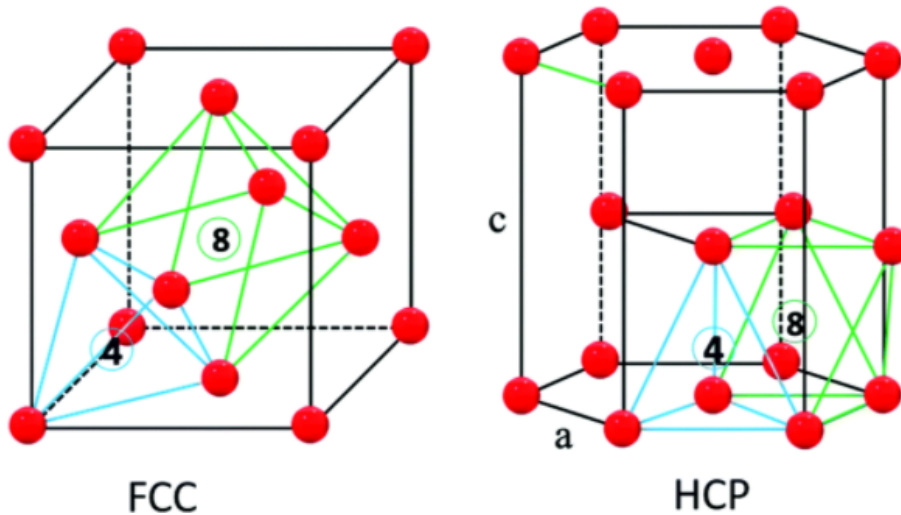


ΕΘΝΙΚΟ ΚΑΙ ΚΑΠΟΔΙΣΤΡΙΑΚΟ ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΑΘΗΝΩΝ  
ΤΜΗΜΑ ΦΥΣΙΚΗΣ  
ΤΟΜΕΑΣ ΦΥΣΙΚΗΣ ΣΥΜΠΥΚΝΩΜΕΝΗΣ ΥΛΗΣ

Προσομοιώσεις Monte Carlo προτύπου Heisenberg  
με 1, 2, 3 και 4 γείτονες στο fcc πλέγμα και  
με πολλούς γείτονες στο (Ga,Mn)N:  
αραιές μαγνητικές προσμίξεις σε fcc και σε hcp  
πλέγμα κατιόντων.



Μπίλια Παναγιώτα  
Μεταπτυχιακή Διπλωματική Εργασία

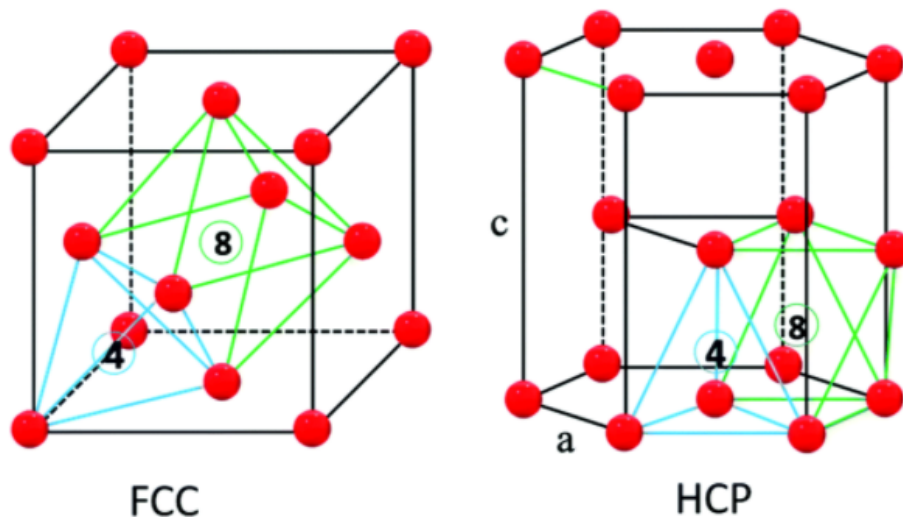
Επιβλέπων: Κωνσταντίνος Σιμσερίδης

ΑΘΗΝΑ 2021



NATIONAL AND KAPODOSTRIAN UNIVERSITY OF ATHENS  
DEPARTMENT OF PHYSICS  
SECTION OF CONDENSED MATTER PHYSICS

Monte Carlo simulations of Heisenberg model  
with 1, 2, 3 and 4 neighbors for fcc lattice and  
with many neighbors for (Ga,Mn)N:  
dilute magnetic doping of fcc and hcp cation lattices.



**Panagiota Bilia**  
Master Thesis

Supervisor: Constantinos Simserides

ATHENS 2021





## Περίληψη

Μελετήθηκε η αλλαγή φάσης τριδιάστατου κλασικού σιδηρομαγνήτη Heisenberg. Δεδομένου ότι το πρότυπο αυτό δεν έχει επιλυθεί αναλυτικά σε τρεις διαστάσεις, υπολογίστηκαν οι εξισώσεις για τα βασικότερα θερμοδυναμικά μεγέθη (μέση ενέργεια, ειδική θερμότητα, μαγνήτιση και μαγνητική επιδεκτικότητα) με τη βοήθεια της θεωρίας μέσου πεδίου, μέσω της αυτοσυνεπούς εξίσωσης της μαγνήτισης καθώς και οι κρίσιμες θερμοκρασίες.

Έπειτα έγιναν προσομοιώσεις Monte Carlo για να εκτιμηθούν τα θερμοδυναμικά μεγέθη σε ένα εύρος θερμοκρασιών το οποίο περιλαμβάνει την αλλαγή φάσης καθώς και για να εκτιμηθούν οι κρίσιμες θερμοκρασίες. Αρχικά μελετήθηκε το πλέγμα fcc αυξάνοντας την τάξη  $n$  των γειτόνων τους οποίους λαμβάνουμε υπόψιν, δηλαδή για  $n = 1, 2, 3, 4$ . Θεωρήθηκαν πλέγματα διαφόρων γραμμικών διαστάσεων  $L$ . Συγκεκριμένα, για  $n = 1$ ,  $L = 2, 10, 16, 20, 24, 26$ , ενώ, για  $n = 2, 3, 4$ ,  $L = 10, 16$ . Επίσης, για  $n = 2, 3, 4$  θεωρήσαμε διαφορετική συμπεριφορά για τα  $J$ , δηλαδή είτε πως φθίνουν σαν  $1/r$  είτε πως φθίνουν σαν  $1/r^2$ . Στη συνέχεια, αρχίσαμε να προσθέτουμε όλο και λιγότερες μαγνητικές προσμίξεις ώστε να καλύπτονται οι πλεγματικές θέσεις σε όλο και μικρότερα ποσοστά κατάληψης,  $p$ . Υπολογίστηκαν τα βασικότερα θερμοδυναμικά μεγέθη (μέση ενέργεια ανά σπιν, ειδική θερμότητα ανά σπιν, μαγνήτιση ανά σπιν και μαγνητική επιδεκτικότητα ανά σπιν) και ο συσσωρευτής τέταρτης τάξης για την μαγνήτιση ανά σπιν για το κατάλληλο κάθε φορά εύρος θερμοκρασιών. Έτσι προσδιορίστηκαν οι ψευδοκρίσιμες θερμοκρασίες από τις κορυφές της ειδικής θερμότητας ανά σπιν και της μαγνητικής επιδεκτικότητας αλλά και οι κρίσιμες μέσω της τομής των συσσωρευτών τέταρτης τάξης. Επίσης, συγκρίθηκε με την βιβλιογραφία το κατώφλι διαπέρασης θέσεων (site percolation threshold)  $p_c$  μέχρι το οποίο μπορούμε να αραιώσουμε σε κάθε περίπτωση.

Επιπλέον προσδιορίστηκαν οι κρίσιμοι εκθέτες. Για την περίπτωση  $n = 1$  προσδιορίστηκαν οι  $\nu$ ,  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$ , ενώ για την περίπτωση  $n = 2, 3, 4$  προσδιορίστηκε μόνο ο κρίσιμος εκθέτης  $\nu$  από την μελέτη της κλιμάκωσης των θερμοδυναμικών μεγεθών.

Κατόπιν, έγιναν προσομοιώσεις και για το υλικό  $\text{Ga}_{1-x}\text{Mn}_x\text{N}$ . Το πλέγμα αυτό αρχικά ήταν GaN και άλλαζε σταδιακά η περιεκτικότητα  $x$  σε μαγνητικές προσμίξεις Mn. Επειδή το υλικό αυτό εμφανίζεται σε δύο δομές σφαλερίτη (zinc-blende) και βουρτσιτή (wurtzite), η μελέτη έγινε και για τις δύο δομές. Έτσι, λοιπόν, προσδιορίστηκαν πάλι οι θερμοδυναμικές ποσότητες (μέση ενέργεια ανά σπιν, ειδική θερμότητα ανά σπιν, μαγνήτιση ανά σπιν και μαγνητική επιδεκτικότητα ανά σπιν) και ο συσσωρευτής τέταρτης τάξης για την μαγνήτιση ανά σπιν για το κατάλληλο κάθε φορά εύρος θερμοκρασιών. Και όπως και για το πλέγμα fcc, έτσι και για το υλικό  $\text{Ga}_{1-x}\text{Mn}_x\text{N}$  προσδιορίστηκαν οι ψευδοκρίσιμες θερμοκρασίες από τις κορυφές της ειδικής θερμότητας ανά σπιν και της μαγνητικής επιδεκτικότητας αλλά και οι κρίσιμες μέσω της τομής των συσσωρευτών τέταρτης τάξης. Επίσης, οι κρίσιμες θερμοκρασίες συγκρίθηκαν με πειραματικές τιμές για το υλικό αλλά και μεταξύ τους για κάθε δομή.



# Abstract

We studied the phase transition of the three-dimensional classical Heisenberg ferromagnet. Since this three-dimensional model has not been analytically solved yet, we used the mean field theory to calculate basic thermodynamic quantities (mean energy, specific heat, magnetisation and magnetic susceptibility) extracted from the self consistent equation for magnetisation. We also calculated relevant critical temperatures.

Monte Carlo stimulations were used in order to estimate the thermodynamic quantities, including the critical region where phase transitions occur, and also to estimate the critical temperatures. Initially fcc lattice was studied by increasing the order  $n$  of the nearest neighbours which we take into account, i.e.,  $n \in 1, 2, 3, 4$ . Different linear sizes of lattices  $L$  were used each time. Specifically, for  $n = 1$ ,  $L = 2, 10, 16, 20, 24, 26$  and for  $n = 2, 3, 4$ ,  $L = 10, 16$ . Also, for  $n = 2, 3, 4$ , two different assumptions for the dependence of  $J$  as a function of  $r$  were used, the first was falling as  $1/r$  and the second as  $1/r^2$ . Then, different percentages of magnetic dopants were introduced to cover the lattice points. Basic thermodynamic quantities (mean energy, specific heat, magnetisation and magnetic susceptibility) were calculated and also the fourth-order cumulant for the magnetisation per spin for the appropriate temperature range. This way, the pseudocritical temperatures were estimated from the picks of specific heat per spin and magnetic susceptibility per spin and the critical temperature from the cross point of fourth-order cumulants.

The site percolation threshold  $p_c$  to which we can dilute so that the lattice still can be percolated by magnetic interactions, was estimated and compared with bibliography. Moreover, the critical exponents were estimated. In the case of  $n = 1$ ,  $\nu$ ,  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$  were estimated and in the case of  $n = 2, 3, 4$  only  $\nu$  was estimated from the scaling properties of the thermodynamic quantities.

Then, Monte Carlo simulations were used for  $\text{Ga}_{1-x}\text{Mn}_x\text{N}$ . Initially, the lattice was GaN and the content  $x$  was changed by introducing magnetic dopants Mn. Because of the fact that this material is found in both zinc-blend and wurtzite structures, the study was done for both. Hence, basic thermodynamic quantities (mean energy, specific heat, magnetisation and magnetic susceptibility) were again calculated and also the fourth-order cumulant for the magnetisation per spin for the appropriate temperature range. The pseudocritical temperatures were estimated from the picks of specific heat per spin and magnetic susceptibility per spin and the critical temperature from the cross point of fourth-order cumulants for the material  $\text{Ga}_{1-x}\text{Mn}_x\text{N}$ . The critical temperatures were compared with experimental values for this material.



## Ευχαριστίες

Θα ήθελα να ευχαριστήσω θερμά τον επιβλέποντα καθηγητή μου, τον Επίκ. Καθηγητή του Τμήματος Φυσικής ΕΚΠΑ κ. Κωνσταντίνο Σιμσερίδη, για τη πολύτιμη βοήθεια του στην παρούσα Διπλωματική Εργασία, την υπομονή του και την καθοδήγησή του. Επίσης, θα ήθελα να ευχαριστήσω τον Υποψ. Διδάκτορα του Τμήματος Φυσικής ΕΚΠΑ κ. Ανδρέα Μόρφη και τον Υποψ. Διδάκτορα του Τμήματος Μηχανικών Επιστήμης των Υλικών Πανεπιστημίου Ιωαννίνων κ. Κωνσταντίνο Κακλαμάνη για την πολύτιμη βοήθειά τους. Τέλος, θα ήθελα να ευχαριστήσω τον Αναπλ. Καθηγητή κ. Φώτιο Διάκονο και τον Καθηγητή κ. Φοίβο Μαυρόπουλο που δέχτηκαν να είναι μέλη της Τριμελούς Επιτροπής για την εξέταση της παρούσας Διπλωματικής Εργασίας.



# Περιεχόμενα

	i
<b>Εισαγωγή</b>	<b>vi</b>
0.1 Το υλικό (Ga,Mn)N . . . . .	vi
0.2 Τα πλέγματα fcc και hcp . . . . .	vii
<b>1 Θεωρία Κρίσιμης Συμπεριφοράς</b>	<b>1</b>
1.1 Αλλαγές φάσης και κρίσιμη συμπεριφορά . . . . .	1
1.1.1 Παράμετρος τάξης . . . . .	2
1.1.2 Κρίσιμοι εκθέτες . . . . .	3
1.1.3 Επίδραση πεπερασμένου μεγέθους και θεωρία κλιμάκωσης . . . . .	4
1.1.4 Οικουμενικότητα . . . . .	10
1.2 Πρότυπο Heisenberg και θεωρία μέσου πεδίου . . . . .	10
1.2.1 Απο το μοντέλο Weiss στο πρότυπο Heisenberg . . . . .	10
1.2.2 Μορφές αλληλεπιδράσεων ανταλλαγής . . . . .	14
1.2.2.1 Άμεση Αλληλεπίδραση (direct exchange interaction) . . . . .	14
1.2.2.2 Έμμεση Αλληλεπίδραση (indirect exchange interaction) . . . . .	14
1.2.2.3 Double Exchange Interaction . . . . .	15
1.2.3 Θεωρία μέσου πεδίου . . . . .	15
1.2.3.1 Αυτοσυνεπής εξίσωση για την μαγνήτιση και κρίσιμη θερμοκρασία . . . . .	19
1.2.3.2 Κρίσιμοι εκθέτες στα πλαίσια θεωρίας μέσου πεδίου . . . . .	20
1.2.4 Θεωρία μέσου πεδίου λαμβάνοντας υπόψιν 2ους, 3ους, 4ους γείτονες . . . . .	24
<b>2 Προσομοιώσεις Monte Carlo και ο αλγόριθμος Metropolis</b>	<b>28</b>
2.1 Αρχές προσομοίωσης Monte Carlo . . . . .	28
2.2 Ο αλγόριθμος Metropolis . . . . .	31
2.3 Ο αλγόριθμος Metropolis στο τριδιάστατο κλασσικό πρότυπο Heisenberg . . . . .	32
2.4 Σφάλματα και διακυμάνσεις εκτιμώμενων θερμοδυναμικών μεγεθών . . . . .	36
<b>3 Αποτελέσματα Προσομοιώσεων για το πλέγμα fcc</b>	<b>39</b>
3.1 Πλέγμα fcc με πρώτους γείτονες . . . . .	39
3.1.1 Η μέση ενέργεια και η ειδική θερμότητα . . . . .	42
3.1.2 Η μαγνήτιση και η μαγνητική επιδεκτικότητα . . . . .	46

3.1.3	Ο συσσωρευτής τέταρτης τάξης	50
3.1.4	Εκτίμηση κρίσιμων θερμοκρασιών	52
3.1.5	Εκτίμηση πιθανότητας διήθησης	54
3.1.6	Εκτίμηση κρίσιμων εκθετών για πλήρως κατειλημμένο πλέγμα	55
3.2	Πλέγμα fcc με δεύτερους γείτονες	61
3.2.1	Η μέση ενέργεια και η ειδική θερμότητα	61
3.2.2	Η μαγνήτιση και η μαγνητική επιδεκτικότητα	64
3.2.3	Ο συσσωρευτής τέταρτης τάξης	67
3.2.4	Εκτίμηση κρίσιμων θερμοκρασιών	70
3.2.5	Εκτίμηση πιθανότητας διήθησης	72
3.2.6	Εκτίμηση κρίσιμων εκθετών για πλήρως κατειλημμένο πλέγμα	74
3.2.6.1	Περίπτωση $J$ φθίνοντος σαν $1/r$	74
3.2.6.2	Περίπτωση $J$ φθίνοντος σαν $1/r^2$	75
3.3	Πλέγμα fcc με τρίτους γείτονες	77
3.3.1	Η μέση ενέργεια και η ειδική θερμότητα	77
3.3.2	Η μαγνήτιση και η μαγνητική επιδεκτικότητα	82
3.3.3	Ο συσσωρευτής τέταρτης τάξης	86
3.3.4	Εκτίμηση κρίσιμων θερμοκρασιών	89
3.3.5	Εκτίμηση πιθανότητας διήθησης	91
3.3.6	Εκτίμηση κρίσιμων εκθετών για πλήρως κατειλημμένο πλέγμα	93
3.3.6.1	Περίπτωση $J$ φθίνοντος σαν $1/r$	93
3.3.6.2	Περίπτωση $J$ φθίνοντος σαν $1/r^2$	94
3.4	Πλέγμα fcc με τέταρτους γείτονες	96
3.4.1	Η μέση ενέργεια και η ειδική θερμότητα	96
3.4.2	Η μαγνήτιση και η μαγνητική επιδεκτικότητα	97
3.4.3	Ο συσσωρευτής τέταρτης τάξης	105
3.4.4	Εκτίμηση κρίσιμων θερμοκρασιών	107
3.4.5	Εκτίμηση πιθανότητας διήθησης	109
3.4.6	Εκτίμηση κρίσιμων εκθετών για πλήρως κατειλημμένο πλέγμα	111
3.4.6.1	Περίπτωση $J$ φθίνοντος σαν $1/r$	111
3.4.6.2	Περίπτωση $J$ φθίνοντος σαν $1/r^2$	112
<b>4</b>	<b>Αποτελέσματα προσομοιώσεων στο υλικό (Ga,Mn)N</b>	<b>115</b>
4.1	Πλέγμα fcc στο υλικό $\text{Ga}_{1-x}\text{Mn}_x\text{N}$ (zinc-blende)	115
4.1.1	Η μέση ενέργεια και η ειδική θερμότητα	115
4.1.2	Η μαγνήτιση και η μαγνητική επιδεκτικότητα	120
4.1.3	Ο συσσωρευτής τέταρτης τάξης	124
4.1.4	Εκτίμηση κρίσιμων θερμοκρασιών	124
4.2	Πλέγμα hcp στο υλικό $\text{Ga}_{1-x}\text{Mn}_x\text{N}$ (wurtzite)	127
4.2.1	Η μέση ενέργεια και η ειδική θερμότητα	128
4.2.2	Η μαγνήτιση και η μαγνητική επιδεκτικότητα	133
4.2.3	Ο συσσωρευτής τέταρτης τάξης	137
4.2.4	Εκτίμηση κρίσιμων θερμοκρασιών	138



5 Συμπεράσματα	142
5.1 Συμπεράσματα . . . . .	142
Βιβλιογραφία	145

## ΓΛΩΣΣΑΡΙΟ

Παρατίθενται όροι της διεθνούς ορολογίας, οι οποίοι χρησιμοποιούνται σε αυτή την εργασία:

ab-initio methods	μέθοδοι από πρώτες αρχές
cluster	σύμπλεγμα
direct exchange interaction	άμεση αλληλεπίδραση ανταλλαγής
dissipation-fluctuation theorem	θεώρημα διακύμανσης -διασκόρπισης
domain	περιοχή με παράλληλα προσανατολισμένα δίπολα
dop	εμπλουτίζω
dopant	πρόσμιξη
double exchange interaction	αλληλεπίδραση διπλής ανταλλαγής
Dzyaloshinsky-Moriya interaction	ανισότροπη αλληλεπίδραση (λόγω σπιν-τροχιάς)
estimator	εκτιμητής
face-centered cubic lattice (fcc)	ενδροκεντρωμένο κυβικό πλέγμα
finite size effects	φαινόμενα πεπερασμένου μεγέθους
hexagonal-closest-packed lattice (hcp)	εξαγωνικό πλέγμα πυκνής διάταξης
indirect exchange interaction	έμμεση αλληλεπίδραση ανταλλαγής
lattice point	πλεγματικό σημείο
localized electron	εντοπισμένο ηλεκτρόνιο
long-ranged superexchange interaction	μεγάλης εμβέλειας αλληλεπίδραση υπερανταλλαγής
magnetically doped	εμπλουτισμένο με μαγνητικές προσμίξεις
mcs (monte carlo steps)	βήματα monte carlo
percolation	διήθηση/διαπέραση
RKKY interaction	έμμεση αλληλεπίδραση ανταλλαγής για τα μέταλλά
scale transformation	μετασχηματισμός κλίμακας
short-ranged superexchange interaction	μικρής εμβέλειας αλληλεπίδραση υπερανταλλαγής
singlet	κατάσταση με συνολικό spin 0
site percolation threshold ( $p_c$ )	κρίσιμη πιθανότητα κατάληψης πλεγματικών θέσεων (κατώφλι) κάτω από την οποία δεν διαπερνάται το πλέγμα με μαγνητικές αλληλεπιδράσεις
superexchange interaction	αλληλεπίδραση υπερανταλλαγής
tight-binding approach	προσέγγιση ισχυρής δέσμευσης
triplet	κατάσταση με συνολικό spin 1
$U_L$ fixed point	η τιμή που συσσωρευτή 4ης τάξης στην κρίσιμη θερμοκρασία
upper critical dimension	ανώτατη κρίσιμη διάσταση πάνω από την οποία είναι αμελητέες οι διακυμάνσεις
wurtzite	βουρτσίτης
zinc-blende	σφαλερίτης

## ΣΥΜΒΟΛΟΘΗΚΗ

Οι παρακάτω συμβολισμοί αναφέρονται στην εργασία χωρίς να εξηγείται η σημασία τους:

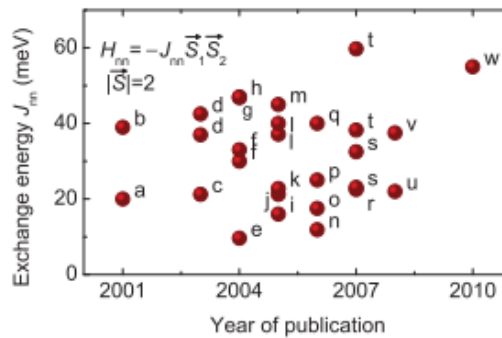
$\dot{A}$	Amstrong
$C$	ειδική θερμότητα
$\langle E \rangle$	μέση ενέργεια
$J_n$	ολοκλήρωμα ανταλλαγής των γειτόνων $n$ τάξης
$k_B$	σταθερά Boltzman
$L$	γραμμική διάσταση πλέγματος
$\langle M \rangle$	μαγνήτιση
$N$	πλήθος πλεγματικών σημείων που είναι κατειλημμένα από μαγνητικούς δότες (πλήθος σπιν)
$\mathcal{N}$	βήματα χρονοσειράς διαδικασίας markov
$p$	ο λόγος των μαγνητικών δοτών προς τις συνολικές πλεγματικές θέσεις
$q$	αριθμός σύνταξης πλέγματος
$r_n$	απόσταση των γειτόνων $n$ τάξης
$T_c$	κρίσιμη θερμοκρασίας αλλαγής φάσης
$U_L$ ή $U_4$	συσσωρευτής 4ης τάξης
$\pi$	ο λόγος της περιφέρειας του κύκλου προς τη διάμετρό του
$\chi$	μαγνητική επιδεκτικότητα

# ΕΙΣΑΓΩΓΗ

## 0.1 Το υλικό (Ga,Mn)N

Στην παρούσα εργασία μελετάται το υλικό GaN με προσμίξεις Mn. Τα κατιόντα Mn αντικαθιστούν τις θέσεις των Ga. Το Ga έχει δομή [Ar]3d<sup>10</sup>4s<sup>2</sup>4p<sup>1</sup> ενώ το Mn [Ar]3d<sup>5</sup>4s<sup>2</sup>. Τα ιόντα του Mn μπορούν να έχουν σθένος +2/+3 ενώ τα ιόντα του Ga έχουν σθένος +3. Οπότε εάν ένα Mn<sup>+2</sup> αντικαταστήσει ένα Ga<sup>+3</sup> θα έχουμε μια οπή η οποία θα περισσεύει.

Έχουν γίνει διάφορες τόσο θεωρητικές όσο και πειραματικές μελέτες πάνω στο υλικό αυτό εδώ και τουλάχιστον μια εικοσαετία καθώς παρουσιάζει ενδιαφέρον σαν ημιαγωγική διάταξη που μπορεί να εμφανίσει μαγνητικές ιδιότητες έχοντας πολλές μάλιστα οπτικές εφαρμογές. Το 2000 ο καθηγητής Dielt πρότεινε για να ερμηνεύσει το μηχανισμό του μαγνητισμού το μοντέλο zener που αφορούσε έναν μαγνητισμό που προκαλείται από φορείς (οπές) [1]. Προέβλεπε μάλιστα ότι εμφανίζει σιδηρομαγνητισμό σε θερμοκρασία δωματίου, κάτι το οποίο είναι χρήσιμο για τεχνολογικές εφαρμογές.

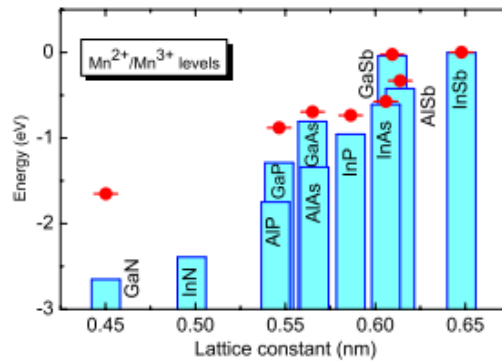


Σχήμα 1: Τα ολοκληρώματα ανταλλαγής του υλικού (Ga,Mn)N [2] θεωρώντας αλληλεπίδραση πρώτων γειτόνων από το 2000-2011 από τις πηγές [3].

Εφόσον προέκυπταν διάφορα αποτελέσματα που υποστήριζαν είτε σιδηρομαγνητισμό [4] [5] [6] [2] [7] είτε αντισιδηρομαγνητισμό [8] [9] [10] υπήρξε καιρό θέμα έρευνας. Δείχθηκε πως αν το σθένος των Mn είναι +3 και δεν έχουμε παρουσία +2 τότε έχουμε μικρής εμβέλειας σιδηρομαγνητική συμπεριφορά που άγεται από το μηχανισμό αλληλεπιδράσεων ανταλλαγής superexchange (short-ranged superexchange interactions) [2] [4]. Αν όμως οδηγηθούμε σε σθένος +2 (είτε λόγω προσμίξεων των δοτών (donor impurities) είτε λόγω κενών αζώτου (nitrogen vacancies) η

αλληλεπίδραση μπορεί να είναι αντισιδηρομαγνητική [11] [12]. Η θεωρία για σιδηρομαγνητική αλληλεπίδραση έχει αναλυθεί και χρησιμοποιώντας μεθόδους από πρώτες αρχές ab-initio με ανάλυση βασιζόμενη στην υπόθεση πως οι αλληλεπιδράσεις είναι τύπου double exchange [13].

Όπως έχει δείχθει το ενεργειακό επίπεδο των δοτών (κατιόντα Mn) είναι στο μέσο του ενεργειακού χάσματος του GaN [14] [11].



