

ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ
ΣΧΟΛΗ ΕΦΑΡΜΟΣΜΕΝΩΝ ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΩΝ ΚΑΙ
ΦΥΣΙΚΩΝ ΕΠΙΣΤΗΜΩΝ
ΤΟΜΕΑΣ ΦΥΣΙΚΗΣ

Τρισδιάστατο πρότυπο ΧΥ στο
πλέγμα

Διπλωματική εργασία

Συγγραφέας:
Ελευθερία ΣΟΛΟΜΩΝΙΔΗ

Επιβλέπων καθηγητής:
Γιώργος ΚΟΥΤΣΟΥΜΠΑΣ

Αθήνα, 28 Ιουνίου 2019



Ευχαριστίες

Θα ήθελα να ευχαριστήσω τον επιβλέποντα καθηγητή μου κ. Γιώργο Κουτσούμπα για την πολύτιμη βοήθειά του σε όλα τα στάδια της εκπόνησης της εργασίας, την υπομονή του και το ανοιχτόμυαλο και δημιουργικό πνεύμα που επέδειξε.

Περίληψη

Τα κρίσιμα φαινόμενα αποτελούν ένα μεγάλο κεφάλαιο της Στατιστικής Φυσικής. Τις τελευταίες δεκαετίες η μελέτη τους έχει διευκολυνθεί καθοριστικά από τον πολλαπλασιασμό της υπολογιστικής ικανότητας των υπολογιστών, μέσω των οποίων μπορούν να μελετηθούν εξονυχιστικά οι διάφορες προσεγγιστικές μέθοδοι. Ανάμεσα σε αυτές τις μεθόδους, οι προσομοιώσεις Μόντε Κάρλο παίζουν πρωταγωνιστικό ρόλο λόγω της αξιοπιστίας τους και του αναλογικά μικρού υπολογιστικού τους χρόνου. Από την άλλη, η ανάπτυξη των πλεγματικών θεωριών βαθμίδας στον τομέα της μη διαταρακτικής κβαντικής θεωρίας πεδίου έδωσε επιπρόσθετη αξία στη μελέτη των στατιστικών συστημάτων με κρίσιμα φαινόμενα, με την τελευταία να επεκτείνεται και σε άλλους τομείς της Φυσικής που χρησιμοποιούν θεωρίες πεδίου, όπως η Ατομική και Μοριακή Φυσική.

Στην παρούσα εργασία γίνεται μια ανασκόπηση των χαρακτηριστικών των κρίσιμων φαινομένων κυρίως δεύτερης τάξης καθώς και της λογικής της προσομοίωσης Μόντε Κάρλο, χρησιμοποιώντας ως αρχέτυπο το μοντέλο Ising. Στη συνέχεια γίνεται αβίαστα το πέρασμα στο πρότυπο XY, το οποίο μελετάται στην απλή του μορφή και έπειτα σε διάταξη δίνης. Αφορμή για την τελευταία περίπτωση αποτελεί η πρόσφατη διερεύνηση της σημασίας τοπολογικών διεγέρσεων όπως η δίνη σε θεωρίες πεδίου που απαντούν στην Ατομική Φυσική [3]. Επιστρέφοντας στην απλή διάταξη του προτύπου XY, εισάγουμε ένα δεύτερο είδος σπιν και μελετάμε ένα σύστημα δύο ειδών με αλληλεπίδραση πλησιέστερων γειτόνων, με κύριο σκοπό την εύρεση του διαγράμματος φάσεων. Τέλος, γίνεται μία εισαγωγή στις βασικές αρχές της πλεγματικής θεωρίας πεδίου και υπολογίζεται το διάγραμμα φάσεων για τη θεωρία ϕ^4 σε αλληλεπίδραση με διανυσματικό πεδίο.

Περιεχόμενα

1 Το πρότυπο Ising	8
1.1 Περιγραφή	8
1.2 Προσέγγιση μέσου πεδίου	10
1.3 Η προσομοίωση Μόντε Κάρλο για το πρότυπο Ising - Λογική της κατασκευής	12
1.4 Χαρακτηριστικές συμπεριφορές και έκφρασή τους στις προσομοιώσεις	15
1.4.1 Χρόνος για θερμική ισορροπία	15
1.4.2 Ειδική θερμοχωρητικότητα και μαγνητική επι- δεκτικότητα	18
1.4.3 Συναρτήσεις συσχετισμού	19
1.4.4 Εξέλιξη ενέργειας και μαγνήτισης συναρτήσει του β	23
1.4.5 Σπάσιμο συμμετρίας	25
2 Το πρότυπο XY	27
2.1 Περιγραφή	27
2.2 Η προσομοίωση Μόντε Κάρλο για το πρότυπο XY . .	28
2.3 Αποτελέσματα	30
3 Πρότυπο XY με συνθήκες σχηματισμού δίνης	34
4 Σύστημα XY για δύο πεδία με ζεύξη	40
4.1 Προσέγγιση μέσου πεδίου	40
4.1.1 Λογική της κατασκευής	40
4.1.2 Αποτελέσματα	42
4.2 Προσομοίωση Μόντε Κάρλο	44
5 Θεωρία πεδίου στο πλέγμα - Αλληλεπίδραση πε- δίου Higgs με διανυσματικό πεδίο	55
5.1 Πλεγματική θεωρία πεδίου	55
5.1.1 Ελεύθερο βαθμωτό πεδίο	55
5.1.2 Το πεδίο βαθμίδας	60
5.1.3 Ο μηχανισμός Higgs σε αλληλεπίδραση με πεδίο βαθμίδας	64
5.2 Προσομοιώσεις και αποτελέσματα	68
6 Ανακεφαλαίωση και Συμπεράσματα	72

Κατάλογος Σχημάτων

1	Εξέλιξη της ενέργειας και της μαγνήτισης ανά πλεγμα- τική θέση για 50×50 πλέγμα μέχρι χρόνο Μόντε Κάρλο $=200$ (διάφορες θερμοκρασίες)	16
2	Εξέλιξη της ενέργειας και της μαγνήτισης ανά πλεγμα- τική θέση για 50×50 πλέγμα μέχρι χρόνο Μόντε Κάρ- λο $=1000$ (διάφορες θερμοκρασίες)	18
3	Μαγνητική επιδεκτικότητα και ειδική θερμοχωρητικότη- τα για πλέγμα $70 \times 70, 10000$ περάσματα για κάθε β και βήμα $\beta=0.005$	19
4	Λεπτομέρεια των προηγούμενων	20
5	Σύγκριση μαγνητικής επιδεκτικότητας για τρία διαφο- ρετικά μεγέθη πλέγματος, με 1000 περάσματα σε κάθε β	21
6	Συνάρτηση συσχετισμού δύο σημείων και συνεκτική συνάρτηση συσχετισμού στο μοντέλο Ising για διάφο- ρες τιμές β , σε πλέγμα 10×10	22
7	Μέση μαγνήτιση ανά πλεγματική θέση για πλέγμα $70 \times$ 70 και 10000 βήματα ανά β	24
8	Μέση μαγνήτιση ανά πλεγματική θέση για πλέγμα $20 \times$ 20 και 10000 βήματα ανά β	25
9	Μέση μαγνήτιση ανά πλεγματική θέση για πλέγμα $50 \times$ 50 και 50 βήματα ανά β για την παρατήρηση του ανα- λόγου τού 'hysteresis loop'	26
10	Η μείον μέση ενέργεια ανά δεσμό και οι μέσες χ - και ψ -συνιστώσες της μαγνήτισης στο μοντέλο XY για ένα πεδίο σπιν. Το πλέγμα είναι $20 \times 20 \times 20$. Για την ενέρ- γεια έγιναν 120 βήματα Μόντε Κάρλο ανά β με μέτρη- ση των τελευταίων 100, ενώ για τις μαγνητίσεις έγιναν $20+5$ βήματα Μόντε Κάρλο.	31
11	Συνάρτηση συσχετισμού δύο σημείων κατά τον άξονα του χρόνου για ένα πεδίο μοντέλου XY σε $10 \times 10 \times 50$ πλέγμα, για διάφορες τιμές της παραμέτρου β , και λε- πτομέρεια για τιμές κοντά στην κρίσιμη τιμή β	32

12	Συνεχτική συνάρτηση συσχετισμού κατά τον άξονα του χρόνου για ένα πεδίο μοντέλου ΧΥ σε 10*10*50 πλέγμα, για διάφορες τιμές της παραμέτρου β , και λεπτομέρεια για τιμές κοντά στην κρίσιμη τιμή β	33
13	Συνοριακές συνθήκες για το τρισδιάστατο πρότυπο ΧΥ με σχηματισμό δίνης (ενδεικτικό πλέγμα 40*40*40). . .	34
14	Αρχικός σχηματισμός που προσομοιάζει σε δίνη με κέντρο το κέντρο του τετραγώνου	34
15	Η διάταξη των σπιν στις συνοριακές επιφάνειες του πλέγματος και η καμπύλη των κέντρων των δινών όπως προκύπτουν εποπτικά, για πλέγμα 30*30*30 στην τιμή $\beta=0.5$	36
16	Το πλέγμα και η καμπύλη των κέντρων των δινών του σχήματος 15 σε πλάγια όψη ως προς i_x και ως προς i_y	37
17	Διάταξη των αναμενόμενων τιμών των σπιν για τρία πλεγματικά επίπεδα $i_t = 15, 20$ και 30 σε πλέγμα 80*80*60 για τιμή $\beta=0.5$. Με κουκκίδα σημειώνεται η θέση του κέντρου της σχηματιζόμενης δίνης.	38
18	Το πεδίο του σπιν για το βήμα προσομοίωσης (χρόνο Μόντε Κάρλο) 110 και οι θέσεις του κέντρου της δίνης σε επόμενα βήματα, στα επίπεδα $i_t = 16$ και $i_t = 26$, για πλέγμα 30*30*30 και $\beta=1$	39
19	Η κίνηση, κατά τη διάρκεια της προσομοίωσης, των κέντρων των δινών στα επίπεδα $i_t = 16$ και $i_t = 26$	39
20	Καμπύλες εξισώσεων αυτοσυνέπειας για $\beta_2=0.20$, $\mu=0.10$ και για τρεις διαφορετικές τιμές του β_1 , 0.20, 0.26 και 0.27 αντίστοιχα. Στον οριζόντιο άξονα βρίσκεται το s και στον κατακόρυφο το σ	49
21	Διάγραμμα ισοϋψών καμπυλών του χώρου των παραμέτρων από την προσέγγιση μέσου πεδίου. Στον οριζόντιο άξονα αναπαρίσταται το β_1 και στον κατακόρυφο το β_2 . Το "mu" αναφέρεται στην τιμή του μ	50
22	Το σημείο τομής των καμπυλών αυτοσυνέπειας για $\beta_2 = 0$, μ λίγο μεγαλύτερο από μηδέν ($=0.05$) και β_1 λίγο μεγαλύτερο από την κρίσιμη τιμή του ($=0.36$). Το s αποκτά κατευθείαν μεγάλη τιμή μαγνήτισης ενώ το σ αποκτά μεν μαγνήτιση αλλά πολύ μικρής τιμής.	50

23	Μέση (αντίθετη) ενέργεια ανά δεσμό του πρώτου πεδίου s , του πρώτου με το δεύτερο πεδίο, του δεύτερου πεδίου και μέση x -συνιστώσα της μαγνήτισης του δεύτερου πεδίου, για $\beta_1=0.8$, $\beta_2=0$ και μεταβαλλόμενο μ , συναρτήσει του μ . Το πλέγμα είναι $20*20*20$ και γίνονται $20+5$ βήματα Μόντε Κάρλο ανά τριπλέτα παραμέτρων.	51
24	Σύγκριση των ενεργειών των s, σ και των x -συνιστωσών των μαγνητίσεων, συναρτήσει του μ , για δύο ζεύγη τιμών $(\beta_1, \beta_2)=(0.8, 0)$ και $(0.3, 0.2)$. Πλέγμα $20*20*20$, $20+5$ βήματα Μόντε Κάρλο ανά μ	51
25	Αριστερά: ενέργεια σύζευξης μεταξύ των δύο πεδίων συναρτήσει του μ . Δεξιά: ενέργεια του κάθε πεδίου, ενέργεια σύζευξης και συνολική ενέργεια. Και για τις δύο εικόνες, $\beta_1=\beta_2=0$ και γίνονται $100+20$ επαναλήψεις ανά μ	52
26	Η x -συνιστώσα της μαγνήτισης τόσο για το πεδίο s όσο και για το σ , συναρτήσει του μ για $\beta_1=\beta_2=0$. $100+20$ επαναλήψεις	52
27	Προσεγγιστικό διάγραμμα φάσεων από τις προσομοιώσεις Μόντε Κάρλο στο επίπεδο $\beta_2 = 0$	53
28	Σύγκριση της υποψήφιας θεωρητικής μορφής 39 με σημεία από την προσομοίωση Μόντε Κάρλο, σε διάγραμμα ισοϋψών καμπυλών ως προς β_2 . Στον οριζόντιο άξονα απεικονίζεται το β_1 και στον κατακόρυφο το μ	53
29	Αναμενόμενη ποιοτική μορφή του διαγράμματος φάσεων για σύστημα XY δύο πεδίων με ζεύξη, με βάση τις προσομοιώσεις Μόντε Κάρλο.	54
30	Γραφική επεξήγηση του path integral. Ο οριζόντιος άξονας είναι μία από τις μεταβλητές του χωροχρόνου, π.χ. το τ , ενώ ο κατακόρυφος είναι το πεδίο ϕ . Γίνεται διαμέριση του τ και σε κάθε σημείο που προκύπτει, το ϕ ολοκληρώνεται ως προς όλες τις δυνατές του τιμές, καθεμία από τις οποίες αντιστοιχεί σε μια διαφορετική πραγμάτωση του ϕ , $\phi(\tau)$	57
31	Γραφική επεξήγηση του τρόπου κατασκευής της πλακέτας 62	62

32	Το αντίθετο της μέσης ενέργειας ανά σύνδεσμο για τρεις μεγάλες τιμές της παραμέτρου β_g σε συνάρτηση με την παράμετρο β_h . Παρουσιάζονται επιπλέον τα αντίθετα των μέσων ενεργειών ανά πλακέτα, οι οποίες είναι πολύ κοντά στο 1 όπως αναμένεται.	70
33	Τα αντίθετα των μέσων ενεργειών ανά σύνδεσμο και ανά πλακέτα για $\beta_g = 3, 1.5, 1.2$. Για $\beta_g = 3$ έχουν γίνει 50 επαναλήψεις ανά τιμή β_h ενώ για τις άλλες δύο τιμές του β_g έχουν γίνει 20 επαναλήψεις.	71
34	Το διάγραμμα φάσεων	71

Κατάλογος Πινάκων

1	Ενδεικτικές προσεγγιστικές τιμές των κρίσιμων σημείων, όπως υπολογίστηκαν από τις προσομοιώσεις Μόντε Κάρλο.	48
2	Κρίσιμα ζεύγη τιμών των παραμέτρων για το διάγραμμα φάσεων του μοντέλου Higgs-διανυσματικού πεδίου όπως υπολογίστηκαν από δοκιμές με σταθερό β_g και μεταβαλλόμενο β_h	70

1 Το πρότυπο Ising

Ένα σχετικά απλό πρότυπο που αναδεικνύει όλα τα ποιοτικά χαρακτηριστικά των μεταβάσεων φάσης, ενώ προσφέρεται για εφαρμογή των προσομοιώσεων Μόντε Κάρλο, είναι το πρότυπο Ising.

Το πρότυπο αυτό έχει χρησιμοποιηθεί για να εξηγήσει τον σιδηρομαγνητισμό, δηλαδή το φαινόμενο κατά το οποίο κάποια υλικά αποκτούν μαγνήτιση αυθόρμητα (χωρίς την παρουσία εξωτερικού μαγνητικού πεδίου), κάτω από μια ορισμένη θερμοκρασία. Υποθέτουμε ότι στα υλικά αυτά υπάρχει μια συλλογή ατόμων που το καθένα έχει μαγνητική ροπή, η οποία καθορίζεται από το σπιν. Καθώς μειώνεται η θερμοκρασία, τα σπιν θα πρέπει να προσανατολίζονται όλα στην ίδια κατεύθυνση, με αποτέλεσμα να εμφανίζεται μαγνήτιση και σε μακροσκοπικό επίπεδο.

1.1 Περιγραφή

Για τη θεμελίωση του προτύπου, θεωρούμε ένα σύνολο από αλληλεπιδρώντα σπιν, τοποθετημένα σε ένα πλέγμα Δ διαστάσεων. Το κάθε σπιν παίρνει μόνο δύο δυνατές τιμές, $+1$ και -1 , κατ' αντιστοιχία με τον χβαντικό αριθμό του σπιν για τα φερμιόνια. Στη δική μας περιγραφή το πλέγμα είναι δισδιάστατο, δηλαδή $\Delta=2$. Κατά την απλούστερη προσέγγιση, το κάθε σπιν αλληλεπιδρά μόνο με τους πλησιέστερους γείτονες, οι οποίοι θα είναι 4 το πλήθος. Η Χαμιλτονιανή του συστήματος δίνεται από την απλή σχέση

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j - B \sum_i s_i \quad (1)$$

όπου J μια θετική "σταθερά ανταλλαγής", το $\langle ij \rangle$ υποδηλώνει άθροιση στους πλησιέστερους γείτονες, ενώ το μαγνητικό πεδίο έχει την κατεύθυνση του σπιν $+1$.

Είναι προφανές ότι η ύπαρξη μεγάλου αριθμού συζευγμένων βαθμών ελευθερίας καθιστά απαγορευτική την αναλυτική μελέτη. Στα επόμενα θα καταφύγουμε σε προσεγγιστικές και αριθμητικές μεθόδους. Επομένως, πρέπει αρχικά να εγκαταλείψουμε την χβαντική θεώρηση της Χαμιλτονιανής και των σπιν ως τελεστών που δρουν πάνω σε χβαντικές καταστάσεις. Έτσι, θεωρούμε ότι το κάθε σπιν έχει συγκεκριμένη τιμή, δηλαδή σε αυτή τη φάση παραμερίζουμε χβαντικά φαινόμενα υπέρθεσης. Με αυτόν τον τρόπο η σχέση για τη Χαμιλτονιανή

ανάγεται σε εξίσωση της ενέργειας. Οποιαδήποτε αβεβαιότητα θα μας απασχολήσει θα είναι καθαρά στατιστικής φύσης και όχι κβαντικής.

Η μελέτη για την εμφάνιση αυθόρμητης μαγνήτισης γίνεται προφανώς απουσία εξωτερικού πεδίου. Παίρνοντας για ευκολία τη σταθερά ανταλλαγής αδιάστατη και ίση με τη μονάδα, έχουμε:

$$E = - \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j \quad (2)$$

Το σύστημα μπορεί κάθε στιγμή να βρίσκεται σε μία κατάσταση, που καθορίζεται από την εκάστοτε διάταξη (configuration) των σπιν, $\{s_1, s_2, \dots, s_N\}$. Αν το πλέγμα έχει N θέσεις, τότε οι διαφορετικές καταστάσεις του συστήματος είναι 2^N . Κάθε τέτοια κατάσταση λέγεται και μικροκατάσταση (microstate) του συνόλου. Η πιθανότητα να βρίσκεται σε μια κατάσταση καθορίζεται από τη στατιστική του συνόλου. Εδώ θεωρούμε ότι το σύστημα βρίσκεται σε επαφή με δεξαμενή θερμότητας η οποία βρίσκεται σε ορισμένη θερμοκρασία T , ή εναλλακτικά $\beta = \frac{1}{k_B T}$. Επομένως το σύνολο των μικροκαταστάσεων αποτελεί ένα κανονικό σύνολο (canonical ensemble). Σύμφωνα με τη στατιστική φυσική, σε θερμική ισορροπία, η πιθανότητα το σύστημα να βρίσκεται σε μια μικροκατάσταση α είναι

$$P_\alpha = \frac{1}{Z} e^{-\beta E_\alpha} \quad (3)$$

όπου Z η συνάρτηση επιμερισμού (partition function), που λόγω της κανονικοποίησης των πιθανοτήτων στη μονάδα είναι ίση με

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

Έχουμε λοιπόν μια πλήρη στατιστική περιγραφή του συστήματος και με βάση αυτήν μπορούμε να υπολογίσουμε με ακρίβεια αναμενόμενες τιμές για διάφορες ποσότητες, π.χ. για την ενέργεια και τη μαγνήτιση. Πράγματι, η αναμενόμενη τιμή της συνολικής ενέργειας του συστήματος θα είναι

$$\langle E \rangle = \sum_{\alpha} E_\alpha P_\alpha = \frac{1}{Z} \sum_{\alpha} E_\alpha e^{-\beta E_\alpha} \quad (4)$$

ενώ η μαγνήτιση $M = \sum_i s_i$ θα έχει αναμενόμενη τιμή

$$\langle M \rangle = \sum_{\alpha} M_\alpha P_\alpha \quad (5)$$

Και πάλι όμως, ο εκθετικά μεγάλος αριθμός των δυνατών καταστάσεων που εμφανίζονται καθώς μεγαλώνει το πλέγμα καθιστά επίπονους τέτοιους υπολογισμούς. Για τους παραπάνω λόγους γίνεται σαφές ότι χρειάζεται να χρησιμοποιήσουμε αριθμητικούς υπολογισμούς ή εναλλακτικά αδρές προσεγγίσεις.

Σημειώνεται ωστόσο ότι το πρότυπο Ising έχει επιλυθεί αναλυτικά, στην πλήρη του μορφή σε μία διάσταση καθώς και σε δύο διαστάσεις για μηδενικό εξωτερικό πεδίο και με περιοδικές συνοριακές συνθήκες (βλ. παρακάτω). Συγκεκριμένα, ενώ στο μονοδιάστατο πρότυπο δε συμβαίνει μετάβαση φάσης, στο δισδιάστατο τετραγωνικό πλέγμα ($L \times L$) προκύπτει μετάβαση φάσης δεύτερης τάξης με συγκεκριμένους κρίσιμους εκθέτες [11]. Οι εκθέτες αυτοί είναι

$$\begin{aligned}\alpha &= 0 \\ \beta &= \frac{1}{8} \\ \gamma &= \frac{7}{4} \\ \nu &= 1\end{aligned}$$

Αυτά τα αναλυτικά αποτελέσματα θα συγκριθούν με τα πορίσματα από τις προσεγγίσεις που θα κάνουμε.

1.2 Προσέγγιση μέσου πεδίου

Μια πρώτη προσπάθεια αντιμετώπισης του προβλήματος αποτελεί η θεωρία μέσου πεδίου (Mean-field theory). Στο παρόν απλώς θα αναφερθούμε στη λογική της και θα παραθέσουμε υπάρχοντα αποτελέσματα, αφήνοντας κατά μέρος υπολογισμούς. Η συγκεκριμένη προσέγγιση βρίσκει τη μέση τιμή της μαγνήτισης ανά πλεγματική θέση σε θερμοκή ισορροπία και με βάση αυτήν υπολογίζει άλλες ποσότητες.

Για την κατανόηση της προσέγγισης θεωρούμε αρχικά σύστημα ενός μόνο σωματιδίου σε μαγνητικό πεδίο, σε θερμοκή επαφή με δεξαμενή θερμοτήτας. Αυτό έχει ενέργεια

$$E = -Bs$$

και αφού $s = \pm 1$ η ενέργεια θα έχει δυνατές τιμές $\mp B$.

Σύμφωνα με όσα είπαμε, η καθεμία από τις δύο καταστάσεις έχει πιθανότητα εμφάνισης $P_+ = \frac{1}{2}e^{\beta B}$ και $P_- = \frac{1}{2}e^{-\beta B}$. Η αναμενόμενη τιμή της μαγνήτισης είναι

$$\langle M \rangle = \langle s \rangle = 1P_+ + (-1)P_- = \tanh(\beta B) \quad (6)$$

Επανερχόμαστε στο πλέγμα των σπιν απουσία εξωτερικού πεδίου. Η ενέργεια μπορεί να γραφτεί ως

$$E = - \sum_i \left(\sum_{\langle j \rangle} s_j \right) s_i \quad (7)$$

όπου το $\langle j \rangle$ υποδηλώνει τους πλησιέστερους γείτονες του σπιν i . Η ΠΜΠ βασίζεται στην παραδοχή ότι, αγνοώντας συνοριακά φαινόμενα, το κάθε σπιν του πλέγματος θα “βλέπει” κατά μέσο όρο το ίδιο περιβάλλον γύρω του. Τώρα μπορούμε να δούμε τον όρο της εξίσωσης 7 που βρίσκεται μέσα στην παρένθεση ως ένα εξωτερικό μαγνητικό πεδίο για το κάθε σπιν i , γράφοντας

$$E \approx - \left(\sum_{\langle j \rangle} s_j \right) \sum_i s_i = -B \sum_i s_i \quad (8)$$

. Το πρόβλημα έχει αναχθεί σε πρόβλημα N ανεξάρτητων βαθμών ελευθερίας. Επομένως, σε πλήρη αντιστοιχία με την περίπτωση του ενός σωματιδίου, η αναμενόμενη τιμή του κάθε σπιν θα προκύπτει από τη σχέση (6) όπου εδώ το πεδίο θα είναι ένα “μέσο πεδίο” που θα προκύπτει από τα γειτονικά σπιν, σύμφωνα με την

$$B = \sum_{\langle j \rangle} \langle s \rangle_j = 4 \langle s \rangle \quad (9)$$

αφού η μέση μαγνήτιση θα είναι ίδια για κάθε πλεγματοική θέση (και 4 ο αριθμός των πλησιέστερων γειτόνων). Συνδυάζοντας τις εξισώσεις (6) και (9) προκύπτει η σχέση

$$\langle s \rangle = \tanh(4\beta \langle s \rangle) \quad (10)$$

που είναι μια **σχέση αυτοσυνέπειας** για τη μέση μαγνήτιση ανά πλεγματοική θέση.

Στη συνέχεια η εξίσωση αυτή μπορεί να λυθεί αριθμητικά με διάφορες μεθόδους [4]. Προφανής λύση είναι η $\langle s \rangle = 0$, που αντιστοιχεί σε ολική μαγνήτιση του πλέγματος ίση με μηδέν και ολική ενέργεια επίσης ίση με 0. Η αριθμητική επίλυση όμως οδηγεί για μεγάλα β (μικρές θερμοκρασίες) και σε μια επιπλέον λύση $\langle s \rangle > 0$ (και μία ισοδύναμη αρνητική), η οποία οδηγεί σε μικρότερη (αρνητική) ενέργεια για το σύστημα (όπως φαίνεται από τις εξισώσεις (8) και (9)). Επομένως, μετά από μία κρίσιμη τιμή β_C το σύστημα αποκτά αυθόρμητη μαγνήτιση $N \langle s \rangle$. Άρα η ΠΜΠ προβλέπει ορθά μια σιδηρομαγνητική μετάβαση.

