

Dorota Jeziorek-Kniola

**Zbadanie nieciągłych przemian
fazowych w złożonych spinowych
układach sieciowych przy pomocy
eksperymentów komputerowych:
trójwymiarowy model Ashkina-Tellera**

Praca doktorska

wykonana

w Zakładzie Fizyki Materiałów Funkcjonalnych

Wydziału Fizyki

Uniwersytetu im. Adama Mickiewicza w Poznaniu

Promotor

prof. UAM dr hab. Grzegorz Musiał

Poznań 2021

Podziękowania

Dziękuję panu prof. UAM dr hab. Grzegorzowi Musiałowi za okazaną mi pomoc, cenne sugestie i krytyczne uwagi oraz panu prof. dr. hab. Stanisławowi Dylakowi z Wydziału Studiów Edukacyjnych UAM za cenne uwagi i konsultacje zastosowań edukacyjnych. Pragnę również podziękować dyrekcji, kolegom i koleżankom z III Liceum Ogólnokształcącego w Kaliszu za wsparcie i motywację. Dziękuję także mojej rodzinie za cierpliwość i wyrozumiałość.

Oświadczenie

Ja niżej podpisana Dorota Jeziorek-Knioła, doktorantka Wydziału Fizyki Uniwersytetu im. Adama Mickiewicza w Poznaniu oświadczam, że przedkładaną pracę doktorską pt. *"Zbadanie nieciągłych przemian fazowych w złożonych spinowych układach sieciowych przy pomocy eksperymentów komputerowych: trójwymiarowy model Ashkina-Tellera"* napisałam samodzielnie. Oznacza to, że przy pisaniu pracy, poza niezbędnymi konsultacjami, nie korzystałam z pomocy innych osób, w szczególności nie zleciłam opracowania rozprawy lub jej istotnych części innym osobom, ani nie odpisywałam tej rozprawy lub jej istotnych części od innych osób.

Równocześnie wyrażam zgodę na to, że gdyby powyższe oświadczenie okazało się nieprawdziwe, decyzja o wydaniu dyplomu zostanie cofnięta.

Streszczenie

Eksperyment komputerowy Monte Carlo (MC) do analizy przemian fazowych pierwszego rodzaju sterowanych temperaturą w układzie z trzema niezależnie zachowującymi się parametrami porządku przedstawiono na przykładzie trójwymiarowego (3W) modelu Ashkina-Tellera (AT), jednego z ważnych układów odniesienia w fizyce statystycznej pokazującego bogaty i złożony diagram fazowy. Wykorzystywane są właściwości wielkości, takich jak namagnesowanie, trzy różne typy kumulant, energia wewnętrzna i jej histogram. Te eksperymenty z powodzeniem mogą być stosowane w analizie temperaturowych przemian fazowych pierwszego rodzaju w układach ze stopniami swobody typu Isinga nie tylko z jednym niezależnym parametrem porządku, ale także w złożonych układach o wielu parametrach porządku pokazujących indywidualne uporządkowanie, jak w modelu AT. Koncepcja Lee i Kosterlitzza zaproponowana dla silnych przemian fazowych pierwszego rodzaju w układach z jednym niezależnym parametrem porządku jest istotnie rozszerzona, aby uzyskać wyniki z porównywalnymi słupkami niepewności w rozsądnych czasach obliczeń przy dowolnej ilości ciepła przemiany. Zaproponowany komputerowy eksperyment MC wykorzystuje przetwarzanie równoległe i algorytm Metropolis, jednak Wojtkowiak i Musiał sprawdzili poprawność swoich wyników używając swojego niedawno skonstruowanego algorytmu klastrowego typu Wolffa. Badane są przemiany fazowe pierwszego rodzaju dowolnie słabe do silnych w obszarze diagramu fazowego z oddziaływaniami ferromagnetycznymi, a ciepło przemiany jest dokładnie obliczane nie tylko dla całego układu, ale wyznaczono wkłady związane z poszczególnymi stopniami swobody. Dużo uwagi poświęcono doborowi formuł skalowania wyników uzyskanych dla układów o skończonych rozmiarach do granicy termodynamicznej, które przedyskutowano na tle wielu prac źródłowych. W pracy po raz pierwszy wskazano rolę punktu Potts w 3W modelu AT. Stwierdzono, że punkt bifurkacji nie jest punktem trójkrytycznym, jak donosiły wcześniejsze prace, a także udokładniono położenia punktu bifurkacji i punktów trójkrytycznych.

Praca zawiera propozycję eksperymentu komputerowego, który można przeprowadzić w ramach wykorzystania technologii informacyjnych w nauczaniu dzieci i młodzieży. Opracowana w tym celu aplikacja, nazwana *Ciągłe przemiany fazowe*, wykorzystuje ideowo prosty model Isinga do badania i wizualizacji zachowania układu w obszarze ciągłych przemian fazowych w skali mikroskopowej. Program można

potraktować jako mikroskop, który demonstruje zachowanie się spinów, kluczowych elementów do zrozumienia istoty magnetyzmu, a także daje wgląd w istotę i mechanizm ciągłej przemiany fazowej typu porządek-nieporządek.

Abstract

The Monte Carlo (MC) computer experiment for the analysis of first-order temperature-driven phase transitions in a system with three independently behaving order parameters is presented on the example of the three-dimensional (3D) Ashkin-Teller (AT) model, one of the important reference systems in statistical physics showing the rich and complex phase diagram. The properties of number of quantities, such as magnetization, three different types of cumulants, the internal energy, and its histogram, are exploited. These experiments can be successfully used in the analysis of first-order temperature-driven phase transitions not only in systems with degrees of freedom of the Ising type with one independent order parameter, but also in complex systems with many order parameters showing individual ordering, as in the AT model. The Lee and Kosterlitz concept proposed for strong first-order phase transitions in systems with one independent order parameter is significantly expanded to obtain the results with comparable error bars in reasonable computation times at arbitrary amount of latent heat. The proposed MC computer experiment uses parallel processing and the Metropolis algorithm, but Wojtkowiak and Musiał validated my results using their recently constructed Wolff-type cluster algorithm. Arbitrarily weak to strong first-order phase transitions in the phase diagram region with ferromagnetic interactions are investigated and the latent heat associated with individual degrees of freedom is carefully computed. Much attention was paid to the selection of the formulas for scaling the results obtained for systems with finite sizes to the thermodynamic limit, which were discussed in the context of many source papers. The paper shows for the first time the role of the Potts point in the 3D AT model. It was found that the bifurcation point is not a tri-critical point, as reported in previous papers, and the positions of the bifurcation point and tricritical points were refined.

The work contains a proposal of a computer experiment that can be carried out as part of the use of information technology in teaching children and adolescents. The application developed for this purpose, called *Continuous phase transitions*, uses the ideologically simple Ising model to study and visualize the behavior of the system in the region of continuous phase transitions on a microscopic scale. The program can be viewed as a microscope that demonstrates the behavior of spins, the key elements for understanding the essence of magnetism, and also gives an insight into the essence and mechanism of the continuous phase transition of the order-disorder type.

Spis treści

Wstęp	8
1. Wprowadzenie do mechaniki statystycznej i przemian fazowych.....	10
1.1. Opis statystyczny układu.....	10
1.2. Opis termodynamiczny układu	11
1.3. Fluktuacje energii	13
1.4. Klasyfikacja przemian fazowych.....	16
2. Układy spinowe	22
2.1. Model Isinga.....	22
2.2. Model XY i Heisenberga.....	23
2.3. Model Potts'a.....	24
2.4. Model AT	24
2.5. Wybrane zastosowania spinowych modeli sieciowych	27
2.5.1. Gaz sieciowy	27
2.5.2. Stopy wieloskładnikowe	27
3. Magnetyczne własności ciał.....	29
4. Eksperyment komputerowy typu Monte Carlo	32
4.1. Metoda Monte Carlo	33
4.2. Wstępna lokalizacja punktów przemian fazowych – kumulanty Bindera	38
4.3. Ustalenie charakteru przemian fazowych – kumulanty typu Challi	39
4.4. Przemiany fazowe pierwszego rodzaju – kumulanty typu Lee-Kosterlitz'a.....	41
4.5. Wykorzystanie histogramu rozkładu energii wewnętrznej	41
4.6. Przetwarzanie równoległe	44
5. Wyniki dla trójwymiarowego modelu Ashkina-Tellera	48
5.1. Wstępna lokalizacja punktów przemian fazowych z wykorzystaniem kumulant Bindera	49
5.2. Analiza zachowania uogólnionych kumulant typu Challi i jej ograniczeń.....	51
5.3. Wykorzystanie kumulant typu Lee-Kosterlitz'a i analiza zakresu ich stosowalności	59
5.4. Analiza histogramu rozkładu energii	63
5.5. Analiza uzyskanych wyników i wnioski.....	70
6. Zastosowanie symulacji komputerowych – aplikacja <i>Ciągłe przemiany fazowe</i>	75
Podsumowanie	79
Publikacje własne	83
Literatura.....	84

Wstęp

Zjawiska fizyczne rządzące światem przyrody są bardzo złożone i większość z nich można opisać za pomocą odpowiednich równań, które jednak bardzo często trudno rozwiązać analitycznie. Pozostają nam wtedy symulacje komputerowe, rodzaj eksperymentu z użyciem komputera. Podstawową ideą eksperymentów numerycznych jest symulowanie ewolucji układu fizycznego poprzez rozwiązanie odpowiedniego zestawu równań, które ten układ opisują. W moim przypadku rozpatruję układy o skończonych rozmiarach, które w granicy termodynamicznej dają obraz i zachowanie układu makroskopowego.

Dlatego głównym celem tej pracy są obliczenia numeryczne niektórych parametrów opisujących zachowanie układów w czasie przemian fazowych pierwszego rodzaju w trójwymiarowym modelu Ashkina-Tellera. Jest to jeden z najważniejszych układów odniesienia w mechanice statystycznej, gdyż jest nietrywialnym uogólnieniem szeroko wykorzystywanego modelu Isinga. Podobnie jak model Isinga, model Ashkina-Tellera wciąż znajduje interesujące zastosowania, na przykład do modelowania porządku krystalicznego w VO_2 , uczenia maszynowego, stanu Coulomba bez przerwy energetycznej, wzorców nanodomien w ultra-tetragonalnym PbTiO_3 , właściwości magnetycznych nanorurek, elastycznej odpowiedzi cząsteczki DNA na siłę zewnętrzną i moment obrotowy.

Model Ashkina-Tellera jest tak atrakcyjny poznawczo i aplikacyjnie, gdyż charakteryzuje go bogaty diagram fazowy i dogłębna analiza różnych regionów tego diagramu daje możliwość modelowania tak wielu wyżej wspomnianych zjawisk. To zmotywowało mnie do zbadania przemian fazowych, najpierw poprzez lokalizowanie punktów tych przemian, dokonanie ich klasyfikacji, jak i określania punktów trójkrytycznych. Wymagało to istotnego rozwinięcia metod dotąd wykorzystywanych w literaturze przedmiotu. W mojej pracy dokonywałam tego wykorzystując kumulanty Bindera, głównie do wstępnej lokalizacji punktów przemian fazowych, jak i kumulanty typu Challi i Lee-Kosterlitz do ustalenia charakteru tych przemian, dokładniejszej lokalizacji punktów przemian fazowych oraz wyznaczenia ciepła przemiany. Jako niezależne potwierdzenie poprawności wyznaczonego ciepła przemiany wyżej wspomnianymi metodami zastosowałam metodę histogramu rozkładu energii wewnętrznej do niezależnego i dokładniejszego wyznaczenia wartości tego ciepła. Dzięki eksperymentom komputerowym zastosowanym do standardowego trójwymiarowego modelu Ashkina-Tellera, w mojej pracy doktorskiej dokonuję porównania wyników uzyskanych z tych metod, co podnosi ich wiarygodność.

Praca doktorska składa się z sześciu rozdziałów oraz wstępu i podsumowania. W rozdziale pierwszym opisuję podstawowe pojęcia mechaniki statystycznej i dokonuję klasyfikacji przemian fazowych. Rozdział drugi został poświęcony omówieniu modeli spinowych układów sieciowych, w tym także modelu Ashkina-Tellera, i ich zastosowań. Magnetyczne własności ciał omawiam w rozdziale kolejnym. W rozdziale czwartym przedstawiam metody będące podstawą przeprowadzanych przeze mnie eksperymentów komputerowych, czyli metodę Monte Carlo, kumulanty Bindera, kumulanty typu Challi i Lee-Kosterlitz, jak i metodę histogramu rozkładu energii wewnętrznej, a także podkreślam znaczenie przetwarzania równoległego dla uzyskania wiarygodnych ekstrapolacji moich wyników do granicy termodynamicznej. W rozdziale piątym przedstawiam wyniki moich analiz przeprowadzonych dla trójwymiarowego modelu Ashkina-Tellera. Dzięki uzyskanym wynikom dokonałam lokalizacji punktów przemian fazowych, wyznaczyłam ciepło przemiany i określiłam charakter tych przemian. Porównałam wyniki uzyskane z zastosowaniem kumulant typu Bindera, Challi, Lee-Kosterlitz oraz z wykorzystaniem histogramu rozkładu energii wewnętrznej, a także określiłam zakres stosowalności przybliżonych wartości wykorzystywanych kumulant typu Bindera, Challi, Lee-Kosterlitz w granicy termodynamicznej pozwalających wyznaczyć wartość ciepła przemiany. Szósty rozdział zawiera propozycję eksperymentu komputerowego, który może zostać przeprowadzony w ramach zastosowania technologii informatycznej w dydaktyce dzieci i młodzieży. Stworzona w tym celu aplikacja, nazwana *Ciągłe przemiany fazowe*, wykorzystuje ideowo prosty model Isinga do badania i wizualizacji zachowania się układu w obszarze ciągłej przemiany fazowej w skali mikroskopowej.

W pracy zaznaczam merytoryczny wkład pozostałych członków zespołu badawczego, a jego zestawienie przedstawiam na końcu podsumowania.

1. Wprowadzenie do mechaniki statystycznej i przemian fazowych

1.1. Opis statystyczny układu

Fizycznym narzędziem, które pozwala badać układy o dużej liczbie stopni swobody jest mechanika statystyczna. Wyjaśnia ona, w jaki sposób z chaosu powstaje porządek, jak prawa mikroskopowe, symetryczne ze względu na odwrócenie czasu, prowadzą do asymetrii czasowej makroświata. Mechanika statystyczna stanowi idealne narzędzie do badania zjawisk krytycznych w konkretnych układach.

W mojej pracy rozważam jedynie układy w równowadze termodynamicznej. Różne możliwe mikroskopowe konfiguracje stopni swobody układu będę nazywać mikrostanem i oznaczać jako α . Będę modelować układ rzeczywisty, w którym mikrostan mogą tworzyć albo układ ciągły, albo dyskretny, znajdujący się w równowadze termodynamicznej z termostatem o temperaturze T . Energię mikrostanu oznaczam jako E_α . W praktyce dla układu makroskopowego wymagamy, aby miał N cząstek, objętość V i energię pomiędzy E i $E+\Delta$, gdzie $\Delta \ll E$ wiążemy z niepewnością, która jest immanentną cechą opisu fizycznego. Warunki te spełnia praktycznie nieskończona liczba stanów. Zbiór myślowych kopii tego układu w tych stanach to zespół statystyczny.

Prawdopodobieństwo p_α , że układ przebywa w jednym spośród nieskończonego zbioru stanów mikroskopowych Φ_α o energii E_α jest proporcjonalne do wyrażenia $e^{-\beta E_\alpha}$ zwanego czynnikiem Boltzmann (zob. np. [6] i prace tam cytowane). Natomiast $\beta = 1/k_B T$, gdzie k_B to stała Boltzmann. Dla uzyskania prawdopodobieństwa p_α , że układ jest w mikro stanie α , unormuję czynnik Boltzmann,

$$Z = \sum_{\alpha} e^{-\beta E_{\alpha}}, \quad (1.1.1)$$

gdzie Z – czynnik normalizacyjny, suma stanów (suma statystyczna), a sumujemy tu po mikrostanach, a nie po wartościach energii. Układ zawsze znajduje się w jakimś stanie, suma czynników p_α jest równa jeden, a znormalizowane prawdopodobieństwo można zapisać jako

$$p_{\alpha} = \frac{1}{Z} e^{-\beta E_{\alpha}}. \quad (1.1.2)$$

Wzór (1.1.2) przedstawia rozkład kanoniczny (zwany też rozkładem Gibbsa). Znając energie E_α mikrostanów α , można obliczyć wartość średnią $\langle X \rangle$ po zespole mikrostanów (średnia temperaturowa) dowolnej wielkości X jako

$$\langle X \rangle = \sum_{\alpha} p_{\alpha} X_{\alpha} = \frac{1}{Z} \sum_{\alpha} X_{\alpha} e^{-\beta E_{\alpha}}, \quad (1.1.3)$$

jeżeli znamy wartość X_{α} , przyjmowaną przez X w każdym z mikrostanów. Wprawdzie suma (1.1.3) może być trudna do obliczenia, ale rozkład prawdopodobieństwa p_{α} Gibbsa daje prostą i uniwersalną metodę na obliczenie makroskopowych średnich po zespole, równych średnim temperaturowym (tj. średnim po czasie przy ustalonej T), z praw mikroskopowych.

1.2. Opis termodynamiczny układu

Termodynamicznym układem może być makroskopowy układ wielu ciał, których rozmiary i czas istnienia są wystarczające do wykonania procesów pomiaru, a fazę układu lub podukładu stanowi określony stan termodynamiczny. Przy czym dany układ (podukład) znajduje się w określonym stanie, gdy różne makroskopowe części układu znajdują się w termodynamicznych stanach równowagi. Z kolei stan równowagi to stan układu, do którego układ zmierza, nie poddany żadnym zewnętrznym oddziaływaniom lub znajdując się w danym oddziaływaniu ze swoim otoczeniem. Jeżeli dwa układy zaczną oddziaływać ze sobą, to nowy układ, którego częścią są te dwa, przechodzi w stan równowagi termodynamicznej. Relacja równowagi pomiędzy układami ma charakter przechodni, zgodnie z "zerową" zasadą termodynamiki. Wielkości (zmiennie) fizyczne, które przyjmują określone znaczenie dla każdego stanu równowagi układu, nazywamy wielkościami termodynamicznymi lub funkcjami stanu. Dzielimy je na "intensywne", jeżeli nie zależą od rozmiarów i masy układu, a należy do nich np. temperatura i ciśnienie oraz "ekstensywne", czyli te co zależą od rozmiaru i masy, np. masa i energia.

Stany termodynamiczne, którymi zajmuje się termodynamika, nie muszą być stanami równowagi rozpatrywanego układu, ale w układzie takim muszą być realizowane stany równowagi lokalnej, czyli układ można rozbić na makroskopowe podukłady, w których realizowane są stany równowagi.

W celu opisanie układu można podawać za każdym razem zbiór wszystkich wielkości termodynamicznych, charakteryzujących stan równowagi termodynamicznej, ale dla przejrzystości opisu można znaleźć zbiór zmiennych niezależnych oraz sposób wyrażania za ich pomocą pozostałych wielkości termodynamicznych. Układy w stanie równowagi termodynamicznej opisujemy za pomocą funkcji termodynamicznych nazywanych potencjałami termodynamicznymi. Dzięki nim można obliczyć wartości wszystkich wielkości charakteryzujących dany układ termodynamiczny. Do nich najczęściej należą: entropia S i temperatura T , ciśnienie p i objętość V oraz liczba cząstek w układzie N i potencjał

chemiczny μ . Poza tym rozważam funkcje stanu: energię wewnętrzną U , energię swobodną Helmholtza F , entalpię swobodną lub swobodną energię Gibbsa G .

Średnią energię układu w równowadze termodynamicznej zgodnie ze wzorem (1.1.3) mogę zapisać w postaci

$$U \equiv \langle E \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\alpha} E_{\alpha} e^{-\beta E_{\alpha}} \quad (1.2.1)$$

i wyraża ona sumę energii mikrostanów α z wagą określoną przez ich prawdopodobieństwo.

Ze wzoru (1.1.1) wynika, że

$$U = - \left(\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta} \right)_V. \quad (1.2.2)$$

Wielkość $\left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_V$ to pojemność cieplna układu przy stałym V , którą będę oznaczać C_V .

Zatem

$$C_V = \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_V, \quad (1.2.3)$$

a na podstawie (1.2.2) i (1.2.3) otrzymuję

$$C_V = k_B \beta^2 \left(\frac{\partial^2 \ln Z}{\partial \beta^2} \right)_V. \quad (1.2.4)$$

Wykorzystując fakt, że przy stałej objętości V praca mechaniczna nad układem nie jest wykonywana, czyli jeśli zmienia się energia układu, to znaczy, że miał miejsce przepływ ciepła, otrzymuję

$$C_V dT = T dS. \quad (1.2.5)$$

Z tego wynika, że mogę zapisać

$$C_V = -\beta \left(\frac{\partial S}{\partial \beta} \right)_V. \quad (1.2.6)$$

Porównując wzory (1.2.4) i (1.2.6) otrzymuję $-\left(\frac{\partial S}{\partial \beta} \right)_V = k_B \beta \left(\frac{\partial^2 \ln Z}{\partial \beta^2} \right)_V$. Po całkowaniu po β

uzyskuję wzór na entropię w postaci

$$S = -k_B \beta \left(\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta} \right)_V + k_B \ln Z. \quad (1.2.7)$$

W przypadku energii swobodnej Helmholtza prawdziwa jest zależność $F \equiv U - TS$ i wykorzystując wzory (1.2.2) i (1.2.7) otrzymujemy energię swobodną Helmholtza

$$F = -\frac{1}{\beta} \ln Z. \quad (1.2.8)$$

Natomiast dla energii swobodnej Gibbsa mam

$$G \equiv F + \sum_i p_i V_i = -\frac{1}{\beta} \sum_i \frac{\partial}{\partial V_i} (V_i \ln Z). \quad (1.2.9)$$

W podsumowaniu tych krótkich rozważań należy zauważyć, że znajomość sumy stanów Z jest podstawą opisu statystycznego zachowania się układu, gdyż za jej pomocą można wyznaczyć potrzebne wielkości termodynamiczne. Natomiast Z otrzymamy, gdy będą znane energie wszystkich mikrostanów układu, a tą informację zawiera $H(\alpha, V)$ i stąd można zapisać $E_\alpha = H(\alpha, \text{więzy})$, gdzie H to hamiltonian. Zatem mechanika statystyczna, w odróżnieniu od termodynamiki klasycznej, wychodząc od hamiltonianu układu daje możliwość badania wielu wielkości.

Zwróćmy jeszcze uwagę na fakt, że istotnymi wielkościami, charakteryzującymi rozważane układy, są funkcje określające ich reakcje na działanie zewnętrzne. Do najważniejszych należy ciepło właściwe charakteryzuje reakcję układu na dopływ energii, ściśliwość - charakteryzuje reakcję (podatność) układu na zmianę ciśnienia oraz podatność magnetyczna - określa reakcję (podatność) układu na zmianę natężenia pola magnetycznego.

1.3. Fluktuacje energii

Mikrostany układu w zespole kanonicznym mają różne energie, których wartość fluktuuje wokół średniej energii określonej przez temperaturę. Znając energie E_α mikrostanów α , można obliczyć wartość średnią $\langle E_\alpha \rangle$ po zespole mikrostanów korzystając ze wzoru (1.2.1). O tym jakie są fluktuacje energii δU , informuje nas średnia temperaturowa z $\langle (E_\alpha - \langle E_\alpha \rangle)^2 \rangle$, przy czym łatwo można wykazać (zob. np. [6]), że

$$\langle (E_\alpha - \langle E_\alpha \rangle)^2 \rangle = \langle E_\alpha^2 \rangle - \langle E_\alpha \rangle^2. \quad (1.3.1)$$

Korzystając z przytaczanych wyżej wzorów można stwierdzić, że dla tych fluktuacji spełniona jest zależność

$$\langle \langle (E_\alpha - \langle E_\alpha \rangle)^2 \rangle \rangle = \left(\frac{\partial^2 \ln Z}{\partial \beta^2} \right)_V = \frac{C_V}{k_B \beta^2}. \quad (1.3.2)$$

Pamiętając, że $\beta = 1/k_B T$ fluktuacja energii układu może zostać przedstawiona w postaci wyrażenia

$$\delta U = T(k_B C_V)^{\frac{1}{2}}. \quad (1.3.3)$$

Pojemność cieplna jako wielkość ekstensywna rośnie liniowo z rozmiarem sieci, czyli względne fluktuacje termiczne maleją jak pierwiastek kwadratowy ze wzrostem rozmiaru układu. Jeśli rozmiary dążą do nieskończoności, czyli w granicy termodynamicznej te fluktuacje zanikają, chyba, że pojemność cieplna jest rozbieżna w punkcie krytycznym.

Energia całkowita odnosi się do układu jako całości, lecz można wyliczyć średnie temperaturowe dzięki znajomości rozkładu prawdopodobieństwa dla mikrostanów układu, które odnoszą się nie tylko do całego układu, ale też do jego części. Przykładowo zamiast obliczać całkowite namagnesowanie układu spinów, można przeanalizować, jak zmienia się ono od miejsca do miejsca i jak spiny są ze sobą skorelowane w różnych miejscach.

W tym celu rozważamy N zmiennych s_1, \dots, s_N opisujących mikrostan danego układu. Jeżeli chcemy znać średnią temperaturową całkowitego spinu $S = \sum_i s_i$ to do

hamiltonianu należy dodać człon $\Delta H = \left(-\frac{1}{\beta}\right)JS$ i obliczyć Z jako funkcję pola J .

Otrzymujemy namagnesowanie

$$M = \left. \frac{\partial \ln Z}{\partial \beta} \right|_{J=0}. \quad (1.3.4)$$

Jeżeli pole J jest różne na różnych węzłach sieci spinów, średnie temperaturowe mogą być otrzymane z Z , a do hamiltonianu zamiast wcześniej wspomnianego wyrażenia można dodać człon

$$\Delta H = \left(-\frac{1}{\beta}\right) \sum_i J_i s_i \quad (1.3.5)$$

a znając Z jako funkcję J można obliczyć wielkości zwane funkcjami korelacji

$$\langle s_i \rangle = \frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial J_i}, \quad \langle s_i s_j \rangle = \frac{1}{Z} \frac{\partial^2 Z}{\partial J_i \partial J_j}, \quad \langle s_i s_j s_k \rangle = \frac{1}{Z} \frac{\partial^3 Z}{\partial J_i \partial J_j \partial J_k} \quad (1.3.6)$$

i tak dalej. Uogólniając otrzymujemy n -punktową funkcję korelacji:

$$G^{(n)}(i_1, \dots, i_n) \equiv \langle s_{i_1} s_{i_2} \dots s_{i_n} \rangle = \frac{1}{Z} \frac{\partial^n Z}{\partial J_{i_1} \dots \partial J_{i_n}}, \quad (1.3.7)$$

gdzie G jest funkcją położeń (i_1, \dots, i_n) uśrednionych spinów.

Gdy spiny nie oddziałują średnie z iloczynów różnych spinów równe są iloczynom poszczególnych średnich:

$$\langle s_i s_j \rangle = \langle s_i \rangle \langle s_j \rangle \quad (1.3.8)$$

dla $i \neq j$. Natomiast, gdy spiny oddziałują, wtedy fluktuują i funkcja korelacji informuje nas o ich zachowaniu.

Jednak należy zauważyć, że opisane funkcje korelacji nie zawsze w pełni opisują układ. Przykładowo weźmy ferromagnetyk w zerowym polu magnetycznym, powyżej punktu Curie jako układ N spinów. Taki ferromagnetyk nie jest namagnesowany, zaś średnia temperaturowa każdego spinu jest równa zeru: $\langle s_i \rangle = 0$, a spiny blisko siebie wykazują tendencję do ustawiania się w tym samym kierunku i ta korelacja będzie malała, gdy odległość między spinami będzie rosła. Dwupunktowa funkcja korelacji $G^{(2)}(i, j) = \langle s_i s_j \rangle$ dostarcza informacji jak skorelowane są ze sobą różne spiny i będzie miała wartość dodatnią dla małych odległości między węzłami, a jej wartość będzie zbliżać się do zera ze wzrostem tej odległości. Funkcja ta przyjmuje wartości niezerowe nawet dla nieoddziałujących spinów, bo $\langle s_i \rangle$ i $\langle s_j \rangle$ są różne od zera i prawdziwe jest równanie (1.3.8). W takim przypadku potrzebna byłaby wielkość, która określi tylko tę część korelacji, która zależy od oddziaływań, czyli dwupunktowa związana funkcja korelacji, która jest miarą korelacji między fluktuacjami w dwóch węzłach i i j , zdefiniowana wyrażeniem

$$G_{zw}^{(2)}(i, j) = \langle s_i s_j \rangle - \langle s_i \rangle \langle s_j \rangle. \quad (1.3.9)$$

Funkcja ta znika, gdy mamy do czynienia z układem nieoddziałujących spinów.

Funkcje korelacji wyższego rzędu są również użyteczne, ale ponownie zawierają nadmiar informacji, jak wspomniana wyżej dwupunktowa funkcja korelacji, o wkładzie pochodzącym od każdego spinu z osobna. W celu wyznaczenia związanej funkcji korelacji wyższego rzędu nie trzeba obliczać funkcji korelacji $G^{(n)}(i_1, \dots, i_n)$, lecz wystarczy zróżniczkować $\ln Z$:

$$G_{zw}^{(n)}(i_1, \dots, i_n) = \frac{\partial}{\partial J_{i_1}} \dots \frac{\partial}{\partial J_{i_n}} \ln Z \equiv \langle s_{i_1} \dots s_{i_n} \rangle_{zw}. \quad (1.3.10)$$

Należy również zwrócić uwagę, że wyrażenie $-\frac{G_{zw}^{(n)}}{\beta}$ ma dodatkowe znaczenie fizyczne - jest współczynnikiem rozwinięcia energii swobodnej Helmholtza w szereg Taylora względem J_i .

1.4. Klasyfikacja przemian fazowych

Mechanika statystyczna jest dobrym narzędziem do badania przemian fazowych i zjawisk krytycznych, zwłaszcza w układach o zbyt dużej ilości stopni swobody, by można było zsumować po wszystkich jego mikrostanach. W kontekście tych rozważań na temat energii za J. W. Gibbssem (1875) wprowadzę też potencjał chemiczny μ jako pochodną cząstkową energii wewnętrznej U po liczbie cząstek przy stałej objętości, entropii, ciśnieniu i temperaturze. Aby moje rozważania prowadzić w sposób ogólny, zamiast konkretnej wielkości opisującej dany stan będę wykorzystywać uogólnioną siłę X . Uwzględnię układy o określonej jednej sile uogólnionej, dla których potencjał chemiczny w przypadku współistnienia dwóch faz A i B spełnia równanie (zob. np. [9])

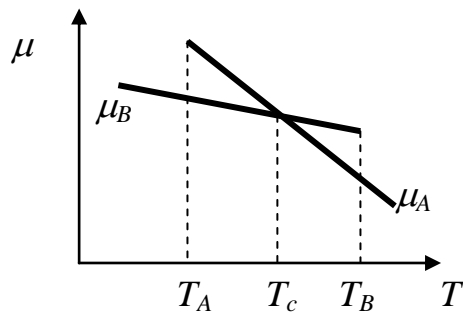
$$\mu_A(T,X)=\mu_B(T,X), \quad (1.4.1)$$

a dla trzech faz A, B i C jest prawdziwe

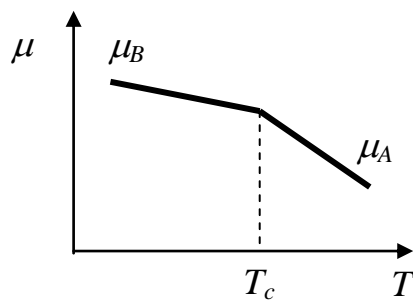
$$\mu_A(T,X)=\mu_B(T,X)=\mu_C(T,X). \quad (1.4.2)$$

Na diagramie fazowym powyższa zależność (1.4.1) określa linię współistnienia dwóch faz, a zależność (1.4.2) wyznacza punkt, w którym współistnieją trzy fazy. Przecięcie się linii współistnienia dwóch faz skutkuje wyznaczeniem punktu, który często nazywany jest punktem dwukrytycznym. Natomiast punkt, w którym linia ciągłych przemian fazowych przechodzi w linię nieciągłych przemian fazowych, określany jest jako trójkrytyczny (pojęcie to w literaturze przedmiotu wprowadził R. B. Griffith [23] w 1970 roku). Linia rozdzielająca poszczególne fazy może zakończyć się w punkcie zwanym krytycznym (zob. np. [6,9]). Przesunięcie się na diagramie fazowym na skutek procesu termodynamicznego z jednej fazy do drugiej oznacza, że miała miejsce przemiana fazowa. W układzie (μ, T) przy stałej sile uogólnionej, funkcje potencjałów termodynamicznych dwóch faz mogą się przeciąć (rys. 1.4.1) lub przechodzić jedna w drugą (rys. 1.4.2).