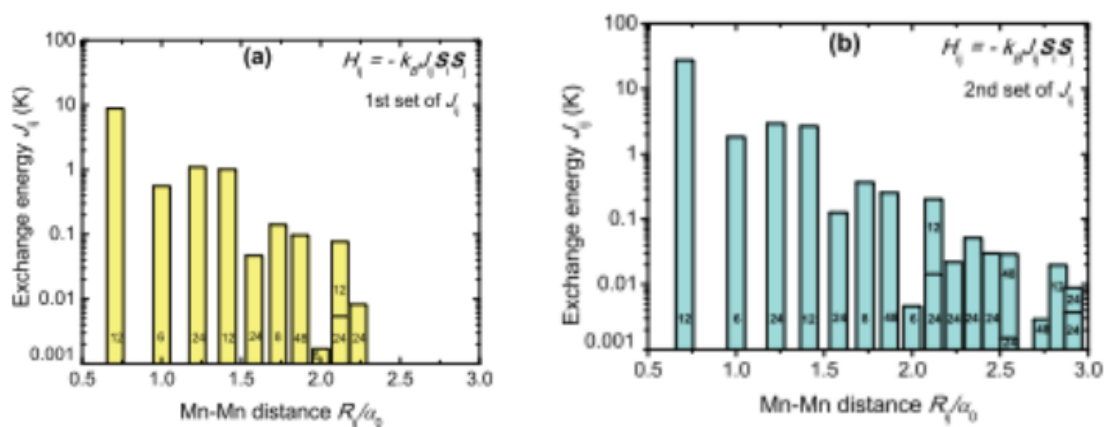
Σχήμα 2: Τα ενεργειακά επίπεδα των Mn όπως αυτά έχουν εκτιμηθεί πειραματικά σε σχέση με τα όρια των ζωνών σθένους των ενώσεων III-V. Από το άρθρο [11].

Έτσι οι οπές παραμένουν εντοπισμένες και δεδομένου ότι είναι μικρή η ενεργή ακτίνα Bohr δεν αναμένεται απεντοπισμός των οπών για τουλάχιστον  $x = 0.1$  (μοριακό κλάσμα συγκέντρωσης Mn). Επομένως υφίσταται σιδηρομαγνητισμός χωρίς να οφείλεται αυτό σε οπές μεσολαβητές. Έτσι ο μηχανισμός αφορά την αλληλεπίδραση τυχαία κατανομημένων ιόντων  $Mn^{+3}$  παρά την απουσία οπών διαμεσολαβητών. Έχει δείχθει πως η σιδηρομαγνητική αυτή αλληλεπίδραση είναι τύπου superexchange [12]. Δεδομένου πως δεν συνυπάρχουν ιόντα  $Mn^{+2}$  ο μηχανισμός double exchange δεν είναι εκείνος που θα πρέπει να ληφθεί υπόψιν. Έχουν εκτιμηθεί τα ολοκληρώματα ανταλλαγής έως 10 και ως 16 γείτονες [4] [15] βασιζόμενοι σε προσέγγιση ισχυρής δέσμευσης (tight-binding-approach).

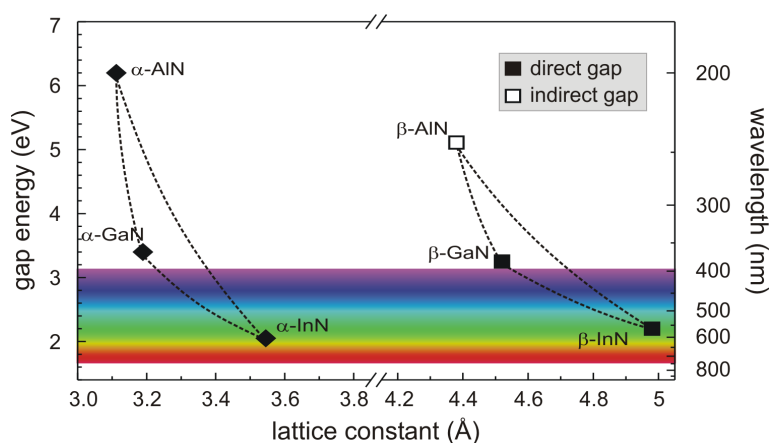
## 0.2 Τα πλέγματα fcc και hcp

Το GaN είναι ημιαγωγός τύπου III-V και έχει σχετικά μεγάλο ημιαγωγικό ενεργειακό χάσμα. Το ότι είναι διευρυμένο το ενεργειακό του χάσμα (μεγαλύτερο από αυτό που έχει συνήθως ένας ημιαγωγός) το καθιστά χρήσιμο για εφαρμογές σε υψηλές τάσεις, συχνότητες και θερμοκρασίες. Επίσης είναι ημιαγωγός άμεσου ενεργειακού χάσματος, κάτι που το καθιστά κατάλληλο για οπτικές εφαρμογές. Χρησιμοποιήθηκε για την κατασκευή μπλέ φωτοδιόδων και laser και για την κατασκευή του μπλε laser δόθηκε μάλιστα το βραβείο Nobel στους I. Akasaki, H. Amano και S. Nakamura το 2014 [16] [17] [18] [19].

Συνατάται κυρίως σε δομή βουρτσίτη (wurtzite) για  $a = 0.3188nm$   $c = 0.5185nm$  και άρα  $c/a = 1.626$ . Εφόσον τέλειο βουρτσίτη ισχύει  $c/a = \sqrt{8/3} = 1.633$ , στην δομή αυτή ο



Σχήμα 3: Τα ολοκληρώματα ανταλλαγής για την δομή *fcc* του υλικού  $\text{GaMnN}$  [12] βασισμένοι σε προσέγγιση ισχυρής δέσμησης. Το *a* είναι από την πηγή [4] και το *b* από την πηγή [15].



Σχήμα 4: Το ενεργειακό χάσμα σαν συνάρτηση της πλεγματικής σταθεράς σε αντιστοιχία με τα μήκη κύματος για θερμοκρασία  $T = 300 \text{ K}$  [20]. Φαίνεται πως και οι δύο δομές του  $\text{GaN}$  ( $\alpha\text{-GaN}$ /*wurtzite structure* (WZ) και  $\beta\text{-GaN}$ /*zinc-blende structure* (ZB) έχουν κατάλληλο ενεργειακό χάσμα για να εκπέμψουν στο ιώδες/μώβ και με προσμίξεις  $\text{In}$  μπορεί να χρησιμοποιηθεί για εκπομπή μπλε ακτινοβολίας.

λόγος εμφανίζεται μικρότερος από τον ιδανικό. Όμως υπό κάποιες συνθήκες μπορεί να αποκτήσει δομή σφαλερίτη (*zinc-blende*) [21]. Οι δύο δομές έχουν μικρή ενεργειακή διαφορά και γι αυτό συναντώνται και οι δύο. Η ενεργειακή διαφορά τους εκτιμάται  $\Delta E = 9.88 \text{ meV/atom}$  [22]. Σε θερμοκρασία  $T = 0 \text{ K}$ , το ενεργειακό χάσμα είναι  $E_g \approx 3.5 \text{ eV}$  για την περίπτωση δομής βουρτσιτη και  $E_g \approx 3.299 \text{ eV}$  για την περίπτωση δομής σφαλερίτη [21]. Για να θεωρηθεί αντίστοιχη δομή του βουρτσιτη σε σφαλερίτη θεωρείται πλεγματική σταθερά  $\alpha_o = (\sqrt{3}a^2c)^{1/3} = 0.45 \text{ nm}$ .

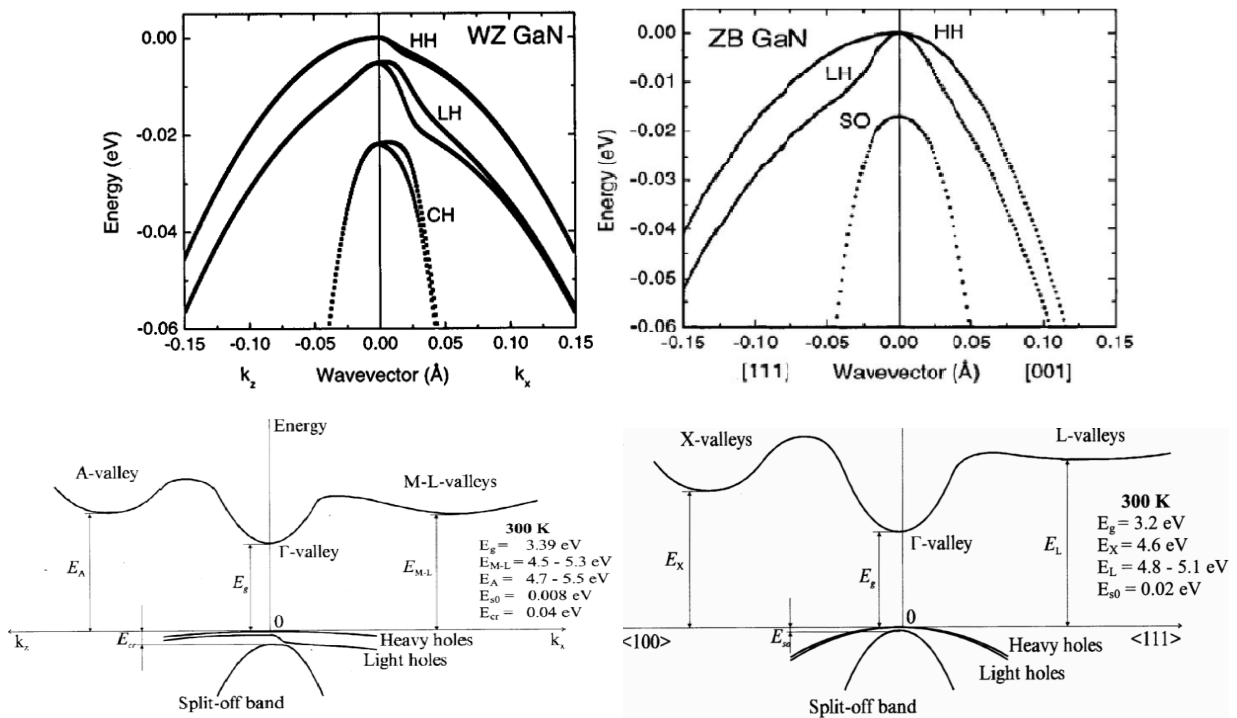
Ονομάζουμε απόσταση  $D$  την διάμετρο σκληρών σφαιρών η οποία υπολογίζεται  $\frac{\sqrt{2}\alpha_o}{2}$ . Μέχρι και τους 16ους γείτονες οι αποστάσεις για την δομή σφαλερίτη όπως αναφέρονται στην βιβλιογραφία [12] είναι οι εξής:

$$r_n = \begin{cases} D\sqrt{n}, n \leq 13 \\ D\sqrt{n+1}, 14 \leq n \leq 16 \end{cases} \quad (1)$$

Δεν υπάρχουν γείτονες στις αποστάσεις  $D\sqrt{14}$  και  $D\sqrt{30}$ .

Για τις δομές βουρτσιτή και σφαλερίτη οι πρώτοι και οι δεύτεροι γείτονες είναι ίδιοι τόσο σε πλήθος (6 πρώτοι και 12 δεύτεροι πλησιέστεροι γείτονες) όσο και σε απόσταση. Από τους τρίτους γείτονες και μετά ξεκινούν οι διαφορές και έχουμε 24 τρίτους γείτονες σε απόσταση  $r_3 = D\sqrt{3}$  για δομή fcc ενώ για δομή hcp έχουμε μόλις 2 τρίτους γείτονες σε απόσταση  $r_3 = D\sqrt{8/3}$ . Ο ατομικός παράγοντας καλύψεως και για τις δύο δομές προκύπτει  $\pi\sqrt{18} \approx 0.74$ . Επίσης για τις δύο δομές το κατώφλι διήθησης/διαπέρασης (site percolation threshold) σε προσέγγιση πρώτων γειτόνων προκύπτει ίδιο [23]. Έτσι οι δύο δομές εμφανίζουν αρκετές ομοιότητες.

Παρακάτω φαίνονται οι ενεργειακές ζώνες σθένους για τις δύο δομές.



Σχήμα 5: Οι ενεργειακές ζώνες σθένους για τις δύο δομές του GaN ( $\alpha$ -GaN/wurtzite structure και  $\beta$ -GaN/zinc-blende structure) και οι ενεργειακές ζώνες σθένους/αγωγιμότητας και για τις δύο δομές από κάτω [21], [24].

Περισσότερες πληροφορίες για τις χημικές ηλεκτρικές, μηχανικές, θερμικές και οπτικές ιδιότητες του υλικού αναφέρονται στην βιβλιογραφία [22], [21], [24], [25], [26].





# Κεφάλαιο 1

## ΘΕΩΡΙΑ ΚΡΙΣΙΜΗΣ ΣΥΜΠΕΡΙΦΟΡΑΣ

### 1.1 Αλλαγές φάσης και κρίσιμη συμπεριφορά

Τα υλικά ανάλογα με τις συνθήκες στις οποίες βρίσκονται μπορεί να υφίστανται αλλαγές φάσης. Οι αλλαγές φάσεις συνήθως σχετίζονται με αλλαγές στην τάξη των δομικών λίθων. Για παράδειγμα μεταβάσεις από στερεό (πλέγμα-τάξης μακράς εμβέλειας) σε υγρό (μικρή εμβέλεια) ή μεταβάσεις από σιδηρομαγνητισμό (τάξη προσανατολισμού) σε παραμαγνητισμό (αταξία προσανατολισμού απουσία εξωτερικού πεδίου).

Οι αλλαγές φάσεις ταξινομούνται σε i) αλλαγές πρώτης τάξης εάν κατά την αλλαγή φάσης εμφανίζεται ασυνέχεια στην πρώτη παράγωγο ενός θερμοδυναμικού μεγέθους. ii) συνεχείς αλλαγές ή αλλιώς ανώτερης τάξης όταν εμφανίζεται συνεχής μετάβαση στην πρώτη παράγωγο και ασυνέχειες σε παραγώγους ανώτερης τάξης των θερμοδυναμικών μεγεθών. Για παράδειγμα αλλαγή φάσης από σιδηρομαγνητισμό σε παραμαγνητισμό δεν εμφανίζει ασυνέχειες στην μαγνήτιση επομένως πρόκειται για συνεχή αλλαγή φάσης.

Για να περιγραφεί μια αλλαγή φάσης δομικών λίθων χρειάζεται να αντιμετωπισθεί με την χρήση στατιστικής φυσικής. Αρχικά υπολογίζεται πάντα η συνάρτηση επιμερισμού  $Z$  η οποία περιέχει όλες τις πληροφορίες του συστήματος και μέσω αυτής υπολογίζονται όλα τα θερμοδυναμικά μεγέθη. Ουσιαστικά το σύστημα έχει ένα πλήθος δυνατών μικροκαταστάσεων στην οποίες μπορεί να βρεθεί. Η πιθανότητα εμφάνισης της κάθε μικροκατάστασης αναλόγως την κατανομή την οποία θεωρούμε μπορεί να υπολογιστεί. Στην περίπτωση κανονικής κατανομής είναι

$$P_{\mu} = \frac{e^{-\beta E_{\mu}}}{Z} \quad (1.1)$$

όπου  $E_{\mu}$  η ενέργεια της μικροκατάστασης και  $\beta = \frac{1}{k_B T}$  η αντίστροφη θερμοκρασία. Η συνάρτηση επιμερισμού προκύπτει από την απαίτηση κανονικοποίησης της πιθανότητας αυτής αθροίζοντας σε όλες τις δυνατές μικροκαταστάσεις του συστήματος.

$$\sum_{\mu} P_{\mu} = 1 \rightarrow Z = \sum_{\mu} e^{-\beta E_{\mu}} \quad (1.2)$$

Οι μέσες τιμές με την βοήθεια της πιθανότητας είναι

$$\langle A \rangle = \sum_{\mu} P_{\mu} A_{\mu} \quad (1.3)$$

Για παράδειγμα η μέση ενέργεια

$$U = \langle E \rangle = \sum_{\mu} P_{\mu} E_{\mu} = -\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta} \quad (1.4)$$

Εφόσον η ελεύθερη ενέργεια Helmholtz είναι  $F = U - TS$

$$dU = TdS - MdH \rightarrow d(U - TS) = -SdT - MdH \rightarrow dF = -SdT - MdH \quad (1.5)$$

Η κανονική κατανομή όπου  $dT = 0$  είναι εκείνη που απουσία εξωτερικού πεδίου  $H$  ελαχιστοποιεί την ελεύθερη ενέργεια Helmholtz. Ισχύει ότι

$$Z = e^{-\beta F} \rightarrow F = -k_B \ln Z \quad (1.6)$$

Έτσι υπολογίζονται τα θερμοδυναμικά μεγέθη της μαγνήτισης

$$M = -\frac{\partial F}{\partial H} \Big|_T \quad (1.7)$$

της μαγνητικής επιδεκτικότητας για σταθερή θερμοκρασία

$$\chi = \frac{\partial M}{\partial H} \Big|_T = -\frac{\partial^2 F}{\partial H^2} \Big|_T = \frac{1}{k_B T} (\delta M)^2 \quad (1.8)$$

και της ειδικής θερμότητας απουσία πεδίου

$$C = \frac{\partial U}{\partial T} \Big|_H = -T \frac{\partial^2 F}{\partial T^2} \Big|_H = \frac{1}{k_B T^2} (\delta E)^2 \quad (1.9)$$

όπου  $\delta M$  και  $\delta E$  οι διακυμάνσεις της μαγνήτισης και της ενέργειας αντίστοιχα.

### 1.1.1 Παράμετρος τάξης

Για να μελετηθεί μια αλλαγή φάσης πρέπει να βρεθεί μια ποσότητα η οποία να εκφράζει την τάξη του συστήματος. Αυτή η ποσότητα είναι η παράμετρος τάξης και σε κάθε πρόβλημα πρέπει να επιλέγεται κατάλληλα ώστε ο μηδενισμός της να αντιπροσωπεύει την αλλαγή φάσης. Πρέπει να είναι ορισμένη με τέτοιο τρόπο ώστε να είναι μηδέν όταν το σύστημα έχει μεταβεί στην κατάσταση πλήρους αταξίας (κατά την αλλαγή φάσης) ενώ από την άλλη να είναι 1 όταν το σύστημα βρίσκεται σε πλήρη μακροσκοπική τάξη. Εντοπίζοντας λοιπόν το σημείο που μια ποσότητα με αυτά τα χαρακτηριστικά μηδενίζεται έχει εντοπισθεί το κρίσιμο σημείο αλλαγής φάσης. Η παράμετρος τάξης σε κάθε περίπτωση μπορεί να είναι μονόμετρο διανυσματικό ή και τανυστικό μέγεθος αρκεί να περιγράφει με επιτυχία τα παραπάνω.

Στην περίπτωση που αφορά την παρούσα εργασία και μελετάται μετάβαση από σιδηρομαγνητική σε παραμαγνητική φάση η μαγνήτιση είναι το κατάλληλο μέγεθος εκείνο το οποίο μπορεί να περιγράψει την αλλαγή φάσης. Πριν το κρίσιμο σημείο (σιδηρομαγνητισμός) το σύστημα έχει μαγνήτιση διάφορη του μηδενός και σε θερμοκρασία απόλυτου μηδενός που όλα τα σπιν είναι παράλληλα προσανατολισμένα η μαγνήτιση είναι μονάδα. Ενώ από το κρίσιμο σημείο και έπειτα που δεν υπάρχει κοινός προσανατολισμός των σπιν η μαγνήτιση γίνεται μηδέν.

### 1.1.2 Κρίσιμοι εκθέτες

Αρχικά ορίζουμε ανηγμένη θερμοκρασία την ποσότητα  $t = \frac{T - T_c}{T_c}$  η οποία στο κρίσιμο σημείο  $T = T_c$  μηδενίζεται.

Κοντά στο κρίσιμο σημείο οι θερμοδυναμικές ποσότητες εμφανίζουν ιδιόμορφες συμπεριφορές και μπορούν να γραφτούν σαν το άθροισμα ενός αναλυτικού  $A_1(t)$  και ενός μη αναλυτικού μέρους  $A_2(t)$ . Το μη αναλυτικό μέρος μπορεί να γραφτεί με ένα νόμο δύναμης με βάση την ανηγμένη θερμοκρασία  $t$  και εκθέτη έναν κρίσιμο εκθέτη  $\mu$ .

$$\lim_{t \rightarrow 0} A(t) = A_1(t) + A_2(t), A_2(t) \approx t^\mu \quad (1.10)$$

Ορίζονται οι κρίσιμοι εκθέτες  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$ , που περιγράφουν την κυρίαρχη συμπεριφορά του μη αναλυτικού μέρους της ειδικής θερμότητας, της μαγνήτισης και της μαγνητικής επιδεκτικότητας αντίστοιχα.

$$c(t, H = 0) = |t|^{-\alpha}, M(t, H = 0) \approx (-t)^\beta (t < 0), \chi(t, H = 0) \approx |t|^{-\gamma} \quad (1.11)$$

Καθώς και ο κρίσιμος εκθέτης  $\delta$  που περιγράφει την καμπύλωση της κρίσιμης ισόθερμου

$$M(0, H) \approx H^{1/\delta} \text{sgn}H, T = T_c \text{ και } H \rightarrow 0 \quad (1.12)$$

Επίσης ένα σημαντικό μέρος περιγραφής της αλλαγής φάσης απαιτεί τον ορισμό της συνάρτησης συσχέτισης. Η συνάρτηση συσχέτισης δείχνει κατά πόσο δύο πλεγματικά σημεία σε μια απόσταση  $\vec{r}_i$  έχουν συσχετίσεις μεταξύ τους.

$$\Gamma(\vec{r}_i) = \langle \vec{S}(0)\vec{S}(\vec{r}_i) \rangle - \langle \vec{S}(0) \rangle \langle \vec{S}(\vec{r}_i) \rangle \quad (1.13)$$

Η μαγνητική επιδεκτικότητα που σχετίζεται με τις διακυμάνσεις της μαγνήτισης μπορεί να γραφτεί σύμφωνα με τον παρακάτω τύπο

$$\chi = \beta N \sum_i \Gamma(\vec{r}_i) \longrightarrow \beta \int d^3r_i \Gamma(\vec{r}_i) \quad (1.14)$$

Για μεγάλες αποστάσεις η  $\Gamma(\vec{r}_i)$  θα πρέπει να φθίνει απότομα καθώς όσο πιο μακριά είναι τα πλεγματικά σημεία παύουν να συσχετίζονται, έτσι μπορεί να γραφτεί

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \Gamma(\vec{r}_i) \approx r^{-p} e^{-r/\xi} \quad (1.15)$$

Το  $\xi$  έχει μονάδες μήκους και εκφράζει μέχρι ποιο μήκος υπάρχει εμβέλεια των συσχετίσεων. Όταν το σύστημα πλησιάζει στο κρίσιμο σημείο το μήκος συσχέτισης αποκλίνει σύμφωνα με τον νόμο δύναμης

$$\xi(t, H = 0) \approx |t|^{-\nu} \quad (1.16)$$

Η συνάρτηση συσχέτισης έχει την συμπεριφορά [27]

$$\Gamma(\vec{r}_i) \approx r^{-d+2-\eta}, T = T_c \text{ και } r \longrightarrow \infty \quad (1.17)$$

Μεταξύ των κρίσιμων εκθετών αποδεικνύονται στα πλαίσια της θεωρίας κλιμάκωσης (που θα αναλυθεί λίγο παρακάτω) οι σχέσεις

$$\alpha + 2\beta + \gamma = 1 \quad (1.18)$$

$$\alpha + \beta(1 + \delta) = 1 \quad (1.19)$$

$$\gamma = \nu(2 - \eta) \quad (1.20)$$

$$2 - \alpha = \nu d \quad (1.21)$$

$$2\beta = \nu(d - 2 + \eta) \quad (1.22)$$

Αξίζει να σημειωθεί πως οι κρίσιμοι εκθέτες δεν έχουν θεωρηθεί διαφορετικοί πριν και μετά το κρίσιμο σημείο καθώς αναφερόμαστε σε αυτούς στα πλαίσια της θεωρίας κλιμάκωσης όπου προκύπτουν ίδιοι.

### 1.1.3 Επίδραση πεπερασμένου μεγέθους και θεωρία κλιμάκωσης

Όταν μελετάται ένα σύστημα το οποίο στο θερμοδυναμικό όριο θεωρείται άπειρο όμως στην πραγματικότητα είναι πεπερασμένου μεγέθους τότε αυτό επηρεάζει τις θερμοδυναμικές ποσότητες (finite size effects). Υποθέτοντας πως πρόκειται για ένα άπειρο πλέγμα, κάθε θέση έχει πιθανότητα  $p$  να είναι κατειλημμένη και  $1 - p$  να είναι μη κατειλημμένη. Γειτονικές κατειλημμένες θέσεις σχηματίζουν συμπλέγματα (clusters). Υπάρχει μια κρίσιμη πιθανότητα κατάληψης  $p_c$  (site percolation threshold) όπου για  $p < p_c$  υπάρχουν μόνο συμπλέγματα πεπερασμένου μεγέθους  $l$  ενώ για  $p \geq p_c$  έχει σχηματιστεί ένα άπειρο σύμπλεγμα που διεισδύει η μαγνήτιση από το ένα όριο του πλέγματος στο άλλο. Έστω ένα πεπερασμένο πλέγμα διάστασης  $L$  στο οποίο υπάρχουν  $n_l(p)$  σε πλήθος συμπλέγματα τα οποία περιέχουν  $l$  κατειλημμένες θέσεις ανά πλεγματική θέση.

Ορίζεται η πιθανότητα  $P_\infty(p)$  που είναι η πιθανότητα μια κατειλημμένη θέση θα αποτελεί μέρος του άπειρου συμπλέγματος. Έτσι με την σειρά της ορίζεται και η μαγνητική επιδεκτικότητα διήθησης [28] [30]

$$\chi = \sum_{l=1}^{\infty} l^2 n_l(p) / p \quad (1.23)$$

Για πιθανότητα κατάληψης να τείνει στην κρίσιμη  $p \rightarrow p_c$  θα πρέπει τα δύο παρακάτω μεγέθη να εμφανίζουν ασυνέχειες

$$P_\infty(p) = B_p \left( \frac{p}{p_c} - 1 \right)^{\beta_p}, p \rightarrow p_c^+ \text{ ενώ για } p < p_c \quad P_\infty(p) = 0 \text{ (δεν ορίζεται άπειρο σύμπλεγμα)} \quad (1.24)$$

$$\chi(p) = \begin{cases} \Gamma_p^+ (1 - \frac{p}{p_c})^{-\gamma_p}, & \text{για } p \rightarrow p_c^- \\ \Gamma_p^- (\frac{p}{p_c} - 1)^{-\gamma_p}, & \text{για } p \rightarrow p_c^+ \end{cases} \quad (1.25)$$

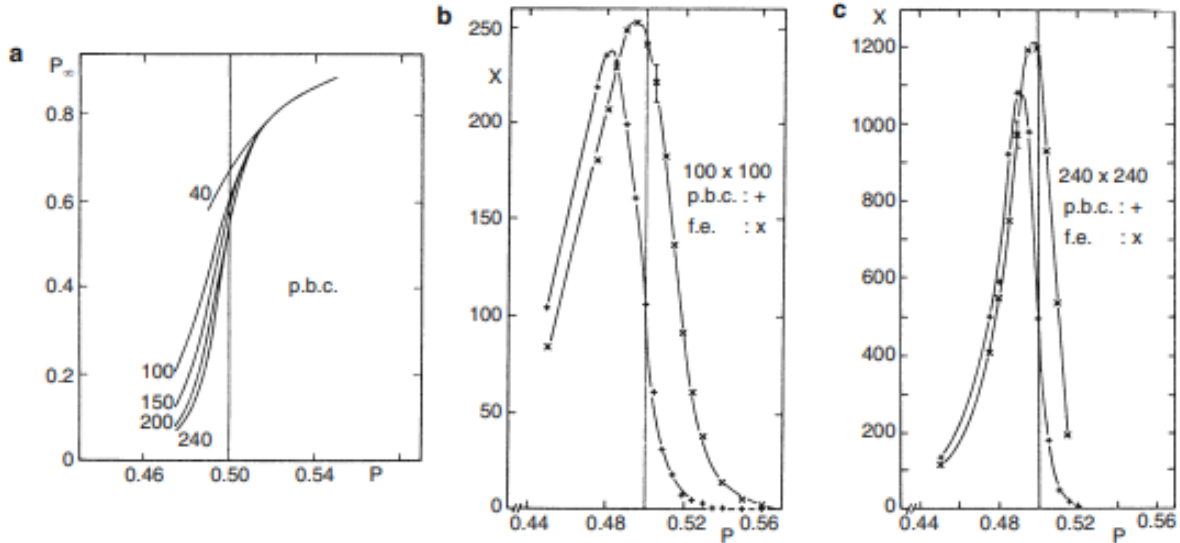
Για πεπερασμένο μέγεθος πλέγματος η μαγνητική επιδεκτικότητα δεν απειρίζεται αλλά αποκτά ένα μέγιστο το ύψος του οποίου εξαρτάται από το μέγεθος του πλέγματος. Η  $P_\infty(p)$  δεν μηδενίζεται για καμία  $p > 0$ . Ακόμα και η πιθανότητα να είναι όλες οι θέσεις κατειλημμένες δεν είναι μηδέν σε ένα πεπερασμένο σύστημα, σε  $d$  διαστάσεις είναι

$$p^{L^d} = \exp(L^d \ln p) \quad (1.26)$$

Και η διήθηση εμφανίζεται με πιθανότητα

$$p^L = \exp(L \ln p), p \rightarrow 0 \quad (1.27)$$

Έτσι οι απειρισμοί ομαλοποιούνται όπως φαίνεται στα σχήματα και για τις δύο σχέσεις 1.24 , 1.25.