Αφήνοντας κατά μέρος τους συγκεκριμένους υπολογισμούς, μπορούμε να ασχοληθούμε με την περίπτωση που βρισκόμαστε κοντά στο κρίσιμο β και $\langle s \rangle \ll 1$. Αναπτύσσοντας κατά Taylor έχουμε ότι $\tanh x \approx x - \frac{1}{3}x^3$, παίρνουμε ότι η μη μηδενική (θετική) λύση είναι η

$$\langle s \rangle = \sqrt{\frac{3\beta}{(4\beta)^3} \left(4 - \frac{1}{\beta}\right)} \sim \sqrt{\frac{1}{\beta_C} - \frac{1}{\beta}} \sim (T_C - T)^{\frac{1}{2}}$$

όπου $\beta_C = \frac{1}{4}$ ή $T_C = 4$. Συνεπώς και η μέση ολική μαγνήτιση κοντά στο κρίσιμο σημείο ακολουθεί ένα νόμο δύναμης (power law) με κρίσιμο εκθέτη $1/2$. Ο εκθέτης αυτός συνήθως συμβολίζεται με β . Παρόλα αυτά, αναλυτικοί υπολογισμοί δίνουν ότι ο κρίσιμος εκθέτης είναι ίσος με $1/8$ αντί για $1/2$. Επίσης, η κρίσιμη θερμοκρασία προκύπτει να είναι $\beta_C = \frac{1}{4} = 0.25$ ενώ η αναλυτική τιμή βρίσκεται στο $\beta_C = \frac{1}{2} \ln(1 + \sqrt{2}) \approx 0.44$. Συνεπώς, η ΠΜΠ μπορεί να είναι ποιοτικά σωστή αλλά βρίσκεται πολύ μακριά από τα σωστά ποσοτικά αποτελέσματα.

Σημειώνεται ότι θεωρούμενο ως δυναμικό σύστημα, το σύστημα υφίσταται μια διακλάδωση τύπου pitchfork. Παρακάτω παρατίθενται και τα αριθμητικά αποτελέσματα.

1.3 Η προσομοίωση Μόντε Κάρλο για το πρότυπο Ising - Λογική της κατασκευής

Η μέθοδος Μόντε Κάρλο είναι η βασική μέθοδος που θα χρησιμοποιήσουμε για το παρόν πρότυπο, καθώς και για τα πιο περίπλοκα μοντέλα που θα μας απασχολήσουν αργότερα. Γενικά, πρόκειται για μία μέθοδο προσομοίωσης φυσικών στοχαστικών διαδικασιών με τη χρήση (με κάποιον τρόπο) μιας ακολουθίας τυχαίων ή, συνήθως, ψευδοτυχαίων αριθμών, οι οποίοι παράγονται από μια γεννήτρια. Δημιουργούνται διάφορες δυνατές καταστάσεις του συστήματος και από το προκύπτον δείγμα υπολογίζονται οι αναμενόμενες τιμές των φυσικών ποσοτήτων που μας ενδιαφέρουν.

Θέλουμε να προσομοιώσουμε την αλληλεπίδραση του πλέγματος των σπιν με τη δεξαμενή θερμότητας. Βασιζόμαστε στη συμπεριφορά σε κατάσταση ισορροπίας, όπου το σύστημα λειτουργεί ως κανονικό σύνολο και ακολουθεί την κατανομή Boltzmann που περιγράφηκε νωρίτερα. Μια αρχική σκέψη θα ήταν να δημιουργήσουμε διάφορες

καταστάσεις με εντελώς τυχαίο τρόπο και στη συνέχεια να υπολογίσουμε τις μέσες τιμές των φυσικών ποσοτήτων με βάση τις σχέσεις 4 και 5. Όμως με αυτόν τον τρόπο, λόγω της εκθετικής συνάρτησης, τη μεγαλύτερη συνεισφορά έχουν πάντα οι καταστάσεις με τη χαμηλότερη ενέργεια, γεγονός που διαστρεβλώνει τα αποτελέσματα. Έτσι, η μέθοδος της απλής δειγματοληψίας (simple sampling) απορρίπτεται και αντί αυτής ακολουθείται ένα προσαρμοσμένο είδος *importance sampling*.

Ο τρόπος δειγματοληψίας βασίζεται στη λεγόμενη **συνθήκη λεπτομερούς ισορροπίας** [2]:

Σε θερμική ισορροπία, η πιθανότητα εύρεσης του συστήματος σε μια μικροκατάσταση παραμένει σταθερή στο χρόνο. Επομένως, οι απόλυτοι ρυθμοί μετάβασης από μία κατάσταση μ σε μια ν και από την ν στην μ θα πρέπει να είναι ίσοι. Σκεπτόμενοι ότι ο απόλυτος ρυθμός μετάβασης είναι η πιθανότητα ενός σύνθετου ενδεχομένου (ανά μονάδα χρόνου), μπορούμε να γράψουμε

$$P_\mu W(\mu \rightarrow \nu) = P_\nu W(\nu \rightarrow \mu) \quad (11)$$

Αυτή ακριβώς είναι η συνθήκη λεπτομερούς ισορροπίας. Για το κανονικό σύνολο, η συνθήκη αυτή δίνει

$$\frac{W(\mu \rightarrow \nu)}{W(\nu \rightarrow \mu)} = \frac{P_\nu}{P_\mu} = \frac{\frac{1}{Z} e^{-\beta E_\nu}}{\frac{1}{Z} e^{-\beta E_\mu}} = e^{-\beta(E_\nu - E_\mu)}$$

Επομένως, αν κατά την προσομοίωση οι (τυχαία προκύπτουσες) καταστάσεις γίνονται αποδεκτές με έναν τρόπο που ικανοποιεί την παραπάνω αναλογία ρυθμών μετάβασης, η προσομοίωση είναι φυσικά συνεπής.

Η μέθοδος που ακολουθούμε βασίζεται σε μια ελαφρά παραλλαγή του αλγόριθμου Metropolis [8]. Δημιουργούμε μια αρχική κατάσταση, είτε τυχαία είτε ξεκινώντας από ευθυγραμμισμένα σπιν. Στη συνέχεια κάθε αλλαγή ενέργειας την προσεγγίζουμε με αλλαγή του σπιν σε μία μόνο πλεγματική θέση. Η αντιστροφή του σπιν δε γίνεται πάντα αποδεκτή. Υπολογίζουμε τη διαφορά ενέργειας μεταξύ της τρέχουσας κατάστασης και αυτής που θα προκύψει αν αντιστραφεί το συγκεκριμένο σπιν. Αν η διαφορά είναι αρνητική, αποδεχόμαστε πάντα την αντιστροφή. Αν είναι θετική, την αποδεχόμαστε με πιθανότητα $e^{-\beta(E_\nu - E_\mu)} < 1$. Με τον τρόπο αυτό ικανοποιείται η σχέση που εξάχθηκε προηγουμένως για το λόγο των ρυθμών μετάβασης (Ένα μικρό πρόβλημα με αυτή την επιλογή μπορεί να παρουσιαστεί μόνο σε

πολύ μικρές τιμές του β , όπου η προαναφερθείσα πιθανότητα γίνεται σχεδόν 1 και επομένως είναι σχεδόν βέβαιο ότι κάθε αντιστροφή σπιν θα γίνεται αποδεκτή, με αποτέλεσμα το σύστημα να εγκλωβίζεται στη συνεχή εναλλαγή μεταξύ δύο μικροκαταστάσεων).

Ως χρόνος μπορεί να νοηθεί αυτή η ακολουθία των βημάτων της προσομοίωσης. Συνήθως ως μονάδα του χρόνου Μόντε Κάρλο ορίζεται το ένα πλήρες πέρασμα από όλες τις θέσεις σπιν του πλέγματος. Πλήρης αλλαγή μικροκατάστασης θεωρείται μόνο η τελική κατάσταση που προκύπτει μετά από κάθε πλήρες πέρασμα. Οι αναμενόμενες τιμές υπολογίζονται ως απλοί στατιστικοί μέσοι όροι, της μορφής $\langle A \rangle = \frac{1}{N_m} \sum_{\mu} A_{\mu}$, όπου N_m ο αριθμός των καταστάσεων (ή, όπως ορίστηκε, ο διακριτός χρόνος Μόντε Κάρλο).

Στην εκδοχή του αλγορίθμου που χρησιμοποιούμε εμείς, το πέρασμα από τις πλεγματικές θέσεις γίνεται με τυχαίο τρόπο και όχι διαδοχικά ανά γραμμή ή στήλη. Κατ' αντιστοιχία, η μονάδα του χρόνου αντιστοιχεί σε $L \times L = N$ τυχαίες επιλογές σπιν από όλο το πλέγμα.

Η χρήση των τυχαίων αριθμών γίνεται όπου εμπλέκονται τυχαίες (εργοδικές) διαδικασίες. Για παράδειγμα, για την αποδοχή του spin flip με πιθανότητα $e^{-\beta\Delta E}$ δημιουργείται ένας τυχαία κατανομημένος αριθμός x στο διάστημα $[0, 1)$. Εφόσον η πιθανότητα να ισχύει $x < e^{-\beta\Delta E}$ είναι ακριβώς όσο ο αριθμός, χρησιμοποιούμε την παραπάνω ανισότητα για την αποδοχή της αλλαγής της κατάστασης.

Φυσικά αυτή η διαφορά ενέργειας προέρχεται μόνο από την αλληλεπίδραση του επιλεγμένου σπιν με τους πλησιέστερους γείτονές του, οπότε ο υπολογισμός της είναι εύκολος. Συγκεκριμένα, προκύπτει αμέσως ότι

$$\Delta E = 2s_i^{\mu} \sum_j s_j^{\mu} \quad (12)$$

όπου μ η αρχική κατάσταση και i το επιλεγμένο σπιν. Μάλιστα το άθροισμα των γύρω σπιν παίρνει μόνο τις τιμές 4,2,0,-2,-4.

Κατασκευάζουμε το πρόγραμμα και το τρέχουμε για διάφορες τιμές β . Για κάθε προσομοίωση υπολογίζουμε σημαντικές ποσότητες, όπως η αναμενόμενη τιμή της ενέργειας και της μαγνήτισης, η ειδική θερμότητα και η μαγνητική επιδεκτικότητα, καθώς και η συνάρτηση συσχετισμού δύο σημείων (2-point correlation function).

Η ειδική θερμότητα υπολογίζεται από το γνωστό πόρισμα της Στα-

τιστικής Φυσικής για τα κανονικά σύνολα, ότι

$$C = k_B \beta^2 (\Delta E)^2 = k_B \beta^2 (\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2) \quad (13)$$

αναφερόμενο και ως θεώρημα διακύμανσης-διάχυσης (fluctuation-dissipation theorem). Αντίστοιχα, η μαγνητική επιδεικτικότητα προκύπτει ως

$$\chi = \beta (\Delta M)^2 = \beta (\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2) \quad (14)$$

Εναλλακτικά για την ειδική θερμότητα μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε απευθείας την εξίσωση ορισμού της

$$C = \frac{dU}{dT} = \frac{d \langle E \rangle}{dT} \quad (15)$$

$$\begin{aligned} \text{Αποδειξτε: } \langle E \rangle &= \frac{1}{Z} \sum E_\mu e^{-\beta E_\mu} = -\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta} \\ \langle E^2 \rangle &= \frac{1}{Z} \frac{\partial^2 Z}{\partial \beta^2} \\ \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial \beta} &= \dots = -(\Delta E)^2 = -C \frac{1}{k\beta^2} \end{aligned}$$

Στη συνέχεια τρέχουμε την προσομοίωση για διαδοχικές τιμές β ώστε να παρατηρήσουμε τη μετάβαση φάσης και τα χαρακτηριστικά της.

1.4 Χαρακτηριστικές συμπεριφορές και έκφρασή τους στις προσομοιώσεις

1.4.1 Χρόνος για θερμική ισορροπία

Αρχικά τρέχουμε την προσομοίωση χωριστά για κάθε θερμοκρασία και παρατηρούμε την εξέλιξη της ενέργειας ανά πλεγματοειδή θέση (σπιν). Χρησιμοποιούμε τον κώδικα του αρχείου `isinghpb.c.f90`. Σύμφωνα με αυτό, επιβάλλουμε περιοδικές συνοριακές συνθήκες στο πλέγμα. Για τα μικρά β χρησιμοποιούμε μια τυχαία αρχική διάταξη από σπιν (hot start), καθώς αυτή βρίσκεται πιο κοντά στην αναμενόμενη τελική κατάσταση του πλέγματος σε ισορροπία. Αντίθετα, για τα μεγάλα β , όπου αναμένουμε τα σπιν να καταλήξουν σε μεγάλο βαθμό ευθυγραμμισμένα μεταξύ τους, ξεκινάμε με “παγωμένη” αρχική διάταξη όπου όλα τα σπιν είναι παράλληλα και ίσα με +1 (cold start). Η σωστή επιλογή αρχικής διάταξης δεν έχει μεγάλη επιρροή στην τελική συμπεριφορά του πλέγματος, όμως μειώνει το χρόνο που χρειάζεται για να επιτευχθεί η ισορροπία. Είναι επίσης φυσικά ορθότερη, αφού στο φυσικό

σύστημα η θερμοκρασία της δεξαμενής αλλάζει με συνεχή τρόπο και επομένως η διάταξη των σπιν δεν υποβάλλεται απευθείας σε μια πολύ δραματική μεταβολή από παγωμένη κατάσταση (πλήρης ευθυγράμμιση) σε θερμή (τυχαία διάταξη).

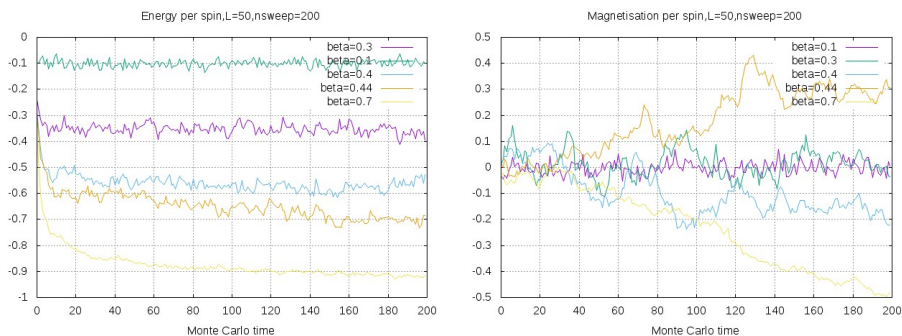
Σε αυτό το στάδιο μπορούμε για καλύτερα αποτελέσματα να χρησιμοποιήσουμε ένα αρκετά μεγάλο πλέγμα με

- $L = 50$ δηλ. 50×50 .

Αρχικά το τρέχουμε για

- χρόνο Μόντε Κάρλο (=αριθμός πλήρων περασμάτων)= 200
- hot start για όλες τις θερμοκρασίες

και παίρνουμε τις παρακάτω γραφικές παραστάσεις 1:



Σχήμα 1: Εξέλιξη της ενέργειας και της μαγνήτισης ανά πλεγματική θέση για 50×50 πλέγμα μέχρι χρόνο Μόντε Κάρλο =200 (διάφορες θερμοκρασίες)

Είναι εύκολο να παρατηρηθεί ότι για τις μικρές τιμές του β , 0.1 και 0.3, το σύστημα φτάνει σε θερμική ισορροπία πολύ γρήγορα, αφού αμέσως η ενέργεια και η μαγνήτιση φαίνεται ταλαντώνονται γύρω από μία σταθερή οριζόντια γραμμή, για τη μεν μαγνήτιση γύρω από το μηδέν, όπως πρέπει, για τη δε ενέργεια γύρω από μια μικρή αλλά υπολογίσιμη αρνητική τιμή. Το τελευταίο σχετίζεται με το ότι ακόμα και σε μικρά β , όπου συνολικά στο πλέγμα τα σπιν έχουν ίδια πιθανότητα να είναι πάνω ή κάτω, αν θεωρήσουμε μια ορισμένη πλεγματική θέση τα γειτονικά του σπιν εξακολουθούν να έχουν μεγαλύτερη πιθανότητα να είναι ευθυγραμμισμένα με αυτό παρά αντίθετα. Η ιδιότητα αυτή είναι χαρακτηριστική του φυσικού συστήματος και δεν αποτελεί σφάλμα της υπολογιστικής μεθόδου. Εκφράζεται ποσοτικά από τη συνάρτηση

συσχετισμού (two-point correlation function) και θα ασχοληθούμε με αυτήν παρακάτω.

Αντίθετα, για τις τιμές 0.4 και ακόμα ισχυρότερα για την 0.44, το σύστημα δε φαίνεται να προσκολλάται γύρω από κάποια σταθερή τιμή, γεγονός που σημαίνει ότι δεν έχει προλάβει ακόμα να επιτευχθεί θερμοκή ισορροπία. Η αύξηση του χρόνου που απαιτείται για τη σταθεροποίηση του συστήματος είναι ένδειξη ότι βρισκόμαστε στην περιοχή του κρίσιμου σημείου, όπως πράγματι συμβαίνει. Το συγκεκριμένο φαινόμενο ονομάζεται **κρίσιμη επιβράδυνση** (*critical slowing down*) και οφείλεται στο συγκεκριμένο αλγόριθμο με τα spin flips που χρησιμοποιήθηκε. Με επιλογή διαφορετικού αλγορίθμου το φαινόμενο εξαλείφεται.

Η ραγδαία μείωση της μαγνήτισης και της ενέργειας για το μεγάλο $\beta=0.7$ οφείλεται στο ότι ξεκινήσαμε από τυχαία αρχική διάταξη των spin, κάτι το οποίο όπως προαναφέρθηκε είναι αφύσικο. Στα επόμενα θα χρησιμοποιηθεί πλήρως ευθυγραμμισμένη διάταξη. Σημειώνεται ότι, για αυτή την ακολουθία τυχαίων αριθμών, το σύστημα φαίνεται να οδηγείται προς αρνητική μαγνήτιση, ενώ για το $\beta=0.44$ τείνει προς τη θετική.

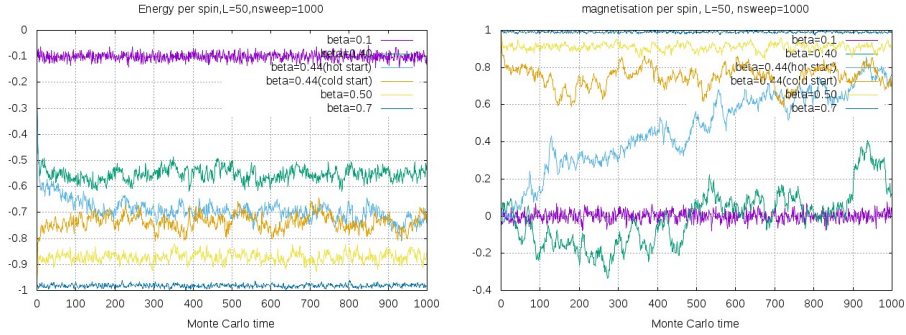
Άλλο σημαντικό χαρακτηριστικό των διαγραμμάτων είναι οι μεγάλες διακυμάνσεις που χαρακτηρίζουν την ενέργεια και κυρίως τη μαγνήτιση στα β κοντά στο 0.44. Οι διακυμάνσεις σχετίζονται με την ειδική θερμοχωρητικότητα και τη μαγνητική επιδεκτικότητα αντίστοιχα, οι οποίες είναι ποσότητες που αποκλίνουν στο κρίσιμο σημείο, καθιστώντας έτσι τις διακυμάνσεις πολύ μεγάλες. Θα μελετηθούν και αυτές χωριστά στη συνέχεια.

Προς το παρόν ξανατρέχουμε τις προσομοιώσεις, χρησιμοποιώντας την κατάλληλη αρχική διάταξη, για μεγαλύτερο αριθμό βημάτων:

- Χρόνος Μόντε Κάρλο=1000

Έτσι προκύπτουν τα εξής διαγράμματα (2):

Σε αυτά φαίνονται ακόμα πιο έντονα οι ισχυρισμοί σχετικά με τις διακυμάνσεις κοντά στην κρίσιμη θερμοκρασία (ήδη από το $\beta=0.40$ και πάρα πολύ ισχυρά στο 0.44). Από την ενέργεια φαίνεται ότι ολόκληρο το “χρονικό” διάστημα 0-200 είναι μεταβατικό για $\beta=0.44$ με επιλογή είτε θερμής είτε ψυχρής αρχικής διάταξης. Από τη μαγνήτιση φαίνεται ότι το διάστημα αυτό είναι ακόμα μεγαλύτερο. Για $\beta=0.7$ η χρήση ψυχρής αρχής φέρνει το σύστημα αμέσως σε θερμοκή ισορροπία, όπως ήταν αναμενόμενο. Προφανώς εδώ η μαγνήτιση είναι θετική, αφού οι αρχικές συνθήκες προσανατολίζουν θετικά όλα τα spin.



Σχήμα 2: Εξέλιξη της ενέργειας και της μαγνήτισης ανά πλεγματική θέση για 50×50 πλέγμα μέχρι χρόνο Μόντε Κάρλο=1000 (διάφορες θερμοκρασίες)

1.4.2 Ειδική θερμοχωρητικότητα και μαγνητική επιδεκτικότητα

Για τις δύο αυτές θερμοδυναμικές ποσότητες χρησιμοποιούνται οι σχέσεις (13) και (14). Οι δύο ποσότητες κοντά στο κρίσιμο σημείο ακολουθούν τους νόμους δυνάμεων

$$C = C_0 \epsilon^{-\alpha} \quad (16)$$

$$\chi = \chi_0 \epsilon^{-\gamma} \quad (17)$$

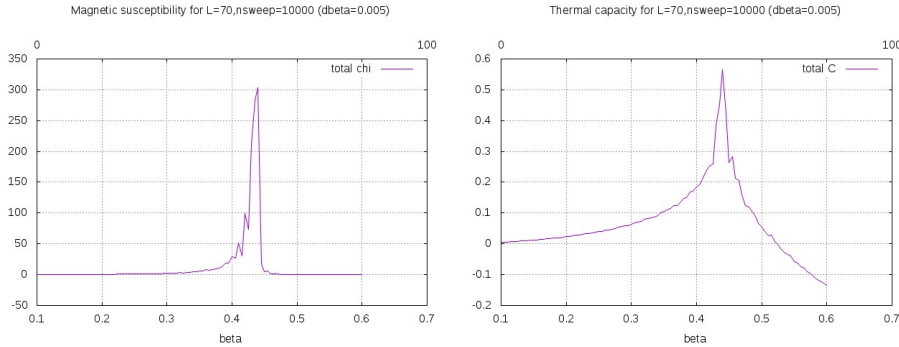
με $\epsilon = |1 - \frac{T}{T_C}| = |1 - \frac{\beta_C}{\beta}|$. Σύμφωνα με τα αναλυτικά αποτελέσματα, οι κρίσιμοι εκθέτες είναι $\alpha = 0$ και $\gamma = \frac{7}{4}$.

Επομένως, εκτός από το κρίσιμο σημείο η ειδική θερμοχωρητικότητα μένει σταθερή. Αυτό φαίνεται από το γεγονός ότι πράγματι οι διακυμάνσεις στην ενέργεια δεν έχουν μεγάλη διαφορά μεταξύ των θερμοκρασιών που μελετήθηκαν. Αντίθετα, οι διακυμάνσεις στη μαγνήτιση είναι εμφανώς μεγαλύτερες στην κρίσιμη περιοχή (γύρω από το κρίσιμο σημείο). Γι' αυτό, η μελέτη της μαγνητικής επιδεκτικότητας για την εύρεση του κρίσιμου σημείου προσφέρει μάλλον καλύτερη εικόνα και είναι πιο ανεκτική σε στατιστικά ή υπολογιστικά σφάλματα.

Με τον αλγόριθμο του αρχείου `isingbrbc.f90` υπολογίζεται για ευκολία (και ίσως για μελλοντική σύγκριση) η θερμοχωρητικότητα και η μαγνητική επιδεκτικότητα ανά πλεγματική θέση. Ωστόσο εδώ θα χρησιμοποιηθούν οι συνολικές C και χ του πλέγματος. Για να μειώσουμε τα στατιστικά σφάλματα χρησιμοποιούμε μεγάλο αριθμό βημάτων, αν και γενικά οι υπολογισμοί των εν λόγω ποσοτήτων οδηγούν

σε διάφορες ανακρίβειες. Παρακάτω (3, 4) φαίνεται η καλύτερη δυνατή προσομοίωση για 10^4 Μόντε Κάρλο βήματα και για μεγάλο πλέγμα 70×70 . Πράγματι παρουσιάζεται μια έντονη κορυφή στις καμπύλες της C και της χ , η οποία μάλιστα βρίσκεται στο 0.44, όπως ακριβώς πρέπει (για τη διακριτική ικανότητα του διαγράμματος).

Προφανώς ο απειρισμός που θεωρητικά αναμένεται στο κρίσιμο σημείο δεν μπορεί να φανεί στο πλαίσιο ενός πεπερασμένου πλέγματος. Μπορεί, όμως, να γίνει σύγκριση πλεγμάτων διαφορετικών μεγεθών. Πράγματι, από το διάγραμμα (5) φαίνεται ότι μεγαλύτερα πλέγματα έχουν υψηλότερες κορυφές, συμπεριφορά που συνάδει με τον απειρισμό των ποσοτήτων για $L \rightarrow \infty$. Ένα πρόβλημα εντοπίζεται στο ότι για μεγάλα β η ειδική θερμοχωρητικότητα γίνεται αρνητική ενώ σχετίζεται με την πάντα θετική διακύμανση. Αυτό όμως οφείλεται σε προβλήματα του αλγορίθμου και δεν αντανακλά κάποια φυσική ιδιαιτερότητα.



