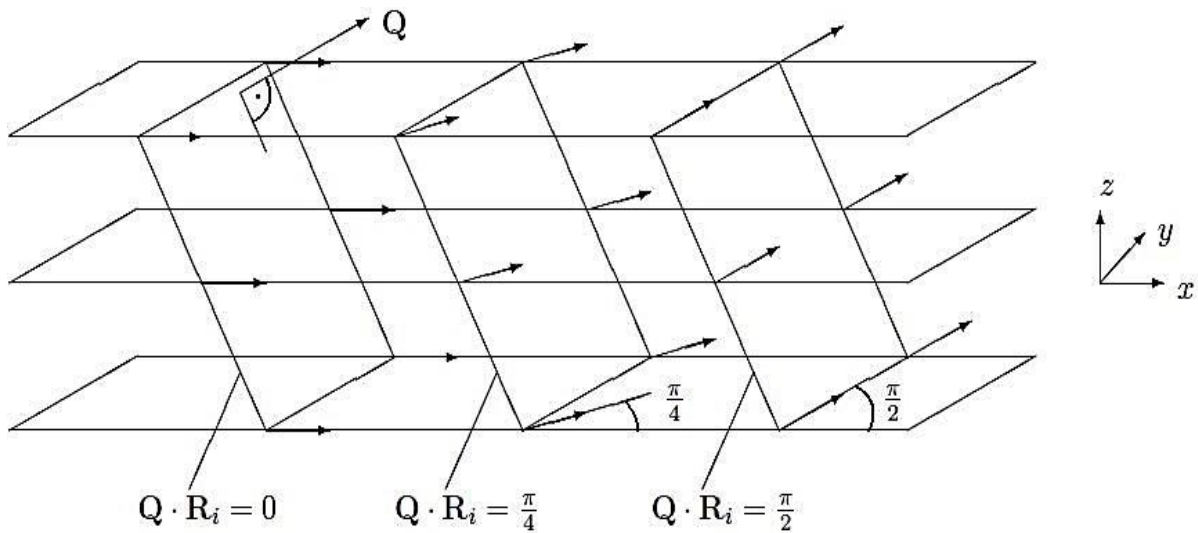
Πέρα από την συνθήκη  $\hat{\mathbf{R}} \perp \hat{\mathbf{I}}$ , οι διευθύνσεις του  $\hat{\mathbf{R}}$  και του  $\hat{\mathbf{I}}$  δεν καθορίζονται ελαχιστοποιώντας την  $H$ . Οποιαδήποτε επιλογή ελαχιστοποιεί την ενέργεια. Ανισοτροπικοί (*anisotropic*) όροι στην Χαμιλιτονιανή μπορούν μόνο να σπάσουν αυτόν τον εκφυλισμό.

Για παράδειγμα, διαλέγουμε τις συντεταγμένες των spin έτσι ώστε  $\hat{x} = \hat{\mathbf{R}}$ ,  $\hat{y} = -\hat{\mathbf{I}}$ . Τότε

$$\begin{aligned} S_i^x &= S \cos Q \cdot \mathbf{R}_i \\ S_i^y &= S \sin Q \cdot \mathbf{R}_i \\ S_i^z &= 0 \end{aligned} \quad (85)$$

Βλέπουμε ότι βρίσκουμε μια ελικοειδή κατάσταση (*helical state*), η οποία είναι συνεπίπεδη αλλά όχι συγγραμμική (*coplanar but not collinear*).

Σημειώνουμε ότι τα  $\hat{\mathbf{R}}, \hat{\mathbf{I}}$  μπορούν να είναι αυθαίρετα προσανατολισμένα στο  $Q$ . (Το  $Q$  είναι καθορισμένο από το  $J(q)$  έχοντας το μέγιστο του για  $q=Q$ ). Για παράδειγμα:

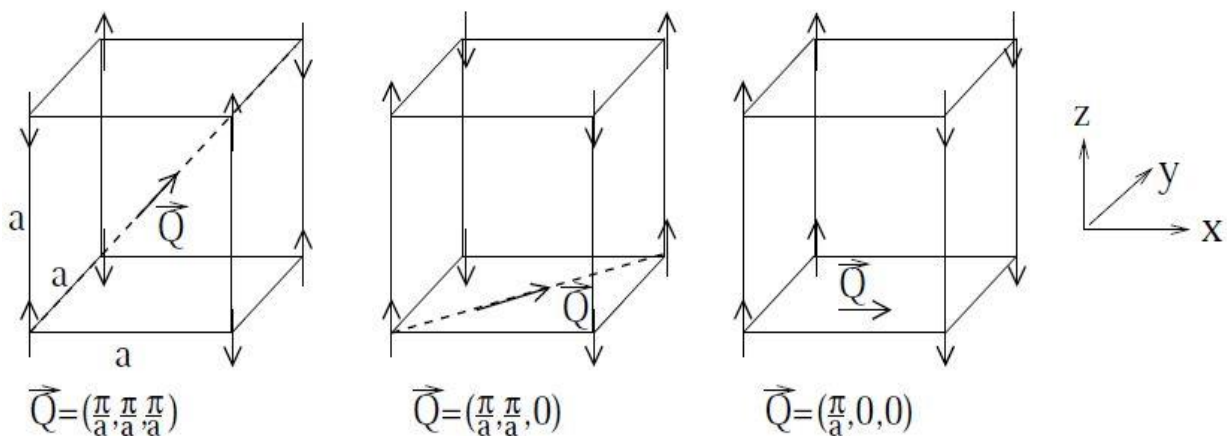


Εικόνα 29. Παραδείγματα της σχέσης μεταξύ του Q και R [10]

Σημειώνουμε ότι το  $S_i$  είναι σταθερό σε κάθε επίπεδο ορθογώνιο στο Q.

Αφού το Q είναι εκεί όπου μεγιστοποιείται το  $J(q)$ , δεν υπάρχει λόγος για το Q να παριστά ένα συγκεκριμένο (high symmetry) σημείο στην πρώτη Brillouin ζώνη. Έτσι η ελικοειδής διάταξη είναι γενικά ασύμμετρη (*incommensurate*). Συνεπώς το πλέγμα με ελικοειδή διάταξη δεν είναι αναλλοίωτο σε οποιαδήποτε μετασχηματισμό στο πραγματικό χώρο.

Από την άλλη μεριά, συχνά το Q είναι ένα ιδιαίτερο σημείο. Για  $Q=0$  έχουμε σιδηρομαγνητισμό (*ferromagnetism*). Για Q σε υψηλής συμμετρίας σημείο στα όρια της ζώνης Brillouin βρίσκουμε αντι-σιδηρομαγνητικά (*antiferromagnetic*) πλέγματα. Παραθέτουμε μερικά παραδείγματα για απλά κυβικά πλέγματα:



Εικόνα 30. Παραδείγματα κυβικών πλεγμάτων σε σχέση με το Q. [10]

### 8.3 **Αυθόρμητο Σπάσιμο Συμμετρίας–Spontaneous Symmetry Breaking** [21]

Το αυθόρμητο σπάσιμο συμμετρίας είναι μία πανταχού παρούσα έννοια στην σύγχρονη φυσική, και ειδικότερα στο τομέα της συμπυκνωμένης ύλης (*condensed matter*) και στη φυσική των στοιχειωδών σωματιδίων. Είναι ένα φαινόμενο όπου η θεμελιώδης Χαμιλτονιανή παρουσιάζει συμμετρία (και άρα μια ποσότητα διατηρείται σύμφωνα με το θεώρημα του Noether), αλλά η θεμελιώδης κατάσταση δεν παρουσιάζει συμμετρία. Υπάρχουν πολλά παραδείγματα στα οποία παρατηρούμε το φαινόμενο του αυθόρμητου σπασίματος της συμμετρίας, μερικά από τα οποία είναι: τα υπερ-ρευστά (*superfluid*), οι υπερ-αγωγοί (*superconductor*), ο σιδηρομαγνητισμός (*ferromagnet*) αλλά και σύμφωνα με το Καθιερωμένο Πρότυπο (*Standard Model*) των στοιχειωδών σωματιδίων, ολόκληρο το σύμπαν. Οι ιδιότητες όλων αυτών των μοντέλων έχουν 2 κοινά στοιχεία:

- α) Μακροσκοπική Συνοχή (*Macroscopic coherence*)
- β) Εκφυλισμένες θεμελιώδης καταστάσεις (*Degenerate ground states*).

Όπως έχουμε αναφέρει η Χαμιλτονιανή του μοντέλου Heisenberg, είναι συμμετρική ως προς τις περιστροφές. Αν στρέψουμε όλα τα spins κατά την ίδια ποσότητα, η Χαμιλτονιανή δεν αλλάζει. Η ποσότητα που διατηρείται, σύμφωνα με το θεώρημα του Noether, είναι το ολικό spin του συστήματος.

$$\vec{S}_{tot} = \sum_i \vec{s}_i \quad (86)$$

το οποίο αποδεικνύεται και από τον μεταθέτη  $[\vec{S}_{tot}, H] = 0$ .

Θεωρούμε τον τελεστή ο οποίος δρα πάνω στα spins και τα στρέφει κατά γωνία  $\vec{\theta}$ :

$$U(\vec{\theta}) = e^{i\vec{S}\cdot\vec{\theta}/\hbar} \quad (87)$$

Γράφουμε την Χαμιλτονιανή

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \left( s_i^z s_j^z + \frac{1}{2} (s_i^+ s_j^- + s_i^- s_j^+) \right) \quad (88)$$

,από την οποία εύκολα καταλαβαίνουμε ότι η κατάσταση στην οποία όλα τα spins είναι «πάνω»  $|\dots \uparrow\uparrow\dots\rangle$  είναι ιδιοκατάσταση της Χαμιλτονιανής.

Παρατηρούμε δηλαδή ότι ενώ η Χαμιλτονιανή είναι τελείως συμμετρική στην περιστροφή των spins, η θεμελιώδης κατάσταση της διαλέγει μια συγκεκριμένη διεύθυνση των spins, σπάζοντας έτσι την συμμετρία.



Υποθέτουμε μια αλυσίδα spins του μοντέλου Heisenberg (1-D), για να απλοποιήσουμε λιγάκι τις μαθηματικές εκφράσεις του μοντέλου υποθέτοντας όμως ότι τα ίδια συμπεράσματα ισχύουν και στο 2D μοντέλο<sup>1</sup>. Η ιδιοτιμή της ενέργειας είναι

$$H|\uparrow \dots \uparrow\rangle = -JN \left(\frac{\hbar}{2}\right)^2 \quad (89)$$

επειδή υπάρχουν  $N$  ζευγάρια γειτονικών spins στα  $N$  spins της αλυσίδας. Αυτή είναι πράγματι μια θεμελιώδης κατάσταση του συστήματος. Το ολικό spin της κατάστασης αυτής είναι λοιπόν  $N\hbar/2$  και ως εκ τούτου έχει πολλαπλότητα  $N+1$ . Αυτή αντιστοιχεί στους διαφορετικούς προσανατολισμούς του spin  $N/2$ . Καθώς το  $N \rightarrow \infty$ , υπάρχουν τόσοι πολλοί πιθανοί προσανατολισμοί κοντά ο ένας στον άλλον, ώστε είναι σαν έχουμε μια συνεχής κλασική στροφορμή. Αν εκφράσουμε μαθηματικά τον προσανατολισμό των spins (*orientation vector*) με  $\vec{n} = \vec{S}_{tot}/(N/2)$ , τότε έχουμε για τον μεταθέτη

$$[n^i, n^j] = \frac{1}{(N/2)^2} [S^i, S^j] = \frac{1}{(N/2)^2} i\hbar \epsilon^{ijk} n^k \quad (90)$$

Καθώς το  $N \rightarrow \infty$ , είναι το ίδιο σαν να ήταν  $\hbar \rightarrow 0$ , και άρα το διάνυσμα του προσανατολισμού των spins συμπεριφέρεται σαν είναι κλασικό.

Ένα κριτήριο για το κλασικό διάνυσμα spin είναι ότι πρέπει να έχει άπειρους προσανατολισμούς. Ξεκινώντας από την κατάσταση στην οποία έχουμε όλα τα spins «πάνω», πραγματοποιούμε πεπερασμένες περιστροφές όλων των spin χρησιμοποιώντας τον τελεστή  $U(\vec{\theta})$  (σχ.87)

$$e^{i\vec{s}\cdot\vec{\theta}/\hbar} = e^{i\vec{\sigma}\cdot\vec{\theta}/2} = \cos \frac{|\vec{\theta}|}{2} + i\vec{\sigma} \cdot \frac{\vec{\theta}}{|\vec{\theta}|} \sin \frac{|\vec{\theta}|}{2} \quad (91)$$

Βρίσκουμε,

$$e^{i\vec{\sigma}\cdot\vec{\theta}/2} |\uparrow\rangle = \cos \frac{|\vec{\theta}|}{2} |\uparrow\rangle + i \sin \frac{|\vec{\theta}|}{2} \left( \frac{\theta_z}{|\vec{\theta}|} |\uparrow\rangle + \frac{\theta_x + i\theta_y}{|\vec{\theta}|} |\downarrow\rangle \right) \quad (92)$$

Ως εκ τούτου,

$$\langle \dots \uparrow \uparrow \dots | U(\theta) | \dots \uparrow \uparrow \dots \rangle = \lim_{N \rightarrow \infty} \left( \cos \frac{|\vec{\theta}|}{2} + i \frac{\theta_z}{|\vec{\theta}|} \sin \frac{|\vec{\theta}|}{2} \right)^N \quad (93)$$

---

<sup>1</sup> Γενικά τα 1D μοντέλα δεν παρουσιάζουν αυθόρμητο σπάσιμο συμμετρίας χάρη στις μακράς εμβέλειας κβαντομηχανικές αλληλεπιδράσεις (*long-range quantum fluctuations*). (Θεώρημα Mermin-Wagner στη φυσική συμπυκνωμένης ύλης)

Οι όροι στην παρένθεση, παρατηρούμε ότι έχουν μέτρο μικρότερο της μονάδας για κάθε περίπτωση εκτός της  $\vec{\theta} \parallel z$ ,

$$\left| \cos \frac{|\vec{\theta}|}{2} + i \frac{\theta_z}{|\vec{\theta}|} \sin \frac{|\vec{\theta}|}{2} \right|^2 = 1 - \frac{\theta_x^2 + \theta_y^2}{|\vec{\theta}|^2} \sin^2 \frac{|\vec{\theta}|}{2} < 1 \quad (94)$$

Και το όριο είναι μηδέν.

Τελικά καταλήγουμε στο συμπέρασμα, ότι η περιστροφή μιας θεμελιώδης κατάστασης καταλήγει σε μια διαφορετική θεμελιώδης κατάσταση  $U(\theta)|\dots \uparrow \uparrow \dots\rangle$  η οποία είναι ορθογώνια στην αρχική κατάσταση. Υπάρχουν άπειρες θεμελιώδης καταστάσεις συσχετισμένες μεταξύ τους με περιστροφή.

Ενώ λοιπόν έχουμε γενικά για την Χαμηλιονιανή ότι είναι αναλλοίωτη σε μετασχηματισμούς περιστροφών  $U$ :

$$UHU^{-1} = H \quad (95)$$

η θεμελιώδης κατάσταση δεν είναι,

$$U|0\rangle \neq |0\rangle \quad (96)$$

Αυτό το φαινόμενο ονομάζεται αυθόρμητο σπάσιμο συμμετρίας.

Όταν η συμμετρία του συστήματος η οποία σπάει αυθόρμητα είναι συνεχής, τότε έχουμε άπειρες θεμελιώδης καταστάσεις, ενώ αντίθετα όταν η συμμετρία είναι διακριτή, όπως στο μοντέλο Ising, υπάρχουν πεπερασμένου πλήθους θεμελιώδης καταστάσεις.

Στην περίπτωση του αυθόρμητου σπασίματος συνεχής συμμετρίας, υπάρχει πάντα μια χαμηλή διέγερση της οποίας η ενέργεια  $E(\vec{p})$  δεν παρουσιάζει χάσμα  $E(\vec{p}) \rightarrow 0$  καθώς η ορμή του πλησιάζει την τιμή μηδέν,  $\vec{p} \rightarrow 0$ .