Σχήμα 1.1: a) Η πιθανότητα διήθησης  $P_\infty(p)$  σαν συνάρτηση της πιθανότητας κατάληψης  $p$  για διδιάστατο σύστημα μεγέθους  $L \times L$  ( $L = 40, 100, 150, 200, 240$ ) για περιοδικές συνοριακές συνθήκες (p.b.c.) b) c). Η μαγνητική επιδεκτικότητα  $\chi$  σαν συνάρτηση της πιθανότητας κατάληψης  $p$  για περιοδικές συνοριακές συνθήκες (p.b.c.) και ελεύθερα άκρα (f.e.) σε δύο διαφορετικά μεγέθη πλεγμάτων [29] [30].

Για πεπερασμένα συστήματα οι  $n_l(p)$  και  $P_\infty(p)$  είναι αναλυτικές συναρτήσεις του  $p$ . Ενώ για άπειρα συστήματα το μέγεθος των συμπλεγμάτων εκφράζεται ως

$$n_l(p)_{l \rightarrow \infty} = l^{-\tau} \tilde{n}[l^\sigma (1 - \frac{p}{p_c})] \quad (1.28)$$

$$\tau = 1 + \frac{1}{\delta_p} \quad (1.29)$$

και

$$\sigma = 1/(\beta_p \delta_p) = 1/(\beta_p + \gamma_p) \quad (1.30)$$

Ενώ στο κρίσιμο όριο  $p_c$  η συνάρτηση συμπεριφέρεται σύμφωνα με τον νόμο δύναμης  $n_l(p) = l^{-\tau} \tilde{n}(0)$ . Για πεπερασμένα συστήματα αυτός ο νόμος ισχύει μόνο εάν η ακτίνα του συμπλέγματος είναι ελαφρά μικρότερη από τη γραμμική διάσταση του πλέγματος  $L$ .

$$r_l(l \rightarrow \infty) = \hat{r} l^{1/d_f} \quad (1.31)$$

όπου  $d_f$  μορφοκλασματική διάσταση (fractal dimensionality) των συμπλεγμάτων. Για  $p = p_c$  η πιθανότητα ένα σύμπλεγμα να διεισδύει είναι μονάδα  $r_l \approx L$ . Έτσι

$$1 = L^d \int_{r_l=L}^{\infty} n_l(p) dl \approx L^d \tilde{n}(0) \int_{(L/\hat{r})^{d_f}}^{\infty} l^{-\tau} dl = \tilde{n}(0) L^{d+d_f(1-\tau)} \hat{r}^{-d_f(1-\tau)} / (\tau - 1) \quad (1.32)$$

Όπως φαίνεται για να εξαφανιστεί το εκθετικό και να μηδενιστεί ο εκθέτης πρέπει  $d_f = \frac{d}{1-\tau}$  και χρησιμοποιώντας και την σχέση 1.29

$$d_f = \frac{d}{1 + \delta_p} = d\beta_p \delta_p / (\beta_p \delta_p + \beta_p) \quad (1.33)$$

Χρησιμοποιώντας και την 1.30 προκύπτει

$$d_f = d(\beta_p + \gamma_p) / (2\beta_p + \gamma_p) = (\beta_p + \gamma_p) / \nu_p = d - \beta_p / \nu_p \quad (1.34)$$

Όπου  $\nu_p = \frac{d}{2\beta_p + \gamma_p}$ . Και άρα όταν  $r_l = L$

$$l_L = (L/\hat{r})^{d_f} \propto L^{d - \beta_p / \nu_p} \quad (1.35)$$

Έτσι το κλάσμα των κατειλημμένων θέσεων του συμπλέγματος  $l_L$  προς τις συνολικές θέσεις  $L^d$  είναι

$$P_{\infty}^{(L)}(p_c) = L^{-d} l_L \propto L^{-\beta_p / \nu_p} \quad (1.36)$$

Έτσι η πιθανότητα διήθησης για το μεγαλύτερο σύμπλεγμα διάστασης  $\xi$  μπορεί να γραφτεί σαν

$$P_{\infty}^L(p) = L^{-\beta_p / \nu_p} \tilde{P}(L/\xi_p) \quad (1.37)$$

Για  $\xi \ll L$

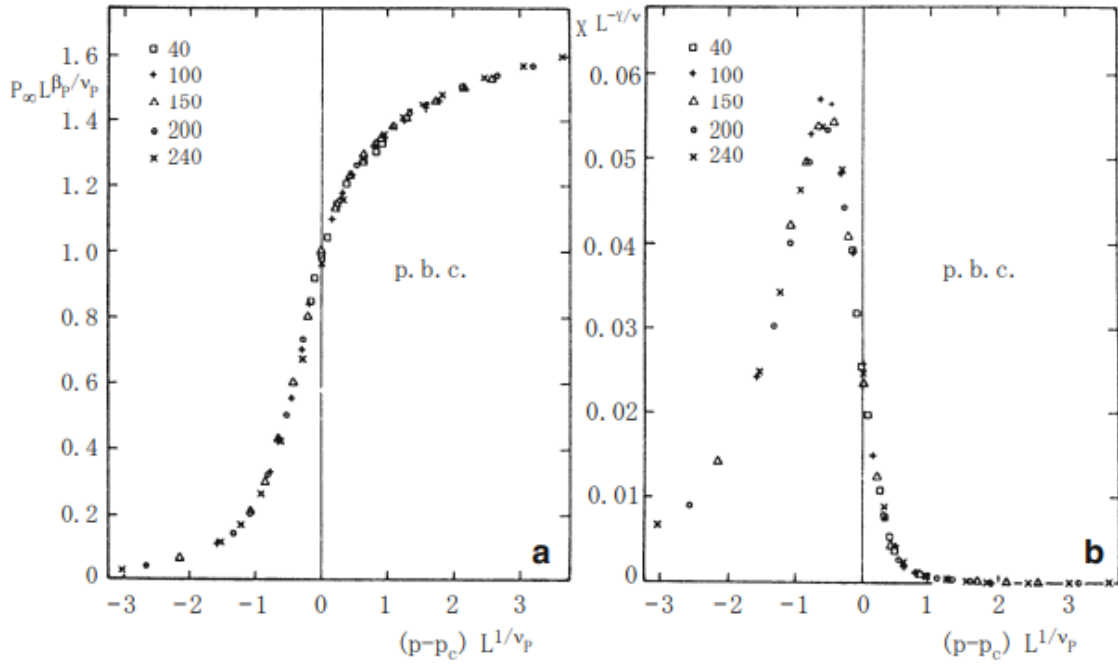
$$\tilde{P}(L/\xi_p) \propto (L/\xi_p)^{\beta_p / \nu_p} \propto L^{\beta_p / \nu_p} (p - p_c)^{\beta_p} \quad (1.38)$$

Αντίστοιχη σχέση προκύπτει και για την επιδεκτικότητα [30]

$$\chi^L(p) = L^{\gamma_p / \nu_p} \tilde{\chi}(L/\xi_p) \quad (1.39)$$

Για  $\xi \ll L$

$$\tilde{\chi}(L/\xi_p) \propto (L/\xi_p)^{-\gamma_p / \nu_p} \quad (1.40)$$



Σχήμα 1.2: Αριστερά η πιθανότητα διήθησης  $L^{\beta_p/\nu_p} P_\infty^L(p)$  συναρτήσει του  $(p - p_c)L^{1/\nu_p}$  και η  $L^{-\gamma_p/\nu_p} \chi^L(p)$  συναρτήσει του  $(p - p_c)L^{1/\nu_p}$  για κρίσιμους εκθέτες  $\beta_p = 0.139$ ,  $\gamma_p = 2.41$  και  $\nu_p = 4/3$  για διδιάστατα πλέγματα διαφόρων μεγεθών [29] [30].

Αντίστοιχα αποδεικνύεται [30] για  $\chi(p = p_c) \propto L^{\gamma_p/\nu_p}$ .

Οι ασυμπτωτικές σχέσεις για της συναρτήσεις κλιμάκωσης  $\tilde{P}(L/\xi_p)$  και  $\tilde{\chi}(L/\xi_p)$  είναι τέτοιες ώστε για  $\xi \ll L$  όλες οι δυνάμεις του  $L$  να εξαφανίζονται και να μένει η συνεισφορά των σχέσεων 1.24 1.25. Ακόμα φαίνεται πως η επιρροή του πεπερασμένου μεγέθους στην περίπτωση των δυο μεγεθών (πιθανότητα διήθησης, μαγνητική επιδεκτικότητα) στις αντίστοιχες συναρτήσεις κλιμάκωσης εξαρτάται από τον λόγο της γραμμικής διάστασης του πλέγματος  $L$  προς το μήκος συσχέτισης  $\xi$ . Το μήκος συσχέτισης έχει την συμπεριφορά

$$\xi \propto (p - p_c)^{-\nu_p} \quad (1.41)$$

και ως το χαρακτηριστικό μέγεθος των συμπλεγμάτων αποτελεί ένα μήκος που δίνει μια ιδέα για την εμβέλεια των συσχετίσεων κατά μήκος του πλέγματος.

Για την εκτίμηση των  $p_c$ ,  $\beta_p/\nu_p$ ,  $\gamma_p/\nu_p$  και  $1/\nu_p$  φαίνεται πως συναρτήσεις κλιμάκωσης στην εικόνα ;; είναι ανεξάρτητες από την γραμμική διάσταση του πλέγματος που εξετάζεται κάθε φορά. Βέβαια δεδομένου ότι στις υποθέσεις μας έχουμε θεωρήσει στο θερμοδυναμικό όριο πως  $L \rightarrow \infty$  θα είναι καλό να επιλεχθούν όσο μεγαλύτερα  $L$  γίνεται.

Όπως φαίνεται, λοιπόν, κοντά στον κρίσιμο σημείο το μήκος συσχέτισης απερίζεται και η συμπεριφορά του συστήματος (θερμοδυναμικές ποσότητες) παραμένουν αναλλοίωτες στους μετασχηματισμούς κλίμακας (scale transformations). Για το συσσωρευτή 4ης τάξης

$$U_L = 1 - \frac{\langle S^4 \rangle_L}{3 \langle S^2 \rangle_L^2} \quad (1.42)$$

Για  $\xi \ll L$  ο συσσωρευτής αποδεικνύεται [31] πως για  $T < T_c$  τείνει στο  $U_\infty = 2/3$  ενώ για  $T > T_c$  τείνει στα  $U_\infty = 4/9$ . Ενώ για  $\xi \gg L$  κοντά στο κρίσιμο σημείο ο συσσωρευτής παίρνει μια συγκεκριμένη τιμή που ελάχιστα εξαρτάται από την γραμμική διάσταση  $L$  του πλέγματος

$$U_* = 1 - C_o \frac{\tilde{\chi}_4(L/\xi)}{3\tilde{\chi}_2^2(L/\xi)} = 1 - C_o \frac{\tilde{\chi}_4(0)}{3\tilde{\chi}_2^2(0)} \quad (1.43)$$

Αυτή η ιδιότητα του συσσωρευτή 4ης τάξης τον καθιστά χρήσιμο στον υπολογισμό της κρίσιμης θερμοκρασίας  $T_c$  βρίσκοντας το σημείο τομής (fixed point) των συναρτήσεων  $U_*$  για διαφορετικά  $L$ .

Πέρα απο τα μεγέθη που αναφέρθηκαν παραπάνω στα πλαίσια της θεωρίας κλιμάκωσης μπορούν να εξεταστούν και όλα τα υπόλοιπα θερμοδυναμικά μεγέθη. Βλέποντας πιο γενικά την υπόθεση της κλιμάκωσης όπως αυτή διατυπώθηκε από τον Widom λέει ότι το μη αναλυτικό μέρος της ελεύθερης ενέργειας του συστήματος μπορεί να γραφτεί σαν ομογενής συνάρτηση των παραμέτρων  $t, H$  [27]

$$F(\lambda^{y_t} t, \lambda^{y_h} H) = \lambda F(t, H) \quad (1.44)$$

Παραγωγίζοντας και τα δύο μέλη προκύπτει

$$\lambda^{y_h} M(\lambda^{y_t} t, \lambda^{y_h} H) = \lambda M(t, H) \quad (1.45)$$

$$M(\lambda^{y_t} t, \lambda^{y_h} H) = \lambda^{1-1/y_h} M(t, H) \quad (1.46)$$

Για  $H = 0$  και  $t \rightarrow 0$

$$\lambda = |t|^{-1/y_t} \quad (1.47)$$

$$M(t \rightarrow 0, 0) \propto |t|^{(1-1/y_h)/y_t} \quad (1.48)$$

Άρα

$$\beta = (1 - 1/y_h)/y_t \quad (1.49)$$

Για  $H \rightarrow 0$  και  $t = 0$

$$\lambda = |H|^{-1/y_h} \quad (1.50)$$

$$M(0, H \rightarrow 0) \propto |t|^{(1-1/y_h)/y_h} \quad (1.51)$$

Άρα

$$1/\delta = (1 - 1/y_h)/y_h \rightarrow \delta = y_h/(1 - 1/y_h) \quad (1.52)$$

Παραγωγίζοντας και δεύτερη φορά την ελεύθερη ενέργεια

$$\chi(t, H) = \lambda^{2y_h-1} \chi(\lambda^{y_t} t, \lambda^{y_h} H) \quad (1.53)$$

Άρα

$$\chi(t \rightarrow 0, 0) \propto |t|^{(1-2y_h)/y_t} \quad (1.54)$$

Και για  $t \rightarrow 0^+$  και για  $t \rightarrow 0^-$  προκύπτει ο ίδιος κρίσιμος εκθέτης

$$\gamma = (2y_h - 1)/y_t \quad (1.55)$$



Αν από την άλλη παραγωγίζαμε την 1.44 δύο φορές ως προς την θερμοκρασία

$$C(t, H) = \lambda^{2y_t-1} C(\lambda^{y_t} t, \lambda^{y_h} h) \quad (1.56)$$

Έτσι

$$C(t \rightarrow 0, 0) \propto |t|^{(1-2y_t)/y_t} \quad (1.57)$$

Και για  $t \rightarrow 0^+$  και για  $t \rightarrow 0^-$  προκύπτει ο ίδιος κρίσιμος εκθέτης

$$\alpha = 2 - 1/y_t \quad (1.58)$$

Συνδυάζοντας τις παραπάνω προκύπτουν οι σχέσεις που έχουν ήδη αναφερθεί 1.1.2 για τους κρίσιμους εκθέτες  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$  και  $\delta$ .

Τελικά συνοψίζοντας οι σχέσεις κλιμάκωσης πεπερασμένου μεγέθους είναι οι εξής

$$m = L^{-\beta/\nu} \tilde{m}(L/\xi) = L^{-\beta/\nu} \tilde{m}(L^{1/\nu} t) \quad (1.59)$$

$$\chi/N = L^{\gamma/\nu} \tilde{\chi}(L/\xi) = L^{\gamma/\nu} \tilde{\chi}(L^{1/\nu} t) \quad (1.60)$$

$$C = L^{-\alpha/\nu} \tilde{C}(L/\xi) = L^{-\alpha/\nu} \tilde{C}(L^{1/\nu} t) \quad (1.61)$$

όπου  $\tilde{m}$ ,  $\tilde{\chi}$  και  $\tilde{C}$  συναρτήσεις κλιμάκωσης σχεδόν ανεξάρτητες από την διάσταση του υπό μελέτη συστήματος.

Όσον αφορά την σχέση των κρίσιμων εκθετών  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$  και  $\delta$  με τους  $\eta$  και  $\nu$  μπορούν να τεκμηριωθούν διαστατικά. Δηλαδή εφόσον  $\eta$  πυκνότητα ελεύθερης ενέργειας

$$f = \frac{F}{k_B T V} \approx \xi^{-d} \approx t^{d\nu} \quad (1.62)$$

Λαμβάνοντας υπόψιν  $\xi \propto t^{-\nu}$ . Παραγωγίζοντας δύο φορές ως προς την θερμοκρασία προκύπτει εκθέτης

$$\alpha = 2 - d\nu \quad (1.63)$$

Στην συνάρτηση συσχέτισης

$$\Gamma(\vec{r}) \approx \xi^{(-d+2-\eta)} \approx |t|^{\nu(-d+2-\eta)} \quad (1.64)$$

Διαστατικά αυτό μπορεί να προσεγγιστεί ως εξής Από τον ορισμό της  $\eta$  συνάρτηση συσχέτισης

$$\Gamma(\vec{r}) \approx e^{-r/\xi}/r^p \quad (1.65)$$

Άρα οι διαστάσεις της είναι

$$[m]^2 = [\Gamma(\vec{r})] = [\mu\lambda\sigma\varsigma]^{-p} (\Gamma(\vec{r}) \approx |t|^{\nu p}) \quad (1.66)$$

$$2\beta = \nu p = \nu(-d + 2 - \eta) \quad (1.67)$$

Σύμφωνα με το θεώρημα διακύμανσης -διασκόρπισης (dissipation-fluctuation)

$$\chi = \frac{1}{k_B T} \int dr^d \Gamma(\vec{r}) \quad (1.68)$$

Άρα από διαστατική ανάλυση

$$[\chi k_B T] = [\text{μήκος}]^d [\Gamma(\vec{r})] = [\text{μήκος}]^{-2+\eta} \quad (1.69)$$

$$|t|^\gamma = [\xi]^{(-2+\eta)} = |t|^{\nu(2-\eta)} \quad (1.70)$$

$$\gamma = \nu(2 - \eta) \quad (1.71)$$

#### 1.1.4 Οικουμενικότητα

Όπως φαίνεται από την προηγούμενη ανάλυση οι θερμοδυναμικές ποσότητες κοντά στο κρίσιμο σημείο δεν εξαρτώνται από τα μικροσκοπικά χαρακτηριστικά του συστήματος. Όπως φάνηκε δεν έχει σημασία το μέγεθος του συστήματος που μελετάται. Γι' αυτό πολλά διαφορετικά συστήματα εμφανίζουν ίδιους κρίσιμους εκθέτες παρόλο που οι εκάστοτε αλλαγές φάσεις μπορεί να αναφέρονται σε διαφορετικά φαινόμενα. Τα συστήματα αυτά λέμε πως ανήκουν στην ίδια κλάση οικουμενικότητας εφόσον έχουν το ίδιο πλήθος διαστάσεων  $d$ , έχουν ίδια συμμετρία και διάσταση παραμέτρου τάξης και έχουν ίδια φύση αλληλεπιδράσεων μακράς εμβέλειας. Τότε οι αλλαγές φάσεις τους μπορούν να περιγραφούν με του ίδιους νόμους δύναμης. Για παράδειγμα, εξετάζοντας στο πρότυπο heisenberg σιδηρομαγνήτες για διαφορετικές δομές πλεγμάτων, προκύπτουν οι ίδιοι κρίσιμοι εκθέτες [32].

## 1.2 Πρότυπο Heisenberg και θεωρία μέσου πεδίου

### 1.2.1 Απο το μοντέλο Weiss στο πρότυπο Heisenberg

Για να εξηγηθεί η αυθόρμητη μαγνητική τάξη στα στερεά προτάθηκε απο τον Pierre Weiss η ύπαρξη εσωτερικού μαγνητικού πεδίου, το επονομαζόμενο μοριακό πεδίο. Το πεδίο αυτό θα μπορούσε να γραφτεί

$$H_M = NM \quad (1.72)$$

όπου  $M$  η μαγνήτιση και  $N$  ο συντελεστής του μοριακού πεδίου. Δηλαδή αυτό το μοριακό πεδίο είναι παράλληλο με την μαγνήτιση και θεωρήθηκε υπεύθυνο για το γεγονός ότι γειτονικά spin προσανατολίζονται παράλληλα. Βέβαια μπορεί να υπέθεσε την ύπαρξη του αλλά δεν είχε βρεθεί ποιά είναι η φύση και ο μηχανισμός αλληλεπίδρασης στον οποίο οφείλεται. Η μαγνητική ροπή δίνεται απο την σχέση

$$\mu = mg\mu_B \quad (1.73)$$

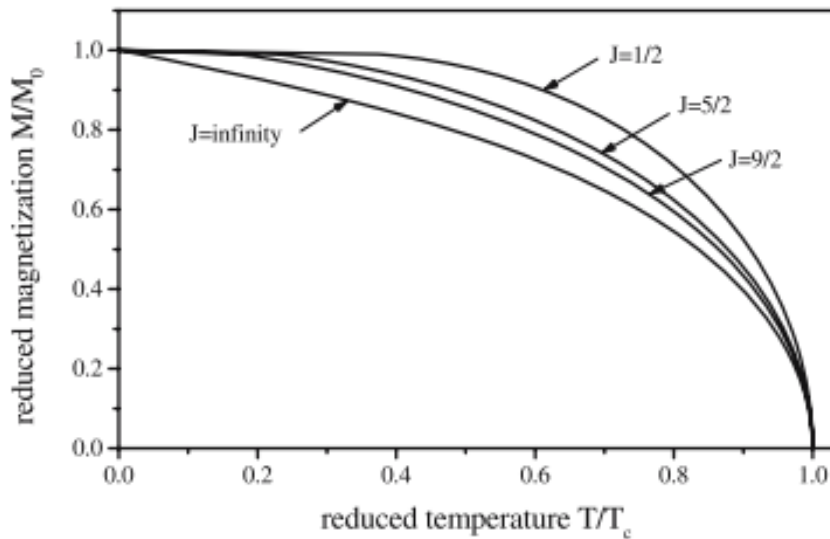
για  $-J \leq m \leq +J$  όπου  $m$  και  $J$  κβαντικοί αριθμοί και  $g$  ο παράγοντας Lande. Έτσι χρησιμοποιώντας την ενέργεια  $E = \mu H$  για τον υπολογισμό της συνάρτησης επιμερισμού και της μαγνήτισης προκύπτει η σχέση

$$\frac{M}{M_o} = \frac{1}{Jg_j\mu_B} \frac{\sum_{m_j=-J}^{m_j=+J} m_j g_j \mu_B \exp \frac{-W}{k_B T}}{\sum_{m_j=-J}^{m_j=+J} \exp \frac{-W}{k_B T}} \quad (1.74)$$

όπου  $W = -m_j g_j \mu_B H$ ,  $H = H_M + H_{ext}$  με  $H_{ext}$  ένα εξωτερικά εφαρμοζόμενο πεδίο και  $M_o$  η μαγνήτιση για θερμοκρασία  $T = 0$  K. Υπολογίζοντας τα αθροίσματα προκύπτει η σχέση για την μαγνήτιση

$$\frac{M}{M_o} = B(a, J) = \frac{2J+1}{2J} \coth a \frac{2J+1}{2J} - \frac{1}{2J} \coth \frac{a}{2J} \quad (1.75)$$

όπου  $B(a, J)$  η συνάρτηση Brillouin.



Σχήμα 1.3: Η συνάρτηση Brillouin για διάφορα  $J$  [33].

Επίσης για την μαγνητική επιδεκτικότητα προκύπτει

$$\chi = \frac{1}{3} J(J+1) \frac{g_j^2 \mu_B^2}{k_B T} = \frac{\mu_{eff}^2}{3k_B T} \quad (1.76)$$

Το μοντέλο αυτό επιβεβαιώνεται πειραματικά για διάφορα παραμαγνητικά ιόντα μετάλλων [33]. Για υψηλές θερμοκρασίες

$$\frac{M}{M_o} = \frac{1}{3} \frac{J+1}{J} \frac{Jg_j\mu_B}{k_B T N M} \quad (1.77)$$

Δεδομένου ότι κοντά στο κρίσιμο σημείο η  $M$  τείνει στο μηδέν και θεωρώντας πως  $H_{ext} = 0$  προκύπτει μια σχέση για την κρίσιμη θερμοκρασία

$$k_B T_c = \frac{1}{3}(J+1)g_j \mu_B N M_o \quad (1.78)$$

όπου για ηλεκτρόνια  $J = S = 1/2$  και  $|g_j| = 1/2$  άρα

$$k_B T_c = \mu_B N M_o \quad (1.79)$$

χρησιμοποιώντας αυτή την σχέση μπορεί να υπολογιστεί για πειραματικά γνωστή  $T_c$  και  $\mu_B$  ο συντελεστής του μαγνητικού πεδίου  $N$  και άρα η τάξη του μοριακού πεδίου. Το μοριακό πεδίο, λοιπόν, προκύπτει της τάξης των  $10^3$  T [33] [34]. Αυτή η τάξη μεγέθους είναι μεγαλύτερη από κάθε συνεχές πεδίο που παράγεται σε εργαστήριο και είναι περίπου  $10^4$  φορές μεγαλύτερο από αυτό που θα χρειαζόταν για να κορεστεί η μαγνήτιση.

Χρησιμοποιώντας την 1.77 προκύπτει για την επιδεκτικότητα

$$\chi = \frac{M}{H_{ext}} = \frac{C}{T - T_c} \quad (1.80)$$

όπου  $C$  η σταθερά Curie  $C = \frac{1}{3}J(J+1)\frac{g_j \mu_B}{k_B} M_o$ .

Ο Weiss για να εξηγήσει το γεγονός, ότι κάποιες περιοχές μπορεί τοπικά να μην είναι μαγνητισμένες, υπέθεσε πως υπάρχουν περιοχές (domains) που κάθε μια από αυτές έχει την δική της μαγνήτιση κορεσμού. Όταν οι πολλές αυτές περιοχές γίνονται μια και έχουν την ίδια μαγνήτιση κορεσμού τότε αυτή είναι η διαδικασία του μαγνητισμού.

Καταλήγοντας ο Weiss έκανε δύο υποθέσεις που αληθεύουν. Πρώτον ότι δημιουργείται αυθόρμητη μαγνήτιση χωρίς εξωτερικό πεδίο και δεύτερον το χωρισμό σε περιοχές domains. Παρόλο που δεν λέει τίποτα για την προέλευση του μοριακού πεδίου και τον φυσικό μηχανισμό που το προκαλεί κατάφερε να προβλέψει την ύπαρξη του.

Αν προσπαθώντας να κατανοήσουμε τη προέλευση του θεωρήσουμε πως είναι καθαρά μαγνητική και πως προέρχεται από την αλληλεπίδραση διπόλων λόγω του πεδίου Lorenz τότε η τάξη μεγέθους του προκύπτει πολλή μικρότερη και δεν είναι ικανή να εξηγήσει το φαινόμενο του σιδηρομαγνητισμού, καθώς προκύπτει περίπου χίλιες φορές μικρότερο [35], [36].

Το 1928 ο Heisenberg πρότεινε το μοντέλο αλληλεπίδρασης ανταλλαγής το οποίο οδηγεί στην σιδηρομαγνητική τάξη. Σε αντίθεση με το μοντέλο του Weiss που πρότεινε απλά ένα αόριστο μοριακό πεδίο αυτή την φορά μικροσκοπικά βλέπουμε την αλληλεπίδραση μεταξύ δύο spin που βρίσκονται σε δύο πλεγματικές θέσεις. Επίσης σε αντίθεση με το μοντέλο Weiss που υποθέτουμε ότι έχουμε κλασικές μαγνητικές ροπές τώρα τα spin θεωρούνται τελεστές και όχι ανύσματα. Η αλληλεπίδραση ανταλλαγής είναι κβαντικό φαινόμενο το οποίο δεν έχει κλασικό ανάλογο. Με βάση την απαγορευτική αρχή του Pauli η χαμιλτονιανή που περιγράφει τον όρο της ενέργειας αλληλεπίδρασης ανταλλαγής είναι αυτή που είχε ήδη προταθεί το 1923 από τον Dirac για το μοντέλο των εντοπισμένων ηλεκτρονίων (localized electrons) σε ορθογώνια τροχιακά

$$H = -2 \sum_{i < j} J_{i,j} S_i S_j \quad (1.81)$$

Ουσιαστικά υποθέτουμε πως αν δύο ηλεκτρόνια με αντιπαράλληλα spin πλησιάσουμε τον ένα το άλλο θα μπουν στο ίδιο τροχιακό παρόλο που αυτό αυξάνει την ηλεκτροστατική ενέργεια Coulomb. Αν όμως αυτά είναι παράλληλα δεν μπορούν να μοιραστούν τον ίδιο τροχιακό λόγω της απαγορευτικής αρχής του Pauli και έτσι απομακρύνονται, μειώνοντας έτσι την ηλεκτροστατική ενέργεια Coulomb. Για απόσταση μεταξύ των ηλεκτρονίων  $1 \text{ \AA}$  η ηλεκτροστατική ενέργεια Coulomb υπολογίζεται της τάξης των  $2.1 * 10^{-18} \text{ Joule}$  [35] και είναι  $10^5$  φορές μεγαλύτερη απο την αλληλεπίδραση διπόλων λόγω πεδίου Lorenz.