Analizując wykres 1.4.1 można zauważyć, że faza wysokotemperaturowa (faza A) istnieje nawet dla $T < T_C$, aż do T_A , a faza niskotemperaturowa aż do T_B . Z tego wynika, że stan opisany poprzez μ_A odpowiada minimum odpowiedniego potencjału termodynamicznego w zakresie temperatur $T > T_A$, a stan opisany przez μ_B dla $T < T_B$. W zakresie temperatur $T_A < T < T_C$ stan opisany funkcją μ_B jest stanem stabilnym, a stan opisany funkcją μ_A metastabilnym, a w zakresie $T_C < T < T_B$ zachodzi sytuacja odwrotna. Zatem można przeprowadzić taki proces termodynamiczny, który doprowadziłby w zakresie np. $T_A < T < T_C$ do realizacji stanu metastabilnego, a więc nietrwałego ze względu na skończone wielkości zaburzeń.



Rys. 1.4.1 Zależność $\mu(T)$ przy przemianie fazowej pierwszego rodzaju.



Rys. 1.4.2 Zależność $\mu(T)$ przy przemianie fazowej nie pierwszego rodzaju.

Funkcje μ_A i μ_B w punkcie T_C dla przypadku przedstawionego na wykresie 1.4.2 spełniają warunek

$$\left(\frac{\partial \mu_A}{\partial T} \right)_X \Big|_{T=T_C} = \left(\frac{\partial \mu_B}{\partial T} \right)_X \Big|_{T=T_C} \quad (1.4.3)$$

Idea podziału przemian fazowych wprowadzona przez P. Ehrenfesta opierała się na ciągłości potencjału chemicznego μ , zdefiniowanego wyżej jako potencjał termodynamiczny na jedną cząstkę. Przemiana fazowa jest pierwszego rodzaju gdy pierwsza pochodna wykazuje nieciągłość. Zatem przemiana będzie n -tego rodzaju, gdy najniższa, n -ta pochodna μ jest nieciągła. Ta klasyfikacja nie sprawdza się, gdyż pochodne μ pozostają ciągłe w punkcie przemiany fazowej, mimo, że w miarę zbliżania się do niego są rozbieżne (zob. np. [6,9]). W myśl tej definicji przemiana fazowa na rysunku 1.4.1 jest przemianą fazową pierwszego rodzaju, natomiast na rysunku 1.4.2 przemianą fazową wyższego rodzaju.

Jedną z podstawowych teorii, dotyczących przemian fazowych sformułował L. Landau [45] w 1937 roku. Jego teoria stała się fundamentem dla wielu późniejszych interpretacji i jest w dziedzinie fizyki przemian fazowych podstawą do jej zrozumienia.

Zakłada, że przemiany fazowe doprowadzające do zmiany symetrii w ciele stałym mogą zajść w dwojaki sposób: poprzez skokową zmianę struktury krystalicznej lub przez nieskończenie małą zmianę, powodującą zaniknięcie lub pojawienie się jakiegoś elementu symetrii. Godny uwagi jest szczególnie drugi przypadek więc jeżeli założymy, że mamy do czynienia z kryształem, którego komórka elementarna jest prostą komórką regularną w wyniku niewielkiego przemieszczenia węzłów sieci może dojść do zamiany komórki regularnej w komórkę tetragonalną (rozsunięcie wzdłuż jednej z osi czterokrotnych), czyli do zmiany symetrii. Jest różnica w symetrii magnetycznej w fazie ferromagnetycznej i paramagnetycznej, jak i w fazie paramagnetycznej i ferroelektrycznej, przy czym zmiana między fazami związana jest np. z pojawieniem się nieskończenie małych namagnesowań czy polaryzacji w węzłach sieci. Głównym założeniem, na którym opiera się teoria Landaua przy tego typu przemianach jest stwierdzenie, że zawsze można znaleźć wielkość, której mała zmiana powoduje zmianę symetrii, zatem niewielka zmiana ilościowa tej wielkości powoduje jakościowe zmiany własności ciała. Wielkość, o której mowa w literaturze nazywa się parametrem porządku. Trzeba zwrócić uwagę na fakt, że gdy symetria zostaje podwyższona, a więc pojawia się jakiś nowy element symetrii to parametr porządku znika, co znaczy, że powinien istnieć związek między symetrią w jednej i drugiej fazie, co jest cechą ciągłych przemian fazowych.

Tabela 1.4.1

Parametry porządku wraz ze sprzężonymi z nimi wielkościami termodynamicznymi dla wybranych przemian fazowych.

Przemiana fazowa	Parametr porządku	Wielkość termodynamiczna sprzężona z parametrem porządku
ciecz - gaz	różnica gęstości	ciśnienie
ferromagnetyk - paramagnetyk	moment magnetyczny	natężenie pola magnetycznego
ferroelektryk - paraelektryk	polaryzacja	natężenie pola elektrycznego
He nadciężły - He normalny	funkcja falowa kondensatu	niefizyczne
nadprzewodnik - przewodnik	zespolony parametr szczeliny	niefizyczne

Tabela 1.4.1 zawiera parametry porządku dla wybranych przemian fazowych ze sprzężonymi z nimi wielkościami termodynamicznymi [9]. Z powyższych rozważań wynika,

że idea istnienia parametru porządku powstała z założenia, że zawsze w tych przemianach fazowych następuje zmiana symetrii. Przykładowo w przypadku przemiany fazowej między stanem normalnym, a nadciekłym helu zmiana symetrii dotyczy fazy funkcji falowej kondensatu, natomiast elementem symetrii różniącym fazę uporządkowaną od nieuporządkowanej jest "możliwość dozwolonej zmiany fazy".

Z tabeli 1.4.1 wynika, że parametr porządku niekoniecznie musi być skalarem i przykładowo przy przemianach między nadprzewodnikiem a przewodnikiem jest liczbą zespoloną, więc jest dwuwymiarowy. Parametr porządku może być wektorem (trójwymiarowym) lub mieć wiele składowych (>3) [37,38]. Parametr porządku może stanowić także wybrana składowa wektora, reprezentującego wielkość, jak w przypadku ferromagnetyka anizotropowego w zewnętrznym polu magnetycznym [39,40].

Na uwagę zasługuje fakt, że potencjał termodynamiczny może jednocześnie zależeć od więcej niż jednego parametru porządku, a parametry te mogą ze sobą oddziaływać, przy czym każdy z nich może mieć różny wymiar [41]. Wymiar parametru porządku ma duże znaczenie, gdyż między innymi określa sposób zachowania się wielkości fizycznych w otoczeniu punktu przemiany fazowej, będąc istotnym przy określaniu klas uniwersalności. Poza tym należy zauważyć, że cechą odróżniającą punkt dwukrytyczny od trójkrytycznego jest fakt, że w pierwszym przypadku mamy do czynienia z dwoma parametrami porządku różnymi dla dwu zbiegających się linii punktów krytycznych, natomiast w drugim przypadku z jednym parametrem porządku.

Zatem teoria Landaua pierwotnie została zaproponowana do opisu ciągłych przemian fazowych i opiera się na dwóch założeniach:

1. Przy każdej ciągłej przemianie fazowej można znaleźć parametr porządku φ , który spełnia rolę miary stopnia uporządkowania układu.
2. Potencjał termodynamiczny w pobliżu punktu krytycznego można rozwinąć w szereg potęgowy względem parametru porządku.

Przy czym parametr porządku φ ma własności:

1. W fazie nieuporządkowanej (o wyższej symetrii) parametr porządku znika, a w fazie uporządkowanej (o niższej symetrii) osiąga wartości różne od zera.
2. Parametr porządku musi dążyć do zera w sposób ciągły, gdy $T \rightarrow T_c$, od strony temperatur, w których istnieje faza uporządkowana.
3. Poniżej punktu krytycznego parametr porządku nie jest w pełni określony przez warunki zewnętrzne i przy tych samych warunkach może przybierać

dwie lub więcej różnych wartości, minimalizując odpowiedni potencjał termodynamiczny.

Potencjał termodynamiczny, np. energię swobodną Gibbsa G , zgodnie z teorią Landaua można przedstawić jako funkcję zmiennych termodynamicznych X , T oraz φ , przy czym parametr porządku φ powinien być wyznaczony z minimalizacji G przy zadanych X , T . Przy czym X jest odpowiednią siłą uogólnioną. Ponieważ zakładamy, że zmiana stanu w pobliżu punktu krytycznego odbywa się w sposób ciągły, a więc G przybiera dowolnie małe wartości, to możemy $G(X, T, \varphi)$ rozwinąć w szereg potęgowy Taylora względem φ

$$G(X, T, \varphi) = G_0 + \alpha\varphi + A\varphi^2 + \beta\varphi^3 + B\varphi^4 + \dots, \quad (1.4.4)$$

przy czym G_0 , α , A , β , B są funkcjami temperatury i siły uogólnionej. G_0 to potencjał termodynamiczny fazy nieuporządkowanej, gdy $\varphi = 0$.

Z warunku równowagi w reprezentacji Gibbsa wynika, że

$$\alpha = \left(\frac{\partial G}{\partial \varphi} \right)_{X, T} = 0. \quad (1.4.5)$$

Jeżeli uwzględnimy układy symetryczne ze względu na zmianę $\varphi \rightarrow -\varphi$ to $\beta = 0$ i otrzymujemy tylko parzyste potęgi rozwinięcia:

$$G(X, T, \varphi) = G_0 + A\varphi^2 + B\varphi^4 + \dots \quad (1.4.6)$$

Warunek równowagi stabilnej jest następujący

$$\left(\frac{\partial G}{\partial \varphi} \right)_{X, T} = 2A\varphi + 4B\varphi^3 = 0; \quad \left(\frac{\partial^2 G}{\partial \varphi^2} \right)_{X, T} = 2A + 12B\varphi^2 > 0. \quad (1.4.7)$$

Lewy wzór (1.4.7) ma dwa rozwiązania: $\varphi = 0$ dla fazy nieuporządkowanej oraz $\varphi = \pm \sqrt{-\frac{A}{2B}}$ dla fazy uporządkowanej. Jeżeli uwzględnimy uzyskane wartości parametru

porządku, to widzimy, że $\left(\frac{\partial^2 G}{\partial \varphi^2} \right)_{X, T} = 2A > 0$, czyli $A > 0$ dla fazy nieuporządkowanej oraz

$\left(\frac{\partial^2 G}{\partial \varphi^2} \right)_{X, T} = -4A > 0$, czyli $A < 0$ dla fazy uporządkowanej.

Wynika stąd, że w punkcie przejścia A zmienia znak. Według teorii Landau parametr A spełnia warunek

$$A = \alpha(T - T_c). \quad (1.4.8)$$

To założenie prowadzi do wzoru

$$\varphi = \pm \sqrt{\frac{-\alpha}{2B}} (T - T_C)^{\frac{1}{2}}. \quad (1.4.9)$$

Jeżeli $A > 0$ dla $T > T_C$, $A < 0$ dla $T < T_C$ oraz $A = 0$ dla $T = T_C$ to wówczas z warunku stabilności w $T = T_C$ wynika, że

$$\left(\frac{\partial^2 G}{\partial \varphi^2} \right)_{x,T} = 12B\varphi^2 > 0, \quad (1.4.10)$$

czyli $B > 0$. Zatem dla $B > 0$ teoria Landaua opisuje ciągle przemiany fazowe.

Niestety, wyniki landauowskiego przybliżenia są wiarygodne w pobliżu T_C , ale nie w obszarze krytycznym. Granice obszaru stosowalności teorii Landaua określają od strony T_C efekty związane z fluktuacjami, a od temperatur niskich efekty związane ze wzbudzeniami kolektywnymi, np. w postaci fal spinowych dla magnetyków. Teoria Landaua może również opisywać przemiany fazowe pierwszego rodzaju. Jednak nie nadaje się do opisu wszystkich przemian nieciągłych. W przemianach drugiego rodzaju zawsze symetria jednej fazy jest niższa, a drugiej wyższa. W przypadku przemian nieciągłych symetrie obu faz mogą ze sobą nie mieć nic wspólnego i w niektórych układach może być problem ze znalezieniem takiej postaci funkcji termodynamicznej, która opisywałaby poprawnie obie fazy.

Często jako kryterium ogólne, które umożliwia sklasyfikowanie przemiany fazowej jest stwierdzenie obecności ciepła przemiany. Jeżeli w materiale zachodzi przemiana fazowa z fazy wysokotemperaturowej do niskotemperaturowej i w małym zakresie temperatur wokół temperatury przejścia wydziela się skończona ilość ciepła zwana ciepłem przemiany, to mamy do czynienia z przemianą fazową pierwszego rodzaju, w przeciwnym razie z przemianą ciągłą. Jest to wniosek ważny, który często wykorzystuję w niniejszej rozprawie.

2. Układy spinowe

W badaniach przemian fazowych wykorzystuje się wiele modeli, których celem jest odzwierciedlenie w uproszczeniu układu rzeczywistego, przy zachowaniu najbardziej istotnych jego cech. Niektóre wyniki zostały otrzymane w odniesieniu do konkretnego modelu i dlatego uznałam, że część mojej pracy poświęcę najważniejszym według mnie modelom, które umożliwią badanie przemian fazowych sterowanych temperaturą.

Przedmiotem moich rozważań będą modele zjawisk zachodzących w sieci o N węzłach i wymiarze d , w próbce o kształcie sześcianu oraz krawędzi zawierającej $L = N^{\frac{1}{d}}$ węzłów. Parametr porządku przyjmuję jako średnia wartość wszystkich spinów s_i , które są zdefiniowane na każdym węzle sieci.

2.1. Model Isinga

Uważam, że duże znaczenie w rozwoju badań nad przemianami fazowymi wywarł, i wciąż jest intensywnie wykorzystywany, model stworzony w roku 1920 przez W. Lenza jako model ferromagnetyka. Główna idea modelu Lenza wiąże się z próbą opisu własności magnetycznych ferromagnetyków. Uważał on, że dostatecznie silne oddziaływanie pochodzenia niemagnetycznego powodowało, że energetycznie bardziej korzystne jest jedno z położenia momentu magnetycznego cząstki względem jej najbliższych sąsiadów w kryształ ferromagnetycznym, co prowadzi do uporządkowania momentów magnetycznych całego kryształu w nieobecności zewnętrznego pola magnetycznego, czyli do różnego od zera parametru porządku. Rozwiązanie tego modelu dla przypadku jednowymiarowego uzyskał E. Ising w roku 1925 [25], który wykazał, że w tym przypadku nie występuje przemiana do stanu ferromagnetycznego (uporządkowanego) w żadnej temperaturze powyżej zera bezwzględnego. Istota oddziaływania porządkującego momenty magnetyczne nie była znana w czasach Lenza i Isinga. Zatem ten jego wynik spowodował, że zainteresowanie modelem spadło, aż do roku 1936 kiedy to Peierls [42] wykazał, że modele dwu- i trójwymiarowy Isinga opisują zjawisko uporządkowania magnetycznego. Dla układu dwuwymiarowego przy zerowym polu magnetycznym analityczne rozwiązanie podał L. Onsager [26] w roku 1944, a przy niezerowym polu magnetycznym A. Zamolodczikov w roku 1989 [27]. Należy zwrócić uwagę, że rozwiązanie Onsagera [26] wykazało, że do badania przemian fazowych można zastosować mechanikę statystyczną bez jakichkolwiek założeń fizycznych, dotyczących zachowania układu. W teoriach fenomenologicznych trzeba robić założenia

niejako "podpowiadające" układowi kiedy nastąpi przemiana w nową fazę. Modele opierające się na mikroskopowym hamiltonianie mogą być rozwiązane w ramach mechaniki statystycznej i prowadzić do przemiany fazowej, a wielkości termodynamiczne wykazywać osobliwe zachowanie w granicy termodynamicznej, czyli dla układu nieskończonego.

Model Isinga wyróżnia jego prostota, co ułatwia rozważania statystyczne i daje możliwość zastosowania modelu do opisu przemian fazowych w różnych układach, np. w przypadku ferromagnetyka rozpatrywanym układem jest kryształ zbudowany z cząstek, których momenty magnetyczne mogą przyjmować jedynie dwa przeciwne położenia względem wyróżnionego kierunku w przestrzeni. Cząstki traktowane są jako punkty i w pierwotnym modelu Isinga sztywno związane z siecią krystaliczną. Zatem rozważamy prostą regularną sieć krystaliczną o wymiarze $d = 1, 2$ lub 3 , jeden niezależny stopień swobody $s = \pm 1$ na każdym węźle, często określane też typu Isinga, oraz jeden niezależnie porządkujący się parametr, czyli średnia wartość s .

Uwzględniając tylko oddziaływania między spinami zlokalizowanymi w najbliższych sąsiadujących węzłach, energię układu można przedstawić w postaci hamiltonianu

$$-\frac{H}{k_B T} = K \sum_{[i,j]} s_i s_j \quad (2.1.1)$$

gdzie indeksy numerują węzły sieci, wielkość $K = -J/k_B T$ jest nazywana stałą sprzężenia, a $[i, j]$ oznacza sumę tylko po najbliższych sąsiadach, gdyż tylko oni tu oddziałują z jednakową energią J . Dalsze oddziaływania zostają zaniedbane, co ma swoje uzasadnienie w znanym fakcie, że energia oddziaływania spinów krytycznie zależy od odległości. T oznacza temperaturę układu. Jeżeli $J < 0$, to spiny w sąsiednich węzłach układają się równolegle – mamy ferromagnetyk. Jeżeli $J > 0$, to sąsiadujące spiny ułożą się antyrównolegle – tworzy się antyferromagnetyk.

2.2. Model XY i Heisenberga

W modelu Isinga spiny mogą przyjmować tylko dwie wartości, czyli układać się wzdłuż jednego kierunku i wykazywać jedynie dwa przeciwne zwroty. W modelu XY każdy ze spinów jest scharakteryzowany przez dwuwymiarowy wektor s , czyli może wskazywać dowolny kierunek w danej płaszczyźnie. Model ten uważa się za szczególny przypadek modelu Heisenberga, w którym występują d -wymiarowe, klasyczne spiny s .

Jeżeli uwzględni się tylko oddziaływanie między najbliższymi sąsiadami, to hamiltonian modelu Heisenberga można zapisać jako

$$-\frac{H}{k_B T} = \sum_{[i,j]} (K_x s_i^x s_j^x + K_y s_i^y s_j^y + K_z s_i^z s_j^z), \quad (2.2.1)$$

gdzie s_i^α oznacza α -składową spinu s_i rezydującego na i -tym węźle sieci.

Jeśli $K_x = K_y = K_z$ to otrzymujemy hamiltonian dla izotropowego modelu Heisenberga. Gdy $K_x = K_y = 0$, $K_z \neq 0$ to mamy hamiltonian dla modelu Isinga. Zaś, gdy $K_x, K_y \neq 0$, $K_z = 0$, to otrzymujemy model XY.

2.3. Model Potts'a

Model Potts'a [32] jest uogólnieniem modelu Isinga, przy czym parametr porządku przyjmuje jedną z szeregu możliwych wartości. Mamy prostą regularną sieć krystaliczną, o wymiarze $d = 2$ lub 3 , jeden niezależny stopień swobody $s = 1, 2, \dots, q$ na każdym węźle, jeden niezależnie porządkujący się parametr.

Hamiltonian q -stanowego modelu Potts'a przybiera postać

$$-\frac{H}{k_B T} = K \sum_{[i,j]} \delta_{s_i s_j}. \quad (2.3.1)$$

gdzie symbol δ to delta Kroneckera, która przyjmuje wartość 1 dla $i = j$, a w przeciwnym przypadku jest 0 .

W tym modelu parametr porządku przyjmuje jedną z szeregu możliwych wartości i gdy odpowiednie wartości parametru porządku są różne to energia oddziaływania między sąsiadującymi węzłami jest równa zero, a gdy są takie same wynosi J . Podobieństwem do modelu Heisenberga jest przyjmowanie tych samych wartości na sąsiednich węzłach, ale odróżnia je to, że nie ma energetycznej nagrody za przybranie "podobnych", ale nie identycznych wartości.

2.4. Model AT

Model zaproponowany przez J. Ashkina i E. Tellera w 1943 roku [29] jako dwuwymiarowy model stopu lub kryształu czteroskładnikowego, stanowi nietrywialne uogólnienie modelu Isinga, gdyż Fan [28] pokazał w 1972 roku, że można go traktować jako nałożenie na siebie dwóch modeli Isinga z niezależnymi stopniami swobody s i σ (spinami) przyjmującymi wartości $+1$ lub -1 na każdym węźle sieci. Rozważamy prostą regularną sieć krystaliczną o wymiarze $d = 2$ i 3 . W modelu tym mamy trzy niezależnie porządkujące się

parametry porządku: $\langle s \rangle$, $\langle \sigma \rangle$, $\langle s\sigma \rangle$. Zatem rozpatrujemy tutaj tylko stałe dwuspinowe oddziaływania z całą wymiany J_2 tylko pomiędzy najbliższymi sąsiadami. Rozszerzenie tych dwóch nałożonych na siebie modeli Isinga do modelu AT następuje poprzez uwzględnienie oddziaływania czterospinowego z całą wymiany J_4 pomiędzy parami spinów rezydujących na węzłach, również tylko będących najbliższymi sąsiadami. Zatem efektywny hamiltonian w tym modelu przybiera postać [28]:

$$-H/(k_B T) = \sum_{[i,j]} (K_1 s_i s_j + K_2 \sigma_i \sigma_j + K_4 s_i s_j \sigma_i \sigma_j), \quad (2.4.1)$$

gdzie oznaczenia są analogiczne jak we wzorze (2.1.1) definiującym hamiltonian modelu Isinga, a wielkość $K_n = -J_n/(k_B T)$ z $n = 1, 2$ lub 4 jest nazywana stałą sprzężenia.

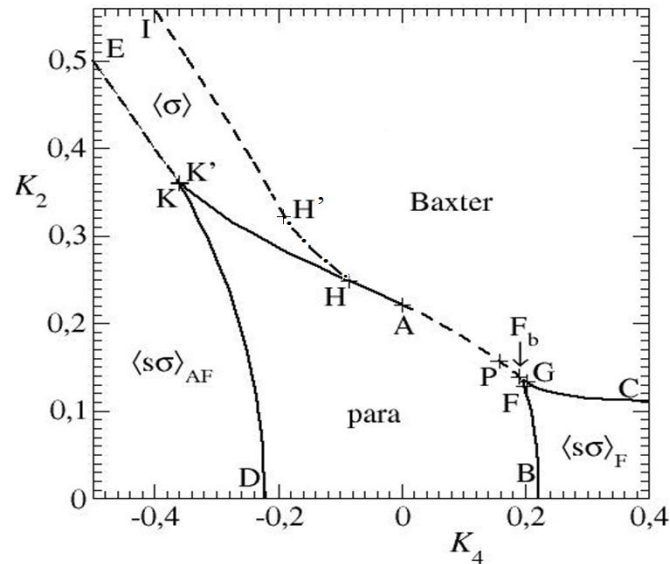
Model AT jest jednym z najważniejszych modeli w fizyce statystycznej i każdego roku poświęconych jest jemu kilkanaście prac (patrz najnowsze prace np. [33-35, 54-58] i cytowane w nim artykuły) ponieważ można traktować go jako uogólnienie dwóch modeli: czterostanowego modelu Potts'a i szeroko wykorzystywanego modelu Isinga. Jeśli $J_1 = J_2 = J_4 > 0$, to otrzymujemy czterostanowy model Potts'a. Jeśli $J_1 = J_2 = 0$, to otrzymujemy model Isinga w zmiennych $s\sigma$. Natomiast gdy $J_4 = 0$ wtedy model AT jest równoważny dwóm niesprzężonym modelom Isinga zlokalizowanym na tej samej sieci. W mojej rozprawie skoncentruję się na standardowym, symetrycznym modelu AT, w którym $J_1 = J_2$:

$$-H/(k_B T) = \sum_{[i,j]} [K_2 (s_i s_j + \sigma_i \sigma_j) + K_4 s_i s_j \sigma_i \sigma_j]. \quad (2.4.2)$$

Podobnie jak model Isinga, model AT wciąż znajduje interesujące zastosowania, na przykład ostatnio do modelowania porządku krystalicznego w VO_2 [48], uczenia maszynowego [49], stanu Coulomba bez przerwy energetycznej [50], wzorców nanodomen w ultra-tetragonalnym PbTiO_3 [51], właściwości magnetycznych nanorurek [52], elastycznej odpowiedzi cząsteczki DNA na siłę zewnętrzną i moment obrotowy [53].

Model AT charakteryzuje bogaty diagram fazowy, gdyż niezależne spontaniczne uporządkowanie wykazują nie tylko spiny s i σ , ale także ich iloczyn $s\sigma$. Rysunek 2.4.1 przedstawia diagram fazowy dla standardowego trójwymiarowego (3W) modelu AT zgodnie ze stanem wiedzy na dzień obecny. Przerwane linie oznaczają nieciągłe przemiany fazowe, zaś linie ciągłe to przemiany ciągłe. Bardzo interesujący przypadek ilustruje linia kropkowano-kreskowana, gdzie mamy współistnienie ciągłych i nieciągłych przemian fazowych dla różnych parametrów porządku [14]. W fazie *Baxtera* każdy parametr porządku $\langle s \rangle$, $\langle \sigma \rangle$, $\langle s\sigma \rangle$ jest uporządkowany ferromagnetycznie, w fazie *para* wszystkie te parametry są równe 0, zaś w fazach oznaczonych " $\langle s\sigma \rangle_F$ " i " $\langle s\sigma \rangle_{AF}$ " parametry $\langle s \rangle = \langle \sigma \rangle = 0$, a tylko parametr $\langle s\sigma \rangle$ jest uporządkowany odpowiednio ferro- i antyferromagnetycznie. Faza " $\langle \sigma \rangle$ "

zwana obszarem faz mieszanych charakteryzuje się tym, że tam $\langle s\sigma \rangle = 0$ i tylko jeden z parametrów $\langle s \rangle$ albo $\langle \sigma \rangle$ jest uporządkowany ferromagnetycznie, a drugi nie. Położenia punktów trójkrytycznych na diagramie fazowym oznaczyłam przez + i opisałam jako A, F, G, H, H', K i K'.



Rys. 2.4.1 Diagram fazowy standardowego 3W modelu AT – obecny stan wiedzy.

Charakter przemian fazowych wzdłuż linii AHK', DK, BP i CG oraz lokalizacja trójkrytycznych punktów K, K', F, G i punktu bifurkacji F_b była badana przez G. Musiała [12,4], linia AP to efekt pracy P. Arnolda i Y. Zhanga [7], a reszta diagramu jest wynikiem badań R.V. Ditzian i współpracowników [10]. Poza tym należy zwrócić uwagę na analizy zespołu J. P. Santosa i F. C. Sá Barreto nad przemianami między fazami *Baxtera*, *para*, $\langle s\sigma \rangle_F$ i $\langle s\sigma \rangle_{AF}$ [33,35]. Moje badania dotyczyły przemian fazowych wzdłuż linii APF_bF oraz F_bG . Według Arnolda i Zhanga zbliżając się do punktu Isinga (punkt A) usytuowanego przy $K_4 = 0$ i $K_2 = 0,2216546$ dla dodatnich wartości K_4 , model AT przejawia słabe przemiany fazowe pierwszego rodzaju, z dowolnie małą ilością ciepła przemiany dla każdego z trzech parametrów porządku $\langle s \rangle$, $\langle \sigma \rangle$, $\langle s\sigma \rangle$ [7]. W szerokim regionie diagramu fazowego wzdłuż linii APF_b pomiędzy fazą *Baxtera* i paramagnetyczną sygnalizowane są przemiany fazowe pierwszego rzędu od arbitralnie słabych do silnych [7, 22]. Poza tym w punkcie P, zwany punktem Potts, usytuowanym w $K_4 = K_2 = 0,157154(4)$ [7] model AT redukuje się do czterostanowego modelu Potts, w którym w modelu 2W zachodzą ciągle przemiany fazowe, ale w modelu 3W obserwujemy przemiany fazowe pierwszego rodzaju. Wyniki symulacji Monte Carlo sugerowały możliwość wystąpienia nieuniwersalnego zachowania również

w 3W modelu AT [4, 10, 14], ale ostatnie wyniki wskazują tylko na crossover wzdłuż linii AH i rzadkie współlistnienie przemiany fazowej ciągłej i pierwszego rodzaju rzędu wzdłuż linii HH' [14] pokazanej na rys. 2.4.1. Jednak charakter ciągły przemiany fazowej wzdłuż linii HK' to wciąż problem otwarty.

2.5. Wybrane zastosowania spinowych modeli sieciowych

2.5.1. Gaz sieciowy

Można zauważyć, że poprzez prostą zamianę zmiennych model Isinga można wykorzystać do opisu zupełnie innych układów. Przykładem może być gaz sieciowy, gdzie mamy układ na regularnej sieci d -wymiarowej o stałej sieci L z periodycznymi warunkami brzegowymi. Każdy węzeł sieci może znajdować się w jednym z dwóch stanów $n_i = 0$ lub 1 (pusty, zajęty), gdzie $i = 1, \dots, L^d$. W każdym z węzłów sieci może znajdować się najwyżej jedna cząstka. Ponieważ gaz nie jest doskonały cząstki gazu oddziałują ze sobą i energia gazu jest niższa, gdy cząstki są w sąsiednich komórkach, niż gdy są daleko od siebie.

Energia oddziaływania pomiędzy cząstkami zadana jest hamiltonianem:

$$-\frac{H}{k_B T} = 4K \sum_{[i,j]} n_i n_j. \quad (2.5.1.1)$$

W przypadku gdy $K > 0$, mamy do czynienia z oddziaływaniem przyciągającym, a dla $K < 0$ odpychającym. Jeśli przyjmiemy, że $n_i = \frac{s_i + 1}{2}$, a stąd $s_i = 2n_i - 1$ to dla poszczególnych wartości n_i otrzymujemy $s_i = 1$ lub $s_i = -1$, czyli mamy stopnie swobody modelu Isinga.

2.5.2. Stopy wieloskładnikowe

Istnieją dwie główne klasy stopów: stopy jednorodne (jednofazowe) i eutektyki (układy wielofazowe). W pierwszym przypadku stężenie każdego składnika jest stałe w całym stopie, podczas gdy w drugim występują małe kryształy. Niektóre z nich zawierają więcej jednego składnika, podczas gdy inne zawierają więcej drugiego. Eutektyki takie powstają, gdy wzajemna rozpuszczalność składników stopu jest ograniczona, a stężenie w danym stopie przekracza granicę rozpuszczalności. Charakterystyki jakościowe przejścia porządek-nieporządek w stopach wydają się być dobrze wyjaśnione, dla niektórych przykładów, przez statystyczne potraktowanie raczej uproszczonego modelu z odpowiednimi założeniami. Jednak z punktu widzenia porównań ilościowych z eksperymentami, obecna

teoria jest nadal daleka od zadowalającej i pozostaje wiele do zrobienia w celu dokładniejszego obliczenia funkcji podziału i udoskonalenia modelu poprzez staranne rozważenie rzeczywistych sytuacji w stopach [59].