Υποθέτουμε μια κατάσταση

$$|k\rangle = \sum_n |\dots \uparrow \dots \downarrow_n \dots \uparrow \dots\rangle e^{ikna} \quad (97)$$

,όπου  $a$  είναι η σταθερά του πλέγματος και  $k$  είναι το κυματο-διάνυσμα. Αν μεταβούμε στον χώρο της σταθεράς του πλέγματος,  $e^{ipa/\hbar}$ , η κατάσταση μας γράφεται

$$\begin{aligned}
e^{ipa/\hbar}|k\rangle &= \sum_n |\dots \uparrow \dots \downarrow_{n-1} \dots \uparrow \dots\rangle e^{ikna} \\
&= \sum_n |\dots \uparrow \dots \downarrow_n \dots \uparrow \dots\rangle e^{ik(n+1)a} = \\
&= e^{ika}|k\rangle
\end{aligned} \tag{98}$$

Επομένως, αυτή η κατάσταση έχει μια πεπερασμένη ορμή  $p = \hbar k$ . Η ενέργεια της κατάστασης αυτής είναι:

$$H|k\rangle = -J \sum_m \left( s_m^z s_{m+1}^z + \frac{1}{2} (s_m^+ s_{m+1}^- + s_m^- s_{m+1}^+) \right) \sum_n |\dots \uparrow \dots \downarrow_n \dots \uparrow \dots\rangle e^{ikna} \tag{99}$$

Οι όροι  $s_i^z s_j^z$  δίνουν

$$\begin{aligned}
&-J \sum_m s_m^z s_{m+1}^z \sum_n |\dots \uparrow \dots \downarrow_n \dots \uparrow \dots\rangle e^{ikna} = \\
&= -J \left( (N-2) \left( \frac{\hbar}{2} \right)^2 + 2 \left( \frac{\hbar}{2} \right) \left( -\frac{\hbar}{2} \right) \right) |k\rangle
\end{aligned} \tag{100}$$

Αντίστοιχα για του άλλους όρους έχουμε,

$$\begin{aligned}
&-J \sum_m \frac{1}{2} (s_m^+ s_{m+1}^- + s_m^- s_{m+1}^+) \sum_n |\dots \uparrow \dots \downarrow_n \dots \uparrow \dots\rangle e^{ikna} = \\
&= -J \sum_m \frac{\hbar^2}{2} \left( |\dots \uparrow \dots \downarrow_{m+1} \dots \uparrow \dots\rangle e^{ikma} + |\dots \uparrow \dots \downarrow_{m-1} \dots \uparrow \dots\rangle e^{ikma} \right) = \\
&= -J \frac{\hbar^2}{2} (e^{-ika} + e^{ika}) |k\rangle
\end{aligned} \tag{101}$$

Αντικαθιστώντας καταλήγουμε στην σχέση,

$$H|k\rangle = -J \left( N \frac{\hbar^2}{4} + \hbar^2 (\cos ka - 1) \right) |k\rangle \tag{102}$$

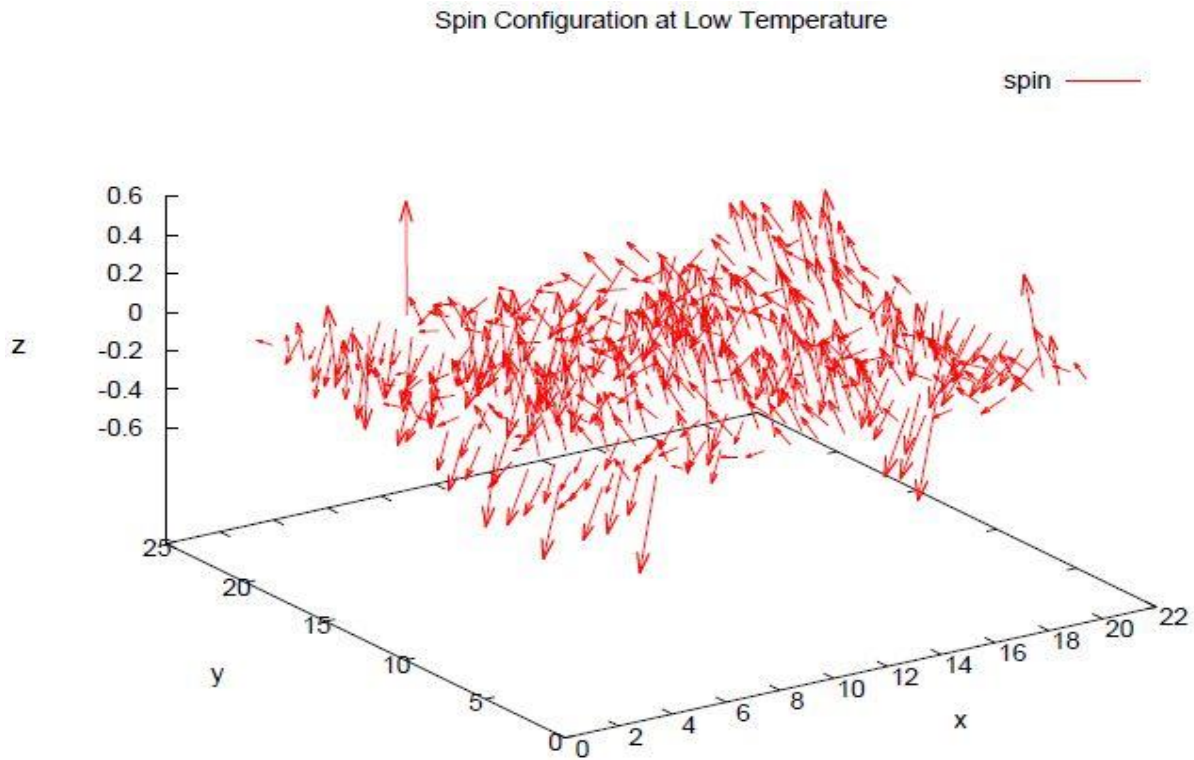
Και άρα η ενέργεια διέγερσης είναι

$$E(k) = J(1 - \cos ka) \tag{103}$$

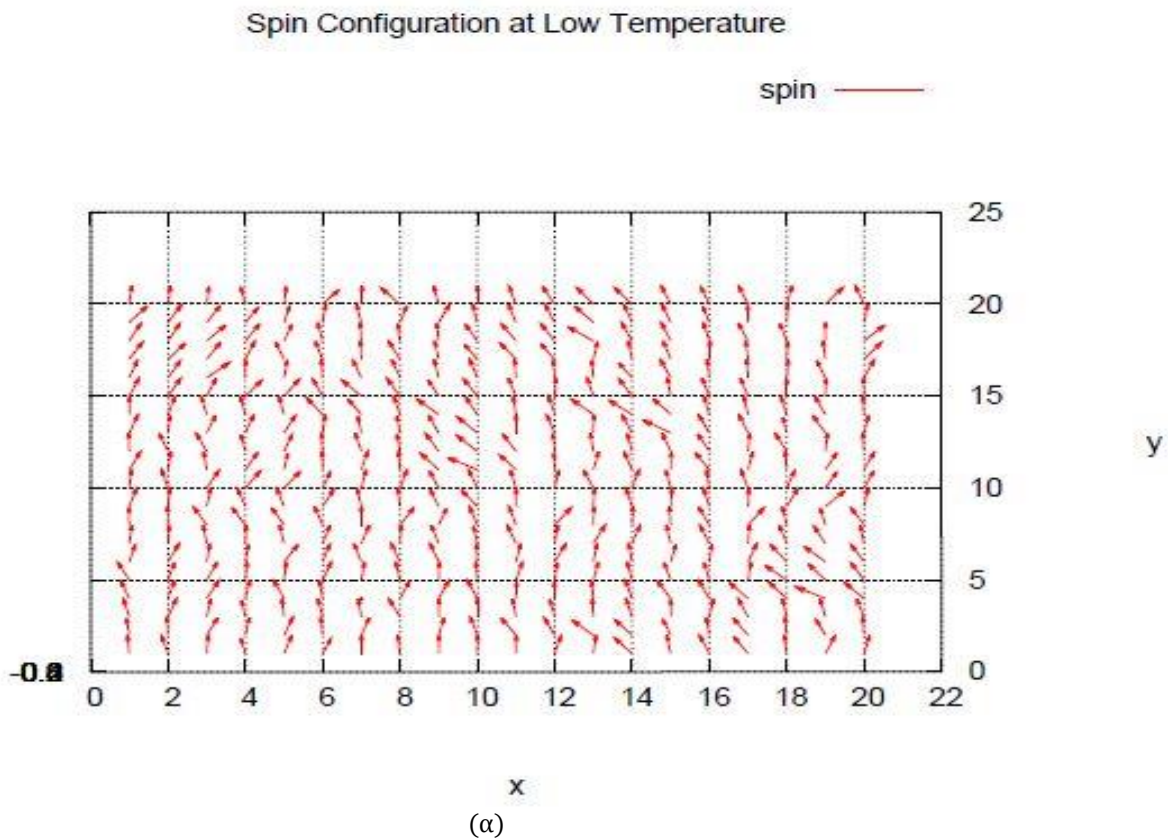
Από την παραπάνω σχέση βλέπουμε δηλαδή τελικά ότι η ενέργεια διέγερσης πηγαίνει ομαλά προς το μηδέν, χωρίς χάσμα, καθώς η ορμή πηγαίνει στο μηδέν.

Χαρακτηρίστηκες είναι οι παρακάτω εικόνες του πλέγματος ( $L=20 \times 20$ ) για χαμηλή θερμοκρασία, όπου παρατηρούμε την επιλογή της διεύθυνσης των spins

προς την διεύθυνση του  $y$  άξονα χωρίς να παρατηρούμε όμως αυθόρμητο σπάσιμο συμμετρίας στις θερμοκρασίες που μπορούμε να προσομοιώσουμε<sup>1</sup>.

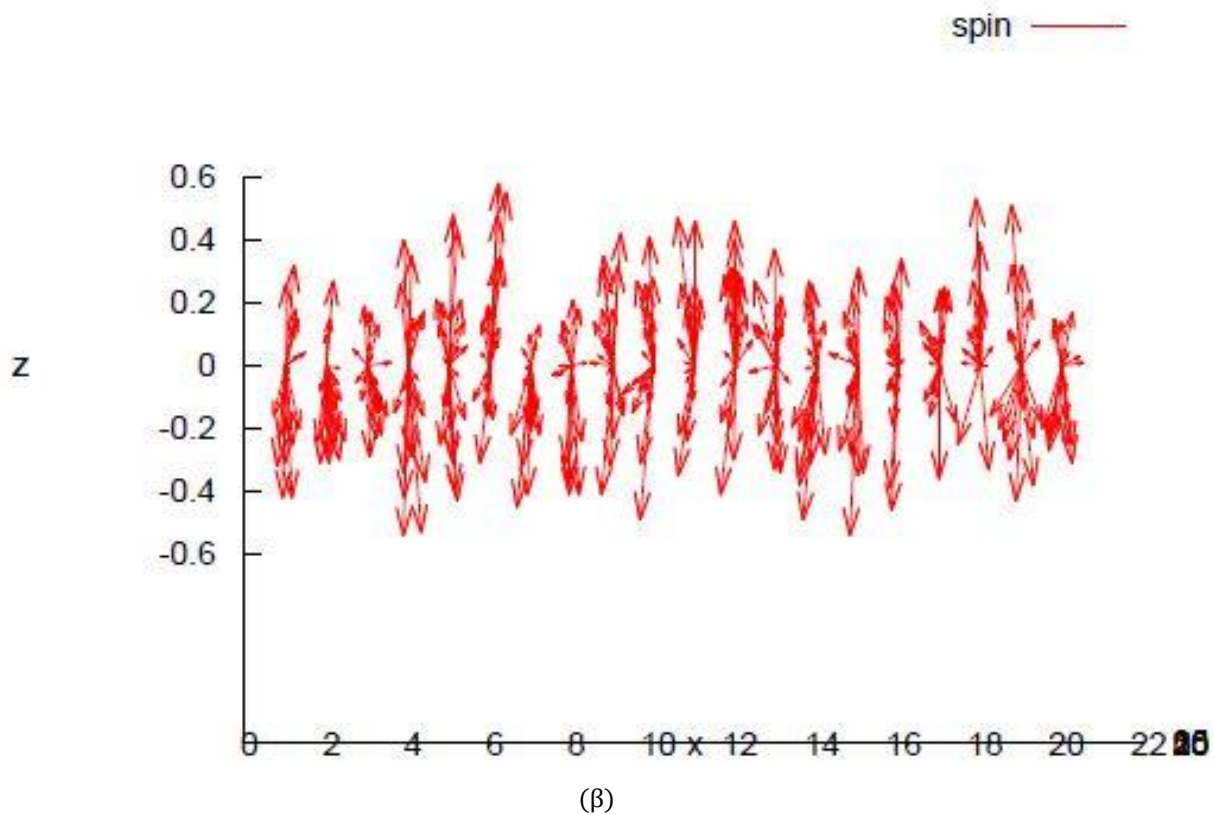


Εικόνα 31. Η διάταξη των spins σε ένα πλέγμα 20x20 για χαμηλή θερμοκρασία.

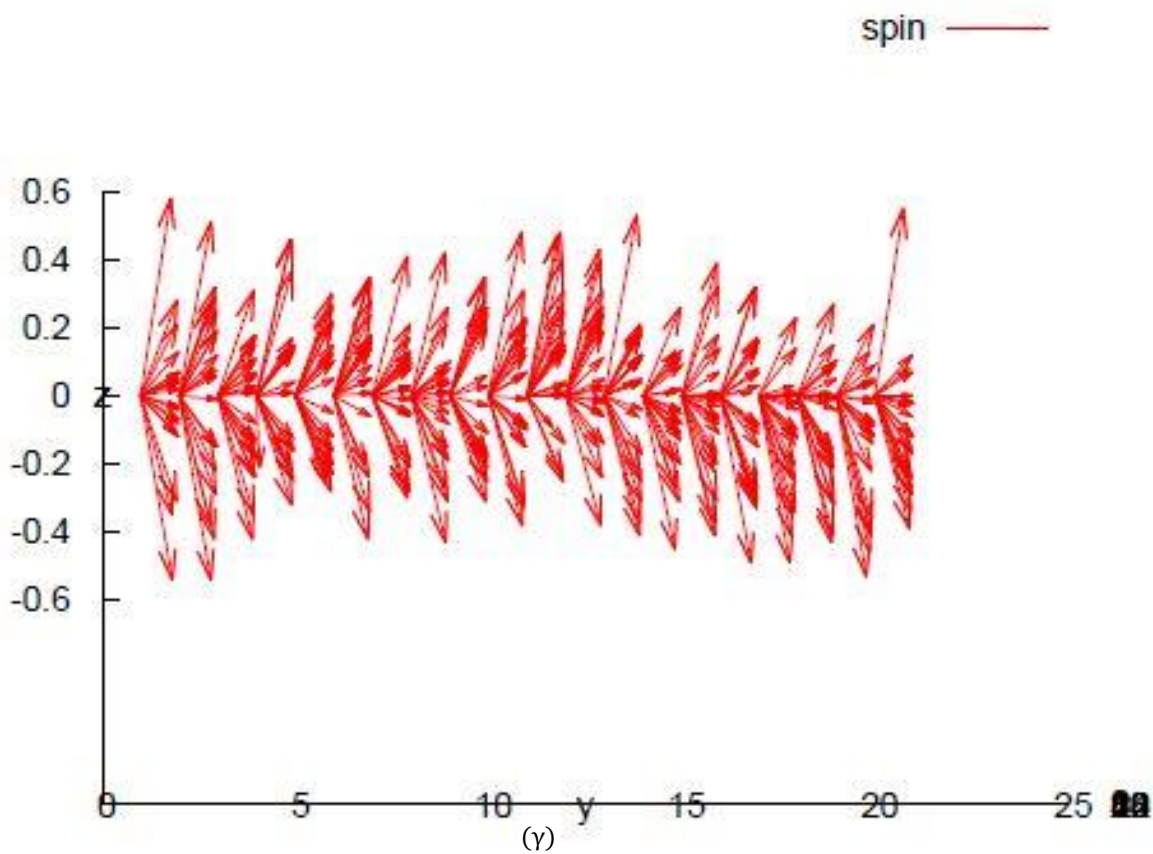


<sup>1</sup> Υπενθυμίζουμε, ότι στο μοντέλο Heisenberg στις 2 διαστάσεις, δεν παρατηρούμε φάση τάξης, οπότε δεν έχουμε αυθόρμητο σπάσιμο συμμετρίας, σύμφωνα και με το θεώρημα *Mermin-Wagner-Hohenberg*

### Spin Configuration at Low Temperature



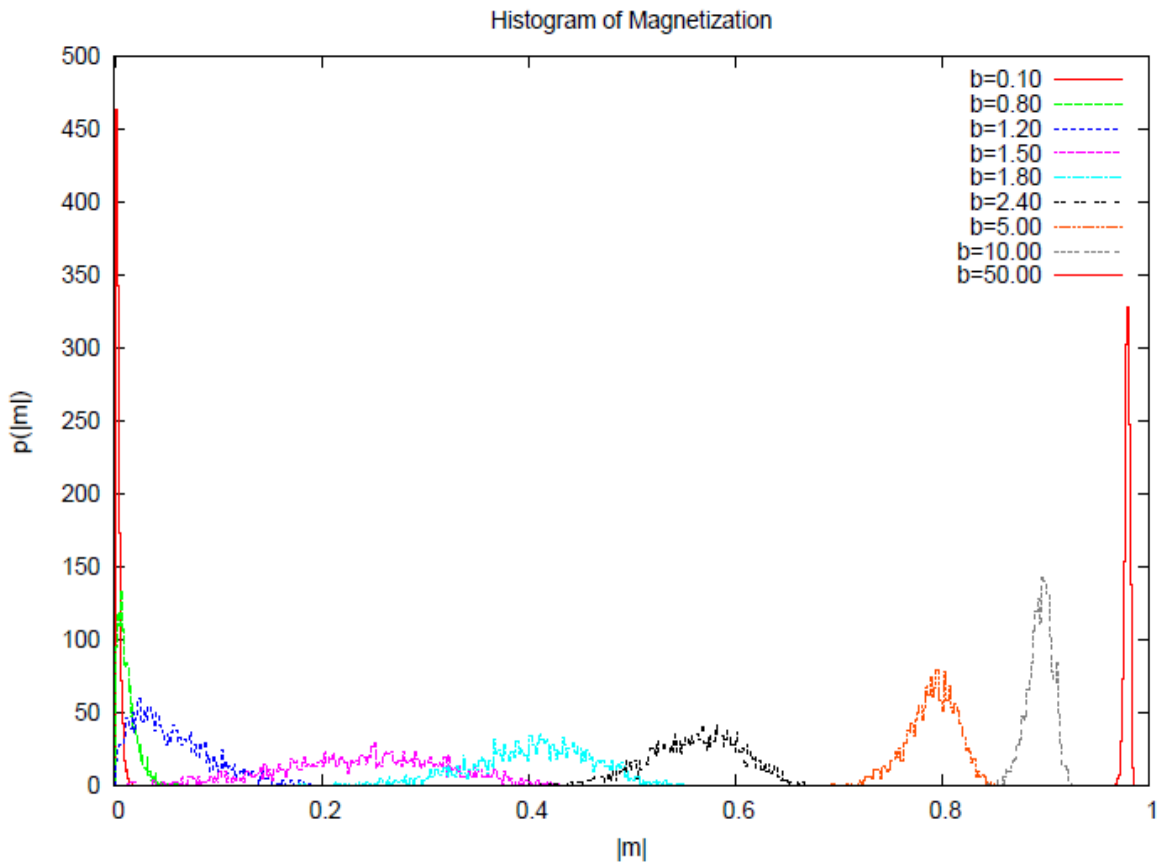
### Spin Configuration at Low Temperature