Αν θεωρήσουμε δύο spin ένα στην θέση  $r_1$  και ένα στην θέση  $r_2$  τότε η συνολική κυματοσυνάρτηση είναι το γινόμενο των δύο κυματοσυναρτήσεων. Επειδή τα δύο ηλεκτρόνια είναι μη διακρίσιμα και είναι φερμιόνια η συνολική κυματοσυνάρτηση πρέπει να είναι αντισυμμετρική. Αν είμαστε σε singlet κατάσταση με συνολικό spin 0 ( $x_s$ ) που είναι αντισυμμετρική το χωρικό μέρος πρέπει να είναι συμμετρικό. Ενώ αν είμαστε σε triplet κατάσταση με συνολικό spin 1 ( $x_T$ ) που είναι συμμετρική το χωρικό μέρος πρέπει να είναι αντισυμμετρικό. Έτσι

$$\psi_s = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_a(r_1)\psi_b(r_2) + \psi_a(r_2)\psi_b(r_1))x_s \quad (1.82)$$

$$\psi_T = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_a(r_1)\psi_b(r_2) - \psi_a(r_2)\psi_b(r_1))x_T \quad (1.83)$$

Οι ενέργειες των single και triplet καταστάσεων είναι

$$E_s = \int \psi_s^* \hat{H} \psi_s dV_1 dV_2 \quad (1.84)$$

$$E_T = \int \psi_T^* \hat{H} \psi_T dV_1 dV_2 \quad (1.85)$$

Και επειδή

$$S_1 S_2 = \sqrt{\frac{S^2 - S_1^2 - S_2^2}{2}} \quad (1.86)$$

Και οι ιδιοτιμές των  $S^2$ ,  $S_1^2$  και  $S_2^2$  είναι γνωστές Για singlet  $S_1 S_2 = -3/4$  και για triplet  $S_1 S_2 = 1/4$ . Έτσι η διαφορά των ενεργειών είναι

$$E_s - E_T = 2 \int \psi_a^*(r_1)\psi_b^*(r_2)\hat{H}\psi_a(r_2)\psi_b(r_1)dr_1dr_2 \quad (1.87)$$

Η χαμιλτονιανή γράφεται

$$\hat{H} = \frac{1}{4}(E_s + 3E_T) - (E_s - E_T)S_1 S_2 \quad (1.88)$$

Άρα αν τεθεί

$$J = \frac{E_s - E_T}{2} = \int \psi_a^*(r_1)\psi_b^*(r_2)\hat{H}\psi_a(r_2)\psi_b(r_1)dr_1dr_2 \quad (1.89)$$

το ολοκλήρωμα ανταλλαγής, η χαμιλτονιανή πλέον γράφεται

$$\hat{H} = -2JS_1 S_2 \quad (1.90)$$

για δύο ηλεκτρόνια και είναι σιδηρομαγνητική αν  $J > 0$  (triplet) και αντισιδηρομαγνητική αν  $J < 0$  (singlet).

## 1.2.2 Μορφές αλληλεπιδράσεων ανταλλαγής

### 1.2.2.1 Άμεση Αλληλεπίδραση (direct exchange interaction)

Όταν δύο ηλεκτρόνια που ανήκουν σε γειτονικά μαγνητικά άτομα αλληλεπιδρούν μέσω της αλληλεπίδρασης ανταλλαγής αυτή είναι γνωστή ως άμεση αλληλεπίδραση. Αυτό γιατί δεν χρειάζεται μεσολαβητής για να αλληλεπιδράσουν. Δεδομένου όμως πως τα γειτονικά μοριακά τροχιακά έχουν μικρές αλληλεπικαλύψεις (direct overlaps) αυτός ο μηχανισμός δεν είναι αυτός που ελέγχει τις μαγνητικές ιδιότητες. Κυρίως στα παραδείγματα μετάλλων σπάνιων γαιών που τα 4f τροχιακά είναι εντοπισμένα κοντά στον πυρήνα αλλά και στις περιπτώσεις των μεταβατικών μετάλλων τα 3d τροχιακά που δεν είναι τόσο εντοπισμένα όσο τα 4f και πάλι είναι δύσκολο να πούμε πως η άμεση αλληλεπίδραση δικαιολογεί τις μαγνητικές ιδιότητες. Σε αυτά τα μέταλλα θα έπρεπε να λάβουμε υπόψιν μας και τα ηλεκτρόνια αγωγιμότητας και άρα και ο εντοπισμός και οι ζώνες των ηλεκτρονίων πρέπει να εξετασθούν.

### 1.2.2.2 Έμμεση Αλληλεπίδραση (indirect exchange interaction)

Για να δικαιολογηθούν οι μαγνητικές ιδιότητες πολλές χρειάζεται να εισαχθεί μια άλλου είδους έμμεση αλληλεπίδραση καθώς η αλληλεπίδραση μπορεί να γίνεται μεταξύ ηλεκτρονίων τα οποία βρίσκονται μακριά το ένα από το άλλο και η αλληλεπικάλυψη τους να είναι πολύ μικρή επομένως η άμεση αλληλεπίδραση (short-ranged) να είναι πολλή μικρή. Για την έμμεση αλληλεπίδραση (long-ranged) χρειάζεται ένας μεσολαβητής ενδιάμεσα στα ηλεκτρόνια που μέσω αυτού να γίνεται η αλληλεπίδραση. Υπάρχουν οι περιπτώσεις γαιών (earth metals) που τα ηλεκτρόνια αγωγιμότητας μπορούν να επάγουν την αλληλεπίδραση καθώς είναι ελεύθερα μεταξύ των ατόμων αλλά και οι περιπτώσεις των μεταβατικών μετάλλων (transition metals) όπου εκεί επειδή τα ηλεκτρόνια είναι εντοπισμένα χρειάζεται να υπάρχουν κάποια άλλα ιόντα πχ οξυγόνου για να επάγουν την αλληλεπίδραση.

### Στα μέταλλα (RKKY interaction)

Στην περίπτωση των γαιών τα ηλεκτρόνια αγωγιμότητας επάγουν την έμμεση αλληλεπίδραση. Η εντοπισμένη μαγνητική ροπή πολώνει το ηλεκτρόνιο αγωγιμότητας αλληλεπιδρώντας με αυτό και το ηλεκτρόνιο αγωγιμότητας με την σειρά του αλληλεπιδρά με την άλλη εντοπισμένη μαγνητική ροπή. Είναι γνωστή ως RKKY interaction καθώς προτάθηκε από τους Ruderman, Kittel, Kasuya και Yosida. Η περίπτωση των μετάλλων μπορεί να αντιμετωπισθεί με το μοντέλων των ελευθέρων ηλεκτρονίων σαν προσέγγιση που αναφέρεται εκτενώς στην βιβλιογραφία [36]. Υποθέτοντας μια σφαιρική επιφάνεια Fermi ακτίνας  $k_F$  η εξάρτηση του ολοκληρώματος αλληλεπίδρασης από την απόσταση  $r$  για μεγάλες αποστάσεις  $r \gg k_F^{-1}$  είναι:

$$J_{RKKY}(r) \approx \frac{\cos 2k_F r}{r^3} \quad (1.91)$$

και έχει ταλαντωτική συμπεριφορά (ταλαντώσεις Friedel). Η αλληλεπίδραση μπορεί να είναι είτε σιδηρομαγνητική είτε αντισιδηρομαγνητική.

### Στα ιοντικά στερεά (superexchange)

Αρκετά ιοντικά στερεά όπως οξείδια, φθοριούχα άλατα, νιτρίδια κλπ εμφανίζουν μαγνητικές ιδιότητες όπως πχ  $MnO$ ,  $MnF_2$ ,  $MnN$ . Δεδομένου ότι στο οξείδιο του μαγγανίου για παράδειγμα τα ιόντα του μαγγανίου δεν έχουν άμεσο ολοκλήρωμα αλληλεπίδρασης το γεγονός πως είναι αντισιδηρομαγνητικό δείχνει πως υπάρχει έμμεση αλληλεπίδραση μέσω του ιόντος του οξυγόνου. Αυτή η αλληλεπίδραση είναι long-ranged και ονομάζεται superexchange interaction. Ουσιαστικά πρόκειται για δύο μαγνητικά ιόντα που αλληλεπιδρούν με την μεσολάβηση ενός μη μαγνητικού ιόντος ενδιάμεσα.

Το ολοκλήρωμα αλληλεπίδρασης αποτελείται από δύο μέρη ένα είναι το δυναμικό και το άλλο το κινητικό μέρος. Το δυναμικό μέρος αντιπροσωπεύει την άπωση των ηλεκτρονίων και ενισχύει τον σιδηρομαγνητισμό όμως σε περίπτωση που απέχουν πολύ τα ιόντα είναι μικρή η επιρροή του. Το κινητικό μέρος ενισχύει τον αντισιδηρομαγνητισμό και επιτρέποντας στα ηλεκτρόνια να είναι απεντοπισμένα μειώνοντας έτσι την κινητική τους ενέργεια.

#### 1.2.2.3 Double Exchange Interaction

Μια ειδική περίπτωση αλληλεπίδρασης κατά την οποία δύο μαγνητικά ιόντα με διαφορετικό αριθμό οξειδωσης αλληλεπιδρούν μέσω ενός μη μεταλλικού ιόντος είναι η double exchange αλληλεπίδραση. Για παράδειγμα το Mn μπορεί να υπάρξει με αριθμούς οξειδωσης +3 και +4 και ενδιάμεσα υπάρχει οξυγόνο. Τότε αν είναι τα σπιν στα δύο μαγνητικά ιόντα παράλληλα τότε μπορεί να ένα ηλεκτρόνιο που υπάρχει παραπάνω στο ένα μαγνητικό ιόν να ανταλλάσσεται μέσω του ιόντος του οξυγόνου μεταξύ των δύο μαγνητικών ιόντων. Όπως φαίνεται και στην εικόνα η αλληλεπίδραση αυτή είναι σιδηρομαγνητική.

Αξίζει να σχολιαστεί πως στο πρότυπο Heisenberg θεωρούμε την αλληλεπίδραση ισότροπη και ανεξάρτητη της διεύθυνσης. Αν ληφθεί υπόψιν η αλληλεπίδραση σπιν-τροχιάς υπάρχει μια αλληλεπίδραση ανταλλαγής μεταξύ της βασικής του ενός και της διεγερμένης κατάστασης του άλλου ιόντος. Είναι γνωστή σαν Dzyaloshinsky-Moriya interaction και οδηγεί σε έναν όρο της χαμιλτονιανής

$$\hat{H}_{DM} = \vec{D} \vec{S}_1 \times \vec{S}_2 \quad (1.92)$$

οπού  $\vec{D}$  άνυσμα που εξαφανίζεται όταν το κρυσταλλικό πεδίο έχει συμμετρία αναστροφής σε σχέση με το κέντρο των δύο μαγνητικών ιόντων.

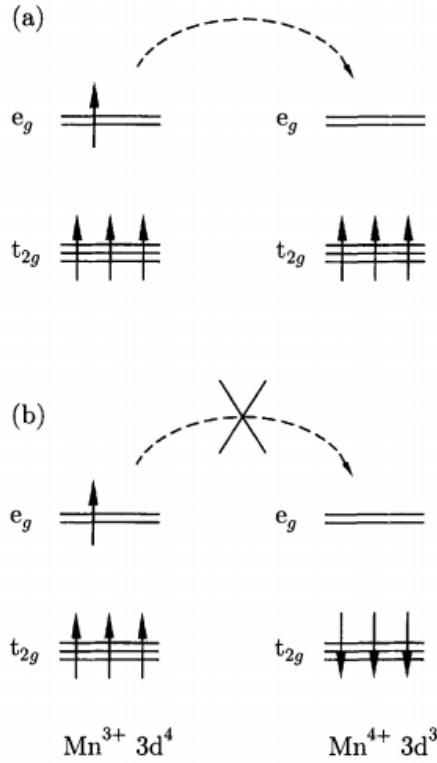
### 1.2.3 Θεωρία μέσου πεδίου

Όπως αναφέρθηκε ο όρος αλληλεπίδρασης της χαμιλτονιανής μπορεί να γραφτεί ως

$$H = -2 \sum_{i < j} J_{i,j} \vec{S}_i \vec{S}_j \quad (1.93)$$

Αν λάβουμε υπόψιν και ένα εξωτερικό πεδίο  $B$  η χαμιλτονιανή που δείχνει την αλληλεπίδραση ενός σπιν με το εξωτερικό πεδίο και τα γειτονικά του σπιν είναι:

$$H = \sum_{\langle ij \rangle} J \vec{S}_i \vec{S}_j - \sum_i \vec{B} \vec{S}_i \quad (1.94)$$



Σχήμα 1.4: Η *double exchange* μεταξύ των ιόντων μαγγανίων για *a* σιδηρομαγνητισμό όπου είναι εφικτή και *b* αντισιδηρομαγνητισμό όπου δεν είναι εφικτή [36]

Σε ένα στερεό πλέγμα οι συνδυασμοί των σπιν θα είναι πάρα πολλοί και έτσι δεν μπορεί να υπολογιστεί ακριβώς το άθροισμα. Έτσι έχει υπολογιστεί μέσω της προσέγγισης μέσου πεδίου. Στην προσέγγιση μέσου πεδίου θεωρούμε πως το κάθε σπιν που βρίσκεται στην πλεγματική θέση  $i$  μπορεί να γραφτεί σαν μια μέση τιμή του σπιν συν μια διακύμανση γύρω από αυτή την μέση τιμή.

$$\vec{S}_i = \langle \vec{S}_i \rangle + \delta \vec{S}_i \quad (1.95)$$

Τότε ο όρος

$$\sum_{\langle ij \rangle} J \vec{S}_i \vec{S}_j \quad (1.96)$$

γίνεται

$$\sum_{\langle ij \rangle} J (\langle \vec{S}_i \rangle + \delta \vec{S}_i) (\langle \vec{S}_j \rangle + \delta \vec{S}_j) \quad (1.97)$$

$$\sum_{\langle ij \rangle} J (\langle \vec{S}_i \rangle \langle \vec{S}_j \rangle + \langle \vec{S}_i \rangle \delta \vec{S}_j + \langle \vec{S}_j \rangle \delta \vec{S}_i) \quad (1.98)$$

Ο όρος  $\delta \vec{S}_i \delta \vec{S}_j$ , εφόσον οι διακυμάνσεις είναι πολύ μικρές, θα είναι πολύ μικρότερης τάξης μεγέθους και αγνοείται. Επίσης εφόσον θεωρούμε πως τα σπίν των σημείων του πλέγματος είναι



ισοδύναμα οι μέσες τιμές τους είναι ίδιες

$$\langle \vec{S}_i \rangle = \langle \vec{S}_j \rangle = \langle \vec{S} \rangle \quad (1.99)$$

$$\sum_{\langle ij \rangle} [J(\langle \vec{S} \rangle \langle \vec{S} \rangle + \langle \vec{S} \rangle \delta \vec{S}_j + \langle \vec{S} \rangle \delta \vec{S}_i)] \quad (1.100)$$

Αντικαθιστώντας ξανά  $\delta S = S - \langle S \rangle$  για κάθε  $i, j$  προκύπτει

$$\sum_{\langle ij \rangle} [J(-\langle \vec{S} \rangle^2 + \langle \vec{S} \rangle (\vec{S}_j) + \langle \vec{S} \rangle (\vec{S}_i))] \quad (1.101)$$

Αν πούμε ότι λαμβάνουμε υπόψιν την αλληλεπίδραση μόνο μεταξύ πρώτων γειτόνων την αλληλεπίδραση με πιο μακρινούς γείτονες την θεωρούμε αμελητέα. Άρα αν το ένα σημείο του πλέγματος είναι το  $i$  το  $j$  θα είναι πρώτος γείτονας του και θα μπορούμε να οδηγηθούμε χωρικά από το  $i$  στο  $j$  προσθέτοντας ένα άνυσμα πλέγματος  $\vec{\delta}$ . Σε κάθε διάσταση του προβλήματος για το  $i$  έχει δυο γείτονες έναν για  $+\vec{\delta}$  και έναν για  $-\vec{\delta}$  όμως εφόσον θα πάρουμε άθροισμα στους γείτονες  $i$  και  $j$  αλλά και στους  $j$ ,  $i$  αν μετακινούμασταν με το  $\vec{\delta}$  και στις δύο διευθύνσεις θα παίρναμε δύο φορές την ίδια αλληλεπίδραση. Συνεπώς κινούμαστε με το  $\vec{\delta}$  σε όλες τις διευθύνσεις κατά την θετική κατεύθυνση. Άρα το άθροισμα στο  $j$  δίνεται άθροισμα στα  $\vec{\delta}$  αθροίζουμε πρώτα στα σημεία  $i$  και για κάθε σημείο  $i$  στα ανύσματα μετατόπισης  $\vec{\delta}$  που μας οδηγούν στους πρώτους γείτονες από την θετική κατεύθυνση.

$$\sum_{\langle i\vec{\delta} \rangle} J(-\langle \vec{S} \rangle \langle \vec{S} \rangle + \langle \vec{S} \rangle \vec{S}_{i+\vec{\delta}} + \langle \vec{S} \rangle \vec{S}_i) \quad (1.102)$$

Το  $\sum_{\langle i\vec{\delta} \rangle} 1 = \sum_i 1 \sum_{\vec{\delta}} 1 = \frac{Nq}{2}$  όπου  $q$  ο αριθμός σύνταξης του πλέγματος

$$- \frac{Nq}{2} J \langle \vec{S} \rangle^2 + \sum_{\langle i\vec{\delta} \rangle} \langle \vec{S} \rangle J \vec{S}_{i+\vec{\delta}} + J \sum_{\langle i\vec{\delta} \rangle} \langle \vec{S} \rangle \vec{S}_i \quad (1.103)$$

$$- \frac{Nq}{2} J \langle \vec{S} \rangle^2 + J \langle \vec{S} \rangle \sum_{\langle i\vec{\delta} \rangle} \vec{S}_{i+\vec{\delta}} + J \langle \vec{S} \rangle \sum_{\langle i\vec{\delta} \rangle} \vec{S}_i \quad (1.104)$$

$$- \frac{Nq}{2} (J \langle \vec{S} \rangle^2) + J \langle \vec{S} \rangle \frac{q}{2} \sum_i \vec{S}_i + \frac{q}{2} J \langle \vec{S} \rangle \sum_i \vec{S}_i \quad (1.105)$$

Το άθροισμα  $\sum_{\langle i\vec{\delta} \rangle} \vec{S}_{i+\vec{\delta}}$  αθροίζει και αυτό σε όλα τα σημεία του πλέγματος οπότε μπορεί να γραφτεί  $\frac{q}{2} \sum_i \vec{S}_i$

$$- \frac{Nq}{2} (J \langle \vec{S} \rangle^2) + 2J \langle \vec{S} \rangle \frac{q}{2} \sum_i \vec{S}_i \quad (1.106)$$

Αφού αποσυνζεύχτηκαν οι όροι, η χαμιλτονιανή μπορεί τώρα να γραφτεί

$$H = -2J\langle\vec{S}\rangle\frac{q}{2}\sum_i\vec{S}_i - \sum_i\vec{B}\vec{S}_i + \frac{Nq}{2}(J\langle\vec{S}\rangle)^2 \quad (1.107)$$

$$H = -(2J\langle\vec{S}\rangle\frac{q}{2} + \vec{B})\sum_i\vec{S}_i + \frac{Nq}{2}(J\langle\vec{S}\rangle)^2 \quad (1.108)$$

$$H = -\vec{B}_{eff}\sum_i\vec{S}_i + \frac{Nq}{2}J\langle\vec{S}\rangle^2 \quad (1.109)$$

Το  $\vec{B}_{eff}$  είναι το ενεργό μαγνητικό πεδίο που εμπεριέχει το εξωτερικό αλλά και την αλληλεπίδραση από το μαγνητικό πεδίο των πρώτων γειτόνων που έχουν μέση τιμή spin  $\langle\vec{S}\rangle$ .

Προχωρώντας στον υπολογισμό της συνάρτησης επιμερισμού

$$Z = \sum_n e^{-\beta E_n} \quad (1.110)$$

$$\sum_{\vec{S}_1} \dots \sum_{\vec{S}_N} e^{+\beta(B_{eff}\sum_i\vec{S}_i - NdJ\langle\vec{S}\rangle^2)} \quad (1.111)$$

$$Z = \sum_{\vec{S}_1} \dots \sum_{\vec{S}_N} e^{+\beta\sum_i(B_{eff}\vec{S}_i)} e^{-\beta NdJ\langle\vec{S}\rangle^2} \quad (1.112)$$

$$Z = e^{-\frac{Nq}{2}\beta J\langle\vec{S}\rangle^2} \sum_{\vec{S}_1} \sum_{\vec{S}_N} e^{+\beta\sum_i(B_{eff}\vec{S}_i)} \quad (1.113)$$

$$Z = e^{-\frac{Nq}{2}\beta J\langle\vec{S}\rangle^2} \sum_{\vec{S}_1} e^{+\beta(B_{eff}\vec{S}_1)} \dots \sum_{\vec{S}_N} e^{+\beta(B_{eff}\vec{S}_N)} \quad (1.114)$$

$$Z_1 = e^{-\frac{Nq}{2}\beta J\langle\vec{S}\rangle^2} \sum_{\vec{S}_1} e^{+\beta(B_{eff}\vec{S}_1)} \quad (1.115)$$

Και

$$Z = Z_1^N \quad (1.116)$$

Θεωρώντας το κλασσικό πρότυπο Heisenberg σε 3 διαστάσεις θα θεωρήσουμε το spin τριδιάστατο άνυσμα και θα θεωρήσουμε το  $\vec{B}_{eff}$  προσανατολισμένο στον άξονα  $z$ .

$$Z_1 = e^{-\frac{q}{2}\beta J\langle\vec{S}\rangle^2} \int d\Omega e^{+\beta(B_{eff}S\cos\theta)} \quad (1.117)$$

$$Z_1 = e^{-\frac{q}{2}\beta J\langle\vec{S}\rangle^2} \int_0^{2\pi} \int_0^\pi d\theta d\phi \sin\theta e^{+\beta(B_{eff}S\cos\theta)} \quad (1.118)$$

$$Z_1 = 2\pi e^{-\frac{q}{2}\beta J \langle \vec{S} \rangle^2} \int_{-1}^{+1} du e^{+\beta(B_{eff}Su)} \quad (1.119)$$

$$Z_1 = 2\pi e^{-\frac{q}{2}\beta J \langle \vec{S} \rangle^2} \frac{[e^{+\beta B_{eff}S} - e^{-\beta B_{eff}S}]}{\beta B_{eff}S} \quad (1.120)$$

$$Z_1 = 4\pi e^{-\frac{q}{2}\beta J \langle \vec{S} \rangle^2} \frac{\sinh \beta B_{eff}S}{\beta B_{eff}S} \quad (1.121)$$

$$Z = [4\pi]^N e^{-\frac{q}{2}\beta NJ \langle \vec{S} \rangle^2} \frac{[\sinh \beta B_{eff}S]^N}{[\beta B_{eff}S]^N} \quad (1.122)$$

### 1.2.3.1 Αυτοσυνεπής εξίσωση για την μαγνήτιση και κρίσιμη θερμοκρασία

Έτσι προκύπτει η αυτοσυνεπής εξίσωση για την μαγνήτιση

$$\langle M \rangle = -\left(\frac{\partial F}{\partial B}\right)_T = -\frac{1}{\beta} \frac{\partial \ln Z}{\partial B} \quad (1.123)$$

$$\langle M \rangle = NS(\coth(\beta B_{eff}S) - \frac{1}{\beta B_{eff}S}) \quad (1.124)$$

όπου  $B_{eff} = 2J \langle S \rangle \frac{q}{2} + B$

$$\langle M \rangle = NS(\coth \beta(2J \langle S \rangle \frac{q}{2} + B)S - \frac{1}{\beta(2J \langle S \rangle \frac{q}{2} + B)S}) \quad (1.125)$$

Επειδή

$$\langle M \rangle = N \langle S \rangle \quad (1.126)$$

$$\langle S \rangle = S(\coth \beta(qJ \langle S \rangle + B)S - \frac{1}{\beta(qJ \langle S \rangle + B)S}) \quad (1.127)$$

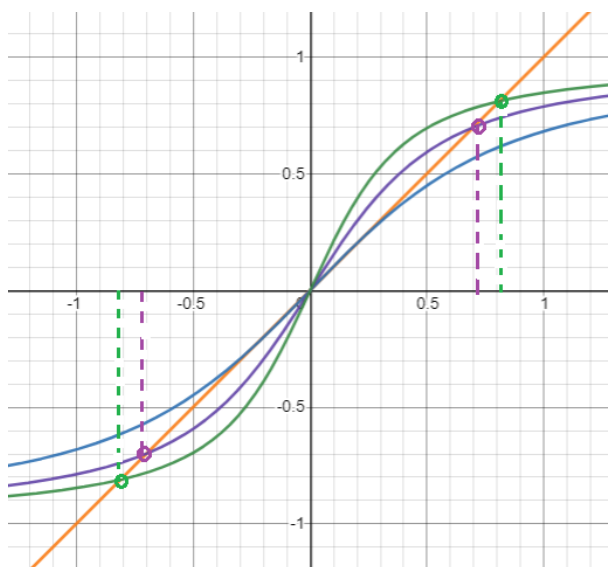
Είναι αυτοσυνεπής εξίσωση για την μαγνήτιση καθώς και το πρώτο μέλος αλλά και το δεύτερο εξαρτώνται από την μαγνήτιση. Έτσι εισάγοντας τιμές εισόδου για την μαγνήτιση μπορεί να προσδιοριστεί σε ποιές τιμές εισόδου πλησιάζουμε τις τιμές εξόδου.

Αν και λύνεται αριθμητικά, μπορούμε να προσδιορίσουμε ποιοτικά το πρόβλημα με γραφική επίλυση. Αν θεωρήσουμε δύο συναρτήσεις

$$f_1(\langle s \rangle) = \langle S \rangle \quad (1.128)$$

και

$$f_2(\langle S \rangle) = S(\coth \beta(J \langle S \rangle q + B)S - \frac{1}{\beta(J \langle S \rangle q + B)S}) \quad (1.129)$$



Σχήμα 1.5: Οι συναρτήσεις  $f_1(\langle s \rangle) = \langle S \rangle$  και  $f_2(\langle S \rangle) = S(\coth \beta(J\langle S \rangle q + B)S - \frac{1}{\beta(J\langle S \rangle q + B)S})$  για διάφορες τιμές θερμοκρασιών. Οι πράσινες και οι μοβ εμφανίζουν δύο μη μηδενικές λύσεις από τα σημεία τομής ενώ η μπλε είναι η οριακή θερμοκρασία  $T = T_c$  κάτω από την οποία δεν έχουμε λύσεις διάφορες του μηδενός και συνεπώς δεν είναι το σύστημα σιδηρομαγνητικό.

Και τις ζωγραφίσουμε Για να προσδιοριστεί η κρίσιμη τιμή της θερμοκρασίας ουσιαστικά η κλίση δηλαδή και παράγωγος στο μηδέν της  $f_2(\langle S \rangle)$  συνάρτησης θα πρέπει να είναι μεγαλύτερη της κλίσης της  $f_1(\langle S \rangle)$  στο μηδέν (που είναι 1). Έτσι θα υπάρχουν δύο σημεία τομής για μέση μαγνήτιση διάφορη του μηδενός. Η κρίσιμη προκύπτει

$$T_c = \frac{JqS^2}{3k_B} \quad (1.130)$$

Είναι εμφανές πως για  $J = 1$  και  $k_B = 1$  στο  $fcc$  και  $hcp$  πλέγμα που ο αριθμός σύναξης πρώτων γειτόνων είναι  $q = 12$  η προβλεπόμενη κρίσιμη θερμοκρασία λαμβάνοντας υπόψη μόνο 1ους γείτονες είναι  $T_c = 4 \text{ J/k}_B$ .