Stop podwójny, zwany mosiądzem β , jest przykładem będącym zastosowaniem modelu Isinga. Składa się on z atomów cynku i miedzi, które tworzą regularną wzajemnie przenikającą się sieć, jako wynik nałożenia dwóch podsieci. W $T = 0 K$ stop zawiera jednakową liczbę obu rodzajów atomów, czyli mamy dwie regularne podsieci. Gdy temperatura rośnie coraz więcej atomów miedzi przechodzi do podsieci cynku i odwrotnie. W temperaturze $739 K$ podział na dwie podsieci przestaje istnieć, a w temperaturze wyższej niż $739 K$ liczba atomów miedzi i cynku w obu podsieciach jest jednakowa, czyli podział na obie podsieci załamuje się. Zakładamy, że energia układu jest obniżona o J na każde wiązanie pomiędzy różnymi atomami na najbliższych węzłach, a podwyższona o J pomiędzy równymi. Parametrem porządku może być s_i , które przyjmuje wartość $+1$, gdy węzeł jest zajęty przez atom miedzi, a -1 , gdy przez atom cynku. Zatem można energię układu opisać hamiltonianem modelu Isinga.

3. Magnetyczne własności ciał

Klasyfikacji materiałów pod względem ich własności magnetycznych można dokonać poprzez określenie, w jaki sposób reagują one na zewnętrzne pole magnetyczne, czyli jakie jest ich namagnesowanie. Miarą stopnia namagnesowania jest tzw. magnetyzacja (albo namagnesowanie). Magnetyzacja \vec{M} jest to moment magnetyczny przypadający na jednostkę objętości. Właściwości magnetyczne materiału zależą od podatności magnetycznej χ , którą w izotropowych materiałach określa następujący związek między namagnesowaniem \vec{M} i natężeniem pola magnetycznego \vec{H}

$$\vec{M} = \chi \vec{H} . \quad (3.1)$$

Zależnie od podatności magnetycznej wszystkie materiały można podzielić na rodzaje: diamagnetyki, paramagnetyki, ferromagnetyki, ferrimagnetyki i antyferromagnetyki.

Diamagnetyki mają podatność magnetyczną $\chi < 0$ i jest ona dla większości diamagnetyków niezależna od temperatury. W diamagnetykach wypadkowy moment magnetyczny tworzących je atomów jest zerowy. Zatem przy braku zewnętrznego pola magnetycznego diamagnetyk nie wykazuje namagnesowania. Jeżeli jednak próbka umieszczona zostanie w zewnętrznym polu magnetycznym, to w efekcie indukowany zostanie moment magnetyczny skierowany przeciwnie do kierunku zewnętrznego pola magnetycznego. Działa moment siły, który wymusza ustawienie się orbitalnego momentu magnetycznego wzdłuż kierunku zewnętrznego pola magnetycznego. Oś orbity elektronu zaczyna ulegać precesji z tzw. częstością Larmora. Zmianie ulega kierunek orbitalnego momentu pędu oraz kierunek orbitalnego momentu magnetycznego. Powstaje zatem wypadkowy orbitalny moment pędu, a co za tym idzie, również nowy indukowany orbitalny moment magnetyczny i jest skierowany przeciwnie do kierunku pola magnetycznego. W efekcie zewnętrzne pole magnetyczne jest osłabiane przez diamagnetyk.

Paramagnetyki charakteryzują się dodatnią podatnością magnetyczną, której wartość zależy od temperatury zgodnie z zależnością otrzymaną przez Langevina [36]

$$\chi = \frac{n\mu^2}{3k_B T} = \frac{C}{T} , \quad (3.2)$$

gdzie: n – koncentracja atomów, μ - moment magnetyczny pojedynczego atomu, a $C = \frac{n\mu^2}{3k_B}$

to stała Curie. Wzór (3.2) nosi nazwę prawa Curie.

W materiałach paramagnetycznych, gdy nie ma zewnętrznego pola magnetycznego, atomy mają różny od zera moment magnetyczny. Na skutek ruchów termicznych cząstek ich momenty magnetyczne są zorientowane w sposób nieuporządkowany. Gdy paramagnetyk zostanie umieszczony w zewnętrznym polu magnetycznym, momenty magnetyczne atomów (cząsteczek) dążą do ustawienia się równoległe do kierunku pola, czemu przeciwdziałają ruchy cieplne. Mimo ruchów cieplnych w stanie równowagi będzie znajdować się przeważająca część elementarnych magnesów, których momenty magnetyczne będą skierowane zgodnie z kierunkiem pola magnetycznego. Ciało uzyska wypadkowy moment magnetyczny. Ponieważ drgania sieci związane ze wzrostem temperatury działają destrukcyjnie na układanie się momentów magnetycznych wzdłuż linii pola magnetycznego, podatność magnetyczna zależy od temperatury. Niektóre z paramagnetyków poniżej pewnej charakterystycznej dla każdej substancji temperatury, zwanej temperaturą Curie, spontanicznie stają się uporządkowane magnetycznie.

Do materiałów, które poniżej pewnej krytycznej temperatury wykazują spontaniczne namagnesowanie bez przykładania zewnętrznego pola magnetycznego zaliczamy ferromagnetyki, antyferromagnetyki i ferrimagnetyki.

Ferromagnetyzm możliwy jest jedynie w kryształach zawierających atomy pierwiastków przejściowych, tzn. atomy mające niezapełnioną wewnętrzną powłokę elektronową, i powstaje w wyniku oddziaływania wymiennego elektronów z niezapełnionych powłok, przy czym oddziaływanie to jest efektem kwantowym. Wewnątrz ferromagnetyka tworzą się pewne niewielkie obszary, wielkości 1 - 10 μm , w których zachodzi uporządkowanie momentów magnetycznych. Obszary te nazywane są domenami magnetycznymi. W przypadku, gdy próbka nigdy wcześniej nie była umieszczana w polu magnetycznym, domeny rozmieszczone są losowo, a co za tym idzie ferromagnetyk nie wykazuje namagnesowania. Wystarczy jednak umieścić próbkę w polu magnetycznym, aby całe domeny zaczęły się porządkować, a próbka wykazywać namagnesowanie. Po usunięciu pola magnetycznego domeny nie powracają do poprzedniego położenia, a całe ciało wykazuje namagnesowanie. Temperatura T_o , w której znika spontaniczne namagnesowanie, nazywana jest temperaturą Curie lub temperaturą krytyczną. Dla temperatur $T > T_o$ ferromagnetyk zachowuje się w zewnętrznym polu magnetycznym tak jak paramagnetyk, przy czym podatność χ można wyrazić zależnością znaną jako prawo Curie-Weissa [30]:

$$\chi = \frac{C}{T - T_o}, \quad (3.3)$$

gdzie C to stała Curie-Weissa.

Antyferromagnetyzm występuje w substancji posiadającej antyrównoległe uporządkowane elementarne momenty magnetyczne w podsieciach sieci krystalicznej. Sieć antyferromagnetyka może być rozpatrywana jako wiele podsieci, z których w każdej momenty magnetyczne mają identyczny kierunek, ale uporządkowane ferromagnetycznie poszczególne podsieci mają przeciwne zwroty. Moment magnetyczny całej sieci jest zatem zerowy. Gdy dojdzie do zaburzenia tego uporządkowania może wytworzyć się spontaniczne namagnesowanie całej sieci. Przykładem antyferromagnetyka jest rozpowszechniony w przyrodzie minerał żelaza – hematyt. Poniżej temperatury krytycznej, zwanej temperaturą Néela, spiny są ustawione antyrównoległe, a podatność osiąga wartość maksymalną w tej temperaturze. Powyżej temperatury Néela uporządkowanie antyferromagnetyczne ulega zniszczeniu, a substancja staje się paramagnetykiem.

Ferrimagnetyzm to własność magnetyczna polegająca na tym, że w temperaturach poniżej temperatury Néela pojawia się spontaniczne antyrównoległe uporządkowanie elementarnych momentów magnetycznych na podsieciach, ale w odróżnieniu od antyferromagnetyzmu momenty te nie kompensują się wzajemnie do zera. Następuje częściowa kompensacja momentów magnetycznych, a układ wykazuje wypadkowe namagnesowanie. Uporządkowanie ferrimagnetyczne występuje zarówno w ciałach krystalicznych, jak i bezpostaciowych, poniżej temperatury Néela, natomiast powyżej tej temperatury staje się paramagnetykiem. Najważniejszymi ferrimagnetykami są: tlenki magnetyczne (ferryty) o strukturze spineli i granatów oraz niektóre stopy amorficzne.

4. Eksperyment komputerowy typu Monte Carlo

Układy o dużej liczbie stopni swobody pozwala badać mechanika statystyczna, której narzędzia można wykorzystać w eksperymencie komputerowym. Definiuje się go jako symulacje z modelowaniem komputerowym określające również niepewności obliczanych wielkości. Polega to na badaniu przedmiotowego układu złożonego (rzeczywistego lub hipotetycznego) przez obserwowanie zmian zachodzących w czasie w dynamicznym modelu tego układu pod wpływem zmieniających się warunków wewnętrznych i zewnętrznych w stosunku do tego układu. Celem eksperymentu komputerowego jest uzyskanie wyników łącznie z ich niepewnościami zgodnych z rzeczywistością w rozsądnym i praktycznie przydatnym czasie.

W programie komputerowym umieszczany zostaje model układu fizycznego i obserwuje się jego zachowanie w równowadze termodynamicznej. Model układu fizycznego opisywany jest tym samym hamiltonianem co układ. Jednak liczba możliwych mikrostanów układu rośnie eksponencjalnie z jego rozmiarem i dla większych układów obliczenia zajmują zbyt dużo czasu. Przykładowo dla modelu Isinga na sieci kwadratowej 3×3 mamy $2^9 = 512$ stanów i do posumowania wystarczy bardzo skromny komputer. Po nałożeniu okresowych warunków brzegowych otrzymujemy dobre wyniki dla temperatur dużo powyżej T_C (małe grupy spinów, sieć może być mała) oraz dużo poniżej T_C (tylko pojedyncze spiny są odwrócone). Jednak dla temperatur pośrednich wielkości są rozmyte w szerokim zakresie temperatur. Przy zwiększeniu układu do 10×10 liczba stanów będzie wynosić $2^{100} \approx 1,3 \cdot 10^{30}$ i sumowanie zajmie kilka razy wiek Wszechświata nawet najszybszym superkomputerom. Dlatego ważna jest taka strategia losowania nowej konfiguracji układu, która pozwoli określić właściwości termodynamiczne na podstawie małego podzbioru ze wszystkich konfiguracji. Można to zrealizować przez całkowicie przypadkowy wybór stanów, gdzie prawdopodobieństwo wyboru dowolnej konfiguracji jest jednakowe, stosując generatory liczb losowych. Jednak w czasie losowania uwzględnia się z równymi wagami stany wnoszące mały wkład w obliczane wielkości. I tak dla sieci kwadratowej 3×3 tylko 7 z 512 stanów daje 99,9% wkładu do sumy statystycznej Z przy $K = 1,1$, a przy $K = 2,2$ wystarczą tylko 2 stany. Z pomocą w tym przypadku przychodzi losowanie nieproste, zwane też próbkowaniem ważonym, które opiera się na prostej idei: w czasie symulacji spędzać najwięcej czasu przy stanach dających duży wkład do obliczanych wielkości i nie marnować czasu pracy

komputerów na pozostałe konfiguracje. Zapewnia nam to metoda Monte Carlo, czyli losowania stanów z rozkładem kanonicznym (Gibbsa), za pomocą liczb (pseudo)losowych.

Zauważmy, że w eksperymentach komputerowych rozpatrujemy układy o skończonych rozmiarach, a w moim przypadku są to sześciany o boku L . Następnie otrzymane wyniki przeskalowujemy do granicy termodynamicznej używając relacji skalowania skończenie-rozmiarowego omówionych w kolejnych podrozdziałach. Jednak ważne jest, by w tych skończonych układach efekty brzegowe wносиły nieduży wkład w porównaniu z zachowaniem objętościowym. Dla trzech wymiarów należy używać próbek z $L \geq 16$ [4, 5].

4.1. Metoda Monte Carlo

Metoda Monte Carlo (MC) zwykle jest stosowana do modelowania na tyle złożonych procesów, że nie można przewidzieć ich zachowania za pomocą podejścia analitycznego. Znajduje szerokie zastosowanie poczynając od symulacji fizycznych, dla których pierwotnie została stworzona, poprzez informatykę, do bankowości. Ostatnio wykorzystuje się metodę MC w nowych, prężnych dziedzinach informatyki, jak sieci neuronowe, systemy eksperckie czy poszukiwanie sztucznej inteligencji.

Istotną rolę w metodzie MC odgrywa losowanie wielkości charakteryzujących proces, które dokonywane jest zgodnie z rozkładem Gibbsa. Do wyboru konfiguracji układu stosowane są liczby pseudolosowe. Dla losowania stanów musimy zapewnić proces Markowa, dzięki któremu można otrzymać nową konfigurację układu z aktualnie istniejącej i nie wymagana jest wiedza o stanach poprzednich. Proces Markowa opiera się na regule, która stwierdza, że z każdą możliwą parą stanów α i α' związane jest prawdopodobieństwo przejścia P ze stanu α do α' w następnym kroku, a układ osiągnie inny stan, co można zapisać regułą sumacyjną

$$\sum_{\alpha'} P(\alpha \rightarrow \alpha') = 1. \quad (4.1.1)$$

Częstotliwość pojawienia się każdego stanu α jest proporcjonalne do jego prawdopodobieństwa, a zbiór tych generowanych stanów tworzy tzw. łańcuch Markowa. Przy czym prawdopodobieństwo przejścia musi spełniać zasadę dostępności, czyli punkt początkowy musi mieć możliwość osiągnięcia przez układ dowolnej innej konfiguracji wystarczająco wiele razy, oraz zasadę mikroodrębności, która wymaga, żeby zachodziła równość $p_{\alpha}P(\alpha \rightarrow \alpha') = p_{\alpha'}P(\alpha' \rightarrow \alpha)$, gdzie p_{α} to prawdopodobieństwo Gibbsa zdefiniowane w podrozdziale 1.1.

Najważniejszy i najczęściej używany algorytm dla procesu Markowa losowania stanów układu odkryli Metropolis i współpracownicy w 1953 roku [15]. Układ przechodzący ze stanu α do α' zmienia swoją energię, a problem polega na tym, że układ preferuje mikrostan o niższej energii. Jeśli $E_{\alpha'} - E_{\alpha} < 0$ to nowa konfiguracja jest akceptowana automatycznie, w przeciwnym przypadku jest akceptowana z prawdopodobieństwem

$$P(\alpha \rightarrow \alpha') = A^{-1} e^{-\beta(E_{\alpha'} - E_{\alpha})}, \quad (4.1.2)$$

gdzie A to stała normalizacyjna dobrana tak, aby był spełniony warunek (4.1.1).

Kluczową rolę odgrywają tu liczby pseudolosowe, a okres ich powtórzeń powinien być dużo większy od ich ilości używanej w symulacji.

Strukturę i działanie tego algorytmu przedstawię na konkretnym przykładzie i dla jasności w dalszej części tego podrozdziału wybrałam ideowo prosty model Isinga. Działanie algorytmu Metropolisa można podzielić na etapy [15]:

1. Ustalamy temperaturę T .
2. Generujemy stan początkowy (np. z losowo skierowanymi spinami).
3. Obliczamy energię układu E_{α} .
4. Losowo wybieramy jeden z węzłów układu i obracamy w nim spin.
5. Wyliczamy nową energię $E_{\alpha'}$ i różnicę energii $\Delta E = E_{\alpha'} - E_{\alpha}$.
6. Jeśli $\Delta E \leq 0$ akceptujemy nową konfigurację.
7. Jeśli $\Delta E > 0$ generujemy losową liczbę r o rozkładzie jednorodnym z przedziału $[0;1]$.
8. Jeśli $P \geq r$ akceptujemy nową konfigurację (dołączamy do zespołu); w przeciwnym wypadku spin obrócony w punkcie 4 przywracamy do początkowego stanu i oryginalną konfigurację dołączamy do zespołu.
9. Powracamy do punktu 4.

Na tak zwany krok Monte Carlo składają się etapy od 4 do 9.

Rodzi się pytanie o to, czy kolejne konfiguracje są niezależne. Prawdopodobieństwo znalezienia kolejnego stanu w $n + 1$ kroku zależy od stanu układu w kroku poprzednim. Problem ten rozwiązuje obliczenie funkcji autokorelacji wzdłuż ścieżki zmiany stanów korzystając ze wzoru

$$C(k) \equiv \frac{\langle X_{\alpha_j} X_{\alpha_{j+k}} \rangle - \langle X_{\alpha_j} \rangle^2}{\langle X_{\alpha_j}^2 \rangle - \langle X_{\alpha_j} \rangle^2}, \quad (4.1.3)$$

gdzie X_{α_j} – wartość wielkości termodynamicznej charakteryzującej układ w konfiguracji α_j wylosowanej w kroku j , a średnie są wyliczane wzdłuż tej ścieżki. Jeżeli do otrzymania wyników będziemy używali tylko co k -tego stanu, to każdy taki stan pojawi się z prawdopodobieństwem w równowagowym rozkładzie kanonicznym (Gibbsa), jeżeli tylko k będzie odpowiednio duże. C jest znormalizowana tak, że jest równa 1 dla $k = 0$, gdy wartości X są całkowicie skorelowane i jest równa 0 dla k na tyle dużego, że korelacji już nie ma. Powinniśmy obliczyć funkcję autokorelacji wzdłuż ścieżki zmiany stanów i zapamiętać wartość k , po której jest ona odpowiednio mała. Uważa się, że w całej symulacji zachowanie tej funkcji jest podobne i pomija się zawsze k mikrostanów układu, zanim weźmie się dany mikrostan do obliczeń wielkości termodynamicznych.

Jednak w miarę zbliżania się do temperatury krytycznej czas zaniku korelacji (liczba kroków k) wydłuża się. Zatem mamy do czynienia ze spowolnieniem krytycznym, które spowodowane jest zwiększeniem się zasięgu korelacji w tym obszarze temperatur. Pojawia się coraz więcej coraz rozleglejszych wysp uporządkowanych spinów, więc musi istnieć rozsądna szansa odwrócenia wszystkich spinów w takiej wyspie, aby otrzymać statystycznie niezależną konfigurację. Jest to trudne przy odwracaniu pojedynczego spinu na raz za pomocą algorytmu Metropolis'a i mało prawdopodobne, bo wymaga dużej energii.

Czas autokorelacji zależy od długości korelacji co wynika z zależności

$$\tau = \xi^z, \quad (4.1.4)$$

gdzie z to dynamiczny wykładnik krytyczny i dla modelu Isinga $z = 2$ dla dowolnego procesu Markowa, w którym spiny odwracane są pojedynczo. Natomiast ξ jest długością korelacji określającą maksymalny rozmiar fluktuacji w układzie. Ta cecha to dynamiczna uniwersalność. Oczywiście długość korelacji w skończonym układzie nie może przekraczać jego rozmiaru L .

Istnieją algorytmy które odwracają całe grupy spinów, np. algorytm Swendsena-Wanga [16] i Wolffa [17]. W algorytmie Swendsena-Wanga układ decyduje o kształcie grupy spinów, tzw. klasteru, które są odwracane jednocześnie. Jeden krok tego algorytmu można przedstawić w postaci następujących etapów [16]:

1. Utworzenie wiązania między sąsiednimi równoległymi spinami.
2. Losowe usunięcie wiązań z prawdopodobieństwem $e^{-4\beta J}$.
3. Potraktowanie spinów w klasternach jako pojedyncze jednostki.
4. Zorientowanie tych jednostek przypadkowo.

Procedura powyższa to pojedynczy krok Monte Carlo. Należy zauważyć, że jest możliwe, że wszystkie wiązania zostaną usunięta, a wtedy jeden dowolny stan może przejść w inny w pojedynczym kroku, czyli spełnione jest kryterium dostępności. Ponadto spełnia także warunek mikroodwracalności, gdyż dla pary konfiguracji α i α' , które transformują się jedna w drugą w pojedynczym kroku Swendsena-Wanga istnieje droga od α' do α przez dokładnie ten sam diagram wiązań. Jeżeli przy przejściu od α do α' usunięto n_1 wiązań, a w drodze powrotnej n_2 to stosunek prawdopodobieństw dla tych dwóch dróg wynosi $e^{4(n_1-n_2)\beta J}$. Wyrażenie n_1-n_2 oznacza różnicę między liczbą sąsiadujących par spinów równoległych w konfiguracjach α i α' , czyli różnica energii między tymi dwiema konfiguracjami jest równa $4J(n_1-n_2)$. Zatem stosunek prawdopodobieństwa przejścia w jedną i drugą stronę po tej drodze jest równy $e^{-4\beta(E_{\alpha'}-E_{\alpha})}$ jak tego wymaga kryterium mikroodwracalności.

W tym algorytmie $z = 0,35$, czyli spowolnienie krytyczne jest w nim mniejszym problemem niż w algorytmie Metropolis.

Algorytmem, w którym całkowicie wyeliminowano problem spowolnienia krytycznego, jest algorytm Wolffa, czyli tutaj wykładnik z ma wartość bliską lub równą zero. Można w nim wyróżnić kolejne etapy [17, 31]:

1. Wylosowanie węzła i w sieci.
2. Odwiedzenie wszystkich sąsiednich węzłów j i dodanie j do klasteru zawierającego i z prawdopodobieństwem

$$P = 1 - e^{\min(0, 4\beta J s_i s_j)}. \quad (4.1.5)$$

3. Powtarzanie kroku 2 z i równym po kolei wszystkim j , które dołączyły do klasteru.
4. Powtarzanie kroku 3 tak długo aż nie będzie można dodać nowych węzłów.
5. Odwracanie spinów we wszystkich węzłach w tak otrzymanym klasterze.

Powyższa procedura również spełnia kryterium dostępności, gdyż zawsze istnieje niezerowe prawdopodobieństwo tego, że klaster będzie zawierał tylko pojedynczy spin, a odwracanie sekwencji pojedynczych spinów pozwala osiągnąć dowolną konfigurację, jak i kryterium mikroodwracalności. W celu uzasadnienia tego rozważę dwie konfiguracje α i α' , których spiny przyjmują wartości $\{s_i\}$ i $\{s'_i\}$ oraz które przechodzą w siebie przez odwrócenie pojedynczego klasteru spinów, który zostaje oznaczony przez C . Stosunek prawdopodobieństw przejścia w obie strony wynosi

$$\begin{aligned}
\frac{P(\alpha \rightarrow \alpha')}{P(\alpha' \rightarrow \alpha)} &= \prod_{(i \in C, j \notin C)} \frac{1 - P_{\text{dodaj}}(s_i, s_j)}{1 - P_{\text{dodaj}}(s_i', s_j')} \\
&= \exp\left[4\beta J \sum_{(i \in C, j \notin C)} s_i s_j\right] \\
&= \exp\left[-\beta(E_{\alpha'} - E_{\alpha})\right]
\end{aligned} \tag{4.1.6}$$

Prawdopodobieństwa, że spiny nie dodadzą się do krawędzi klastru, nie redukują się lecz dają czynnik $e^{4\beta J}$ dla każdej pary (i, j) równoległych spinów na krawędzi i czynnik $e^{-4\beta J}$ dla każdej pary antyrównoległej.

Można zauważyć, że liczba kroków w algorytmie Wolffa, które są potrzebne do osiągnięcia stanów niezależnych nie zależy od temperatury. Jednak w miarę zbliżania się do temperatury krytycznej powstają coraz częściej duże klaster, zatem rośnie liczba operacji, które muszą być wykonane w jednym kroku, a co za tym idzie czas obliczeń numerycznych znacznie wydłuża się. Warto zauważyć, że Wojtkowiak i Musiał [31] zastosowali algorytm klastrowy dla 3W modelu Ashkina-Tellera po raz pierwszy w literaturze przedmiotu w 2020 roku, co umożliwiło mi zweryfikowanie zgodności wyników, które wcześniej zostały otrzymane z wykorzystaniem algorytmu Metropolis.

Omówione algorytmy Swensena-Wanga i Wolffa dają dobre wyniki dla szerokiej klasy układów i używając ich można przeprowadzać obliczenia dla układów o dużej długości korelacji, a liczba kroków Monte Carlo niezbędna do otrzymania statystycznie niezależnych wyników nie jest zbyt wielka. Jednak nie zawsze wielkości charakteryzujące zachowanie krytyczne, np. wykładniki krytyczne, mogą być otrzymane bezpośrednio z symulacji. Niekiedy trzeba przeprowadzać symulacje dla różnych temperatur, a fluktuacje namagnesowania w pobliżu temperatury krytycznej stają się bardzo duże i aby otrzymać wiarygodne wyniki symulacje powinny być przeprowadzane przez odpowiednio długi czas.

Zdefiniuję teraz termin kroku Monte Carlo (MCS, od ang. Monte Carlo step) w moich eksperymentach komputerowych, który zwykle jest stosowany w literaturze przedmiotu i będzie używany w dalszej części mojej pracy. W algorytmie Metropolis [15] jeden MCS kończy się, gdy każdy z węzłów sieci został odwiedzony raz (wybierany systematycznie lub losowo). Oczywiście zmiana energii oddziaływania pary spinów w układzie jest równa $e^{-2(K_2+K_4)}$ przy odwróceniu pojedynczego spinu. W przypadku algorytmu klastrowego typu Wolffa jeden MCS jest zakończony, gdy skumulowana liczba odwróconych spinów w kilku próbkowanych klastrach jest równa (ewentualnie może być nieco większa) liczbie spinów w sieci.

4.2. Wstępna lokalizacja punktów przemian fazowych – kumulanty Bindera

Jednym ze sposobów opisu liczbowego rozkładu prawdopodobieństwa zmiennych losowych są tzw. momenty zmiennych losowych. Najważniejszym momentem jest wartość oczekiwana zmiennej M , którą oznaczę jako $\langle M \rangle$, zwana także wartością przeciętną, czy nadzieją matematyczną. Jest to spodziewany wynik doświadczenia losowego przy założonym prawdopodobieństwie p jego wystąpienia. Wartość oczekiwana jest pierwszym momentem rozkładu danej zmiennej losowej definiowanym jako

$$\langle M \rangle = \sum_i p_i M_i, \quad (4.2.1)$$

gdzie sumowanie przebiega po mikrostanach, jak we wzorze (1.1.3).

Ogólnie moment rzędu n (gdzie $n = 1, 2, \dots$) zmiennej losowej M to wartość oczekiwana n -tej potęgi tej zmiennej

$$\langle M^n \rangle = \sum_i p_i M_i^n. \quad (4.2.2)$$

Ilorazy momentów zmiennej tworzą wielkości bezwymiarowe zwane kumulantami. W mojej pracy do opisu przemian fazowych w 3W modelu AT będę wykorzystywać momenty rzędu n , które będą wyrażały n -tą potęgę parametru porządku stopni swobody α , gdzie $\alpha = s, \sigma$, a także ich iloczynu $s\sigma$, uśrednionych po wylosowanych stanach.

Do wstępnego zlokalizowania punktów przemian fazowych dla ustalonych wartości stałej sprzężenia K_4 wykorzystuję kumulanty Bindera Q_L [8] zaadoptowane przez Musiała i in. dla 3W modelu AT [12] w postaci

$$Q_{\alpha,L} = \frac{\langle M_\alpha^2 \rangle_L^2}{\langle M_\alpha^4 \rangle_L}, \quad (4.2.3)$$

gdzie $\langle M_\alpha^n \rangle_L$ oznacza n -ty moment parametru porządku stopni swobody α , $\alpha = s, \sigma$ lub ich iloczynu $s\sigma$, uśredniony po zespole niezależnych próbek o rozmiarach $L \times L \times L$, zaś M_α to średnia wartość stopnia swobody α przypadająca na jeden węzeł sieci. Analiza tych kumulant jest pomocna w znalezieniu wstępnej wartości krytycznej stałej sprzężenia K_2 . Jeśli zostanie wykreślona krzywa $Q_L(K_2)$ dla sieci o rozmiarze L , a następnie kolejna krzywa $Q_{L'}(K_2)$ dla sieci o mniejszej wartości rozmiaru L' to dla $K_2 < K_{2,C}$ jest $Q_L < Q_{L'}$, a dla $K_2 > K_{2,C}$ jest $Q_L > Q_{L'}$ [8]. Dzięki tej własności nastąpi przecięcie krzywych obu kumulant w pobliżu krytycznej wartości $K_{2,C}$.

Ta metoda pozwala wstępnie lokalizować punkty przemian fazowych zarówno ciągłych, jak i nieciągłych, niezależnie dla każdego parametru porządku. Odczytując przedział odciętych punktów, w których przecinają się krzywe $Q_L(K_2)$ dla różnych rozmiarów, można wstępnie oszacować krytyczną wartość stałej K_2 z dokładnością rzędu 3 cyfr znaczących dla przemian pierwszego rodzaju i do 4 cyfr znaczących dla przemian ciągłych. Przy czym im mniejsza wartość ciepła przemiany, tym to oszacowanie położenia regionu krytycznego jest precyzyjniejsze. Niepewności powinny być tutaj ostrożnie szacowane, ponieważ jest to tylko przybliżone wskazanie obszaru krytycznego [21].

Warto zauważyć, że dla ciągłych przemian fazowych wartość kumulanty Q w punkcie krytycznym, wyznaczana jako średnia wartość rzędnych punktów, w których przecinają się krzywe $Q_L(K_2)$ dla różnych rozmiarów, ma wartość uniwersalną, co pozwala przeskalować wyniki uzyskane dla skończonego rozmiarowego układu do granicy termodynamicznej [12,19].

4.3. Ustalenie charakteru przemian fazowych – kumulanty typu Challi

Do rozróżnienia pomiędzy ciągłą i nieciągłą przemianą fazową w układach z wieloma niezależnymi parametrami porządku wykazującymi niezależne uporządkowanie, a także do wyznaczenia ciepła przemiany i do znacznie lepszego oszacowania krytycznej wartości stałej sprężenia K_2 przy ustalonej wartości stałej K_4 , wykorzystujemy kumulanty typu Challi [5] zmodyfikowane przez Musiała [4] dla ustalonej wartości stałej sprężenia K_4 , które są postaci:

$$V_{\alpha,L} = 1 - \frac{\langle E_\alpha^4 \rangle_L}{3 \langle E_\alpha^2 \rangle_L^2}, \quad (4.3.1)$$

gdzie $\langle E_\alpha^n \rangle_L$ oznacza n -ty moment energii wewnętrznej E z całego hamiltonianu H (2.4.2) lub z jednego z jego członów dla stopni swobody α ($\alpha = s, \sigma$ lub ich iloczynu $s\sigma$) uśredniony po zespole niezależnych próbek o rozmiarach $L \times L \times L$. Pragnę podkreślić, że tylko rozpatrywanie energii każdego z członów hamiltonianu (2.4.2) osobno daje możliwość uzyskania wkładu od poszczególnych stopni swobody do ciepła przemiany fazowej. Dla ciągłej przemiany fazowej wartość $V_{\alpha,L} = 2/3$ w granicy $L \rightarrow \infty$ i pozostaje stała również daleko od temperatury krytycznej. Zaś dla nieciągłej przemiany fazowej zależności $V_{\alpha,L}(K_2)$ mają wyraźne minima w okolicy $K_2 = K_{2,C}$ i, co więcej, zachodzi [5]

$$V_{\alpha,L \rightarrow \infty}^{\min} = 1 - \frac{2(E_+^4 + E_-^4)}{3(E_+^2 + E_-^2)^2} - \frac{c_V}{L^d}, \quad (4.3.2)$$

gdzie c_v to skomplikowane wyrażenie, którego wartość nie zależy od L , ani od K_2 , u mnie wymiar $d = 3$, przy czym $E_{\pm} = \langle E_{\alpha} \rangle (K_2 \rightarrow K_{2,c} |_{\pm})$ w granicy termodynamicznej. Ze wzoru (4.3.2) wynika, że wartość tego minimum $V_{\alpha,L}^{\min}$, jak i jego lokalizacja K_2^{\min} skalują się liniowo w funkcji L^{-3} , co pozwala mi ekstrapolować wartości tych dwu parametrów do granicy termodynamicznej. Pierwsza z nich przy wykorzystaniu wzoru (4.3.2) pozwoli wyznaczyć ciepło przemiany fazowej, a druga da znacznie lepsze oszacowanie krytycznej wartości stałej sprężenia K_2 przy ustalonej wartości stałej K_4 . Należy jednak zastrzec, że wzór (4.3.2) został wyprowadzony przy założeniu, że przemiana fazowa jest słaba i w konsekwencji $P(E)$ dla obydwu faz uporządkowanej i nieuporządkowanej jest sumą Gaussianów o równych wagach statystycznych, dlatego załamuje się stopniowo przy przejściach do silniejszych przemian fazowych. Zasadność tego założenia była kwestionowana w literaturze przedmiotu [3,43], dlatego do tej kontrowersji odniosę się na gruncie 3W modelu AT przy interpretacji wyników uzyskanych przeze mnie.