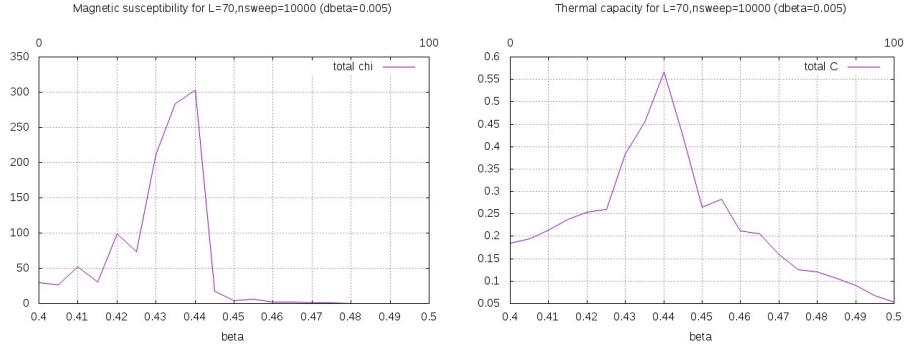
Σχήμα 3: Μαγνητική επιδεκτικότητα και ειδική θερμοχωρητικότητα για πλέγμα 70×70 , 10000 περάσματα για κάθε β και βήμα $\beta=0.005$

1.4.3 Συναρτήσεις συσχετισμού

Η συνάρτηση συσχετισμού δύο σημείων (two-point correlation function) σε ένα πλέγμα ορίζεται ως

$$f(n, m) = \langle s_n \cdot s_m \rangle \quad (18)$$

όπου n, m οι θέσεις των σημείων πάνω στο πλέγμα και $\langle \dots \rangle$ η γνωστή έκφραση για την αναμενόμενη τιμή. Στην περίπτωση όπου υπάρχει συμμετρία μεταφοράς, όπως όταν εφαρμόζονται περιοδικές συνοριακές



Σχήμα 4: Λεπτομέρεια των προηγούμενων

συνθήκες, η συνάρτηση μπορεί να οριστεί ισοδύναμα ως

$$f(n) = \langle s_0 \cdot s_n \rangle \quad (19)$$

με 0 μία θέση που ορίζεται ως αρχή των διακριτών αξόνων. Γενικά στα στατιστικά συστήματα με μετάβαση φάσης, για θερμοκρασίες μεγαλύτερες ή ίσες της κρίσιμης ισχύει η σχέση

$$f(n) \sim e^{-\frac{n}{\xi(T)}}, T \geq T_C \quad (20)$$

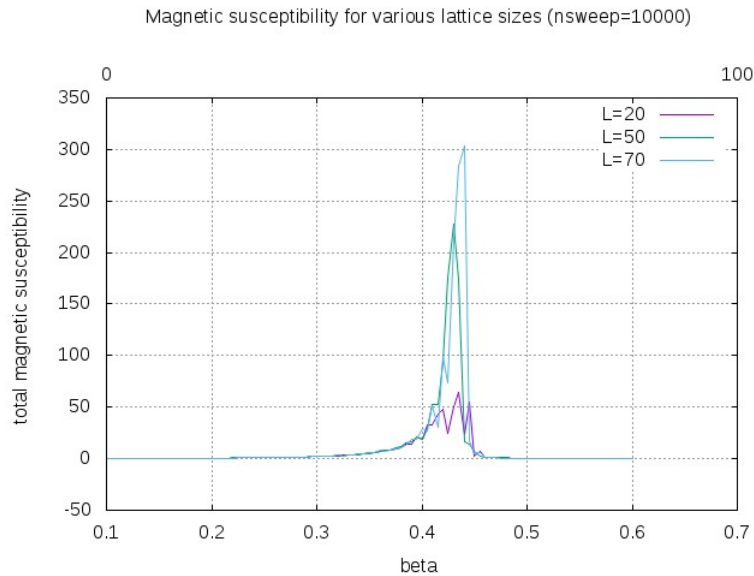
με

$$\xi(T) \sim \frac{1}{(T - T_C)^\nu} \quad (21)$$

όπου ν ένας κρίσιμος εκθέτης. Για το διδιάστατο πρότυπο Ising ο εκθέτης αυτός είναι $\nu = 1$. Η ποσότητα ξ ονομάζεται μήκος συσχετισμού. Για θερμοκρασίες μικρότερες της T_C δεν ορίζεται [6].

Όπως είναι κατανοητό, το μήκος συσχετισμού σχετίζεται με το πόσο μακριά φτάνει η επίδραση του σπιν ενός σημείου στον καθορισμό του σπιν άλλων σημείων. Προφανώς για μικρές θερμοκρασίες, όπου όλα τα σπιν είναι περίπου ευθυγραμμισμένα, η συνάρτηση συσχετισμού παίρνει παντού τιμές πολύ κοντά στο 1. Αυτό θα μπορούσε να σημαίνει ότι η επίδραση ενός σπιν φτάνει πολύ μακριά, δηλαδή μια ποσότητα όπως το μήκος συσχετισμού θα έπρεπε να είναι άπειρη. Ωστόσο αυτό δεν ισχύει. Αν οριστεί μια άλλη ανάλογη συνάρτηση, η **συνεκτική συνάρτηση συσχετισμού** (*connected correlation function*):

$$ccf(n) = \langle s_0 \cdot s_n \rangle - \langle s_0 \rangle \cdot \langle s_n \rangle = \langle s_0 \cdot s_n \rangle - \langle s_0 \rangle^2 \quad (22)$$



Σχήμα 5: Σύγκριση μαγνητικής επιδεκτικότητας για τρία διαφορετικά μεγέθη πλέγματος, με 1000 περάσματα σε κάθε β

πράγματι φαίνεται ότι αυτή μηδενίζεται παντού στην περίπτωση της κατάστασης σπασμένης συμμετρίας $T < T_C$, ενώ ισούται με την απλή συνάρτηση συσχετισμού στην περίπτωση που $T > T_C$.

Από την άλλη, σε πολύ μεγάλες θερμοκρασίες από τις σχέσεις 20 και 21 φαίνεται ότι το μήκος συσχετισμού είναι πολύ μικρό και η συνάρτηση συσχετισμού, όπως και η συσχετισμένη, τείνει πολύ γρήγορα στο μηδέν. Στο κρίσιμο σημείο το μήκος συσχετισμού απειρίζεται και η συνάρτηση συσχετισμού είναι παντού μεγάλη. Σημειώνεται ότι προκύπτει πως, για $T = T_C$, $f(n) \sim n^{-\frac{1}{4}}$ (στο δισδιάστατο Ising). Συνεπώς, το σύστημα έχει συσχετισμούς μεγάλου εύρους μόνο στο κρίσιμο σημείο.

Το γεγονός ότι το μήκος συσχετισμού αποκλίνει στο κρίσιμο σημείο συνεπάγεται ότι εκεί οι συσχετισμοί δεν εξαρτώνται πλέον από τα στοιχεία του πλέγματος, όπως το σχήμα ή η πλεγματική σταθερά. Η παρατήρηση αυτή είναι χρήσιμη για την εξαγωγή συμπερασμάτων που αφορούν τα συνεχή μοντέλα τα οποία μπορεί να προσεγγίστηκαν με διακριτοποίησή τους σε πλέγμα. Ειδική αναφορά θα γίνει στην περίπτωση του συνεχούς ορίου στις πλεγματικές θεωρίες πεδίου (βλ. παρακάτω).

Στις προσομοιώσεις Εργαζόμαστε σε δισδιάστατο πλέγμα. Η στατιστική του δείγματος γίνεται καλύτερη όταν επιλέξουμε έναν από τους δύο άξονες, π.χ. τον x , και αθροίσουμε πάνω σε όλες τις θέσεις y . Δηλαδή η συνάρτηση συσχετισμού υπολογίζεται ως

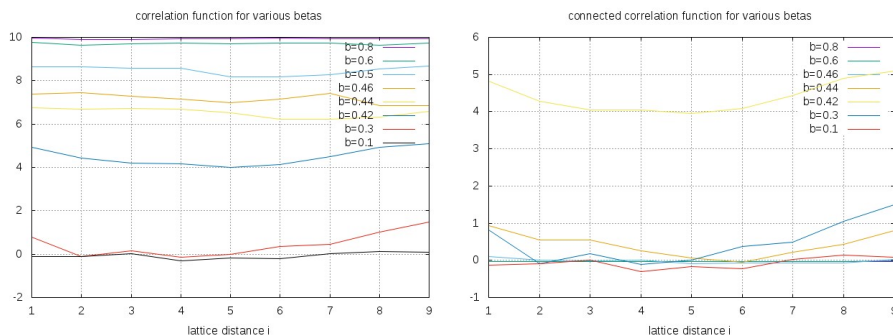
$$f(i_x) = \langle s_0 \cdot \sum_{i_y} s_{i_x, i_y} \rangle \quad (23)$$

και αντίστοιχα η συνεκτική συνάρτηση συσχετισμού. Ακόμα, πρέπει να σημειωθεί ότι λόγω των περιοδικών συνθηκών η συνάρτηση συσχετισμού δεν ακολουθεί τη μορφή 20. Η συνεισφορά από το σημείο "0" στην κατεύθυνση αύξησης του i_x συμβάλλει με τη συνεισφορά από την αντίθετη κατεύθυνση, με αποτέλεσμα η εμφανιζόμενη συνάρτηση συσχετισμού να έχει τη μορφή

$$e^{-\frac{n}{\xi}} + e^{-\frac{L-n}{\xi}} = e^{-\frac{L}{2\xi}} \left(e^{-\frac{n-L/2}{\xi}} + e^{-\frac{L/2-n}{\xi}} \right) \sim \cosh \frac{n-L/2}{\xi} \quad (24)$$

οπότε αναμένεται να εμφανίζεται μία καμπύλη που μειώνεται και έπειτα αυξάνεται, με το βάθος της να είναι μικρότερο όταν το μήκος συσχετισμού είναι μεγαλύτερο.

Ενδεικτικά, για ένα μικρό πλέγμα 10×10 και σχετικά μικρό αριθμό επαναλήψεων ίσο με 500 προκύπτουν οι παρακάτω καμπύλες (6) οι οποίες επιβεβαιώνουν ποιοτικά όσα αναφέρθηκαν.



Σχήμα 6: Συνάρτηση συσχετισμού δύο σημείων και συνεκτική συνάρτηση συσχετισμού στο μοντέλο Ising για διάφορες τιμές β , σε πλέγμα 10×10 .

Ακόμα πρέπει να σημειωθεί ότι η μαγνητική επιδεκτικότητα προκύπτει ότι είναι ίση και με

$$\chi = \beta \sum_n f(n) \quad (25)$$

[6], κάτι που επίσης δείχνει ότι στο κρίσιμο σημείο η ποσότητα αυτή αποκλίνει. Το γεγονός αυτό συμφωνεί με την παρατήρηση ότι η μαγνητική επιδεκτικότητα είναι καλύτερος δείκτης για την εύρεση του κρίσιμου σημείου σε σύγκριση με την ειδική θερμοχωρητικότητα.

1.4.4 Εξέλιξη ενέργειας και μαγνήτισης συναρτήσει του β

Η παράμετρος τάξης του συστήματος είναι η μαγνήτιση. Όπως είπαμε, το σύστημα υφίσταται μια μετάβαση φάσης δεύτερης τάξης, όπου η μαγνήτιση από 0 σε 1 με σχετικά ομαλό τρόπο (η συνάρτηση $m(\beta)$ είναι συνεχής). Κοντά στο κρίσιμο σημείο ισχύει ότι

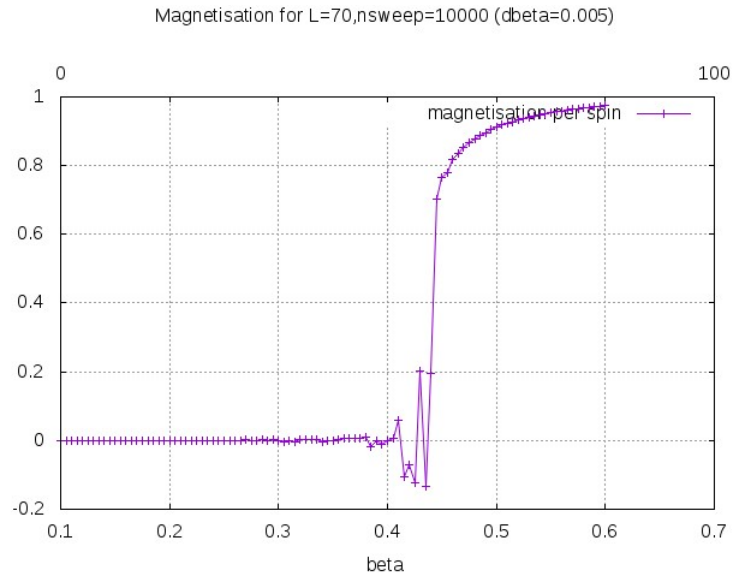
$$m = m_0 \epsilon^{-\beta} \quad (26)$$

όπου το ϵ ορίστηκε παραπάνω και $\beta = \frac{1}{8}$ ο κρίσιμος εκθέτης για τη μαγνήτιση. Έτσι, η μαγνήτιση του συστήματος θα εμφανίζει μια συνεχή αλλά απότομη πτώση καθώς το β θα πλησιάζει στο κρίσιμο σημείο.

Υλοποιούμε έναν αλγόριθμο που επαναλαμβάνει τα βήματα του Metropolis για διαδοχικές τιμές του β , χρησιμοποιώντας ως αρχική διάταξη για κάθε β την τελευταία διάταξη spin που προέκυψε από το αμέσως προηγούμενο β . Το πρόγραμμα βρίσκεται στο αρχείο `runningbforth.f90`. Θέλουμε για κάθε τιμή του β το σύστημα να έχει τον απαιτούμενο χρόνο ώστε να φτάσει σε θερμική ισορροπία. Η μεγαλύτερη δοκιμή που κάνουμε είναι αυτή σε πλέγμα 70×70 για χρόνο Μόντε Κάρλο 10^4 σε κάθε θερμοκρασία.

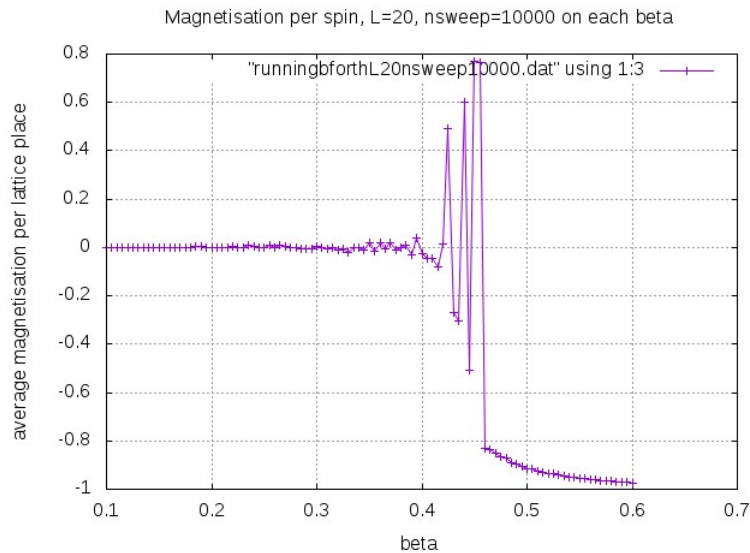
Σχεδιάζουμε τη μαγνήτιση ανά πλεγματική θέση και παίρνουμε το διάγραμμα (7). Παρατηρούμε ότι παρά το μεγάλο αριθμό βημάτων η συνάρτηση δε μοιάζει να είναι ομαλή για τις τιμές του β κοντά στο κρίσιμο σημείο και αριστερά του. Αυτό πιθανώς να οφείλεται στις μεγάλες διακυμάνσεις της μαγνήτισης στην κρίσιμη περιοχή. Σε αυτήν την περιοχή το σύστημα είναι εξίσου πιθανό να ακολουθήσει πορεία είτε προς θετική είτε προς αρνητική μαγνήτιση (βλ. σχήμα (8)). Η εξέλιξη του συστήματος σε κάθε β επηρεάζεται και από την αρχική του κατάσταση, η οποία όμως λόγω των μεγάλων διακυμάνσεων δεν είναι μια μέση κατάσταση αλλά μια τυχαία διάταξη που αλλάζει από το ένα Μόντε Κάρλο βήμα στο άλλο. Επομένως, η εξέλιξη του συστήματος είναι πολύ ευαίσθητη στη μεταβολή ασήμαντων παραμέτρων όπως ο ακριβής αριθμός των βημάτων. Εκείνο που έχει σημασία είναι πως στο $\beta=0.44$ φαίνεται ξεκάθαρα η μετάβαση φάσης, καθώς μετά από αυτήν

την τιμή η μαγνήτιση ακολουθεί σταθερά ανοδική πορεία προς την τελική της τιμή 1.



Σχήμα 7: Μέση μαγνήτιση ανά πλεγματική θέση για πλέγμα 70×70 και 10000 βήματα ανά β

Άλλος τρόπος εντοπισμού του κρίσιμου σημείου Στις μεταβάσεις φάσης πρώτης τάξης εμφανίζεται το λεγόμενο hysteresis loop. Το συγκεκριμένο φαινόμενο αναφέρεται στην καθυστέρηση της παραμέτρου τάξης να αλλάξει τιμή καθώς η θερμοκρασία (ή όποια άλλη ανεξάρτητη παράμετρος) περνάει από την κρίσιμη τιμή. Παρότι στις μεταβάσεις δεύτερης τάξης δεν εμφανίζεται το φαινόμενο, μπορούμε να εκμεταλλευτούμε κάτι ανάλογο για τον εντοπισμό του κρίσιμου σημείου. Λόγω της κρίσιμης επιβράδυνσης (που, όπως είπαμε, οφείλεται στον αλγόριθμο και δεν είναι εγγενής του συστήματος), αν σαρώνοντας τον άξονα της θερμοκρασίας δίνεται μικρός χρόνος Μόντε Κάρλο για κάθε τιμή, τότε κοντά στο κρίσιμο σημείο το σύστημα δε θα προλαβαίνει να φτάσει σε ισορροπία και οι μέσες τιμές της μαγνήτισης δε θα είναι οι πραγματικές αλλά κάποιες κάπως άστατες τιμές. Σαρώνοντας ξανά τον άξονα προς την αντίθετη κατεύθυνση, οι μαγνητίσεις που θα προκύπτουν θα είναι διαφορετικές (και πάλι φυσικά όχι οι πραγματικές αναμενόμενες τιμές). Ως αποτέλεσμα, θα εμφανίζεται ένας σχηματισμός που μοιάζει



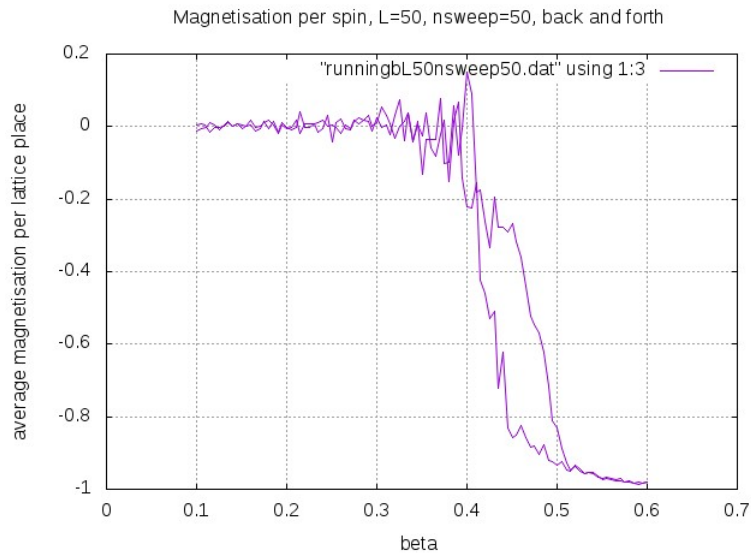
Σχήμα 8: Μέση μαγνήτιση ανά πλεγματική θέση για πλέγμα 20×20 και 10000 βήματα ανά β

με hysteresis loop χωρίς όμως να είναι στην πραγματικότητα και, περιμένοντας το κρίσιμο σημείο να βρισκείται κάπου στη μέση, μπορούμε να το προσδιορίσουμε.

Χρησιμοποιούμε το πρόγραμμα του αρχείου `runningb.f90`. Θα πρέπει να δοθεί μικρός αριθμός βημάτων. Για πλέγμα πλευράς 50 και 50 βήματα ανά β , προκύπτει το σχήμα (9). Πράγματι διακρίνεται ένα είδος βρόγχου μεταξύ 0.4 και 0.5, γεγονός που υποδεικνύει ότι η κρίσιμη τιμή βρίσκεται περίπου στο 0.45. Βεβαίως αυτή η μέθοδος είναι πολύ χονδροειδής και δε χρειάζεται να επιστρατευθεί για ένα υπολογιστικά απλό μοντέλο σαν το Ising. Ωστόσο, για πιο πολύπλοκα πρότυπα στα οποία ο μεγάλος αριθμός επαναλήψεων είναι απαγορευτικός, η παραπάνω εύκολη τεχνική μπορεί να δώσει ικανοποιητικά αποτελέσματα.

1.4.5 Σπάσιμο συμμετρίας

Ένα σημαντικό χαρακτηριστικό του μοντέλου είναι το εξής: Για χαμηλές θερμοκρασίες είπαμε ότι το σύστημα εμφανίζει αυθόρμητη μαγνήτιση, η οποία δείχνει είτε προς τα πάνω είτε προς τα κάτω. Δηλαδή, μία από τις κατευθύνσεις $+1$ και -1 ευνοείται έναντι της άλλης. Επομένως, το σύστημα δεν έχει πια τη συμμετρία $s \uparrow \rightleftharpoons s \downarrow$ της Χαμιλτονιανής.



Σχήμα 9: Μέση μαγνήτιση ανά πλεγματική θέση για πλέγμα 50×50 και 50 βήματα ανά β για την παρατήρηση του αναλόγου τού 'hysteresis loop'

Αυτό το φαινόμενο είναι γνωστό ως **αυθόρμητο σπάσιμο συμμετρίας** (*spontaneous symmetry breaking*). Θα μας απασχολήσει και στη συνέχεια σε διάφορες μορφές του.

2 Το πρότυπο XY

2.1 Περιγραφή

Το πρότυπο Ising είναι ένα παράδειγμα προτύπου με διακριτούς βαθμούς ελευθερίας. Μια σχετικά άμεση γενίκευσή του σε σύστημα συνεχών βαθμών ελευθερίας αποτελεί το λεγόμενο πρότυπο *Heisenberg* ή *XY*. Σε αυτό, τα σπιν μπορούν να έχουν οποιαδήποτε κατεύθυνση πάνω σε ένα επίπεδο ή και στον τρισδιάστατο χώρο. Εμείς περιοριζόμαστε στις δύο διαστάσεις (planar Heisenberg model). Το μέτρο των σπιν παραμένει, όπως και στο Ίζινγκ, ίσο με ένα, οπότε στο επίπεδο το κάθε σπιν έχει μόνο έναν βαθμό ελευθερίας, ο οποίος μπορεί να επιλεγεί ως η γωνία που σχηματίζει με τον άξονα x , παίρνοντας συνεχείς τιμές από 0 ως 2π . Σημειώνεται ότι τα σπιν διατάσσονται και πάλι σε ένα διακριτό πλέγμα, που μπορεί να εκτείνεται σε μία, δύο, τρεις ή και περισσότερες διαστάσεις.

Η Χαμιλτονιανή του συστήματος ορίζεται ως

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} \vec{s}_i \cdot \vec{s}_j = -J \sum_{\langle ij \rangle} \cos(\theta_i - \theta_j) \quad (27)$$

σε μια προφανή γενίκευση από το πρότυπο Ίζινγκ. Η συμμετρία εναλλαγής “πάνω-κάτω” που διείπε το Ίζινγκ ανάγεται τώρα σε κυκλική συμμετρία: αν όλα τα σπιν περιστραφούν ταυτόχρονα κατά μία οποιαδήποτε γωνία, η Χαμιλτονιανή παραμένει αναλλοίωτη.

Η συνεχής φύση των βαθμών ελευθερίας προσδίδει στο σύστημα ένα συνεχές φάσμα δυνατών καταστάσεων/διατάξεων και άρα ενεργειών. Το σύστημα θεωρείται και πάλι ότι βρίσκεται σε επαφή με δεξαμενή θερμότητας και η μεταβλητή παράμετρος του συστήματος είναι πάλι η β . Η κατανομή Boltzmann την οποία ακολουθούσαν οι πιθανότητες στο πρότυπο των διακριτών σπιν προσαρμόζεται στο συνεχές φάσμα ενεργειών. Έτσι, η πιθανότητα να βρεθεί το σύστημα σε κατάσταση με ενέργεια μεταξύ E και $E + dE$ είναι

$$p(E)dE = \frac{1}{Z} e^{-\beta E} dE \quad (28)$$

άρα η κατανομή πιθανότητας είναι

$$p(E) = \frac{1}{Z} e^{-\beta E} \quad (29)$$

με

$$Z = \int e^{-\beta E} \rho(E) dE \quad (30)$$

όπου $\rho(E)$ η πυκνότητα καταστάσεων γύρω από την ενέργεια E .

Σημειώνεται ότι, λόγω της συνεχούς συμμετρίας ($O(2)$) της Χαμιλτονιανής, υπάρχει και ένα συνεχές από θεμελιώδεις καταστάσεις, που ορίζεται από το $\theta_i = \theta$ για κάθε i . Αυτό το χαρακτηριστικό του συστήματος ορίζει τον λεγόμενο τρόπο Goldstone (Goldstone mode). [10]

Ακόμα, πρέπει να παρατηρήσουμε ότι για μικρές αποκλίσεις από τη θεμελιώδη κατάσταση $\Delta\theta_{ij} = 0$ για όλα τα i, j , η ύπαρξη του συνημιτόνου δίνει ότι

$$H \approx -J \sum_{\langle ij \rangle} \left(1 - \frac{1}{2!} (\Delta\theta_{ij})^2\right)$$

που είναι το αντίστοιχο της Χαμιλτονιανής του απλού αρμονικού ταλαντωτή. Έτσι, χρησιμοποιώντας το θεώρημα της ισοκατανομής της ενέργειας (equipartition), μπορούμε να εξάγουμε κάποιες πληροφορίες για τις θερμοδυναμικές ποσότητες του συστήματος. Έτσι, η ειδική θερμοχωρητικότητα του συστήματος αναμένεται να είναι $C = N_{nn} \times \frac{1}{2} k_B$ ή αλλιώς η ειδική θερμοχωρητικότητα ανά πλεγματική θέση αναμένεται να είναι $C_{perspin} = \frac{1}{2} k_B$. Αυτή η τιμή μπορεί να αποτελέσει ένα σημείο αναφοράς για τις χαμηλές θερμοκρασίες-μεγάλα β , όπου τα spin θα πρέπει να είναι σχεδόν παράλληλα μεταξύ τους.

Κατά τη γνώση μας, δεν υπάρχουν αναλυτικά αποτελέσματα για το συγκεκριμένο μοντέλο. Η μελέτη του μπορεί να γίνει σε πρώτο επίπεδο με την προσέγγιση μέσου πεδίου και πιο βαθιά με τη χρήση προσομοιώσεων Μόντε Κάρλο. Στα επόμενα θα αναφερθούμε στις προϋποθέσεις γύρω από την τελευταία μέθοδο.

2.2 Η προσομοίωση Μόντε Κάρλο για το πρότυπο XY

Το σκεπτικό πίσω από την κατασκευή ενός αλγορίθμου για το πρότυπο XY είναι κατ'αρχήν ανάλογο με αυτό που επιστρατεύθηκε για το Ising. Μπορεί και πάλι να χρησιμοποιηθεί ένας αλγόριθμος τύπου Metropolis, όπου οι δοκιμές για αλλαγή της ενέργειας γίνονται σε τοπικό επίπεδο. Εδώ όμως τη θέση του απλού spin flip από πάνω σε

κάτω και αντίστροφα πρέπει να πάρει κάποιος άλλος τρόπος αλλαγής του σπιν.

Παρότι η χρήση πολικών συντεταγμένων είναι ελαφρώς πιο κοστοβόρα υπολογιστικά, θα μείνουμε σε αυτήν για να αποφύγουμε αλγορίθμους σε καρτεσιανές συντεταγμένες που μπορεί να ευνοούν συγκεκριμένες κατευθύνσεις [10]. Μια πιθανή πρόταση για τη δοκιμή μεταβολής κάθε σπιν είναι η επιλογή μιας τυχαίας νέας γωνίας, με τη δημιουργία ενός ομοιόμορφα κατανεμημένου αριθμού στο διάστημα $[0, 2\pi)$. Στη συνέχεια υπολογίζεται η διαφορά ενέργειας μεταξύ παλιάς και πιθανής νέας κατάστασης, και η νέα κατάσταση γίνεται ή δε γίνεται αποδεκτή με τις ίδιες πιθανότητες που είχαμε χρησιμοποιήσει για το Ίζινγκ. Έτσι, η συνθήκη λεπτομερούς ισορροπίας ικανοποιείται και πάλι.