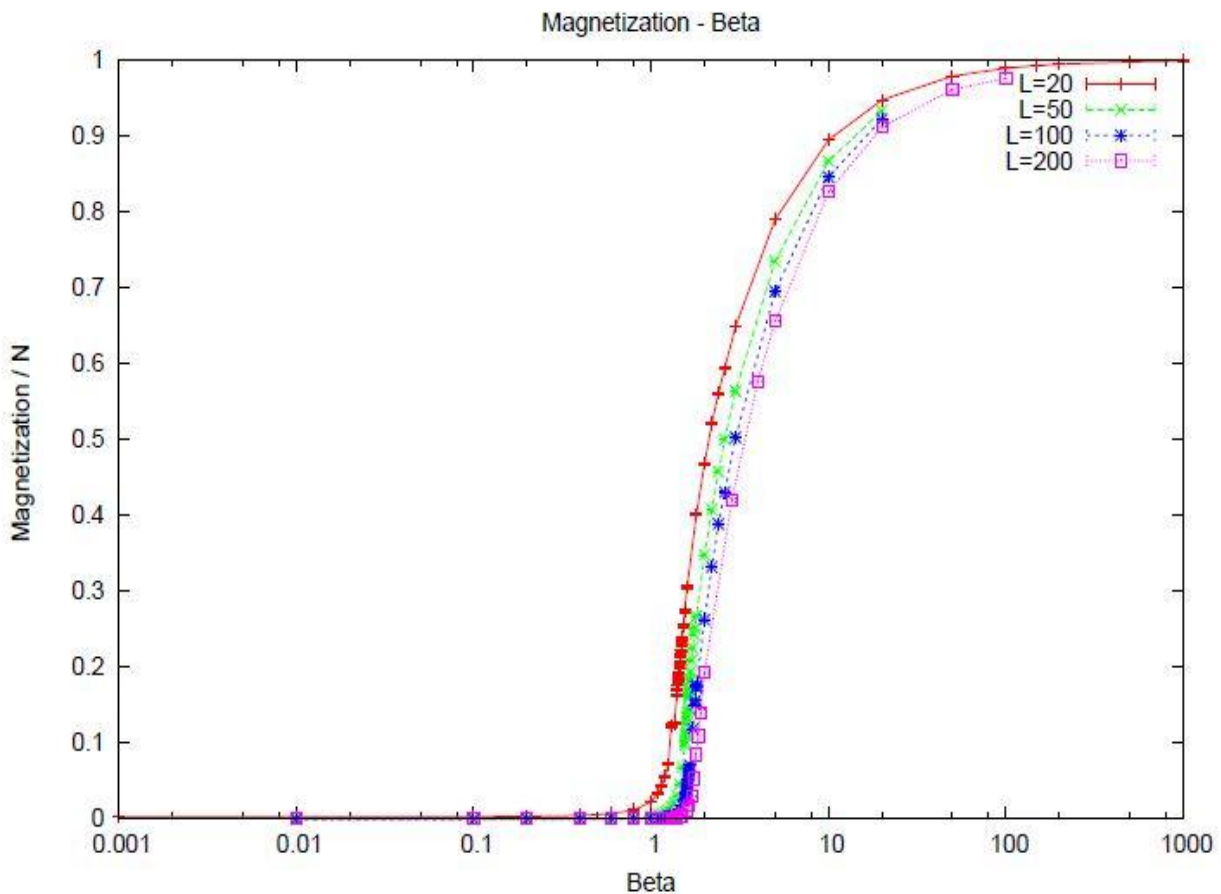
**Εικόνα 32.** Η διάταξη των spins της εικόνας 32 από διαφορετικές προοπτικές (α),(β),(γ). Παρατηρούμε την τάση της διεύθυνσης των spin προς την φορά του άξονα y.

### 8.4 Μαγνήτιση του Συστήματος

Συνεχίζουμε παρουσιάζοντας το ιστόγραμμα της μαγνήτισης ανά πλεγματική θέση και την εξάρτησή της σε σχέση με την θερμοκρασία.



Εικόνα 33. Ιστόγραμμα της απόλυτης τιμής της μαγνήτισης ανά πλεγματική θέση για διάφορες θερμοκρασίες.



Εικόνα 34. Η μαγνήτιση του συστήματος ανά πλεγματική θέση σε σχέση με την θερμοκρασία για διαφορετικά μεγέθη πλέγματος.

Και στην περίπτωση της μαγνήτισης, οι κατανομές παρουσιάζουν γκαουσιανή κατανομή, με τις κορυφές τους να κινούνται από την τιμή μηδέν (0) προς την τιμή ένα (1) καθώς μειώνεται η θερμοκρασία.

Στην εικόνα 35 παρατηρούμε μια συνεχή καμπύλη, ένδειξη για την μη παρουσία αλλαγής φάσης 1<sup>ης</sup> τάξης, η οποία για υψηλές θερμοκρασίες τείνει στο μηδέν (0), ενώ για χαμηλές θερμοκρασίες τείνει στην τιμή ένα (1). Φαινόμενο που εξηγείται εφόσον έχουμε πει ότι στις υψηλές θερμοκρασίες τα spins είναι προσανατολισμένα τυχαία, με αποτέλεσμα να μην συνεισφέρουν σε μια ολική μαγνήτιση για το σύστημα. Αντίθετα στις χαμηλές θερμοκρασίες τα spins είναι ευθυγραμμισμένα ομόρροπα (θεμελιώδης κατάσταση) και έτσι δίνουν την μέγιστη τιμή μαγνήτισης στο σύστημα. Η μέγιστη τιμή της ολικής μαγνήτισης θα ήταν όση και τα spins του συστήματος (πλεγματικές θέσεις) ή αντίστοιχα θα ήταν μονάδα (1) για την μαγνήτιση ανά πλεγματική θέση, αλλά αυτό θα συνέβαινε σε μια φάση τάξης η οποία όπως έχουμε ήδη διαπιστώσει δεν παρατηρείται στο μοντέλο Heisenberg. Τέλος όπως θα δούμε και στη συνέχεια οι μετρήσεις για θερμοκρασίες μεγαλύτερες του 1.80 παρουσιάζουν έντονα τα φαινόμενα λόγω πεπερασμένου μεγέθους του πλέγματος και δεν θα πρέπει να λαμβάνονται υπ' όψιν.

Τέλος σημειώνουμε ότι μετράμε την απόλυτη τιμή της μαγνήτισης στις μικρές θερμοκρασίες και αυτό γιατί λόγω του πεπερασμένου μεγέθους του συστήματος μας, είναι πιθανό η φορά των spins να αλλάζει συχνά πρόσημο οδηγώντας μας έτσι σε μια μηδενική μέση τιμή της μαγνήτισης ακόμα και σε χαμηλές θερμοκρασίες, κάτι το οποίο δεν θα συνέβαινε στο θερμοδυναμικό όριο (πραγματικό σύστημα).

### 8.5 Ειδική Θερμότητα - Μαγνητική Επιδεκτικότητα

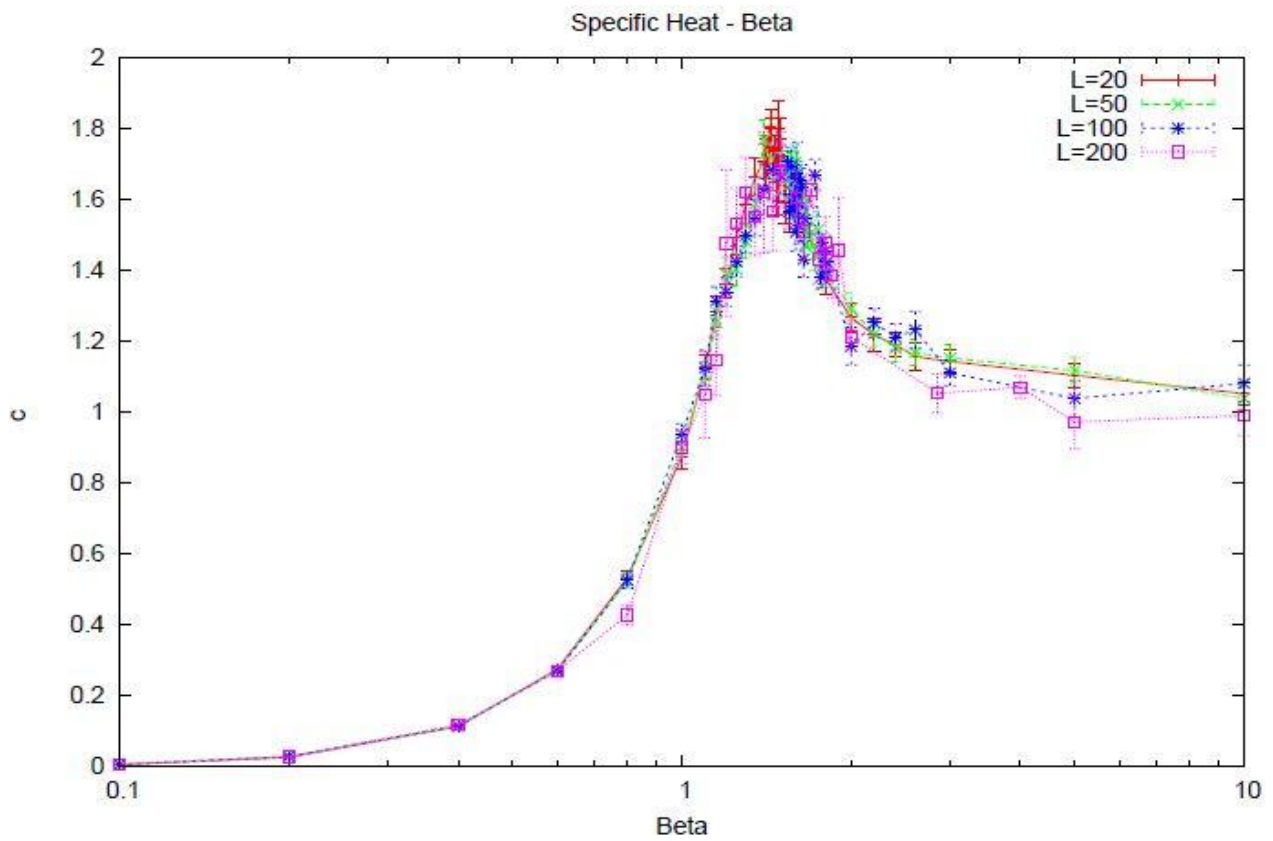
Μέσω των μετρήσεων της ενέργειας και της μαγνήτισης του συστήματος μπορούμε να υπολογίσουμε, από την σχέση

$$c = N\beta^2(\Delta E)^2 \quad (23)$$

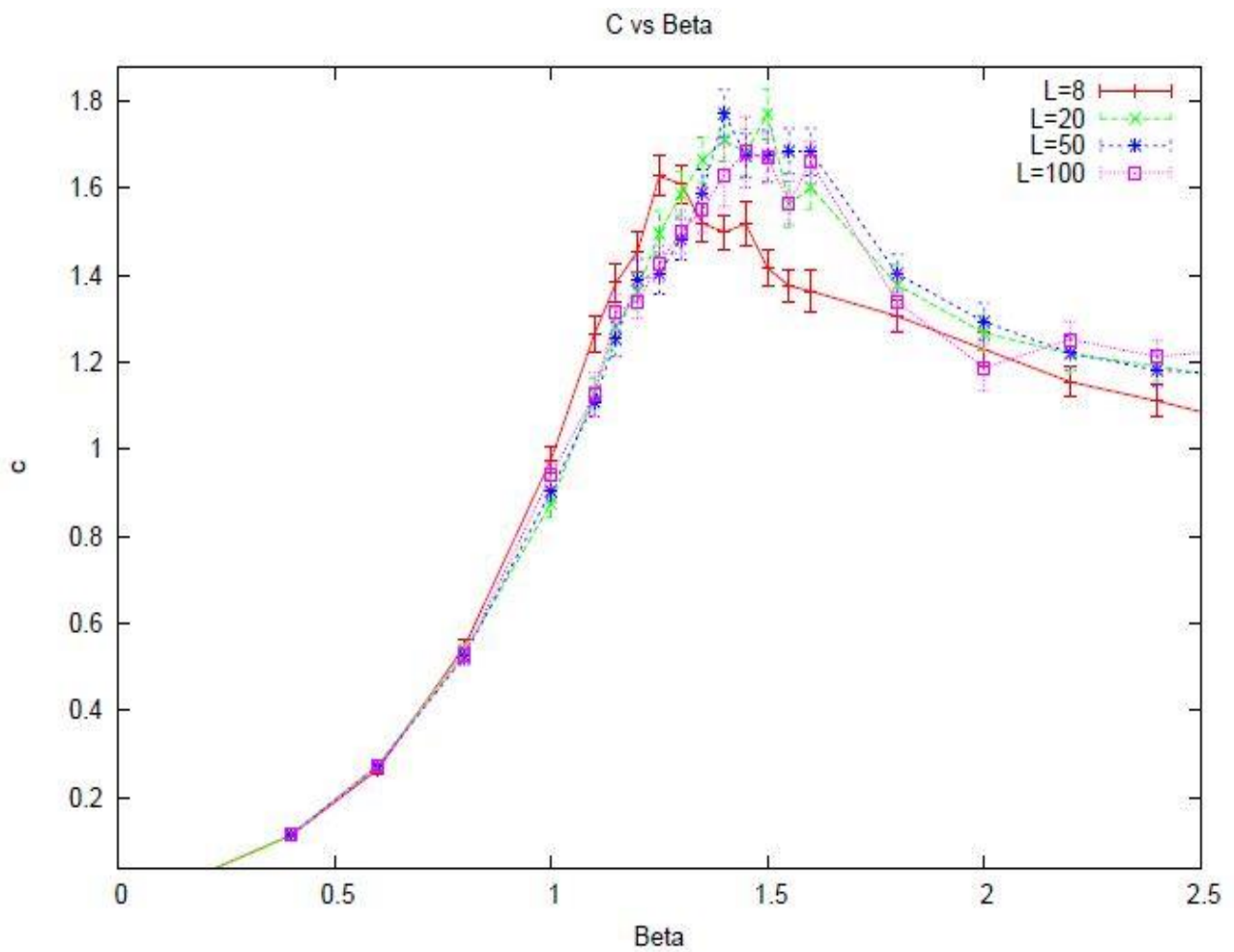
την ειδική θερμότητα, ενώ για τον υπολογισμό της μαγνητικής επιδεκτικότητας χρησιμοποιούμε την σχέση

$$X = \frac{\beta}{N} \langle M^2 \rangle \quad (104)$$

Φτιάχνουμε τα παρακάτω διαγράμματα των μεγεθών αυτών σε σχέση με την θερμοκρασία.

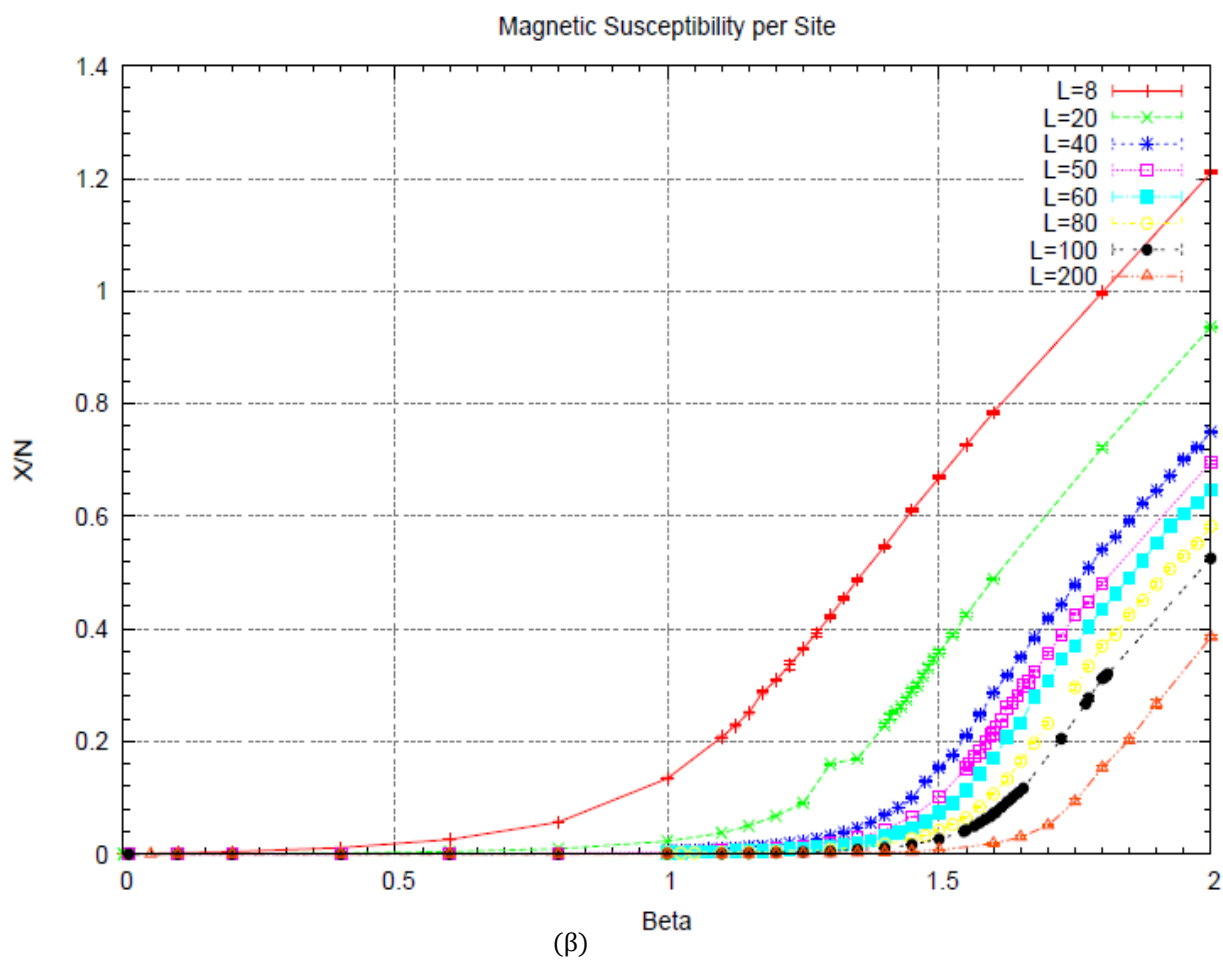
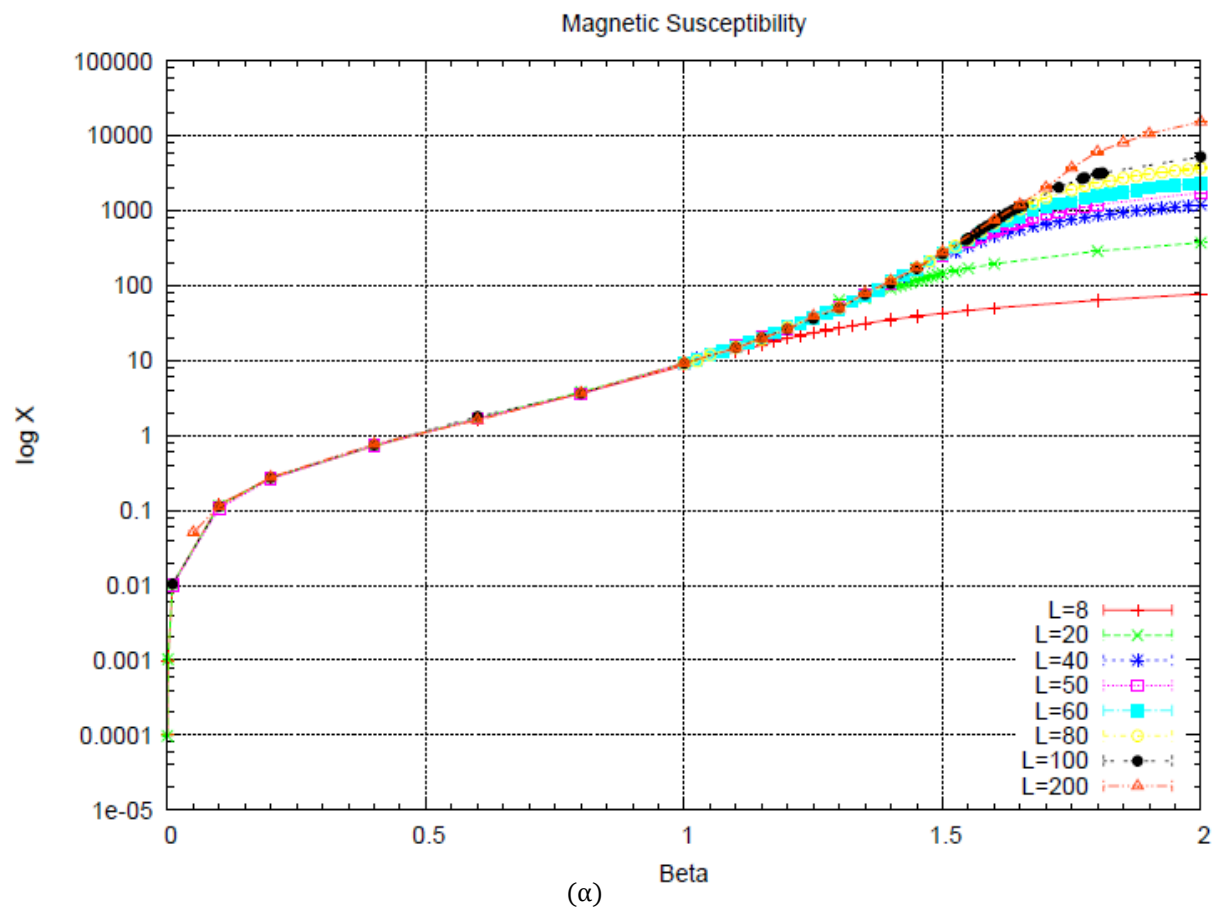