### 1.2.3.2 Κρίσιμοι εκθέτες στα πλαίσια θεωρίας μέσου πεδίου

$$\text{Εάν } x = \frac{qJS}{k_B T} = \frac{qS}{T} \text{ και } \langle S \rangle = \sigma$$

$$\sigma = S(\coth x\sigma - \frac{1}{x\sigma}) \quad (1.131)$$

Κοντά στην κρίσιμη θερμοκρασία

$$\lim_{\sigma \rightarrow 0} (\coth x\sigma - \frac{1}{x\sigma}) = \frac{x\sigma}{3} - \frac{x^3\sigma^3}{45} + \mathcal{O}(x^5\sigma^5) \quad (1.132)$$

Έτσι

$$\sigma \approx S \frac{x\sigma}{3} - S \frac{x^3\sigma^3}{45} \quad (1.133)$$

$$\sigma \approx S \frac{x\sigma}{3} - S \frac{x^3\sigma^3}{45} \quad (1.134)$$

Αντικαθιστώντας  $x = \frac{3T_c}{ST}$  και λύνοντας ως προς  $\sigma$

$$\sigma^2 = \frac{5}{3} \left( \frac{ST}{T_c} \right)^2 \left( \frac{T_c - T}{T_c} \right) \quad (1.135)$$

Θέτοντας  $t = \frac{T_c - T}{T_c}$

$$\sigma \approx \pm S \sqrt{\frac{5}{3}} (-t)^{-\frac{1}{2}} \quad (1.136)$$

Επομένως στα πλαίσια θεωρίας μέσου πεδίου ο κρίσιμος εκθέτης  $\beta$  εκτιμάται  $\beta = \frac{1}{2}$   
Για τον προσδιορισμό της κρίσιμης ισόθερμου χρησιμοποιείται το ανάπτυγμα

$$\lim_{y \rightarrow 0} (\coth y - \frac{1}{y}) = \frac{y}{3} - \frac{y^3}{45} + \mathcal{O}(y^5) \quad (1.137)$$

στην αυτοσυνεπή εξίσωση της μαγνήτισης για  $B \neq 0$  και  $T = T_c$  οπότε

$$\sigma = S \left( S \frac{(JqS + B)}{3k_B T_c} + S^3 \frac{(Jq\sigma + B)^3}{45(k_B T_c)^3} \right) \quad (1.138)$$

εφόσον  $T_c = \frac{JqS^2}{3k_B}$  προκύπτει

$$\frac{B}{Jq} = \frac{S^4 (JqS + B)^3}{45(k_B T_c)^3} \quad (1.139)$$

Όταν  $B \rightarrow 0$  η κυρίαρχη συμπεριφορά είναι

$$\sigma \approx H^{1/3} \quad (1.140)$$

Επομένως ο κρίσιμος εκθέτης  $\delta = 3$ .

Για τον προσδιορισμό της μαγνητικής επιδεκτικότητας παραγωγίζοντας τη σχέση 1.127

$$\chi/N = \frac{d\sigma}{dB} = S \left( -\frac{1}{\sinh^2(x)} + \frac{1}{x^2} \right) \frac{dx}{dB} \quad (1.141)$$

με  $x = \frac{(qJ\sigma + B)S}{k_B T}$  άρα

$$\chi/N = \frac{d\sigma}{dB} = S \left( -\frac{1}{\sinh^2(x)} + \frac{1}{x^2} \right) \left( \frac{SJq}{k_B T} \frac{d\sigma}{dB} + \frac{S}{k_B T} \right) \quad (1.142)$$

$$\chi/N = \frac{d\sigma}{dB} = \frac{S^2}{k_B T} \left( -\frac{1}{\sinh^2(x)} + \frac{1}{x^2} \right) \left( Jq \frac{d\sigma}{dB} + 1 \right) \quad (1.143)$$

$$\frac{d\sigma}{dB} \left( 1 - \frac{S^2 Jq}{k_B T} \left( -\frac{1}{\sinh^2(x)} + \frac{1}{x^2} \right) \right) = \frac{S^2}{k_B T} \left( -\frac{1}{\sinh^2(x)} + \frac{1}{x^2} \right) \quad (1.144)$$

$$\frac{d\sigma}{dB} \left( 1 - \frac{S^2 Jq}{k_B T} \left( -\frac{1}{\sinh^2(x)} + \frac{1}{x^2} \right) \right) = \frac{S^2}{k_B T} \left( -\frac{1}{\sinh^2(x)} + \frac{1}{x^2} \right) \quad (1.145)$$

$$\frac{d\sigma}{dB} = \frac{\frac{S^2}{k_B T} \left( -\frac{1}{\sinh^2(x)} + \frac{1}{x^2} \right)}{\left( 1 - \frac{S^2 Jq}{k_B T} \left( -\frac{1}{\sinh^2(x)} + \frac{1}{x^2} \right) \right)} \quad (1.146)$$

Για  $B \rightarrow 0$ ,  $\sigma \rightarrow 0$  και  $T \rightarrow T_c$

$$-\frac{1}{\sinh^2(x)} + \frac{1}{x^2} \approx \frac{1}{3} - \frac{x^2}{15} + \mathcal{O}(x^4) \quad (1.147)$$

$$\frac{d\sigma}{dB} = \frac{\frac{S^2}{k_B T} \left( \frac{1}{3} - \frac{x^2}{15} \right)}{\left( 1 - \frac{S^2 Jq}{k_B T} \left( \frac{1}{3} - \frac{x^2}{15} \right) \right)} \quad (1.148)$$

$$\frac{d\sigma}{dB} = \frac{\frac{S^2}{3k_B T} \left( 1 - \frac{x^2}{5} \right)}{1 - \frac{S^2 Jq}{3k_B T} \left( 1 - \frac{x^2}{5} \right)} \quad (1.149)$$

Επειδή  $x = \frac{3T_c \sigma}{ST}$

$$\frac{d\sigma}{dB} = \frac{\frac{S^2}{3k_B T} \left( 1 - \frac{9\sigma^2 T_c^2}{5S^2 T^2} \right)}{1 - \frac{S^2 Jq}{3k_B T} \left( 1 - \frac{9\sigma^2 T_c^2}{5S^2 T^2} \right)} \quad (1.150)$$

Και αντικαθιστώντας την 1.135 προκύπτει

$$\frac{d\sigma}{dB} = \frac{\frac{S^2}{3k_B T} \left( 1 - 3 \left( \frac{T_c - T}{T_c} \right) \right)}{1 - \frac{S^2 Jq}{3k_B T} \left( 1 - 3 \left( \frac{T_c - T}{T_c} \right) \right)} \quad (1.151)$$

Προκύπτει λοιπόν

$$\frac{d\sigma}{dB} = \frac{\left( -2 + \frac{3T}{T_c} \right) S^2}{2(T_c - T) 3k_B} \quad (1.152)$$

Εφόσον  $T = T_c(1 + t)$  η κυρίαρχη συμπεριφορά προκύπτει

$$\frac{\chi}{N} \approx \begin{cases} (-t)^{-1}, T \rightarrow T_c^- \\ (t)^{-1}, T \rightarrow T_c^+ \end{cases} \quad (1.153)$$

Επομένως ο κρίσιμος εκθέτης  $\gamma = 1$  θα πλαίσια της θεωρίας μέσου πεδίου. Στην σχέση της εσωτερικής ενέργειας χωρίς εξωτερικό πεδίο

$$\langle E \rangle = -\frac{\partial \ln Z}{\partial B} \quad (1.154)$$

Χρησιμοποιώντας την 1.122 για  $B_{eff} = Jq\sigma$

$$\frac{\langle E \rangle}{N} = \frac{q}{2}J\sigma^2 + \beta Jq\sigma \frac{\partial \sigma}{\partial \beta} - (SJq\sigma + \beta JSq \frac{\partial \sigma}{\partial \beta}) (\coth \beta JqS\sigma - \frac{1}{\beta JqS\sigma}) \quad (1.155)$$

Αντικαθιστώντας 1.131 προκύπτει

$$\frac{\langle E \rangle}{N} = -J\frac{q}{2}\sigma^2 \quad (1.156)$$

Για το προσδιορίσουμε την κρίσιμη συμπεριφορά

$$\frac{\langle E \rangle}{N} \approx \begin{cases} -\frac{5}{2}k_B T_c \left(\frac{T_c - T}{T_c}\right), \text{για } T \rightarrow T_c^- \\ 0, \text{για } T \rightarrow T_c^+ \end{cases} \quad (1.157)$$

Έπειτα η ειδική θερμότητα ανά σπιν προσδιορίζεται ως

$$\frac{C}{N} = \frac{\partial \langle E \rangle / N}{\partial T} \quad (1.158)$$

Χρησιμοποιώντας την 1.156

$$\frac{C}{N} = -Jq\sigma \frac{\partial \sigma}{\partial T} \quad (1.159)$$

Αντικαθιστώντας την 1.135

$$\frac{\partial \sigma}{\partial T} = \frac{-\frac{Jq\sigma S^2}{k_B T^2} \left(-\frac{1}{\sinh^2(x)} + \frac{1}{x^2}\right)}{\left(1 - \frac{S^2 Jq}{k_B T} \left(-\frac{1}{\sinh^2(x)} + \frac{1}{x^2}\right)\right)}, \text{για } x = \beta S Jq\sigma \quad (1.160)$$

Έτσι

$$\frac{C}{N} = \frac{k_B x^2 \left(-\frac{1}{\sinh^2(x)} + \frac{1}{x^2}\right)}{\left(1 - \frac{S^2 Jq}{k_B T} \left(-\frac{1}{\sinh^2(x)} + \frac{1}{x^2}\right)\right)}, \text{για } x = \beta S Jq\sigma \quad (1.161)$$

Για την κρίσιμη συμπεριφορά με χρήση της 1.157

$$\frac{C}{N} \approx \begin{cases} \frac{5}{2}k_B, \text{για } T \rightarrow T_c^- \\ 0, \text{για } T \rightarrow T_c^+ \end{cases} \quad (1.162)$$

Έτσι ο κρίσιμος εκθέτης προκύπτει  $\alpha = 0$

### 1.2.4 Θεωρία μέσου πεδίου λαμβάνοντας υπόψιν 2ους, 3ους, 4ους γείτονες

Αν στην προηγούμενη ανάλυση θεωρήσουμε πως κάθε σπιν αλληλεπιδρά με πρώτους και δεύτερους γείτονες η χαμιλτονιανή θα μπορεί να γραφτεί

$$H = \sum_{\langle ij \rangle} J_1 \vec{S}_i \vec{S}_j + \sum_{\langle ik \rangle} J_2 \vec{S}_i \vec{S}_k - \sum_i \vec{B} \vec{S}_i \quad (1.163)$$

όπου  $j$  ο δείκτης που αθροίζει σε όλους τους πρώτους γείτονες του  $i$  και  $k$  ο δείκτης που αθροίζει σε όλους τους δεύτερους γείτονες του  $i$ . Επίσης  $J_1$  και  $J_2$  τα ολοκληρώματα αλληλεπίδρασης ανταλλαγής για πρώτους και δεύτερους γείτονες αντίστοιχα.

Θεωρώντας όλα τα σπιν ισοδύναμα και ίσα με ένα μέσο σπιν με μικρή διακύμανση από την μέση τιμή του και αντικαθιστώντας και στα δυο αθροίσματα την σχέση αυτή 1.95 η χαμιλτονιανή προκύπτει

$$H = -J_1 \sum_{i,j} [(\vec{S}_i + \vec{S}_j) \langle \vec{S} \rangle - \langle \vec{S} \rangle^2] - J_2 \sum_{i,k} [(\vec{S}_i + \vec{S}_k) \langle \vec{S} \rangle - \langle \vec{S} \rangle^2] + \sum_i \vec{B} \vec{S}_i \quad (1.164)$$

Με αντίστοιχη ανάλυση των αθροισμάτων με αυτή που προηγήθηκε προκύπτει

$$-J_1 \sum_{i,j} [(\vec{S}_i + \vec{S}_j) \langle \vec{S} \rangle - \langle \vec{S} \rangle^2] = -\frac{Nq_1}{2} (J_1 \langle \vec{S} \rangle^2) + J_1 \langle \vec{S} \rangle q_1 \sum_i \vec{S}_i \quad (1.165)$$

και

$$-J_2 \sum_{i,k} [(\vec{S}_i + \vec{S}_k) \langle \vec{S} \rangle - \langle \vec{S} \rangle^2] = -\frac{Nq_2}{2} (J_2 \langle \vec{S} \rangle^2) + J_2 \langle \vec{S} \rangle q_2 \sum_i \vec{S}_i \quad (1.166)$$

Αντικαθιστώντας τις 1.165 και 1.166 στην 1.164

$$H = -N \frac{(J_1 q_1 + J_2 q_2)}{2} (\langle \vec{S} \rangle^2) + (J_1 q_1 + J_2 q_2) \langle \vec{S} \rangle \sum_i \vec{S}_i + \sum_i \vec{B} \vec{S}_i \quad (1.167)$$

ή αλλιώς

$$H = -N \frac{(J_1 q_1 + J_2 q_2)}{2} (\langle \vec{S} \rangle^2) + \sum_i B_{eff}^{\vec{S}} \vec{S}_i \quad (1.168)$$

για  $B_{eff}^{\vec{S}} = B + (J_1 q_1 + J_2 q_2) \langle \vec{S} \rangle$ . Επομένως η χαμιλτονιανή έχει την ίδια μορφή με εκείνη για την αλληλεπίδραση πρώτων γειτόνων μόνο που αντί για  $J_1 q_1 \rightarrow J_1 q_1 + J_2 q_2$ . Αντίστοιχα για τρίτους γείτονες θα είναι

$$H = -N \frac{(J_1 q_1 + J_2 q_2 + J_3 q_3)}{2} (\langle \vec{S} \rangle^2) + \sum_i B_{eff}^{\vec{S}} \vec{S}_i \quad (1.169)$$

για  $B_{eff}^{\vec{S}} = B + (J_1 q_1 + J_2 q_2 + J_3 q_3) \langle \vec{S} \rangle$ . Και για τέταρτους γείτονες

$$H = -N \frac{(J_1 q_1 + J_2 q_2 + J_3 q_3 + J_4 q_4)}{2} (\langle \vec{S} \rangle^2) + \sum_i B_{eff}^{\vec{S}} \vec{S}_i \quad (1.170)$$



για  $B_{eff}^{\vec{}} = B + (J_1q_1 + J_2q_2 + J_3q_3 + J_4q_4)\langle\vec{S}\rangle$

Επομένως η ανάλυση είναι αντίστοιχη με αυτή που έχει προηγηθεί και οι συναρτήσεις επιμερισμού είναι

$$Z = \begin{cases} [4\pi]^N e^{-\frac{J_1q_1 + J_2q_2}{2}\beta N\langle\vec{S}\rangle^2} \frac{[\sinh \beta B_{eff} S]^N}{[\beta B_{eff} S]^N}, \text{ για δεύτερους γείτονες} \\ [4\pi]^N e^{-\frac{(J_1q_1 + J_2q_2 + J_3q_3)}{2}\beta N\langle\vec{S}\rangle^2} \frac{[\sinh \beta B_{eff} S]^N}{[\beta B_{eff} S]^N}, \text{ για τρίτους γείτονες} \\ [4\pi]^N e^{-\frac{(J_1q_1 + J_2q_2 + J_3q_3 + J_4q_4)}{2}\beta N\langle\vec{S}\rangle^2} \frac{[\sinh \beta B_{eff} S]^N}{[\beta B_{eff} S]^N}, \text{ για τέταρτους γείτονες} \end{cases} \quad (1.171)$$

Οι αυτοσυνεπείς εξισώσεις για την μαγνήτιση προκύπτουν

$$\sigma = \begin{cases} S(\coth x - 1/x), \text{ για δεύτερους } x = \beta((q_1J_1 + q_2J_2)\sigma + B)S \\ S(\coth x - 1/x), \text{ για τρίτους } x = \beta((J_1q_1 + J_2q_2 + J_3q_3)\sigma + B)S \\ S(\coth x - 1/x), \text{ για τέταρτους } x = \beta((J_1q_1 + J_2q_2 + J_3q_3 + J_4q_4)\sigma + B)S \end{cases} \quad (1.172)$$

Οι κρίσιμες θερμοκρασίες προκύπτουν

$$T_c = \begin{cases} \frac{(q_1J_1 + q_2J_2)S^2}{3k_B}, \text{ για δεύτερους γείτονες} \\ \frac{(q_1J_1 + q_2J_2 + J_3q_3)S^2}{3k_B}, \text{ για τρίτους γείτονες} \\ \frac{(q_1J_1 + q_2J_2 + J_3q_3 + J_4q_4)S^2}{3k_B}, \text{ για τέταρτους γείτονες} \end{cases} \quad (1.173)$$

Οι μαγνητικές επιδεκτικότητες

$$\chi/N = \begin{cases} \frac{\frac{S^2}{k_B T} \left(-\frac{1}{\sinh^2(x)} + \frac{1}{x^2}\right)}{\left(1 - \frac{S^2(J_1q_1 + J_2q_2)}{k_B T} \left(-\frac{1}{\sinh^2(x)} + \frac{1}{x^2}\right)\right)}, \text{ για δεύτερους γείτονες} \\ \frac{\frac{S^2}{k_B T} \left(-\frac{1}{\sinh^2(x)} + \frac{1}{x^2}\right)}{\left(1 - \frac{S^2(J_1q_1 + J_2q_2 + J_3q_3)}{k_B T} \left(-\frac{1}{\sinh^2(x)} + \frac{1}{x^2}\right)\right)}, \text{ για τρίτους γείτονες} \\ \frac{\frac{S^2}{k_B T} \left(-\frac{1}{\sinh^2(x)} + \frac{1}{x^2}\right)}{\left(1 - \frac{S^2(J_1q_1 + J_2q_2 + J_3q_3 + J_4q_4)}{k_B T} \left(-\frac{1}{\sinh^2(x)} + \frac{1}{x^2}\right)\right)}, \text{ για τέταρτους γείτονες} \end{cases} \quad (1.174)$$

με  $x = \beta((J_1q_1 + J_2q_2)\sigma + B)S$  για δευτέρους,  $x = \beta((J_1q_1 + J_2q_2 + J_3q_3)\sigma + B)S$  για τρίτους και  $x = \beta((J_1q_1 + J_2q_2 + J_3q_3 + J_4q_4)\sigma + B)S$  για τέταρτους γείτονες. Οι μέσες ενέργειες ανά σπιν

$$\frac{\langle E \rangle}{N} = \begin{cases} -\frac{(q_1J_1 + q_2J_2)}{2}\sigma^2, \text{ για δευτέρους γείτονες} \\ -\frac{(q_1J_1 + q_2J_2 + J_3q_3)}{2}\sigma^2, \text{ για τρίτους γείτονες} \\ -\frac{(q_1J_1 + q_2J_2 + J_3q_3 + J_4q_4)}{2}\sigma^2, \text{ για τέταρτους γείτονες} \end{cases} \quad (1.175)$$

Οι ειδικές θερμότητες ανά σπιν προκύπτουν

$$\frac{C}{N} = \begin{cases} \frac{k_Bx^2\left(-\frac{1}{\sinh^2(x)} + \frac{1}{x^2}\right)}{\left(1 - \frac{S^2(q_1J_1 + q_2J_2)}{k_B T}\left(-\frac{1}{\sinh^2(x)} + \frac{1}{x^2}\right)\right)}, \text{ για δευτέρους γείτονες} \\ \frac{k_Bx^2\left(-\frac{1}{\sinh^2(x)} + \frac{1}{x^2}\right)}{\left(1 - \frac{S^2(q_1J_1 + q_2J_2 + J_3q_3)}{k_B T}\left(-\frac{1}{\sinh^2(x)} + \frac{1}{x^2}\right)\right)}, \text{ για τρίτους γείτονες} \\ \frac{k_Bx^2\left(-\frac{1}{\sinh^2(x)} + \frac{1}{x^2}\right)}{\left(1 - \frac{S^2(q_1J_1 + q_2J_2 + J_3q_3 + J_4q_4)}{k_B T}\left(-\frac{1}{\sinh^2(x)} + \frac{1}{x^2}\right)\right)}, \text{ για τέταρτους γείτονες} \end{cases} \quad (1.176)$$

με  $x = \beta((J_1q_1 + J_2q_2)\sigma + B)S$  για δευτέρους,  $x = \beta((J_1q_1 + J_2q_2 + J_3q_3)\sigma + B)S$  για τρίτους και  $x = \beta((J_1q_1 + J_2q_2 + J_3q_3 + J_4q_4)\sigma + B)S$  για τέταρτους γείτονες.

Οι κρίσιμοι εκθέτες προκύπτουν οι ίδιοι με αυτούς για την περίπτωση των πρώτων γειτόνων

$\alpha$	$\beta$	$\gamma$	$\delta$
0	1/2	1	3

Οι κρίσιμες θερμοκρασίες για  $k_B = 1$ ,  $J_1 = 1$  στο πλέγμα fcc όπου οι αριθμοί σύναξης είναι  $q_1 = 12$ ,  $q_2 = 6$ ,  $q_3 = 24$  και  $q_4 = 12$  και στις περιπτώσεις που πέφτει σαν  $1/r$  ( $J_2 = \frac{\sqrt{2}}{2}$ ,  $J_3 = \frac{\sqrt{3}}{3}$  και  $J_4 = \frac{\sqrt{4}}{4}$ ) και σαν  $1/r^2$  ( $J_2 = 1/2$ ,  $J_3 = 1/3$  και  $J_4 = 1/4$ ).

Οι κρίσιμες θερμοκρασίες στην περίπτωση που το  $J$  πέφτει σαν  $1/r^2$

πρώτοι γείτονες	δευτεροί γείτονες	τρίτοι γείτονες	τέταρτοι γείτονες
4 J/k <sub>B</sub>	5 J/k <sub>B</sub>	7.666 J/k <sub>B</sub>	8.666 J/k <sub>B</sub>

Οι κρίσιμες θερμοκρασίες στην περίπτωση που το  $J$  πέφτει σαν  $1/r$

πρώτοι γείτονες	δεύτεροι γείτονες	τρίτοι γείτονες	τέταρτοι γείτονες
4 J/k <sub>B</sub>	5.414 J/k <sub>B</sub>	10.033 J/k <sub>B</sub>	12.033 J/k <sub>B</sub>

Τόσο οι κρίσιμοι εκθέτες όσο και κρίσιμες θερμοκρασίες είναι σχετικά διαφορετικές σε σχέση με αυτά που προβλέπει η θεωρία μέσου πεδίου για τον σιδηρομαγνήτη Heisenberg λόγω του γεγονότος ότι στη θεωρία μέσου πεδίου σε 3 διαστάσεις έχει θεωρηθεί ότι οι διακυμάνσεις γύρω από το μέσο σπιν είναι μικρές.

Συγκεκριμένα η θεωρία μέσου πεδίου και το να θεωρηθούν οι διακυμάνσεις αμελητέες ευσταθεί για διαστάση  $d > 4$  (upper critical dimension). Η ελεύθερη ενέργεια μιας διακύμανσης είναι της τάξης  $k_B T$  ενώ το τυπικό μήκος εμβέλειας είναι  $\xi$  και ελεύθερη της ενέργεια θα είναι  $\xi^d$  όπου  $d$  οι διαστάσεις. Έτσι η συνεισφορά μιας διακύμανσης στην πυκνότητα ελεύθερης ενέργειας είναι  $f \approx \frac{k_B T}{\xi^d} \approx |t|^{d\nu}$  εφόσον  $\xi = |t|^{-\nu}$ . Επίσης αν ολοκληρωθεί δύο φορές η ειδική θερμότητα, για την οποία  $|t|^{-\alpha}$ , θα προκύπτει η πυκνότητα ενέργειας. Έτσι έπειτα από διπλή ολοκλήρωση για την πυκνότητα ενέργειας θα υπάρχει εξάρτηση  $|t|^{2-\alpha}$ . Επομένως για να θεωρηθεί αμελητέα η ελεύθερη ενέργεια των διακυμάνσεων ( $|t|^{d\nu}$ ) θα πρέπει να είναι σημαντικά μικρότερη της ελεύθερης ενέργειας ( $|t|^{2-\alpha}$ ). Έτσι θα πρέπει να ισχύει

$$d\nu > -2 + \alpha \quad (1.177)$$

εφόσον  $\alpha = 1$  και  $\nu = 1/2$

$$d > 4 \quad (1.178)$$

Επομένως η θεωρία μέσου πεδίου μπορεί να θεωρηθεί έγκυρη για διαστάσεις παραπάνω από 4 όπου οι διακυμάνσεις δικαίως θεωρούνται αμελητέες. Συνεπώς όσο περισσότερους γείτονες και όσο πιο πολλές διαστάσεις εισάγουμε τόσο πιο πολύ περιορίζονται οι διακυμάνσεις και άρα αυξάνεται η εγκυρότητα της θεωρίας μέσου πεδίου.

# Κεφάλαιο 2

## ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΕΙΣ Monte Carlo ΚΑΙ Ο ΑΛΓΟΡΙΘΜΟΣ Metropolis

### 2.1 Αρχές προσομοίωσης Monte Carlo

Ο υπολογισμός των μεγεθών στην στατιστική μηχανική είναι ένα βασικό πρόβλημα. Αυτό διότι τα συστήματα των υλικών που αντιμετωπίζονται μικροσκοπικά αποτελούνται από πολλούς δομικούς λίθους με αποτέλεσμα να μην μπορούν να λυθούν ακριβώς μαθηματικά.

Υποθέτοντας πως έχουμε μια μικροκατάσταση  $\mu$  του συστήματος. Η πιθανότητα μετάβασης από μια κατάσταση  $\mu$  σε μια κατάσταση  $\nu$  σε χρόνο  $dt$  είναι  $R(\mu \rightarrow \nu)dt$ . Και όπου  $R(\mu \rightarrow \nu)$  ο ρυθμός μετάβασης που είναι χρονοεξαρτώμενος γενικά. Αυτός ο ρυθμός μπορεί να προσδιοριστεί για κάθε πιθανή μικροκατάσταση  $\nu$ . Αν γνωρίζουμε ότι είμαστε σε μια αρχική κατάσταση  $\mu$  είναι θέμα χρόνου να έχει πιθανότητα μεταβεί σε οποιαδήποτε πιθανή κατάσταση. Οποιαδήποτε κατάσταση λοιπόν του συστήματος είναι προσβάσιμη από οποιαδήποτε άλλη εάν περάσει αρκετός χρόνος. Αυτό ονομάζεται συνθήκη εργοδικότητας.

Οι διαδικασίες μετάβασης από μια μικροκατάσταση σε μια άλλη ονομάζονται διαδικασίες Markov και εκτός από την εργοδικότητα πρέπει οι πιθανότητες μετάβασης να μην εξαρτώνται από τον χρόνο και να ισχύει ότι

$$\sum_{\nu} P(\mu \rightarrow \nu) = 1 \quad (2.1)$$

ώστε από μια αρχική να παράγεται πάντα μια τελική κατάσταση.

Αν θεωρήσουμε συναρτήσεις βάρους να βρίσκεται το σύστημα σε κατάσταση  $\mu$  σε χρόνο  $t$  την  $\omega_{\mu}(t)$  η εξέλιξή της θα δίνεται από την εξίσωση

$$\frac{d\omega_{\mu}}{dt} = \sum_{\nu} [\omega_{\nu}(t)R(\mu \rightarrow \nu) - \omega_{\mu}(t)R(\nu \rightarrow \mu)] \quad (2.2)$$

Δεδομένου ότι το σύστημα θα πρέπει να βρίσκεται σε κάποια κατάσταση για τις πιθανότητες  $\omega_{\mu}(t)$  ισχύει

$$\sum_{\mu} \omega_{\mu}(t) = 1 \quad (2.3)$$

Έστω λοιπόν πως έχουμε μια μακροσκοπική ποσότητα που θέλουμε να υπολογίσουμε και η οποία παίρνει την τιμή  $Q_\mu$  στην κατάσταση  $\mu$ . Η αναμενόμενη τιμή/εκτιμητής (estimator) για αυτή την ποσότητα είναι

$$\langle Q \rangle = \sum_{\mu} Q_{\mu} \omega_{\mu}(t) \quad (2.4)$$

Ένας τρόπος να εκτιμήσουμε την τιμή είναι να θεωρήσουμε την αναμενόμενη τιμή χρονική μέση τιμή των ποσοτήτων  $Q$ . Να καταγράφουμε την τιμή του  $Q$  δηλαδή κάθε ένα χρονικό βήμα για πολλά βήματα και στο τέλος να παίρνουμε την μέση τιμή αυτών των τιμών. Αν το σύστημα σε αυτό το χρονικό διάστημα των βημάτων καταφέρνει να περάσει από μια αντιπροσωπευτική επιλογή καταστάσεων τότε η εκτιμώμενη μέση τιμή θα πρέπει να πλησιάζει την πειραματική τιμή του μεγέθους. Για να είναι αντιπροσωπευτική αυτή η επιλογή των καταστάσεων πρέπει να δοθεί προσοχή σε δύο πράγματα. Πρώτον αν το σύστημα αλλάζει γρήγορα ή όχι καταστάσεις έτσι ώστε να επιλεχθεί το σωστό χρονικό βήμα. Δεύτερον αν οι ποσότητες  $\omega_{\mu}(t)$  που είναι χρονοεξαρτώμενες αλλάζουν κατά την χρονική διάρκεια που χρησιμοποιούμε.