Η τυχαία επιλογή οσοδήποτε μεγάλης γωνίας αποτελεί τη συνηθέστερη μέθοδο που χρησιμοποιείται για αλγορίθμους Metropolis. Παρόλα αυτά, η επιλογή οσοδήποτε μεγάλης γωνίας μπορεί να οδηγήσει σε χαμηλούς λόγους αποδοχής, κάτι το οποίο δυσχεραίνει τη στατιστική μας και είναι γενικά μη επιθυμητό. Μια εναλλακτική θα ήταν να επιλέγουμε από ένα φάσμα μικρότερων γωνιών, οι οποίες δε μεταβάλλουν τόσο δραματικά την ενέργεια και επομένως γίνονται ευκολότερα αποδεκτές από το σύστημα, κάτι πολύ σημαντικό ειδικά στις χαμηλές θερμοκρασίες-μεγάλα β . Το μειονέκτημα μιας τέτοιας επιλογής είναι ότι το σύστημα μεταβάλλεται πιο αργά.

Στη δική μας προσέγγιση, επιλέγουμε να μεταβάλλουμε το σπιν στην εκάστοτε θέση κατά μια τυχαία γωνία εντός ενός μικρού διαστήματος τιμών, ελέγχοντας το λόγο αποδοχής στα πρώτα βήματα της προσομοίωσης. Όταν αυτός γίνεται πολύ μεγάλος σημαίνει ότι το σύστημα μπορεί να δεχθεί και λίγο μεγαλύτερες μεταβολές και συνεπώς μπορούμε να μεγαλώσουμε τα όρια του διαστήματος επιτρεπτών τιμών. Αν ο λόγος αποδοχής πέφτει κάτω από ένα όριο, τότε οι προτεινόμενες μεταβολές είναι πολύ μεγάλες για το σύστημα και για να το διευκολύνουμε μειώνουμε τη μέγιστη γωνία κατά την οποία μπορεί να αλλάζουν τα σπιν.

Θα μπορούσε ακόμα η αλλαγή της γωνίας να γίνεται κατά μία καθορισμένη τιμή, δηλαδή τα σπιν να παίρνουν τιμές από ένα πεπερασμένο διακριτό σύνολο N στοιχείων (εφόσον η καθορισμένη τιμή είναι διαιρέτης του 2π ή αρκετά μικρή ώστε να μπορεί να θεωρηθεί ότι $\frac{2\pi}{\Delta\theta} \approx N$). Τότε πρόκειται για το λεγόμενο μοντέλο του Potts. Για $N=2$ προφανώς ανάγεται στο μοντέλο του Ising και συνεπώς το Potts είναι ένα ενδιάμεσο πρότυπο μεταξύ αυτού και του XY.

Βεβαίως η μέθοδος αυτή παρουσιάζει σημαντικά προβλήματα, όπως αυτό της κρίσιμης επιβράδυνσης (critical slowing down) [7], που αυξάνει πολύ το χρόνο Μόντε Κάρλο που απαιτείται για να επιτευχθεί θερμική ισορροπία κοντά στην κρίσιμη θερμοκρασία. Για το λόγο αυτό, συχνά γίνεται χρήση άλλων αλγορίθμων, όπως εκείνου του Wolff, με τον οποίο δημιουργούνται “κομμάτια” (clusters) από γειτονικά σπιν και η δοκιμή μεταβολή τους γίνεται ταυτόχρονα για το σύνολο αυτών των σπιν.

Αυτός ο αλγόριθμος χρησιμοποιήθηκε και από τους Gottlob και Hasenbusch [5], οι οποίοι έδωσαν τα πρώτα αποτελέσματα για τρισδιάστατο κυβικό πλέγμα για περιοδικές συνοριακές συνθήκες. Σύμφωνα με αυτά,

- η κρίσιμη τιμή του β είναι $\beta_C = 0.45420$

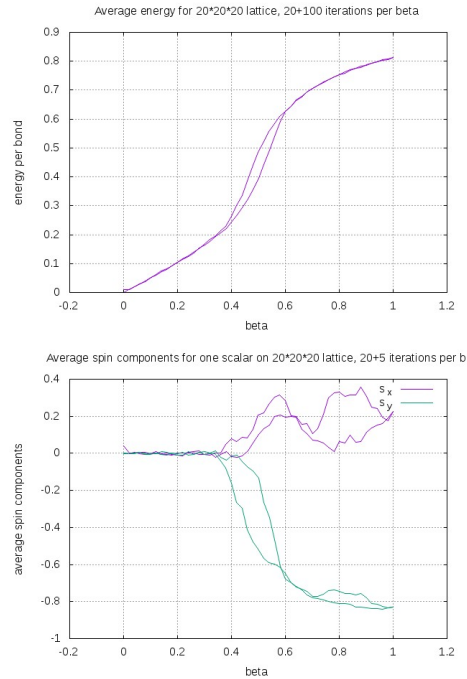
ενώ οι κρίσιμοι εκθέτες είναι

- για το μήκος συσχετισμού $\nu = 0.662$
- για την ειδική θερμοχωρητικότητα $\alpha = 0.23$ και
- για τη μαγνητική επιδεκτικότητα $\gamma = 1.308$.

Παρατηρούμε ότι η κρίσιμη θερμοκρασία είναι πολύ κοντά σε αυτήν του προτύπου Ising, παρότι τα δύο μοντέλα δε φαίνεται να ανήκουν στην ίδια κλάση καθολικότητας.

2.3 Αποτελέσματα

Χρησιμοποιήθηκε ο αλγόριθμος του συστήματος των δύο πεδίων που αναλύεται στην επόμενη ενότητα, μηδενίζοντας τις παραμέτρους που σχετίζονται με το δεύτερο πεδίο και εξετάζοντας τη συμπεριφορά μόνο του πρώτου πεδίου. Η κρίσιμη τιμή της παραμέτρου β μπορεί να εξαχθεί από τον οιονεί βρόχο υστέρησης, τη συμπεριφορά της ειδικής θερμοχωρητικότητας ή της μαγνητικής επιδεκτικότητας, καθώς και τη συμπεριφορά των συναρτήσεων συσχετισμού. Χρησιμοποιείται πλέγμα $20*20*20$ ώστε τα αποτελέσματα να μπορούν άμεσα να συγκριθούν με τα γνωστά αποτελέσματα για κυβικό πλέγμα. Ωστόσο, για τις συναρτήσεις συσχετισμού χρησιμοποιείται πλέγμα με εκτεταμένο τον τρίτο άξονα t , συγκεκριμένα $10*10*50$, ώστε οι συναρτήσεις να υπολογιστούν πάνω σε αυτό τον άξονα όπου η στατιστική θα είναι καλύτερη και οι τιμές επηρεάζονται λιγότερο από τα χαρακτηριστικά του πλέγματος.



Σχήμα 10: Η μέση ενέργεια ανά δεσμό και οι μέσες χ - και ψ -συνιστώσες της μαγνήτισης στο μοντέλο XY για ένα πεδίο σπιν. Το πλέγμα είναι $20 \times 20 \times 20$. Για την ενέργεια έγιναν 120 βήματα Μόντε Κάρλο ανά β με μέτρηση των τελευταίων 100, ενώ για τις μαγνητίσεις έγιναν $20+5$ βήματα Μόντε Κάρλο.

Συνεπώς, για πλέγμα $20 \times 20 \times 20$ λαμβάνονται οι παρακάτω καμπύλες 10, για την ενέργεια ανά δεσμό και για τις μέσες προβολές της μαγνήτισης στους άξονες χ και ψ , συναρτήσει της παραμέτρου β .

Από την εικόνα της ενέργειας φαίνεται καθαρά ένα hysteresis loop με μέσο το 0.45 περίπου, όπως ήταν αναμενόμενο. Η εικόνα της χ -μαγνήτισης δεν είναι ξεκάθαρη, αφού μετά το $\beta=0.6$ η τιμή μειώνεται. Ωστόσο αυτό απλά σημαίνει ότι η χ -συνιστώσα μειώνεται με βάση τον αλγόριθμο που χρησιμοποιείται και όχι η συνολική μέση μαγνήτιση. Παρατηρείται μια ξεκάθαρη απότομη αύξηση κοντά στην τιμή 0.45, ενώ γύρω από αυτήν την τιμή εμφανίζεται πράγματι ένας σχηματισμός που μοιάζει με βρόχο. Αντίθετα, η ψ -συνιστώσα εκδηλώνει πιο εμφανή μετάβαση φάσης πηγαίνοντας από την τιμή 0 σχεδόν στο -1 και εμφανίζοντας ένα μεγάλο βρόχο υστέρησης όταν το β βρίσκεται μεταξύ του 0.4 και του 0.6. Τα αποτελέσματα για την ειδική θερμοχωρητικότητα είναι μη αξιολογήσιμα και δεν παρουσιάζονται εδώ.

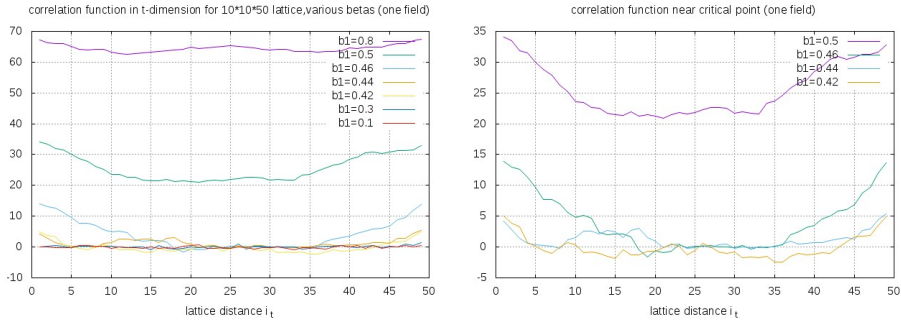
Συναρτήσεις συσχετισμού Σε πλέγμα $10*10*50$ υπολογίζεται η συνάρτηση συσχετισμού δύο σημείων ως

$$f(i_t) = \langle \vec{s}_0 \cdot \sum_{i_x, i_y} \vec{s}(i_x, i_y, i_t) \rangle = \langle \sum_{i_x, i_y} \cos(\chi(1, 1, 1) - \chi(i_x, i_y, i_t - 1)) \rangle \quad (31)$$

Ακόμα υπολογίζεται η συνεκτική συνάρτηση συσχετισμού (connected correlation function) ως

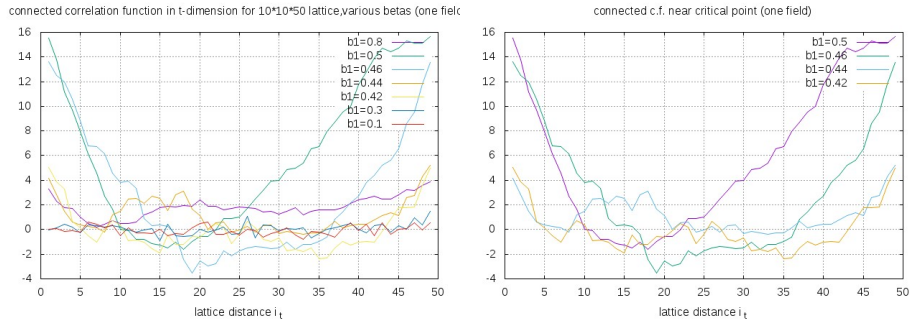
$$ccf(i_t) = f(i_t) - \langle s_0 \rangle \langle \sum_{i_x, i_y} s(i_x, i_y, i_t) \rangle = f(i_t) - \langle \cos(\chi(1, 1, 1)) \rangle \langle \sum_{i_x, i_y} \cos(\chi(i_x, i_y, i_t - 1)) \rangle \quad (32)$$

Προκύπτουν οι παρακάτω καμπύλες 11 και 12.



Σχήμα 11: Συνάρτηση συσχετισμού δύο σημείων κατά τον άξονα του χρόνου για ένα πεδίο μοντέλου XY σε $10*10*50$ πλέγμα, για διάφορες τιμές της παραμέτρου β , και λεπτομέρεια για τιμές κοντά στην κρίσιμη τιμή β .

Όπως φαίνεται, οι τιμές που παίρνει η συνάρτηση συσχετισμού για μεγάλα β είναι μεγάλες και μειώνονται καθώς μειώνεται το β . Αυτό είναι αναμενόμενο. Όμως η κλίση της συνάρτησης είναι παντού κοντά στο μηδέν τόσο για μεγάλα όσο και για μικρά β , και μόνο για β μεταξύ 0.44 και 0.5 οι συναρτήσεις παίρνουν μεγάλες κλίσεις. Αντίστοιχα, η συνεκτική συνάρτηση συσχετισμού παίρνει τόσο μικρές κλίσεις όσο και μικρές τιμές για β μακριά από την περιοχή 0.44-0.5, ενώ στην εν λόγω περιοχή πηγαίνει απότομα από μεγάλες τιμές στα άκρα σε μικρές τιμές στο κέντρο (λόγω των περιοδικών συνοριακών συνθηκών που εφαρμόζονται). Άρα και οι συναρτήσεις συσχετισμού επιβεβαιώνουν

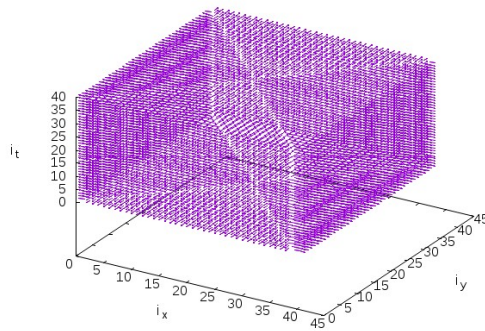


Σχήμα 12: Συνεκτική συνάρτηση συσχετισμού κατά τον άξονα του χρόνου για ένα πεδίο μοντέλου XY σε $10*10*50$ πλέγμα, για διάφορες τιμές της παραμέτρου β , και λεπτομέρεια για τιμές κοντά στην κρίσιμη τιμή β .

ότι το κρίσιμο σημείο βρίσκεται κοντά στο 0.45. Βεβαίως τα αποτελέσματα έχουν μεγάλες διακυμάνσεις εξαιτίας της φτωχής στατιστικής του χρησιμοποιούμενου πλέγματος.

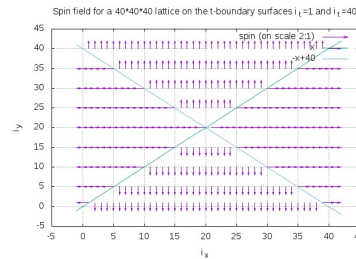
3 Πρότυπο XY με συνθήκες σχηματισμού δίνης

Πρόκειται και πάλι για τρισδιάστατο πρότυπο XY (τρεις διαστάσεις θεωρούνται ως δύο χωρικές και μία χρονική. Όμως αντί για περιοδικές συνοριακές συνθήκες επιβάλλονται ειδικές συνοριακές συνθήκες όπως αυτές του σχήματος 13: στην κάτω και στην πάνω έδρα του πλέγματος τα σπιν διατάσσονται σε σχηματισμό δίνης που στρέφεται προς τα έξω (σχήμα 14), ενώ στις πλάγιες έδρες τα σπιν διατάσσονται κάθετα σε αυτές και με φορά προς τα έξω. Ακόμα, ορίζεται ως αρχική συνθήκη εκκίνησης της προσομοίωσης Μόντε Κάρλο όλα τα επίπεδα σταθερού χρόνου να τηρούν τον σχηματισμό δίνης του σχήματος 14.



Σχήμα 13: Συνοριακές συνθήκες για το τρισδιάστατο πρότυπο XY με σχηματισμό δίνης (ενδεικτικό πλέγμα 40*40*40).

Το κρίσιμο σημείο έχει υπολογιστεί και αυτό στο $\beta_C \approx 0.45$, όπως προέκυψε και για το μοντέλο με περιοδικές συνοριακές συνθήκες. Ένα στοιχείο που μπορεί να μελετηθεί είναι η τελική θέση του κέντρου της δίνης στα διάφορα οριζόντια επίπεδα σταθερού χρόνου t . Για το σκοπό αυτό, το σύστημα αφήνεται να εξελιχθεί για κάποιο χρόνο Μόντε Κάρλο και στη συνέχεια



Σχήμα 14: Αρχικός σχηματισμός που προσομοιάζει σε δίνη με κέντρο το κέντρο του τετραγώνου

υπολογίζονται οι μέσες τιμές των σπιν στις διάφορες θέσεις πάνω στο εκάστοτε πλεγματοειδές επίπεδο. Από την αναπαράστασή τους προκύπτει η θέση του κέντρου της δίνης και μπορεί να παρατηρηθεί η μετατόπιση τού τελευταίου από την αρχική θέση, η οποία σύμφωνα με τις αρχικές συνθήκες ήταν το κέντρο του επιπέδου. Λόγω των συνοριακών συνθηκών αναμένεται συμμετρία ως προς το επίπεδο με χρόνο τον μισό της διάστασης του πλέγματος, οπότε αρκεί η μελέτη του κάτω μισού του ορθογωνίου. Η μελέτη γίνεται για τιμή της παραμέτρου β ίση με 0.5, δηλαδή κοντά στην κρίσιμη τιμή και πάνω από αυτήν, ώστε να διατηρείται κάποιος σχηματισμός στο πλέγμα.

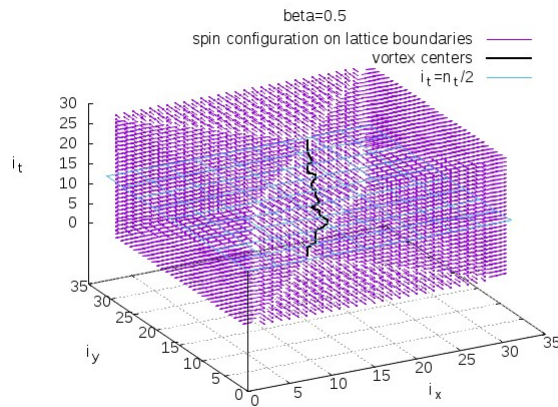
Για ένα σχετικά μικρό πλέγμα $30 \times 30 \times 30$ μπορούν εύκολα να βρεθούν τα κέντρα σε κάθε επίπεδο σταθερού χρόνου. Από την ανάλυση προκύπτει το σχήμα 15, στο οποίο διακρίνεται η καμπύλη που ενώνει τα κέντρα των δινών των πλεγματοειδών επιπέδων. Όπως φαίνεται, η μορφή της καμπύλης κάτω και πάνω από το μισό του χρόνου δεν είναι ίδια. Αυτό μάλλον οφείλεται στο ότι η προσομοίωση δε γίνεται με τυχαία επιλογή πλεγματοειδούς θέσης αλλά με αυθεντικό αλγόριθμο Metropolis όπου οι θέσεις επιλέγονται κατά αύξουσα σειρά θέσεων ως προς x, y, t . Ακόμα, ίσως για τον ίδιο λόγο παρατηρείται διαφορετική συμπεριφορά ως προς τους δύο άξονες x και y , δηλαδή μοιάζει να χάνεται η συμμετρία περιστροφής κατά 90 μοίρες. Γενικότερα όμως η καμπύλη δε φαίνεται να έχει κάποια συγκεκριμένη μορφή, γεγονός που πρέπει να αποδοθεί στο μικρό αριθμό πλεγματοειδών θέσεων, που καθιστούν απαγορευτική την προσέγγιση ενός συνεχούς ομαλού σχήματος.

Για

- πλέγμα με διαστάσεις $n_x = 80, n_y = 80, n_t = 60$
- τρεις χρόνους $i_t = 15, 20$ και 30 στο κάτω μισό του πλέγματος

λαμβάνουμε τα πεδία σπιν των εικόνων του σχήματος 17.

Βλέπουμε ότι τα κέντρα μετατοπίζονται από την αρχική τους θέση στα σημεία $(38,38)$, $(40,41)$ και $(40,39)$ για $i_t = \frac{n_t}{4}, \frac{n_t}{3}$ και $\frac{n_t}{2}$ αντίστοιχα. Για το πλέγμα διαστάσεων $30 \times 30 \times 30$ τα κέντρα των δινών στα αντίστοιχα πλεγματοειδή επίπεδα (δηλαδή στα επίπεδα με ίδιους λόγους i_t/n_t) βρίσκονται σε εντελώς διαφορετικές θέσεις σε σχέση με τον κατακόρυφο άξονα του πλέγματος (σύγκρινε με σχήμα 16). Επομένως με αυτά τα δεδομένα δεν μπορεί να εξαχθεί κάποια γενική μορφή για τη γραμμή των κέντρων.

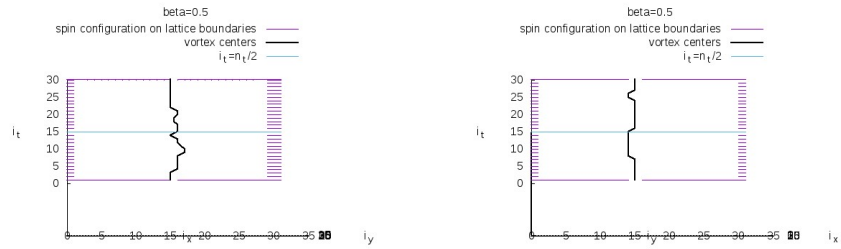


Σχήμα 15: Η διάταξη των σπιν στις συνοριακές επιφάνειες του πλέγματος και η καμπύλη των κέντρων των δινών όπως προκύπτουν οπτικά, για πλέγμα $30*30*30$ στην τιμή $\beta=0.5$.

Ένα άλλο ζήτημα που μπορεί να εξεταστεί, το οποίο έχει σχέση καθαρά με την προσομοίωση, είναι η μετατόπιση του κέντρου σε συνάρτηση με το χρόνο Μόντε Κάρλο. Επιλέγονται πλεγματικά επίπεδα σταθερού χρόνου t και σε καθένα από αυτά εντοπίζεται το κέντρο της δίνης, όχι με βάση τις αναμενόμενες τιμές $\langle \dots \rangle$ του σπιν σε όλο το επίπεδο, αλλά από τη διάταξη του σπιν στο επίπεδο σε ένα συγκεκριμένο βήμα της προσομοίωσης Μόντε Κάρλο. Παρατηρείται η θέση του κέντρου για διαδοχικούς χρόνους Μόντε Κάρλο και μπορεί να σχεδιαστεί μία καμπύλη με την κίνηση του κέντρου στον ψευδοχρόνο της προσομοίωσης και να συγκριθεί με την αντίστοιχη κίνηση σε άλλα πλεγματικά επίπεδα.

Για τιμές του β κοντά στην κρίσιμη προκύπτει ότι η διάταξη των σπιν δεν σχηματίζει διακριτή δίνη σε κάθε βήμα Μόντε Κάρλο (παρόλο που, όπως είδαμε νωρίτερα, η μέση τιμή των σπιν σχηματίζει δίνη). Για το λόγο αυτό χρησιμοποιούμε μια μεγάλη τιμή του β , εν προκειμένω $\beta=1$. Τα στοιχεία της προσομοίωσης είναι λοιπόν

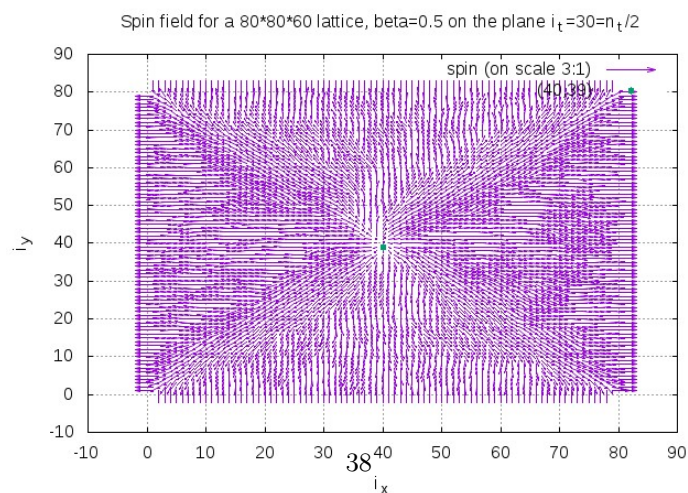
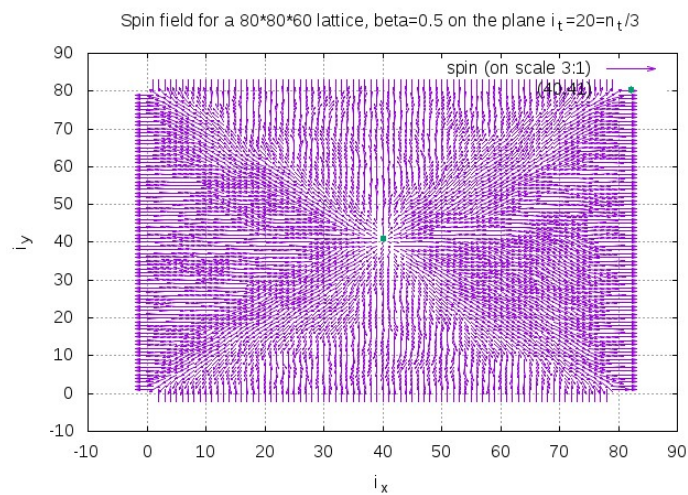
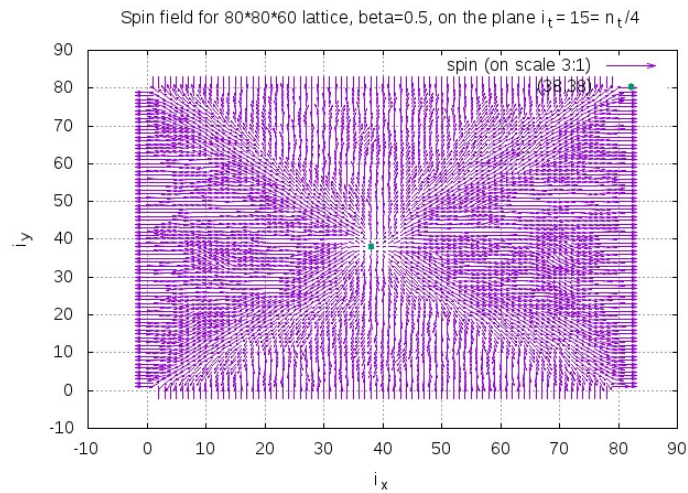
- $\beta = 1$
- διαστάσεις πλέγματος $30*30*30$
- χρόνος προσομοίωσης = 1000 + 200 μεταβατικά βήματα στην αρχή



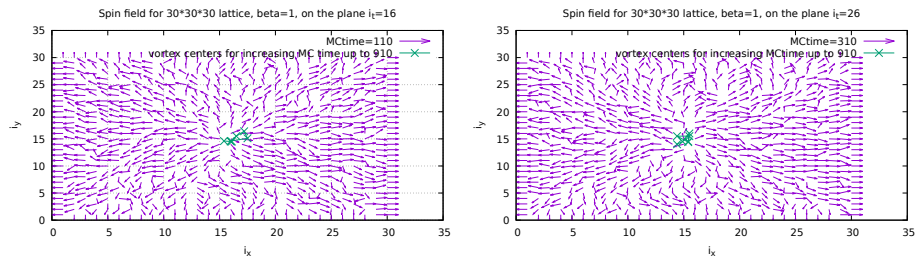
Σχήμα 16: Το πλέγμα και η καμπύλη των κέντρων των δινών του σχήματος 15 σε πλάγια όψη ως προς i_x και ως προς i_y .