Εικόνα 35. Η ειδική θερμότητα σε σχέση με την θερμοκρασία σε όλο το φάσμα της θερμοκρασίας.



Εικόνα 36. Το γράφημα της ειδικής θερμότητας  $c$  σε σχέση με την θερμοκρασία για διάφορα μεγέθη πλέγματος (για θερμοκρασίες μεταξύ του  $\beta=0,5 - 2,5$ ).





**Εικόνα 37.** (α) Η μαγνητική επιδεκτικότητα και (β) η μαγνητική επιδεκτικότητα ανά πλεγματική θέση συναρτήσει της θερμοκρασίας  $\beta$ .

Παρατηρούμε στο γράφημα της ειδικής θερμότητας, ότι η τιμή της αυξάνεται παρουσιάζοντας ένα μέγιστο για θερμοκρασία κοντά στην τιμή 1.50. Βλέπουμε επίσης ότι το μέγεθος του συστήματος μετατοπίζει την κορυφή του γραφήματος μετακινώντας την προς τις μικρότερες θερμοκρασίες (μεγαλύτερο  $\beta$ ) καθώς αυξάνεται. Η ύπαρξη κορυφής στο γράφημα της ειδικής θερμότητας αποκλείει την ύπαρξη μετάβασης φάσης 1<sup>ης</sup> ή 2<sup>ης</sup> τάξης στις οποίες περιμένουμε απειρισμό της ποσότητας. Οι τιμές για θερμοκρασίες μεγαλύτερες από  $\beta > 1.70$  επηρεάζονται σημαντικά από φαινόμενα λόγω πεπερασμένου μεγέθους του πλέγματος, ώστε να μην θεωρούνται σωστές.

Στο γράφημα της μαγνητικής επιδεκτικότητας, παρατηρούμε ότι μετά από κάποια θερμοκρασία (αντίστοιχη για κάθε μέγεθος πλέγματος) οι τιμές της μαγνητικής επιδεκτικότητας αυξάνονται γρήγορα και τείνουν να απειριστούν. Επίσης βλέπουμε ότι όσο μεγαλύτερο είναι το πλέγμα της προσομοίωσης μας, τόσο η θερμοκρασία στην οποία παρατηρούμε την αλλαγή στο ρυθμό αύξησης της τιμής της μεγαλώνει. Το φαινόμενο οφείλεται και πάλι στα φαινόμενα λόγω πεπερασμένου μεγέθους του πλέγματος μας και υποθέτουμε ότι σε ακόμα μεγαλύτερα πλέγματα η μαγνητική επιδεκτικότητα θα ακολουθεί την asymptotic scaling συμπεριφορά, υπόθεση την οποία θα ελέγξουμε στη συνέχεια.

Τέλος σημαντικό είναι να σημειώσουμε ότι τα σφάλματα των μετρήσεων και για τα δύο μεγέθη μεγαλώνουν παρά την αύξηση του μεγέθους του πλέγματος λόγω των λιγότερων μετρήσεων που κάνουμε ώστε ο χρόνος της προσομοίωσης μας να είναι σε «φυσιολογικά» πλαίσια<sup>1</sup>.

---

<sup>1</sup> Αυξάνοντας το μέγεθος του πλέγματος για σταθερό αριθμό μετρήσεων, αυξάνεται η ακρίβεια των μετρήσεων για ποσότητες όπως της μαγνήτισης και της ενέργειας του συστήματος, αλλά δεν συνεισφέρει καθόλου στην ακρίβεια των μετρήσεων της μαγνητικής επιδεκτικότητας και ειδικής θερμότητας. Γενικά είναι πιο συμφέρον να χρησιμοποιούμε τα μικρότερα πλέγματα τα οποία βέβαια ικανοποιούν την συνθήκη  $L \gg \xi$  και να παίρνουμε περισσότερες μετρήσεις, παρά το αντίθετο [3].

Στον παρακάτω πίνακα, συνοψίζονται μερικά αποτελέσματα από τις μετρήσεις μας.

$\beta$	L	Energy	Magnetization	C	X
1.500	50	$-1.20382 \pm 37 \times 10^{-5}$	$0.06776 \pm 94 \times 10^{-5}$	$1.673 \pm 0.059$	$6.76 \pm 0.22$
1.500	100	$-1.20321 \pm 19 \times 10^{-5}$	$0.01764 \pm 33 \times 10^{-5}$	$1.668 \pm 0.056$	$2.84 \pm 0.13$
1.600	50	$-1.27282 \pm 33 \times 10^{-5}$	$0.1340 \pm 13 \times 10^{-4}$	$1.683 \pm 0.054$	$13.56 \pm 0.32$
1.600	100	$-1.27155 \pm 18 \times 10^{-5}$	$0.04525 \pm 74 \times 10^{-5}$	$1.659 \pm 0.050$	$14.50 \pm 0.50$
1.700	50	$-1.33009 \pm 31 \times 10^{-5}$	$0.2095 \pm 13 \times 10^{-4}$	$1.507 \pm 0.042$	$14.61 \pm 0.50$
1.725	100	$-1.34144 \pm 18 \times 10^{-5}$	$0.1189 \pm 21 \times 10^{-4}$	$1.670 \pm 0.043$	$43.6 \pm 1.4$
1.800	80	$-1.37667 \pm 13 \times 10^{-5}$	$0.2052 \pm 20 \times 10^{-4}$	$1.480 \pm 0.048$	$27.8 \pm 1.9$
1.800	100	$-1.37616 \pm 13 \times 10^{-5}$	$0.1733 \pm 12 \times 10^{-4}$	$1.396 \pm 0.033$	$41.6 \pm 1.2$
1.900	80	$-1.41646 \pm 23 \times 10^{-5}$	$0.2522 \pm 20 \times 10^{-4}$	$1.299 \pm 0.053$	$27.5 \pm 1.6$
1.900	200	$-1.41591 \pm 19 \times 10^{-5}$	$0.1404 \pm 42 \times 10^{-4}$	$1.46 \pm 0.15$	$142 \pm 30$
2.000	100	$-1.45036 \pm 20 \times 10^{-5}$	$0.2627 \pm 20 \times 10^{-4}$	$1.187 \pm 0.053$	$38.2 \pm 2.4$
2.000	200	$-1.45036 \pm 15 \times 10^{-5}$	$0.1927 \pm 23 \times 10^{-4}$	$1.213 \pm 0.040$	$121.3 \pm 9.2$

Πίνακας 1. Συνοπτικός πίνακας μετρήσεων

Συγκρίνοντας τις τιμές που μετρήσαμε με άλλες παρεμφερείς εργασίες, όπως τις [15],[18],[19] βλέπουμε ότι συμφωνούμε σε μεγάλο ποσοστό στις τιμές της ενέργειας και της ειδικής θερμότητας, ενώ οι τιμές της μαγνητικής επιδεκτικότητας διαφέρουν κατά σταθερούς λόγους οι οποίοι αλλάζουν ανάλογα με την εργασία με την οποία γίνεται η σύγκριση και οφείλεται κυρίως σε διαφορετικές παραλλαγές του τύπου υπολογισμού της μαγνητικής επιδεκτικότητας που χρησιμοποιεί ο κάθε συγγραφέας. Διαφορές επίσης παρουσιάζονται για θερμοκρασίες αρκετά μικρές οι οποίες στην εργασία μας επηρεάζονται από τα φαινόμενα λόγω πεπερασμένου μεγέθους. Όπως θα δούμε και παρακάτω, το μήκος συσχετισμού (*correlation length*)  $\xi$ , για θερμοκρασίες  $\beta > 1.50$  αρχίζει να γίνεται συγκρίσιμο με το μέγεθος του πλέγματος, ακόμα και για  $L=200$ , οδηγώντας μας έτσι σε εσφαλμένους υπολογισμούς.

#### 8.6 Ροπή 4<sup>ης</sup> Τάξης - Binder Cumulant

Μία συνήθης μέθοδος για να προσδιορίσουμε την κρίσιμη θερμοκρασία  $T_c$  είναι με την χρήση της ροπής 4<sup>ης</sup> τάξης, ή αλλιώς της ροπής Binder. Η μέθοδος αυτή γενικά είναι καλύτερη για τον προσδιορισμό της κρίσιμης θερμοκρασία σε σχέση με άλλες μεθόδους, λόγω του ότι περιορίζονται αρκετά τα φαινόμενα λόγω πεπερασμένου μεγέθους του συστήματος. Στην εργασία αυτήν θα την χρησιμοποιήσουμε σαν ακόμα μία ένδειξη για την μη ύπαρξη μετάβασης φάσης.

Η ροπή ορίζεται ως:

$$V_x(L) = 1 - \frac{\langle (x - \langle x \rangle_L)^4 \rangle}{3 \langle (x - \langle x \rangle_L)^2 \rangle^2} \quad (105)$$

,όπου  $x$  η ποσότητα που μελετάμε και  $L$  το μέγεθος του συστήματος μας.

Για την περίπτωση της μαγνήτισης ισχύει ότι  $\langle m^n \rangle_L = 0$  για άρτιο  $n$ , λόγω της συμμετρίας που παρουσιάζει το σύστημα. Οπότε η ροπή 4<sup>ης</sup> τάξης μπορεί να γραφτεί ως:

$$V_m(L) = 1 - \frac{\langle m^4 \rangle_L}{3 \langle m^2 \rangle_L^2} \quad (106)$$

Αναλύοντας την παραπάνω σχέση, μπορούμε να πούμε ότι στην περίπτωση που έχουμε αταξία του συστήματος, δηλαδή για  $T > T_c$  ( $\beta < \beta_c$ ), τότε ισχύει  $m \rightarrow 0$  και άρα η ροπή τείνει στο μηδέν (0).

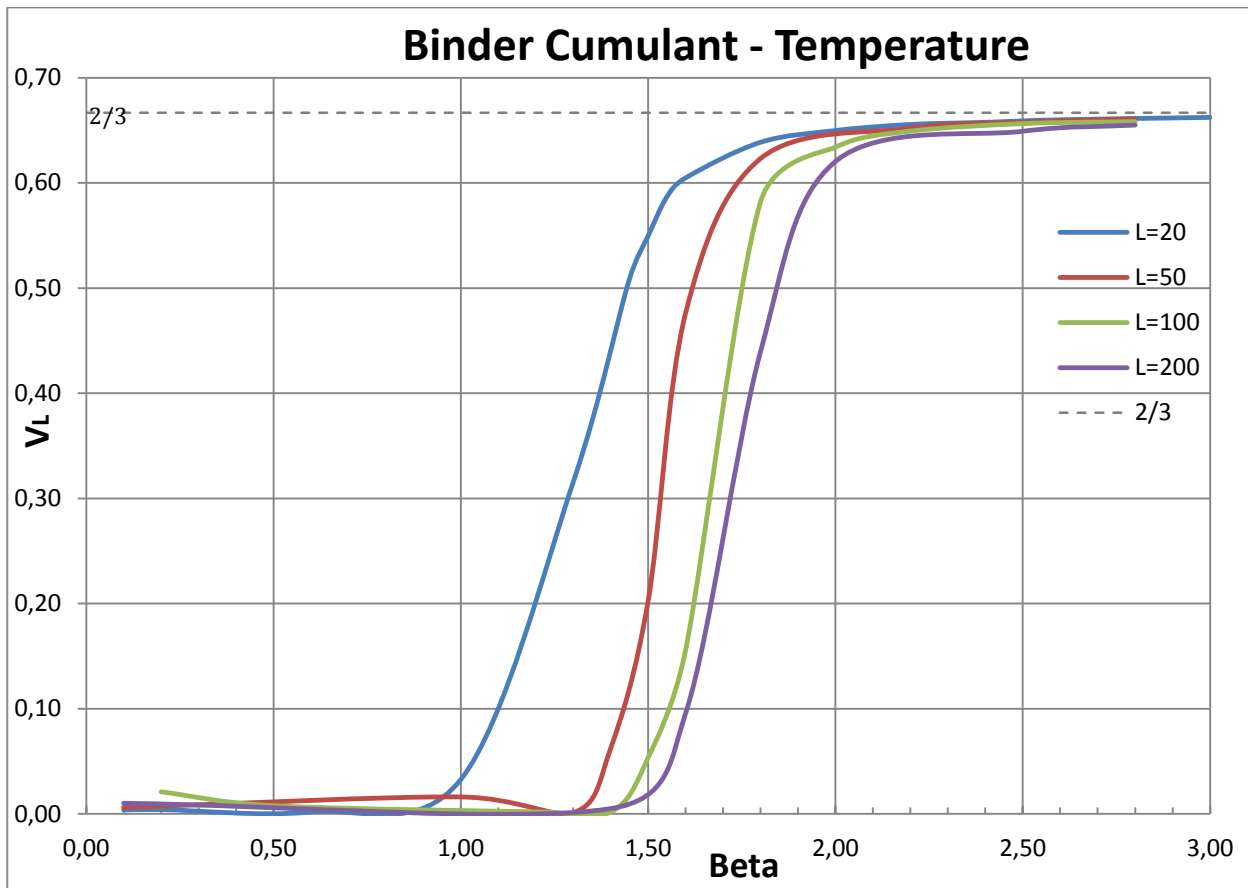
$$V_m(L) \rightarrow 0, \text{ για } T > T_c \quad (107)$$

Αντίστοιχα στην περίπτωση των χαμηλών θερμοκρασιών  $T < T_c$  ( $\beta > \beta_c$ ) ισχύει  $\langle m^n \rangle = m_0$  για κάθε  $n$ , οπότε η ροπή τείνει στην τιμή 2/3.

$$V_m(L) \rightarrow \frac{2}{3}, \text{ για } T < T_c \quad (108)$$

Ενώ για  $T \approx T_c$  (ή  $L \ll \xi$ ) η τιμή της ροπής 4<sup>ης</sup> τάξης τείνει σε μια συγκεκριμένη τιμή  $0 < V_m^* < \frac{2}{3}$  η οποία μεταβάλλεται πολύ λίγο με την επίδραση της θερμοκρασίας ή το μέγεθος του πλέγματος.

Αν κάνουμε λοιπόν τις γραφικές παραστάσεις της ροπής 4<sup>ης</sup> τάξης για διάφορα μεγέθη πλέγματος, τότε το σημείο τομής τους μπορεί να μας δώσει την κρίσιμη θερμοκρασία  $T_c$ .