Lee i Kosterlitz [3] przyjmując, że przemiana fazowa jest silna, wyprowadzili nowe wyrażenie arytmetyczne dla wartości minimum kumulant $V_{\alpha,L}^{\min}$:

$$V_{\alpha,L \rightarrow \infty}^{\min} = \frac{2}{3} - \frac{1}{12} \left(\frac{E_{a,+}}{E_{a,-}} - \frac{E_{a,-}}{E_{a,+}} \right)^2 + \frac{c'_v}{L^3}, \quad (4.3.3)$$

gdzie c'_v jest złożonym wyrażeniem niezależnym od L , ani od K_2 , podobnie jak c_v we wzorze (4.3.2). Również ze wzoru (4.3.3) wynika, że wartość tego minimum $V_{\alpha,L}^{\min}$, jak i jego lokalizacja K_2^{\min} skalują się liniowo w funkcji L^{-3} , co pozwala mi ekstrapolować wartości tych dwu parametrów do granicy termodynamicznej.

Chociaż wzór (4.3.3) został wyprowadzony dla silnych przemian fazowych to jednak wyniki moich obliczeń i ich analizy wskazują na to, że daje on poprawne wyniki również dla słabych przemian fazowych. W tym ostatnim przypadku wyniki otrzymane z wykorzystaniem wzorów (4.3.2) i (4.3.3) pozostają zgodne w granicach niepewności pomiarowych. Należy zauważyć, że równanie (4.3.3) uzyskali niezależnie Borgs, Kotecky i Miracle-Sole [43] przy dużo ogólniejszych założeniach.

4.4. Przemiany fazowe pierwszego rodzaju – kumulanty typu Lee-Kosterlitz

J. Lee i J. M. Kosterlitz do badania przemian fazowych pierwszego rodzaju oprócz kumulanty Challi zaproponowali kumulanty U_L [3] zmodyfikowane przez nas dla modelu AT [18]:

$$U_{\alpha,L} = \frac{\langle E_{\alpha}^2 \rangle_L}{\langle E_{\alpha} \rangle_L^2}, \quad (4.4.1)$$

gdzie $\langle E_{\alpha}^n \rangle_L$ oznacza n -ty moment energii wewnętrznej E z całego hamiltonianu H (2.4.2) lub z jednego z jego członów dla stopni swobody α ($\alpha = s, \sigma$ lub ich iloczynu $s\sigma$) uśredniony po zespole niezależnych próbek o rozmiarach $L \times L \times L$. Na wykresie zależności $U_{\alpha,L}(K_2)$ wykazują maksima, których wartości w granicy $L \rightarrow \infty$ dla ciągłych przemian fazowych przeskalowują się do wartości 1. Dla przemian fazowych pierwszego rodzaju mamy

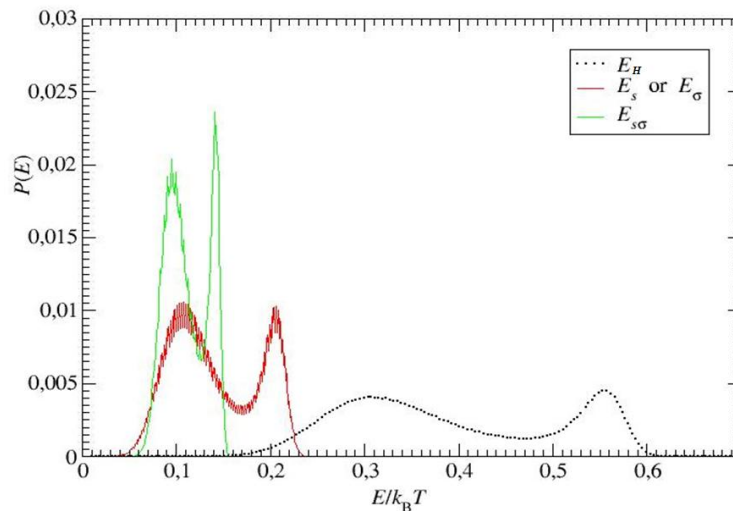
$$U_{\alpha,L \rightarrow \infty}^{max} = \frac{(E_{\alpha,+} + E_{\alpha,-})^2}{4 E_{\alpha,-} E_{\alpha,+}} + \frac{c_U}{L^d}, \quad (4.4.2)$$

gdzie c_U to wyrażenie o skomplikowanej postaci, którego wartość nie zależy od L , ani od K_2 . Podobnie jak przy wzorach (4.3.2) i (4.3.3), wartość tego maksimum $U_{\alpha,L}^{max}$, jak i jego lokalizacja K_2^{max} skalują się liniowo w funkcji L^{-3} , co pozwala mi ekstrapolować wartości tych dwu parametrów do granicy termodynamicznej.

4.5. Wykorzystanie histogramu rozkładu energii wewnętrznej

Wykorzystanie histogramu rozkładu energii w symulacjach typu Monte Carlo temperaturowych przemian fazowych pierwszego rodzaju w układach o skończonych rozmiarach L^d , gdzie d oznacza wymiar układu (tutaj $d = 3$), z nałożonymi periodycznymi warunkami brzegowymi zostało rozwiązane na przełomie dekad 1980 i 1990 (zob. [1-3] i prace tam cytowane). Podobnie jak w q -stanowym modelu Potts'a z q równoważnymi uporządkowanymi stanami i jednym nieuporządkowanym [3], również w 3W modelu AT zaobserwowaliśmy charakterystyczny histogram o dwóch pikach w obszarze krytycznym [18]. To jest pierwsze zastosowanie tej metody do modelu AT w literaturze przedmiotu. Przykład otrzymanego przeze mnie histogramu jest zobrazowany na rysunku 4.5.1 dla parametru $K_4 = 0,1$ przy wartości $K_2 = 0,18381(6)$ wyznaczonej przeze mnie jako wartość krytyczna na podstawie analiz zachowania się kumulant typu Bindera [8], Challi [5] i Lee-

Kosterlitz [3], przedstawionych odpowiednio w podrozdziałach 4.2, 4.3 i 4.4. Maksima tych pików pojawiają się przy wartości energii $E_{\alpha L_+}$ dla stanu nieuporządkowanego oraz $E_{\alpha L_-}$ dla stanu uporządkowanego i są rozdzielone minimum o wartości $E_{\alpha L, m}$. Warto zauważyć, że dla wystarczająco silnej przemiany fazowej pierwszego rodzaju charakterystyczny histogram rozkładu energii wewnętrznej w rejonie krytycznym ma dwa piki, zaś dla ciągłych przemian fazowych można zaobserwować tylko jeden pik. Praktycznie w całym obszarze badanego przeze mnie diagramu fazowego, wzdłuż linii APF_b na rys. 2.4.1, każdy z trzech parametrów porządku ma tę samą wartość krytyczną K_2 .



Rys. 4.5.1 Charakterystyczny histogram rozkładu energii wewnętrznej o dwóch pikach w obszarze krytycznym dla 3W modelu AT przy $K_4 = 0,1$ i przy wartości krytycznej $K_2 = 0,18381(6)$ dla stopni swobody α opisanych w legendzie. Jak pokazuje okienko legendy, krzywa oznaczona jako E_H przedstawia wykres prawdopodobieństwa P energii z całego hamiltonianu H , a pozostałe prawdopodobieństwa energii poszczególnych członów tego hamiltonianu wskazanych w indeksach dolnych.

Jednak analiza energii całego układu nie daje mi wglądu w indywidualne zachowanie się poszczególnych stopni swobody układu s , σ i ich iloczynu $s\sigma$, wykazujących niezależne uporządkowanie. Żeby obliczyć indywidualny wkład każdego z tych trzech stopni swobody układu do ciepła przemiany, zaproponowałam [18] przeanalizowanie także zachowania energii oddziaływania poszczególnych stopni swobody, czyli energii z każdego z trzech członów hamiltonianu (2.4.1) osobno.

Technicznie ten histogram wyznaczam dzieląc przedział wszystkich energii E (w jednostkach $k_B T$) pojawiających się w moich eksperymentach komputerowych na małe podprzedziały (tutaj na ogół o szerokości 0,001) i program zlicza występowanie energii w poszczególnych podprzedziałach. Następnie dzieląc w tym programie otrzymane wartości

poszczególnych zliczeń przez ich sumę, czyli ilość kroków MC, otrzymuję wartości prawdopodobieństwa P pojawiania się energii w poszczególnych podprzedziałach. Stosownie do treści poprzedniego akapitu, oprócz histogramu całej energii układu, obliczam także histogramy energii poszczególnych członów hamiltonianu (2.4.1).

Dzieląc stronami przez ilość kroków MC wzór (2.1) w pracy [3] po lewej stronie otrzymuję prawdopodobieństwo wystąpienia energii E w układzie o skończonym rozmiarze L^d w postaci

$$P_L(E, \beta) = Z^{-1}(\beta, L) \Omega(E, L) e^{-\beta E} \quad (4.5.1)$$

gdzie Z jest sumą stanów zdefiniowaną wzorem (1.1.1), a Ω liczbą stanów o energii E . Ciekawe własności wykazuje funkcja $-\ln P_L(E, \beta)$, która ma minima przy $E = E_{\alpha, L, \pm}$ rozdzielone maksimum przy $E = E_{\alpha, L, m}$. Różnica $E = E_{\alpha, L, m}$ oraz $E = E_{\alpha, L, +}$ jest równa $\Delta F(L)$, wysokości bariery energii swobodnej pomiędzy stanami uporządkowanym i nieporządkowanym, która nie zależy od ilości kroków MC [1, 3]. Przy ciągłych przemianach fazowych wielkość $\Delta F(L)$ nie zależy od rozmiaru układu L , natomiast przy przemianie fazowej pierwszego rodzaju jest rosnącą funkcją L , która przy $L \gg \xi$ wzrasta proporcjonalnie do L^{d-1} , gdzie ξ jest długością korelacji podczas tej przemiany. Własność ta wynika stąd, że w pobliżu przemiany fazowej pierwszego rodzaju funkcja $F(E, L)$ ma rozwinięcie [1,3]

$$F(E, L) = L^d f_0(E) + L^{d-1} f_1(E) + \dots \quad (4.5.2)$$

gdzie $f_0(E)$ jest przestrzenną energią swobodną mającą minimum przy $E_+ \geq E \geq E_-$ pozostając stałą w tym przedziale, zaś $f_1(E)$ jest powierzchniową energią swobodną z maksimum przy wartości E_m . Z równania (4.5.2) wynika, że funkcja $F(E, L)$ ma dwa minima przy $E = E_+(L)$ oraz $E_-(L)$ oraz że

$$E_i(L) - E_i = OL^{-(d-1)}, \quad (4.5.3)$$

gdzie $i = +$ lub $-$, a wartości energii dla skończonych układów $E_i(L)$ liniowo zbliżają się do przestrzennych wartości E_i w funkcji $L^{-(d-1)}$, przy czym zależność (4.5.3), podobnie jak kumulanta U_L (4.4.1), została wyprowadzona przy założeniu, że przemiana fazowa jest silna pierwszego rodzaju [1,3]. Dzięki temu mogę na podstawie tych wyników obliczyć wprost ciepło przemiany l :

$$l = E_+ - E_- \quad (4.5.4)$$

W układach z jednym niezależnym parametrem porządku, jak model Isinga, czy q -stanowy model Potts'a, zależność (4.5.3) została wykorzystana jako relacja skalowania skończenie-rozmiarowego (zob. np. [1,2,3] i prace tam cytowane). W tych pracach dla modeli dwuwymiarowych ($d = 2$) położenia minimów $E_i(L)$ zależności $-\ln P_L(E, \beta)$ uzyskane dla

skończonych próbek w funkcji L^{-1} wykazują dobrą liniową skalowalność do granicy termodynamicznej do wartości E_i znanych z obliczeń analitycznych.

Dla sprawdzenia poprawności otrzymanych wyników ważne będzie sprawdzenie w podrozdziale 5.4, czy podobne analizy wykonane dla całej energii układu oraz dla energii oddziaływania trzech stopni swobody układu s , σ i ich iloczynu $s\sigma$, wykazujących niezależne uporządkowanie, czyli dla każdego z trzech członów hamiltonianu (2.4.1) osobno, dadzą spójne wyniki. Dodatkowo sprawdzę, czy będą one zgodne z rezultatami uzyskanymi z niezależnych analiz zachowania kumulant w podrozdziałach 5.1 do 5.3.

4.6. Przetwarzanie równoległe

Z powodu ograniczeń wydajności pojedynczych komputerów, spowodowanych skończoną szybkością rozchodzenia się sygnału i dyssypacji energii, dzisiejsze procesory i pamięci komputerów mają architekturę rozproszoną o coraz większej skali. Pojawia się jednak poważny problem, jak wykorzystać rozproszoną moc takich komputerów, gdy tradycyjna aplikacja z przetwarzaniem sekwencyjnym wykorzysta zaledwie jeden rdzeń procesora, co stanowi bardzo mały procent mocy przetwarzania całego komputera. Tu z pomocą przychodzi przetwarzanie równoległe. Sprzężenie mocy obliczeniowej wielu dziesiątek, setek czy tysięcy procesorów, wykorzystując klastry czy gridy komputerowe, zwiększa możliwości analizy układów o skali większej o kilka rzędów wielkości. Zatem przetwarzanie równoległe to użycie równoległego systemu komputerowego w celu skrócenia czasu rozwiązania pojedynczego problemu, a wykonuje się je na dużych ilościach danych, gdy przetwarzanie sekwencyjne wymaga zbyt dużo czasu. Poza tym w przetwarzaniu sekwencyjnym, aby rozwiązać problem obliczeniowy, tworzony jest algorytm, który składa się z ciągu instrukcji, które są wykonywane, w ustalonej kolejności na jednej jednostce obliczeniowej. Nie można wykonywać więcej niż jednej instrukcji jednocześnie – po ukończeniu jednej instrukcji, wykonywana jest kolejna. Natomiast w obliczeniach równoległych, aby rozwiązać dany problem, wykorzystuje się wiele jednostek obliczeniowych jednocześnie. Można tak postąpić, dzieląc problem na mniejsze, niezależne części, z których jedna może być wykonywana niezależnie od pozostałych. Jeśli uda się przeprowadzić taki podział, każda z części może być wykonana na innej jednostce obliczeniowej w tym samym czasie co pozostałe.

W przetwarzaniu równoległym można wyróżnić multiprocesory, gdy pamięć operacyjna jest współdzielona przez procesory, oraz multikomputery, gdy pamięć jest

rozproszona pomiędzy procesory. W pierwszym przypadku mamy szybką komunikację przez współdzielone obszary pamięci, a do zrównoleglenia przetwarzania wykorzystuje się wątki wykonujące się współbieżnie. W drugim przypadku do komunikacji i synchronizacji równoległe wykonujących się procesów służy wymiana komunikatów.

Obecnie standardem dla modelu wymiany komunikatów jest MPI (od ang. Message Passing Interface). Jest zbiorem precyzyjnie zdefiniowanych metod, które mogą być efektywnie zaimplementowane. Standard ten w postaci biblioteki MPI nie obciąża procesora operacjami kopiowania pamięci umożliwiając efektywną komunikację i może być stosowany w środowisku heterogenicznym. Udostępnia mechanizmy komunikacji punkt-punkt oraz zbiorowej (dla grup procesów), może być używany na wielu platformach, tak równoległych jak i skalarnych, bez większych zmian w sposobie działania. Aplikacja wykorzystująca funkcje (jak w języku C) czy procedury (jak języku Fortran) biblioteki MPI składa się z niezależnych procesów współbieżnie operujących danymi. Każdy proces ma własną przestrzeń adresową, a w standardzie MPI-2 wykorzystanie obszarów pamięci współdzielonej z jednostronnymi operacjami zapisu i odczytu (środowisko biblioteki MPI zapewnia wzajemne wykluczanie przy tych operacjach) też jest możliwe. Poszczególne procesy mogą być wielowątkowe.

W eksperymentach komputerowych, w których jako model wykorzystujemy układ o dużym rozmiarze liniowym L , czas obliczeń pojedynczej średniej cząstkowej jest bardzo długi, wiele tygodni, a nawet miesięcy. Jednak należy pamiętać, że im większy jest rozważany układ tym uzyskane rezultaty są bliższe wynikom odpowiadającym makroskopowym systemom i ekstrapolacje otrzymanych wyników do granicy termodynamicznej, wykorzystujące skalowanie skończenie-rozmiarowe, są dokładniejsze. Zastosowanie przetwarzania równoległego znacznie skraca czas tych obliczeń, a obliczenia równoległe są raczej konieczne dla systemów o $L \geq 70$. Dlatego w naszej publikacji [11] zaproponowaliśmy schemat zrównoleglenia, który kieruje procesami w symulacjach typu Monte Carlo uruchamianych w silnie heterogenicznych (różnorodne komputery składowe, z różnymi procesorami, albo różnie obciążone) systemach komputerowych. Rozważaliśmy dwuwymiarowy model Isinga na sieci kwadratowej w stałym, jednorodnym polu magnetycznym. Zgodnie z tym schematem system był doprowadzany do stanu równowagi niezależnie w każdym równoległym procesie, a do tego celu stosowane było wygrzewanie długości rzędu 10^6 kroków Monte Carlo. Stosowaliśmy różne zestawy liczb losowych w każdym równoległym procesie, gdyż tylko wtedy średnie cząstkowe można traktować jako niezależne.

Przyspieszenie obliczeń u jest definiowane jako

$$u = \frac{t_{ser}}{t_{par}}, \quad (4.6.1)$$

gdzie t_{ser} i t_{par} to odpowiednio czasy przetwarzania sekwencyjnego i równoległego. My użyliśmy takiej liczby procesów p , która była całkowitym dzielnikiem liczby średnich cząstkowych k . Dzięki temu w każdym równoległym procesie została użyta ta sama liczba średnich cząstkowych i każdy równoległy proces był obciążony jednakowo, czyli $k = ip$. Jeżeli założymy, że nie ma opóźnień między równoległymi procesami, to przyspieszenie powinno być wyrażone wzorem

$$u = \frac{t_0 + ipt_1}{t_0 + it_1}, \quad (4.6.2)$$

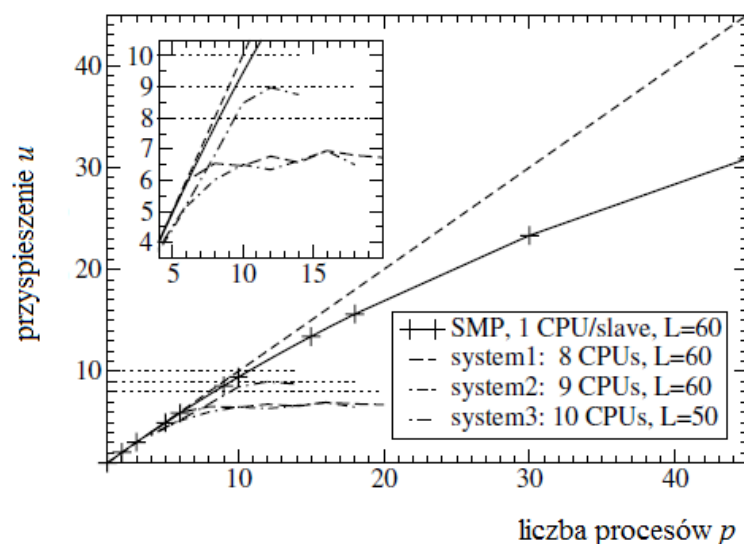
gdzie t_0 to czas potrzebny do doprowadzenia systemu do stanu równowagi, a t_1 to czas obliczeń jednej średniej cząstkowej obliczanych wielkości. Zwykle $t_0 = t_1$ zatem otrzymamy

$$u = \frac{1 + ip}{1 + i}. \quad (4.6.3)$$

Idealne przyspieszenie $u = p$ uzyskujemy, gdy i , wyrażone jako stosunek liczby średnich cząstkowych do liczby procesów, będzie dużo większe od jedności.

Na wykresie 4.6.1 [11] przedstawiona została zależność przyspieszenia obliczeń od liczby równoległych procesów – uzyskane rezultaty to ciągła linia, a idealne przyspieszenie dla $u = p$ przedstawia przerywana linia. Kropkowane linie pokazują ilość procesorów w poszczególnych systemach komputerowym objaśnionych w okienku legendy, które stanowią naturalną granicę ich przyspieszenia. Przyczyną odstępstwa od idealnego przyspieszenia (wynikającego ze zwiększenia liczby procesów) jest to, że część komputerowego czasu w każdym równoległym procesie (dokładnie jest to czas obliczania $w = 5$ średnich cząstkowych) jest zużywana na niezależne wygrzewanie systemu. Dla małych p na ciągłej linii widać, że opóźnienie było niewielkie podczas tych obliczeń, bo zmniejszenie przyspieszenia w porównaniu z idealnym przyspieszeniem było głównie efektem zmniejszenia stosunku liczby kroków Monte Carlo zużytych do obliczeń średnich cząstkowych do liczby kroków zużytych w wygrzewaniu. To jest wyraźnie widoczne dla punktu z $p = 45$, dla których tylko 10 średnich cząstkowych było obliczanych, a wygrzewanie zabrało aż $w = 5$ czasów obliczania średniej cząstkowej, czyli 1/3 wszystkich kroków Monte Carlo w procesie. Stąd im mniej średnich cząstkowych tym gorsza skalowalność symulacji (czyli podzielność obliczeń pomiędzy równoległe procesy).

Nieregularne krzywe na wykresie 4.6.1 pokazują wpływ liczby procesorów i różnych rozmiarów symulowanych układów L podanych w legendzie na zależność $u(p)$. Przyspieszenie zwiększa się ze wzrostem liczby procesorów p , kiedy p nie przekracza liczby procesorów. Zatem, żeby mieć duże przyspieszenie obliczeń u i efektywność obliczeń $E = u/p$, każdy spośród p równoległych procesorów powinien spełniać warunek $k/p \gg w$.



Rys. 4.6.1 Zależność przyspieszenia od liczby równoległych procesorów [11]. Liczba rdzeni i rozmiar użytej sieci Isinga są podane w legendzie.

W eksperymencie komputerowym uruchomionym na dowolnym systemie rozproszonym, używając coraz więcej procesorów, możemy rozważać duże fizyczne systemy co prowadzi do wzrostu wiarygodności ekstrapolacji do granicy termodynamicznej uzyskanych rezultatów, jak i przyspiesza czas obliczeń.

5. Wyniki dla trójwymiarowego modelu Ashkina-Tellera

Głównym przedmiotem moich badań były przemiany fazowe pierwszego rodzaju wzdłuż linii APF_bF oraz F_bG diagramu trójwymiarowego modelu Ashkina-Tellera zilustrowanego na rys. 2.4.1, które były sygnalizowane w literaturze [4,7,10] jako nieciągłe. Wyniki badań zostały otrzymane dzięki rozbudowanym przeze mnie eksperymentom komputerowym przeprowadzonym przede wszystkim na platformach obliczeniowych Poznańskiego Centrum Superkomputerowo-Sieciowego, jednak uruchomienia testowe i dla mniejszych rozmiarów badanego układu wykonywałam na multikomputerze *armada* Zakładu Fizyki Materiałów Funkcjonalnych (przed 2020 rokiem Zakład Fizyki Komputerowej, od kilkunastu do 24 rdzeni na poszczególnych węzłach) oraz na multikomputerze dużej mocy *cluster0* Wydziału Fizyki UAM (320 rdzeni).

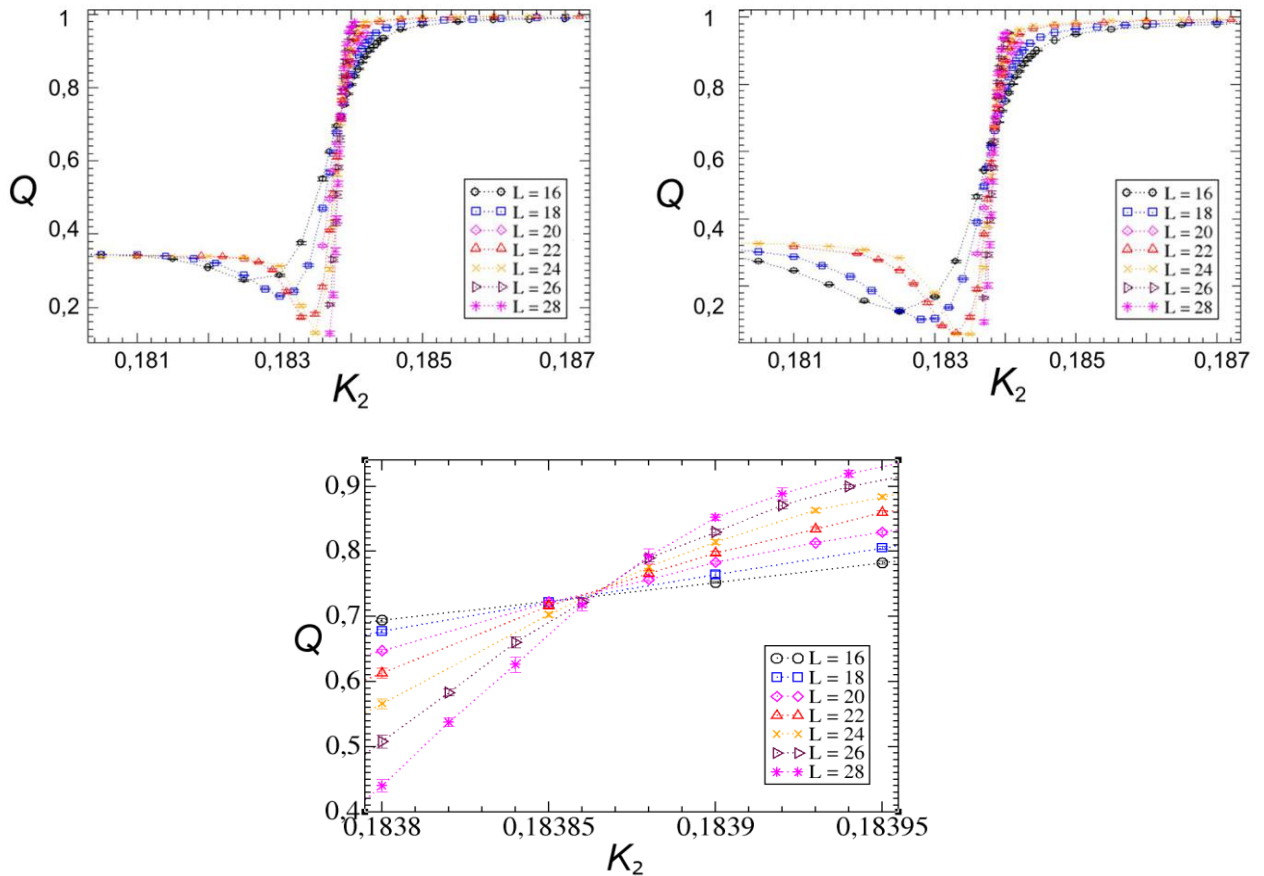
Jak opisałam w rozdziale 4, w programie komputerowym umieszczałam przedmiotowy model układu fizycznego i obserwowałam jego zachowanie w równowadze termodynamicznej. Równowagowe konfiguracje próbek o skończonych rozmiarach $L \times L \times L$ (głównie $16 \leq L \leq 32$) były generowane dla ustalonych wartości parametrów modelu przy użyciu algorytmu Metropolisia oraz generatorów liczb (pseudo)losowych. Jednak moje wyniki zostały sprawdzone przez Wojtkowiaka i Musiała z użyciem algorytmu klastrowego typu Wolffa [31], których wyniki są w pełni zgodne z otrzymanymi przeze mnie [61]. Na układ były nałożone okresowe warunki brzegowe i stosowałam wygrzewanie o długości rzędu 10^5 do 10^6 kroków MC, by doprowadzić układ do stanu równowagi termodynamicznej. Jak zdefiniowałam to w podrozdziale 4.1, jeden MCS oznacza jednokrotne odwiedzenie każdego węzła sieci. Aby uzyskać miarę rozrzutu statystycznego wyników, każdy przebieg symulacji MC był podzielony na n (przeważnie $6 \leq n \leq 20$) segmentów zwanych średnimi cząstkowymi, które zawierały około 10^7 kroków MC. Przy obliczaniu tych średnich cząstkowych tylko co k -ty krok MC był uwzględniany (głównie $8 \leq k \leq 10$), aby uniknąć korelacji pomiędzy losowanymi mikrostanami spinów w układzie i aby losować mikrostany z rozkładem prawdopodobieństwa Gibbsa, co jest w pełni wystarczające, jak to objaśniłam w podrozdziale 4.1. Jeden przebieg mojego eksperymentu komputerowego MC trwał od 20 godzin dla najmniejszych L do kilku miesięcy do największych L i aby uzyskać wyniki w rozsądnym czasie zastosowałam przetwarzanie równoległe, którego szczegóły przedstawiłam w podrozdziale 4.6.

Jak pisałam we wprowadzeniu, pierwsze systematyczne zbadanie diagramu fazowego 3W modelu AT na sieci sześcienniej w 1980 roku zawdzięczamy Ditzian i in. [10]. Chociaż wykorzystali oni krótkie rozwinięcia potęgowe i symulacje Monte Carlo (MC) z bardzo małymi próbkami, jednak byli w stanie naszkicować przybliżony diagram fazowy. Jest on ważnym punktem odniesienia, ale ich wyniki są niejednoznaczne. Linia AP diagramu fazowego była przedmiotem pierwszych dokładniejszych badań Arnolda i Zhanga [7], którzy sygnalizowali, że zbliżając się do punktu A model AT przejawia słabe przemiany fazowe pierwszego rodzaju, z dowolnie małą ilością ciepła przemiany dla każdego z trzech parametrów porządku $\langle s \rangle$, $\langle \sigma \rangle$, $\langle s\sigma \rangle$ wykazujących niezależne uporządkowanie. Głównym celem mojej pracy doktorskiej było zastosowanie eksperymentu komputerowego do wyznaczenia ciepła przemian fazowych zachodzących między punktem Isinga (punkt A), przez punkt Potts'a P i bifurkacji F_b aż do punktów trójkrytycznych F i G diagramu 3W modelu AT przedstawionego na rysunku 2.4.1 i omówionego w podrozdziale 2.4. Badania rozpoczęłam od wstępnego zlokalizowania punktów przemian fazowych, czyli oszacowania krytycznej wartości stałej sprzężenia K_2 , przy ustalonej wartości stałej sprzężenia K_4 w rozważanym rejonie diagramu 3W modelu AT.