- Λαμβάνονται δεδομένα για τις “στιγμιαίες” διατάξεις σπιν ανά 100 βήματα Μόντε Κάρλο, ξεκινώντας από το βήμα 310
- Επιλέγονται για σύγκριση τα πλεγματικά επίπεδα $i_t = 16$ και $i_t = 26$

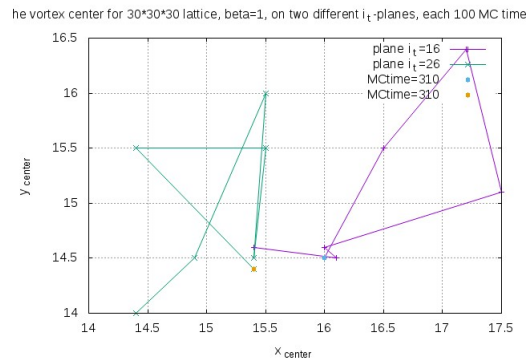
Οι διατάξεις που προκύπτουν διατηρούν τη μορφή δίνης, αν και είναι αρκετά πιο άτακτες, όπως είναι λογικό. Στο σχήμα 18 παρατίθεται η μορφή του πεδίου σπιν σε μια Μόντε Κάρλο-χρονική στιγμή και η κίνηση του κέντρου ανά 100 βήματα Μόντε Κάρλο. Οι μετατοπίσεις των κέντρων είναι της ίδιας τάξης μεγέθους με τις μέσες μετατοπίσεις των κέντρων από τον άξονα στα διάφορα πλεγματικά επίπεδα, όπως υπολογίστηκαν προηγουμένως. Η σύγκριση των κινήσεων των κέντρων (σχήμα 19) δείχνει ότι η μέση θέση του κέντρου, γύρω από την οποία αυτό περιστρέφεται, είναι αρκετά διαφορετική για τα δύο επίπεδα, όπως πρέπει. Η εξαγωγή περαιτέρω συμπερασμάτων, π.χ. για τον προσανατολισμό της κίνησης, είναι μάλλον ανασφαλής.



Σχήμα 17: Διάταξη των αναμενόμενων τιμών των σπιν για τρία πλεγματικά επίπεδα $i_t = 15, 20$ και 30 σε πλέγμα $80*80*60$ για τιμή $\beta=0.5$. Με κουκκίδα σημειώνεται η θέση του κέντρου της σχηματιζόμενης δίνης.



Σχήμα 18: Το πεδίο του σπιν για το βήμα προσομοίωσης (χρόνο Μόντε Κάρλο) 110 και οι θέσεις του κέντρου της δίνης σε επόμενα βήματα, στα επίπεδα $i_t = 16$ και $i_t = 26$, για πλέγμα $30 \times 30 \times 30$ και $\beta=1$.



Σχήμα 19: Η κίνηση, κατά τη διάρκεια της προσομοίωσης, των κέντρων των δινών στα επίπεδα $i_t = 16$ και $i_t = 26$

4 Σύστημα XY για δύο πεδία με ζεύξη

Πρόκειται για ένα τρισδιάστατο πλέγμα όπως στα προηγούμενα, όπου πλέον σε κάθε πλεγματοειδή θέση εδράζονται δύο είδη σπιν τύπου XY: ένα που το ονομάζουμε s και ένα σ . Αυτά τα δύο είδη αλληλεπιδρούν το καθένα με τον εαυτό του κατά τα γνωστά, αλλά και κάθε σπιν με τα γειτονικά σπιν του άλλου είδους. Η Χαμιλτονιανή του συστήματος είναι η ακόλουθη:

$$\begin{aligned} H &= -J_1 \sum_{\langle ij \rangle} \vec{s}_i \cdot \vec{s}_j - J_2 \sum_{\langle ij \rangle} \vec{\sigma}_i \cdot \vec{\sigma}_j - J_{12} \sum_{\langle ij \rangle} \vec{s}_i \cdot \vec{\sigma}_j \\ &= -J_1 \sum_{\langle ij \rangle} \cos(\chi_i - \chi_j) - J_2 \sum_{\langle ij \rangle} \cos(\phi_i - \phi_j) - J_{12} \sum_{\langle ij \rangle} \cos(\chi_i - \phi_j) \end{aligned} \quad (33)$$

Σκοπός μας είναι η κατασκευή του διαγράμματος φάσεων του συστήματος στον τρισδιάστατο χώρο των παραμέτρων (β_1, β_2, μ) . Για την απόκτηση μιας πρώτης εικόνας του διαγράμματος είναι χρήσιμη η μελέτη μέσω της προσέγγισης μέσου πεδίου.

4.1 Προσέγγιση μέσου πεδίου

4.1.1 Λογική της κατασκευής

Η προσέγγιση γίνεται σε πλήρη αντιστοιχία με το πρότυπο Ίζινγκ. Η θεμελιώδης παραδοχή είναι ότι το περιβάλλον γύρω από κάθε σπιν είναι παντού ίδιο. Θεωρούμε τη Χαμιλτονιανή ως προς s

$$H_s = - \sum_i (J_1 \sum_j \vec{s}_j + J_{12} \sum_j \vec{\sigma}_j) \cdot \vec{s}_i = -B_{eff,s} \sum_i s_{iB} \quad (34)$$

και ως προς σ

$$H_\sigma = - \sum_i (J_2 \sum_j \vec{\sigma}_j + J_{12} \sum_j \vec{s}_j) \cdot \vec{\sigma}_i = -B_{eff,\sigma} \sum_i \sigma_{iB} \quad (35)$$

αφού ο όρος αλληλεπίδρασης του εκάστοτε “άλλου” είδους σπιν είναι απλά μια σταθερά για το είδος σπιν που μελετάμε κάθε φορά. B_{eff} είναι το μέσο ενεργό μαγνητικό πεδίο που δημιουργείται από τα γειτονικά σπιν του ίδιου ή του άλλου είδους και s_{iB} η προβολή του σπιν στην κατεύθυνση του πεδίου. Σε μια απλουστευτική προσέγγιση, θεωρούμε την προβολή στον οριζόντιο άξονα, οπότε $s_{iB} = \cos\chi_i$ και

$\sigma_{iB} = \cos\phi_i$. Αγνοώντας την πυκνότητα καταστάσεων, οι κατανομές πιθανότητας για κάθε είδος σπιν γίνονται με αυτόν τον τρόπο

$$\begin{aligned} \langle s_{proj} \rangle = \langle \cos\chi \rangle &= \int_0^{2\pi} d\chi \cos\chi P(\chi) = \int_0^{2\pi} d\chi \cos\chi \frac{1}{Z_s} e^{-\beta H_s} = \\ &= \frac{\int_0^{2\pi} d\chi \cos\chi e^{\beta B_{eff,s} \cos\chi}}{\int_0^{2\pi} d\chi e^{\beta B_{eff,s} \cos\chi}} \end{aligned} \quad (36)$$

Όμως το ενεργό πεδίο σχετίζεται με τα μέσα σπιν ως

$$\vec{B}_{eff,s} = J_1 \sum_j \vec{s}_j + J_{12} \sum_j \vec{\sigma}_j$$

και, πάλι σε μια απλουστευτική προσέγγιση, μπορούμε να θεωρήσουμε μόνο την προβολή του πεδίου στον οριζόντιο άξονα, ώστε και πάλι

$$B_{eff,s} = J_1 \sum_j \langle s_{j,proj} \rangle + J_2 \sum_j \langle \sigma_{j,proj} \rangle = J_1 n \langle \cos\chi \rangle + J_2 n \langle \cos\phi \rangle \quad (37)$$

όπου n ο αριθμός των πλησιέστερων γειτόνων, ίσος με 6 για το τρισδιάστατο πλέγμα. Αντίστοιχες σχέσεις προκύπτουν και για το πεδίο σ . Αντικαθιστώντας τα ενεργά μαγνητικά πεδία στις σχέσεις για τις αναμενόμενες τιμές των μαγνητίσεων προκύπτουν δύο εξισώσεις της μορφής

$$\begin{aligned} \langle s_{proj} \rangle &= f(\langle s_{proj} \rangle, \langle \sigma_{proj} \rangle; \beta_1, \beta_2, \mu) \\ \langle \sigma_{proj} \rangle &= g(\langle s_{proj} \rangle, \langle \sigma_{proj} \rangle; \beta_1, \beta_2, \mu) \end{aligned} \quad (38)$$

Οι παράμετροι J έχουν απορροφήσει το β και συμβολίζονται πλέον β_1, β_2, μ . Η επίλυση αυτού του συστήματος εξισώσεων αυτοσυνέπειας δίνει την αναμενόμενη τιμή των δύο ποσοτήτων, που μπορούν να θεωρηθούν ως τα ανάλογα των "μαγνητίσεων". Η λύση $\langle s_{proj} \rangle = \langle \sigma_{proj} \rangle = 0$ υπάρχει για όλες τις τιμές των παραμέτρων (β_1, β_2, μ) . Για κάποιες περιοχές τιμών θα υπάρχει και μη μηδενική λύση χαμηλότερης ενέργειας.

Η μέθοδος που ακολουθούμε συνίσταται στην αριθμητική κατασκευή των καμπυλών (38) και την παρατήρηση των σημείων τομής τους, για διάφορες τιμές των τριών παραμέτρων. Η μετάβαση φάσης γίνεται στις τριπλέτες τιμών των παραμέτρων για τις οποίες από ένα

σημείο τομής, το (0,0), οι καμπύλες αποκτούν και άλλα δύο συμμετρικά σημεία τομής. Δεν καταγράφουμε τις τιμές των μαγνητίσεων.

Τα αρχεία που περιέχουν τον αντίστοιχο κώδικα είναι τα `sigmas-mean.f90` και `besselattempt.f90`. Το τελευταίο απλώς κατασκευάζει κάποιες ολοκληρωτικές συναρτήσεις οι οποίες χρησιμοποιούνται στο κυρίως πρόγραμμα. Οι συναρτήσεις αυτές μοιάζουν με τις λεγόμενες Bessel, εξ ου και το όνομα του αρχείου.

Λόγω της “χειροκίνητης” άντλησης πληροφοριών από τη μέθοδο καθίσταται δυσχερής η εξέταση μεγάλου αριθμού σημείων στο χώρο των παραμέτρων. Ωστόσο και μικρός αριθμός κατάλληλα επιλεγμένων σημείων είναι αρκετός για να μας δώσει την ποιοτική εικόνα που σε αυτή τη φάση χρειαζόμαστε.

Παρακάτω παρατίθενται ενδεικτικά κάποιες από τις καμπύλες των εξισώσεων αυτοσυνέπειας για ορισμένες τιμές των β_1, β_2 και μ , ώστε να γίνει πιο κατανοητή η μέθοδος που ακολουθήθηκε. Ο οριζόντιος άξονας αντιστοιχεί στο $\langle s_{proj} \rangle$ (για συντομία s) και ο οριζόντιος στο σ_{proj} (για συντομία σ). Στο κρίσιμο σημείο των παραμέτρων (εκτός ειδικών περιπτώσεων) οι καμπύλες πρέπει να εφάπτονται.

Έτσι (σχήμα 20), για τη γραμμή $\beta_2 = 0.20, \mu = 0.10$, βλέπουμε ότι η μαγνήτιση γίνεται από μηδενική, μη μηδενική, ταυτόχρονα και για τα δύο πεδία, στο $\beta_1 = 0.26$. Μάλιστα οι μαγνητίσεις αποκτούν κατευθείαν μια μεγάλη τιμή μακριά από το μηδέν, όπως ακριβώς αναμένεται σε μία μετάβαση φάσης.

4.1.2 Αποτελέσματα

Κρατάμε σταθερό το μ και έπειτα για διαδοχικές τιμές του β_2 βρίσκουμε την κρίσιμη τιμή του β_1 . Λόγω της συμμετρίας του συστήματος ως προς την εναλλαγή του s με το σ , ο χώρος των παραμέτρων θα είναι επίσης συμμετρικός ως προς την εναλλαγή β_1 - β_2 (δηλαδή ως προς τη διχοτόμο της γωνίας των β_1 και β_2 αξόνων). Επομένως, όταν η ευρισκόμενη κρίσιμη τιμή του β_1 γίνει ίση με την εκάστοτε τιμή του β_2 απλώς δημιουργούμε σημεία συμμετρικά ως προς τη διχοτόμο εναλλάσσοντας τα β_1 - β_2 . Μπορούμε έτσι να περάσουμε στην εξέταση της επόμενης τιμής του μ .

Τα συνολικά αποτελέσματα φαίνονται στο διάγραμμα ισοϋψών καμπυλών του σχήματος 21. Ακολουθεί επεξήγηση ορισμένων χαρακτηριστικών του.

Εξετάζοντας αρχικά το σύστημα ενός μόνο πεδίου, δηλαδή μη-δενίζοντας τα β_2, μ , προκύπτει ότι η μετάβαση φάσης συμβαίνει στο $\beta_1 = 0.33$, τιμή αρκετά μακριά από το 0.45 που έχει υπολογιστεί αναλυτικά. Αυτό είναι αναμενόμενο, αφού και στο Ising η ΠΜΠ απείχε ποσοτικά σε σημαντικό βαθμό από τη θεωρία (και την προσέγγιση Μόντε Κάρλο). Προφανώς σε αυτήν την περίπτωση η δεύτερη μαγνήτιση παραμένει μηδενική για οποιαδήποτε τιμή του β_1 .

Αυτό που έχει ενδιαφέρον είναι η συμπεριφορά του δεύτερου πεδίου όταν $\beta_2 = 0$ αλλά η σταθερά ζεύξης μ μεταξύ τους είναι διάφορη του μηδενός. Σε αυτήν την περίπτωση προκύπτει ότι, μεταβάλλοντας το β_1 , η κρίσιμη τιμή του μειώνεται καθώς το μ αυξάνεται. Το πιο σημαντικό εύρημα όμως είναι ότι το δεύτερο πεδίο φαίνεται να εμφανίζει μαγνήτιση ακριβώς όταν εμφανίζει και το πρώτο πεδίο. Δηλαδή, ενώ ευρισκόμενοι στην ευθεία $\beta_2 = 0, \mu = 0$ το σύστημα εμφανίζει μια μετάβαση φάσης για το πεδίο s αλλά το σ παραμένει αμαγνήτιστο, μια απειροελάχιστη μετακίνηση από την ευθεία προς τιμή $\mu \neq 0$ οδηγεί το πεδίο σ να ακολουθεί το s όταν αυτό αποκτά μαγνήτιση. Προφανώς τα ίδια ισχύουν και για το s όταν $\beta_1 = 0$.

Αυτό φαίνεται εποπτικά και στο διάγραμμα 21. Στο επίπεδο $\mu = 0$ ο χώρος των παραμέτρων χωρίζεται σε τέσσερις διαφορετικές περιοχές που αντιστοιχούν σε τέσσερις διαφορετικές φάσεις: αυτή όπου κανένα πεδίο δεν έχει μαγνήτιση (κάτω αριστερά), δύο περιοχές όπου το ένα πεδίο έχει μαγνήτιση ενώ το άλλο όχι (κάτω δεξιά και πάνω αριστερά) και μία όπου και τα δύο πεδία έχουν μαγνήτιση (πάνω δεξιά). Όταν το μ ξεφεύγει από το μηδέν, π.χ. για $\mu = 0.1$ (προκύπτει ότι το ίδιο ισχύει και για μικρότερα μ), υπάρχουν μόνο η περιοχή όπου η μαγνήτιση είναι μηδενική και για τα δύο πεδία (μέσα από την καμπύλη του $\mu = 0.1$ και αντίστοιχα για τις άλλες τιμές του μ) και η περιοχή όπου και τα δύο πεδία έχουν μαγνήτιση.

Παρόλα αυτά, πρέπει να σημειωθεί ότι στην τιμή $\beta_2 = 0$ που συζητήθηκε, το δεύτερο πεδίο σ μοιάζει να εμφανίζει μαγνήτιση η οποία αυξάνεται ομαλά από την τιμή μηδέν καθώς το μ μεγαλώνει και όχι απότομα, όπως αναμένουμε σε μια μετάβαση φάσης. Αντίθετα το s εμφανίζει κανονικά μετάβαση φάσης. Αυτό φαίνεται και από το σχήμα 22.

Καθώς το μ αυξάνεται οι κρίσιμες τιμές των β_1 και β_2 γίνονται όλο και μικρότερες. Για τιμή $\mu = 0.34$ περίπου, τα δύο πεδία αποκτούν μαγνήτιση ακόμα και όταν οι σταθερές της αυτοζεύξης τους είναι ίσες με μηδέν. Η καμπύλη δηλαδή των κρίσιμων ζευγών β_1, β_2 συμπίπτει

με το 0 και για όλα τα επίπεδα με $\mu > 0.34$ ο χώρος περιέχει μόνο μία φάση, αυτήν όπου και τα δύο πεδία είναι μαγνητισμένα.

Με βάση τα παραπάνω και όσα είπαμε προηγουμένως για την περίπτωση $\beta_2 = 0$, εγείρεται το ερώτημα αν συμβαίνει μετάβαση φάσης πάνω στον άξονα του μ : αν δηλαδή για $\beta_1 = \beta_2 = 0$ και για τιμές μεγαλύτερες της κρίσιμης τιμής του μ τα δύο πεδία αποκτούν μαγνήτιση που μεταβάλλεται ομαλά από το μηδέν ή που παίρνει εξαρχής μια μεγάλη τιμή. Φυσικά στη δεύτερη περίπτωση θα μιλάμε για μετάβαση δεύτερης τάξης οπότε θα υπάρχει μια "ομαλότητα". Από δοκιμές προκύπτει ότι μετά το 0.34 η μαγνήτιση του κάθε πεδίου εκτοξεύεται απότομα, επομένως μάλλον μιλάμε για μετάβαση φάσης.

Εφόσον έχουμε μια ποιοτική εικόνα του τρισδιάστατου διαγράμματος φάσεων του συστήματος, μπορούμε τώρα να χρησιμοποιήσουμε πιο στοχευμένα τις προσομοιώσεις Μόντε Κάρλο.

4.2 Προσομοίωση Μόντε Κάρλο

Η μέθοδος που ακολουθήθηκε συνίσταται στη διατήρηση σταθερών των δύο από τις τρεις παραμέτρους και η μεταβολή της τρίτης για την εύρεση της κρίσιμης τιμής. Ο αλγόριθμος που χρησιμοποιήθηκε βρίσκεται στα προγράμματα `runningb1.f90` και `runningmu.f90`, όπου οι παράμετροι που δοκιμάζονται είναι οι β_1 και μ αντίστοιχα. Δε χρειάζεται δοκιμή της παραμέτρου β_2 αφού το σύστημα διακρίνεται από τη συμμετρία εναλλαγής των δύο πεδίων. Οι προσομοιώσεις έγιναν σε πλέγμα $20 \times 20 \times 20$.

Τα αποτελέσματα από το ένα βαθμωτό πεδίο δίνουν το διάγραμμα φάσεων για το επίπεδο $\mu = 0$, το οποίο φυσικά θα χωρίζεται σε τέσσερις πλήρως διακρίσιμες φάσεις, ανάλογα με το αν και ποια πεδία βρίσκονται σε κατάσταση τάξης. Με βάση το διάγραμμα που εξήχθη από την προσέγγιση μέσου πεδίου αναμένεται η αύξηση της μίας παραμέτρου να οδηγεί σε μείωση της κρίσιμης τιμής των άλλων παραμέτρων. Έμφαση πρέπει να δοθεί στην εξέταση της συμπεριφοράς του δεύτερου πεδίου για $\beta_2 = 0$ και μ λίγο μεγαλύτερο από μηδέν ώστε να εξακριβωθεί αν το δεύτερο πεδίο υφίσταται αμέσως μετάβαση φάσης ή αν υπάρχει μετάβαση φάσης. Ακόμα πρέπει να εξεταστεί η μετάβαση φάσης πάνω στον άξονα του μ ($\beta_1 = \beta_2 = 0$).

Με β_1 να παίρνει την αρκετά μεγάλη τιμή 0.8, $\beta_2 = 0$ και μεταβαλλόμενο μ λαμβάνονται οι παρακάτω καμπύλες 23. Φυσικά το πρώτο πεδίο s (που αντιστοιχεί στη γωνία χ) απλώς αυξάνει την ενέργειά

του. Το σημαντικό όμως είναι ότι το πεδίο σ εμφανίζει μία εντελώς ομαλή μεταβολή της μαγνήτισής του και συνακόλουθα της ενέργειάς του, από το 0 προς μεγάλες τιμές. Το ίδιο ισχύει και για την ενέργεια μεταξύ των δύο πεδίων. Έτσι, φαίνεται να επιβεβαιώνεται η πρόβλεψη της προσέγγισης μέσου πεδίου ότι δε συμβαίνει μετάβαση φάσης πάνω στο επίπεδο $\beta_2=0$ για μεγάλες τιμές του β_1 . Η ποιοτική διαφορά της συμπεριφοράς των ενεργειών και των μαγνητίσεων μεταξύ μιας μετάβασης φάσης και μιας ομαλής μετάβασης φαίνεται στο σχήμα 24. Στην περίπτωση της μετάβασης φάσης το hysteresis loop είναι απόλυτα εμφανές.

Ένα άλλο ζήτημα είναι η εξέταση της συμπεριφοράς του συστήματος πάνω στον άξονα μ . Για $\beta_1=\beta_2=0$, λαμβάνουμε τα παρακάτω αποτελέσματα, τα οποία δείχνουν ότι τα δύο πεδία περνούν ταυτόχρονα από μία μετάβαση φάσης κοντά στην τιμή του $\mu=0.46$, δηλαδή στην ίδια κρίσιμη τιμή με το β για ένα ασύζευκτο πεδίο (σχήμα 25). Από τις τρεις ενέργειες, εκείνη που εμφανίζει τη μεγαλύτερη αύξηση (σε απόλυτη τιμή) είναι η ενέργεια ζεύξης μεταξύ τους. Αντίθετα, οι αντίθετες των ενεργειών του κάθε πεδίου τείνουν προς αρνητικές τιμές, δηλαδή οι ενέργειες στην πραγματικότητα αυξάνονται, γεγονός που σημαίνει ότι πηγαίνουν αντίθετα στην κατεύθυνση μείωσης της ενέργειας του συστήματος. Αλλά και η συνολική ενέργεια έχει πολύ ασταθή συμπεριφορά και για μεγάλα μ παίρνει ακόμα και αρνητικές τιμές (δηλαδή η πραγματική ενέργεια παίρνει και θετικές τιμές). Επίσης, βλέπουμε ότι και η x -συνιστώσα της μαγνήτισης, που είναι σχεδόν ίδια για τα δύο πεδία (σχήμα 26) από το κρίσιμο σημείο του 0.46 και μετά μεταβάλλεται άτακτα. Επομένως, μολονότι διαθέτουμε μόνο την x -συνιστώσα, η συμπεριφορά της για έναν ικανό αριθμό χρόνου Μόντε Κάρλο (120 σε κάθε τιμή της παραμέτρου) σε συνδυασμό με την "αφύσικη" συμπεριφορά της ενέργειας του κάθε πεδίου υποδεικνύει ότι για $\mu=0$ η παράμετρος τάξης είναι άλλη από τη μαγνήτιση. Πράγματι, θα πρέπει να συνδέεται με την ενέργεια ζεύξης μεταξύ των δύο πεδίων, της οποίας η εξέλιξη είναι ίδια με την εξέλιξη της ενέργειας για σύστημα ενός μόνο πεδίου (απλό πρότυπο XY). Πιθανώς λοιπόν στον άξονα του μ εμφανίζεται μία ιδιαιτερότητα.

Στη συνέχεια μπορεί να μελετηθεί σε όλη την έκτασή του το επίπεδο του $\beta_2=0$, διατηρώντας σταθερό το β_1 και μεταβάλλοντας το μ . Προκύπτει ότι για $\beta_1 < \beta_{crit} \approx 0.45$ τα δύο πεδία περνούν ταυτόχρονα από μετάβαση φάσης σε συγκεκριμένο, διακρίσιμο σημείο του μ . Το ίδιο φάνηκε να ισχύει και για την περίπτωση του $\beta_1=0$ που αναφέρθη-

κε, αν αγνοηθεί η ασταθής συμπεριφορά των μαγνητίσεων για μεγάλα μ . Η αστάθεια των μαγνητίσεων αίρεται για $\beta_1 \neq 0$. Καθώς αυξάνεται το β_1 το κρίσιμο σημείο του μ μειώνεται ώσπου από το $\beta_1 = 0.45$ και μετά η συμπεριφορά αλλάζει. Το πεδίο s (γωνία χ) έχει εξαρχής μεγάλη ενέργεια και το δεύτερο πεδίο εμφανίζει μια βαθμιαία αύξηση της μαγνήτισής του, όπως αναφέρθηκε και στην περίπτωση του $\beta_1=0.8$. Επομένως το επίπεδο παραμέτρων $\beta_2=0$ μπορεί να χωριστεί σε τρεις περιοχές (σχήμα 27): μία περιοχή κάτω από την καμπύλη στην οποία τα δύο πεδία είναι σε κατάσταση αταξίας, μία περιοχή πάνω από την καμπύλη και για $\beta_1 < 0.45$ στην οποία τα δύο πεδία είναι μαγνητισμένα και μία περιοχή δεξιά της ευθείας $\beta_1 = 0$ όπου το πεδίο s είναι μαγνητισμένο ενώ το σ αποκτά βαθμιαία μαγνήτιση αν κινούμαστε προς τα πάνω (στη φορά αύξησης του μ). Ακόμα, από δοκιμές με μεταβαλλόμενο β_1 και σταθερό μ προκύπτει ότι σε κάθε σημείο της περιοχής βαθμιαίας μαγνήτισης η ενέργεια του πεδίου σ (αλλά και του πεδίου s) είναι ίδια, είτε φτάσαμε σε αυτό το σημείο κινούμενοι παράλληλα στον άξονα β_1 είτε κινούμενοι παράλληλα στον άξονα των μ . Επομένως δεν υπάρχει πρόβλημα επικοινωνίας μεταξύ των περιοχών, μολονότι εκ πρώτης όψεως η διάκριση μεταξύ μαγνήτισης από μετάβαση φάσης και μαγνήτισης χωρίς μετάβαση φάσης θα μπορούσε να γεννά προβλήματα.

Η μελέτη μπορεί να συνεχιστεί και στα επόμενα επίπεδα σταθερού β_2 . Προκύπτει η ίδια εικόνα με το επίπεδο $\beta_2=0$ και το διάγραμμα φάσεων χωρίζεται σε τρεις περιοχές. Οι διαφορές έγκεινται στο ότι: πρώτον, η καμπύλη που διαχωρίζει τις καταστάσεις τάξης και αταξίας έχει όλο και μικρότερα σημεία τομής με τους άξονες του μ και του β_1 (ενν. στην ουσία σημεία τομής με τα επίπεδα $\beta_1=0$ και $\mu=0$ αντίστοιχα)[βλ. και πίνακα 1]. Δεύτερον, όσο μεγαλώνει το β_2 , στην περιοχή βαθμιαίας μαγνήτισης η αρχική μαγνήτιση του δεύτερου πεδίου σ στο επίπεδο $\mu=0$ αυξάνεται και η αρχική μαγνήτιση του πρώτου πεδίου s εξαρτάται φυσικά από τη θέση του β_1 . Στο επίπεδο $\beta_2 = 0.45$ περίπου, η περιοχή αταξίας (μηδενικής μαγνήτισης) παύει να υπάρχει και παρατηρείται απλώς σταδιακή αύξηση της μαγνήτισης. Το δεύτερο πεδίο σ είναι παντού μαγνητισμένο ενώ το πρώτο κοντά στο $\beta_1=0, \mu=0$ έχει μηδενική μαγνήτιση, η οποία αυξάνεται βαθμιαία στην κατεύθυνση αύξησης του μ ή και σε τυχαία κατεύθυνση, ενώ μόνο για $\mu=0$ περνάει από μετάβαση φάσης στην κατεύθυνση αύξησης του β_1 .