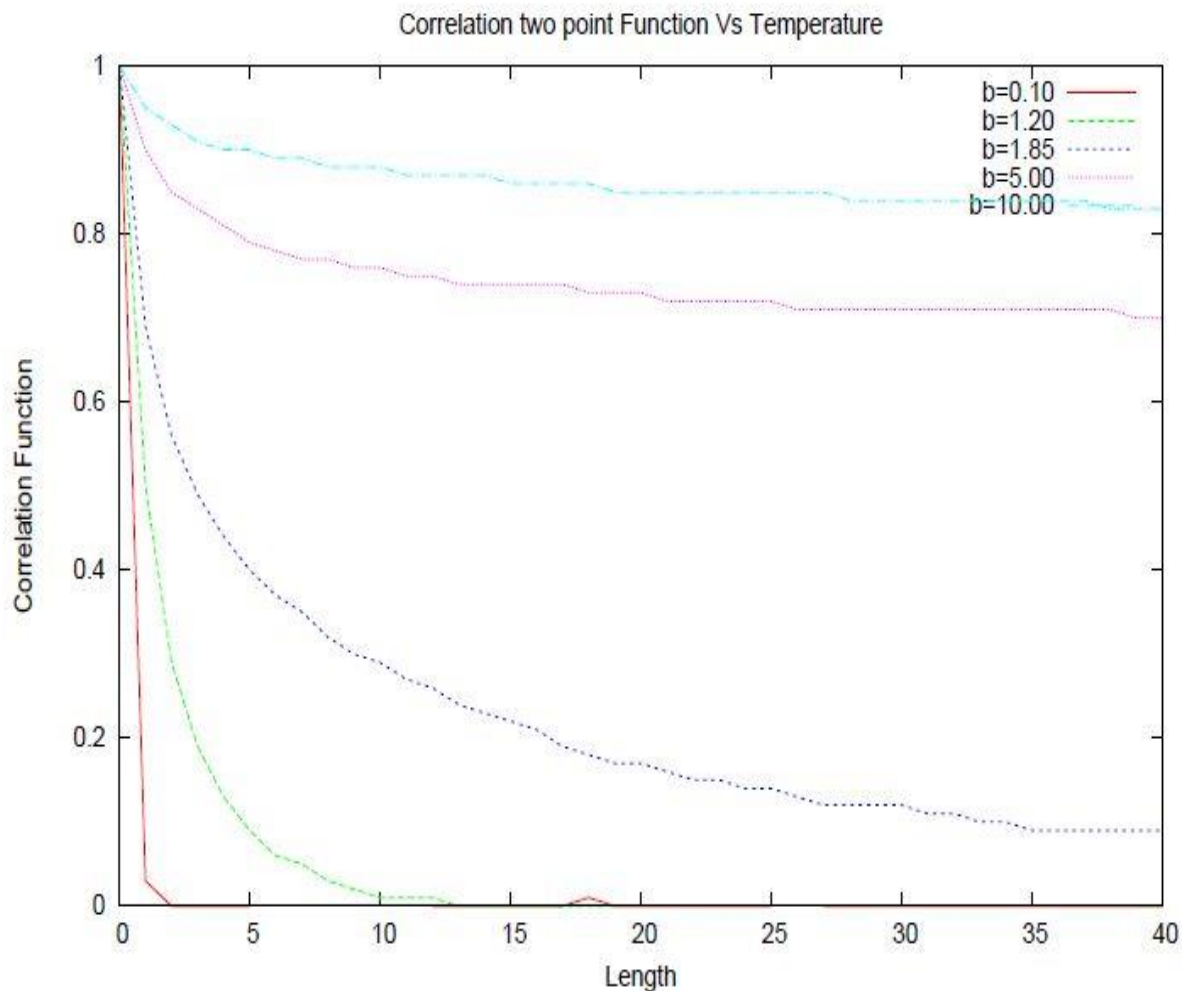


Εικόνα 38. Η ροπής 4<sup>ης</sup> τάξης – Binder Cumulant συναρτήσει της θερμοκρασίας για διάφορα μεγέθη πλέγματος.

Παρατηρούμε στο παραπάνω γράφημα ότι οι καμπύλες της Binder Cumulant για τα διάφορα πλέγματα δεν παρουσιάζουν σημείο τομής και μάλιστα όσο μεγαλώνει το πλέγμα, τόσο η καμπύλες κινούνται προς μεγαλύτερες τιμές  $\beta$  (μικρότερες θερμοκρασίες). Δηλαδή δεν μπορούμε να προσδιορίσουμε μία κρίσιμη θερμοκρασία όπου πραγματοποιείται η μετάβαση φάσης και έτσι έχουμε ακόμα μία ένδειξη για την μη ύπαρξη μετάβασης.

### 8.7 Συνάρτηση Συσχετισμού

Στο επόμενο γράφημα παρουσιάζουμε την συνάρτηση συσχετισμού για διάφορες θερμοκρασίες. Παρατηρούμε ότι για υψηλές θερμοκρασίες (μικρό  $\beta$ ) η συνάρτηση συσχετισμού μειώνεται εκθετικά σε σχέση με την απόσταση των spins και ήδη στην απόσταση μιας πλεγματικής θέσης τα spins είναι ασυσχέτιστα. Αντιθέτως για μικρές θερμοκρασίες (μεγάλο  $\beta$ ) η συνάρτηση συσχετισμού μειώνεται με πολύ αργό ρυθμό, αποδεικνύοντας έτσι ότι για χαμηλές θερμοκρασίες το μοντέλο είναι ισχυρά συσχετισμένο και το μήκος συσχετισμού αγγίζει την τάξη μεγέθους  $L$  του πλέγματος.

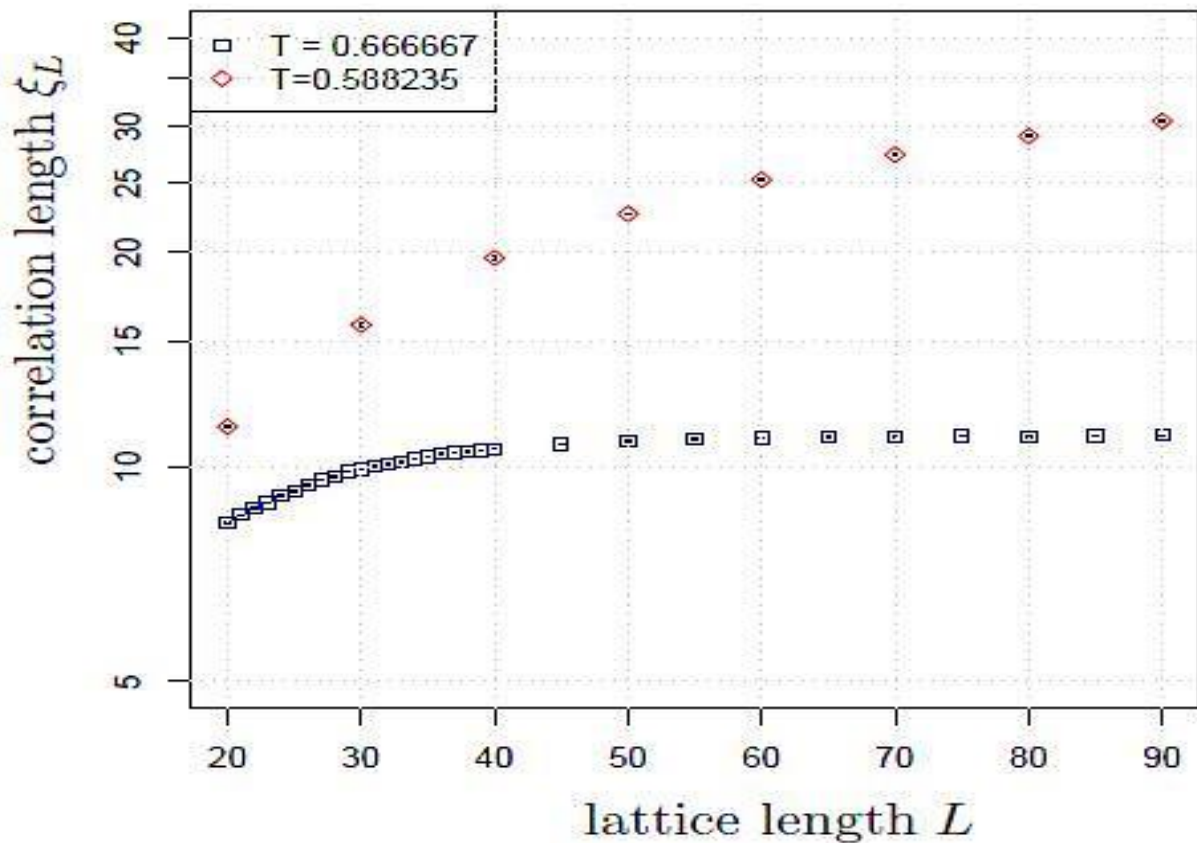


Εικόνα 39. Η συνάρτηση συσχετισμού 2 σημείων για διάφορες θερμοκρασίες. ( $L=200$ )

### 8.8 Μήκος Συσχετισμού

Το μήκος συσχετισμού,  $\xi$ , είναι μια σημαντική και ενδιαφέρουσα ποσότητα του μοντέλου Heisenberg, και ειδικότερα η συμπεριφορά του στην κρίσιμη περιοχή των χαμηλών θερμοκρασιών ( $T_c = 0$ ).

Γενικά επειδή τα υπολογιστικά συστήματα που φτιάχνουμε είναι πολύ μικρά σε σχέση με τα φυσικά συστήματα, όταν θέλουμε να υπολογίσουμε ποσότητες που είναι κοντά σε θερμοκρασίες όπου το μήκος συσχετισμού γίνεται πολύ μεγάλο, χρησιμοποιούμε μεθόδους ώστε να ελαχιστοποιήσουμε όσο γίνεται περισσότερο τα σφάλματα λόγω πεπερασμένου μεγέθους των μοντέλων μας. Στην συγκεκριμένη εργασία θα χρησιμοποιήσουμε την μέθοδο του Kim (1996), η οποία καθιστά την περιοχή γύρω από την κρίσιμη θερμοκρασία προσιτή.



**Εικόνα 40.** Το μήκος συσχετισμού  $\xi$  σε σχέση με το μέγεθος του πλέγματος  $L$  για 2 θερμοκρασίες. Για θερμοκρασία  $T=1/1.5$  η σύγκλιση πραγματοποιείται κατά προσέγγιση για ένα μέγεθος πλέγματος  $L=60$ . Για την μικρότερη θερμοκρασία  $T=1/1.7$  χρειαζόμαστε πολύ μεγαλύτερα πλέγματα τα οποία μπορεί να μην είναι

### 8.8.1 Μέθοδος Kim για την βάθμωση πεπερασμένου μεγέθους Finite Size Scaling (FSS) [6][7]

Ξεκινάμε με την βασική υπόθεση της FSS

$$A_L(T) = A(T)f_A(s) \quad (109)$$

,όπου  $A_L$  η τιμή του μεγέθους  $A$  που μας ενδιαφέρει σε ένα μέγεθος πλέγματος  $L$  και  $s \equiv s(L, T) \equiv L/\xi$ . Η συνάρτηση  $f_A$ , ονομάζεται καθολική συνάρτηση βάθμωσης (*universal scaling function*). Στη σχέση (109) κάνουμε την υπόθεση ότι η σχέση βάθμωσης  $f_A$  εξαρτάται μόνο από το  $s$ . Ενώ με  $\xi = \xi_\infty$  συμβολίζουμε το μήκος συσχετισμού στο θερμοδυναμικό όριο.

Για  $A=\xi$  γράφουμε την σχέση  $\xi_L(T) = \xi(T)f_\xi(s)$ . Αφού το  $\xi_L/L$  είναι συνάρτηση του  $\xi/L$  μπορούμε να γράψουμε την σχέση (109) ως

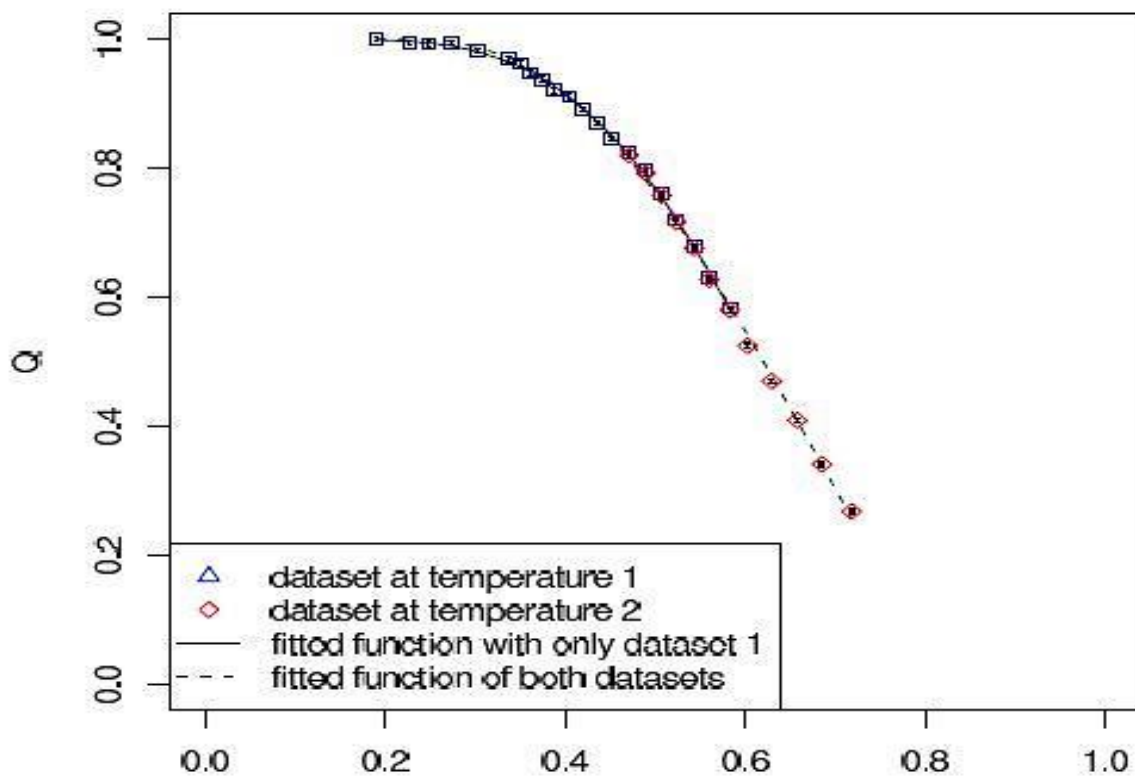
$$\begin{aligned} A_L(T) &= A(T)Q_A(x(L, T)) \\ x(L, T) &= \xi_L/L \end{aligned} \quad (110)$$

Η συνάρτηση  $Q_A$  είναι μία άλλη καθολική συνάρτηση βάθμωσης. Το πλεονέκτημα της παραπάνω σχέσης είναι ότι δεν χρειάζεται να γνωρίζουμε το

άγνωστο  $\xi = \xi_\infty$ . Με την γνώση του  $Q_A$  είναι πιθανό να υπολογίσουμε τα θερμοδυναμικά όρια με την σχέση  $A(T) = A_L(T)/Q(x)$ , υπολογίζοντας πρώτα το  $Q$  και συνέχεια χρησιμοποιώντας το  $A_L(T)$  για ένα «μικρό»  $L$ .

Έτσι για το υπολογισμό του μήκους συσχετισμού  $A=\xi$  η μέθοδος για να βρούμε το  $Q(x) = \xi_L/\xi_\infty$  για μια μεγάλη περιοχή  $x$  είναι η ακόλουθη:

- Διαλέγουμε μία αρχική θερμοκρασία  $T_0$ , όπου το μήκος συσχετισμού  $\xi_L$  συγκλίνει και παίρνουμε το  $x(T_0) = \xi_L(T_0)/L$  και το  $Q(x(T_0))$ , για διάφορα μεγέθη πλέγματος.
- Φτιάχνουμε την γραμμή τάσης (*regression*) αυτών των δεδομένων
- Διαλέγουμε μία άλλη χαμηλότερη θερμοκρασία  $T_1$  όπου το  $\xi_L$  δεν συγκλίνει για  $L$  προσβάσιμα από την προσομοίωση Monte Carlo. Παίρνουμε το  $x(T_1) = \xi_L(T_1)/L$ . Η βάση του  $x(T_1)$  θα πρέπει να επικαλύπτεται με το  $x(T_0)$ . Για να βρούμε το αντίστοιχο  $Q(x(T_1))$  χρειαζόμαστε το  $\xi_\infty(T_1)$  το οποίο δεν έχουμε. Αντί για αυτού χρησιμοποιούμε την γραμμή τάσης  $Q(x(T_0))$  για να προεκταθούμε στο  $\xi(T_1)$ . Αυτό είναι το ίδιο με το να βαθμώναμε τα δεδομένα  $\xi_L(T_1)$  έως ότου τα σημεία της  $x(T_1)$  να επικαλύπτονται με την γραμμή τάσης. Στη συνέχεια φτιάχνουμε μια νέα γραμμή τάσης και στα δύο σει δεδομένων.
- Επαναλαμβάνουμε την διαδικασία.



$x$

**Εικόνα 41.** Παράδειγμα της μεθόδου Kim

Αρχικά υπολογίζουμε το  $Q = \xi_L/\xi_\infty$  στην χαμηλή περιοχή  $x$  (μπλε καμπύλη). Στη συνέχεια ξεκινάμε μια άλλη μέτρηση για χαμηλότερη θερμοκρασία για την οποία δεν μπορούμε να παρατηρήσουμε την σύγκλιση μέσα στις υπολογιστικές δυνατότητες για το μέγεθος του πλέγματος (κόκκινη καμπύλη). Αφού το  $\xi_\infty$  είναι άγνωστο, οι τιμές του  $\xi_L$  βαθμωνονται κατά ένα παράγοντα έτσι ώστε οι καμπύλες να επικαλύπτονται. [7]



Προσοχή χρειάζεται στην επιλογή των συστημάτων  $L$  καθώς μπορούμε να φθάσουμε σε μεγάλες τιμές του  $x$  για μεγάλες θερμοκρασίες για πλέγματα πολύ μικρού μήκους. Όμως τέτοια πλέγματα τόσο μικρά δεν δίνουν αξιόπιστα αποτελέσματα. Ο Kim ισχυρίζεται ότι για μέγεθος πλέγματος μεγαλύτερο από το προσεγγιστικό 20 τα συστηματικά λάθη του  $\xi_L$  είναι περίπου  $10^{-2}$  τα οποία είναι συγκρίσιμα με τα τυπικά στατιστικά λάθη της μεθόδου Monte Carlo.

Γνωρίζοντας το  $Q$  έχουμε δύο δυνατότητες. Μπορούμε να υπολογίσουμε το μήκος συσχετισμού για υψηλότερες θερμοκρασίες σε πολύ μικρά πλέγματα ή μπορούμε να υπολογίσουμε το μήκος συσχετισμού για μικρές θερμοκρασίες με τον υπολογισμό του  $\xi_L$  και  $x$  για μεγάλα  $L$ . Αυτό μας επιτρέπει να υπολογίσουμε το μήκος συσχετισμού μέχρι και  $10^5$ , το οποίο είναι πολύ μεγαλύτερο από συστήματα που μπορούμε να προσομοιώσουμε με την μέθοδο Monte Carlo. Αυτή η τεχνική δουλεύει εκ των προτέρων για κάθε  $x$  το οποίο είναι μικρότερο από το μεγαλύτερο  $x$  όπου το  $Q$  είναι δυνατόν να υπολογιστεί, π.χ. εάν θέλουμε να προβλέψουμε μια ποσότητα  $A_L$  για  $L \rightarrow \infty$ , τότε το αντίστοιχο  $x$  στο  $A_L$  πρέπει να είναι στην βάση (*support*) της συνάρτησης πρόβλεψης (*regression*).