Αν το σύστημα βρίσκεται σε κατάσταση ισορροπίας οι συναρτήσεις βάρους δεν μεταβάλλονται με τον χρόνο οπότε δεν υπάρχει το δεύτερο πρόβλημα. Άρα οι συναρτήσεις βάρους ισορροπίας δεν είναι χρονοεξαρτώμενες. Όλα τα συστήματα μετά από κάποιο χρόνο έρχονται σε κατάσταση ισορροπίας. Κοιτάζοντας την σχέση 2.2 φαίνεται πως εάν οι δύο όροι του δεύτερου μέλους για να συμβαίνει αυτό αλληλοαναιρούνται η χρονική παράγωγος μηδενίζεται.

$$\sum_{\nu} [\omega_{\nu}(t) R(\mu \rightarrow \nu) - \omega_{\mu}(t) R(\nu \rightarrow \mu)] = 0 \quad (2.5)$$

Γνωρίζουμε πως οι τιμές στην κατάσταση ισορροπίας των συναρτήσεων βάρους είναι

$$p_{\mu} = \lim_{t \rightarrow \infty} \omega_{\mu}(t) \quad (2.6)$$

και ονομάζονται πιθανότητες κατάληψης ισορροπίας (equilibrium occupation probabilities).

$$\sum_{\nu} [p_{\nu} R(\mu \rightarrow \nu) = \sum_{\nu} p_{\mu} R(\nu \rightarrow \mu)] \quad (2.7)$$

Οι ρυθμοί μετάβασης μπορούν να αντικατασταθούν από τις πιθανότητες μετάβασης

$$\sum_{\nu} [p_{\nu} P(\mu \rightarrow \nu) = \sum_{\nu} p_{\mu} P(\nu \rightarrow \mu)] \quad (2.8)$$

Μια λύση των παραπάνω είναι αυτή του λεπτομερούς ισοζυγίου [30]

$$[p_{\nu} P(\mu \rightarrow \nu) = p_{\mu} P(\nu \rightarrow \mu)] \quad (2.9)$$

Οι ρυθμοί μετάβασης παίρνουν συγκεκριμένες τιμές αναλόγως με το την αλληλεπίδραση του συστήματος μας με την δεξαμενή θερμότητας με την οποία θεωρούμε πως αλληλεπιδρά (σύνολο φασικού χώρου, κανονική συλλογή). Για το σύστημα που αλληλεπιδρά με δεξαμενή θερμότητας οι πιθανότητες αυτές όπως έδειξε το Gibbs το 1902 είναι

$$p_{\mu} = \frac{1}{Z} e^{\frac{-E_{\mu}}{k_B T}} = \frac{1}{Z} e^{-\beta E_{\mu}} \quad (2.10)$$

όπου  $Z = \sum_{\mu} e^{-\beta E_{\mu}}$  η συνάρτηση επιμερισμού και  $E_{\mu}$  η ενέργεια της μικροκατάστασης  $\mu$  και  $k_B$  η σταθερά Boltzman.

Αν η επιθυμητή κατάσταση ισορροπίας είναι η κατανομή Boltzman τότε ο λόγος των πιθανοτήτων του λεπτομερούς ισοζυγίου είναι

$$\frac{P(\mu \rightarrow \nu)}{P(\nu \rightarrow \mu)} = e^{-\beta(E_{\nu} - E_{\mu})} \quad (2.11)$$

που όπως φαίνεται ο λόγος των πιθανοτήτων μετάβασης εξαρτάται μόνο από την ενεργειακή διαφορά των καταστάσεων.

Ουσιαστικά έχοντας ένα επιθυμητό σύνολο από πιθανότητες μετάβασης  $P(\mu \rightarrow \nu)$  οι οποίες ικανοποιούν τις σχέσεις 2.1 και 2.11 απλά δημιουργούμε διαδικασίες Markov οι οποίες παράγουν καταστάσεις με αυτές τις πιθανότητες μετάβασης και έτσι έχουμε παράγει της καταστάσεις του συστήματος μας με τις σωστές πιθανότητες Boltzman. Κάθε φορά που θέλουμε έναν αλγόριθμο με τις κατάλληλες διαδικασίες Markov για να ελέγξουμε εάν οι διαδικασίες αυτές δίνουν το επιθυμητό σύνολο πιθανοτήτων μετάβασης εισάγουμε την έννοια του λόγου αποδοχής.

Η σχέση 2.11 εάν  $\nu = \mu$  είναι ταυτολογία. Άρα αν το σύστημα παραμένει στην ίδια κατάσταση, η πιθανότητα να συμβαίνει αυτό μπορεί να επιλεγεί με μια σχετική ελευθερία, καθώς έτσι κι αλλιώς η σχέση 2.11 θα ικανοποιείται. Επομένως αυτό δίνει και ευελιξία στην επιλογή των πιθανοτήτων για  $\nu \neq \mu$ . Μπορούμε να προσαρμόσουμε κάθε πιθανότητα μετάβασης  $P(\mu \rightarrow \nu)$  κρατώντας σταθερό το άθροισμα της σχέσης 2.1 κάνοντας της αντίστροφη αλλαγή στην πιθανότητα μετάβασης  $P(\mu \rightarrow \mu)$ . Αρκεί μόνο η πιθανότητα  $P(\mu \rightarrow \mu)$  να παραμείνει από 0 έως 1. Αν αλλάξει η πιθανότητα  $P(\mu \rightarrow \nu)$  θα πρέπει να αλλάξει και η  $P(\nu \rightarrow \mu)$  ώστε να ικανοποιείται η 2.11.

Ας χωρίσουμε την πιθανότητα μετάβασης  $P(\mu \rightarrow \nu)$  σε δύο μέρη.

$$P(\mu \rightarrow \nu) = g(\mu \rightarrow \nu)A(\mu \rightarrow \nu) \quad (2.12)$$

Το πρώτο μέρος  $g(\mu \rightarrow \nu)$  είναι η πιθανότητα ο αλγόριθμος από μια κατάσταση  $\mu$  να παράξει μια κατάσταση  $\nu$ . Ενώ το δεύτερο μέρος  $A(\mu \rightarrow \nu)$  είναι η πιθανότητα αυτή η κατάσταση να γίνει αποδεκτή. Ουσιαστικά δεχόμαστε το σύστημα να αλλάξει κατάσταση για ένα μέρος του χρόνου και τον υπόλοιπο χρόνο το σύστημα θεωρούμε πως δεν αλλάζει κατάσταση. Η πιθανότητα αποδοχής ή αλλιώς λόγος αποδοχής πρέπει να κυμαίνεται από 0 έως 1. Στην οριακή περίπτωση που είναι μηδέν το σύστημα δεν αλλάζει κατάσταση καθόλου ενώ όσο μεγαλώνει πλησιάζοντας στο 1 τόσο πιο πιθανό είναι να αλλάξει κατάσταση. Στην πραγματικότητα για μην σπαταλάμε χρόνο προτιμούμε να είναι σχετικά μεγάλη η πιθανότητα αποδοχής, δηλαδή σχετικά κοντά στη μονάδα. Έτσι το σύστημα δεν θα εγκλωβίζεται σε επιλεκτικά σε μικροκαταστάσεις και οι παραγόμενες καταστάσεις θα καλύπτουν μεγαλύτερο μέρος του φασικού χώρου χωρίς να χρειαστεί μεγάλος υπολογιστικός χρόνος. Εφόσον αυτό που μας ενδιαφέρει είναι ο λόγος  $\frac{A(\mu \rightarrow \nu)}{A(\nu \rightarrow \mu)}$  μπορούμε για να μεγαλώσουμε τις πιθανότητες αποδοχής πολλαπλασιάζοντας και τις δύο πιθανότητες με τον ίδιο παράγοντα για να τις μεγαλώσουμε διατηρώντας τον λόγο τους σταθερό. Ένας ιδανικός αλγόριθμος θα έδινε ακριβώς τις σωστές πιθανότητες μετάβασης στις νέες καταστάσεις σε όλο τον χρόνο και η πιθανότητα αποδοχής θα ήταν πάντα μονάδα. Βέβαια κανένας αλγόριθμος δεν μπορεί να είναι ιδανικός.

Επειδή

$$\frac{P(\mu \rightarrow \nu)}{P(\nu \rightarrow \mu)} = \frac{g(\mu \rightarrow \nu)A(\mu \rightarrow \nu)}{g(\nu \rightarrow \mu)A(\nu \rightarrow \mu)} \quad (2.13)$$

Ο λόγος  $\frac{A(\mu \rightarrow \nu)}{A(\nu \rightarrow \mu)}$  μπορεί να πάρει οποιεσδήποτε τιμές από 0 έως άπειρο. Που σημαίνει πως και οι  $g(\nu \rightarrow \mu)$  και  $g(\mu \rightarrow \nu)$  έχουν μια σχετική ελευθερία πεδίου τιμών.

Οπότε δημιουργώντας έναν αλγόριθμο Monte Carlo σκεφτόμαστε έναν αλγόριθμο που από παλιές καταστάσεις  $\mu$  να γεννά τυχαίες νέες καταστάσεις  $\nu$  με πιθανότητες  $g(\mu \rightarrow \nu)$  ικανοποιώντας την συνθήκη εργοδικότητας. Και αναλόγως με τον λόγο αποδοχής  $A(\mu \rightarrow \nu)$  να δεχόμαστε ή όχι την μετάβαση. Αν γίνεται αποδεκτή το σύστημα μεταβαίνει στην νέα κατάσταση  $\nu$  ενώ εάν όχι παραμένει στην προηγούμενη  $\mu$ . Και αυτό επαναλαμβάνεται συνεχώς. Εφόσον ικανοποιούνται, λοιπόν, οι προϋποθέσεις (2.1, 2.11) παράγουμε καταστάσεις οι οποίες όταν φτάνουν στην ισορροπία εμφανίζονται με την σωστή πιθανότητα Boltzman.

## 2.2 Ο αλγόριθμος Metropolis

Ο πιο γνωστό αλγόριθμος που χρησιμοποιήθηκε για πρώτη φορά το 1953 από τον Nikolas Metropolis και τους συνεργάτες του [37] είναι ο λεγόμενος αλγόριθμος Metropolis.

Οι πιθανότητες  $g(\mu \rightarrow \nu)$  για όλες τις καταστάσεις  $\nu$  είναι ίσες. Αν οι νέες διαθέσιμες καταστάσεις είναι  $N$  τότε η πιθανότητες είναι

$$g(\mu \rightarrow \nu) = \frac{1}{N} \quad (2.14)$$

Επομένως αντικαθιστώντας αυτό και συνδυάζοντας τις σχέσεις 2.11 , 2.13

$$\frac{NA(\mu \rightarrow \nu)}{NA(\nu \rightarrow \mu)} = \frac{A(\mu \rightarrow \nu)}{A(\nu \rightarrow \mu)} = e^{-\beta(E_\nu - E_\mu)} \quad (2.15)$$

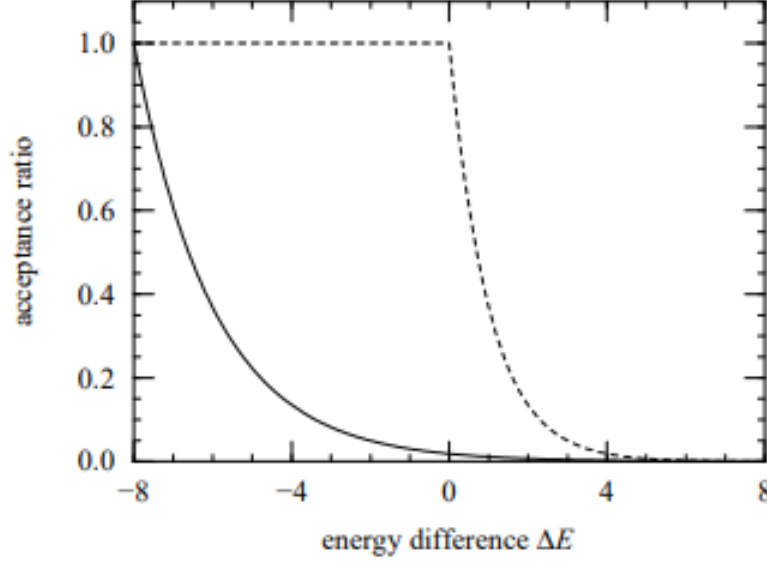
Ο λόγος αποδοχής είναι τέτοιος ώστε να επιτρέπει την μετάβαση εάν η νέα κατάσταση είναι μικρότερη ενεργειακά αλλιώς η πιθανότητα αποδοχής πέφτει εκθετικά όσο μεγαλώνει η ενεργειακή διαφορά. Πράγμα που σημαίνει πως αν η νέα κατάσταση έχει σημαντικά μεγαλύτερη ενέργεια από την αρχική την απορρίπτει.

$$A(\mu \rightarrow \nu) = \begin{cases} e^{-\beta(E_\nu - E_\mu)}, & E_\nu > E_\mu \\ 1, & \text{αλλιώς} \end{cases} \quad (2.16)$$

αυτό ονομάζεται κριτήριο Metropolis και όλοι οι αλγόριθμοι με αυτό τον λόγο αποδοχής ονομάζονται αλγόριθμοι τύπου Metropolis.

Όπως φαίνεται στο παραπάνω σχήμα στην περίπτωση του αλγορίθμου Metropolis δεχόμαστε αρκετές μεταβάσεις ενώ στην περίπτωση του άλλου αλγορίθμου παρόλο που και με αυτόν προσομοιώνουμε την κατανομή Boltzman απορρίπτουμε μεγάλο πλήθος μεταβάσεων.

Αυτό εξηγεί γιατί ο αλγόριθμος αυτός είναι διάσημος. Καθώς έχει λόγο αποδοχής τέτοιο ώστε να μην χρειάζεται απορρίπτεται μεγάλο πλήθος μεταβάσεων. Έτσι χρησιμοποιείται ευρέως για την επίλυση πολλών προβλημάτων με προσομοίωση Monte Carlo.



Σχήμα 2.1: Ο λόγος αποδοχής σαν συνάρτηση της ενεργειακής διαφοράς δύο καταστάσεων στην περίπτωση αλγορίθμου Metropolis 2.16 (διεκεκομμένη γραμμή) και στην περίπτωση διαφορετικού τύπου αλγορίθμου με λόγο αποδοχής  $A(\mu \rightarrow \nu) = A_0 e^{-\frac{1}{2}\beta(E_\nu - E_\mu)}$  (συνεχής γραμμή) [38].

## 2.3 Ο αλγόριθμος Metropolis στο τριδιάστατο κλασικό πρότυπο Heissenberg

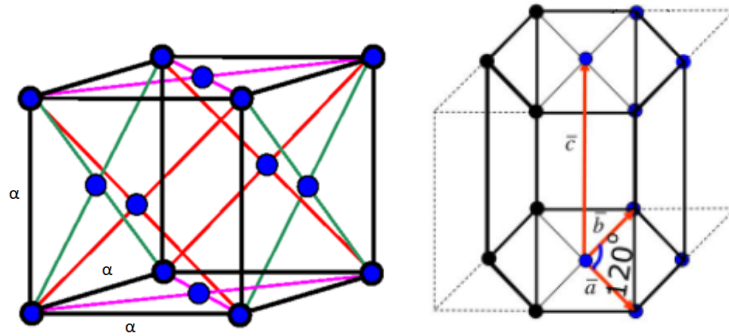
Έστω ότι έχουμε ένα μαγνητικό σύστημα αποτελείται από  $N$  πλεγματικά σημεία. Αν το σύστημα αυτό βρίσκεται μέσα σε υπερκύβο διάστασης  $L'$  ο όγκος του είναι  $V = L'^3$ . Η γραμμική διάσταση  $L'$  είναι αδιάσταση αφορά τον αριθμό των μοναδιαίων κυψελίδων που περιλαμβάνει ο υπερκύβος επί της διάστασης αυτής. Στην περίπτωση του πλέγματος fcc σε κύβο διάστασης  $L'$  (συμβατική κυψελίδα) περιέχονται 4 μοναδιαίες κυψελίδες διάστασης  $L$  ενώ στην περίπτωση του πλέγματος hcp κάθε συμβατική κυψελίδα (δύο εξάγωνα που συνδέονται με έξι ορθογώνια παραλληλόγραμμα) διαστάσεων  $axbxc$  περιέχει 3 μοναδιαίες κυψελίδες.

Παίρνοντας τα θεμελιώδη ανύσματα για το κάθε πλέγμα κατασκευάστηκε ένα τριδιάστατο κουτί που αποτελούνται από πλήθος συμβατικών κυψελίδων. Τα θεμελιώδη ανύσματα για τα πλέγματα fcc και hcp είναι

$$fcc = \begin{cases} \vec{\alpha}_1 = \frac{a}{2}(0, 1, 1) \\ \vec{\alpha}_2 = \frac{a}{2}(1, 0, 1) \\ \vec{\alpha}_3 = \frac{a}{2}(1, 1, 0) \end{cases} \quad (2.17)$$

$$hcp = \begin{cases} \vec{\alpha}_1 = \frac{a}{2}(\sqrt{3}, -1, 0) \\ \vec{\alpha}_2 = \frac{a}{2}(\sqrt{3}, 1, 0) \\ \vec{\alpha}_3 = c(0, 0, 1) = \sqrt{\frac{8}{3}}a(0, 0, 1) \end{cases} \quad (2.18)$$





Σχήμα 2.2: Η συμβατική κυψελίδα πλέγματος *fcc* [39] με όγκο  $V = L^3 = 4L^3$  και η συμβατική κυψελίδα πλέγματος *hcp* με όγκο  $V = 3\frac{a^2c\sqrt{3}}{2}$  καθώς και το εξωτερικό παραλληλεπίπεδο κουτί με όγκο  $V = 4\frac{a^2c\sqrt{3}}{2}$ .

και με αυτά κατασκευάζουμε τις διαθέσιμες πλεγματικές θέσεις.

Έπειτα αφού κατασκευάστηκαν οι διαθέσιμες πλεγματικές θέσεις μέσα σε έναν υπερκύβο (*fcc*) ή σε ένα μεγάλο παραλληλεπίπεδο κουτί (*hcp*), που περιέρχουν ένα πλήθος μοναδιαίων κυψελίδων το οποίο μπορούμε να το αλλάζουμε κάθε φορά αλλάζοντας έτσι και το μέγεθος του μελετούμενου συστήματος, μέσα τους καταθέτουμε τυχαία τις μαγνητικές προσμίξεις *dopants* ή αλλιώς τα *spin*. Μπορούμε αν θέλουμε ένα πλήρως μαγνητισμένο σύστημα να βάλουμε τόσες προσμίξεις όσες και οι πλεγματικές θέσεις ή αν το θέλουμε αραιό να βάλουμε λιγότερες.

Αρχικά το σύστημα μας πρέπει να βρίσκεται σε μια κατάσταση. Αυτή μπορεί να είναι για  $T = 0$  K όπου τα *spin* βρίσκονται πλήρη τάξη στην θεμελιώδη κατάσταση ή για  $T = \infty$  όπου έχουμε πλήρη αταξία.

Επειδή δεν μελετάμε επιφανειακά φαινόμενα πρέπει να εισαχθούν περιοδικές συνοριακές συνθήκες. Έτσι κάθε *spin* έχει ίδια τοπική συμμετρία και ίδιο αριθμό γειτόνων και επομένως όλα τα *spin* είναι ισοδύναμα.

Αρχικά επιλέγουμε σαν αρχική κατάσταση όλα τα *spin* για κάθε πλεγματικό σημείο  $i$  να είναι προσανατολισμένα στον άξονα  $z$ . Δηλαδή  $S_x(i) = S_y(i) = 0$  και  $S_z(i) = S = 1$ . Υπολογίζουμε την μέση αρχική ενέργεια για να ελέγξουμε έπειτα το πρόγραμμα αν έχει σαρώσει όλα τα *spin*. Έπειτα επιλέγουμε δύο τυχαίους αριθμούς  $u, v$  από 0 έως 1 και υπολογίζουμε τα παρακάτω

$$S_z = S \cos \theta = S(2v - 1) \quad (2.19)$$

$$S_x = S \sin \theta \cos \phi = S\sqrt{1 - (2v - 1)^2}d \cos(2\pi u) \quad (2.20)$$

$$S_y = S \sin \theta \sin \phi = S\sqrt{1 - (2v - 1)^2}d \sin(2\pi u) \quad (2.21)$$

Όπως φαίνεται ο τυχαίος αριθμός  $u$  είναι αυτός που περιστρέφει την γωνία  $\phi$  από 0 έως  $2\pi$ . Ενώ ο τυχαίος αριθμός  $v$  είναι αυτός που περιστρέφει την γωνία  $\theta$  από 0 έως  $\pi$  ( $\cos \theta \in [-1, 1]$ ) έτσι ώστε  $2v - 1 = \cos \theta$ . Αφού λοιπόν μεταβάλλουμε την διεύθυνση των *spin* με τυχαίο τρόπο

υπολογίζουμε για κάθε βήμα την ενέργεια της νέας κατάστασης

$$E = -\frac{1}{2} \sum_{i_\mu}^N \sum_{j_\mu}^q J_{ij} (S_{i_\mu}^x S_{j_\mu}^x + S_{i_\mu}^y S_{j_\mu}^y + S_{i_\mu}^z S_{j_\mu}^z) \quad (2.22)$$

όπου τα  $j$  είναι οι γείτονες του  $i$  που έχουν ολοκλήρωμα ανταλλαγής  $J_{ij}$ . Στο πρόγραμμα μας για κάθε τάξη γειτόνων που λαμβάνουμε υπόψιν μας θεωρούμε σταθερά και γνωστά τα  $J$ .

Έπειτα καλούμε έναν καινούργιο τυχαίο αριθμό  $r$  και ελέγχουμε εάν  $E_2 < E_1$  ή εάν  $e^{-\beta(E_2 - E_1)} > r$  που αυτός είναι και ο λόγος αποδοχής του αλγορίθμου Metropolis 2.16. Αν η νέα κατάσταση με ενέργεια  $E_2$  ικανοποιεί τον λόγο αποδοχής τότε το σύστημα μεταβαίνει σε καινούργια κατάσταση αν όχι παραμένει στην κατάσταση με ενέργεια  $E_1$ .

Έτσι για κάθε βήμα υπολογίζονται η μέση ενέργεια και το μέσο σπιν και οι συνιστώσες του συστήματος για όλες τις καταστάσεις τις αλυσίδας Markov που έχουν γίνει αποδεκτές. Εάν τα βήματα μας είναι αρκετά ώστε το σύστημα να έχει φτάσει σε ισορροπία έχουμε κάνει μια καλή σάρωση των πιθανών καταστάσεων. Οι καταστάσεις ωστόσο που αφορούν χρόνο πριν την ισορροπία του συστήματος δε πρέπει να ληφθούν υπόψη στον υπολογισμό των θερμοδυναμικών μεγεθών και στον μέσο όρο τους.

Οι θερμοδυναμικές ποσότητες που εξάγονται από το πρόγραμμα είναι η μέση ενέργεια, η ειδική θερμότητα, το μέσο σπιν, το μέτρο της μαγνητικής επιδεκτικότητας, η μαγνητική επιδεκτικότητα σε κάθε άξονα και ο συσσωρευτής τέταρτης τάξης. Οι τύποι για τα παρακάτω μεγέθη είναι οι εξής: Η χρονοσειρά της ενέργειας για χρόνο μεγαλύτερο από τον χρόνο ισορροπίας προκύπτει

$$E_\mu = -\frac{1}{2} \sum_{i_\mu}^N \sum_{j_\mu}^q J_{ij} (S_{i_\mu}^x S_{j_\mu}^x + S_{i_\mu}^y S_{j_\mu}^y + S_{i_\mu}^z S_{j_\mu}^z) \quad (2.23)$$

Κάθε κατάσταση  $\mu$  αντιστοιχεί σε ένα βήμα της χρονοσειράς με συνολικά βήματα  $\mathcal{N}$ . Έτσι η μέση ενέργεια είναι

$$\langle E \rangle = \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{\mu=1}^{\mathcal{N}} E_\mu \quad (2.24)$$

και η μέση ενέργεια ανά σπιν

$$\langle \epsilon \rangle = \frac{\langle E \rangle}{N} = \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{\mu=1}^{\mathcal{N}} \frac{E_\mu}{N} \quad (2.25)$$

Η χρονοσειρά για το μέτρο της μαγνήτισης

$$M_\mu = \sqrt{(M_\mu^x)^2 + (M_\mu^y)^2 + (M_\mu^z)^2} \quad (2.26)$$

όπου

$$M_\mu^x = \sum_{i_\mu=1}^N S_{i_\mu}^x \quad (2.27)$$

$$M_\mu^y = \sum_{i_\mu=1}^N S_{i_\mu}^y \quad (2.28)$$

$$M_\mu^z = \sum_{i_\mu=1}^N S_{i_\mu}^z \quad (2.29)$$

Έτσι η μαγνήτιση προκύπτει

$$\langle M \rangle = \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{\mu=1}^{\mathcal{N}} M_\mu \quad (2.30)$$

και η μαγνήτιση ανά σπιν προκύπτει

$$\langle m \rangle = \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{\mu=1}^{\mathcal{N}} \frac{M_\mu}{N} \quad (2.31)$$

Αντίστοιχα υπολογίζονται και η ειδική θερμότητα ανά σπιν  $C/N = c$  και η μαγνητική επιδεκτικότητα ανά σπιν  $\chi$ .

$$C = k_B \beta^2 (\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2) \quad (2.32)$$

$$c = \frac{k_B \beta^2}{N} (\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2) \quad (2.33)$$

$$c = \frac{k_B \beta^2}{N} (N \langle \epsilon^2 \rangle - N^2 \langle \epsilon \rangle^2) \quad (2.34)$$

$$c = k_B \beta^2 (\langle \epsilon^2 \rangle - N \langle \epsilon \rangle^2) \quad (2.35)$$

Εφόσον  $k_B = 1$

$$c = \beta^2 (\langle \epsilon^2 \rangle - N \langle \epsilon \rangle^2) \quad (2.36)$$

Και

$$\chi_S = \beta N (\langle m^2 \rangle - \langle m \rangle^2) \quad (2.37)$$

$$\chi_{S_x} = \beta N (\langle m_x^2 \rangle - \langle m_x \rangle^2) \quad (2.38)$$

$$\chi_{S_y} = \beta N (\langle m_y^2 \rangle - \langle m_y \rangle^2) \quad (2.39)$$

$$\chi_{S_z} = \beta N (\langle m_z^2 \rangle - \langle m_z \rangle^2) \quad (2.40)$$

Τέλος υπολογίζεται και ο συσσωρευτής τέταρτης τάξης του Binder για την μαγνήτιση ανά σπιν

$$U_4 = 1 - \frac{\langle m^4 \rangle}{3 \langle m^2 \rangle^2} \quad (2.41)$$

## 2.4 Σφάλματα και διακυμάνσεις εκτιμώμενων θερμοδυναμικών μεγεθών

Θα πρέπει να σημειωθεί πως όλες οι εκτιμώμενες ποσότητες είναι αριθμοί που εμφανίζουν διακυμάνσεις γύρω από την θεωρητική τιμή. Εφόσον κάθε φορά για την εκτίμηση χρησιμοποιούνται οι καταστάσεις που συνεισφέρουν σημαντικά αυτό εισάγει σφάλματα στους υπολογισμούς. Για να εκτιμηθούν οι διακυμάνσεις αυτές θα έπρεπε να πραγματοποιηθεί η προσομοίωση πολλές φορές ωστόσο είναι πιο απλό να εκτιμηθούν από την διακύμανση της κατανομής των τιμών της εκτιμώμενης ποσότητας.

Έστω η ποσότητα

$$G_m(t) = \int dt' [m(t') - \langle m \rangle][m(t' + t) - \langle m \rangle] = \int dt' [m(t')m(t' + t) - \langle m \rangle^2] \quad (2.42)$$

Η οποία μας δείχνει την συσχέτιση μεταξύ δύο τιμών της μαγνήτισης σε δυο διαφορετικούς χρόνους  $t'$  και  $t' + t$ . Μπορούμε μετρήσουμε τις διαφορές τους από την μέση τιμή και να τις πολλαπλασιάσουμε. Ολοκληρώνοντας ως προς τον χρόνο έχουμε την συνάρτηση αυτοσυσχέτισης για την μαγνήτιση μεταξύ δύο χρονικών στιγμών. Αποδεικνύεται [38] πως η συνάρτηση αυτοσυσχέτισης πέφτει εκθετικά για μεγάλους χρόνους

$$G_m(t) \approx e^{-t/\tau} \quad (2.43)$$

Όπου  $\tau$  ο χρόνος στον οποίο η συνάρτηση αυτοσυσχέτισης έχει μειωθεί κατά  $1/e$  φορές σε σχέση με την αρχική μέγιστη τιμή της για  $t = 0$  που θεωρείται  $G_m(0) = 1$ . Γενικά έναν θέλουμε  $n$  ανεξάρτητες μετρήσεις πρέπει να περιμένουμε χρόνο  $t = \tau_{int}$  αν ένα βήμα διαρκεί  $t_{max}$ .

$$n = \frac{t_{max}}{2\tau_{int}} \quad (2.44)$$

Έτσι σε κάθε προσομοίωση Monte Carlo πρέπει να λαμβάνεται υπόψη, για κάθε εκτιμώμενο μέγεθος <sup>1</sup>, ο χρόνος αυτοσυσχέτισης. Επειδή ο υπολογισμός του χρόνου αυτοσυσχέτισης είναι απαιτητική αριθμητικά διαδικασία τουλάχιστον είναι σημαντικό να γίνεται εκτίμηση της τάξης μεγέθους του. Έτσι για  $\mathcal{N}$  πλήθος μετρήσεων μιας θερμοδυναμικής ποσότητας το πλήθος των στατιστικά ανεξάρτητων είναι  $n$

$$n = \frac{\mathcal{N}}{2\tau_{int}} \quad (2.45)$$

Έτσι η διακύμανση της τιμής ενός θερμοδυναμικού μεγέθους  $\bar{m}$  είναι

$$\sigma = \sqrt{\frac{\frac{1}{n} \sum_{i=0}^n (m_i - \bar{m})^2}{n-1}} \quad (2.46)$$

<sup>1</sup> Διαφορετικές θερμοδυναμικές ποσότητες  $Q$  μπορεί να έχουν διαφορετικούς χρόνους αυτοσυσχέτισης. Έτσι σε κάθε περίπτωση πρέπει να λαμβάνεται υπόψιν ο μεγαλύτερος.