Καταλήγουμε ότι το διάγραμμα φάσεων έχει την (τοπολογική) μορφή ενός ογδοημορίου σφαίρας (σχήμα 29). Αυτό που πρέπει να τονι-

στεί είναι ότι η περιοχή έξω από την σφαιροειδή επιφάνεια δεν έχει παντού ομοιόμορφη μαγνήτιση, αλλά οι μαγνητίσεις αυξάνονται η καθεμία στην κατεύθυνση αύξησης της αντίστοιχης παραμέτρου β_i και οι δύο ταυτόχρονα στην κατεύθυνση αύξησης της παραμέτρου μ .

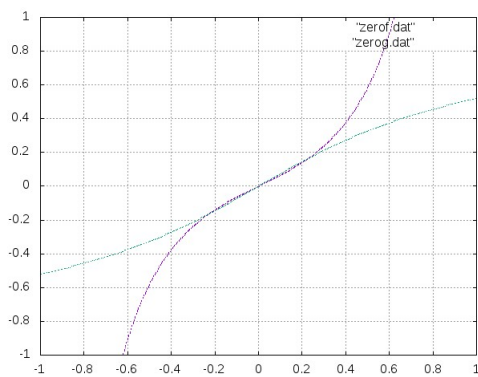
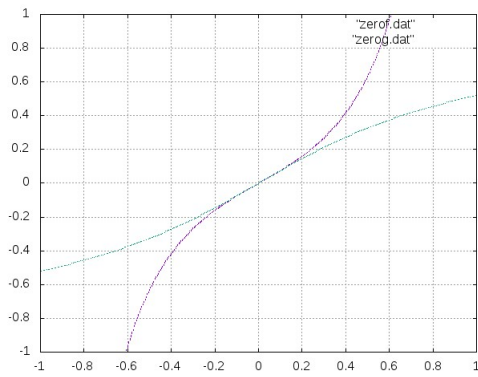
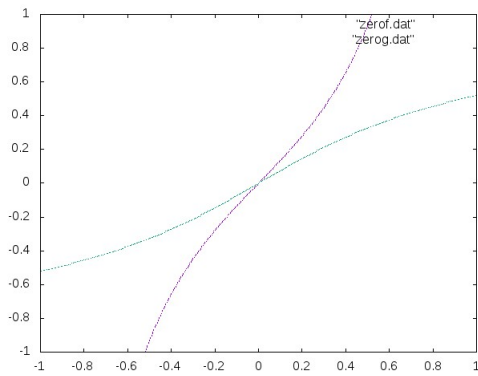
Η αναλυτική μορφή της διαχωριστικής επιφάνειας του διαγράμματος φάσεων δεν είναι γνωστή. Μία πιθανή εξίσωση είναι η

$$\mu = \sqrt{(\beta_C - \beta_1)(\beta_C - \beta_2)} \quad (39)$$

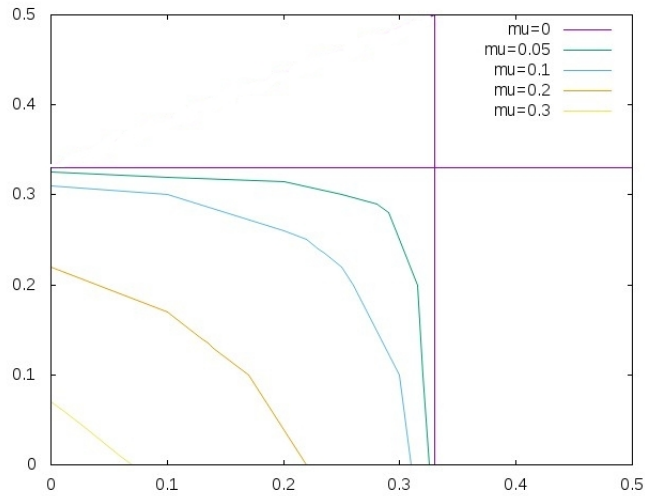
Σύγκριση της θεωρητικής μορφής 39 με ενδεικτικά σημεία που λήφθηκαν από την προσομοίωση (πίνακας 1) γίνεται στο διάγραμμα 28. Τα σημεία από την προσομοίωση έχουν ληφθεί κυρίως από την παρατήρηση του hysteresis loop και επομένως εμπεριέχουν σημαντικά σφάλματα. Πάντως εμφανίζεται μια σχετική συμφωνία.

β_1	β_2	μ
0.0	0.0	0.45
0.1	0.0	0.43
0.2	0.0	0.37
0.30	0.0	0.25
0.40	0.0	0.17
0.43	0.0	0.1
0.45	0.0	0.0
0.0	0.1	0.43
0.05	0.1	0.37
0.1	0.1	0.33
0.2	0.1	0.25
0.3	0.1	0.20
0.35	0.1	0.17
0.40	0.1	0.12
0.43	0.1	0.06
0.435	0.1	0.0
0.0	0.2	0.37
0.1	0.2	0.25
0.2	0.2	0.20
0.3	0.2	0.17
0.0	0.3	0.25
0.1	0.3	0.20
0.2	0.3	0.17
0.3	0.3	0.11
0.4	0.3	0.07
0.0	0.40	0.17
0.1	0.40	0.12
0.3	0.4	0.07

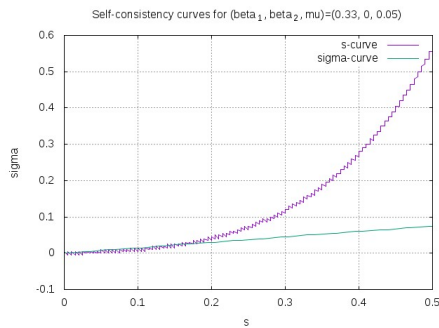
Πίνακας 1: Ενδεικτικές προσεγγιστικές τιμές των κρίσιμων σημείων, όπως υπολογίστηκαν από τις προσομοιώσεις Μόντε Κάρλο.



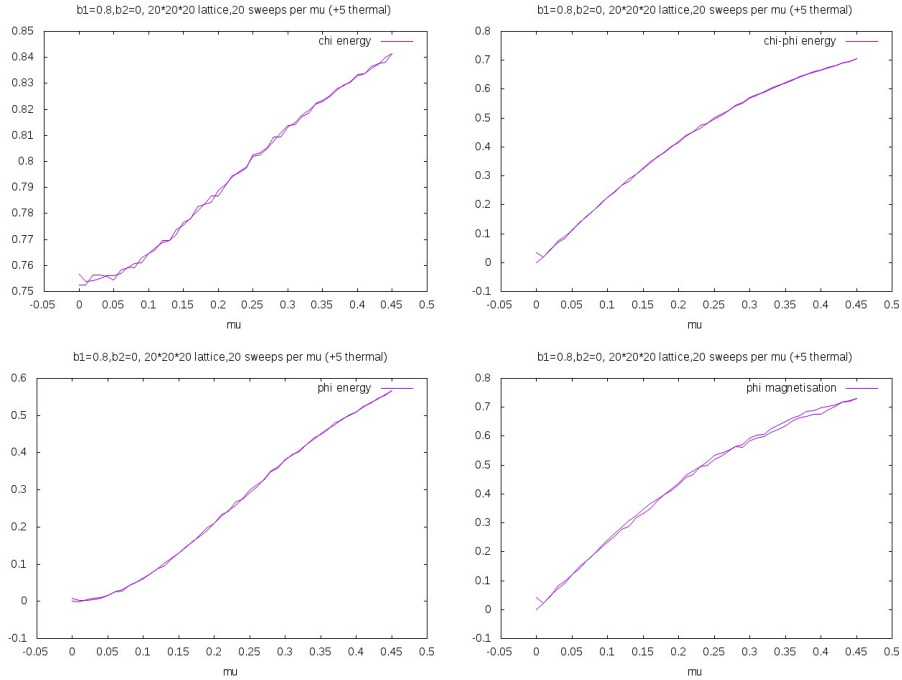
Σχήμα 20: Καμπύλες εξισώσεων αυτοσυνέπειας για $\beta_2=0.20$, $\mu=0.10$ και για τρεις διαφορετικές τιμές του β_1 , 0.20, 0.26 και 0.27 αντίστοιχα. Στον οριζόντιο άξονα βρίσκεται το s και στον κατακόρυφο το σ .



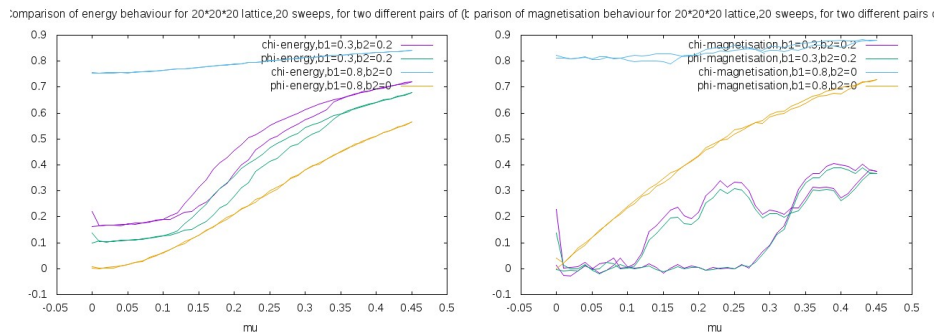
Σχήμα 21: Διάγραμμα ισοψών καμπυλών του χώρου των παραμέτρων από την προσέγγιση μέσου πεδίου. Στον οριζόντιο άξονα αναπαρίσταται το β_1 και στον κατακόρυφο το β_2 . Το "mu" αναφέρεται στην τιμή του μ .



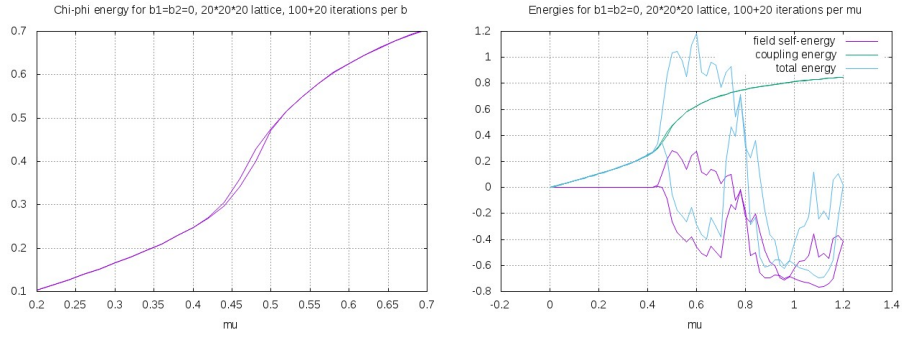
Σχήμα 22: Το σημείο τομής των καμπυλών αυτοσυνέπειας για $\beta_2 = 0$, μ λίγο μεγαλύτερο από μηδέν ($=0.05$) και β_1 λίγο μεγαλύτερο από την κρίσιμη τιμή του ($=0.36$). Το s αποκτά κατευθείαν μεγάλη τιμή μαγνήτισης ενώ το σ αποκτά μεν μαγνήτιση αλλά πολύ μικρής τιμής.



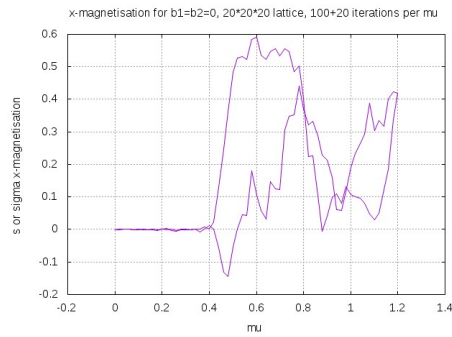
Σχήμα 23: Μέση (αντίθετη) ενέργεια ανά δεσμό του πρώτου πεδίου s , του πρώτου με το δεύτερο πεδίο, του δεύτερου πεδίου και μέση x -συνιστώσα της μαγνήτισης του δεύτερου πεδίου, για $\beta_1=0.8$, $\beta_2=0$ και μεταβαλλόμενο μ , συναρτήσει του μ . Το πλέγμα είναι $20 \times 20 \times 20$ και γίνονται $20+5$ βήματα Μόντε Κάρλο ανά τριπλέτα παραμέτρων.



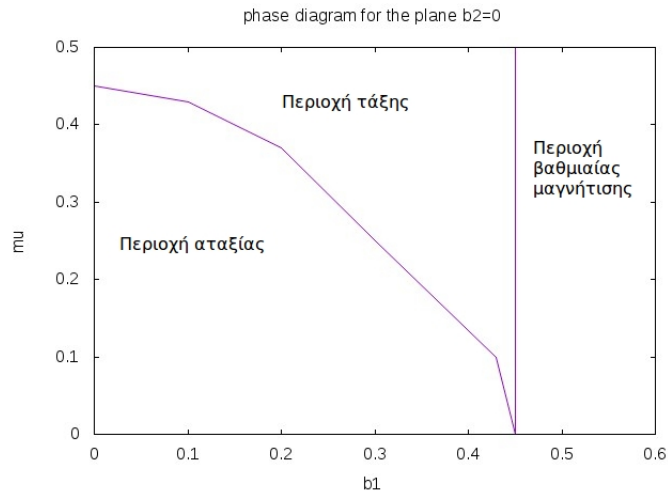
Σχήμα 24: Σύγκριση των ενεργειών των s, σ και των x -συνιστωσών των μαγνήτισεων, συναρτήσει του μ , για δύο ζεύγη τιμών $(\beta_1, \beta_2) = (0.8, 0)$ και $(0.3, 0.2)$. Πλέγμα $20 \times 20 \times 20$, $20+5$ βήματα Μόντε Κάρλο ανά μ .



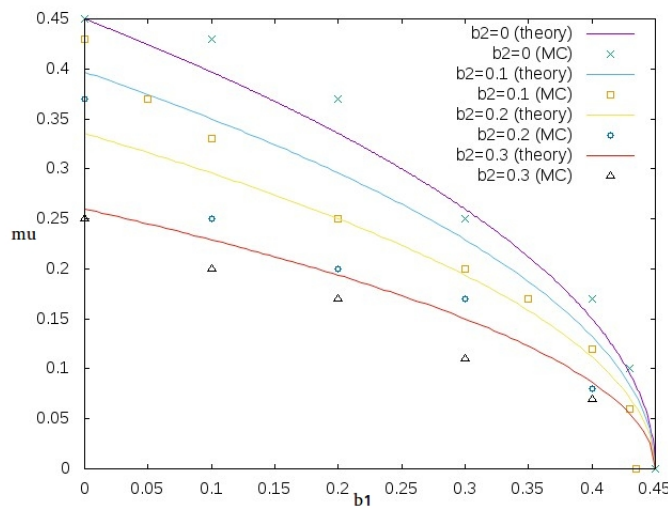
Σχήμα 25: Αριστερά: ενέργεια σύζευξης μεταξύ των δύο πεδίων συναρτήσει του μ . Δεξιά: ενέργεια του κάθε πεδίου, ενέργεια σύζευξης και συνολική ενέργεια. Και για τις δύο εικόνες, $\beta_1=\beta_2=0$ και γίνονται 100+20 επαναλήψεις ανά μ .



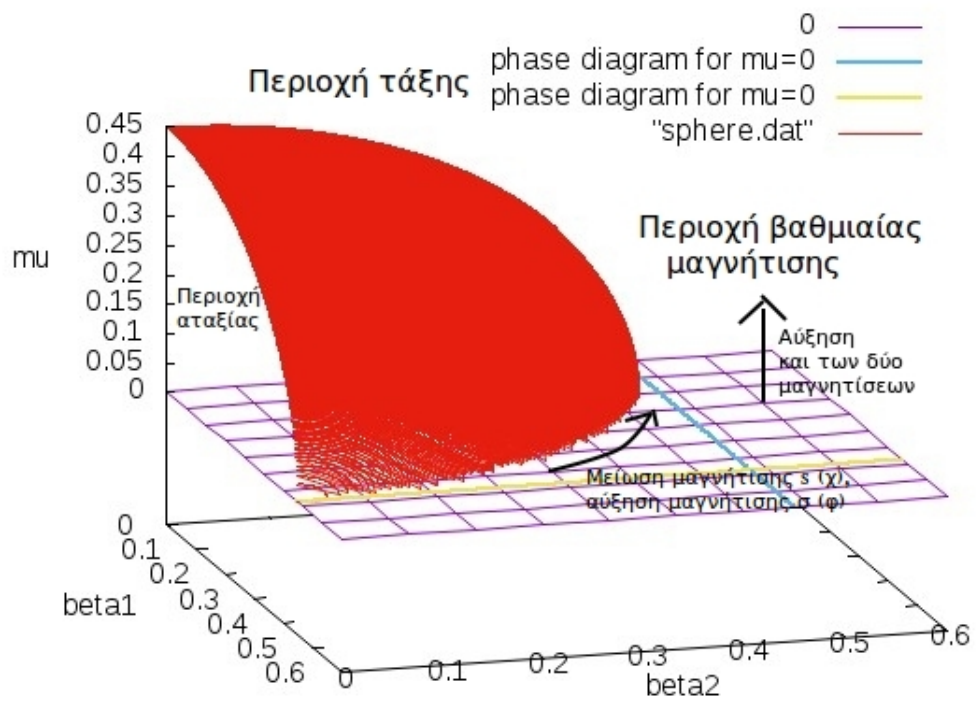
Σχήμα 26: Η x -συνιστώσα της μαγνήτισης τόσο για το πεδίο s όσο και για το σ , συναρτήσει του μ για $\beta_1=\beta_2=0$. 100+20 επαναλήψεις



Σχήμα 27: Προσεγγιστικό διάγραμμα φάσεων από τις προσομοιώσεις Μόντε Κάρλο στο επίπεδο $\beta_2 = 0$



Σχήμα 28: Σύγκριση της υποψήφιας θεωρητικής μορφής 39 με σημεία από την προσομοίωση Μόντε Κάρλο, σε διάγραμμα ισοϋψών καμπυλών ως προς β_2 . Στον οριζόντιο άξονα απεικονίζεται το β_1 και στον κατακόρυφο το μ .



Σχήμα 29: Αναμενόμενη ποιοτική μορφή του διαγράμματος φάσεων για σύστημα XY δύο πεδίων με ζεύξη, με βάση τις προσομοιώσεις Μόντε Κάρλο.

5 Θεωρία πεδίου στο πλέγμα - Αλληλεπίδραση πεδίου Higgs με διανυσματικό πεδίο

5.1 Πλεγματική θεωρία πεδίου

Η πλεγματική θεωρία πεδίου (lattice field theory) είναι ένας κλάδος της κβαντικής θεωρίας πεδίου (QFT) που ιστορικά έχει παίξει και εξακολουθεί να παίζει καθοριστικό ρόλο στην εξέλιξη της φυσικής στοιχειωδών σωματιδίων. Πρόκειται για ένα σύνολο μεθοδολογιών για τη μελέτη κβαντικών πεδίων σε διακριτοποιημένο χωρόχρονο. Λόγω της μεγάλης του υπολογιστικής δύναμης είναι χρήσιμη για την εξαγωγή ποσοτήτων υψηλής ακρίβειας. Είναι επίσης χρήσιμη σε άλλους τομείς που χρησιμοποιούν θεωρίες πεδίου, όπως η Φυσική Συμπυκνωμένης Ύλης.

5.1.1 Ελεύθερο βαθμωτό πεδίο

Ένα ελεύθερο πραγματικό βαθμωτό πεδίο έχει λαγκρανζιανή πυκνότητα (στο εξής απλά λαγκρανζιανή)

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2}(\partial_\mu\phi)(\partial^\mu\phi) - \frac{1}{2}M^2\phi^2 \quad (40)$$

και επομένως δράση

$$S = -\frac{1}{2} \int d^4x \phi(x)(\partial_\mu\partial^\mu + M^2)\phi(x) \quad (41)$$

Βασικό ρόλο στην κβαντική θεωρία πεδίου παίζουν οι συναρτήσεις Green, οι οποίες σχετίζονται με την αναμενόμενη τιμή κάποιου τελεστή στο κενό. Για το βαθμωτό πεδίο η συγκεκριμένη συνάρτηση σε πολλαπλά σημεία του χωροχρόνου x, y, \dots ορίζεται ως

$$G(x, y, \dots) = \langle \phi(x)\phi(y)\dots \rangle = \langle 0|T(\phi(x), \phi(y)\dots)|0 \rangle \quad (42)$$

όπου το T συμβολίζει το χρονολογικό γινόμενο των τελεστών (δηλ. διάταξη των τελεστών σε σειρά φθίνουσας τιμής του $x^0 = t$) [1]. Η συνάρτηση Green προκύπτει (κατ' αναλογία με τη μη σχετικιστική Κβαντομηχανική προσέγγιση) ότι είναι ίση με

$$\langle \phi(x)\phi(y)\dots \rangle = \frac{\int D\phi \phi(x)\phi(y)\dots e^{iS[\phi]}}{\int D\phi e^{iS[\phi]}} \quad (43)$$

Εδώ το $D\phi$ δεν έχει οριστεί αυστηρά ακόμα. Ένα ολοκλήρωμα ως προς $D\phi$ ονομάζεται path integral και θα πρέπει να αναφέρεται σε ολοκλήρωση ως προς κάθε πιθανή πραγμάτωση του φ , $\phi(x)$.

Είναι χρήσιμη η αντικατάσταση του πραγματικού χρόνου από το φανταστικό. Κάνουμε δηλαδή το μετασχηματισμό

$$t = -i\tau$$

μπορούμε να περάσουμε από το χώρο Minkowski στον Ευκλείδειο R^4 , αντικαθιστώντας την x_0 συνιστώσα με την x_4 . Ορίζοντας την ευκλείδεια δράση $S_E = -iS$ καταλήγουμε ότι

$$\langle \phi(x)\phi(y)\dots \rangle = \frac{\int D\phi \phi(x)\phi(y)\dots e^{-S_E[\phi]}}{\int D\phi e^{-S_E[\phi]}} \quad (44)$$

με

$$S_E[\phi] = \frac{1}{2} \int d^4x \phi(x)(-\partial_\mu \partial_\mu + M^2)\phi(x) \quad (45)$$

Αν η δράση είναι κάτω φραγμένη τότε τα ολοκληρώματα της (44) συγχλίνουν.

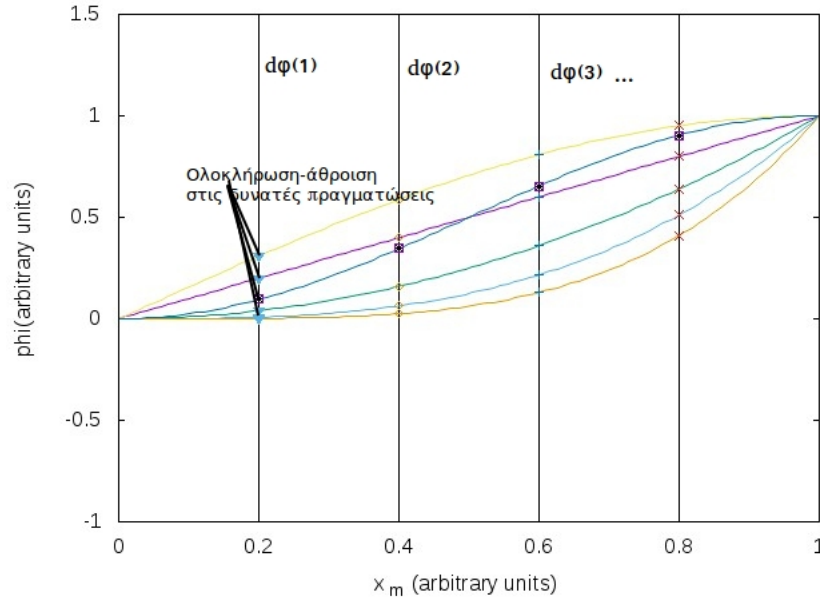
Εισαγωγή του πλέγματος Για να οριστεί το στοιχείο ολοκλήρωσης του path integral, $D\phi$, καταφεύγουμε σε διακριτοποίηση του Ευκλείδειου χωροχρόνου. Επιλέγεται μια ενιαία πλεγματική σταθερά α έτσι ώστε το $\phi(x)$ για $x_i = n_i \times \alpha$ να συμβολίζεται πλέον ως ϕ_n , με $n = (n_1, n_2, n_3, n_4)$. Τώρα μπορεί να οριστεί

$$D\phi = \prod_n d\phi_n \quad (46)$$

δηλαδή γίνεται ολοκλήρωση ως προς φ σε κάθε σημείο n του τετραδιάστατου πλέγματος (βλ. Το φυσικό νόημα της θεωρίας βρίσκεται βέβαια στο όριο $\alpha \rightarrow 0$ (βλ. παρακάτω για κάποιες σημαντικές παρατηρήσεις).

- Ο ορισμός της παραγώγισης μπορεί να γίνει ως

$$\begin{aligned} \partial_\mu \phi(n\alpha) &\rightarrow \frac{1}{\alpha}(\phi_n - \phi_{n+\mu}) \\ \partial_\mu \partial_\mu \phi(n\alpha) &\rightarrow \frac{1}{\alpha^2} \sum_{\mu>0} (\phi_{n+\mu} + \phi_{n-\mu} - 2\phi_n) \end{aligned}$$



Σχήμα 30: Γραφική επεξήγηση του path integral. Ο οριζόντιος άξονας είναι μία από τις μεταβλητές του χωροχρόνου, π.χ. το τ , ενώ ο κατακόρυφος είναι το πεδίο ϕ . Γίνεται διαμέριση του τ και σε κάθε σημείο που προκύπτει, το ϕ ολοκληρώνεται ως προς όλες τις δυνατές του τιμές, καθεμία από τις οποίες αντιστοιχεί σε μια διαφορετική πραγμάτωση του ϕ , $\phi(\tau)$.

όπου $\phi_{n+\mu}$ υποδεικνύει την τιμή του ϕ στην αμέσως επόμενη του n θέση προς την κατεύθυνση \vec{e}_μ ($\mu = 1, 2, 3, 4$) ενώ το $\sum_{\mu>0}$ υπονοεί άθροιση μόνο για τις θετικές κατευθύνσεις των αξόνων (η χρησιμότητα της διασαφήνισης αυτής θα φανεί παρακάτω).

- Η ολοκλήρωση από $\int d^4x$ ορίζεται ως $\sum_n \alpha^4$.
- Τέλος, ορίζουμε τα αδιάστατα μεγέθη

$$\hat{M} = \alpha M$$

$$\hat{\phi}_n = \alpha \phi_n$$

Έτσι η δράση γίνεται τελικά

$$S_E = -\frac{1}{2} \sum_{n,\mu} \hat{\phi}_n \hat{\phi}_{n+\mu} + \frac{1}{2} (8 + \hat{M}^2) \sum_n \hat{\phi}_n \hat{\phi}_n \quad (47)$$

όπου η άθροιση ως προς μ περιλαμβάνει και τις θετικές και τις αρνητικές κατευθύνσεις των τεσσάρων αξόνων.