### 8.8.2 Μήκος συσχετισμού

Σκοπός μας είναι να βρούμε την εξάρτηση του μήκους συσχετισμού  $\xi$  με την θερμοκρασία  $T$  κοντά σε πολύ χαμηλές θερμοκρασίες όπου παρατηρείται το φαινόμενο του asymptotic scaling. Σε αυτές τις θερμοκρασίες περιμένουμε μια εκθετική σχέση της μορφής

$$\xi \propto e^{2\pi J/k_B T} \quad (111)$$

Ορίζουμε την συνάρτηση συσχετισμού ζεύγους (*pair correlation function*) ως

$$g(S_i, S_j) := \mathbb{E}[(S_i - \mathbb{E}[S_i])(S_j - \mathbb{E}[S_j])] = \mathbb{E}[S_i S_j] - \mathbb{E}[S_i]\mathbb{E}[S_j] \quad (112)$$

Από το αναλλοίωτο ως προς τις περιστροφές των spins έχουμε  $\mathbb{E}[S_i] = 0$  για όλα τα  $i$ . Επίσης  $g(S_i, S_j) = g(i, j) = g(i - j) = g(k)$ . Με αυτές τις ιδιότητες η συνάρτηση συσχετισμού (112) γράφεται

$$g(S_0, S_k) = \mathbb{E}[(S_0 \cdot S_k)] = \frac{1}{N} \mathbb{E} \left[ \sum_i (S_i \cdot S_{i+k}) \right] \quad (113)$$

Το μήκος συσχετισμού  $\xi_L$  ορίζεται ως

$$g(S_i, S_j) \propto e^{-|i-j|/\xi_L} \quad (114)$$

Υπολογίζεται για μη περιοδικές συνοριακές συνθήκες

$$\xi_L = \frac{1}{|q|} \sqrt{\frac{\hat{g}(0)}{\hat{g}(q)}} - 1 \quad (115)$$

και

$$\xi_L \approx \frac{1}{2 \sin\left(\frac{|q|}{2}\right)} \sqrt{\frac{\hat{g}(0)}{\hat{g}(q)}} - 1 \quad (116)$$

για περιοδικές συνοριακές συνθήκες.  $\hat{g}(\cdot)$  είναι η διακριτός μετασχηματισμός Fourier (Discrete Fourier Transform - DFT) της  $g(\cdot)$ . Στη διακριτή περίπτωση με περιοδικές συνοριακές συνθήκες είναι αναγκαίο να χρησιμοποιούμε μικρά  $|q|$ .

### 8.8.3 **Διακριτός μετασχηματισμός Fourier (DFT)**

Εφόσον η προσομοίωση πραγματοποιείται σε ένα πλέγμα, η συνάρτηση μετασχηματισμού πρέπει να υπολογιστεί με τον διακριτό μετασχηματισμό Fourier. Ο διακριτός μετασχηματισμός Fourier ορίζεται ως

$$F_n = \sum_{k=0}^{N-1} f_k e^{-2\pi i \frac{nk}{N}} = \sum_{n=0}^{N-1} F_n e^{-2\pi i \frac{nk}{N}} \quad (117)$$

,όπου  $N$  είναι ο αριθμός των σημείων δειγματοληψίας.

Ο μετασχηματισμός Fourier

$$F(v) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-2\pi i v x} f(x) dx \quad (118)$$

$$f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{2\pi i v x} F(v) dv \quad (119)$$

όπου  $f(x)$  μη μηδενική μόνο στο διάστημα  $x \in [0, T]$  δειγματοληπτείται στο

$$t_k = k \frac{T}{N} \quad (120)$$

και οι αντίστοιχες συχνότητες

$$v_n = \frac{n}{T} \quad (121)$$

Οπότε

$$F(v_n) = \frac{T}{N} F_n \quad (122)$$

Αν η  $f$  είναι μια περιοδική συνάρτηση στο  $[-\frac{T}{2}, \frac{T}{2}]$ , τότε η σειρά Fourier δίνεται από τον τύπο

$$f(x) = \sum_{n=-\infty}^{n=\infty} c_n e^{2\pi i n x / T} \quad (123)$$

$$c_n = \frac{1}{T} \int_{-T/2}^{T/2} f(x) e^{-2\pi i n x / T} dx \quad (124)$$

Και σχετίζεται με τον DFT μέσω της

$$c_n = \frac{1}{N} F_n \quad (125)$$

#### 8.8.4 Βελτιωμένος Εκτιμητής για το Μήκος Συσχετισμού με τον αλγόριθμο του Wolff.

Για να υπολογίσουμε το  $\xi_L$  μέσω της σχέσης (115), χρειαζόμαστε να υπολογίσουμε τους μετασχηματισμούς Fourier της συνάρτησης συσχετισμού ζεύγους  $g(S_i, S_j)$ . Αρχικά δείχνουμε ότι μπορούμε να φτιάξουμε έναν εκτιμητή για την συνάρτηση συσχετισμού  $\mathbb{E}[(S_i \cdot S_j)]$ , ο οποίος εξαρτάται μόνο από τις προβολές των spins  $S_i$  και  $S_j$  πάνω στο  $e$ .

$$\int_{e \in S^2} (e \cdot S_i)(e \cdot S_j) dO = \int S_i^T e e^T S_j dO = S_i^T \int e e^T dO S_j = \frac{4\pi}{3} (S_i \cdot S_j) \quad (126)$$

Από την σχέση (113)

$$\hat{g}(q) = \frac{1}{N} \sum_{k,i} \mathbb{E}[S_i S_{i+k}] e^{i \frac{2\pi}{L} q k} = \frac{1}{N} \sum_{i,j} \mathbb{E}[S_i S_j] e^{i \frac{2\pi}{L} q (i-j)} \quad (127)$$

Από την σχέση (125)

$$\begin{aligned} \hat{g}(q) &= \frac{1}{N^2} \sum_{i,j} \mathbb{E}[(S_i \cdot S_j)] e^{i \frac{2\pi}{L} q (i-j)} = \\ &= \frac{1}{N^2} \mathbb{E} \left[ \sum_{i,j} \frac{3}{4\pi} \int_{e \in S^2} (e \cdot S_i)(e \cdot S_j) dO e^{i \frac{2\pi}{L} q (i-j)} \right] \\ &\approx \frac{3}{N^2} \frac{1}{M} \sum_{n=1}^M \sum_{i,j} \mathbb{E}[(e_n \cdot S_i)(e_n \cdot S_j)] e^{i \frac{2\pi}{L} q (i-j)} \quad (*) \\ &= 3 \frac{1}{M} \sum_{n=1}^M \frac{1}{L} \sum_{m=1}^L \frac{1}{NS(\text{cluster}_m)} \sum_{i,j \in \text{cluster}_k} (e_n \cdot S_i^{(m)})(e_n \cdot S_j^{(m)}) e^{i \frac{2\pi}{L} q (i-j)} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= 3 \frac{1}{M} \sum_{n=1}^M \frac{1}{NS(cluster_n)} \sum_{i,j \in cluster_n} (e_n \cdot S_i^{(n)}) (e_n \cdot S_j^{(n)}) e^{i \frac{2\pi}{L} q(i-j)} \quad (**) \\
&= 3 \frac{1}{M} \sum_{n=1}^M \frac{1}{NS(cluster_n)} \left| \sum_{i,j \in cluster_n} (e_n \cdot S_i^{(n)}) e^{i \frac{2\pi}{L} qi} \right|^2 \quad (128)
\end{aligned}$$

,όπου χρησιμοποιήσαμε τον αριθμητικό μέσο σαν εκτιμητή για την έκφραση (\*) και το αναλλοίωτο ως προς τις περιστροφές του συστήματος στη έκφραση (\*\*).  $S_i^{(n)}$  είναι η διαμόρφωση των spins στο n-οστό βήμα Monte Carlo ενώ  $S(cluster_n)$  είναι το μέγεθος του cluster στο n-οστό βήμα Monte Carlo. Τα αποτελέσματα που υπολογίζουμε με αυτήν την μέθοδο είναι σε πλήρη συμφωνία με τα μήκη συσχετισμού που θα υπολογίζαμε με την εκτίμηση της συνάρτησης συσχετισμού  $g(z)$  και στη συνέχεια εφαρμόζαμε το DFT.

### 8.8.5 **Ο αλγόριθμος Wolff Single Cluster**

Για τον υπολογισμό του μήκους συσχετισμού με την μέθοδο του Kim, χρησιμοποιήσαμε τον κώδικα του κ. S. Walter, στον οποίο χρησιμοποιείται ο αλγόριθμος Wolff.

Ο αλγόριθμος Wolff είναι ο ευκολότερος τρόπος για μελετήσουμε και να υπολογίσουμε το μήκος συσχετισμού  $\xi$ , καθώς δεν παρουσιάζει κρίσιμη επιβράδυνση (*critical slowing down*) και επιτρέπει τον υπολογισμό του  $\xi$  με καλή προσέγγιση.

Ο αλγόριθμος Wolff υλοποιείται συνοπτικά στα παρακάτω βήματα ως εξής:

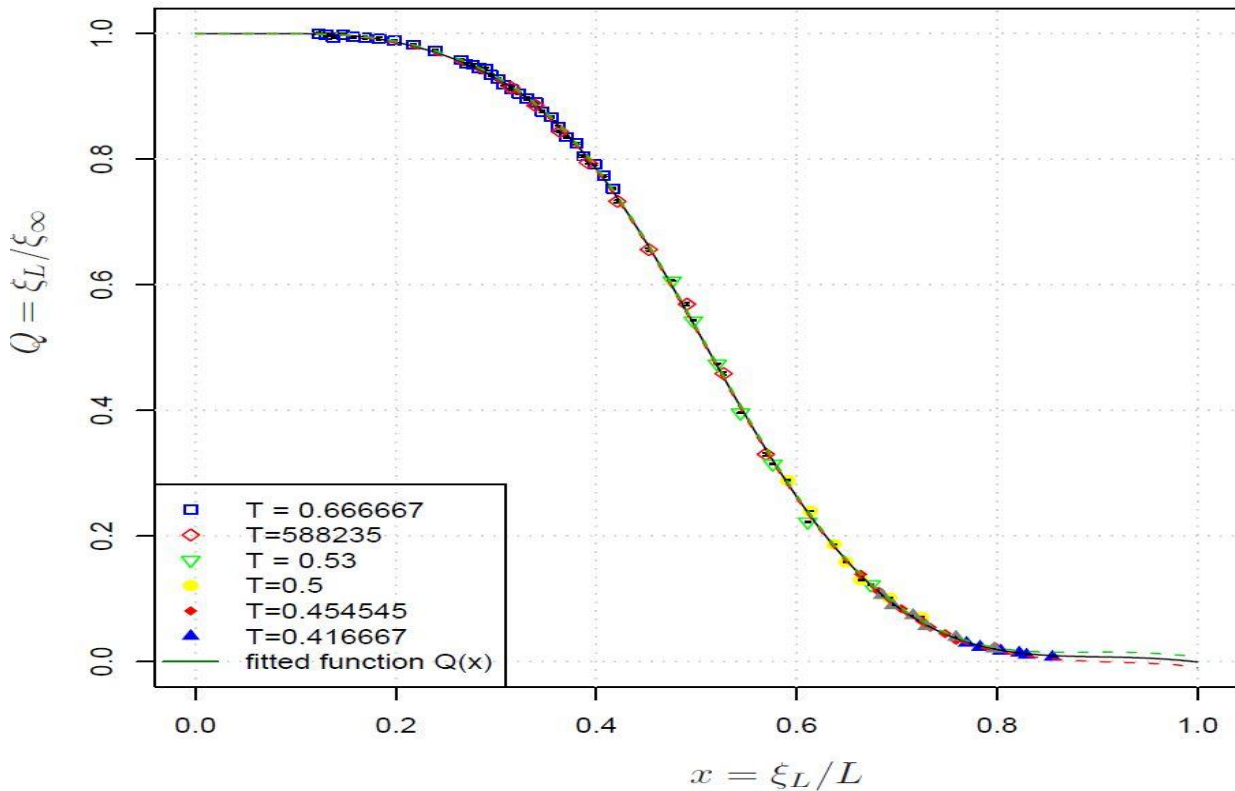
1. Επιλέγουμε με ομοιόμορφη πιθανότητα  $p_{seed} = 1/N$  μια πλεγματική θέση που θα είναι ο γεννητορας (seed) του συμπλέγματος (*cluster*). Είναι το πρώτο νέο μέλος του cluster.
2. Επαγωγικά: Για κάθε νέο μέλος του cluster επισκεπτόμαστε τους πλησιέστερους γείτονες του που δεν ανήκουν ήδη στο cluster. Τους προσθέτουμε στα 'νέα μέλη' με πιθανότητα  $P_{add}$ . Το αρχικό spin είναι πια 'παλιό μέλος'.
3. Όταν τελειώσουν τα 'νέα μέλη' η διαδικασία ανάπτυξης του cluster σταματάει.
4. Αλλάζουμε την τιμή του spin κάθε μέλους του cluster.

Προσοχή πρέπει να δείξουμε ώστε να ικανοποιείται η συνθήκη της λεπτομερούς ισοζύγησης και το κριτήριο της εργοδικότητας.

Η πιθανότητα να προστεθούν νέα μέλη στο cluster, στην εργασία μας δίνεται από την σχέση:

$$P_{add} = P(S_i, S_j) = 1 - \exp(\min[0, 2J/(k_B T)(e \cdot S_i)(e \cdot S_j)]) \quad (129)$$

### 8.8.6 Επεξεργασία μετρήσεων



**Εικόνα 42.** Η συνάρτηση βάθμωσης  $Q$  συναρτήσει της  $x$ . Κοντά στο  $x \approx 1$ , βλέπουμε το 65% του διαστήματος εμπιστοσύνης της πρόβλεψης. Αυτό είναι αποτέλεσμα της αβεβαιότητας της μεταβλητής  $a_i$ . Η διακεκομμένη γραμμή είναι τα όρια όλων των πιθανών συναρτήσεων  $Q$  που παράγονται μεταβάλλοντας τα  $a_i$  μέσα στο διάστημα εμπιστοσύνης. Το διάστημα εμπιστοσύνης είναι μόνο ένα μέτρο της αβεβαιότητας της  $Q$  καθώς οι περισσότερες τιμές του  $Q_i$  εξαρτώνται από τις ίδιες σε μια προηγούμενη πρόβλεψη. Ως εκ τούτου δεν χρησιμοποιήθηκε για τον υπολογισμό του διαστήματος εμπιστοσύνης της προβλέψιμης τιμής για το  $\xi$  αν και είναι ένας δείκτης για το σφάλμα.

Για την γραμμή τάσης της συνάρτησης  $x$ , χρησιμοποιούμε την εκθετική συνάρτηση

$$Q(x) = 1 + a_1 \exp\left(-\frac{1}{x}\right) + a_2 \exp\left(-\frac{2}{x}\right) + a_3 \exp\left(-\frac{3}{x}\right) + \dots \quad (130)$$

με μεταβλητό αριθμό όρων.

Για να συγκρίνουμε τα μήκη συσχετισμού που υπολογίσαμε με την μέθοδο του Kim, φτιάχνουμε τον πίνακα 3. Η σύγκριση μεταξύ των αποτελεσμάτων μας και των θεωρητικών προβλέψεων απεικονίζεται στο γράφημα 44. Για θερμοκρασίες μεταξύ  $T = 0.4 \rightarrow 0.5$  τα αποτελέσματά μας συμπίπτουν με τα θεωρητικά (Γράφημα 44(a)). Αν τα προβλέψιμα  $\xi$  από μικρότερες θερμοκρασίες προστεθούν, τότε η συνάρτηση προσαρμογής (*fitted function*) δεν ταιριάζει πολύ καλά αν και τα σημεία βρίσκονται προσεγγιστικά σε μια γραμμή. Έτσι φτιάχνουμε την προσαρμογή με

$$\log \xi = \alpha_1 + \alpha_2 \beta \quad (131)$$

όπου  $\beta = J/(k_B T)$ . Σαν αποτέλεσμα παίρνουμε  $\alpha_1 = -8.2429 \pm 0.4065$  και  $\alpha_2 = 6.7188 \pm 0.1724$  (γράφημα 44(b)). Αν η ίδια προσαρμογή γίνει και για τα δεδομένα του πίνακα 23χωρίς τις 2 τελευταίες γραμμές, παίρνουμε  $\alpha_1 = -6.6249 \pm 0.1204$  και  $\alpha_2 = 5.9777 \pm 0.0537$ , το οποίο συμφωνεί καλύτερα με την θεωρητική τιμή του  $\alpha_2 = 2\pi$ .