Αν τα  $m_i$  είναι στατιστικά ανεξάρτητα τότε

$$\sigma = \sqrt{\frac{(\bar{m}^2 - (\bar{m})^2)}{n-1}} \quad (2.47)$$

Αποδεικνύεται ότι η σχέση είναι [40]

$$\sigma = \sqrt{\frac{1 + 2\tau_{int}/\Delta t (\bar{m}^2 - (\bar{m})^2)}{n-1}} \quad (2.48)$$

που ταυτίζεται με την προηγούμενη εάν  $\Delta t \gg \tau$  αλλά συνήθως ισχύει  $\Delta t \ll \tau$  οπότε εφόσον για χρόνο τρεξίματος  $t_{max}$  το  $\Delta t$  σχετίζεται με το πλήθος ανεξάρτητων τιμών του δείγματος

$$n = \frac{t_{max}}{\Delta t} \quad (2.49)$$

Για  $n$  μεγάλο προκύπτει

$$\sigma = \sqrt{\frac{2\tau_{int}(\bar{m}^2 - (\bar{m})^2)}{t_{max}}} \quad (2.50)$$

Έτσι προκύπτει

$$n = \frac{t_{max}}{\Delta t} = \frac{\mathcal{N}}{2\tau_{int}} \quad (2.51)$$

Επειδή ακριβώς οι συσχετίσεις δεν μπορούν εύκολα να εκτιμηθούν ποσοτικά στην βιβλιογραφία αναφέρονται διάφοροι μέθοδοι για τον υπολογισμό των σφαλμάτων με μεθόδους επαναδειγματοποίησης όπως οι μέθοδοι bootstrap και jackknife. Ωστόσο ο υπολογισμός των σφαλμάτων δεν υπήρξε ο χρόνος να ολοκληρωθεί στα πλαίσια αυτής της εργασίας.

Ο ολοκληρωμένος χρόνος αυτοσυσχέτισης είναι η ποσότητα

$$\tau_{int} = \frac{1}{2} + \sum_{t=1}^{\mathcal{N}} G_Q(t) \quad (2.52)$$

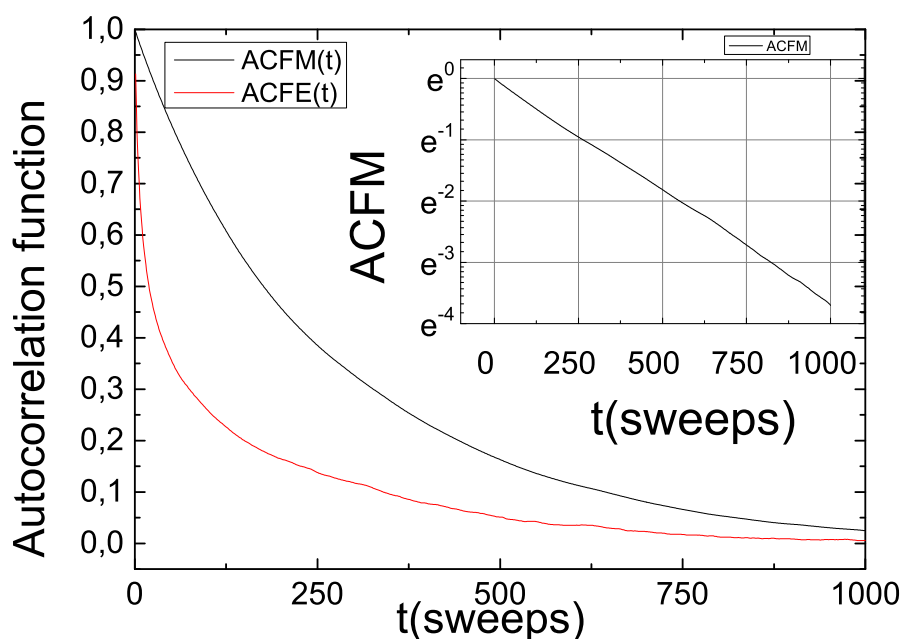
Και εκτιμάται η τάξη μεγέθους του στην εργασία αυτή από την αυτοσυνεπή σύγκλιση της επόμενης σχέσης

$$\tau_{int} \approx \frac{1}{2} + \sum_{t=1}^{6t_{int}} G_Q(t) \quad (2.53)$$

Επίσης παρουσιάζεται η συνάρτηση αποσυσχέτισης 2.42

$$G_Q(t) = \frac{\langle Q(0)Q(t) \rangle - \langle Q^2 \rangle}{\langle Q^2 \rangle - \langle Q \rangle^2} \quad (2.54)$$

Για την μαγνήτιση  $Q \equiv m$  και για την ενέργεια  $Q \equiv E$ . Όπως φαίνεται είναι διαφορετικός ο τρόπος που πέφτουν μετά από κάποια χρονικά βήματα η συνάρτηση αυτοσυσχέτισης και άρα η ποσοτικοποίηση των συσχετίσεων σχεδόν σταθεροποιούνται και γίνονται πολύ λιγότερες. Ο χρόνος



Σχήμα 2.3: Η συνάρτηση αυτοσυσχέτισης για συναρτήσεις των χρονικών βημάτων για την μαγνήτιση  $AFM$  και την ενέργεια  $ACFE$  για πλέγμα  $fcc$  γραμμικής διάστασης  $L = 16$  για θερμοκρασία  $T = 3.2$   $K$ .

$\tau$  που ουσιαστικά η συνάρτηση αυτοσυσχέτισης πέφτει κατά  $1/e$  που φαίνεται και προσεγγιστικά με το μάτι μας δείχνει ότι πρέπει να περιμένουμε  $2\tau = 500$  sweeps για να πάρουμε μια στατιστικά ανεξάρτητη τιμή για την μαγνήτιση και μικρότερο χρόνο για να πάρουμε μια στατιστικά ανεξάρτητη τιμή για την ενέργεια (εφόσον μας ενδιαφέρει ο μεγαλύτερος από του δύο χρόνους αυτοσυσχέτισης). Έτσι αν θέλουμε πχ 10 στατιστικά ανεξάρτητες τιμές θα πρέπει 10 φορές να περιμένουμε τα  $2\tau = 500$  sweeps άρα 500 sweeps για την μαγνήτιση. Άρα θα χρειαστούμε  $10 \times 500 = 5000$  sweeps να τρέξουμε το πρόγραμμα έπειτα από την ισορροπία άρα συνολικά  $500 \times$  lattice points mcs (monte carlo steps). Αν θέλαμε 100 ανεξάρτητες μετρήσεις θα χρειαζόμασταν  $5000 \times$  lattice points mcs (monte carlo steps). Όπου lattice points τα πλεγμάτικα σημεία που έχουμε τοποθετήσει σπιν σε αυτά.

Οι συναρτήσεις αυτοσυσχέτισης παρουσιάζονται σχεδόν στην κρίσιμη θερμοκρασία όπου οι διακυμάνσεις μεγιστοποιούνται και θα έχουμε τους μεγαλύτερους χρόνους αυτοσυσχέτισης που πρέπει να ληφθούν υπόψιν.

# Κεφάλαιο 3

## ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΕΩΝ ΓΙΑ ΤΟ ΠΛΕΓΜΑ fcc

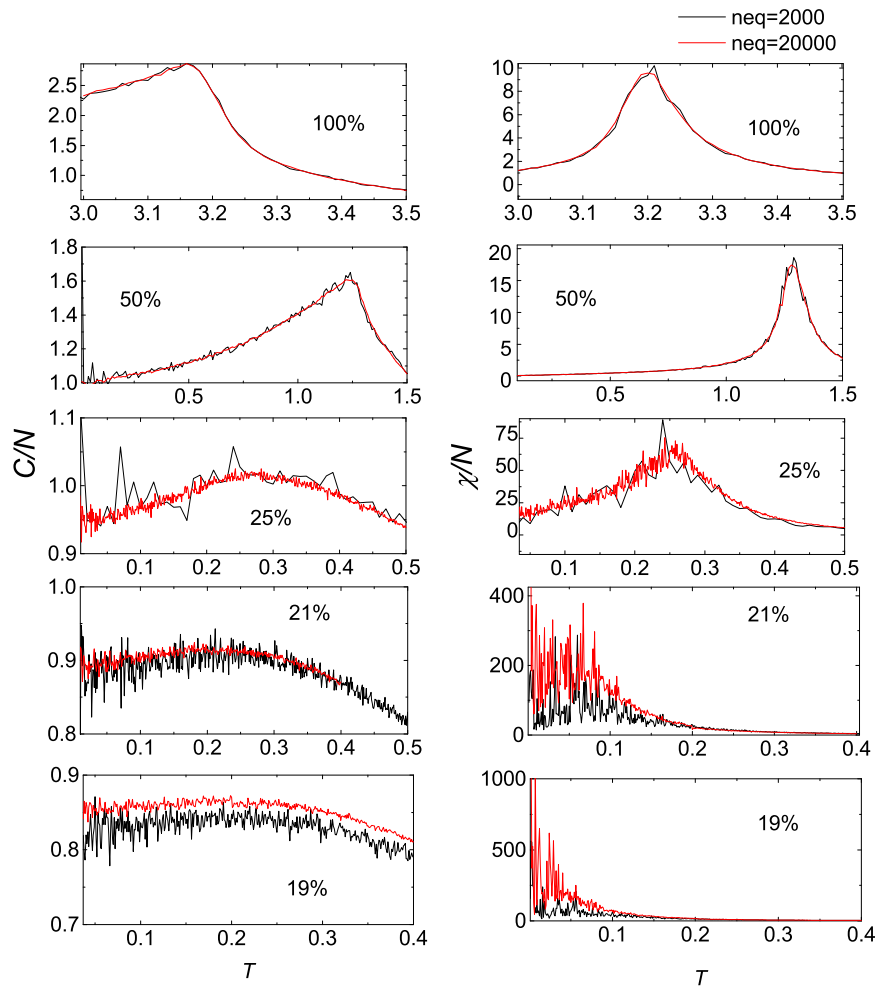
### 3.1 Πλέγμα fcc με πρώτους γείτονες

Αρχικά μελετάται το πλέγμα fcc λαμβάνοντας υπόψιν μόνο την αλληλεπίδραση πρώτων γειτόνων. Στο πλέγμα αυτό μειώνεται το ποσοστό μαγνητικών προσμίξεων σταδιακά. Συγκεκριμένα, έχοντας προσθέσει μαγνητικές προσμίξεις σε ποσοστά κατάληψης πλέγματος  $p = 1$  (100%),  $p = 0.5$  (50%),  $p = 0.25$  (25%),  $p = 0.21$  (21%) και  $p = 0.19$  (19%). Σύμφωνα με την βιβλιογραφία υπάρχει κρίσιμο ποσοστό κατάληψης κάτω από το οποίο δεν έχουμε σιδηρομαγνητικό υλικό. Αυτό συμβαίνει, καθώς δεν υπάρχει ένα σύμπλεγμα με διαστάσεις τις διαστάσεις του πλέγματος, που να το διαπερνά η μαγνήτιση, αλλά μικρότερα συμπλέγματα. Για το πλέγμα fcc λαμβάνοντας υπόψιν μόνο την αλληλεπίδραση πρώτων γειτόνων το ποσοστό αυτό κατάληψης (site percolation threshold of fcc lattice) είναι 0.198 19.8% [28]. Έτσι δεν είχε νόημα να μειωθεί, το ποσοστό κατάληψης μαγνητικών δοτών, περισσότερο καθώς για μικρότερα ποσοστά κατάληψης δεν θα παρατηρείται φαινόμενο αλλαγής φάσης.

Οι προσομοιώσεις Monte Carlo έγιναν στις θερμοκρασιακές περιοχές: i)  $T \in [0.01, 5.0]$  με βήμα εκατοστού για τα ποσοστά κατάληψης 100% και 50% ii)  $T \in [0.01, 2.0]$  με βήμα εκατοστού για το ποσοστό κατάληψης 25% και iii)  $T \in [0.001, 1.0]$  με βήμα χιλιοστού για τα ποσοστά κατάληψης 21% και 19%. Υπολογίστηκαν τα θερμοδυναμικά μεγέθη για διάφορα μεγέθη πλεγμάτων, με γραμμική διάσταση  $L = 4, 10, 16, 20, 24, 26$ .

Το σύστημα αφέθηκε να ισορροπήσει για 2000 sweeps για τα μεγέθη πλεγμάτων με γραμμική διάσταση  $L = 10, 16, 20, 24, 26$  ενώ για το μέγεθος  $L = 4$  αφέθηκε για 20000 sweeps. Η χρονοσειρά έχει συνολικά χρονικά βήματα  $\mathcal{N} = nav = 200.000$  για τα μεγέθη πλεγμάτων με γραμμική διάσταση  $L = 10, 16, 20, 24, 26$  ενώ για το μέγεθος  $L = 4$  έχει  $\mathcal{N} = nav = 2.000.000$ . Για τα μεγέθη  $L = 10, 16$  ελέγχθηκε κοντά στην κρίσιμη θερμοκρασία όπου μεγιστοποιούνται οι διακυμάνσεις (φαινόμενο κρίσιμης επιβράδυνσης [38]) αν οι καμπύλες όλων των θερμοδυναμικών μεγεθών ταυτίζονται με τις καμπύλες για χρόνο ισορροπίας 20000 sweeps. Πιο αναλυτικά για ποσοστό κατάληψης 100% στην θερμοκρασιακή περιοχή  $T \in [3.0, 3.5]$  με βήμα εκατοστού, για ποσοστό κατάληψης 50% στην θερμοκρασιακή περιοχή  $T \in [0.01, 1.5]$  με βήμα εκατοστού, για ποσοστό κατάληψης 25% στην θερμοκρασιακή περιοχή  $T \in [0.001, 0.5]$  με βήμα χιλιοστού, για ποσοστό κατάληψης 21% στην θερμοκρασιακή περιοχή  $T \in [0.001, 0.4]$  με βήμα χιλιοστού και τέλος για ποσοστό κατάληψης 19% στην θερμοκρασιακή περιοχή  $T \in [0.001, 0.4]$  με βήμα

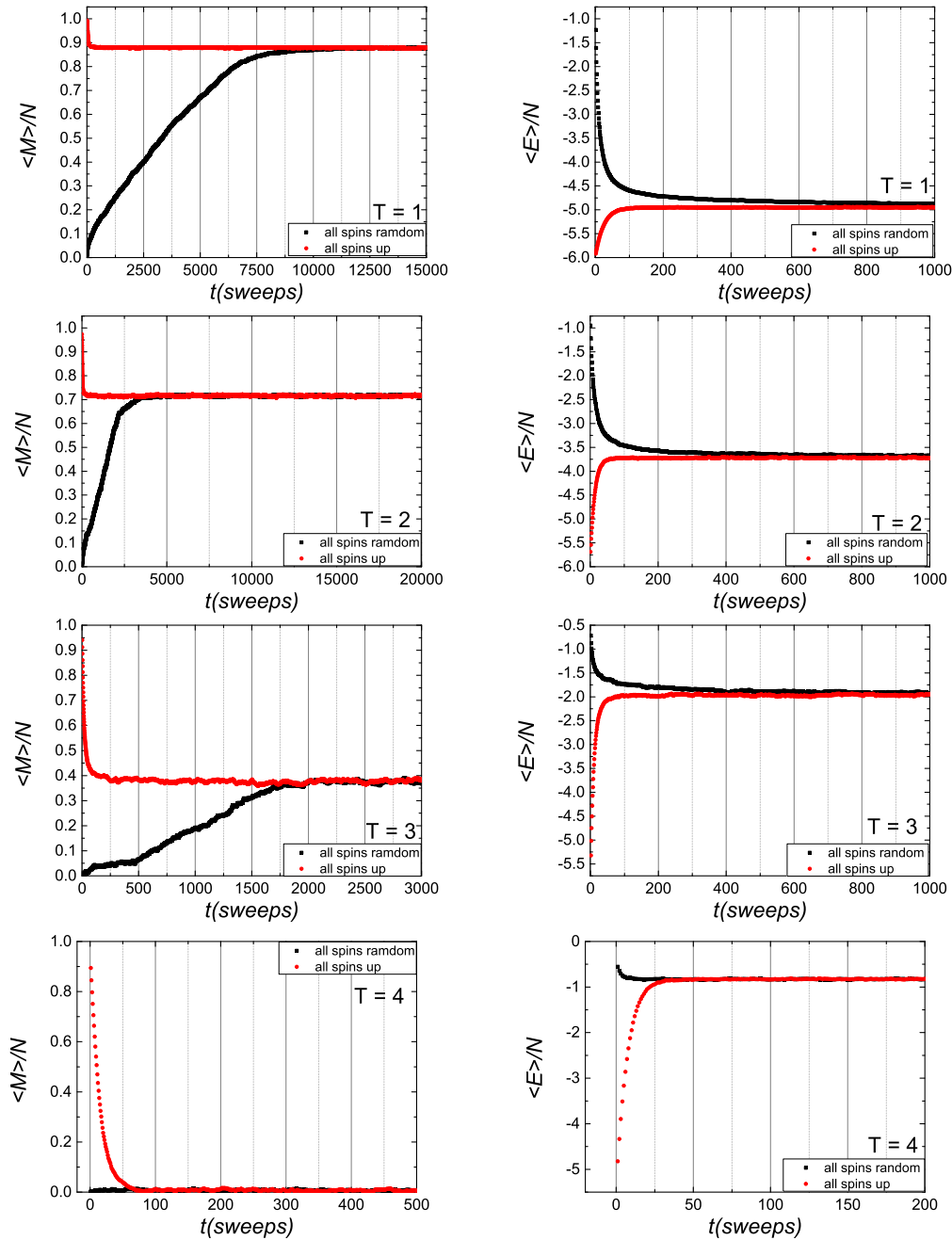
χιλιοστού υπολογίστηκαν οι καμπύλες για τον δεκαπλάσιο χρόνο ισορροπίας. Βρέθηκε πώς για επιπλέον αύξηση του χρόνου ισορροπίας να μην είναι πιο ομαλές οι καμπύλες αλλά οι εκτιμήσεις των ψευδοκρίσιμων είναι οι ίδιες στα πλαίσια των σφαλμάτων. Βέβαια, αν κάποιος θελήσει να πάρει μικρότερα θερμοκρασιακά βήματα, για να έχει μεγαλύτερη ακρίβεια πιθανόν να χρειαστεί αύξηση του χρόνου ισορροπίας για να αποφευχθούν ανωμαλίες στις καμπύλες των θερμοδυναμικών μεγεθών ιδιαίτερα κοντά στην κρίσιμη θερμοκρασία.



Σχήμα 3.1: Ενδεικτικά για πλέγμα με γραμμική διάσταση πλέγματος  $L = 16$  για χρόνους ισορροπίας  $neq = 2000$  sweeps με συνολικά βήματα  $n_{av} = 200000$  sweeps και  $neq = 20000$  sweeps με συνολικά βήματα  $n_{av} = 2000000$  sweeps, η ειδική θερμότητα και η μαγνητική επιδεκτικότητα σαν συνάρτηση της θερμοκρασίας.

Πέρα από αυτό ελέγχθηκε και βάζοντας το σύστημα σε διαφορετικές αρχικές συνθήκες (όλα τα σπιν πάνω  $\langle M \rangle / N = 1$  ή όλα τα σπιν τυχαία  $\langle M \rangle / N = 0$ ) για θερμοκρασίες  $T = 1, 2, 3, 4$  K σε μέγεθος πλέγματος γραμμικής διάστασης  $L = 32$  πόσο θα κάνει το σύστημα να ισορροπήσει





Σχήμα 3.2: Η μαγνήτιση ανά σπιν (αριστερά) και η μέση ενέργεια ανά σπιν (δεξιά) για θερμοκρασίες  $T = 1, 2, 3, 4$  K σαν συνάρτηση των χρονικών βημάτων  $t$  (sweeps) για διαφορετικές αρχικές συνθήκες για fcc πλέγμα με  $L = 32$ .

και να μην εξαρτάται από τις αρχικές συνθήκες.

Η μαύρη γραμμή αφορά την τυχαία κατανομή των σπιν ενώ η κόκκινη την κατανομή όλων των σπιν πάνω. Γενικά η κόκκινη γραμμή έρχεται σε ισορροπία αρκετά sweeps πιο γρήγορα οπότε είναι και η αρχική κατάσταση που επιλέγουμε. Για αυτή την αρχική συνθήκη μερικές εκατοντάδες sweeps αρκούν για να ισορροπήσει το σύστημα επομένως το όριο 2000 sweeps φαίνεται να είναι ικανοποιητικό.

Έτσι υπολογίζονται τα θερμοδυναμικά μεγέθη που παρουσιάζονται στην συνέχεια.

### 3.1.1 Η μέση ενέργεια και η ειδική θερμότητα

Αρχικά παρουσιάζονται τα αποτελέσματα για την μέση ενέργεια ανά σπιν καθώς και την ειδική θερμότητα ανά σπιν για κάθε ποσοστό κατάληψης.

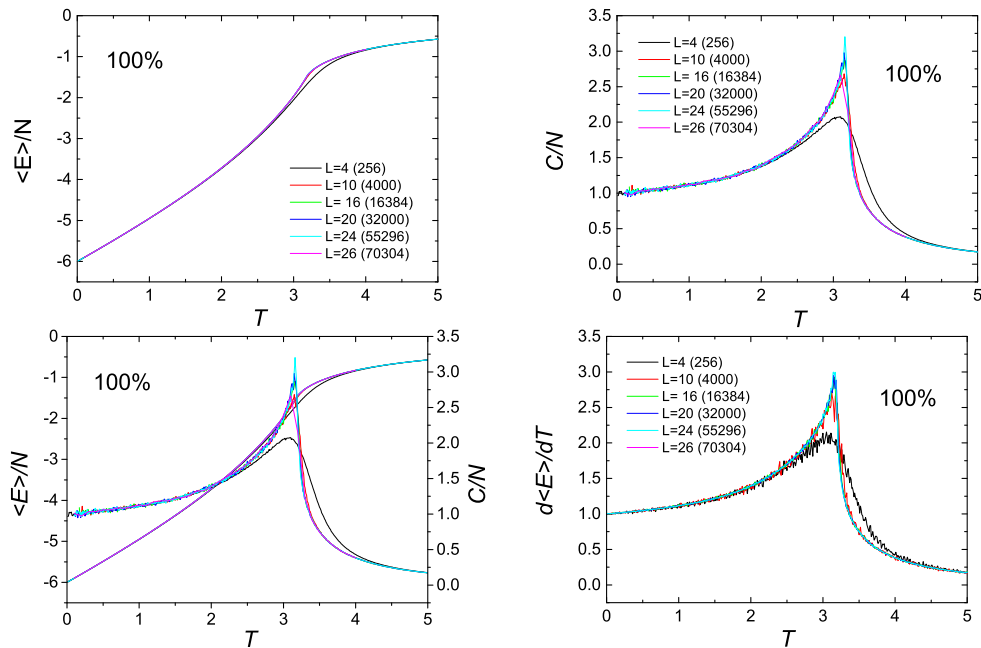
$$\frac{\langle E \rangle}{N} = \langle \epsilon \rangle = \frac{1}{N} \sum_{\mu=1}^N \frac{E_{\mu}}{N} \quad (3.1)$$

και

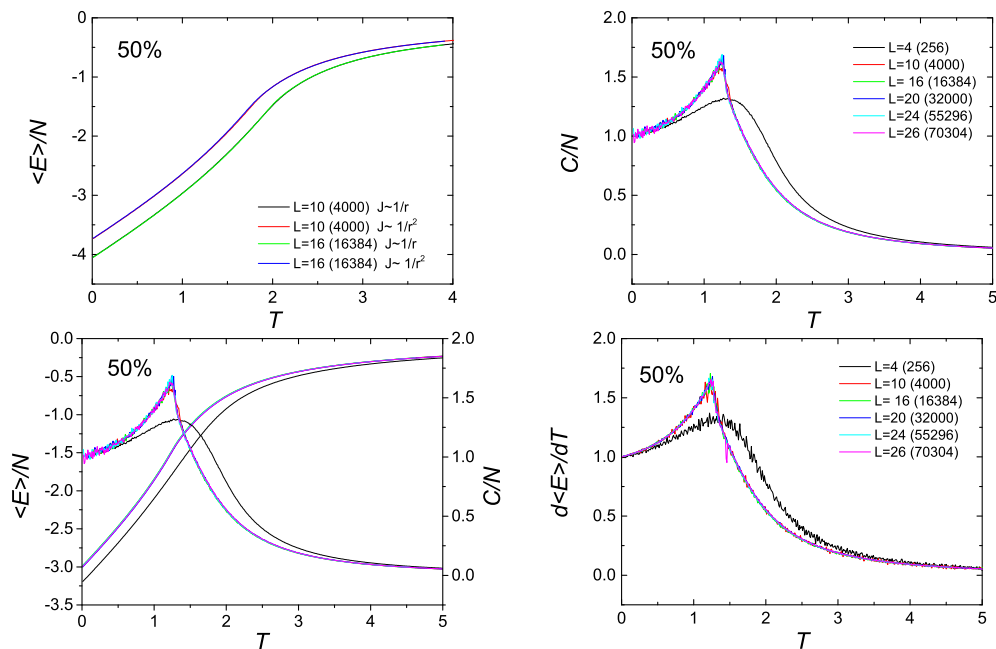
$$\frac{C}{N} = \beta^2 (\langle \epsilon^2 \rangle - N \langle \epsilon \rangle^2) \quad (3.2)$$

όπως φαίνεται η ειδική θερμότητα σχετίζεται με τις διακυμάνσεις της ενέργειας. Στην κρίσιμη θερμοκρασία όπου οι διακυμάνσεις μεγιστοποιούνται εμφανίζει μέγιστο και η ειδική θερμότητα. Η θερμοκρασία στην οποία εμφανίζεται αυτό το μέγιστο είναι η ψευδοκρίσιμη θερμοκρασία. Στην ίδια αυτή θερμοκρασία όπως φαίνεται από το συγκριτικό διάγραμμα  $\langle E \rangle / N - C / N$  έχει η μέση ενέργεια ανά σπιν την μέγιστη κλίση. Αυτό μπορεί να επιβεβαιωθεί προσπαθώντας να υπολογίσουμε και την παράγωγο της μέσης ενέργειας ανά σπιν. Αξίζει να σημειωθεί πως ο υπολογισμός αυτός της παραγώγου δεν έχει γίνει παραγωγίζοντας κάποια αναλυτική σχέση αλλά υπολογίζοντας της κλίση κάθε φορά για κάθε θερμοκρασία με χρήση του λογισμικού origin. Έτσι είναι μια προσέγγιση της παραγώγου με έναν τρόπο που ενέχει σφάλματα και γι αυτό σε μικρότερα ποσοστά του 25% που τα σημεία σχηματίζουν λιγότερο ομαλές καμπύλες για την μέση ενέργεια δεν παρουσιάζεται καν η μορφή της καθώς δεν προκύπτει ομαλή. Όπως φαίνεται και η παράγωγος της μέσης ενέργειας ανά σπιν εμφανίζει μέγιστο στην ίδια θερμοκρασία. Επίσης οι μορφές των καμπυλών ειδικής θερμότητας ανά σπιν και παραγώγου μέσης ενέργειας ανά σπιν είναι παρόμοιες με την δεύτερη να είναι λιγότερο ομαλή λόγω της μεθόδου που έχει χρησιμοποιηθεί για τον υπολογισμό της παραγώγου.