Η συνάρτηση Green, για παράδειγμα για δύο πλεγματικές θέσεις, γράφεται

$$\langle \hat{\phi}_n \hat{\phi}_m \rangle = \frac{\int \prod_l d\hat{\phi}_l \hat{\phi}_n \hat{\phi}_m e^{-S_E[\hat{\phi}]}}{\int \prod_l d\hat{\phi}_l e^{-S_E[\hat{\phi}]}} \quad (48)$$

Η σχέση υποδεικνύει ότι κάθε πραγμάτωση του ϕ , που αντιστοιχεί σε μια συγκεκριμένη “διάταξη” (configuration) των $\hat{\phi}_n$, συνεισφέρει στην αναμενόμενη τιμή στο κενό σύμφωνα με ένα συντελεστή βάρους $e^{-S_E[\hat{\phi}]}$. Η ίδια ακριβώς σχέση 48 θα εξέφραζε τον στατιστικό μέσο όρο της ποσότητας $\hat{\phi}_n \hat{\phi}_m$ (που ισούται με τη συνάρτηση συσχετισμού $f(n, m)$) για ένα σύστημα από “σπιν” $\hat{\phi}_n$ τα οποία εδράζονται σε τετραδιάστατο πλέγμα και έχουν δράση $S_E = \beta H$ τη δράση της (47) (βλ. σχέσεις για μοντέλα Ίζινγκ, XY). Για να γίνει πιο κατανοητό αυτό, πρέπει να παρατηρηθεί ότι και στην περίπτωση του στατιστικού συνόλου του μοντέλου XY η έκφραση $\int dE \rho(E)$ υποδηλώνει ολοκλήρωση σε όλες τις δυνατές καταστάσεις (configurations) του συνόλου των βαθμών ελευθερίας s_i , όπως ακριβώς και η ολοκλήρωση τύπου path integral. Η βασική διαφορά από ένα μοντέλο XY, πέρα από την διαφορετική αναλυτική μορφή της δράσης, έγκειται στο ότι το “σπιν” μπορεί να πάρει οποιαδήποτε πραγματική τιμή. Επομένως είναι δυνατή η μελέτη της διακριτοποιημένης εκδοχής της θεωρίας πεδίου ως στατιστικού συστήματος με τις γνωστές μεθόδους, όπως οι προσομοιώσεις Μόντε Κάρλο. Η μοναδική παράμετρος ελέγχου θα είναι η αδιάστατη μάζα \hat{M} .

Μετά από αρκετή επεξεργασία και χρήση της μεταφοράς στο χώρο των ορμών [12], προκύπτει ότι η αναμενόμενη τιμή είναι

$$\langle \hat{\phi}_n \hat{\phi}_m \rangle = \int_{-\pi}^{\pi} \frac{d^4 \hat{k}}{(2\pi)^4} \frac{e^{i\hat{k}(n-m)}}{4 \sum_{\mu} \sin^2 \frac{\hat{k}_{\mu}}{2} + \hat{M}^2} = G(n, m; \hat{M}) \quad (49)$$

όπου το $\hat{k} \equiv ak$ είναι η αδιάστατη τετραορμή.

Το συνεχές όριο Όπως αναφέρθηκε, η φυσική θεωρία έγκειται εκεί όπου η πλεγματική σταθερά τείνει στο μηδέν. Αυτή έχει απορροφηθεί από τις αδιάστατες ποσότητες αλλά στη συγκεκριμένη περίπτωση

μπορούμε να την επαναφέρουμε. Εύκολα προκύπτει ότι

$$\langle \phi(x)\phi(y) \rangle = \lim_{\alpha \rightarrow 0} \frac{1}{\alpha^2} G\left(\frac{x}{\alpha}, \frac{y}{\alpha}; \alpha M\right) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d^4 k}{(2\pi)^4} \frac{e^{ik(x-y)}}{k^2 + M^2} \quad (50)$$

το οποίο είναι ο γνωστός διαδότης Φάυνμαν (στον Ευκλείδειο χώρο).

Η αναγωγή στο συνεχές όριο δεν είναι σχεδόν ποτέ δυνατή με αναλυτικό τρόπο όπως έγινε εδώ. Στις περισσότερες περιπτώσεις η μόνη επιλογή θα ήταν να μελετηθεί το αντίστοιχο στατιστικό σύστημα με ολοένα και μικρότερη πλεγματική σταθερά ώσπου τα μετρούμενα φυσικά μεγέθη να συγκλίνουν σε κάποια τιμή. Όμως η σύγκλιση των μεγεθών δεν είναι εγγυημένη, γιατί μπορεί να εξαρτάται από την ίδια την πλεγματική σταθερά. Ας θεωρήσουμε τη φυσική ποσότητα του μήκους συσχετισμού ξ , που ορίζεται από τη σχέση $\langle \phi(x)\phi(y) \rangle \sim e^{-\frac{|x-y|}{\xi}}$. Όπως φαίνεται από την τελική σχέση 50, το μήκος συσχετισμού εξαρτάται μόνο από τη μάζα και μάλιστα προκύπτει ότι $\xi \sim \frac{1}{M}$.

Αν δε διαθέταμε την αναλυτική έκφραση, αυτό που θα μπορούσε να εξαχθεί από την πλεγματική προσέγγιση είναι το αδιάστατο μήκος συσχετισμού $\hat{\xi} = \frac{\xi}{\alpha}$ που θα υπολογιζόταν ως $\langle \hat{\phi}_n \hat{\phi}_m \rangle \sim e^{-\frac{|n-m|}{\hat{\xi}}}$. Για την προσέγγιση του συνεχούς ορίου, εφόσον το α δεν εμφανίζεται άμεσα, μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε το \hat{M} που έχει οριστεί ως αM και να το πλησιάσουμε στο μηδέν. Όμως, με βάση την αναλυτική μας γνώση προκύπτει ότι $\hat{\xi} \sim \frac{1}{\hat{M}}$, άρα στο υποτιθέμενο συνεχές όριο το αδιάστατο μήκος συσχετισμού θα αποκλίνει. Η διαπίστωση αυτή, παρότι όντως δυσχεραίνει την εξαγωγή συμπερασμάτων για το φυσικό μήκος συσχετισμού, δίνει ωστόσο μια πολύ σημαντική πληροφορία: Το γεγονός ότι μεταβάλλοντας την παράμετρο \hat{M} το στατιστικό σύστημα αποκτά άπειρο μήκος συσχετισμού σε μια συγκεκριμένη τιμή (εδώ $\hat{M} \rightarrow 0$) υποδεικνύει ότι το σύστημα υφίσταται μία μετάβαση φάσης και μάλιστα δεύτερης τάξης. Επομένως στις πλεγματικές προσεγγίσεις θεωριών πεδίου το συνεχές όριο πρέπει να αναζητάται κοντά στα κρίσιμα σημεία του αντίστοιχου στατιστικού συστήματος. Βεβαίως εκεί δεν μπορούν να υπολογιστούν ποσότητες όπως το μήκος συσχετισμού. Παρόλα αυτά είναι δυνατός ο υπολογισμός αδιάστατων ποσοτήτων, όπως η ποσότητα

$$\frac{\langle \phi(x)\phi(y) \rangle}{M^2} \xrightarrow{\text{lattice}} \frac{\langle \hat{\phi}_n \hat{\phi}_m \rangle}{\hat{M}^2}$$

πλησιάζοντας το \hat{M} στο μηδέν αλλά κρατώντας το $\hat{M}|n-m|$ σταθερό

ώστε να αντιστοιχεί στο ίδιο πάντα $M|x - y|$.

5.1.2 Το πεδίο βαθμίδας

Θεωρία πεδίου στο συνεχή χωρόχρονο Έστω ένα μιγαδικό βαθμωτό πεδίο. Η λαγκρανζιανή του είναι

$$\mathcal{L} = (\partial_\mu \phi^*)(\partial^\mu \phi) - M^2 \phi^* \phi \quad (51)$$

Αν απαιτήσουμε η λαγκρανζιανή να είναι αναλλοίωτη κάτω από τοπικούς μετασχηματισμούς βαθμίδας της ομάδας $U(1)$,

$$\phi(x) \rightarrow \phi'(x) = G(x)\phi(x), G(x) = e^{i\Lambda(x)} \quad (52)$$

τότε απαιτείται η αναβάθμιση της παραγώγου σε συναλλοίωτη παράγωγο

$$\partial_\mu \rightarrow D_\mu = \partial_\mu + igA_\mu \quad (53)$$

όπου το A_μ είναι ένα νέο διανυσματικό πεδίο που κάτω από μετασχηματισμούς βαθμίδας μετασχηματίζεται ως

$$A_\mu(x) \rightarrow A'_\mu(x) = A_\mu(x) - \frac{1}{g}\partial_\mu \Lambda(x) \quad (54)$$

και το g είναι η σταθερά ζεύξης που θα εμφανίζεται στον όρο ϕA_μ , ο οποίος εκφράζει την αλληλεπίδραση των δύο πεδίων.

Πρέπει ακόμα στη Λαγκρανζιανή να προστεθεί ο όρος διάδοσης του νέου πεδίου,

$$\mathcal{L}_{gf} = -\frac{1}{4}F_{\mu\nu}F^{\mu\nu} \quad (55)$$

με

$$F_{\mu\nu} = \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu \quad (56)$$

Αφήνοντας την προσέγγιση μέσω λαγκρανζιανής και ξεκινώντας εκ νέου από τη σκοπιά της συνάρτησης Green, αφού πάμε στον Ευκλείδειο χώρο (αντίστοιχο της εξίσωσης 44 αλλά για μιγαδικό πεδίο), θέλουμε να μένει αναλλοίωτο το γινόμενο $\phi^*(x)\phi(y)$. Για το σκοπό αυτό πρέπει να αναβαθμιστεί ως

$$\phi^*(x)\phi(y) \xrightarrow{upgrade} \phi^*(x)U(x,y)\phi(y) \quad (57)$$

όπου $U(x,y) \xrightarrow{gauge} G(x)U(x,y)G^{-1}(y)$. Στην $U(1)$ ο τελεστής αυτός επιλέγεται ως

$$U(x,y) = e^{ig \int_x^y dx_\mu A_\mu(x)} \quad (58)$$

με το διανυσματικό πεδίο $A_\mu(x)$ να μετασχηματίζεται όπως στην (54). Για απειροστές μετατοπίσεις, ο τελεστής γράφεται

$$U(x, x + dx) = e^{igdx_\mu A_\mu(x)} \quad (59)$$

και με κατάλληλη εισαγωγή στη δράση εξασφαλίζει την αναλλοiotητα βαθμίδας και της ποσότητας αυτής. Βεβαίως για τη διατήρηση της αναλλοiotητας και του διαφορικού πρέπει να εισαχθεί και ένα διαφορικό τύπου path integral DU .

Εισαγωγή στο πλέγμα Το μιγαδικό πεδίο στο πλέγμα θα μετασχηματίζεται ως

$$\hat{\phi}_n \rightarrow G_n \hat{\phi}_n, G_n = e^{i\Lambda_n} \quad (60)$$

Η απλή αντικατάσταση της παραγώγου με συναλλοiotη παράγωγο, $\frac{1}{a}(\phi_{n+\mu} - \phi_n) \rightarrow \frac{1}{a}(\phi_{n+\mu} - \phi_n) + igA_{\mu(n)}$, φαίνεται εύκολα ότι δε διατηρεί τη δράση αναλλοiotη κάτω από μετασχηματισμούς βαθμίδας. Για το λόγο αυτό και έχοντας κατά νου τη σχέση 45 για τη δράση (αλλά για μιγαδικό βαθμωτό πεδίο), που εμπλέκει πλησιέστερους γείτονες, στρεφόμαστε κατευθείαν στον τελεστή $U(x, x+dx)$. Χρειάζεται ο όρος $\hat{\phi}_n^* \hat{\phi}_{n+\mu}$ να αντικατασταθεί από έναν όρο της μορφής

$$\hat{\phi}_n^* U_{n,n+\mu} \hat{\phi}_{n+\mu}$$

όπου

$$U_{n,n+\mu} \rightarrow G_n U_{n,n+\mu} G_{n+\mu}^{-1} = e^{i\Lambda_n} U_{n,n+\mu} e^{-i\Lambda_{n+\mu}} \quad (61)$$

Προφανώς $U_{n+\mu,n} = U_{n,n+\mu}^\dagger$ και ορίζουμε

$$U_{\mu(n)} \equiv U_{n,n+\mu} \quad (62)$$

Το U όπως φαίνεται ορίζεται μεταξύ πλεγματικών θέσεων και γι' αυτό ονομάζεται μεταβλητή συνδέσμων (link variable). Από την 61 συμπεραίνεται ότι η μεταβλητή συνδέσμων είναι επίσης στοιχείο της ομάδας $U(1)$, επομένως έχει τη μορφή

$$U_{\mu(n)} = e^{ia_\mu(n)} \quad (63)$$

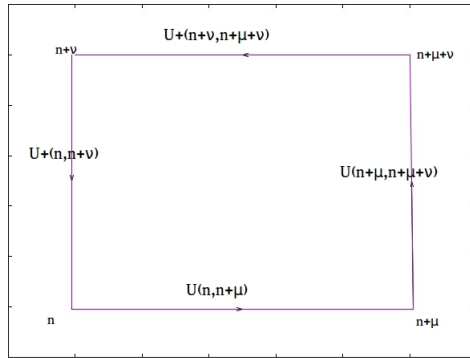
με το όρισμα να ανήκει στο διάστημα $[0, 2\pi)$.

Για την ολοκλήρωση της μετατροπής σε θεωρία βαθμίδας είναι απαραίτητη η προσθήκη στη δράση ενός κινητικού όρου του νέου πεδίου, ανάλογου του

$-\frac{1}{4} \int d^4x F_{\mu\nu} F_{\mu\nu}$ (υπενθυμίζεται ότι ο χώρος είναι ευκλείδειος). Επειδή και πάλι η χρήση των παραγώγων του ταυιστή δύναμης πεδίου $F_{\mu\nu} = \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu$ δεν ενδείκνυται, ορίζουμε έναν ταυιστή που εμπλέκει πλησιέστερους γείτονες κατά μήκος ενός κλειστού βρόχου. Αυτός λέγεται στοιχειώδης πλακέτα (elementary plaquette) και ορίζεται ως εξής:

$$U_{\mu\nu(n)} = U_{\mu(n)} U_{\nu(n+\mu)} U_{\mu(n+\nu)}^\dagger U_{\nu(n)}^\dagger \quad (64)$$

(βλ. και σχήμα 31), όπου υπενθυμίζεται ότι ο δείκτης εντός παρένθεσης δείχνει την πλεγματική θέση και ο δείκτης εκτός παρένθεσης δείχνει την κατεύθυνση κίνησης (μετατόπιση κατά μία θέση προς την κατεύθυνση του δείκτη).



Σχήμα 31: Γραφική επεξήγηση του τρόπου κατασκευής της πλακέτας

Ο όρος που προστίθεται στη δράση είναι ο

$$S_{E,QEDkin} = \frac{1}{g^2} \sum_n \sum_{\mu < \nu} \left[1 - \frac{1}{2} (U_{\mu\nu(n)} + U_{\mu\nu(n)}^\dagger) \right] = \frac{1}{g^2} \sum_P \left[1 - \frac{1}{2} (U_P + U_P^\dagger) \right] \quad (65)$$

όπου το \sum_P δηλώνει άθροισμα πάνω σε όλες τις δυνατές πλακέτες και το g εισάγεται εδώ ως μια παράμετρος (η ίδια που θα εμφανιστεί παρακάτω στη μεταβλητή συνδέσμων).

Μένει να γίνει η σύνδεση με το συνεχές όριο. Η σχέση (63) θα πρέπει να ανάγεται στην (59). Επομένως μπορούμε να ορίσουμε το

$$a_{\mu(n)} = g\alpha A_{\mu(n)} \quad (66)$$

έτσι ώστε, εφόσον το a είναι περιορισμένο στο $[0, 2\pi)$, στο συνεχές όριο (ή έστω στο 'απλοϊκό' συνεχές όριο $a \rightarrow 0$) το A_μ να μπορεί να πάρει οποιαδήποτε πραγματική τιμή, όπως πρέπει να ισχύει για τις συνιστώσες ενός διανυσματικού πεδίου.

Κατάντιστοιχία, η φυσική σημασία της στοιχειώδους πλακέτας διαφαίνεται όταν εισάγουμε τη μορφή της μεταβλητής συνδέσμων: Από την (64) παίρνουμε

$$U_{\mu\nu(n)} = e^{ig\alpha^2 \left(\frac{A_\nu(n+\mu) - A_\nu(n)}{\alpha} - \frac{A_\mu(n+\nu) - A_\mu(n)}{\alpha} \right)} \quad (67)$$

το οποίο μπορούμε να πούμε ότι γίνεται $e^{ig\alpha^2 F_{\mu\nu(n)}}$, αφού το κομμάτι της παρένθεσης αντιστοιχεί στο $\partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu$. Έτσι η δράση, όπως ορίστηκε παραπάνω, γίνεται

$$S_{E,QEDkin} = \frac{1}{g^2} \sum_n \sum_{\mu < \nu} \left[1 - \frac{1}{2} (U_{\mu\nu(n)} + U_{\mu\nu(n)}^\dagger) \right] = \frac{1}{g^2} \sum_n \sum_{\mu < \nu} [1 - \cos(g\alpha^2 F_{\mu\nu(n)})] \quad (68)$$

και στο απλοϊκό συνεχές όριο $\alpha \rightarrow 0$ με ανάπτυξη του συνημιτόνου κατά Taylor λαμβάνουμε

$$S_{E,QEDkin} = \frac{1}{g^2} \sum_n \sum_{\mu < \nu} \left[\frac{1}{2} (g\alpha^2 F_{\mu\nu(n)})^2 \right] = \frac{g^2}{4g^2} \sum_n \alpha^4 \sum_{\mu, \nu} F_{\mu\nu(n)} F_{\mu\nu(n)} \\ \xrightarrow{\alpha \rightarrow 0} \frac{1}{4} \int d^4x F_{\mu\nu}(x) F_{\mu\nu}(x) \quad (69)$$

που είναι η ευκλείδεια δράση του κινητικού όρου του διανυσματικού πεδίου. Από εδώ φαίνεται ότι η παράμετρος που εισήχθη στη δράση της πλακέτας ταυτίζεται όντως με αυτήν που εμφανίστηκε στη μεταβλητή συνδέσμων και η οποία στο συνεχές όριο αποτελεί το φορτίο μέσω του οποίου αλληλεπιδρά το βαθμωτό πεδίο με το πεδίο βαθμίδας. Παρατηρούμε επομένως ότι η καλή ισχύς της πλεγματικής θεωρίας προϋποθέτει μεγάλη σταθερά ζεύξης (ώστε το $\frac{1}{g^2}$ να είναι μικρό), αντίθετα με τις διαταρακτικές θεωρίες πεδίου οι οποίες ισχύουν στην προσέγγιση της ασθενούς ζεύξης.

Όπως υπονοήθηκε και νωρίτερα, το ισοδύναμο της αναλλοιότητας της Λαγκρανζιανής είναι η αναλλοιότητα του path integral. Σύμφωνα με τα παραπάνω, στην πλεγματική θεωρία η εισαγωγή της νέας

μεταβλητής $U_{\mu\nu(n)}$ θα απαιτεί συνεπώς και μια επιπλέον ολοκλήρωση τέτοιου τύπου. Αυτή ορίζεται ως

$$DU = \prod_n da_{\mu(n)} \quad (70)$$

από την (63), ενώ σύμφωνα με τον επαναπροσδιορισμό της a_μ κατά την (66) μπορούμε να γράψουμε

$$DU = \prod_n d\hat{A}_{\mu(n)} \quad (71)$$

όπου $\hat{A}_{\mu(n)} = \alpha A_{\mu(n)}$ το αδιάστατο πεδίο βαθμίδας, όπως ακριβώς είχε ορισθεί η ολοκλήρωση path integral για το βαθμωτό πεδίο. Το φορτίο g αγνοήθηκε διότι είναι απλά μια σταθερά η οποία χάνεται όταν εμφανίζεται πηλίκο ολοκληρωμάτων, όπως στη συνάρτηση Green.

Έτσι, η τελευταία δίνεται τελικά από την ακόλουθη έκφραση:

$$\langle \hat{\phi}_n \cdot \dots \cdot \hat{\phi}_m \cdot \dots U_{\mu(N)} \rangle = \frac{\int D\phi D\phi^* DU \hat{\phi}_n \dots \hat{\phi}_m \dots U_{\mu(N)} e^{-S_E[\hat{\phi}, \hat{\phi}^*, U]}}{\int D\hat{\phi} D\hat{\phi}^* DU e^{-S_E[\hat{\phi}, \hat{\phi}^*, U]}} \quad (72)$$

όπου τα N παίρνουν κατάλληλες τιμές ώστε να συνδέουν τα εμπλεκόμενα βαθμωτά πεδία με τα μιγαδικά τους. Πρόκειται βέβαια για μια διανυσματική έκφραση με τέσσερις συνιστώσες. Η δράση είναι

$$S_{E,compactQED} = \frac{1}{g^2} \sum_P \left[1 - \frac{1}{2} (U_P + U_P^\dagger) \right] - \sum_{n,\mu} \hat{\phi}_n^* U_{\mu(n)} \hat{\phi}_{n+\mu} + (8 + \hat{M}^2) \sum_n \hat{\phi}_n^* \hat{\phi}_n \quad (73)$$

Η προσέγγιση αυτή λέγεται συμπαγής Κβαντική Ηλεκτροδυναμική (compact QED), γιατί το νέο πεδίο παίρνει τιμές σε ένα συμπαγές σύνολο όπως το $U(1)$. Αν και εμφανίζει κάποια προβλήματα, είναι μια αρκετά αποτελεσματική πλεγματική θεωρία.

5.1.3 Ο μηχανισμός Higgs σε αλληλεπίδραση με πεδίο βαθμίδας

Θεωρία πεδίου στο συνεχή χωρόχρονο Στον τετραδιάστατο χωρόχρονο Minkowski ας θεωρήσουμε ένα μιγαδικό βαθμωτό πεδίο και ένα διανυσματικό με λαγκρανζιανή

$$\mathcal{L} = (D_\mu \phi)^* (D^\mu \phi) - \mu^2 (\phi^* \phi) - \lambda (\phi^* \phi)^2 - \frac{1}{4} F_{\mu\nu} F^{\mu\nu} \quad (74)$$

όπου D_μ η συναλλοίωτη παράγωγος. Ο δυναμικός όρος είναι $V(x) = \mu^2(\phi^*\phi) + \lambda(\phi^*\phi)^2$ με μ μια ποσότητα με διαστάσεις μάζας και $\lambda > 0$ μια αδιάστατη παράμετρο, δηλαδή έχει προστεθεί ο όρος του ϕ^4 σε σχέση με τη λαγκρανζιανή της Κβαντικής Ηλεκτροδυναμικής. Η λαγκρανζιανή αυτή εξακολουθεί φυσικά να είναι αναλλοίωτη κάτω από τοπικούς μετασχηματισμούς βαθμίδας.

Η αναμενόμενη τιμή του κενού εντοπίζεται στο ελάχιστο του δυναμικού, δηλαδή εκεί όπου $\frac{\partial V}{\partial \phi} = 0$. Για $\mu^2 > 0$ βρίσκεται στο $\langle 0|\phi|0 \rangle = 0$ και επομένως πρόκειται για τη συνήθη θεωρία όπου το βαθμωτό πεδίο έχει μάζα μ , απλώς με έναν επιπλέον όρο αλληλεπίδρασης με τον εαυτό του ϕ^4 , ο οποίος για ϕ κοντά στο μηδέν είναι πολύ ασθενής. Η διαφορά έγκειται στην περίπτωση όπου $\mu^2 < 0$, τότε το ελάχιστο του δυναμικού υλοποιείται για

$$\mu^2 + 2\lambda(\phi^*\phi) = 0 \Rightarrow \phi^*\phi = -\frac{\mu^2}{2\lambda} \equiv \frac{v^2}{2}$$

Προφανώς το μέτρο του ϕ μπορεί να πάρει την παραπάνω τιμή για ένα σύνολο διαφορετικών ϕ που διαφέρουν κατά μία φάση, από τα οποία ϕ το σύστημα πρέπει να "επιλέξει" μία τιμή στην οποία θα βρίσκεται το κενό. Μπορεί για παράδειγμα ως κενό ληφθεί το $\langle 0|\phi|0 \rangle = \frac{v}{\sqrt{2}}$. Τότε αναπτύσσοντας το πεδίο γύρω από αυτήν την τιμή έχουμε

$$\phi(x) = \frac{v + \eta(x)}{\sqrt{2}} e^{i\theta(x)}$$

όπου η και θ δύο πραγματικά βαθμωτά πεδία. Χάρη στην αναλλοιότητα βαθμίδας της λαγκρανζιανής (74) μπορούμε να επιλέξουμε βαθμίδα, δηλαδή να κάνουμε τον μετασχηματισμό $\phi \rightarrow e^{-i\theta(x)}\phi$. Οπότε το ϕ μπορεί να γραφεί ως

$$\phi(x) = \frac{v + \eta(x)}{\sqrt{2}} \quad (75)$$

Δηλαδή, το ένα πραγματικό πεδίο η με τον μοναδικό βαθμό ελευθερίας του απορροφήθηκε από την ελευθερία επιλογής βαθμίδας. Επανεισάγοντας το ϕ στην (74) η λαγκρανζιανή ξαναγράφεται ως:

$$\begin{aligned} \mathcal{L} &= \frac{1}{2}(\partial_\mu \eta)(\partial^\mu \eta) - \lambda v^2 \eta^2 \\ &+ \frac{1}{2}g^2 v^2 A_\mu A^\mu - \frac{1}{4}F_{\mu\nu}F^{\mu\nu} \quad (76) \\ &- \lambda v \eta^3 - \frac{1}{4}\lambda \eta^4 + g^2 v \eta A_\mu A^\mu + \frac{1}{2}g^2 \eta^2 A_\mu A^\mu + const. \end{aligned}$$

Όπως φαίνεται από τη νέα μορφή της λαγκρανζιανής, για το νέο πεδίο η το οποίο αντιστοιχεί σε αναμενόμενη τιμή κενού $\langle 0|\eta|0 \rangle = 0$ η συμμετρία βαθμίδας έχει σπάσει. Η πρώτη σειρά της λαγκρανζιανής δείχνει ότι το πεδίο η έχει αποκτήσει μάζα $m_\eta^2 = 2\lambda v^2$. Ο ένας βαθμός ελευθερίας του βαθμωτού πεδίου ϕ μοιάζει να έχει χαθεί. Ωστόσο αυτό που έχει συμβεί είναι ότι το διανυσματικό πεδίο A έχει αποκτήσει και αυτό μάζα $m_A^2 = g^2 v^2$ (δεύτερη σειρά της λαγκρανζιανής): επομένως έχει αυξήσει τους βαθμούς ελευθερίας του κατά έναν, αφού τα μαζικά διανυσματικά πεδία έχουν και μια διαμήκη συνιστώσα πόλωσης επιπλέον των δύο εγκαρσίων πολώσεων που έχουν τα άμαζα. Το πραγματικό πεδίο η που μένει μετά το σπάσιμο της συμμετρίας αποτελεί το πεδίο του σωματιδίου Higgs [13].