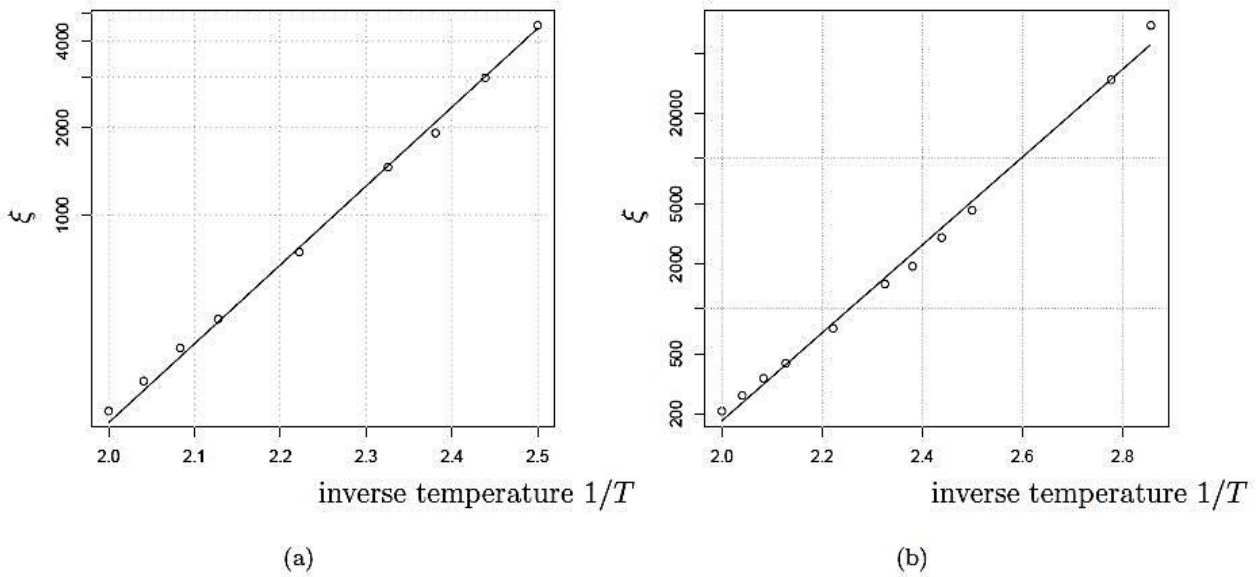
$L$	$\xi_L$	ste of $\xi_L$	MC steps	$x$	$Q(x)$	$\xi$
20	11.3849	0.068	0.08 e6	0.56	0.338	33.65
30	15.8123	0.089	0.09 e6	0.52	0.452	34.90
40	19.6219	0.073	0.16 e6	0.49	0.556	35.26
50	22.6213	0.066	0.25 e6	0.45	0.660	34.23
60	25.2676	0.069	0.36 e6	0.42	0.738	34.21
70	27.4011	0.065	0.49 e6	0.39	0.802	34.16
80	29.1021	0.062	0.64 e6	0.36	0.851	34.18
90	30.5323	0.059	0.81 e6	0.33	0.886	34.43
100	31.512	0.060	1.00 e6	0.31	0.914	34.45
110	32.2544	0.059	1.21 e6	0.29	0.934	34.50
130	33.3455	0.048	1.69 e6	0.25	0.960	34.70
150	33.8079	0.048	2.25 e6	0.22	0.976	34.61
160	34.0701	0.051	2.56 e6	0.21	0.981	34.70
180	34.2703	0.046	3.24 e6	0.19	0.989	34.63
200	34.3983	0.040	4.00 e6	0.17	0.993	34.61

**Πίνακας 2.** Ο πίνακας δείχνει έναν απλό έλεγχο αν η πρόβλεψη του  $\xi$  με το  $Q(x)$ , δίνει τα σωστά αποτελέσματα.

Για  $L=20$  παρατηρούμε μια μάλλον μεγάλη απόκλιση. Τα αποτελέσματα των υπόλοιπων μεγεθών πλέγματος συμφωνούν σε ικανοποιητικό βαθμό. [Z]

length	temperature	$\xi_L$	error of $\xi_L$	$\xi$	computation time (seconds)	cluster updates
100	0.5	59.1226	0.0950944	208.8692	7570	1000000
100	0.49	61.4012	0.100177	265.4039	7022	1000000
100	0.48	63.7259	0.104739	345.5347	7528	1000000
100	0.47	65.6162	0.10197	434.9305	8134	1000000
100	0.45	69.5925	0.105169	742.1125	6911	1000000
100	0.43	73.9694	0.133509	1462.4487	8109	1000000
100	0.42	75.5442	0.131312	1916.6082	8226	1000000
100	0.41	77.935	0.113375	2976.3249	10398	1000000
100	0.4	80.0327	0.131155	4517.7130	13279	1000000
120	0.36	105.36	0.150598	33204.9478	23510	1440000
100	0.35	91.2382	0.157301	76408.6109	10773	1000000

**Πίνακας 3.** Ο πίνακας δείχνει τα υπολογισμένα μήκη συσχετισμού  $\xi_L$  με τα αντίστοιχα προβλεπόμενα (*extrapolated*)  $\xi$  για διάφορες θερμοκρασίες. Οι δύο τελευταίες σειρές είναι αποτέλεσμα για  $x \approx 0.9$ . Σε αυτήν την περιοχή το προβλέψιμο  $\xi$  είναι μάλλον αναξιόπιστο καθώς τα σφάλματα της συνάρτησης προσαρμογής συσσωρεύονται στην μέθοδο Kim. [Z]



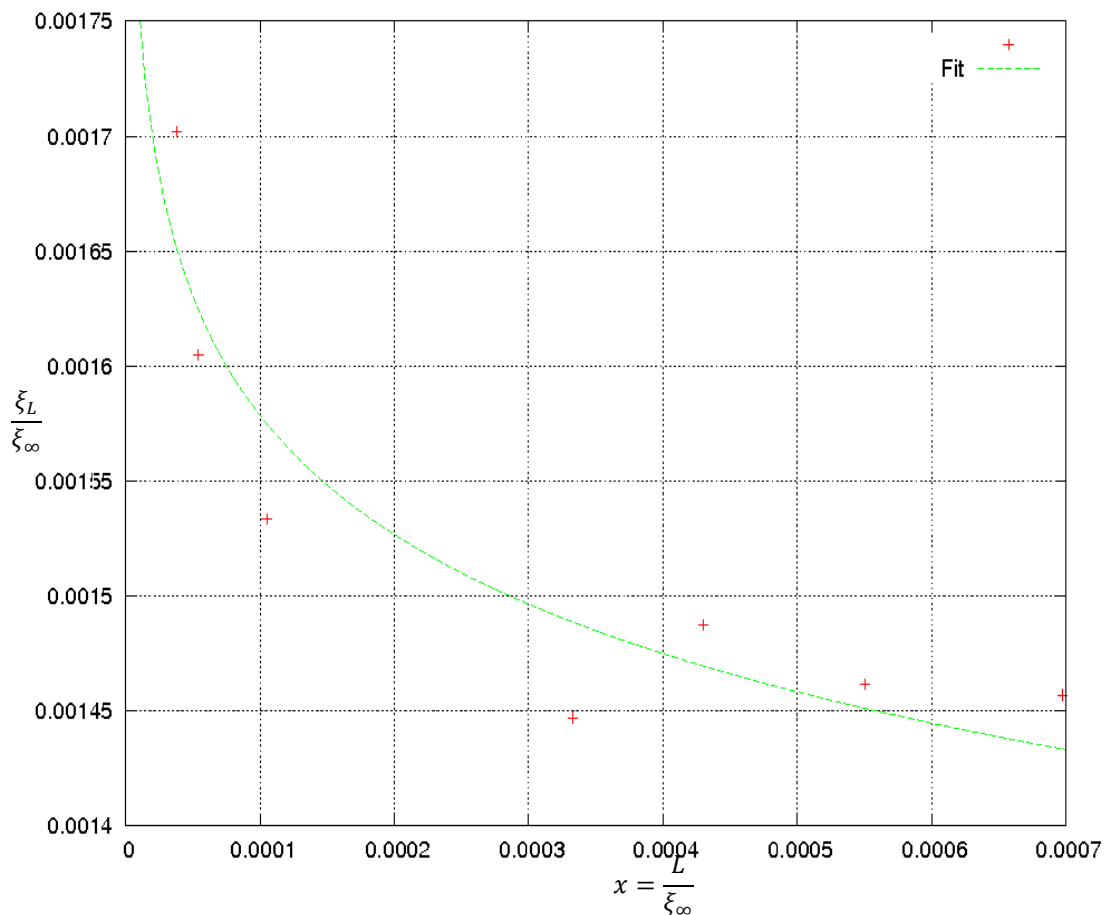
**Εικόνα 43.** Το προβλεπόμενο μήκος συσχετισμού  $\xi$  συναρτῆσει της θερμοκρασίας (a) Το προβλεπόμενο μήκος συσχετισμού  $\xi$  συναρτῆσει της θερμοκρασίας (κύκλοι) και της θεωρητικής τιμῆς  $\xi \propto \exp\left(\frac{2\pi J}{k_B T}\right)$ . (b) Η πρόβλεψη για μεγαλύτερες θερμοκρασίες με  $\log \xi = a_1 + a_2 \beta$ , όπου  $a_1 = -8.24 \pm 0.41$  και  $a_2 = 6.72 \pm 0.17$ . [Z]

Σύμφωνα με τους παραπάνω υπολογισμούς, κάθε προσομοίωση για  $\beta > 1.80$  δεν πρέπει να λαμβάνετε υπ' όψιν για τα συμπεράσματα μας καθώς για τα πλέγματα που χρησιμοποιούμε ισχύει  $L < \xi$ . Χαρακτηριστική εικόνα είναι το γράφημα της ειδικής θερμότητας σε σχέση με την θερμοκρασία, όπου βλέπουμε τις «ουρές» μετά την κορυφή, για θερμοκρασίες στις οποίες το μήκος συσχετισμού γίνεται μεγαλύτερο από το πλέγμα. Στα ίδια συμπεράσματα καταλήγουμε και για τα διαγράμματα της ενέργειας και της μαγνήτισης, οι τιμές των οποίων για θερμοκρασίες μεγαλύτερες από  $\beta > 1.80$  οφείλονται σε φαινόμενα λόγω περασμένου μεγέθους του πλέγματος.

Από τα παραπάνω γραφήματα βλέπουμε να ικανοποιείται μερικώς το φαινόμενο του asymptotic scaling. Για καλύτερη σύγκριση με τις θεωρητικές προβλέψεις, φτιάχνουμε τα δύο επόμενα γραφήματα, όπου μελετάμε την συμπεριφορά του  $\frac{\xi L}{\xi_\infty}$  συναρτῆσει του  $\frac{L}{\xi_\infty}$  και της απόκλισης του μήκους συσχετισμού (*correlation length defect*)  $\delta_\xi$  συναρτῆσει του  $\beta$ . Η απόκλιση του μήκους συσχετισμού ορίζεται αν διαιρέσουμε το μήκος συσχετισμού από την θεωρητική τιμή, δηλαδή

$$\delta_\xi = \beta e^{-2\pi\beta\xi} \quad (132)$$

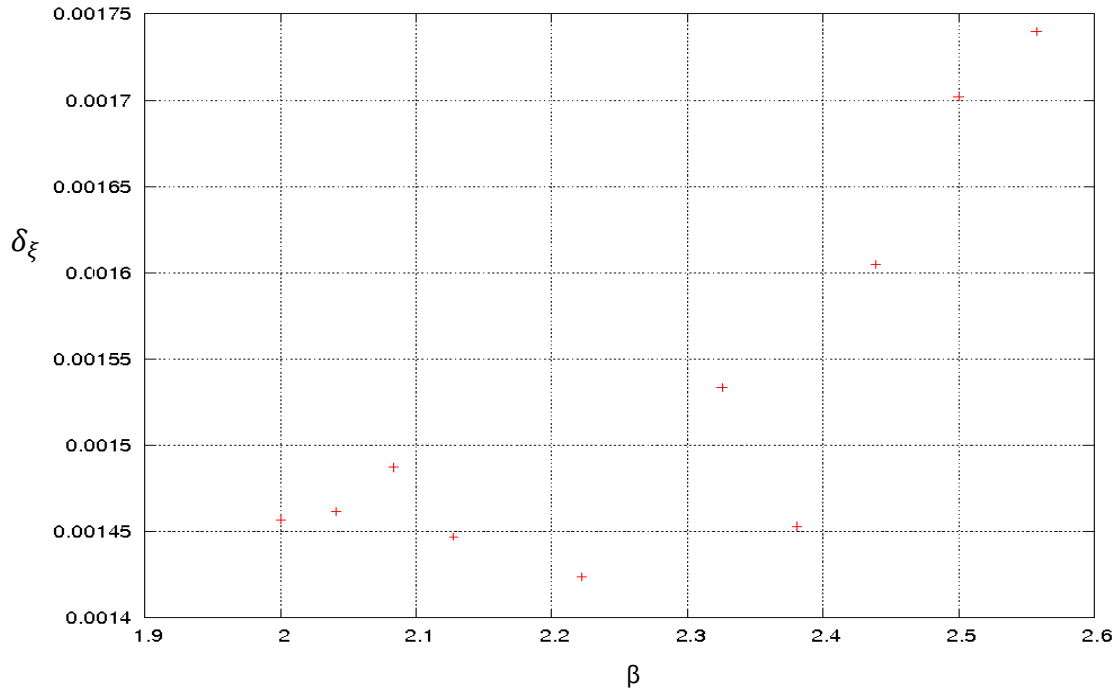
και για να ικανοποιείται το asymptotic scaling θα πρέπει το  $\delta_\xi$  να πηγαίνει σε μια σταθερή τιμή καθώς το  $\beta \rightarrow \infty$ .



**Εικόνα 44.** Η συμπεριφορά του λόγου  $\frac{\xi_L}{\xi_\infty}$ .

Παρατηρούμε ότι στις υψηλές θερμοκρασίες (μικρά  $\beta$ ) και άρα μικρά μήκη συσχετισμού  $\xi_L$  ο λόγος  $\frac{\xi_L}{\xi_\infty}$  είναι μικρός, υποδεικνύοντας έτσι ότι η συμπεριφορά της asymptotic scaling δεν ικανοποιείται. Καθώς όμως οι θερμοκρασίες μικραίνουν (μεγαλύτερα  $\beta$ ), παρατηρούμε μια εκθετική αύξηση του λόγου  $\frac{\xi_L}{\xi_\infty}$ , συμπεραίνοντας έτσι ότι ικανοποιείται το φαινόμενο του asymptotic scaling και μάλιστα παρατηρούμε ότι το μετρήσιμο μήκος συσχετισμού  $\xi_L$  αυξάνεται γρηγορότερα από την θεωρητική τιμή  $\xi_\infty$ . Το φαινόμενο αυτό φαίνεται καλύτερα στο επόμενο γράφημα, όπου παρατηρούμε μια διακύμανση της τιμής του  $\delta_\xi$  γύρω από μια σταθερή τιμή για θερμοκρασίες  $2 < \beta < 2.4$  (ικανοποιείται η asymptotic scaling) ενώ για μεγαλύτερες τιμές του  $\beta$  η απόκλιση μεγαλώνει.





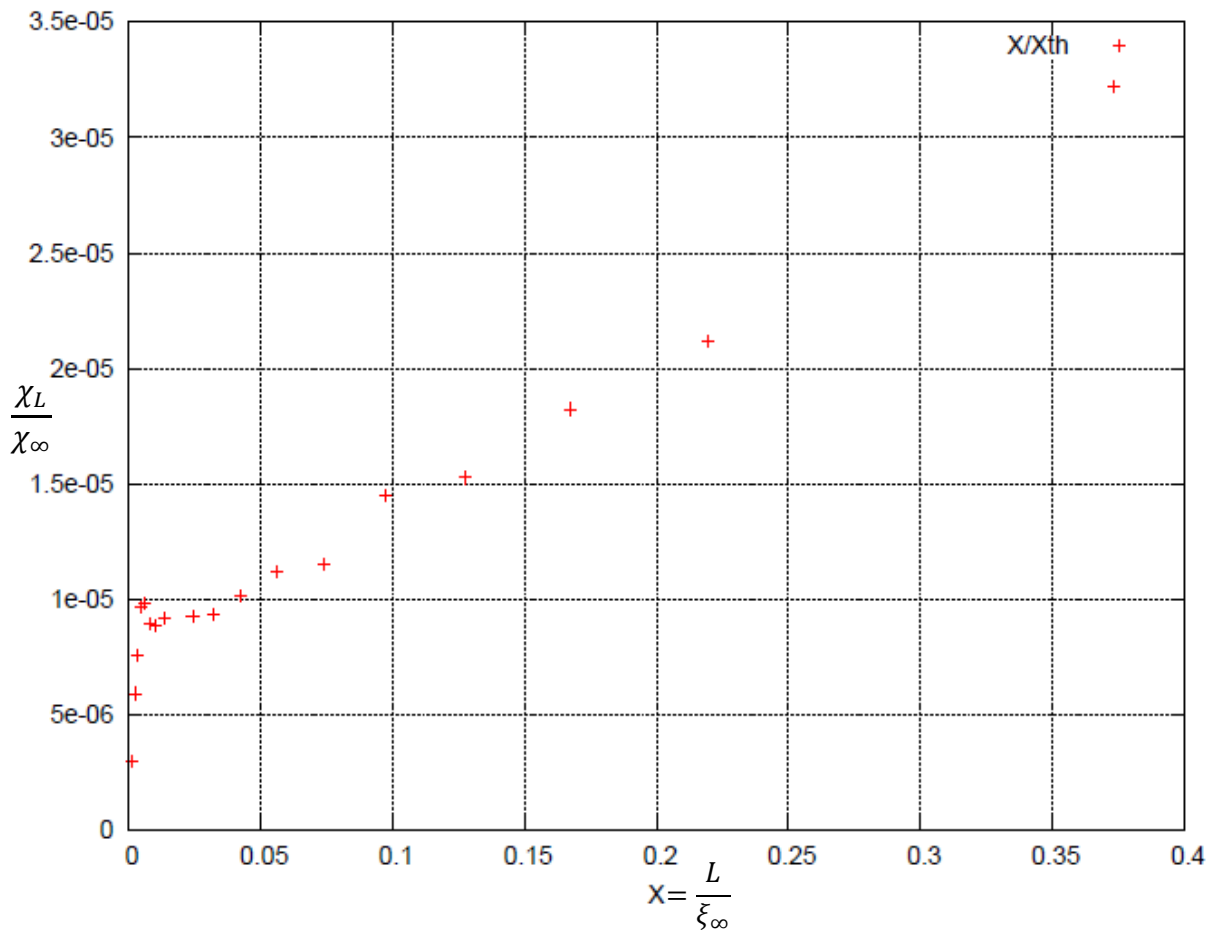
**Εικόνα 45.** Η απόκλιση του μήκους συσχετισμού συναρτήσει της θερμοκρασίας.