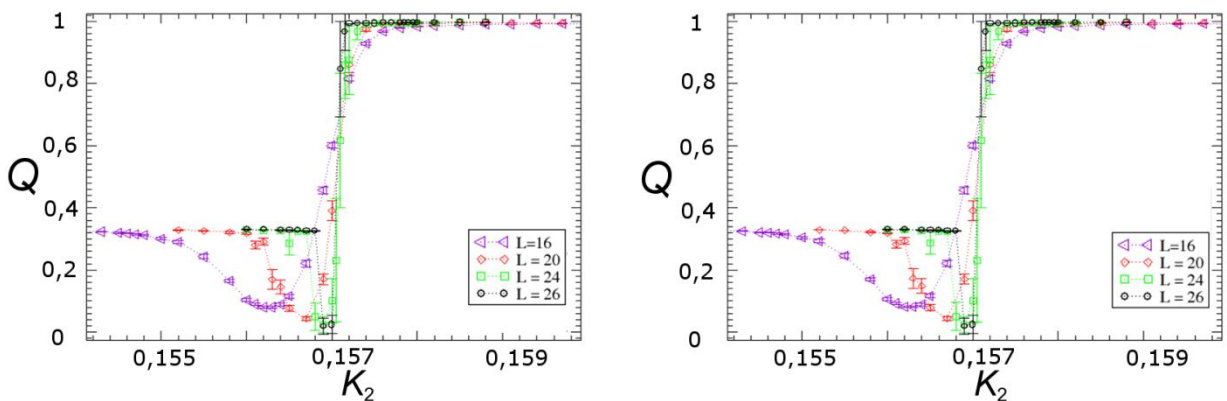
5.1. Wstępna lokalizacja punktów przemian fazowych z wykorzystaniem kumulant Bindera

Najpierw dokonałam wstępnej lokalizacji zależnych od temperatury punktów przemian fazowych wzdłuż linii APF_bF oraz F_bG przy ustalonej wartości stałej sprzężenia K_4 z wykorzystaniem kumulant Bindera $Q_{\alpha L}$. W eksperymencie komputerowym obliczałam wartości kumulant $Q_{\alpha L}$ ze wzoru (4.2.3) dla każdego z trzech parametrów porządku $\langle \alpha \rangle$ ($\alpha = s, \sigma$ lub $s\sigma$), a następnie wykreślałam zależności $Q_{\alpha L}(K_2)$ przy ustalonej wartości stałej sprzężenia K_4 dla różnych rozmiarów układu L . Zależności $Q_{\alpha L}(K_2)$ przecinają się w okolicy krytycznego punktu $K_{2,C}$ ponieważ dla $K_2 < K_{2,C}$ i $L_1 < L_2$ mamy $Q_{\alpha, L_1} > Q_{\alpha, L_2}$, podczas gdy przy $K_2 > K_{2,C}$ występuje $Q_{\alpha, L_1} < Q_{\alpha, L_2}$ [8,12,19,20]. Odczytując odciętą współrzędną punktu przecięcia się krzywych dla różnych rozmiarów można wstępnie oszacować krytyczną wartość stałej K_2 , z dokładnością rzędu 3 (dla przemian pierwszego rodzaju) do 4 cyfr znaczących (dla przemian ciągłych). Im mniejsza wartość ciepła przemiany tym ta dokładność jest większa. Ta metoda pozwala lokalizować punkty przemian fazowych zarówno ciągłych, jak i nieciągłych, niezależnie dla każdego parametru porządku $\langle \alpha \rangle$

z $\alpha = s, \sigma$ i $s\sigma$. Rezultaty dla spinów s i σ są praktycznie identyczne ze względu na symetrię hamiltonianu (2.4.2).



Rys. 5.1.1 Przecięcia zależności kumulant Bindera $Q_{\alpha,L}(K_2)$ przy $K_4 = 0,1$ dla spinów s (lewa strona) i iloczynu spinów $s\sigma$ (prawa strona). Dolny rysunek pokazuje powiększenie samego obszaru, w którym krzywe $Q_{s,L}(K_2)$ przecinają się przy $K_4 = 0,02$ dla spinów s . Niepewności są rzędu wielkości symboli i dla czytelności wykresów zostały pominięte. Wartości rozmiaru układu są podane w okienkach legend.



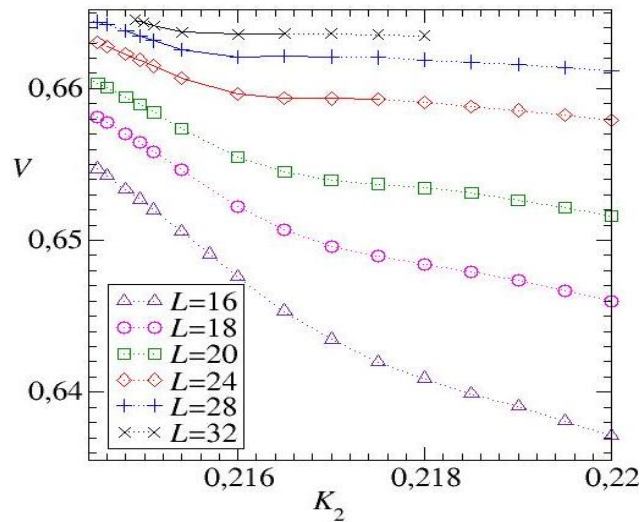
Rys. 5.1.2 Przecięcia zależności kumulant Bindera $Q_{\alpha,L}(K_2)$ przy $K_4 = 0,157$ dla spinów s (lewa strona) i iloczynu spinów $s\sigma$ (prawa strona). Niepewności rzędu wielkości symboli dla czytelności wykresów zostały pominięte. Wartości rozmiaru układu są podane w okienku legendy.

Przykładowo dla bardzo słabej przemiany fazowej pierwszego rzędu przy ustalonej wartości parametru $K_4 = 0,1$ z przecięcia krzywych dla $16 \leq L \leq 28$ wyznaczyłam krytyczną wartość $K_{2,C} = 0,1839(4)$ dla spinów s (lewy rys. 5.1.1) i zgodną w granicach niepewności wartość $K_{2,C} = 0,1838(4)$ dla spinów $s\sigma$ (prawy rys. 5.1.1). Natomiast dolny rys. 5.1.1 pokazuje powiększenie rejonu przecięć krzywych $Q_{s,L}(K_2)$ przy $K_4 = 0,1$. Podobnie dla silniejszej przemiany fazowej pierwszego rodzaju przy wartości parametru $K_4 = 0,157$ i $16 \leq L \leq 26$ otrzymałam dla spinów s i $s\sigma$ jednakowe wartości $K_{2,C} = 0,1571(10)$ (rys. 5.1.2). Przy większej ilości ciepła przemiany oszacowana wartość ma większą niepewność, zgodnie z oczekiwaniami [4,21]. Jak zaznaczyłam w podrozdziale 4.2, niepewności powinny być tutaj szacowane ostrożnie, gdyż jest to tylko przybliżone wskazanie obszaru krytycznego [21]. Spiny s i σ ze względu na symetrię w hamiltonianie (2.4.2) wykazują praktycznie identyczne przebiegi. Dla konkretnej wartości K_4 oszacowane wartości $K_{2,C}$ dla każdego z trzech parametrów porządku $\langle \alpha \rangle$ ($\alpha = s, \sigma$ lub $s\sigma$) są zgodne w granicach niepewności wzdłuż całej linii APF_b.

Sama obecność minimów w przebiegu $Q(K_2)$, które są widoczne na rys. 5.1.1 i 5.1.2, może sygnalizować możliwość przemiany pierwszego rodzaju, ale nie jest rozstrzygającym kryterium, że mamy do czynienia z taką przemianą, co jest sugerowane w literaturze [8,24]. Ta metoda pozwala lokalizować punkty przemian fazowych zarówno ciągłych, jak i nieciągłych.

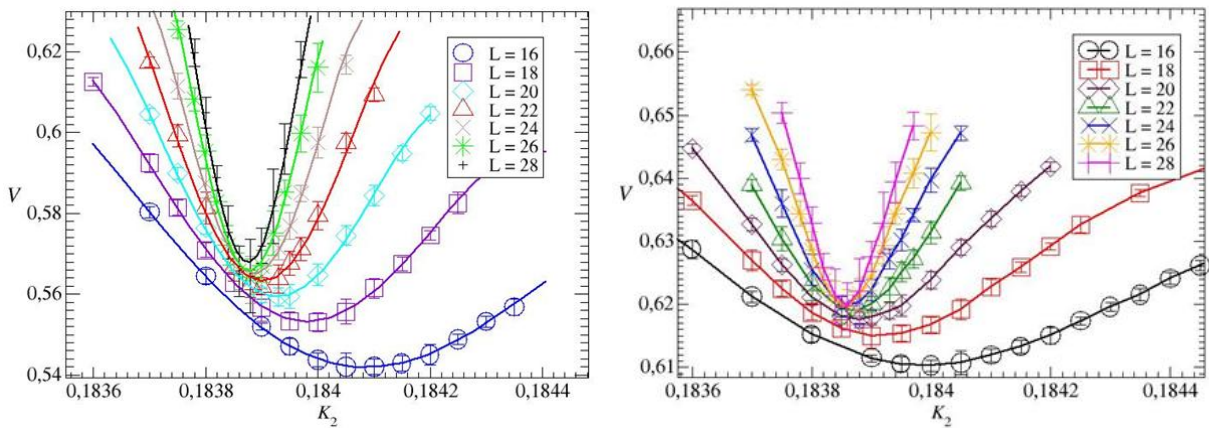
5.2. Analiza zachowania uogólnionych kumulant typu Challi i jej ograniczeń

W eksperymencie komputerowym obliczam także wartości kumulant typu Challi $V_{\alpha,L}$ ze wzoru (4.3.1) niezależnie dla każdego parametru porządku $\langle \alpha \rangle$ z $\alpha = s, \sigma$ i $s\sigma$ oraz dla całego układu. Wykreślam zależności $V_{\alpha,L}(K_2)$, by zlokalizować charakterystyczne lokalne minima (rys. 5.2.1), które są wyraźnie obserwowane w układzie o większym rozmiarze L , tutaj dla $L > 20$. W przypadku mniejszych układów na wykresie $V_{\alpha,L}(K_2)$ pojawia się tylko punkt przegięcia. To specyficzne zachowanie kumulant typu Challi należy przypisać słabym przemianom fazowym pierwszego rodzaju i tak dla $K_4 = 0,01$, gdzie spodziewamy się mniejszej wartości ciepła przemiany, minima są obserwowane dopiero dla $L \geq 28$. Zasada ta jest również spełniona, gdy wartości ciepła przemiany są większe: dla $K_4 = 0,03$ te minima zaczynają się od $L = 22$, dla $K_4 = 0,04$ od $L = 20$, dla $K_4 = 0,05$ od $L = 18$, a dopiero dla $K_4 = 0,06$ od $L = 16$.

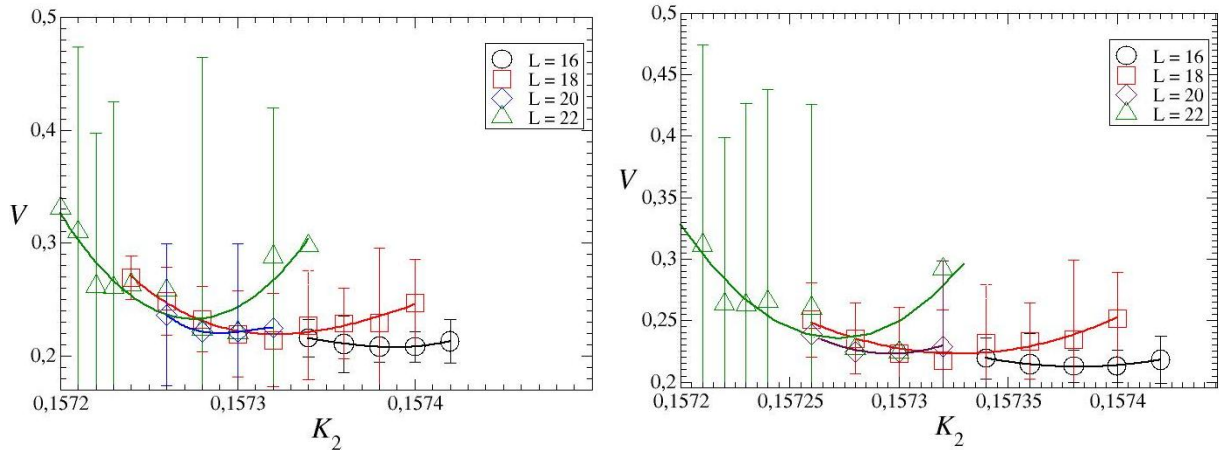


Rys. 5.2.1 Charakterystyczne minima zależności kumulant $V_{\alpha L}(K_2)$ spinów s dla próbek o różnych wartościach $L \geq 16$ przy $K_4 = 0,02$ [22]. Symbolami oznaczyłam wyniki moich eksperymentów komputerowych. Okolice minimów zostały przybliżone wielomianem 4. stopnia dla precyzyjniejszego ustalenia jego współrzędnych. Niepewności są rzędu wielkości symboli i dla przejrzystości rysunku zostały pominięte.

Dla $K_4 = 0,1$ minima są już wyraźne nawet dla małych L (rys. 5.2.2), co może być ważnym sygnałem obecności ciepła przemiany, ale nie tego dowodem. Aby zweryfikować tę obecność trzeba przeskalować wartości tych minimów do granicy termodynamicznej. Natomiast dla $K_4 = 0,157$ widać znacznie większy rozrzut statystyczny wyników i niepewności, rosną one ze wzrostem rozmiaru próbki L , gdy zachowa się tę samą liczbę kroków MC (rys. 5.2.3), co jest zgodne z oczekiwaniami [8,21].



Rys. 5.2.2 Charakterystyczne minima kumulant typu Challi $V_{s,L}(K_2)$ dla spinów s (lewa strona) i iloczynu spinów $s\sigma$ (prawa strona) dla próbek o różnych wartościach L przy $K_4 = 0,1$. Symbolami oznaczyłam wyniki moich eksperymentów komputerowych. Okolice minimów zostały przybliżone wielomianem 4. stopnia dla precyzyjniejszego ustalenia jego współrzędnych.

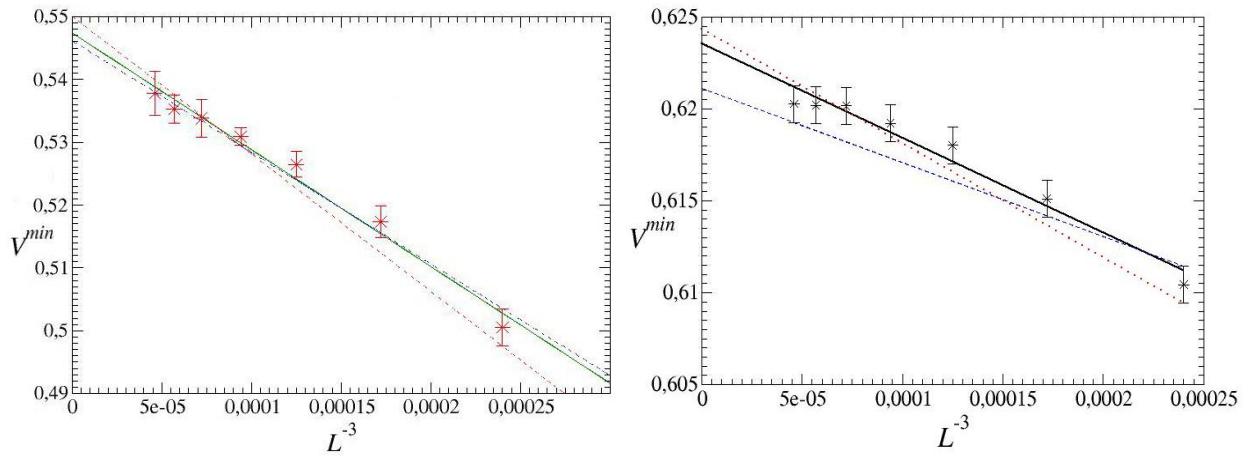


Rys. 5.2.3 Charakterystyczne minima kumulant typu Challa $V_{\alpha L}(K_2)$ spinów s (lewa strona) i iloczynu spinów $s\sigma$ (prawa strona) dla próbek o różnych wartościach L podanych w okienkach legendy przy $K_4=0,157$. Symbolami oznaczyłam wyniki moich eksperymentów komputerowych. Okolice minimów zostały przybliżone wielomianem 4. stopnia dla precyzyjniejszego ustalenia jego współrzędnych. Aby zachować przejrzystość rysunku naniosłam tylko przykładowe niepewności.

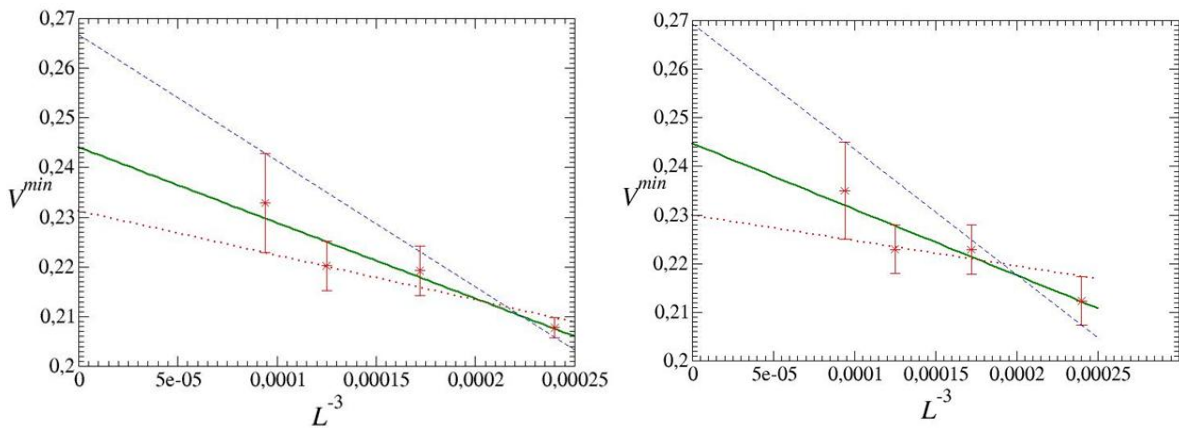
Analizując wyrażenie asymptotyczne (4.3.2) [5] w podrozdziale 4.3 zwróciłam uwagę, że wartości tego minimum $V_{\alpha,L}^{\min}$, jak i jego lokalizacje $K_{\alpha,2}^{\min}$ skalują się liniowo w funkcji L^{-3} . To pozwala ekstrapolować wartości tych dwu parametrów do granicy termodynamicznej z wykorzystaniem regresji liniowej. Wartości krytyczne $V_{\alpha,L}^{\min}$, i $K_{\alpha,2}^{\min}$ to współrzędne punktów przecięcia linii ciągłych na wykresach $V_{\alpha,L}^{\min}(L^{-3})$ i $K_{\alpha,2}^{\min}(L^{-3})$ z osią rzędną. Przechodząc przez słupki niepewności zaznaczone na rysunku 5.2.4 przerywane linie są odchyłone od uzyskanych z regresji liniowej linii ciągłych maksymalnie ku górze i ku dołowi, a punkty ich przecięć z osią rzędną pozwalają wyznaczyć niepewności wartości $V_{\alpha,\infty}^{\min}$.

Jak podkreśliłam w podrozdziale 4.3, gdy wartość $V_{\alpha,\infty}^{\min}$ z uwzględnieniem jej niepewności pozostaje mniejsza od $2/3$, to przemiana fazowa jest nieciągła. Dla $K_4 = 0,1$ wartości $V_{\alpha,\infty}^{\min}$ dla poszczególnych parametrów porządku są mniejsze od $2/3$, co pokazuje rys. 5.2.4, chociaż uzyskane przeze mnie wartości $V_{s,\infty}^{\min} = 0,5474(24)$, $V_{s\sigma,\infty}^{\min} = 0,6236(20)$ wraz z ich niepewnościami leżą blisko granicznej wartości $2/3$. Zatem wykazałam, że przy $K_4 = 0,1$ mamy do czynienia ze słabą przemianą pierwszego rodzaju. Natomiast dla $K_4 = 0,157$ uzyskałam wartości $V_{s,\infty}^{\min} = 0,244(10)$ i $V_{s\sigma,\infty}^{\min} = 0,245(10)$. Wartości te istotnie różnią się od

2/3 (rys. 5.2.5), czyli w tym punkcie z pewnością zachodzi silna przemiana fazowa pierwszego rodzaju.



Rys. 5.2.4 Wartości minimów kumulant typu Challi $V_{\alpha,L}^{min}$, które są pokazane na rys. 5.2.2, dla spinów s (lewy wykres) i iloczynu spinów $s\sigma$ (prawy wykres) ekstrapolowane do granicy termodynamicznej przy pomocy regresji liniowej (linie ciągłe) dla stałej sprzężenia $K_4 = 0,1$. Znaczenie linii przerywanych objaśniłam w tekście.



Rys. 5.2.5 Wartości minimów kumulant typu Challi $V_{\alpha,L}^{min}$, które są pokazane na rys. 5.2.3, dla spinów s (lewy wykres) i iloczynu spinów $s\sigma$ (prawy wykres) ekstrapolowane do granicy termodynamicznej przy pomocy regresji liniowej dla wartości $K_4 = 0,157$. Znaczenie linii przerywanych objaśniłam w tekście.

Dopasowywanie wielomianu niskiego stopnia (na rys. 5.2.2, 5.2.3 jest to wielomian 4. stopnia) w najbliższej okolicy minimów kumulant $V_{\alpha,L}$ uśrednia rozrzut statystyczny i wyniki dobrze układają się wzdłuż linii prostej w funkcji L^{-3} dla odpowiednio dużych układów (tutaj dla $L \geq 16$), jak to przewiduje teoria [4, 5].

Dysponując wartościami $V_{\alpha,L}^{\min}$ ekstrapolowanymi do granicy termodynamicznej (rysunki 5.2.4 i 5.2.5) ciepło przemiany początkowo wyznaczyłam ze związku (4.3.2) i metody zaproponowanej przez Musiała [4] przy $K_4 < 0,1$, czyli dla słabych przemian. Były to pierwsze dokładniejsze i systematyczne badania wykonane tą metodą. Wartość $E_{\alpha,+}$ szacowałam wykreślając obwiednię przebiegów $E_{\alpha,L}(K_2)$ po stronie fazy wysokotemperaturowej dla próbek o skończonych rozmiarach przy ustalonej wartości K_4 , jak objaśniłam na rys. 5.2.6, gdyż z poniżej przedstawionych ekstrapolacji położeń minimów kumulant V i położeń maksimów kumulant U dość precyzyjnie ustaliłam krytyczną wartość K_2 po stronie fazy uporządkowanej, którą na rys. 5.2.6 zaznaczyłam pionową kropkowaną linią. Porównując wartość $V_{\alpha,L}^{\min}$ z pierwszym członem prawej strony wzoru (4.3.2) i używając oszacowanej wyżej wartości $E_{\alpha,+}$ obliczyłam wartość $E_{\alpha,-}$. Wartości ciepła przemiany l_α uzyskane jako różnica $E_{\alpha,+}$ i $E_{\alpha,-}$ w jednostkach $k_B T$ są przedstawione w tabeli 5.2.1 dla spinów s i dla określonych w pierwszym i w trzecim wierszu wartości stałej sprzężenia K_4 .

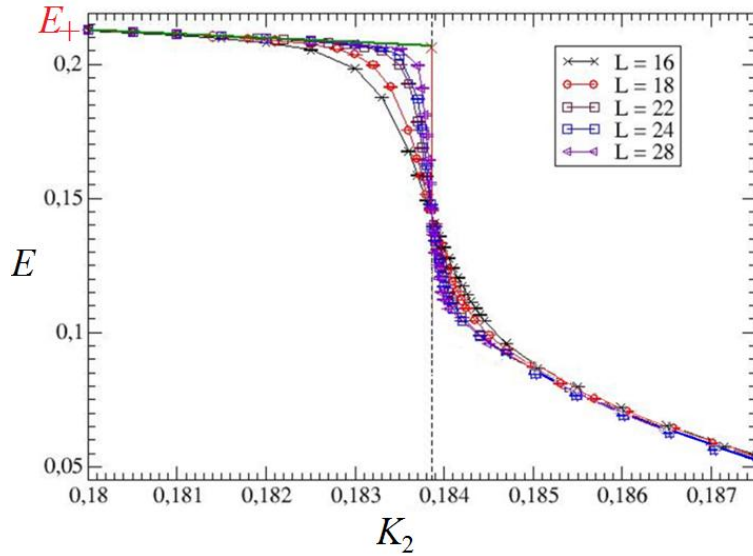
Chociaż takie obliczenie skokowej zmiany energii z $E_{\alpha,+}$ na $E_{\alpha,-}$ w granicy termodynamicznej podczas przejścia z fazy wysokotemperaturowej do fazy niskotemperaturowej może wydawać się nieprecyzyjne, to jednak umożliwia ono zarówno obliczenie wartości $E_{\alpha,+}$ i $E_{\alpha,-}$, jak również jakościową weryfikację położenia tego skoku energii na tle przebiegu zależności $E_{\alpha,L}(K_2)$. Wartość tego oszacowania podnosi fakt, że tak obliczone wartości $E_{\alpha,-}$ oraz l_α słabo zależą od precyzji oszacowania wartości E_+ i zmieniają się dopiero na trzeciej cyfrze znaczącej.

Tab. 5.2.1 Ciepło przemiany l_α obliczone z analiz zależności kumulant $V_{\alpha,L}(K_2)$ dla $\alpha = s$ (lub σ) i dla określonych w pierwszym i trzecim wierszu wartości stałej sprzężenia K_4 . Część wyników uzyskanych przeze mnie jeszcze w trakcie analiz były przedmiotem naszej publikacji konferencyjnej [22].

K_4	0,01	0,02	0,03	0,04	0,05
$l_\alpha/(k_B T)$	0,0016(55)	0,0030(51)	0,0058(21)	0,0112(19)	0,0174(12)
K_4	0,06	0,07	0,08	0,09	0,1
$l_\alpha/(k_B T)$	0,0269(12)	0,0391(11)	0,0539(12)	0,0734(9)	0,0895(7)

Wyniki przedstawione w tabeli 5.2.1 jednoznacznie dowodzą, że kiedy zbliżamy się do punktu Isinga A (zob. diagram fazowy na rys. 2.4.1) położonego w $K_4 = 0$ dla dodatnich wartości K_4 temperaturowe przemiany fazowe spinów s and σ z fazy uporządkowanej

ferromagnetycznie do nieuporządkowanej są pierwszego rodzaju. Podobne wnioski otrzymałam dla parametru porządku $s\sigma$ oraz dla całego układu, gdy do wyznaczania wartości kumulant $V_{\alpha,L}$ i $U_{\alpha,L}$ brałam energię całego hamiltonianu (2.4.2), czyli dla $\alpha = H$.



Rys. 5.2.6 Szacowanie wartości energii wewnętrznej $E_{\alpha,+}$ w punkcie krytycznym zaznaczonym pionową przerywaną linią po stronie fazy wysokotemperaturowej za pomocą obwiedni krzywych $E_{\alpha,L}(K_2)$ wyróżnionej kolorem zielonym dla $\alpha = s$ i dla próbek o skończonych rozmiarach L podanych w okienku legendy przy $K_4 = 0,1$. Wartość $E_{\alpha,+}$, którą zazaczyłam znakiem \times , stanowi punkt przecięcia obwiedni z pionową linią przerywaną.

W 3W modelu AT mamy trzy człony w hamiltonianie (2.4.2) i każdy z nich przedstawia energię oddziaływania E_α w obrębie jednego parametru porządku $\langle\alpha\rangle$ ($\alpha = s, \sigma$ lub $s\sigma$) wykazujących niezależne uporządkowanie. Do analiz można wziąć całą energię układu, czyli cały hamiltonian, i wtedy zachowanie kumulant $V_{\alpha,L}(K_2)$ pozwoli opisać uporządkowanie, jak i wyznaczyć ciepło przemiany fazowej całego układu, ale bez możliwości opisu zachowań i wkładu od poszczególnych parametrów porządku $\langle\alpha\rangle$. Natomiast gdy do obliczeń brany jest tylko jeden człon energii E_α wówczas z własności kumulant $V_{\alpha,L}(K_2)$ możliwy jest opis zachowania, jak i wyznaczenie wkładu do ciepła przemiany fazowej, każdego z tych stopni swobody układu z osobna. W tabeli 5.2.2 ciepło przemiany dla poszczególnych parametrów porządku oznaczone jest jako l_s, l_σ i $l_{s\sigma}$. Szczególnie warta uwagi jest bardzo duża zgodność wartości ciepła przemiany uzyskanego po zsumowaniu jego wartości otrzymanych dla poszczególnych parametrów porządku (kolumna

czwarta w tabeli 5.2.2) z wartością ciepła przemiany uzyskanego dla całego układu l_H (kolumna piąta w tabeli 5.2.2).

Tab. 5.2.2 Ciepło przemiany l_α w jednostkach $k_B T$ dla stopni swobody α opisanych w pierwszym wierszu tabeli, jak i dla całego układu ($\alpha = H$), dla wartości stałej sprężenia $K_4 = 0,1$ i dla $K_4 = 0,18$. Część wyników uzyskanych przeze mnie jeszcze w trakcie analiz były przedmiotem naszej publikacji [60].

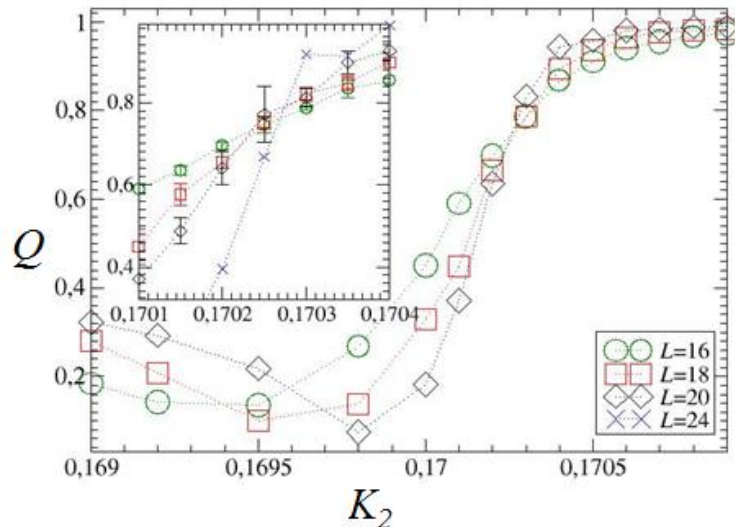
K_4	l_s (lub l_σ)	$l_{s\sigma}$	$l_s + l_\sigma + l_{s\sigma}$	l_H
0,10	0,0895(7)	0,0425(6)	0,2215(20)	0,2215(12)
0,18	0,09477(30)	0,1283(12)	0,31784(72)	0,31784(12)

Analizy dla silnych przemian fazowych z wykorzystaniem asymptotycznego wyrażenia (4.3.2) Challi i in. [5] mogłam prowadzić tylko dla słabych przemian z $K_4 < 0,1$, a dla silniejszych przemian te analizy załamują się, co wynika z własności wyrażenia po prawej stronie tego wzoru. Jak napisałam w podrozdziale 4.3, wzór ten został wyprowadzony przy założeniu, że przemiana fazowa jest słaba i w konsekwencji $P(E)$ dla obydwu faz uporządkowanej i nieuporządkowanej jest sumą Gaussianów o równych wagach statystycznych, dlatego załamuje się stopniowo przy przejściach do silniejszych przemian fazowych. Zasadność tego założenia była kwestionowana w literaturze przedmiotu [3, 43], jednak w moich badaniach stwierdziłam, że założenie Challi i in. może być w pewnym stopniu uzasadnione, gdyż im mniej ciepła przemiany, tym bardziej symetryczne stają się obydwie piki histogramu energii.

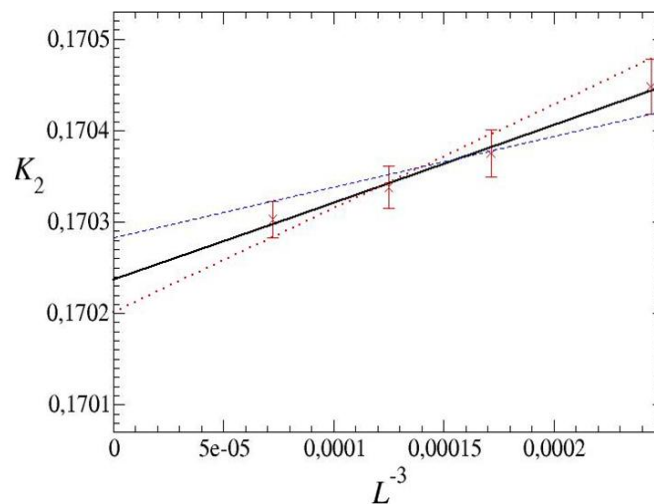
Z kolei asymptotyczne wyrażenie (4.3.3) zostało wyprowadzone przez Lee i Kosterlitz [3] bez tego założenia, jednak dla silnych przemian fazowych pierwszego rodzaju. Jednak moje analizy prowadzone w oparciu o wzór (4.3.3) pokazują, że daje ono poprawne wyniki również dla słabych przemian fazowych, które są zgodne z wynikami otrzymanymi na podstawie asymptotycznego wzoru Challi (4.3.2). Istotną wskazówką jest tutaj fakt, że równanie (4.3.3) uzyskali niezależnie również Borgs, Kotecky i Miracle-Sole [43], jednak uczynili to przy dużo ogólniejszych założeniach.