Ο μηχανισμός Higgs στο πλέγμα Σύμφωνα με όσα έχουν εξηγηθεί προηγουμένως και λαμβάνοντας υπόψιν τις τροποποιήσεις στη λαγκρανζιανή, εύκολα φαίνεται ότι η ευκλείδεια δράση για το μηχανισμό Higgs με διανυσματικό πεδίο είναι:

$$S_E = \frac{1}{g^2} \sum_P \left[1 - \frac{1}{2} (U_P + U_P^\dagger) \right] - \sum_{n,\mu} \hat{\phi}_n^* U_{\mu(n)} \hat{\phi}_{n+\mu} + (6 + \hat{\mu}^2) \sum_n \hat{\phi}_n^* \hat{\phi}_n + \lambda \sum_n (\hat{\phi}_n^* \hat{\phi}_n)^2 \quad (77)$$

(Ο συντελεστής 6 αντί του 8 λόγω της χρήσης 2+1 διαστάσεων) Οι παράμετροι του πλεγματοειδούς συστήματος είναι τρεις: g (ως $\frac{1}{g^2}$), $\hat{\mu}$ και λ . Θα μπορούσαμε επομένως να κατασκευάσουμε ένα τριδιάστατο διάγραμμα φάσεων. Αντ' αυτού, παίρνουμε $\lambda \rightarrow \infty$. Η επιλογή αυτή πρέπει να έχει κάποιες συνέπειες στις τιμές του ϕ . Πράγματι, επιστρέφοντας στη συνεχή μορφή, το δυναμικό μπορεί με μια απλή συμπλήρωση τετραγώνου να γραφτεί ως $V(\phi) = \lambda(\phi^* \phi - \frac{v^2}{2})^2 - \frac{v^4}{4}$. Στην ευκλείδεια δράση αυτό θα εμφανίζεται ως $+V$ και στις ολοκληρώσεις θα υπάρχει ο όρος e^{-S} . Για να μη γίνεται τετριμμένος στο όριο $\lambda \rightarrow \infty$, πρέπει $\phi^* \phi - \frac{v^2}{2} = 0 \Rightarrow |\phi| = \frac{v}{\sqrt{2}}$ ή $|\tilde{\phi}| = 1$, με

$$\tilde{\phi} = \frac{\phi}{v/\sqrt{2}} = \frac{\sqrt{2}\phi}{\sqrt{-\hat{\mu}^2/\sqrt{\lambda}}} = \frac{\sqrt{2\lambda}\hat{\phi}}{\sqrt{-\hat{\mu}^2}} \quad (78)$$

όπου $\hat{\phi}$ και $\hat{\mu}$ οι αδιάστατες ποσότητες που χρησιμοποιούνται στην πλεγματοειδή προσέγγιση, πολλαπλασιάζοντας με την πλεγματοειδή σταθερά. Βεβαίως αυτό σημαίνει ότι στο όριο $\lambda \rightarrow \infty$ και πάντα για $\mu^2 < 0$ στο φυσικό σύστημα έχει γίνει το αυθόρμητο σπάσιμο της συμμετρίας

και μάλιστα το πεδίο ϕ παίρνει παντού τιμές πάνω στην αναλλοίωτη πολλαπλότητα του κενού, στην οποία το δυναμικό είναι ελάχιστο. Επομένως οι φάσεις του πλεγματοειδούς συστήματος δε σχετίζονται μία προς μία με τις φάσεις $\langle 0|\phi|0 \rangle = 0, \langle 0|\phi|0 \rangle = \frac{v}{\sqrt{2}}$ του φυσικού συστήματος, αφού και οι δύο πλεγματοειδείς φάσεις αντιστοιχούν στη δεύτερη περίπτωση.

Με τις παραπάνω παραδοχές λοιπόν οι δύο τελευταίοι όροι της δράσης (77) γίνονται σταθεροί και μπορούν να αγνοηθούν. Μένουν οι δύο πρώτοι όροι οι οποίοι μπορούν να γραφούν (περνώντας το 1 της άθροισης στις πλακέτες στους σταθερούς όρους)

$$\begin{aligned}
S_{E,\lambda \rightarrow \infty} &= -\frac{1}{g^2} \sum_{n,\mu < \nu} \cos(g\alpha^2 F_{\mu\nu(n)}) + \frac{\hat{\mu}^2}{2\lambda} \sum_{n,\mu} \tilde{\phi}_n^* U_{\mu(n)} \tilde{\phi}_{n+\mu} \\
&= -\beta_g \sum_{n,\mu < \nu} \cos(\tilde{A}_{\nu(n+\mu)} - \tilde{A}_{\nu(n)} - \tilde{A}_{\mu(n+\nu)} + \tilde{A}_{\mu(n)}) \quad (79) \\
&\quad -\beta_h \sum_{n,\mu > 0} \frac{1}{2} [e^{i(-\chi_n + \tilde{A}_{\mu(n)} + \chi_{n+\mu})} + e^{-i(-\chi_n + \tilde{A}_{\mu(n)} + \chi_{n+\mu})}]
\end{aligned}$$

όπου ορίσαμε

$$\begin{aligned}
\beta_g &= \frac{1}{g^2} \\
\beta_h &= -\frac{\hat{\mu}^2}{\lambda} = \frac{|\hat{\mu}^2|}{\lambda} \quad (80) \\
\tilde{A}_{\mu(n)} &= g\hat{A}_{\mu(n)} = g\alpha A_{\mu(n)} \\
\tilde{\phi}_n &= e^{i\chi_n}
\end{aligned}$$

Επιπλέον, στον υπολογισμό των διαφορών ποσοτήτων η δράση είναι γνωστό ότι εμπλέκεται ως e^{-S_E} μέσα σε κάποιο ολοκλήρωμα τύπου path integral. Επομένως, το φανταστικό κομμάτι της δράσης δεν παίζει κάποιο ρόλο. Γι' αυτό μπορούμε να γράψουμε ότι η συνεισφέρουσα δράση είναι

$$\begin{aligned}
S_{E,contrib,\lambda \rightarrow \infty} &= Re S_{E,\lambda \rightarrow \infty} = -\beta_g \sum_{n,\mu < \nu} \cos(\tilde{A}_{\nu(n+\mu)} - \tilde{A}_{\nu(n)} - \tilde{A}_{\mu(n+\nu)} + \tilde{A}_{\mu(n)}) \\
&\quad -\beta_h \sum_{n,\mu} \cos(-\chi_n + \tilde{A}_{\mu(n)} + \chi_{n+\mu}) \quad (81)
\end{aligned}$$

όπου τα μ, ν σημαίνουν άθροιση προς τις θετικές κατευθύνσεις των αξόνων.

Ας δούμε τώρα τι συμβαίνει στο παραπάνω σύστημα ως απλό στατιστικό σύστημα από σπιν. Μπορούμε να θεωρήσουμε ότι η δράση είναι

$$S = \beta_h U_{plaq} + \beta_g U_{links} \quad (82)$$

όπου τα δύο U είναι δύο είδη εσωτερικής ενέργειας που αποδίδονται στις πλακέτες και στους συνδέσμους αντίστοιχα. Η πρώτη εσωτερική ενέργεια έχει ελάχιστη τιμή για $\cos(\tilde{A}_{\nu(n+\mu)} - \tilde{A}_{\nu(n)} - \tilde{A}_{\mu(n+\nu)} + \tilde{A}_{\mu(n)}) = 0$, το οποίο ικανοποιείται όταν η κάθε συνιστώσα έχει σταθερή τιμή σε όλες τις πλεγματικές θέσεις, δηλαδή

$$\tilde{A}_\mu = \tilde{A}_{\mu 0} \quad (83)$$

Η δεύτερη εσωτερική ενέργεια έχει ελάχιστο για $\cos(-\chi_n + \tilde{A}_{\mu(n)} + \chi_{n+\mu}) = 0$, το οποίο ικανοποιείται όταν $\chi_{n+\mu} = \chi_n - \tilde{A}_{\mu(n)}$. Αν η παράμετρος β_g είναι αρκετά μεγάλη ώστε τα πεδία \tilde{A}_μ να είναι σε κατάσταση τάξης, τότε η παραπάνω σχέση γίνεται

$$\chi_{n+\mu} = \chi_n - \tilde{A}_{\mu 0} \quad (84)$$

(βλ. και [9] για περισσότερα).

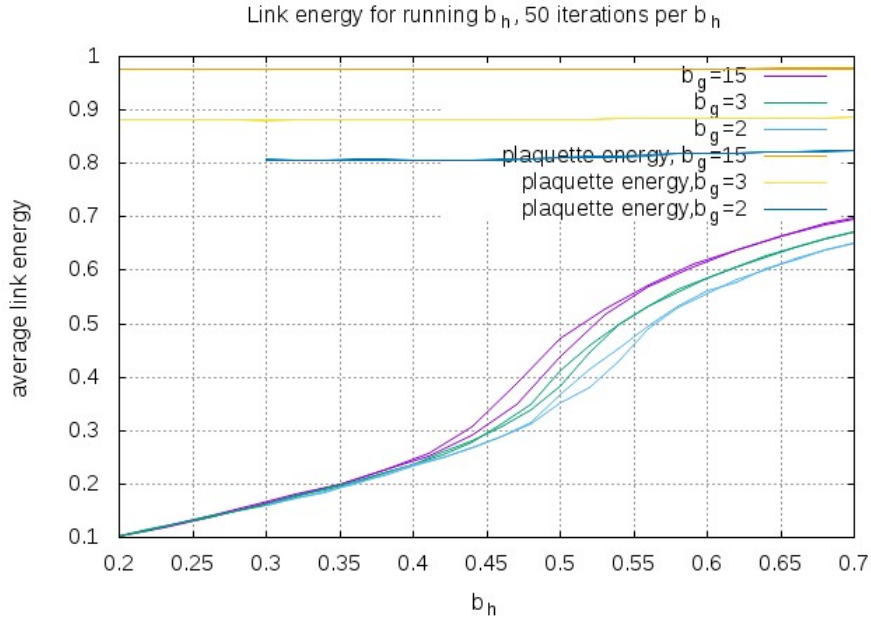
5.2 Προσομοιώσεις και αποτελέσματα

Ασχολούμαστε με την τελευταία περίπτωση, αυτή του εν δυνάμει Higgs σε αλληλεπίδραση με το διανυσματικό πεδίο. Ο αλγόριθμος είναι πανομοιότυπος με αυτόν που χρησιμοποιήθηκε για το μοντέλο ΧΥ νωρίτερα, με τις απαραίτητες αλλαγές στη δράση και στη μορφή των πεδίων. Υπενθυμίζεται ότι η προσομοίωση γίνεται στις τρεις διαστάσεις και επομένως το διανυσματικό πεδίο έχει τρεις συνιστώσες αντί για τέσσερις. Μας ενδιαφέρει το διάγραμμα φάσεων $\beta_g - \beta_h$ και για το λόγο αυτό μπορούν να γίνουν προσομοιώσεις με σταθερή τιμή β_g και μεταβάλλοντας σταδιακά το β_h . Υπολογίζονται οι ποσότητες της μέσης ενέργειας ανά σύνδεσμο $\langle u_{link} \rangle = \langle U_{links} \rangle / (N \times 3)$ και αντίστοιχα της μέσης ενέργειας ανά πλακέτα (βλ. (81),(82)), όπου το $\langle \dots \rangle$ υποδηλώνει θερμικό μέσο όρο, δηλαδή το μέσο όρο από τις καταστάσεις στους διαδοχικούς χρόνους Μόντε Κάρλο.

Όπως αναφέρθηκε, για μεγάλες τιμές της παραμέτρου β_g το διανυσματικό πεδίο αναμένεται να βρίσκεται σε κατάσταση τάξης και η μέση ενέργεια ανά πλακέτα κοντά στην τιμή -1. Όπως φαίνεται από τις προσομοιώσεις, η σταθερή τιμή στην οποία τείνουν όλες οι συνιστώσες του πεδίου είναι $\tilde{A}_\mu = 0$, λόγω της έναρξης των προσομοιώσεων από την τιμή μηδέν για όλα τα πεδία (cold start). Επομένως η μέση ενέργεια των συνδέσμων ανάγεται προσεγγιστικά στη σχέση $u_{link} = -\sum_{n,\mu} \cos(\chi_{n+\mu} - \chi_n)$, όπως ακριβώς και στο τρισδιάστατο πρότυπο ΧΥ. Η μετάβαση φάσης μπορεί να γίνει αντιληπτή από το ανάλογο του hysteresis loop.

Στο σχήμα 32 παριστάνονται τα αποτελέσματα για έναν μεσαίας τάξης μεγέθους αριθμό βημάτων Μόντε Κάρλο, συγκεκριμένα 50 ανά τρέχουσα τιμή του β_h . Πράγματι εμφανίζεται η επιθυμητή συμπεριφορά. Παρατηρούμε ότι καθώς το β_g μειώνεται το hysteresis loop μετατοπίζεται προς τα δεξιά, δηλαδή η κρίσιμη τιμή του β_h αυξάνεται και μάλιστα πιο γρήγορα καθώς το β_g μειώνεται. Σε συμφωνία με αυτήν την παρατήρηση, φαίνεται πως όση διαφορά έχει η ενέργεια ανά πλακέτα όταν το β_g από 15 γίνεται 3, σχεδόν άλλη τόση έχει όταν απλά μειώνεται από το 3 στο 2.

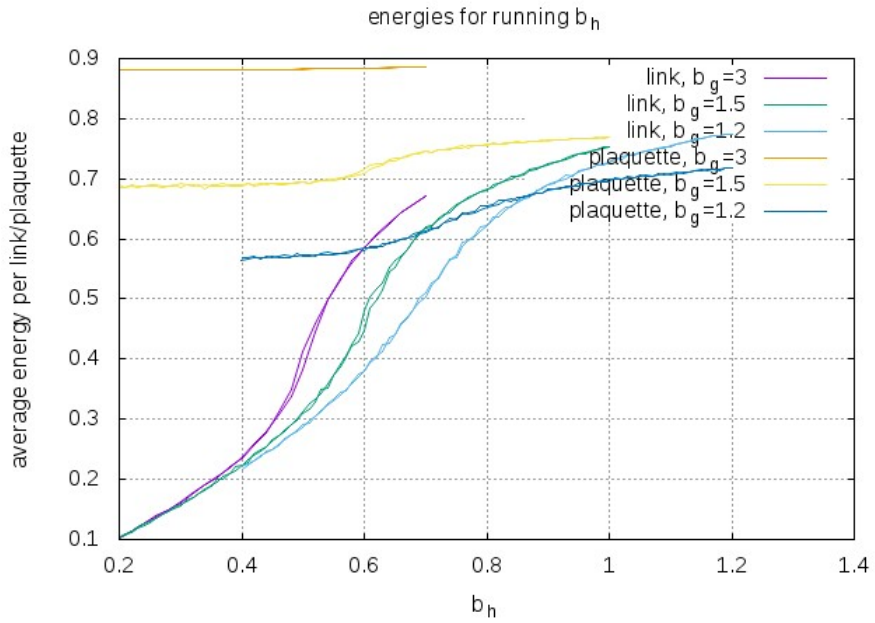
Για λίγο μικρότερες τιμές του β_g η εικόνα αλλάζει (βλ. σχήμα 33). Μειώνουμε τον αριθμό των βημάτων Μόντε Κάρλο ώστε να ευνοηθεί η δημιουργία του hysteresis loop. Για 10 βήματα η στατιστική του δείγματος είναι κακή και οι καμπύλες παρουσιάζουν έντονες διακυμάνσεις. Επιλέγουμε να γίνονται 20 βήματα ανά β_h (με μέτρηση από το 6^ο βήμα). Στην τιμή 1.5 εμφανίζεται ένας μικρός αλλά διακριτός βρόχος υστέρησης κοντά στην τιμή 0.61. Ταυτόχρονα, για αυτό το β_g η τιμή της ενέργειας ανά πλακέτα δεν παραμένει πλέον περίπου σταθερή, αλλά η καμπύλη της αλλάζει καμπυλότητα και αυτή στην ίδια τιμή $\beta_h = 0.61$. Από εκεί και έπειτα, για την μικρότερη τιμή $\beta_g = 1.2$ ο βρόχος δεν είναι διακριτός και μοιάζει σαν να μη συμβαίνει μετάβαση φάσης αλλά μία εντελώς ομαλή μετάβαση. Μπορεί ωστόσο να παρατηρηθεί ότι τα σημεία καμπής των καμπυλών της ενέργειας συνδέσμου και της ενέργειας πλακέτας βρίσκονται στην ίδια τιμή του β_h .



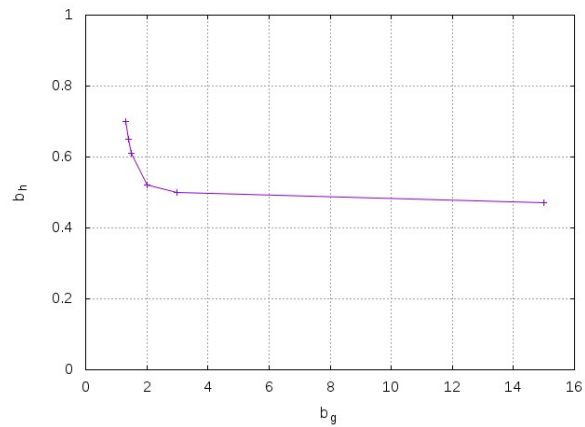
Σχήμα 32: Το αντίθετο της μέσης ενέργειας ανά σύνδεσμο για τρεις μεγάλες τιμές της παραμέτρου β_g σε συνάρτηση με την παράμετρο β_h . Παρουσιάζονται επιπλέον τα αντίθετα των μέσων ενεργειών ανά πλακέτα, οι οποίες είναι πολύ κοντά στο 1 όπως αναμένεται.

β_g	β_h
15	0.47
3	0.50
2	0.52
1.5	0.61
1.4	0.65
1.3	0.70
1.2	-
...	-

Πίνακας 2: Κρίσιμα ζεύγη τιμών των παραμέτρων για το διάγραμμα φάσεων του μοντέλου Higgs-διανυσματικού πεδίου όπως υπολογίστηκαν από δοκιμές με σταθερό β_g και μεταβαλλόμενο β_h .



Σχήμα 33: Τα αντίθετα των μέσων ενεργειών ανά σύνδεσμο και ανά πλακέτα για $\beta_g = 3, 1.5, 1.2$. Για $\beta_g = 3$ έχουν γίνει 50 επαναλήψεις ανά τιμή β_h ενώ για τις άλλες δύο τιμές του β_g έχουν γίνει 20 επαναλήψεις.



Σχήμα 34: Το διάγραμμα φάσεων

6 Ανακεφαλαίωση και Συμπεράσματα

Αφού ορίσαμε τις βασικές ποσότητες που χαρακτηρίζουν τα κρίσιμα φαινόμενα, χρησιμοποιήσαμε την προσομοίωση Μόντε Κάρλο για τη μελέτη του προτύπου Ising. Έχοντας στη διάθεσή μας άπλετη βιβλιογραφία για τη συμπεριφορά των διάφορων μεγεθών στο συγκεκριμένο πρότυπο, είδαμε ότι ένας μέσος προσωπικός υπολογιστής είναι ικανός να παράξει αρκετά ακριβή αποτελέσματα σε μικρούς χρόνους αλλά δεν επιμείναμε στη λεπτομερή ανάλυση του προτύπου, καθώς η μελέτη αυτού δεν αποτέλεσε αυτοσκοπό της παρούσας εργασίας. Με το σκεπτικό ότι το XY είναι μια φυσική επέκταση του προηγούμενου μοντέλου προσαρμόσαμε τη μεθοδολογία για την εξέταση των χαρακτηριστικών ποσοτήτων σε αυτό το μοντέλο στις τρεις διαστάσεις. Εδώ οι υπολογιστικές απαιτήσεις αυξάνονται σημαντικά. Περιοριστήκαμε στην χονδροειδή εύρεση της κρίσιμης τιμής της παραμέτρου β , στην αδρή εξέταση των ποσοτήτων που αποκλίνουν κατά τη μετάβαση φάσης και στην παρατήρηση των συναρτήσεων συσχετισμού. Η ειδική θερμοχωρητικότητα από αυτό το σημείο και έπειτα έπαψε να δίνει σημαντικά αποτελέσματα. Στη συνέχεια κάναμε ένα σύντομο πέρασμα από το πρότυπο XY σε διάταξη δίνης και είδαμε ότι η μετάβαση φάσης του συνδέεται με καταστροφή της διάταξης και συμβαίνει στο ίδιο κρίσιμο σημείο με το απλό πλέγμα XY. Ωστόσο σε χρόνο Μόντε Κάρλο η διάταξη δίνης δεν είναι εμφανής παρά μόνο για πολύ παγωμένες καταστάσεις, για β περίπου διπλάσιο από το κρίσιμο σημείο.

Η υπόλοιπη εργασία πραγματεύθηκε συστήματα με δύο είδη γενικευμένων σπιν αντί για ένα. Αρχικά, στο απλό πρότυπο XY προσθέσαμε ένα δεύτερο είδος σπιν XY το οποίο αλληλεπιδρά με το πρώτο μέσω των πλησιέστερων γειτόνων με θετική παράμετρο ζεύξης. Σκοπός ήταν η αναγνώριση της μορφής του διαγράμματος φάσεων του συστήματος. Κάναμε μια προκαταρκτική μελέτη με τη χρήση της προσέγγισης μέσου πεδίου και επιβεβαιώσαμε με τις προσομοιώσεις ότι η ζεύξη μειώνει τις τιμές των κρίσιμων παραμέτρων για τα δύο σπιν, δίνοντας στην διαχωριστική επιφάνεια μεταξύ συμμετρικής και μη συμμετρικής -και για τα δύο σπιν ταυτόχρονα- περιοχής τοπολογική μορφή σφαίρας (στο θετικό ογδοημόριο). Αυτό που έχει σημασία είναι ότι η ζεύξη επιβάλλει ταυτόχρονη μαγνήτιση ή μη για τα δύο είδη σπιν, εξαλείφοντας τις φάσεις όπου το ένα είδος έχει μαγνήτιση και το άλλο όχι. Ωστόσο, η παράμετρος ζεύξης οδηγεί σε βαθμιαία μεταβολή της μαγνήτισης. Ειδικά για την περίπτωση όπου οι παράμετροι αυτο-

σύζευξης των δύο σπιν είναι μηδέν, για παράμετρο ζεύξης αριθμητικά ίση με την β_{crit} εμφανίζεται μία απροσδιόριστη μετάβαση φάσης, ενώ η ενέργεια ζεύξης των δύο σπιν εμφανίζει συμπεριφορά ενέργειας σε μετάβαση δεύτερης τάξης. Το αν η μετάβαση αυτή είναι πρώτης τάξης χρήζει περαιτέρω διερεύνησης με ακριβέστερους υπολογισμούς, π.χ. με την επιβολή διαφορετικών αρχικών συνθηκών για τα δύο είδη σπιν.

Τέλος, αφού εξηγήσαμε τις βασικές αρχές της πλεγματικής κβαντικής θεωρίας πεδίου, εφαρμόσαμε την πλεγματική προσέγγιση σε μια ειδική περίπτωση της αλληλεπίδρασης βαθμωτού πεδίου με όρο ϕ^4 με διανυσματικό πεδίο, η οποία είναι γνωστό ότι οδηγεί σε αυθόρμητο σπάσιμο της συμμετρίας και δημιουργία σωματιδίου Higgs. Η μελέτη έγινε σε τρεις διαστάσεις με τα ίδια εργαλεία που χρησιμοποιήθηκαν για το μοντέλο XY, με δύο παραμέτρους αυτή τη φορά. Κατασκευάσαμε το δισδιάστατο διάγραμμα φάσεων και είδαμε ότι η μετάβαση φάσης καθορίζεται κυρίως από την παράμετρο που συνδέεται με το βαθμωτό πεδίο και όχι από το φορτίο του ηλεκτρονίου, όπως δηλαδή είναι αναμενόμενο.

Από τα πάνω γίνεται σαφές ότι οι προσεγγίσεις μας δεν έγιναν με σκοπό να αποδώσουν ακριβείς υπολογισμούς. Χρησιμοποιήθηκαν μάλλον με στόχο να αποκτηθεί μια καλή εποπτεία των φαινομένων και να εντοπιστούν οι ενδιαφέρουσες περιοχές, ώστε να είναι διαθέσιμες οι κατευθυντήριες γραμμές για τη σχολαστική εξαγωγή χρήσιμων ποσοτήτων σε επόμενο στάδιο.

Βιβλιογραφία

- [1] Palash B. Pall Amitabha Lahiri. *A First Book of Quantum Field Theory (2nd ed.)* CRC Press, 2005. ISBN: 0849338972.
- [2] Konstantinos N. Anagnostopoulos. *Computational Physics: A Practical Introduction to Computational Physics and Scientific Computing*. National Technical University of Athens, 2014. ISBN: 9781312464414.
- [3] Gesualdo Delfino, Walter Selke, and Alessio Squarcini. «Vortex mass in the three-dimensional $O(2)$ scalar theory». In: *Phys. Rev. Lett.* 122.5 (2019), p. 050602. DOI: 10.1103/PhysRevLett.122.050602.
- [4] Nicholas J. Giordano. *Computational Physics*. Prentice Hall, 1996. ISBN: 0133677230.
- [5] Aloysius P. Gottlob and Martin Hasenbusch. «Critical behavior of the 3-D XY model: A Monte Carlo study». In: *Physica A* 201 (1993), pp. 593–613. DOI: 10.1016/0378-4371(93)90131-M. arXiv: cond-mat/9305020 [cond-mat].
- [6] John B. Kogut. «An Introduction to Lattice Gauge Theory and Spin Systems». In: *Rev. Mod. Phys.* 51 (1979), p. 659. DOI: 10.1103/RevModPhys.51.659.
- [7] David P. Landau and Kurt Binder. *A guide to Monte Carlo simulations in statistical physics*. Cambridge University Press, 2009. ISBN: 9780521768481.
- [8] N. Metropolis et al. «Equation of state calculations by fast computing machines». In: *J. Chem. Phys.* 21 (1953), pp. 1087–1092. DOI: 10.1063/1.1699114.
- [9] Istvan Montvay and Gernot Muenster. *A First Book of Quantum Field Theory (2nd ed.)* Cambridge Monographs on Mathematical Physics. Cambridge University Press, 1994. ISBN: 0521599172.
- [10] M. E. J. Newman and G. T. Barkema. *Monte Carlo methods in statistical physics*. Oxford University Press, 2009. ISBN: 9780198517979.
- [11] Lars Onsager. «Crystal statistics. 1. A Two-dimensional model with an order disorder transition». In: *Phys. Rev.* 65 (1944), pp. 117–149. DOI: 10.1103/PhysRev.65.117.
- [12] Heinz J. Rothe. *Lattice Gauge Theories: An Introduction (3rd ed.)* World Scientific Lecture Notes in Physics - Vol. 74. World Scientific, 2005. ISBN: 9812560629.
- [13] Konstantinos E. Vagionakis. *Particle Physics: An introduction to the basic structure of matter*. National Technical University of Athens, 2008.