Το φαινόμενο της asymptotic scaling συμπεριφοράς μελετάται και για την περίπτωση της μαγνητικής επιδεκτικότητας. Η θεωρητική τιμή της μαγνητικής επιδεκτικότητας, υπολογισμένη με την βοήθεια της θεωρίας διαταραχών (*perturbation theory*) δίνεται από τον τύπο [18]

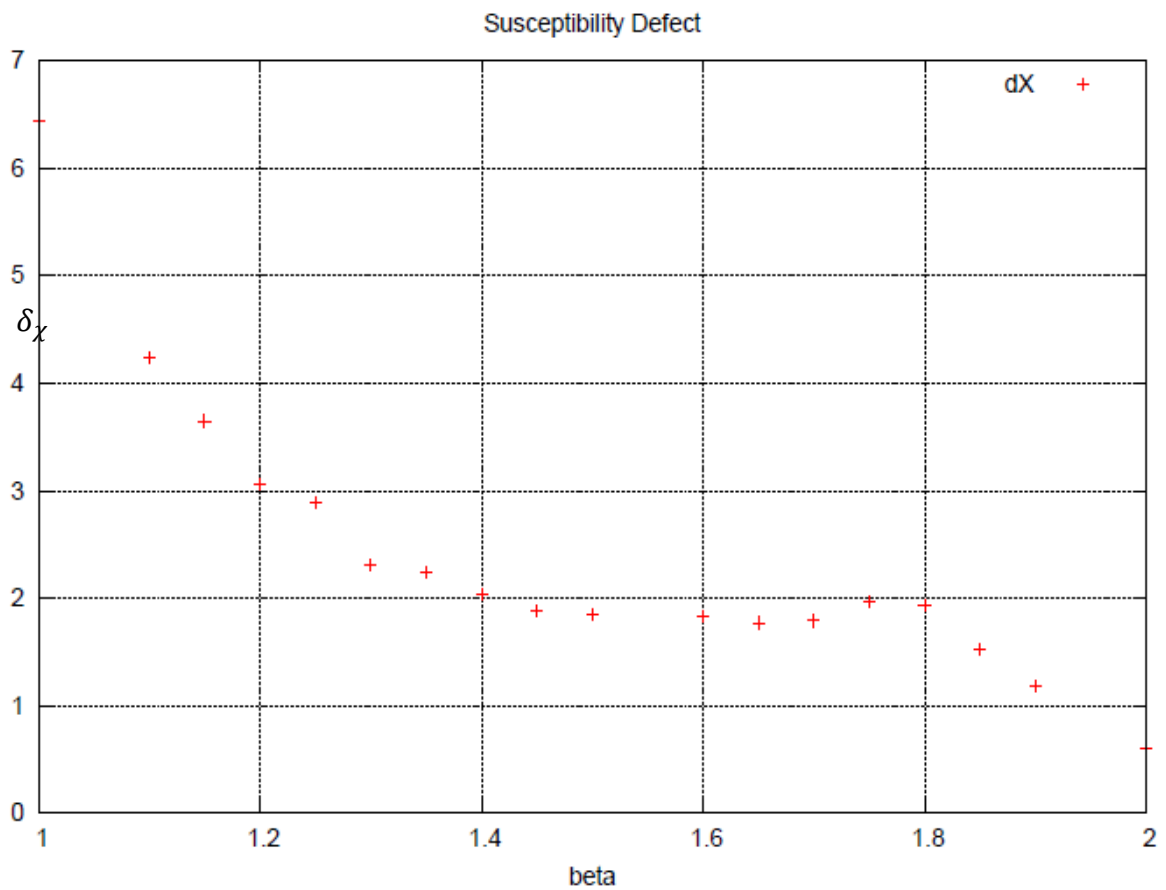
$$\chi_{\infty} = \frac{e^{4\pi\beta}}{\beta^4} \quad (133)$$

Για να ερευνήσουμε την ύπαρξη της asymptotic scaling συμπεριφοράς φτιάχνουμε το αντίστοιχο διάγραμμα των λόγων της μαγνητικής επιδεκτικότητας που υπολογίσαμε στην εργασία προς τις θεωρητικές τιμές,  $\frac{\chi L}{\chi_{\infty}}$ , συναρτήσει του  $\chi = \frac{L}{\xi_{\infty}}$  και το γράφημα της απόκλισης η οποία για την περίπτωση της μαγνητικής επιδεκτικότητας υπολογίζεται από τον τύπο [15]

$$\delta_{\chi} = 2 \times 10^5 \beta^4 e^{-4\pi\beta} \chi \quad (134)$$



Εικόνα 46. Η συμπεριφορά του λόγου  $\frac{\chi_L}{\chi_\infty}$ .



Εικόνα 47. Η απόκλιση της μαγνητικής επιδεκτικότητας συναρτήσει της θερμοκρασίας.

Από τα παραπάνω διαγράμματα παρατηρούμε ότι η μαγνητική επιδεκτικότητα φαίνεται να ακολουθεί την asymptotic scaling συμπεριφορά για μικρές θερμοκρασίες (για μικρότερα  $X$  στην εικόνα 47), και συγκεκριμένα για θερμοκρασίες  $1.4 < \beta < 1.8$  παρατηρούμε σταθερή τιμή στο γράφημα της απόκλισης [εικ.48], το οποίο δείχνει την συμφωνία των τιμών που υπολογίσαμε με τις θεωρητικές τιμές της σχέσης (134). Για θερμοκρασίες πέρα της τιμής  $\beta = 1.80$ , τα αποτελέσματα μας και πάλι ξεφεύγουν από τις αναμενόμενες τιμές, λόγω της ύπαρξης των φαινομένων πεπερασμένου μεγέθους και δεν πρέπει να λαμβάνονται υπ' όψιν.

## **9. Συμπεράσματα**

Η μελέτη μας στο μοντέλο Heisenberg με την βοήθεια της υπολογιστικής φυσικής και συγκεκριμένα με την χρήση των μεθόδων Monte Carlo, μας έδειξε ότι το μοντέλο δεν παρουσιάζει μετάβαση φάσης αλλά έχουμε καλές ενδείξεις ότι παρουσιάζει asymptotic scaling συμπεριφορά για μικρές θερμοκρασίες. Έτσι δεν παρατηρούμε φάσεις τάξης παρά μόνο αταξίας του συστήματος μας για τις τιμές θερμοκρασιών όπου μπορούμε να προσομοιώσουμε και να έχουμε σωστά αποτελέσματα ( $\beta < 1.80$ ). Σε αυτό το συμπέρασμα μας οδήγησαν τα ιστογράμματα της μαγνήτισης και της ενέργειας τα οποία παρουσιάζουν μια κορυφή, συνεχής μετάβαση φάσης, αλλά χωρίς να πραγματοποιείται στο εύρος θερμοκρασιών μια φάση τάξης. Επίσης σε αυτό συμβάλουν και οι γραφικές παραστάσεις της μαγνήτισης, της ενέργειας, της ειδικής θερμότητας και της μαγνητικής επιδεκτικότητας οι οποίες δεν παρουσιάζουν καμία ασυνέχεια.

Ακόμη η μέθοδος για τον υπολογισμό της κρίσιμης θερμοκρασίας με την μέθοδο της ροπής 4<sup>ης</sup> τάξης (*Binder*) δεν μπόρεσε να μας προσδιορίσει την κρίσιμη θερμοκρασία, ενισχύοντας πάλι την άποψη για την μη ύπαρξη μετάβασης φάσης.

Στη συνέχεια με την μέθοδο Kim δείξαμε ότι μπορούμε να προσδιορίσουμε τις τιμές μεγεθών όπως το μήκος συσχετισμού για θερμοκρασίες ή πλέγματα τα οποία δεν είναι προσβάσιμα από τις συνήθεις πρακτικές υπολογισμού. Έτσι μελετήσαμε το μήκος συσχετισμού  $\xi$ , το οποίο φαίνεται να ακολουθεί τις θεωρητικές προβλέψεις της asymptotic scaling θεωρίας για θερμοκρασίες μεταξύ  $2 < \beta < 2.4$ .

Τέλος βλέπουμε ότι και η μαγνητική επιδεκτικότητα φαίνεται να ικανοποιεί τις προβλέψεις της asymptotic scaling συμπεριφοράς και μάλιστα σε μεγαλύτερες θερμοκρασίες από την περίπτωση του μήκους συσχετισμού. Έτσι βλέπουμε ότι για θερμοκρασίες από  $\beta = 1.4$  έως και τα όρια των δυνατών τιμών θερμοκρασίας που μπορούμε να προσομοιώσουμε ( $\beta \approx 1.8$ ), η μαγνητική επιδεκτικότητα παρουσιάζει την asymptotic scaling συμπεριφορά.

## Πίνακας Εικόνων

Εικόνα 1. Σχηματική απεικόνιση της σχέσης μεταξύ της θεωρίας, του πειράματος και της υπολογιστικής προσομοίωσης ενός φυσικού φαινομένου. ....	- 9 -
Εικόνα 2. Σύστημα πολλών δίπολων .....	- 10 -
Εικόνα 3. Σχηματική αναπαράσταση του μοντέλου Ising. ....	- 12 -
Εικόνα 4. Σχηματική αναπαράσταση του $O(2)$ model .....	- 12 -
Εικόνα 5. Το μοντέλο Heisenberg. ....	- 13 -
Εικόνα 6. Οι θερμοκρασίες Curie για τα χημικά στοιχεία .....	- 14 -
Εικόνα 7. Η συνάρτηση συσχετισμού για $\xi < \infty$ και $\xi \rightarrow \infty$ . ....	- 24 -
Εικόνα 8. Η μαγνήτιση ανά πλεγματική θέση για το πρότυπο <i>Ising</i> για διαφορετικές αρχικές συνθήκες. ....	- 27 -
Εικόνα 9. <i>Single-Spin-Flip dynamics</i> .....	- 31 -
Εικόνα 10. Λόγος αποδοχής συναρτήσει της διαφοράς ενέργειας.....	- 32 -
Εικόνα 11. Η διαφορά της μεθόδου Metropolis σε σχέση με της απλής μεθόδου στους λόγους αποδοχής $A$ .....	- 33 -
Εικόνα 13. Η σχηματική αναπαράσταση της σχέσης των σφαιρικών συντεταγμένων σε καρτεσιανές. ....	- 37 -
Εικόνα 14. Το μοντέλο Heisenberg, στην περίπτωση της <i>cold start</i> . ....	- 38 -
Εικόνα 15. Το μοντέλο Heisenberg σε ένα πλέγμα $20 \times 20$ σε συνθήκες μεγάλης θερμοκρασίας ( <i>Hot start</i> ), από διάφορες οπτικές γωνίες. ....	- 39 -
Εικόνα 16. Διαγράμματα της μαγνήτισης και της ενέργειας σε σχέση με τον χρόνο για διαφορετικές θερμοκρασίες στο μοντέλο Ising .....	- 41 -
Εικόνα 17. Οι διακυμάνσεις της ενέργειας με τον αλγόριθμο <i>Metropolis</i> .....	- 42 -
Εικόνα 18. Οι διακυμάνσεις της μαγνήτισης με τον αλγόριθμο <i>Metropolis</i> .....	- 42 -
Εικόνα 19. Η εξάρτηση της ενέργειας σε σχέση με τα sweeps, για το μοντέλο Heisenberg μεγέθους $80 \times 80$ , για θερμοκρασία $\beta=0.5$ (Metropolis). ....	- 43 -
Εικόνα 20. Η συνάρτηση αυτοσυσχετισμού της ενέργειας ανά πλεγματική θέση για διάφορες θερμοκρασίες με τον αλγόριθμο <i>Metropolis</i> . ....	- 44 -
Εικόνα 21. Ο ολοκληρωμένος χρόνος αυτοσυσχετισμού του συστήματος για διάφορες θερμοκρασίες, με τον αλγόριθμο <i>Metropolis</i> . ....	- 44 -
Εικόνα 22. Η συνάρτηση αυτοσυσχετισμού της μαγνήτισης ανά πλεγματική θέση του συστήματος μας για διάφορα μεγέθη πλέγματος, με τον αλγόριθμο <i>Metropolis</i> . -	45 -
Εικόνα 23. Σχηματική αναπαράσταση του τρόπου υπολογισμού των γινομένων $s_i \cdot s_n$ .....	- 45 -
Εικόνα 24. Η μέθοδος Jackknife για ένα δείγμα από $n=20$ μετρήσεις. ....	- 48 -
Εικόνα 25. Γράφημα της ενέργειας ανά πλεγματική θέση ( $s_{pin}$ ) για διάφορα μεγέθη πλέγματος.....	- 49 -

Εικόνα 26. Ιστογράμματα της ενέργειας σε σχέση με την θερμοκρασία.....	50 -
Εικόνα 27. Γραφική παράσταση της εξάρτησης της ενέργειας του συστήματος σε σχέση με την θερμοκρασία, για διάφορα μεγέθη πλέγματος.....	50 -
Εικόνα 28. Διάταξη των spins στη θεμελιώδη κατάσταση .....	51 -
Εικόνα 29. Πλέγμα Bravais σε 2-διαστάσεις.....	52 -
Εικόνα 30. Παραδείγματα της σχέσης μεταξύ του Q και R.....	55 -
Εικόνα 31. Παραδείγματα κυβικών πλεγμάτων σε σχέση με το Q.....	55 -
Εικόνα 32. Η διάταξη των spins σε για χαμηλή θερμοκρασία. ....	60 -
Εικόνα 33. Η διάταξη των spins από διαφορετικές προοπτικές . ....	61 -
Εικόνα 34. Ιστόγραμμα της απόλυτης τιμής της μαγνήτισης ανα πλεγματική θέση για διάφορες θερμοκρασίες. ....	62 -
Εικόνα 35. Η μαγνήτιση του συστήματος ανά πλεγματική θέση σε σχέση με την θερμοκρασία για διαφορετικά μεγέθη πλέγματος.....	62 -
Εικόνα 36. Η ειδική θερμότητα σε σχέση με την θερμοκρασία σε όλο το φάσμα της θερμοκρασίας. ....	64 -
Εικόνα 37. Το γράφημα της ειδικής θερμότητας c σε σχέση με την θερμοκρασία για διάφορα μεγέθη πλέγματος .....	64 -
Εικόνα 38. (α) Η μαγνητική επιδεκτικότητα και (β) η μαγνητική επιδεκτικότητα ανά πλεγματική θέση συναρτήσει της θερμοκρασίας β. ....	65 -
Εικόνα 39. Η ροπή 4ης τάξης – Binder Cumulant συναρτήσει της θερμοκρασίας για διάφορα μεγέθη πλέγματος. ....	69 -
Εικόνα 40. Η συνάρτηση συσχετισμού 2 σημείων για διάφορες θερμοκρασίες-	70
-	
Εικόνα 41. Το μήκος συσχετισμού $\xi$ σε σχέση με το μέγεθος του πλέγματος $L$ για 2 θερμοκρασίες.....	71 -
Εικόνα 42. Παράδειγμα της μεθόδου Kim.....	72 -
Εικόνα 43. Η συνάρτηση βάθμωσης $Q$ συναρτήσει της $x$ .....	77 -
Εικόνα 44. Το προβλεπόμενο μήκος συσχετισμού $\xi$ .....	79 -
Εικόνα 45. Η συμπεριφορά του λόγου $\xi_L/\xi_\infty$ . ....	80 -
Εικόνα 46. Η απόκλιση του μήκους συσχετισμού συναρτήσει της θερμοκρασίας..	81 -
Εικόνα 47. Η συμπεριφορά του λόγου $\chi_L/\chi_\infty$ .....	82 -
Εικόνα 48. Η απόκλιση της μαγνητικής επιδεκτικότητας συναρτήσει της θερμοκρασίας. ....	82 -

## **Βιβλιογραφία**

- [1]. Σημειώσεις Υπολογιστικής Φυσικής, Μια Εισαγωγή στις Προσομοιώσεις Monte Carlo στη Στατιστική Φυσική, Κωνσταντίνος Ν. Αναγνωστόπουλος, 2010
- [2]. Markov Chain Monte Carlo Simulations and Their Statistical Analysis, Bernd A. Berg, 2004
- [3]. Monte Carlo Simulation in Statistical Physics An Introduction, K. Binder, D.W. Heermann, 2002
- [4]. A Guide to Monte-Carlo Simulations in Statistical Physics, David P. Landau & Kurt Binder, 2009
- [5]. Monte Carlo Methods in Statistical Physics, M. E. J. Newman & G.T. Barkema, 2002
- [6]. Kim, J. and de Souza A. J. F. and Landau, D.P. Numerical computation of finite size scaling functions: An alternative approach to finite size scaling., 1996, Phys. Rev. E, Vol 54, Number 3, Pages 2291-2297
- [7]. Correlation Length of the 2D Classical Heisenberg Model, S. Walter, ETH Zurich, CH, May 2000
- [8]. Group Theory and its Physical Applications, Chicago Lectures in Physics, L.M. Falicov, June 1966
- [9]. Στοιχειώδεις διαφορικές εξισώσεις και προβλήματα συνοριακών τιμών, William E. Boyce, Richard C. Dippima, 1999
- [10]. Theory of Magnetism, International Max Planck Research School for Dynamical Processes in Atoms, Molecules and Solids Lectures, Carsten Timm, 2011
- [11]. <http://www.phy.duke.edu/~rgb/Research/BCdesc/node2.html>
- [12]. <http://periodictable.com/Properties/A/CuriePoint.html>
- [13]. <http://www.ibiblio.org/e-notes/Perc/xy.htm>
- [14]. [http://www.aldebaran.cz/bulletin/2009\\_47\\_mag.php](http://www.aldebaran.cz/bulletin/2009_47_mag.php)
- [15]. J. Apostolakis, Cl.F. Baillie, G.C. Fox, Investigation of the two-dimensional O(3) model using the overrelaxation algorithm, Physical Review D, Volume 43, Number 8, 15 April 1991.
- [16]. S. Caracciolo, R. G. Edwards, A. Pelissetto, A.D. Sokal, Asymptotic Scaling in the Two-Dimensional O(3)  $\sigma$ -Model at Correlation Length  $10^5$ , November 5 1994.
- [17]. D. J. Gross, Fr. Wilczek, Asymptotically Free Gauge Theories, Physical Review D, Volume 8, Number 10, 15 November 1973.
- [18]. J.K. Kim, Application of Finite Size Scaling to Monte Carlo Simulations, Physical Review Letters, Volume 70, Number 12, 22 March 1993
- [19]. B. Alles, A. Buonanno, G. Cella, Perturbation theory predictions and Monte Carlo simulations for the 2D O(n) non-linear  $\sigma$ -models, Nuclear Physics B 500 [FS] (1997), 513-543, 3 June 1997.
- [20]. <http://www.zamandayolculuk.com/cetinbal/elementaryparticles.htm>
- [21]. Spontaneous Symmetry Breaking, Lecture Notes 221B, University of Tokyo, 2005