Odcięte K_2^{\min} zależności $V_{\alpha,L}(K_2)$ dla stopni swobody $\alpha = s, \sigma$ oraz iloczynu $s\sigma$ przy stałej wartości stałej sprężenia K_4 skalują się liniowo w funkcji L^{-3} , co pozwala mi ekstrapolować wartości tych minimów do granicy termodynamicznej i ustalić wartość krytyczną $K_{2,\alpha,\infty,V}^{\min}$, która lokalizuje punkty przemiany fazowej. Wartości otrzymane z wykorzystaniem kumulant typu Challi są zgodne w granicach niepewności z krytycznymi

wartościami $K_{2,c}$ określonymi przeze mnie w podrozdziale 5.1 z wykorzystaniem kumulant Bindera $Q_{\alpha,L}$ i metody przecięć. Przykładowo przy $K_4 = 0,1$ dla stopni swobody $\alpha = s$ krytyczna wartość stałej sprzężenia K_2 otrzymana przeze mnie z wykorzystaniem kumulanty $V_{s,L}$ wynosi $0,18387(8)$, zaś z wykorzystaniem kumulanty $Q_{s,L}$ jest równa $0,1839(4)$, jak podałam w podrozdziale 5.1.



Rys. 5.2.7 Przecięcia zależności $Q_{s,L}(K_2)$ przy $K_4 = 0,13$ dla spinów s . Dla przejrzystości rysunku zazaczyłam tylko wybrane niepewności.



Rys. 5.2.8 Odcięte położenia minimów zależności $V_{s,L}^{min}(K_2)$ ekstrapolowane do granicy termodynamicznej z wykorzystaniem regresji liniowej przy $K_4 = 0,13$ dla spinów s . Sposób poprowadzenia przerywanych linii wyznaczających niepewność ekstrapolowanej wartości został omówiony w tekście podrozdziału 5.1.

Warto zauważyć istotnie większą precyzję ustalenia krytycznej wartości stałej sprzężenia $K_{2,\infty}^{min} = 0,17024(6)$, przy ustalonej przykładowej wartości $K_4 = 0,13$ z wykorzystaniem skalowania skończenie-rozmiarowego dla odciętych minimów kumulant

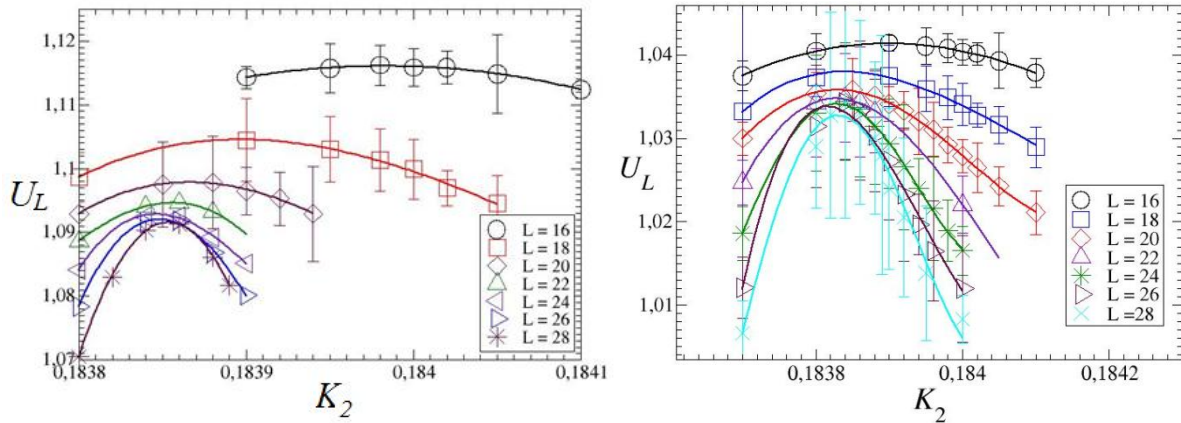
typu Challi (rys. 5.2.8) w stosunku do wartości 0,1703(2) uzyskanej z przecięć zależności kumulant Bindera $Q_{s,L}$ od stałej sprzężenia K_2 (rys. 5.2.7).

5.3. Wykorzystanie kumulant typu Lee-Kosterlitz i analiza zakresu ich stosowalności

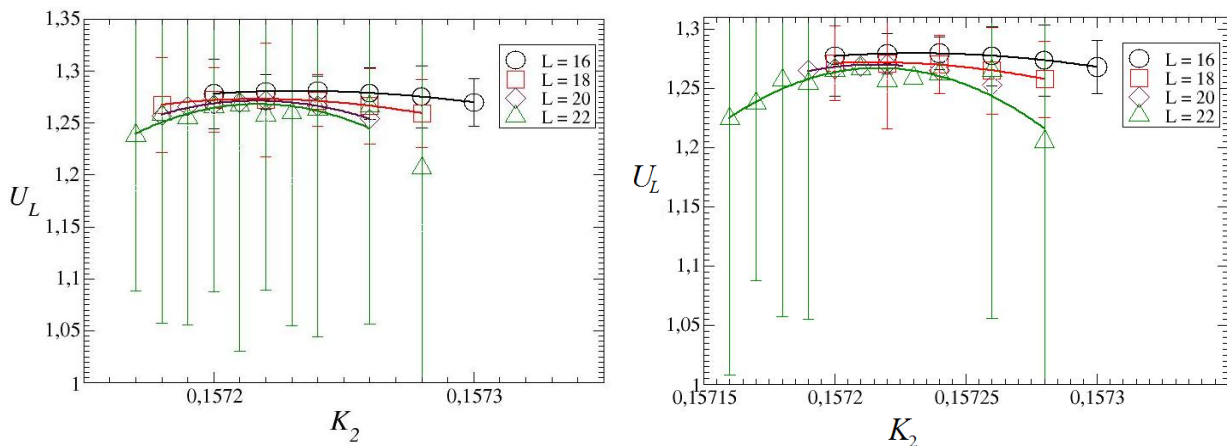
W moich eksperymentach komputerowych obliczałam także wartości kumulant typu Lee-Kosterlitz $U_{\alpha,L}$ dla poszczególnych parametrów porządku $\langle \alpha \rangle$, ze wzoru (4.4.1), które do programu obliczeniowego wprowadził Z. Wojtkowiak, który także powtórzył część moich obliczeń głównie dla zweryfikowania poprawności działania programu. Analogicznie jak opisałam w poprzednim podrozdziale dla kumulant Challi V , wykreślałam zależności $U_{\alpha,L}(K_2)$ (rys. 5.3.1, 5.3.2), by zlokalizować charakterystyczne lokalne maksima. Warto tu przypomnieć, że w granicy $L \rightarrow \infty$ dla ciągłych przemian fazowych wartości tych maksimów przeskalowują się do wartości 1.

Podobnie jak dla kumulant typu Challi, ekstrapolowałam do granicy termodynamicznej rzędne maksimów $U_{\alpha,L}(K_2)$, których przykłady pokazałam na rys. 5.3.1 i 5.3.2, zgodnie ze wzorem (4.4.2). Na wykresach $U_{\alpha,L}(K_2)$ przedstawionych na rys. 5.3.3 obliczyłam, że rzędne maksimów spinów s dla $K_4 = 0,1$ w granicy termodynamicznej przeskalowują się do wartości nieznacznie większej od 1 z uwzględnieniem niepewności, a dla $K_4 = 0,157$ do wartości 1,26(1), wartości istotnie różnej od 1. Zbliżone wyniki uzyskałam dla iloczynów spinów $s\sigma$. Zatem również z tych danych wynika, że mamy do czynienia z przemianami fazowymi pierwszego rodzaju, przy czym dla $K_4 = 0,1$ są to słabe przemiany fazowe, zaś dla $K_4 = 0,157$ silne. Można zauważyć że próba odróżnienia przemian fazowych ciągłych i nieciągłych przeprowadzona z wykorzystaniem kumulant typu Lee-Kosterlitz i typu Challi doprowadziła do tych samych wniosków. Chociaż te dane z moich eksperymentów komputerowych są obarczone większymi niepewnościami, to stanowią one ważne potwierdzenie wyników otrzymanych za pomocą kumulant typu Challi V .

Mimo, że J. Lee i J. M. Kosterlitz wykorzystywali kumulantę U tylko do badania silnych przemian fazowych pierwszego rodzaju [3], ja w moich badaniach z sukcesem stosowałam tę wielkość fizyczną zarówno do badania słabych, jak i silnych przemian fazowych pierwszego rodzaju, podobnie jak w poprzednim podrozdziale dla kumulant typu Challi V , chociaż tutaj nie mamy wyprowadzenia przy bardziej ogólnych założeniach.

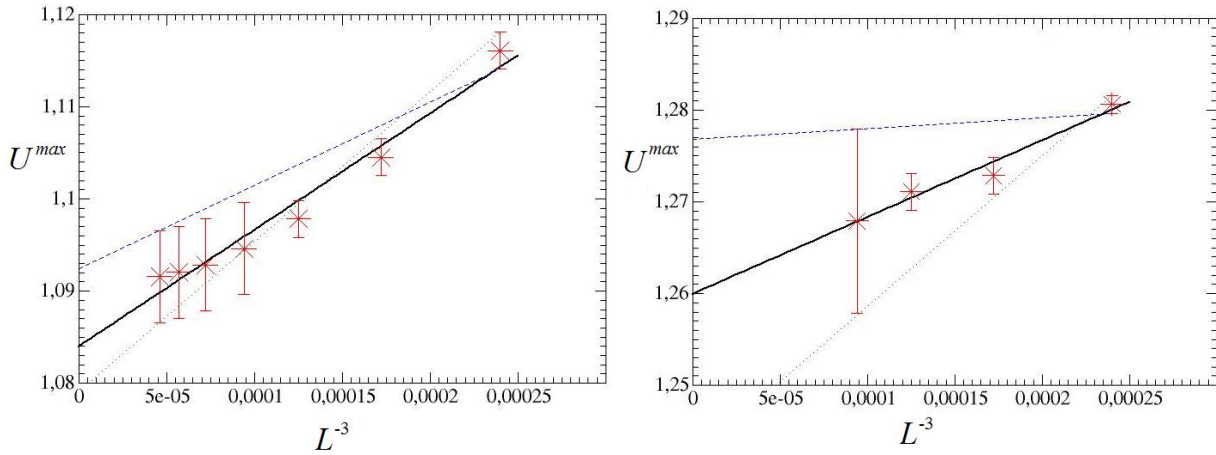


Rys. 5.3.1 Charakterystyczne maksima kumulant typu Lee-Kosterlitz $U_{\alpha,L}(K_2)$ dla $\alpha = s$ (lewy wykres) i spinów $s\sigma$ (prawy wykres) dla próbek o różnych wartościach L wskazanych w legendach przy $K_4=0,1$. Symbolami oznaczyłam wyniki moich eksperymentów komputerowych. Okolice minimów zostały przybliżone wielomianem 4. stopnia dla precyzyjniejszego ustalenia jego współrzędnych.

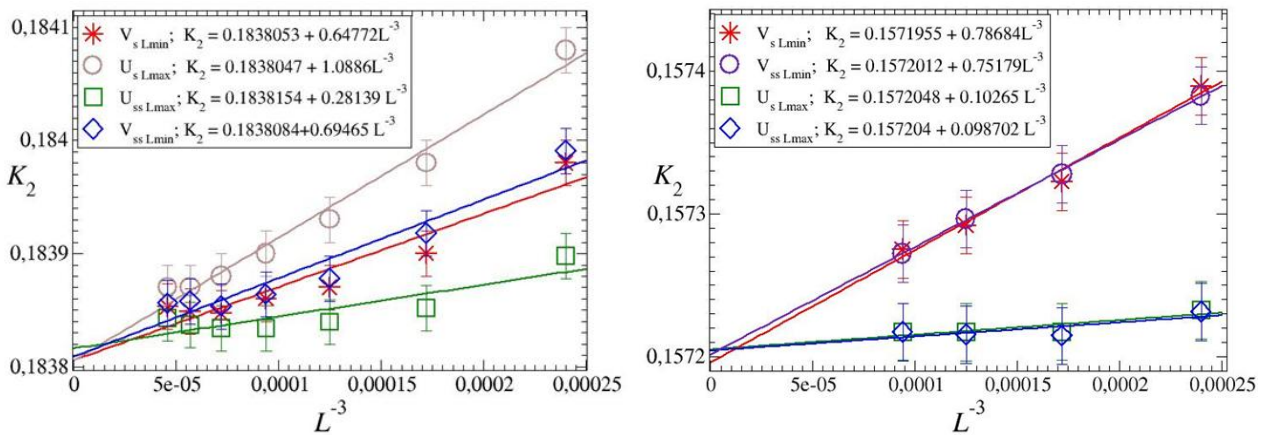


Rys. 5.3.2 Charakterystyczne maksima kumulant typu Lee-Kosterlitz $U_{\alpha,L}(K_2)$ dla $\alpha = s$ (lewy wykres) i spinów $s\sigma$ (prawy wykres) dla próbek o różnych wartościach L wskazanych w legendach przy $K_4=0,157$. Symbolami oznaczyłam wyniki moich eksperymentów komputerowych. Okolice minimów zostały przybliżone wielomianem 4. stopnia dla precyzyjniejszego ustalenia jego współrzędnych.

Na rysunku 5.3.4 porównałam wyniki ekstrapolowania do granicy termodynamicznej odciętych minimów kumulant $V_{\alpha,L}$ i maksimów kumulant $U_{\alpha,L}$ dla $K_4=0,1$ (lewy wykres) i $K_4=0,157$ (prawy wykres) dla spinów s i iloczynów $s\sigma$ wskazanych w okienkach legend, gdzie również podałam równania linii dopasowanych metodą regresji liniowej. Wyniki lokalizacji punktów przemian fazowych tymi dwiema metodami dają wartości krytyczne K_2 różniące się nieznacznie na piątym miejscu po przecinku



Rys. 5.3.3 Wartości rzędnych maksimum kumulant typu Lee-Kosterlitz $U_{\alpha,L}^{\max}$ dla $\alpha = s$ ekstrapolowane do granicy termodynamicznej dla wartości $K_4 = 0,1$ (lewy wykres) i $K_4 = 0,157$ (prawy wykres). Sposób poprowadzenia przerywanych linii wyznaczających niepewność ekstrapolowanej wartości został omówiony w tekście podrozdziału 5.1.



Rys. 5.3.4 Wartości odciętych minimum kumulant typu Challi $V_{\alpha,L}^{\min}$ i maksimum kumulant typu Lee-Kosterlitz $U_{\alpha,L}^{\max}$ dla spinów s i iloczynów $s\sigma$, ekstrapolowane do granicy termodynamicznej przy pomocy regresji liniowej (linie ciągłe) dla wartości $K_4 = 0,1$ (lewy wykres) i $K_4 = 0,157$ (prawy wykres). Sposób poprowadzenia przerywanych linii wyznaczających niepewność ekstrapolowanej wartości został omówiony w tekście podrozdziału 5.1.

W tabeli 5.3.1 umieściłam wartości rzędnych minimum kumulanty typu Challi $V_{\alpha,\infty}^{\min}$ i maksimum kumulanty typu Lee-Kosterlitz $U_{\alpha,\infty}^{\max}$ otrzymane w wyniku ekstrapolowania przy pomocy regresji liniowej do granicy termodynamicznej wyznaczonych dla poszczególnych stopni swobody podanych w pierwszej kolumnie przy $K_4 = 0,18$. Poza tym w tej samej tabeli znajdują się odcięte tych minimum $K_{2,\infty}^{\min}$ i maksimum $K_{2,\infty}^{\max}$, dzięki którym przy ustalonej stałej sprzężenia K_4 został zlokalizowany punkt przemiany fazowej.

Uzyskane wartości krytyczne stałej sprężenia K_2 z wykorzystanie kumulant typu Challi i Lee-Kosterlitz'a wykazują bardzo dobrą zgodność w granicach niepewności.

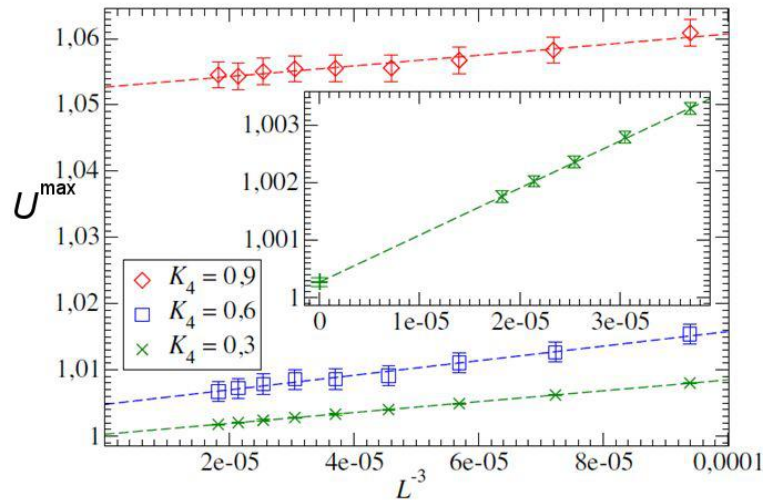
Tab. 5.3.1 Odcięte K_2^{min} i rzędne $V_{\alpha,L}^{min}$ minimów kumulant typu Challi oraz odcięte K_2^{max} i rzędne $U_{\alpha,L}^{max}$ maksimów kumulant typu Lee-Kosterlitz'a w granicy termodynamicznej dla $K_4 = 0,18$. α opisane jest w pierwszej kolumnie tabeli. H oznacza, że energia z całego Hamiltonian była wzięta do obliczeń [60].

α	$V_{\alpha,\infty}^{min}$	$K_{2,\alpha,\infty}^{max}$	$U_{\alpha,\infty}^{max}$	$K_{2,\alpha,\infty}^{max}$
s (lub σ)	0,476(4)	0,145189(35)	1,128(2)	0,145192(28)
$s\sigma$	0,181(14)	0,145183(38)	1,283(4)	0,145187(25)
H	0.406(5)	0,155195(33)	1,169(4)	0,145187(33)

Ciepło przemiany wyznaczałam wykorzystując ekstrapolowane do granicy termodynamicznej rzędne wartości maksimów $U_{\alpha,L}(K_2)$ i podobną metodę jak dla kumulant typu Challi. Przykład analiz dla kumulant Lee-Kosterlitz'a dla $16 \leq L \leq 32$ przy stałej sprężenia K_4 równej 0,03, 0,06 i 0,09 przedstawiłam na rysunku 5.3.5 [47]. Oszacowane wartości maksimów kumulanty $U_{s,L}$ w granicy termodynamicznej z wykorzystaniem regresji liniowej dla stopni swobody s , co wynika ze wzoru (4.4.2), dla $K_4 = 0,03$ wynoszą 1,00027(8), dla $K_4 = 0,06$ i 0,09 odpowiednio są równe 1,0048(15) i 1,0527(24). Widać wyraźnie liniowy charakter danych z mojego eksperymentu komputerowego MC, ale im wyższa wartość $U_{s,\infty}^{max}$, czyli im więcej ciepła przemiany, tym większy rozrzut statystyczny wyników i ich słupki niepewności. Następnie wyznaczyłam $E_{\alpha,-}$ przez przyrównanie $U_{\alpha,\infty}^{max}$ z pierwszym członem wzoru (4.4.2) oraz $E_{\alpha,+}$ na podstawie wykresu $E_{\alpha,L}(K_2)$ dla próbki o skończonych rozmiarach [4,14]. Chociaż takie obliczenia zmiany energii z E_+ na E_- w granicy termodynamicznej podczas przemiany z fazy nieuporządkowanej do fazy Baxtera wydają się nieprecyzyjne to jednak umożliwiają zarówno obliczenie wartości $E_{\alpha,+}$ i $E_{\alpha,-}$, jak i jakościową weryfikację położenia tego skoku wartości energii na tle przebiegu zależności $E_{\alpha,L}(K_2)$. Wartość tego oszacowania zwiększa fakt, że tak obliczona wartość $E_{\alpha,-}$ jest nieznacznie zależna od dokładności oszacowania $E_{\alpha,+}$, która zmienia się tylko na miejscu trzeciej cyfry znaczącej [4,14]. Wykorzystując wartości $E_{\alpha,-}$ i $E_{\alpha,+}$ we wzorze (4.5.4) otrzymałam wartość ciepła przemiany (w jednostkach $k_B T$) dla $\alpha = s, \sigma, s\sigma$ lub H dla poszczególnych wartości K_4 wzdłuż linii APF_b.

Tab. 5.3.2 Ciepło przemiany l_α w jednostkach $k_B T$ dla stopni swobody α oznaczonych w pierwszej kolumnie tabeli obliczone na podstawie kumulant podanych w pierwszym wierszu w drugiej i trzeciej kolumnie dla $K_4 = 0,1$.

	V_α	U_α
l_s (lub l_σ)	0,0895(7)	0,091(16)
$l_{s\sigma}$	0,0425(6)	0,0423(14)
$l_s + l_\sigma + l_{s\sigma}$	0,2215(20)	0,224(46)
l_H	0,2215(12)	0,224(6)



Rys. 5.3.5 Wartości maksimum kumulant typu Lee-Kosterlitz $U_{\alpha,L}^{max}$ ekstrapolowane do granicy termodynamicznej dla $\alpha = s$ i dla stałych wartości $K_4 = 0,03, 0,06$ oraz $0,09$ reprezentowane są przez symbole wyjaśnione w legendzie. Zależności są oznaczone prostymi liniami przerywanymi wyznaczonymi przy użyciu regresji liniowej. Symbol $+$ we wstawce oznacza przykładowy wynik tej ekstrapolacji dla $K_4 = 0,03$ [47].

Również w przypadku kumulant typu Lee-Kosterlitz $U_{\alpha,L}^{max}$ godna uwagi jest zgodność wartości ciepła przemiany otrzymanego po zsumowaniu wartości dla poszczególnych stopni swobody (czwarty wiersz tabeli 5.3.2) z wartością tego ciepła otrzymanego dla całego Hamiltonianu przedstawioną w piątym wierszu tabeli 5.3.2. Wartości ciepła przemiany otrzymane z wykorzystaniem kumulant typu Challi i Lee-Kosterlitz wykazują bardzo dobrą zgodność w granicach niepewności.

5.4. Analiza histogramu rozkładu energii

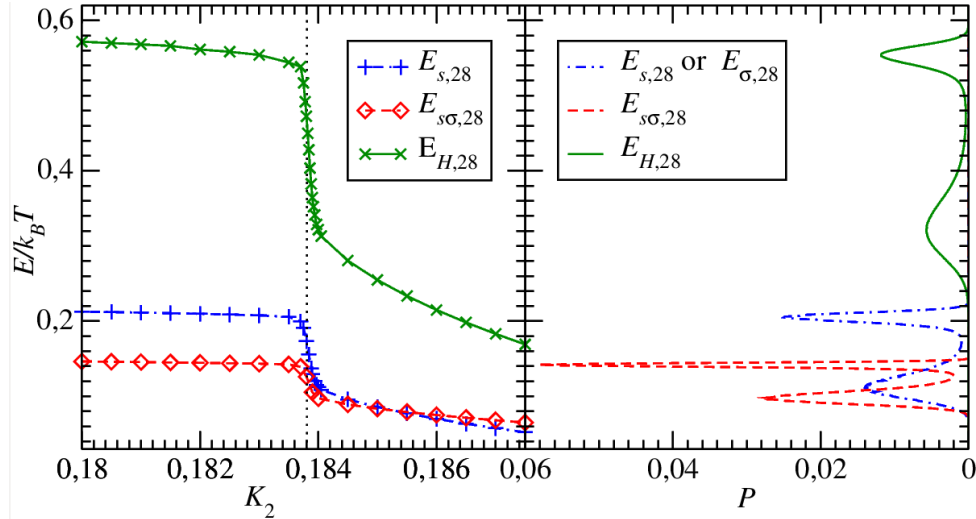
Ponieważ w przedmiotowym układzie mam trzy zachowujące się niezależnie parametry porządku, jak objaśniłam w podrozdziale 4.5, w moich eksperymentach

komputerowych w odniesieniu do histogramu rozkładu energii wykorzystałam podejście analogiczne do zaproponowanego przez Musiała [4] w odniesieniu do kumulant typu Challi [5] dla modelu AT. Metoda histogramu rozkładu energii oryginalnie została wprowadzona dla układów z jednym niezależnym parametrem porządku [3]. Hamiltonian 3W modelu AT (2.4.1) jest sumą trzech członów, z których każdy przedstawia energię oddziaływania w obrębie jednego parametru porządku: $\langle s \rangle, \langle \sigma \rangle, \langle s\sigma \rangle$. Jak napisałam w podrozdziale 4.5, dla celów tej analizy program oblicza niezależnie wartości $P_L(E_\alpha, \beta)$ oraz wielkości $-\ln P_L(E_\alpha, \beta)$, gdzie $\alpha = s, \sigma, s\sigma$, czyli wybierając dla E_α poszczególne człony hamiltonianu reprezentujące kolejno energię oddziaływania spinów s , σ i ich iloczynu $s\sigma$, a także biorąc dla E_α cały hamiltonian przy krytycznej wartości parametru K_2 precyzyjnie wyznaczonej z analiz wykorzystujących kumulanty Q_L , V_L oraz U_L , przedstawionych odpowiednio w podrozdziałach 5.1, 5.2 i 5.3 i podsumowanych w tabeli 5.3.1, dla założonej wartości parametru K_4 .

Zatem w niniejszej analizie wykorzystuję średnie temperaturowe energii E_α poszczególnych członów hamiltonianu, jak również średnią temperaturową energii dla całego hamiltonianu (czyli energię wewnętrzną układu), które także są obliczane w moim eksperymencie komputerowym. Pozwalają one na ważny test: w przemianie fazowej pierwszego rodzaju odpowiednie wartości energii E_+ i E_- po stronie stanów nieuporządkowanego i uporządkowanego wyznaczone z analiz wyników moich eksperymentów MC w obrębie poszczególnych stopni swobody i całego hamiltonianu powinny wypadać w górnym i dolnym rejonie charakterystycznego gwałtownego skoku średnich wartości odpowiednich energii E_α w funkcji K_2 .

Przykład takiej analizy układu z rozmiarem $L = 28$ jest pokazany na rysunku 5.4.1 dla parametru $K_4 = 0,1$ przy krytycznej wartości $K_{2,c} = 0,18381(6)$ (pionowa linia kropkowana), tej samej dla każdego z trzech parametrów porządku, wyznaczonej przeze mnie [22] jako wartość krytyczna na podstawie analiz zachowania się kumulant Bindera [8], a także kumulant typu Challi [5] i Lee-Kosterlitz [3]. Jak przedstawiłam w podrozdziale 4.5, maksima pików prawdopodobieństwa $P_L(E, \beta)$ powinny pojawiać się przy wartości energii $E_+(L)$ dla stanu nieuporządkowanego oraz $E_-(L)$ dla uporządkowanego. Na rysunku 5.4.1 widzimy, że istotnie te piki prawdopodobieństwa P_L wypadają w górnym i dolnym rejonie charakterystycznego gwałtownego skoku średnich wartości zarówno energii $E_{H,28}$ z całego hamiltonianu, jak również energii $E_{\alpha,28}$, z $\alpha = s$ (lub takiej samej dla $\alpha = \sigma$ ze względu na symetrię hamiltonianu) czy $s\sigma$, w funkcji K_2 . Podobne przebiegi obserwujemy dla innych

wartości parametru K_4 wzdłuż linii APF_b oraz F_bF i F_bG rozpatrywanych tutaj przemian fazowych. Jedyną różnicą jest to, że w miarę zbliżania się do punktów trójkrytycznych piki prawdopodobieństwa zbliżają się do siebie i stają się coraz bardziej symetryczne. Zatem dla słabych przemian w pobliżu punktów trójkrytycznych te analizy są coraz trudniejsze, do czego wrócę w dalszej części tego podrozdziału.

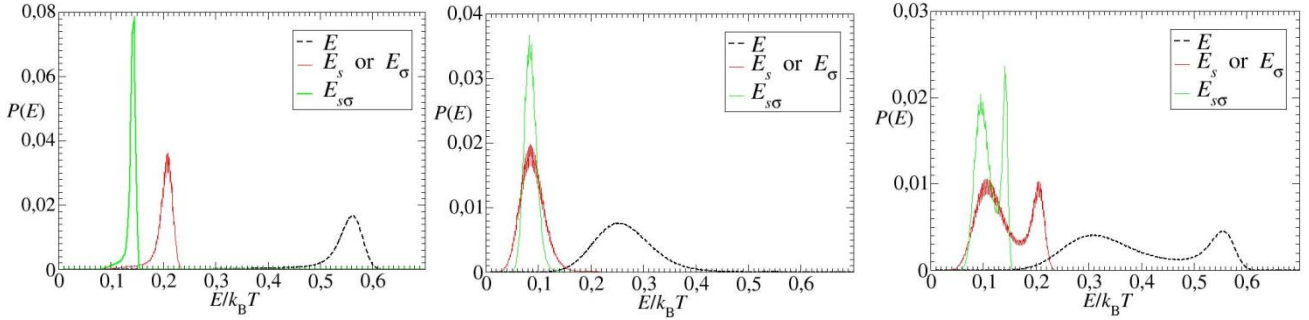


Rys. 5.4.1 Energia $E_{H,28}$ z całego hamiltonianu, jak również energie $E_{\alpha,28}$, z $\alpha = s$ (lub σ), $s\sigma$, w jednostkach $k_B T$ w funkcji K_2 dla 3W modelu AT z rozmiarem $L = 28$ dla parametru $K_4 = 0,1$ przy krytycznej wartości $K_{2,C} = 0,18381(6)$ po lewej stronie. Po prawej odpowiednie prawdopodobieństwa P_L w funkcji tychże energii, które są objaśnione w okienkach legendy [22].

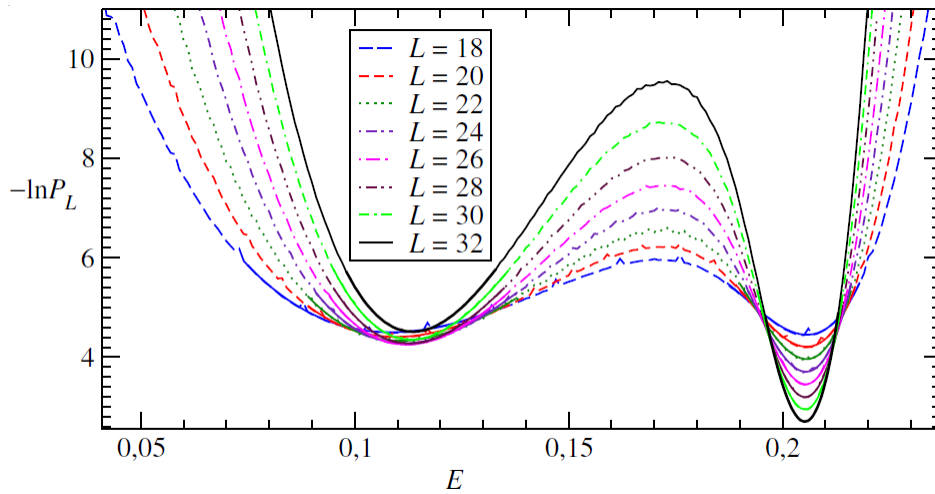
W celu upewnienia się co do prawidłowego przebiegu zależności prawdopodobieństwa P_L również w funkcji energii $E_{H,28}$ z całego hamiltonianu oraz energii $E_{\alpha,28}$, z $\alpha = s$ (lub σ) i $s\sigma$, zilustrowałam je na rysunku 5.4.2 także przy $K_4 = 0,1$, ale przy różnych wartościach stałej sprzężenia $K_2 = 0,1828 < K_{2,C}$ (stan nieuporządkowany) i $K_2 = 0,1848 > K_{2,C}$ (stan uporządkowany), dalekich od wartości krytycznej, oraz dla porównania przy $K_2 = 0,1838$ bliskiej wartości krytycznej. Widzimy, że piki prawdopodobieństwa przy $K_2 = 0,1828$ i $0,1848$ pojawiają się zgodnie z oczekiwaniami, odpowiednio w okolicach $E_{\alpha,28,+}$ i $E_{\alpha,28,-}$.

Innym ważnym testem dla tej analizy jest sprawdzenie, czy suma wartości ciepła przemiany dla poszczególnych parametrów porządku jest równa ciepłu przemiany całego układu wyznaczonego z analizy z energią pełnego hamiltonianu w granicach wyznaczonych niepewności. W tym celu, zgodnie ze strategią nakreśloną w podrozdziale 4.5, program oblicza również wielkość $-\ln P_{\alpha L}$ odpowiednio w funkcji energii $E_{H,L}$ z całego hamiltonianu oraz energii $E_{\alpha,L}$ oddziaływania stopni swobody $\alpha = s, \sigma$ i ich iloczynu $s\sigma$ dla układu

o różnych rozmiarach L . Moje obliczenia obejmowały parzyste wartości L ze względu na okresowe warunki brzegowe zwykle w zakresie od 16 do 32. Tylko dla słabych przemian fazowych w pobliżu punktów trójkrytycznych A, F i G konieczne były większe wartości L do 38, co nawet przy zastosowaniu przetwarzania równoległego wymagało tygodni obliczeń dla pojedynczego przebiegu naszego eksperymentu komputerowego.



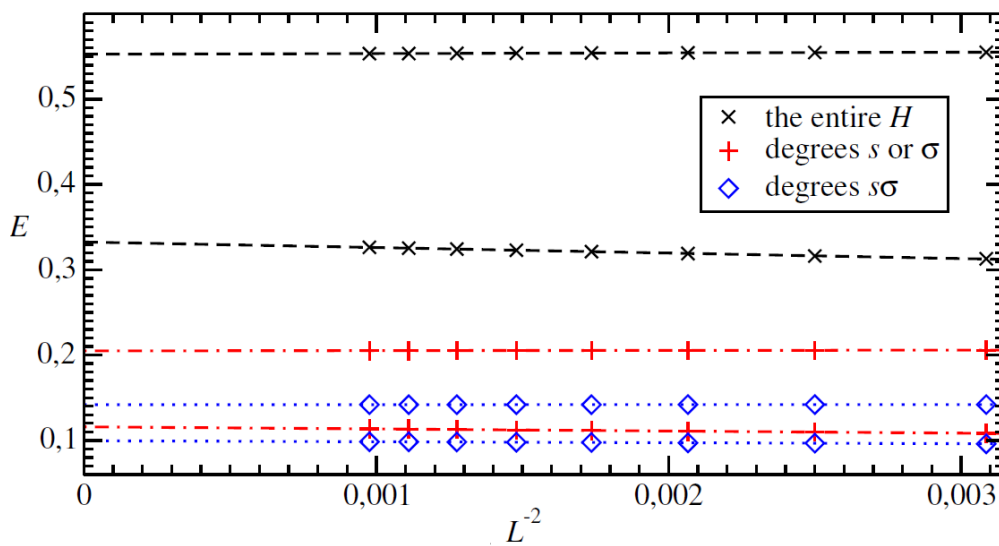
Rys. 5.4.2 Prawdopodobieństwa P_L w funkcji energii $E_{H,28}$ z całego hamiltonianu, jak również energii $E_{\alpha,28}$, z $\alpha = s$ (lub σ) i $s\sigma$, w jednostkach $k_B T$, objaśnionych w okienkach legendy dla 3W modelu AT z rozmiarem $L = 16$ dla $K_4 = 0,1$ przy wartościach stałej sprężenia $K_2 = 0,1828 < K_{2,C}$ po lewej, $0,1848 > K_{2,C}$ w środku i $0,1838$ bliskiej $K_{2,C}$ po prawej.



Rys. 5.4.3 Przebieg zależności $-\ln P_L(E)$ dla stopni swobody s z $K_4 = 0,1$ przy krytycznej wartości $K_2 = 0,18381(6)$. Wybrane wartości L są objaśnione w okienku legendy [18].

Rys. 5.4.3 [18] pokazuje przykładowy przebieg zależności $-\ln P_L(E)$, tutaj przedstawiłam ją dla stopni swobody s z $K_4 = 0,1$ przy krytycznej wartości $K_2 = 0,18381(6)$. Dla moich analiz potrzebne jest jedynie możliwie najbardziej dokładne ustalenie położenia obydwu minimów, które stanowią wartości energii $E_{\alpha,L,+}$ dla stanu nieuporządkowanego (prawe minimum) oraz $E_{\alpha,L,-}$ dla uporządkowanego (lewe minimum), omówionych

w podrozdziale 4.5. W celu zwiększenia precyzji wyznaczenia tych minimów w ich pobliżu funkcję przybliżam gładką krzywą używając regresji trzeciego stopnia. Odcinki tak przybliżone gładkimi krzywymi zaznaczyłam na tym rysunku linią ciągłą. W ten sposób wyznaczałam wartości $E_{\alpha L,+}$ oraz $E_{\alpha L,-}$ dla zależności $-\ln P_L$ w funkcji energii $E_{H,L}$ z całego hamiltonianu oraz energii $E_{\alpha L}$ oddziaływania stopni swobody $\alpha = s, \sigma$ i $s\sigma$. Rys. 5.4.4 [22] ilustruje wyniki tych analiz oznaczone symbolami objaśnionymi w okienku legendy, które zgodnie ze wzorem (4.5.3) w funkcji L^{-2} przeskalowują się odpowiednio do przestrzennych wartości E_+ i E_- , dlatego poszczególne linie ekstrapolowałam do granicy termodynamicznej przy pomocy regresji liniowej.



Rys. 5.4.4 Wartości $E_+(L)$ (górne linie) oraz $E_-(L)$ (dolne linie) otrzymane dla układu o skończonych rozmiarach L dla stopni swobody wyjaśnionych w okienku legendy. Poszczególne linie są ekstrapolowane do granicy termodynamicznej przy pomocy regresji liniowej [22].

Dysponując tymi wynikami sprawdzam, czy ciepło przemiany l_α obliczone ze wzoru (4.5.4) dla energii całego układu ($\alpha = H$) oraz dla energii oddziaływania wszystkich stopni swobody układu z $\alpha = s, \sigma$ i ich iloczynu $s\sigma$, wykazujących niezależne uporządkowanie, czyli dla energii każdego z trzech członów hamiltonianu (2.4.1) osobno, dają spójne wyniki. Są one zebrane w tabelach 5.5.1 i 5.5.2, gdzie dla porównania dodatkowo zestawiałam rezultaty uzyskane z niezależnych analiz zachowania się kumulant V_L oraz U_L , odpowiednio w podrozdziałach 5.2 i 5.3.

Tabela 5.5.1 Zestawienie wartości ciepła przemiany l_α w jednostkach $k_B T$ dla stopni swobody wyjaśnionych w drugim wierszu tabeli, przy stałej sprężenia $K_4 = 0,1$ wyznaczone różnymi metodami.

Metoda	Stopnie swobody			
	s (lub σ)	$s\sigma$	$s + \sigma + s\sigma$	wszystkie (cały H)
kumulant V_L	0,0895(7)	0,0425(6)	0,2215(20)	0,2215(12)
kumulant U_L	0,091(16)	0,0423(14)	0,224(33)	0,224(6)
analiza minimów $-\ln P(E)$	0,0891(10)	0,0423(6)	0,2205 (24)	0,2202(18)

Tabela 5.5.2 Zestawienie wartości ciepła przemiany l_α w jednostkach $k_B T$ dla stopni swobody wyjaśnionych w drugim wierszu tabeli, przy stałej sprężenia $K_4 = 0,18$ wyznaczone różnymi metodami [60].

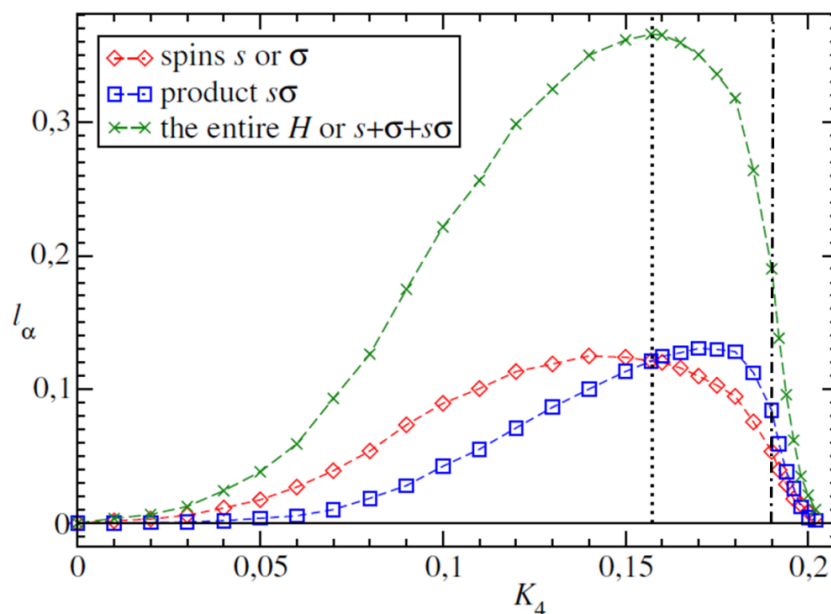
Metoda	Stopnie swobody			
	s (lub σ)	$s\sigma$	$s + \sigma + s\sigma$	wszystkie (cały H)
kumulant V_L	0,09477(3)	0,1283(12)	0,3178(18)	0,3178(12)
kumulant U_L	0,0941(15)	0,1292(7)	0,3174(17)	0,3172(26)
analiza minimów $-\ln P(E)$	0,0935(8)	0,1289(10)	0,3159 (26)	0,3145(13)

Na podstawie uzyskanych wyników można stwierdzić, że suma wkładów l_α do ciepła przemiany od poszczególnych parametrów porządku $\langle \alpha \rangle$ jest równa ciepłu przemiany całego układu obliczonemu z wykorzystaniem pełnego hamiltonianu l_H . Ten warunek jest spełniony w każdym przypadku dla obliczonego ciepła przemiany zarówno na podstawie analiz zachowania kumulant typu Challi i Lee-Kosterlitz, jak i przy niezależnej analizie wykorzystującej histogram rozkładu energii wewnętrznej.

Należy zauważyć, że analizy histogramu rozkładu energii wewnętrznej mogłam użyć tylko dla odpowiednio silnych przemian fazowych pierwszego rodzaju, dla których wyniki ciepła przemiany uzyskane z wykorzystaniem kumulant typu Challi i Lee-Kosterlitz są mniej dokładne, ale są spójne w granicach niepewności z ciepłem uzyskanym na podstawie histogramu energii. W rejonie słabych przemian fazowych pierwszego rodzaju, gdzie obliczenia z użyciem histogramu rozkładu energii wymagają zbyt dużych układów, by obliczenia mogły być wykonane w realnym czasie na dostępnych nam multikomputerach, ze

względem na mniejsze ilości ciepła przemiany otrzymujemy mniejszy rozrzut wyników i mniejsze niepewności, które dzięki temu są porównywalne z otrzymanymi z analiz z wykorzystaniem histogramu.

W punkcie A, w którym model AT redukuje się do modelu Isinga z oddziaływaniem ferromagnetycznym ograniczonym tylko do najbliższych sąsiadów, przemiany zmieniają swoją postać z przemian pierwszego rodzaju na ciągłe. Poza tym przy zbliżaniu się do punktu A od strony dodatnich K_4 wzdłuż linii AP przemiany fazowe pierwszego rodzaju zmieniają się z silnych na dowolnie słabe. W punkcie P zwanym punktem Potts'a ($K_4 = K_2 = 0,157154(4)$) [7], w którym model AT redukuje się do czterostanowego modelu Potts'a w 3W modelu AT ciepło przemiany całego układu ma największą wartość, co ilustruje rys. 5.4.5, na którym pozycję punktu Potts'a wskazuje pionowa kropkowana linia. W 2W modelu AT punkt Potts'a nie tylko jest punktem bifurkacji, ale jest również początkiem ciekawej linii ciągłych przemian fazowych, wzdłuż której w sposób ciągły zmieniają się wykładniki krytyczne, po raz pierwszy pokazanej w pracy [13]. Moje wyniki pozwoliły mi określić rolę punktu Potts'a w 3W modelu AT: jest to punkt, w którym ten układ wykazuje największe ciepło przemiany fazowej pierwszego rodzaju.



Rys. 5.4.5 Zależności wartości ciepła przemiany l_α w jednostkach $k_B T$ od wartości stałej sprzężenia wartości K_4 wzdłuż linii AP_{F_b} , $F_b F$, $F_b G$ pokazanych na rys. 2.4.1 dla stopni swobody α wyjaśnionych w okienku legendy, gdzie najniższa pozycja oznacza, że suma ciepła przemiany otrzymanego dla $\alpha = s$, σ i $s\sigma$ jest równa temu ciepłu dla całego układu obliczonego z wykorzystaniem pełnego Hamiltonianu (1). Słupki błędów są rzędu wielkości symboli. Kropkowana

pionowa linia wskazuje pozycję punktu Potts, a pionowa linia kropkowo-przerywana pokazuje położenie punktu bifurkacji F_b [61].

Moje wyniki są zgodne z wynikami dla pięciu punktów z $K_4/K_2 = 0,3, 0,5, 0,6, 0,8, 1,0$ otrzymanymi przez Arnolda i Zhanga [7] wzdłuż linii AP. Natomiast pionowa linia kropkowo-przerywana na rys. 5.4.5 pokazuje położenie punktu bifurkacji F_b , gdzie ciepło przemiany ma wciąż stosunkowo dużą wartość, również dla iloczynu $s\sigma$. W ten sposób wyniki moich systematycznych i starannych analiz wzdłuż linii APF_b, F_bF, F_bG potwierdzają wniosek Musiała [4], że punkt F_b nie jest punktem trójkrytycznym dla parametru porządku $\langle s \rangle$, jak to stwierdzili w swoich pracach Ditzian i współpracownicy [10] oraz Arnold i Zhang [7]. Ciepło przemiany maleje stopniowo wzdłuż linii F_bF osiągając zero w punkcie trójkrytycznym F dla parametru porządku $\langle s \rangle$ oraz wzdłuż linii F_bG osiągając zero w punkcie trójkrytycznym G dla parametru porządku $\langle s \rangle$ (lub $\langle \sigma \rangle$, co wynika z symetrii hamiltonianu (2.4.2)).

5.5. Analiza uzyskanych wyników i wnioski

Wypracowane pod kierunkiem mojego promotora i zastosowane przeze mnie metody badań oparte na analizie zachowania szeregu wielkości, jak namagnesowanie, kumulant typu Bindera, Challi i Lee-Kosterlitz (który do programu wprowadził Z. Wojtkowiak, a także powtórzył część moich obliczeń głównie dla zweryfikowania poprawności jego działania), jak też energii wewnętrznej i jej histogramu, zostały starannie sprawdzone i mogą być użyte do analiz przemian fazowych pierwszego rodzaju w złożonych układach z wieloma parametrami porządku wykazującymi niezależne uporządkowanie. Wzór (4.3.3) został wyprowadzony dla silnych przemian fazowych pierwszego rodzaju i dlatego do obliczenia ciepła przemiany dla słabych przemian fazowych pierwszego rodzaju, szczególnie w pobliżu trójkrytycznego punktu A od strony dodatnich K_4 , stosowałam przybliżenie Challi (4.3.2), które postrzegałam jako alternatywę do wzoru (4.3.3) dla przemian słabych. Jednak moje analizy wykazały, że chociaż wzór (4.3.3) był wyprowadzony dla silnych przemian fazowych pierwszego rodzaju, to dla 3W modelu AT daje on prawidłowe wyniki zarówno dla silnych, jak i słabych przemian fazowych pierwszego rodzaju, w szczególności zgodne z wynikami uzyskanymi na podstawie przybliżenia Challi dla dowolnie słabej przemiany fazowej w bliskim sąsiedztwie trójkrytycznego punktu A od strony dodatnich wartości stałej sprzężenia K_4 .

Wyniki moich komputerowych eksperymentów pokazują, że im mniej ciepła przemiany, tym bardziej symetryczne szczyty histogramu energii wewnętrznej, zgodnie z podstawowym założeniem Challi i in., że prawdopodobieństwo rozkładu można aproksymować kombinacją liniową dwóch rozkładów Gaussa (gaussianów) o równych

wagach. Jednakże im silniejsze przemiany fazowe, tym większy obszar pod szczytem prawdopodobieństwa po uporządkowanej ferromagnetycznie stronie fazy, co uzasadnia bardziej ogólne założenie Lee i Kosterlitz, że wagi powinny być różne w tej kombinacji. Wniosek o szerszej stosowalności wzoru wyprowadzonego przez Lee i Kosterlitz (4.3.3) wspiera fakt, że równanie (4.3.3) uzyskali niezależnie również Borgs, Kotecky i Miracle-Sole [43], którzy uczynili to przy dużo ogólniejszych założeniach.

Warto też podkreślić tutaj, że chociaż im słabsza przemiana fazowa, tym piki prawdopodobieństwa leżą bliżej siebie, ale ich analiza jest możliwa przy odpowiednio dużych rozmiarach systemu L . Przy umiarkowanych wartościach L analizy z wykorzystaniem kumulant dla $K_4 = 0,03$ wykazały wartość ciepła przemiany dla stopni swobody $\alpha = s$ w jednostkach $k_B T$ tylko 0,0058(21), a dla $K_4 = 0,01$ wartość 0,0016(55), która jest równa zero w granicach niepewności [22].

Odcięte $K_{2,L}^{min}$ minimów zależności $V_{\alpha,L}(K_2)$ i odcięte $K_{2,L}^{max}$ maksimów zależności $U_{\alpha,L}(K_2)$ przy stałej wartości stałej sprzężenia K_4 również są liniowo skorelowane z L^{-3} [3,4,5,14]. Skalując pozycje tych ekstremów do ich granic termodynamicznych ustaliłam odpowiednio wartości $K_{2,\infty}^{min}$ i $K_{2,\infty}^{max}$, które dały możliwość dokładniejszego zlokalizowania punktu przemiany fazowej, czyli krytycznej wartości K_2 . Wartości $K_{2,\infty}^{min}$, $K_{2,\infty}^{max}$, jak i krytyczne wartości K_2 określone na podstawie zależności $Q_{\alpha,L}(K_2)$ są zgodne w granicach niepewności przy określonej wartości K_4 dla całych linii APF_b, F_bF oraz F_bG na diagramie fazowym pokazanym na rys. 2.4.1. Jako $K_{2,C}$ oznaczam obliczoną wartość średnią ze wszystkich krytycznych wartości $K_{2,\infty}^{min}$ i $K_{2,\infty}^{max}$ dla ustalonego K_4 .

Po wystarczająco precyzyjnym zlokalizowaniu punktów przemian fazowych za pomocą niezależnych analiz zależności trzech różnych kumulant Q , V i U od stałej sprzężenia K_2 dla ustalonej wartości K_4 mogłam wykorzystać histogram rozkładu energii wewnętrznej jako inną niezależną metodę. Dla wystarczająco silnej przemiany fazowej pierwszego rodzaju, uzyskałam całkowicie niezależne potwierdzenie poprawności i zwiększoną dokładność moich wyników dzięki analizie histogramu rozkładu energii wewnętrznej [3,18,44] dla $\alpha = s$, σ , $s\sigma$, a także H . Również tutaj H oznacza, że przyjąłam cały hamiltonian (określony w równaniu (2.4.2)) jako energię, nie tylko energię oddziaływania jej poszczególnych stopni swobody. Dla wszystkich parametrów porządku można zaobserwować dwa różne piki prawdopodobieństwa $P_{\alpha,L}$ odpowiadające energii $E_{\alpha,L,-}$ i $E_{\alpha,L,+}$ odpowiednio

dla stanów uporządkowanego i nieuporządkowanego. Dokładne lokalizowanie punktu przemiany fazowej jest kluczowe dla tej metody [3].

Te dwa piki prawdopodobieństwa $P_{\alpha,L}$ odpowiadają minimom funkcji $-\ln P_{\alpha,L}(E_{\alpha,L})$ [3]. Najpierw określiłam wartości energii odpowiadające niższemu minimum $E_{\alpha,L,-}$ tej funkcji dla stanu uporządkowanego i górnemu minimum $E_{\alpha,L,+}$ dla stanu nieuporządkowanego dla wszystkich trzech parametrów porządku $\langle \alpha \rangle$ wyszczególnionych w poprzednim akapicie dla skończonego systemu o rozmiarze L . Rysunek 5.4.4 przedstawia wyniki moich analiz dla energii $E_{\alpha,L,-}^{min}$ (dolne linie) i $E_{\alpha,L,+}^{min}$ (górne linie) w jednostkach $k_B T$ dla energii oddziaływania stopni swobody $\alpha = s$ (te same wyniki uzyskuje się dla $\alpha = \sigma$ dzięki symetrii hamiltonianu (2.4.2)), dla iloczynu $s\sigma$ i dla całego hamiltonianu osobno, wyjaśnione w legendzie, dla systemu o różnym rozmiarze $16 \leq L \leq 30$ w punkcie krytycznym $K_4 = 0,1$ i $K_{2,C} = 0,18381(6)$.

Wartości $E_{\alpha,L,-}$ i $E_{\alpha,L,+}$ w funkcji L^{-2} skalują się liniowo do odpowiednich wartości $E_{\alpha,-}$ i $E_{\alpha,+}$ [3,14,18]. Zgadza się to z teoretycznym wyprowadzeniem zależności pozycji tych minimów od $1/L^{d-1}$ w artykule Lee i Kosterlitz [3], gdzie d jest wymiarem układu. Wynika to z ich równania (2.3), na które ci autorzy wskazują bezpośrednio opisując wyniki na swoim rysunku 3 na stronie 3270. Należy zauważyć, że wyniki dla ciepła przemiany uzyskane z zależności pozycji tych minimów od $1/L^3$, to znaczy od $1/L^d$ wyprowadzone w artykule Billoire, Neuhaus i Berg [45], jak również od $1/L^1$, różnią się istotnie od wyników uzyskanych na podstawie kumulant V i U , ich słupki niepewności są rozłączne. Dlatego poszczególne linie na rysunku 5.4.4 zostały ekstrapolowane do ich granic termodynamicznych za pomocą regresji liniowej w funkcji L^{-2} . Przykładowo dla stałej sprzężenia $K_4 = 0,12$ otrzymałam wartości $E_{s,-} = 0,0900(6)$ i $E_{s,+} = 0,2024(4)$, a po podstawieniu ich do równania (4.5.4) ciepło przemiany wyniosło $l_{s,P} = 0,1124(10)$ w jednostkach $k_B T$ [47]. Indeks P wskazuje, że wartość ciepła przemiany uzyskałam na podstawie zależności $-\ln P_{\alpha,L}(E_{\alpha,L})$. Oczywiście wyniki $l_{\sigma,P}$ dla stopni swobody σ są takie same ze względu na symetrię hamiltonianu (2.4.2). Podobnie $E_{s\sigma,-} = 0,0921(6)$, $E_{s\sigma,+} = 0,16377(12)$ i $l_{s\sigma,P} = 0,0717(7)$. W ten sposób obliczyłam wkład w ciepło przemiany wszystkich trzech parametrów porządku.

Dwie górne linie na rysunku 5.4.4 pokazują wyniki dla całości układu uzyskane z wykorzystaniem energii całego hamiltonianu (2.4.2), co po ekstrapolacji do granicy termodynamicznej dla $K_4 = 0,12$ dało $E_{H,-} = 0,27108(36)$ i $E_{H,+} = 0,56959(24)$. W ten sposób za pomocą równania (4.5.4) znalazłam ciepło przemiany całego systemu z najwyższą

dokładnością $l_{H,P} = 0,2985(6)$. Dla mojego systemu ważne było, aby sprawdzić czy l_{sum} wkładów l_α do ciepła przemiany od indywidualnych parametrów porządku $\langle \alpha \rangle$ jest równa l_H w granicach niepewności pomiarowych na całej linii APF_b.

Oczywiście warunek ten jest spełniony również w przypadku ciepła przemiany obliczonego na podstawie analiz zachowania kumulant V i U . Na przykład dla $K_4 = 0,12$ wartość $U_{s,\infty}^{max} = U_{\sigma,\infty}^{max} = 1,183(12)$ daje $l_{s,U} = l_{\sigma,U} = 0,1143(23)$, a dla $U_{s,\infty}^{max} = 1,084(5)$ otrzymałam $l_{s,\sigma,U} = 0,0713(15)$, zatem $l_{sum,U} = 0,2999(61)$, co w granicach niepewności jest zgodne z $l_{H,U} = 0,2997(27)$ uzyskanym na podstawie $U_{max,H} = 1,146(4)$. Podobnie $V_{s,\infty}^{min} = V_{\sigma,\infty}^{min} = 0,380(6)$ daje $l_{s,V} = l_{\sigma,V} = 0,1130(14)$, a dla $V_{s,\infty}^{min} = 0,546(6)$ jest $l_{s,\sigma,V} = 0,0712(16)$ i stąd $l_{sum,V} = 0,2972(44)$, co w granicach niepewności pomiarowych zgadza się z $l_{H,V} = 0,2976(20)$ otrzymanym z $V_{H,\infty}^{min} = 0,449(5)$.

Dla silnych przemian fazowych wyniki $l_{\alpha,V}$ i $l_{\alpha,U}$ są mniej dokładne, ale spójne w granicach niepewności pomiarowych z ciepłem przemiany $l_{\alpha,P}$ otrzymanym na podstawie histogramu energii. Należy jednak pamiętać, że analiza histogramu energii, której używałam została wyprowadzona dla silnych przejść fazowych pierwszego rodzaju. Dlatego dla $K_4 < 0,06$ i $K_4 > 0,195$ dwa minima zależności $-\ln P_{\alpha,L}(E_{\alpha,L})$ stają się rozdzielone przy zbyt dużych wartościach rozmiaru układu L do uzyskania wyników w rozsądnym czasie. Jednak ze względu na mniejszą ilość ciepła przemiany w tych zakresach wartości K_4 , moje wyniki $l_{\alpha,V}$ i $l_{\alpha,U}$ otrzymane na podstawie kumulant V i U mają porównywalne słupki niepewności, zgodnie z oczekiwaniami.

Ta cecha jest niezbędna do analiz w pobliżu punktu A na rysunku 2.4.1, gdzie model AT redukuje się do modelu Isinga z oddziaływaniem ferromagnetycznym ograniczonym tylko do najbliższych sąsiadów. Zatem tutaj przemiany fazowe zmieniają swój charakter z pierwszego rodzaju na ciągłe. Interesujący jest fakt występowania arbitralnie słabych przemian fazowych pierwszego rodzaju podczas zbliżania się do punktu A, co zostało zasygnalizowane w pracy Arnolda i Zhanga [7], jednak moje wyniki demonstrują to bezpośrednio.

Rysunek 5.4.5 ilustruje wartości ciepła przemiany dla przemian fazowych wzdłuż linii APF_b. Kropkowano-przerywana pionowa linia wskazuje punkt bifurkacji F_b przy $K_4 = 0,190(1)$ i $K_2 = 0,13947(4)$, którego położenie udokładniłam zmniejszając niepewność dla wartości K_4 w stosunku do podanej w pracy Musiała [4]. Linia ta pokazuje, że nie tylko ciepło przemiany l_H i l_s , ale także $l_{s,\sigma}$ w punkcie F_b pozostają znacząco różne od 0. Zatem

punkt trójkrytyczny F dla parametru porządku $\langle s\sigma \rangle$ nie jest punktem bifurkacji, jak stwierdzili autorzy prac [7] i [10], ale jest znacząco przesunięty w prawo i ma współrzędne $K_4 = 0,198(1)$ i $K_2 = 0,12816(5)$, gdzie również udokładniłam niepewność wartości K_4 w stosunku do wyników pracy [4]. Podobnie precyzyjniej w stosunku do wyników pracy [4] ustaliłam pozycję $K_4 = 0,202(1)$ i $K_2 = 0,13295(4)$ punktu trójkrytycznego G dla przemian pomiędzy fazami ferromagnetyczną a paramagnetyczną dla parametru porządku $\langle s \rangle$ (lub $\langle \sigma \rangle$).

Natomiast kropkowana pionowa linia wskazuje pozycję punktu Potts'a, który w 2W modelu AT jest punktem bifurkacji. Rysunek 5.4.5 wskazuje rolę punktu Potts'a w 3W modelu AT przy $K_4 = K_2 = 0,157154(4)$ [7], w którym to ciepło przemiany całego układu ma najwyższą wartość $l_H = 0,3657(12)$, natomiast wartość maksymalna $l_s = l_\sigma = 0,1250(10)$ występuje przy mniejszej wartości $K_4 = 0,14(1)$, a wartość maksymalna $l_{s\sigma} = 0,1306(5)$ przy wyższej wartości $K_4 = 0,17(1)$. Ustalone przeze mnie położenie maksimum ciepła przemiany l_H zgadza się z pozycją punktu P precyzyjnie ustaloną w pracy Arnolda i Zhanga [7].

Wiarygodność moich wyników podnosi fakt, że są one w pełni zgodne z wynikami uzyskanymi z użyciem algorytmu klastrowego typu Wolffa [31] dla modelu AT opracowanego przez Wojtkowiaka i Musiała. Ta weryfikacja jest istotna ze względu na obecność w 3W modelu AT stanów metastabilnych i niestabilnych [3], które mogą być problemem dla algorytmu Metropolis'a, który generując nowe konfiguracje równowagowe odwraca pojedyncze spiny. Wojtkowiak i Musiał wypracowali tutaj najlepszą strategię pozwalającą uzyskać wyniki o porównywalnych niepewnościach w krótszym czasie: algorytm klastrowy typu Wolffa jest używany w regionie krytycznym, a Metropolis'a poza nim [31].

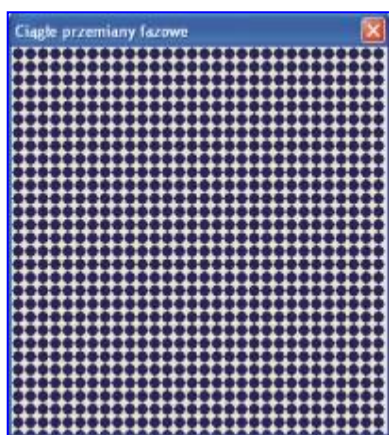
Warto zauważyć, że dla ujemnych wartości K_4 na diagramie fazowym na rysunku 2.4.1 pojawia się efekt szerokiego przejścia typu crossover, który obejmuje całość linii między punktami trójkrytycznymi A i H [14] pokazanych na rysunku 2.4.1. Natomiast pytanie o zachowanie nieuniwersalne tego modelu wzdłuż linii HK' [46,47], jak również zbadanie regionu obejmującego granicę między fazą $\langle s\sigma \rangle_{AF}$ a obszarem faz mieszanych $\langle \sigma \rangle$ pozostaje otwarte i wymaga dalszych badań.

6. Zastosowanie symulacji komputerowych – aplikacja *Ciągłe przemiany fazowe*

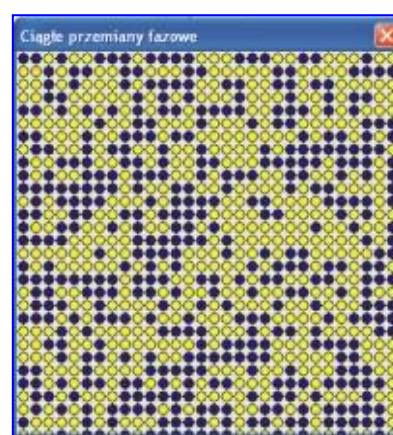
Celem praktycznym przedmiotowej aplikacji jest wykorzystanie ideowo prostego modelu Isinga do badania i wizualizacji zachowania się układu w obszarze ciągłego przejścia fazowego w skali mikroskopowej. Chociaż możemy tu pokazać tylko układy o skończonych, stosunkowo małych rozmiarach, to jednak pozwala to zaobserwować fluktuacje o coraz większej skali, czyli zobrazować podstawowy mechanizm tego przejścia. Aplikacja umożliwia dowolnie małą zmianę temperatury w trakcie eksperymentu symulacyjnego, jak też przejście od uporządkowania ferromagnetycznego, poprzez nieporządek, aż do uporządkowania antyferromagnetycznego i na odwrót.

Moim celem było także zainteresowanie młodzieży zagadnieniami fizycznymi dotyczącymi przemian fazowych, umotywowanie do ich poznawania oraz demonstracja włączenia technologii informacyjnej w kształcenie fizyczne poprzez wykorzystanie programu komputerowego *Ciągłe przemiany fazowe* utworzonego w środowisku programistycznym Builder C++. Program ten umożliwi zademonstrowanie i wyjaśnienie spontanicznego uporządkowania ferromagnetyka i antyferromagnetyka przy nieobecności zewnętrznego pola magnetycznego, a przede wszystkim ich przejście do fazy nieuporządkowanej przy podwyższeniu temperatury, w ramach ideowo prostego modelu Isinga.

Zmieniając temperaturę próbki, czyli K , można obserwować zmiany ustawienia spinów. Mamy tutaj dwa konkurujące czynniki: oddziaływanie spinów stara się ustawić je równoległe (bądź antyrównoległe) względem siebie, a drgania termiczne starają się ten porządek niszczyć. Zatem gdy układ mamy w stanie paramagnetycznym, to w wyniku obniżania temperatury następuje stopniowe porządkowanie spinów. W wyniku fluktuacji pojawiają się zmienne obszary o zgodnym ustawieniu spinów, takie mikrodomeny. Dalsze zmniejszanie temperatury powoduje gwałtowny wzrost fluktuacji wielkości tych mikrodomen, aż ferromagnetyk począwszy od pewnej temperatury T_0 , zwanej krytyczną, spontanicznie staje się jedną domeną. W naszej symulacji ta sytuacja odpowiada prawie wszystkim spinom niebieskim albo żółtym na rysunku 6.1.1. Przy pomocy programu *Ciągłe przemiany fazowe* można także zaobserwować, że z kolei wzrost temperatury spowoduje proces odwrotny: w wyniku wzrostu drgań termicznych w pobliżu temperatury krytycznej stopniowo rosną fluktuacje, aż po jej przekroczeniu pojawia się nieuporządkowanie momentów magnetycznych. Każda próba uporządkowania niszczone jest przez drgania termiczne, jak na rys. 6.1.2.



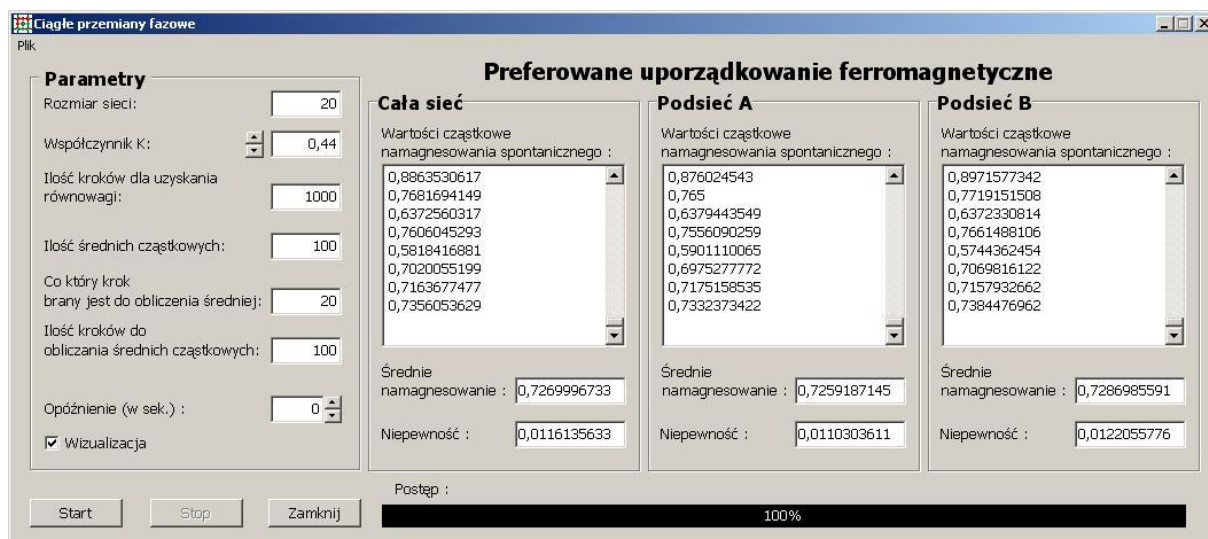
Rys.6.1.1 W niskich temperaturach dla $T \ll T_0$ (tutaj $K = 0,9$) ferromagnetyk ma uporządkowane kierunki spinów, staje się jakby jedną domeną.



Rys. 6.1.2. Ze wzrostem temperatury dla $T \gg T_0$ (tutaj $K = 0,1$) rośnie nieuporządkowanie momentów magnetycznych.

Zatem zwiększenie temperatury powyżej wartości krytycznej prowadzi do stanu, w którym znika uporządkowanie spontaniczne i ferromagnetyk zamienia się w paramagnetyk. Przejście pomiędzy tymi fazami (przemiana fazowa) zachodzi w temperaturze krytycznej zwanej temperaturą Curie T_0 . W temperaturach wyższych od T_0 próbka ma momenty magnetyczne skierowane przypadkowo. W naszym programie *Ciągłe przemiany fazowe* zmieniając temperaturę możemy obserwować zarówno lokalne uporządkowanie spinów w czasie fluktuacji, jak też uporządkowanie dalszego zasięgu, czy też brak uporządkowania, wszystko w trakcie jednego eksperymentu komputerowego.

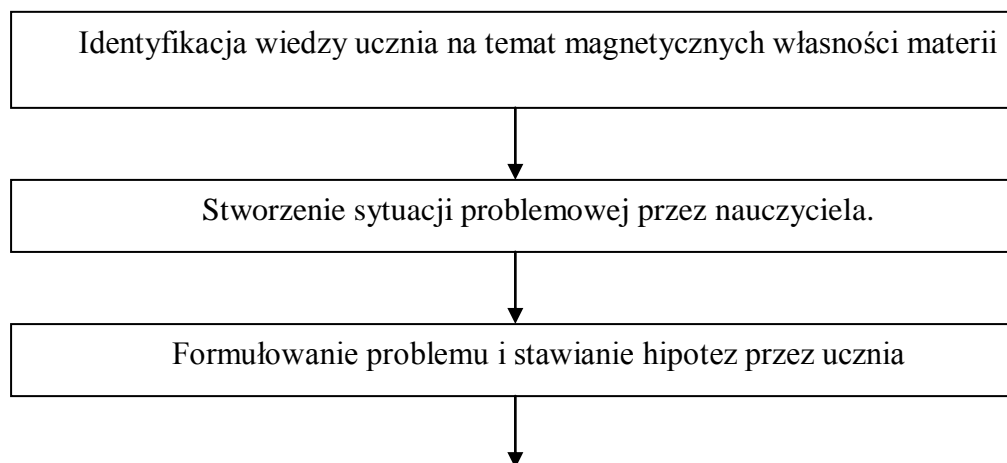
W oknie głównym programu, przedstawionym na rys. 6.1.3, zmianę temperatury próbki uzyskujemy poprzez zmianę wartości współczynnika K , co jest także możliwe w trakcie symulacji. W ferromagnetykach energia oddziaływania pary najbliższych sąsiadów J jest ujemna, czyli mamy $K > 0$, i w związku z tym minimum energii całego układu spinów w stanie podstawowym osiągnąć jest, gdy wszystkie spiny (momenty magnetyczne atomów) są równoległe do siebie i mają ten sam zwrot. W antyferromagnetyku mamy $J > 0$ ($K < 0$) i minimum energii układu spinów w stanie podstawowym występuje przy spinach ustawionych antyrównoległe, czyli kierunki spinów też są równoległe, a zwroty par spinów będących najbliższymi sąsiadami są przeciwne.

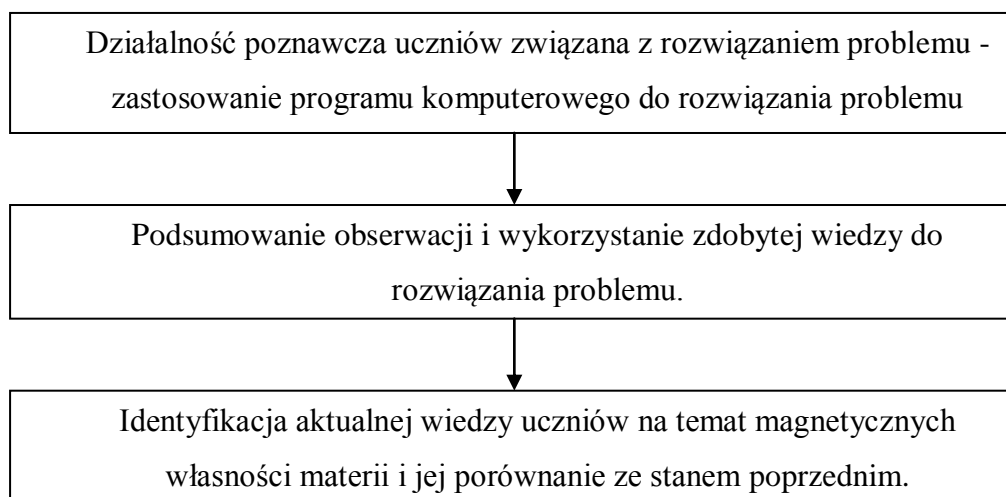


Rys. 6.1.3. Główne okno aplikacji *Ciągłe przemiany fazowe*.

Możemy także analizować zmiany średniego spontanicznego namagnesowania próbki ze zmianą temperatury. Jest to wprawdzie tylko namiastka rzeczywistego układu, gdyż rozpatrujemy bardzo małe układy w porównaniu z rozmiarami makroskopowych próbek, ale bardzo poglądowo pokazuje on mechanizm ciągłej przemiany fazowej: poprzez fluktuacje o coraz większej skali w miarę zbliżania się do K_C .

Stosując aplikację „Ciągłe przemiany fazowe” na lekcji fizyki wykorzystujemy zainteresowanie technologią informacyjną do realizacji konstruktywistycznego modelu uczenia się, według którego rozumienie nowego zjawiska wymaga aktywności uczniów, ciągłego tworzenia i dopasowywania hipotez i ich weryfikacji. To uczenie się ze zrozumieniem zakłada integrację nowej wiedzy z całością wiedzy ucznia poprzez włączanie nowych elementów, poszerzaniu już istniejących, tworzeniu nowych relacji i korygowaniu błędów. Nauczanie oparte na konstruktywizmie odbywa się w kilku etapach, które powinniśmy uwzględnić planując lekcję:





Program *Ciągle przemiany fazowe* został stworzony w oparciu o metodę Monte Carlo i algorytm Metropolis, których głębsze zrozumienie wymaga znajomości podstaw mechaniki statystycznej. Zatem podstawy jego działania mogą być trudne do zrozumienia dla przeciętnego ucznia. Jednak można ten program potraktować jako mikroskop, który widzi tylko spiny. Przecież nie każdy musi znać budowę i działanie mikroskopu, aby dobrze interpretować wyniki obserwacji. Ogląd magnetyka tym „przyrządem” ułatwi zrozumienie wpływu temperatury na jego własności magnetyczne, przy braku zewnętrznego pola magnetycznego. Da również pewien wgląd w istotę i mechanizm ciągłej przemiany fazowej, chociaż w symulacjach mamy układy o skończonych i stosunkowo małych rozmiarach, a prawdziwy obraz można zobaczyć dopiero w granicy termodynamicznej. Analiza tego problemu przy pomocy skalowania skończenie rozmiarowego jest tu zdecydowanie nadmiarowa.

Jednak warto zauważyć, że rozmiar sieci rzędu kilkadziesiąt pozwala zaobserwować fluktuacje o rosnącej skali w miarę zbliżania się K do K_C , co obrazuje podstawowy mechanizm ciągłej przemiany fazowej. Zatem zmieniając T lub J , czyli K , mamy możliwość obserwacji zmiany lokalnego uporządkowania spinów w czasie fluktuacji w obszarze przemiany fazowej, jak też tworzące się spontanicznie uporządkowanie dalszego zasięgu, czy jego brak, wszystko w trakcie jednego eksperymentu komputerowego, który można przeprowadzić w warunkach szkolnych.

Podsumowanie

Szczegółowe podsumowanie i wnioski płynące z analizy wyników moich eksperymentów komputerowych w odniesieniu do linii APF_b , F_bF i F_bG , udokładnione pozycje punktów trójkrytycznych F i G , jak też punktu bifurkacji F_b i potwierdzenie pozycji punktu Potts'a P na diagramie fazowym $3W$ modelu AT zilustrowanym na rysunku 2.4.1 są przedstawione w podrozdziale 5.5, a zastosowania symulacji komputerowych w edukacji w rozdziale 6. Natomiast niniejszy rozdział zawiera ogólne podsumowanie osiągnięć mojej rozprawy doktorskiej.

Eksperyment komputerowy MC i metoda wypracowana przeze mnie pod kierunkiem mojego promotora, która opiera się na analizach zachowania wielkości, takich jak namagnesowanie, trzy różne rodzaje kumulant oraz energia wewnętrzna i jej histogram zostały przeze mnie dokładnie sprawdzone. Z powodzeniem mogą być stosowane do analizy temperaturowych przemian fazowych pierwszego rodzaju nie tylko w układach ze stopniami swobody typu Isinga z jednym niezależnym parametrem porządku, ale także w złożonych systemach o wielu parametrach porządku pokazujących indywidualne uporządkowanie, jak w modelu AT . Chociaż uzyskanie wszystkich wyników z założoną dokładnością czterech cyfr znaczących wymagało ponad tysiąca uruchomień programu komputerowego to jednak zostały one otrzymane w rozsądnym czasie, ponieważ w tym celu prowadziłam obliczenia głównie na próbkach o rozmiarze L poniżej 40.

Wyniki moich eksperymentów komputerowych uzasadniają także fakt, że chociaż równanie (4.3.3), które określa wartość minimów kumulant typu Challa V przeskalowaną do granicy termodynamicznej, zostało wyprowadzone przez Lee-Kosterlitz'a [3] dla silnych przemian fazowych pierwszego rodzaju, to daje ono poprawne wyniki dla obydwu, silnych i słabych przemian fazowych, zgodnie z bardziej rygorystycznym wyprowadzeniem równania uzyskanym przez Borgs i in. [43], które wskazuje na możliwość jej zastosowania również do słabych przemian fazowych. Ten wniosek dotyczy również równania (4.4.2), które określa wartość minimów kumulant typu Lee-Kosterlitz'a U przeskalowaną do granicy termodynamicznej.

Ponadto moje wyniki ciepła przemiany $l_{\alpha,P}$ otrzymane z zależności pozycji minimum funkcji $-\ln P_{\alpha,L}(E_{\alpha,L})$ od $1/L^{d-1}$ wyprowadzone przez Lee i Kosterlitz'a [3] są zgodne z wynikami ciepła $l_{\alpha,V}$ i $l_{\alpha,U}$ obliczonymi na podstawie kumulant V_{α} i U_{α} w granicach niepewności. Podczas gdy $l_{\alpha,P}$ otrzymane z zależności pozycji tych minimów od $1/L^d$

wyprowadzone w pracy Billoire, Neuhaus i Berg [45] różnią się istotnie od $l_{\alpha V}$ i $l_{\alpha U}$, to znaczy, że ich słupki niepewności są rozłączne.

Należy podkreślić, że znacząco rozszerzyłam zastosowanie metody Lee i Kosterlitz, którzy zaproponowali jej stosowanie tylko do silnych przemian fazowych pierwszego rodzaju i tylko w układach ze stopniami swobody typu Isinga z jednym niezależnym parametrem porządku. Natomiast ja zbadalam szerokie spektrum przemian fazowych od arbitralnie słabych do silnych, uzyskując porównywalne niepewności pomiarowe wyników w podobnym czasie obliczeń dla jednego z podstawowych modeli fizyki statystycznej, który jest układem złożonym o trzech parametrach porządku wykazujących indywidualne uporządkowanie.

W moich eksperymentach komputerowych nie tylko wykorzystywałam standardowy algorytm Metropolis, który wykazuje spowolnienie krytyczne, ale także ze względu na obecność stanów metastabilnych i niestabilnych [55], wiarygodność uzyskanych przeze mnie wyników znacząco podnosi fakt sprawdzenia ich przez Wojtkowiaka i Musiała, którzy w tym celu wykorzystali skonstruowany przez siebie algorytm klastrowy typu Wolffa dostosowany do modelu Ashkina-Tellera [31], w którym problem krytycznego spowolnienia praktycznie nie istnieje.

Ponieważ badałam głównie przemiany fazowe pierwszego rodzaju, podczas których druga faza rozrasta się obrębie pierwszej, dlatego testowo zwiększałam liczbę MCS do 10^9 , aby upewnić się, że wartości obliczonych wielkości pozostają takie same i tylko nieznacznie zmniejszają się słupki ich niepewności. Stąd wnioskuję, że stosowana przeze mnie liczba MCS od $0,4 \times 10^6$ dla najmniejszych próbek do $3,6 \times 10^6$ dla największych L jest wystarczająca, aby podczas mojego eksperymentu komputerowego układ wielokrotnie tunelował z jednej fazy do drugiej w obszarze przemiany fazowej pierwszego rodzaju.

Jeżeli chodzi o zastosowania edukacyjne, to wprawdzie utworzenie i przetestowanie programu *Ciągłe przemiany fazowe* wymaga znajomości podstaw mechaniki statystycznej i zasad programowania, które mogą być trudne do zrozumienia dla przeciętnego ucznia, to jednak można ten program potraktować jako mikroskop, który demonstruje zachowanie spinów, kluczowych elementów do zrozumienia istoty magnetyzmu. Obserwowanie zachowania się magnetyka tym „przyrządem” ułatwia zrozumienie wpływu temperatury na jego własności magnetyczne, przy braku zewnętrznego pola magnetycznego. Daje również pewien wgląd w istotę i mechanizm ciągłej przemiany fazowej typu porządek-nieporządek, chociaż w symulacjach mamy układy o skończonych i stosunkowo małych rozmiarach, a prawdziwy obraz można zobaczyć dopiero w granicy termodynamicznej. Oczywiście analiza tego problemu przy pomocy skalowania skończenie rozmiarowego jest dla uczniów

zdecydowanie nadmiarowa, ale rozmiar sieci rzędu kilkadziesiąt pozwala zaobserwować fluktuacje o rosnącej skali w miarę zbliżania się stałej sprzężenia K do wartości krytycznej, zmiany lokalnego uporządkowania spinów w czasie fluktuacji w obszarze przemiany fazowej, jak też tworzące się spontanicznie uporządkowanie dalszego zasięgu, czy jego brak, co obrazuje podstawowy mechanizm ciągłej przemiany fazowej. Takie eksperymenty komputerowe można przeprowadzać w warunkach szkolnych na przeciętnym komputerze osobistym, czy laptopie.

Na początku badania te prowadziłam pod kierunkiem mojego promotora (studia doktoranckie rozpoczęłam w 2005 roku, a otwarcie przewodu doktorskiego nastąpiło 24.07.2009) rozwijając metodę, której podstawy zostały przez niego sformułowane w pracy [4]. Zatem w momencie rozpoczęcia moich badań metoda ta była oparta tylko o analizę zachowania namagnesowania, kumulat Bindera Q oraz kumulant typu Challi V określonych wzorem (4.3.1) z wykorzystaniem wzoru (4.3.2), którego ograniczone zastosowanie przedyskutowałam w tej pracy. Po stwierdzeniu przeze mnie załamania się analiz dla silniejszych przemian fazowych wspólnie z promotorem do interpretacji tych wyników postanowiliśmy sięgnąć do pracy Lee-Kosterlitz [3] adresowanej właśnie do silnych przemian fazowych. Zauważyłam zgodność wyników tych drugich analiz z otrzymanymi na podstawie wzoru (4.3.2), co pozwoliło mi rozszerzyć stosowaną metodę na przemiany fazowe o dowolnej ilości ciepła przemiany. Badania były rozciągnięte w czasie, gdyż cały czas pracuję jako nauczyciel fizyki najpierw w Pleszewie, a potem w Kaliszu.

W 2013 roku do zespołu dołączył Zbigniew Wojtkowiak, który rozpoczął studia doktoranckie i pracę badawczą pod kierunkiem prof. G. Musiała. Z. Wojtkowiak zasadniczo zajmuje się innym obszarem przemian w $3W$ modelu Ashkina-Tellera z ujemnymi wartościami stałej sprzężenia K_4 , ale dodał on do naszego programu komputerowego obliczanie wartości kumulant typu Lee-Kosterlitz U określonych wzorem (4.4.1), co umożliwiło mi ich analizę analogiczną do dotąd wykorzystywanej przeze mnie dla kumulant typu Challi, jednak z wykorzystaniem asymptotycznego wzoru (4.4.2) do ekstrapolacji tych wyników do granicy termodynamicznej. Sprawdzając poprawność obliczeń programu z kumulatami U , Z. Wojtkowiak powtórzył pewną część moich wcześniejszych obliczeń i analiz, otrzymując pełną ich zgodność. Od tego czasu mogłam w swoich eksperymentach komputerowych wykorzystywać obydwa typy kumulant V i U . Po uzyskaniu zgodności wyników ciepła przemiany otrzymanych na bazie kumulant, pod kierunkiem mojego promotora wprowadziłam do programu komputerowego obliczanie histogramu rozkładu energii wewnętrznej, co było inną, niezależną weryfikacją wcześniej otrzymanych wyników,

dodatkowo pozwalającą naszemu zespołowi uzyskiwać najbardziej dokładne wyniki dla ciepła przemiany w obszarze silniejszych przemian, jak również dodatkowe narzędzie do określania charakteru przemian fazowych. W zasadzie już po zakończeniu obliczeń do mojej rozprawy doktorskiej, w 2020 roku Wojtkowiak i Musiał [31] zastosowali algorytm klastrowy dla 3W modelu Ashkina-Tellera po raz pierwszy w literaturze przedmiotu, co umożliwiło nam zweryfikowanie zgodności wyników, które wcześniej zostały otrzymane z wykorzystaniem algorytmu Metropolisa.

Zastosowania edukacyjne przygotowałam pod kierunkiem mojego promotora, stronę dydaktyczną konsultując się ze Stanisławem Dylakiem, profesorem z Zakładu Pedagogiki Wydziału Studiów Edukacyjnych UAM. Natomiast samą aplikację pod moim kierunkiem napisał ówczesny student kierunku Informatyka Stosowana na Wydziale Fizyki UAM Krzysztof Gołąb.

Publikacje własne

Łączny współczynnik wpływu (Impact Factor) 4,266 (2021)

1. G. Musiał, L. Dębski, D. Jeziorek-Knioła, K. Gołąb, *A self-scheduling scheme for parallel processing in heterogeneous environment: simulations of the Monte Carlo type*, Lect. Notes in Comp. Sci. **4967**, 429 – 438 (2008)
2. D. Jeziorek-Knioła, *Magnetyzm wokół nas*, Nauczanie przedmiotów przyrodniczych Nr 27 (3/2008) biuletyn Polskiego Stowarzyszenia Nauczycieli Przedmiotów Przyrodniczych
3. D. Jeziorek-Knioła, G. Musiał, S. Dylak, K. Gołąb, *Wpływ temperatury na własności magnetyków: ciągle przemiany fazowe*, Fizyka w Szkole 2/2011, 18 – 29 (2011)
4. D. Jeziorek-Knioła, G. Musiał, L. Dębski, J. Rogiers, S. Dylak, *On non-Ising phase transitions in the 3D standard Ashkin-Teller model*, Acta Phys. Polon. A **121**, 1105 – 1107 (2012)
5. D. Jeziorek-Knioła, G. Musiał, Z. Wojtkowiak, *Arbitrarily Weak First Order Phase Transitions in the 3D Standard Ashkin-Teller Model by MC Computer Experiments*, Acta Phys. Polon. A **127**, 327 – 329 (2015)
6. D. Jeziorek-Knioła, Z. Wojtkowiak, G. Musiał, *Computation of latent heat based on the energy distribution histogram in the 3D Ashkin-Teller model*, Acta Phys. Polon. A **133**, 435 – 437 (2018)
7. D. Jeziorek-Knioła, Z. Wojtkowiak, G. Musiał, *Computation of latent heat in the system of multi-component order parameter: 3D Ashkin-Teller model*, Comput. Meth. Scie. Techn. **25**, 31 – 38 (2019)
8. G. Musiał, D. Jeziorek-Knioła, and Z. Wojtkowiak, *Monte Carlo examination of first-order phase transitions in a system with many independent order parameters: Three-dimensional Ashkin-Teller model*, Phys. Rev. E **103**, 062124-1 – 7 (2021)

Literatura

- [1] A. M. Ferrenberg, R. H. Swendsen, Phys. Rev. Lett. **61**, 2635 (1988)
- [2] J. Lee, J. M. Kosterlitz, Phys. Rev. Lett. **65**, 137 (1990)
- [3] J. Lee, J. M. Kosterlitz, Phys. Rev. B **43**, 3265 (1991)
- [4] G. Musiał, Phys. Rev. B **69**, 024407 (2004)
- [5] M. S. S. Challa, D. P. Landau, K. Binder, Phys. Rev. B **34**, 1841 (1986)
- [6] J. J. Binney, N. J. Dowrick, A. J. Fisher, M.E.J. Newman, Zjawiska krytyczne. Wstęp do teorii grupy renormalizacji, PWN (1998)
- [7] P. Arnold, Y. Zhang, Nuclear Phys. B **501**, 803 (1997)
- [8] K. Binder, D.P. Landau, Phys. Rev. B **30**, 1477 (1984)
- [9] J. Klamut, K. Durczewski, J. Sznajd, Wstęp do fizyki przejść fazowych, Zakład Narodowy im. Ossolińskich (1979)
- [10] R. V. Ditzian, J. R. Banavar, G. S. Grest, L. P. Kadanoff, Phys. Rev. B **22**, 2542 (1980)
- [11] G. Musiał, L. Dębski, D. Jeziorek-Knioła, K. Gołąb, Lect. Notes in Comp. Scie., vol. 4967, p. 429 (2008)
- [12] G. Musiał, L. Dębski, G. Kamieniarz, Phys. Rev. **66**, 012407 (2002)
- [13] C. Fan, F. Y. Wu, Phys. Rev. B **2**, 723 (1970)
- [14] Z. Wojtkowiak, G. Musiał, Physica A **513**, 104 (2019)
- [15] N. Metropolis, A. W. Rosenbluth, M. N. Rosenbluth, A. H. Teller, J. Chem. Phys. **21**, 1087 (1953)
- [16] R. H. Swendsen and J.-S. Wang, Phys. Rev. Lett. **58**, 86 (1987)
- [17] U. Wolff, Phys. Rev. Lett. **62**, 361 (1989)
- [18] D. Jeziorek-Knioła, Z. Wojtkowiak, G. Musiał, Acta Phys. Polon. A **133**, 435 (2018)
- [19] G. Szukowski, G. Kamieniarz, G. Musiał, Phys. Rev. E **77**, 031124 (2008)
- [20] W. Janke, Lecture Notes in Phys. **739**, 79 (2008)
- [21] K. Binder, D. W. Heermann, Monte Carlo Simulation in Statistical Physics, Springer Series in Solid State Physics, Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 1988
- [22] D. Jeziorek-Knioła, G. Musiał, Z. Wojtkowiak, Acta Phys. Polon. A **127**, 327 (2015)
- [23] R.B. Griffith, Phys. Rev. Lett. **24**, 1479 (1970)
- [24] D. Jeziorek-Knioła, G. Musiał, L. Dębski, J. Rogiers, S. Dylak, Acta Phys. Polon. A **121**, 1105 (2012)
- [25] E. Ising, Z. der Physik **31**, 253 (1925)
- [26] L. Onsager, Phys. Rev. **65**, 117 (1944)

- [27] A. B. Zamolodchikov, *Int. J. Mod. Phys. A* **4**, 4235 (1989)
- [28] C. Fan, *Phys. Lett.* **39A**, 136 (1972)
- [29] J. Ashkin, E. Teller, *Phys. Rev.* **64**, 178 (1943)
- [30] G. Foëx, P. Weiss, *Le magnétisme*, Armand Colin, Section Physique 71(1926)
- [31] Z. Wojtkowiak, G. Musiał, *J. Magn. Magn. Mater.* **500**, 166365 (2020)
- [32] R. B. Potts, *Some Generalized Order-Disorder Transformations*, *Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*, Vol. 48, pp. 106–109 (1952)
- [33] J. P. Santos, F. C. Sá Barreto, *Braz. J. Phys.* **46**, 70 (2016)
- [34] Ü. Akinci, *Physica A* **469**, 740 (2017)
- [35] J. P. Santos, D. S. Rosa, F. C. Sá Barreto, *Phys. Lett. A* **382**, 272 (2018)
- [36] C. Kittel, *Wstęp do fizyki ciała stałego*, PWN (1974)
- [37] P. Bak, D. Mukamel, *Phys. Rev. B* **13**, 5086 (1976)
- [38] D. Mukamel, S. Krinsky, P. Bak, *Physica B+C*, 86-88, cz. II, 609 (1977)
- [39] K. Durczewski, *Phys. Letters* 31A, 56 (1970)
- [40] J. Klamut, *Przejścia fazowe i anizotropia. Wybrane zagadnienia fizyki i chemii ciała stałego*, Ossolineum (1977)
- [41] J. Klamut, J. Lorenc, J. Przystawa, E. Sobula, *Thermodynamical study of phase transitions in uranium compounds of U Ge Te and U₂N₂Z types*, [w:] *Proc. 2nd Intern. Conf. on the Electronic Structure of the Actinides*, Ossolineum
- [42] R. Peierls, *Proc. Cambridge Phil. Soc.*, 447 (1936)
- [43] C. Borgs, R. Kotecky, and S. Miracle-Sole, *J. Stat. Phys.* **62**, 529 (1991)
- [44] A. K. Murtazaev, A. B. Babaev, *J. Magn. Magn. Mater.* **324**, 3870 (2012)
- [45] A. Billoire, T. Neuhaus, and B. A. Berg, *Nuclear Phys. B* **413**, 795 (1994)
- [46] G. Musiał, *Phys. Status Solidi B* **236**, 486 (2003)
- [47] G. Musiał, J. Rogers, *Phys. Status Solidi B* **243**, 335 (2006)
- [48] T. Lovorn, S.K. Sarker, *Phys. Rev. Lett.* **119**, 045501 (2017)
- [49] S.S. Lee, B.J. Kim, *Phys. Rev. E* **99**, 043308 (2019)
- [50] G. -Y. Zhu, G.-M. Zhang, *Phys. Rev. Lett.* **122**, 176401 (2019)
- [51] A. Kumar, J.G.M. Guy, L. Zhang, J. Chen, J.M. Gregg, J.F. Scott, *Appl. Phys. Lett.* **116**, 182903 (2020)
- [52] R. M. Francisco, J.P. Santos, *Phys. Lett. A* **383**, 1092 (2019)
- [53] C. Zhe, W. Ping, Z. Ying-Hong, *Commun. Theor. Phys.* **49**, 525 (2008)
- [54] S.-P. Li, Z.-H. Sun, *Phys. Rev. A* **98**, 022317 (2018)

- [55] J.P. Santos, J.A.J. Avila, D.S. Rosa, R.M. Francisco, J. Magn. Magn. Mater. **469**, 35 (2019)
- [56] G. Delfino, N. Lamsen, J. Phys. A: Math. Theor. **52**, 35LT02 (2019)
- [57] P. Patil, A. W. Sandvik, Phys. Rev. B **101**, 014453 (2020)
- [58] A. Benmansour, S. Bekhechi, B. N. Brahmi, N. Moussa, H. Ez-Zahraouy, J. Magn. Magn. Mater. **511**, 166944 (2020)
- [59] T. Muto, Y. Takagi, Solid State Phys., Vol. 1, 1955, 193-282
- [60] D. Jeziorek-Knioła, Z. Wojtkowiak, G. Musiał, Comput. Meth. Scie. Techn. **25**, 31 – 38 (2019)
- [61] G. Musiał, D. Jeziorek-Knioła, Z. Wojtkowiak, Phys. Rev. E **103**, 062124 (2021)