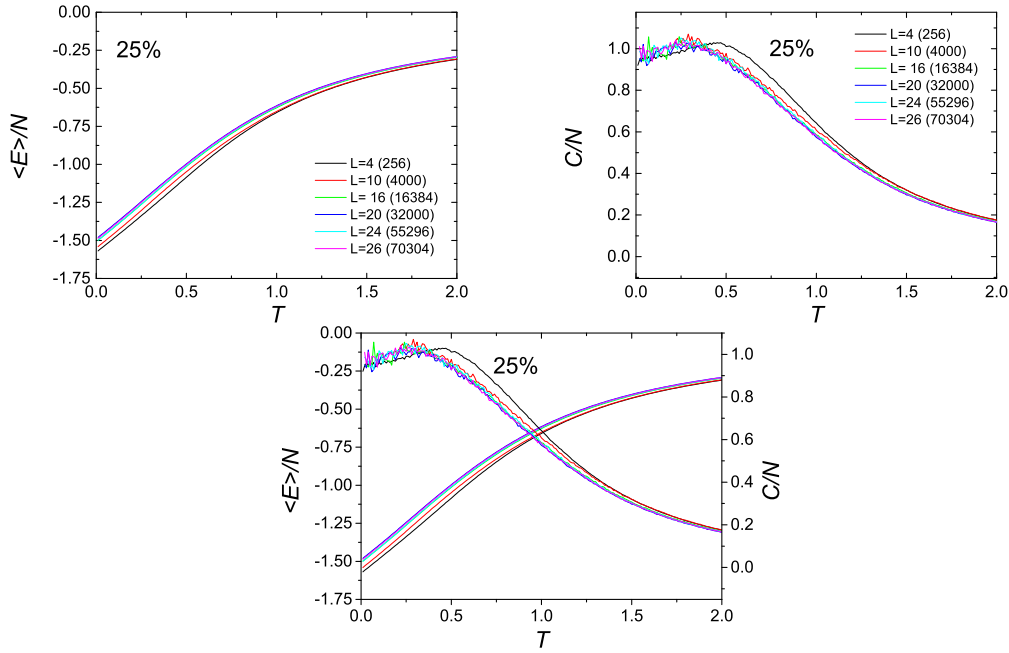
Επίσης η ειδική θερμότητα φαίνεται να έχει μια πεπερασμένη τιμή ίση με 1 για μηδενική θερμοκρασία. Αυτό οφείλεται στο γεγονός ότι μελετάται η κλασική προσέγγιση του προτύπου Heisenberg και σύμφωνα με την κλασική προσέγγιση η ειδική θερμότητα δεν τείνει στο μηδέν όπως στην κβαντική περίπτωση αντίθετα έχει πεπερασμένη τιμή. Συγκεκριμένα κάθε βαθμός ελευθερίας συνεισφέρει κατά  $k_B T / 2$  στην μέση ενέργεια. Στο υπό μελέτη σύστημα το σπιν είναι ένα άνυσμα με καθορισμένο μέτρο που έχει δύο βαθμούς ελευθερίας, που είναι οι γωνίες  $\theta$  και  $\phi$  κατά τις οποίες μπορεί να περιστραφεί. Έτσι η συνεισφορά στην μέση ενέργεια είναι  $k_B T$  και η ειδική θερμότητα είναι η παράγωγος της μέσης ενέργειας ως προς την θερμοκρασία. Οπότε η συνεισφορά



Σχήμα 3.3: Μέση ενέργεια ανά σπιν, η ειδική θερμότητα ανά σπιν ξεχωριστά και σε κοινό διάγραμμα και η παράγωγος της ενέργειας σαν συνάρτηση της θερμοκρασίας για διάφορα μεγέθη πλεγμάτων, με γραμμική διάσταση  $L = 4, 10, 16, 20, 24, 26$  για ποσοστό κατάληψης μαγνητικών δοτών 100%.



Σχήμα 3.4: Μέση ενέργεια ανά σπιν, η ειδική θερμότητα ανά σπιν ξεχωριστά και σε κοινό διάγραμμα και η παράγωγος της ενέργειας σαν συνάρτηση της θερμοκρασίας για διάφορα μεγέθη πλεγμάτων, με γραμμική διάσταση  $L = 4, 10, 16, 20, 24, 26$  για ποσοστό κατάληψης μαγνητικών δοτών 50%.

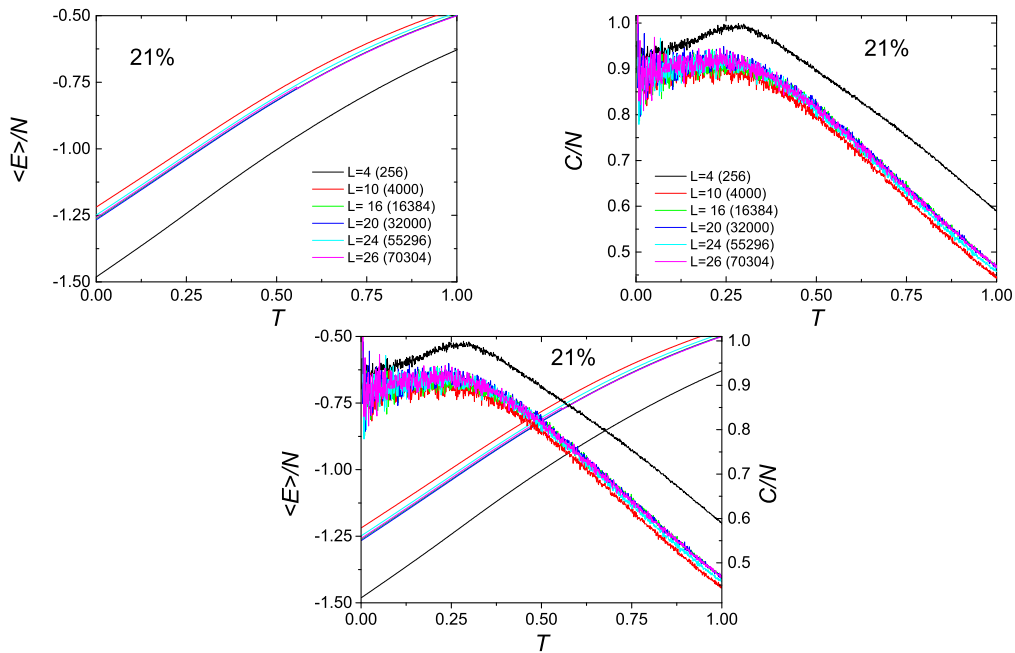


Σχήμα 3.5: Μέση ενέργεια ανά σπιν, η ειδική θερμότητα ανά σπιν ξεχωριστά και σε κοινό διάγραμμα σαν συνάρτηση της θερμοκρασίας για διάφορα μεγέθη πλεγμάτων, με γραμμική διάσταση  $L = 4, 10, 16, 20, 24, 26$  για ποσοστό κατάληψης μαγνητικών δοτών 25%.

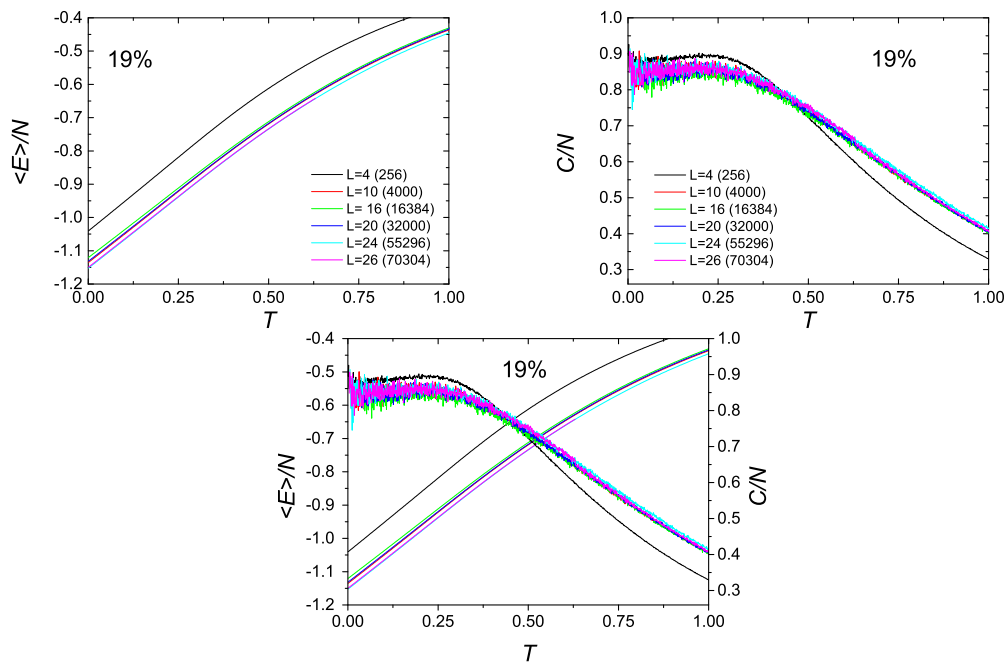
στην ειδική θερμότητα είναι  $k_B$  δηλαδή 1, καθώς στο σύστημα μας έχει θεωρηθεί  $k_B = 1$  όπως και  $J = 1$  [42].

Όπως φαίνεται όσο μεγαλώνει η γραμμική διάσταση του πλέγματος τόσο πιο απότομη είναι η μεταβολή στην κλίση της μέσης ενέργειας ανά σπιν κατά την αλλαγή φάσης. Στα ποσοστά κατάληψης μαγνητικών δοτών 100% και 50%, με εξαίρεση το πλέγμα γραμμικής διάστασης  $L = 4$ , οι μέσες ενέργειες για τα διάφορα μεγέθη ταυτίζονται. Για το ποσοστό κατάληψης μαγνητικών δοτών 25% φαίνεται να διαφέρουν τα μεγέθη  $L = 4, 10$ , από τα υπόλοιπα, τα οποία είναι λίγο πιο ομαλά (μικρότερη μέγιστη κλίση) όμως τα υπόλοιπα σχεδόν ταυτίζονται επίσης. Τέλος, στα ποσοστά κατάληψης μαγνητικών δοτών 21% και 19% φαίνεται να διαφέρουν αρκετά πια τα υπόλοιπα μεγέθη από το  $L = 4$ . Σε αυτή την περίπτωση σε αντίθεση με πριν οι καμπύλες για το  $L = 4$  είναι πιο απότομες και ειδικά για το 21%. Για τα υπόλοιπα μεγέθη οι ενέργειες μοιάζουν να είναι κάπως κοντά χωρίς όμως να ταυτίζονται. Αυτό το πιθανότερο είναι να οφείλεται σε μεγαλύτερα σφάλματα που έχουμε σε τόσο μικρά ποσοστά λόγω της τυχαιότητας κατάληψης των θέσεων που αυξάνεται όσο αυξάνονται οι άδειες θέσεις.

Αντίστοιχα πράγματα ισχύουν και για την ειδική θερμότητα ανά σπιν. Στα ποσοστά κατάληψης μαγνητικών δοτών 100% και 50% φαίνεται μια μυτερή κορυφή, η οποία όσο αυξάνεται η γραμμική διάσταση  $L$  εντοπίζεται ψηλότερα και μετατοπίζεται σε ελαφρώς μεγαλύτερες θερμοκρασίες. Όσο πιο μεγάλο είναι το  $L$  τόσο λιγότερο μετατοπίζεται δεξιά η κορυφή. Ιδιαίτερη περίπτωση αποτελεί το  $L = 4$  που διαφέρει αρκετά από τα υπόλοιπα και δεν είναι και αρκετά μυτερό. Στο 25%



Σχήμα 3.6: Μέση ενέργεια ανά σπιν, η ειδική θερμότητα ανά σπιν ξεχωριστά και σε κοινό διάγραμμα σαν συνάρτηση της θερμοκρασίας για διάφορα μεγέθη πλεγμάτων, με γραμμική διάσταση  $L = 4, 10, 16, 20, 24, 26$  για ποσοστό κατάληψης μαγνητικών δοτών 21%.



Σχήμα 3.7: Μέση ενέργεια ανά σπιν, η ειδική θερμότητα ανά σπιν ξεχωριστά και σε κοινό διάγραμμα σαν συνάρτηση της θερμοκρασίας για διάφορα μεγέθη πλεγμάτων, με γραμμική διάσταση  $L = 4, 10, 16, 20, 24, 26$  για ποσοστό κατάληψης μαγνητικών δοτών 19%.

αυξάνονται τα σφάλματα και δεν υπάρχει η ακρίβεια στους υπολογισμούς για να φανεί καθαρά μια μυτερή κορυφή. Χρειάζεται ενδεχομένως μικρότερα βήματα κοντά στην κρίσιμη θερμοκρασία τα οποία θα απαιτούν και μεγαλύτερους χρόνους ισοροπίας και άρα αρκετό υπολογιστικό χρόνο. Στα 21% και 19% φαίνεται πως αρχίζει η κορυφή να γίνεται όλο και πιο ομαλή. Άλλωστε στο 19% δεν ανάμενεται κάποια μυτερή κορυφή καθώς είναι κάτω από το κρίσιμο ποσοστό κατάληψης (site percolation threshold of fcc lattice) που είναι  $p_c = 0.198$  19.8%.

### 3.1.2 Η μαγνήτιση και η μαγνητική επιδεκτικότητα

Στην συνέχεια υπολογίζονται η μαγνήτιση ανά σπιν

$$\frac{M}{N} = \langle m \rangle = \frac{1}{N} \sum_{\mu=1}^N \frac{M_{\mu}}{N} \quad (3.3)$$

και η μαγνητική επιδεκτικότητα

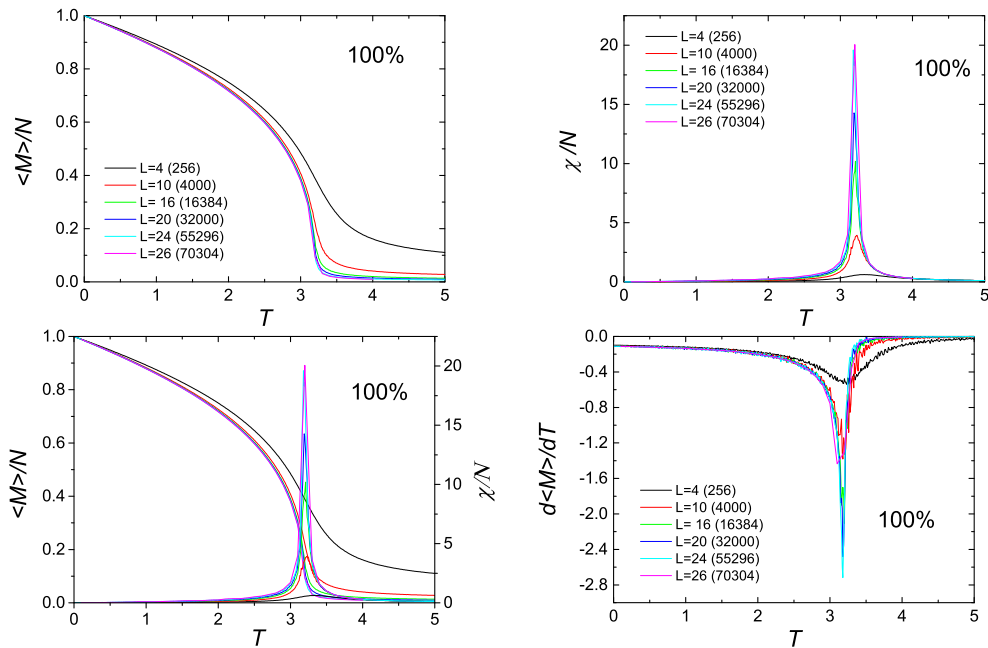
$$\chi = \beta N (\langle m^2 \rangle - \langle m \rangle^2) \quad (3.4)$$

Η μαγνήτιση ανά σπιν από την κρίσιμη θερμοκρασία και μετά τείνει να μηδενιστεί. Ξεκινάει από την μονάδα και καταλήγει μηδέν. Ο μηδενισμός γίνεται όλο και πιο απότομα όσο μεγαλώνει το  $L$ . Όσο πιο μεγάλο είναι το  $L$  τόσο μικρότερη είναι και η διαφορά στην κλίση ανάμεσα στα διάφορα  $L$ .

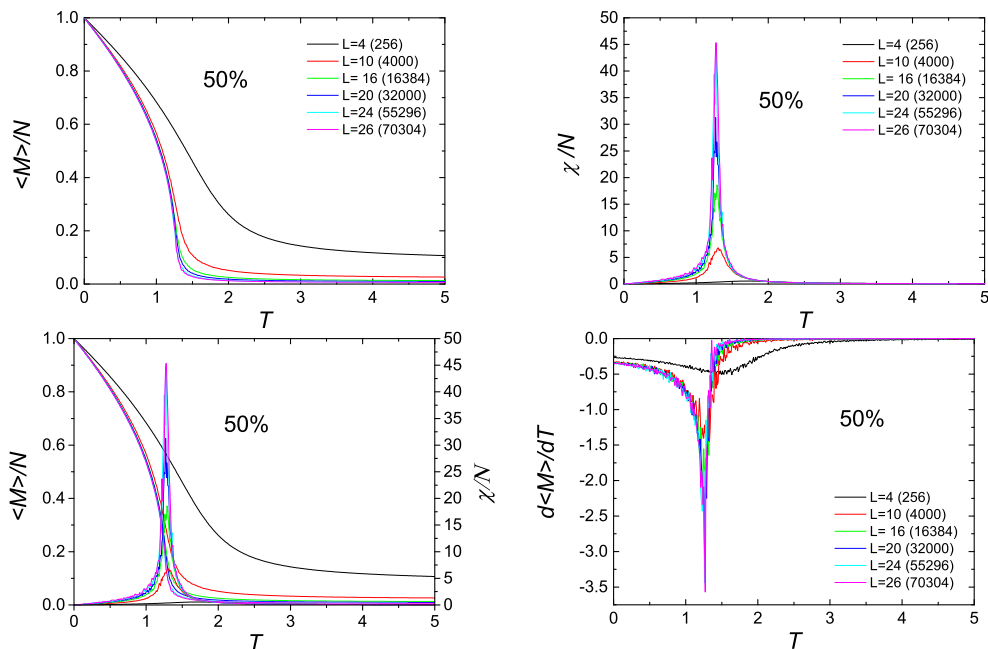
Όπως και την προηγούμενη συζήτηση για τις ενέργειες έτσι κι εδώ η μαγνητική επιδεκτικότητα σχετίζεται με τις διακυμάνσεις της μαγνήτισης και λαμβάνει μέγιστη τιμή στην ψευδοκρίσιμη θερμοκρασία όπου και η κλίση του διαγράμματος της μαγνήτισης είναι μέγιστη. Αντίστοιχα με παρόμοιο τρόπο η υπολογισμένη παράγωγος της μαγνήτισης είναι αντίστοιχη και στην μορφή και στην θέση της κορυφής με την μαγνητική επιδεκτικότητα ανά σπιν όμως με μεγαλύτερα σφάλματα.

Για την μαγνήτιση, όσο πιο μικρό είναι το ποσοστό κατάληψης τόσο μεγαλύτερη διαφορά στην κλιμάκωση εμφανίζουν μεταξύ τους τα  $L$ . Ειδικά το  $L = 4$  για μικρά ποσοστά διαφέρει αρκετά από τα υπόλοιπα. Αυτή η διαφορά στην κλιμάκωση εμφανίζεται με το ίδιο τρόπο και στις μαγνητικές επιδεκτικότητες. Όπου όσο μεγαλώνει το  $L$  και η κλίση στον μηδενισμό της μαγνήτισης μεγαλώνει και το μέγιστο της μαγνητικής επιδεκτικότητας. Ωστόσο όσο πιο μεγάλα  $L$  συγκρίνουμε μεταξύ τους τόσο πιο μικρή η διαφορά μεταξύ τους. Επιπρόσθετα, τα μέγιστα της μαγνητικής επιδεκτικότητας εμφανίζονται σε όλο και μικρότερες θερμοκρασίες, συνεπώς μετατοπίζονται κάθε φορά ελαφρώς αριστερά (σε αντίθετη με τα μέγιστα της ειδικής θερμότητας ανά σπιν).

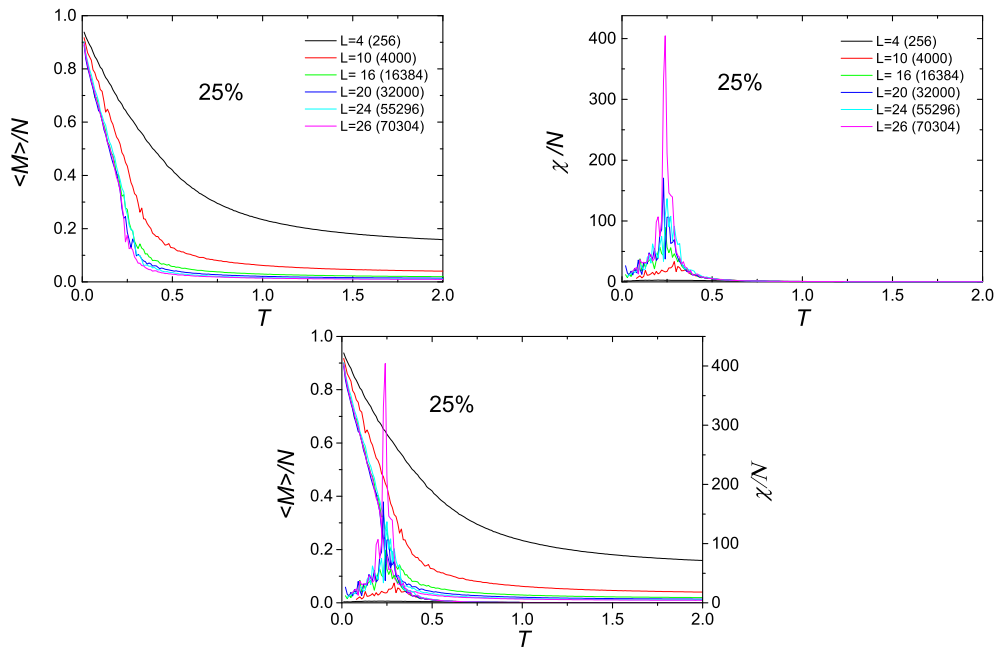
Βέβαια οι ψευδοκρίσιμες θερμοκρασίες, που εκτιμώνται από τα μέγιστα της ειδικής θερμότητας, είναι μικρότερες σε σχέση με αυτές που εκτιμώνται από τα μέγιστα της μαγνητικής επιδεκτικότητας. Επίσης, η ψευδοκρίσιμη από την μέθοδο της ειδικής θερμότητας είναι μικρότερη από την πραγματική λόγω πεπερασμένου μεγέθους και όσο το  $L$  αυξάνεται αυξάνεται και η εκτίμηση της ψευδοκρίσιμης ώστε να προσεγγίσει την πραγματική. Από την άλλη, επειδή η ψευδοκρίσιμη από την



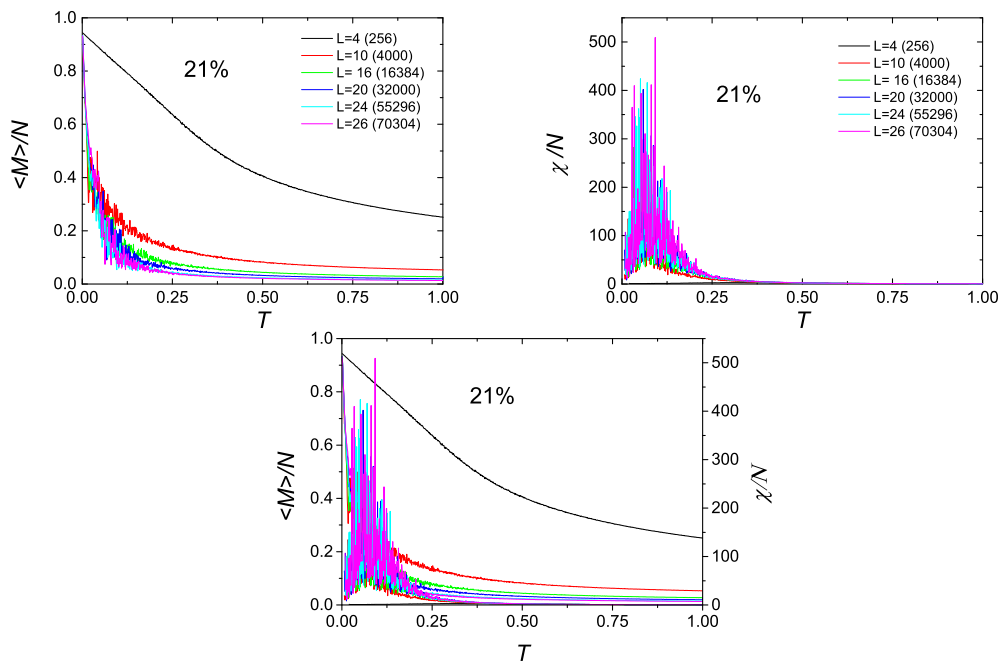
Σχήμα 3.8: Η μαγνήτιση ανά σπιν, η μαγνητική επιδεκτικότητα ανά σπιν ξεχωριστά και σε κοινό διάγραμμα και η παράγωγος της μαγνήτισης σαν συνάρτηση της θερμοκρασίας για διάφορα μεγέθη πλεγμάτων, με γραμμική διάσταση  $L = 4, 10, 16, 20, 24, 26$  για ποσοστό κατάληψης μαγνητικών δοτών 100%.



Σχήμα 3.9: Η μαγνήτιση ανά σπιν, η μαγνητική επιδεκτικότητα ανά σπιν ξεχωριστά και σε κοινό διάγραμμα και η παράγωγος της μαγνήτισης σαν συνάρτηση της θερμοκρασίας για διάφορα μεγέθη πλεγμάτων, με γραμμική διάσταση  $L = 4, 10, 16, 20, 24, 26$  για ποσοστό κατάληψης μαγνητικών δοτών 50%.

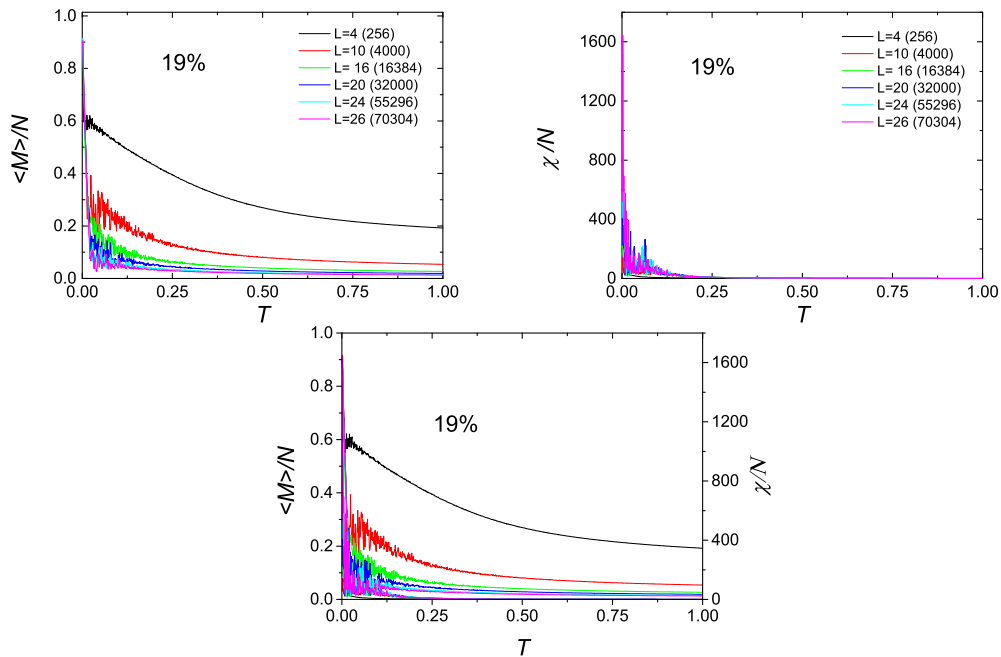


Σχήμα 3.10: Η μαγνήτιση ανά σπιν, η μαγνητική επιδεκτικότητα ανά σπιν ξεχωριστά και σε κοινό διάγραμμα σαν συνάρτηση της θερμοκρασίας για διάφορα μεγέθη πλεγμάτων, με γραμμική διάσταση  $L = 4, 10, 16, 20, 24, 26$  για ποσοστό κατάληψης μαγνητικών δοτών 25%.



Σχήμα 3.11: Η μαγνήτιση ανά σπιν, η μαγνητική επιδεκτικότητα ανά σπιν ξεχωριστά και σε κοινό διάγραμμα σαν συνάρτηση της θερμοκρασίας για διάφορα μεγέθη πλεγμάτων, με γραμμική διάσταση  $L = 4, 10, 16, 20, 24, 26$  για ποσοστό κατάληψης μαγνητικών δοτών 21%.





Σχήμα 3.12: Η μαγνήτιση ανά σπιν, η μαγνητική επιδεκτικότητα ανά σπιν ξεχωριστά και σε κοινό διάγραμμα σαν συνάρτηση της θερμοκρασίας για διάφορα μεγέθη πλεγμάτων, με γραμμική διάσταση  $L = 4, 10, 16, 20, 24, 26$  για ποσοστό κατάληψης μαγνητικών δοτών 19%.

μέθοδο της μαγνητικής επιδεκτικότητας είναι μεγαλύτερη από την πραγματική λόγω πεπερασμένου μεγέθους, όσο το  $L$  αυξάνεται μειώνεται και η εκτίμηση της ψευδοκρίσιμης ώστε να προσεγγίσει την πραγματική. Η πραγματική κρίσιμη είναι κάτι ανάμεσα στις δύο εκτιμήσεις με αυτές τις μεθόδους. Για μεγάλο  $L$  οι εκτιμήσεις θα είναι αρκετά κοντά ενώ για  $L \rightarrow \infty$  ταυτίζονται.

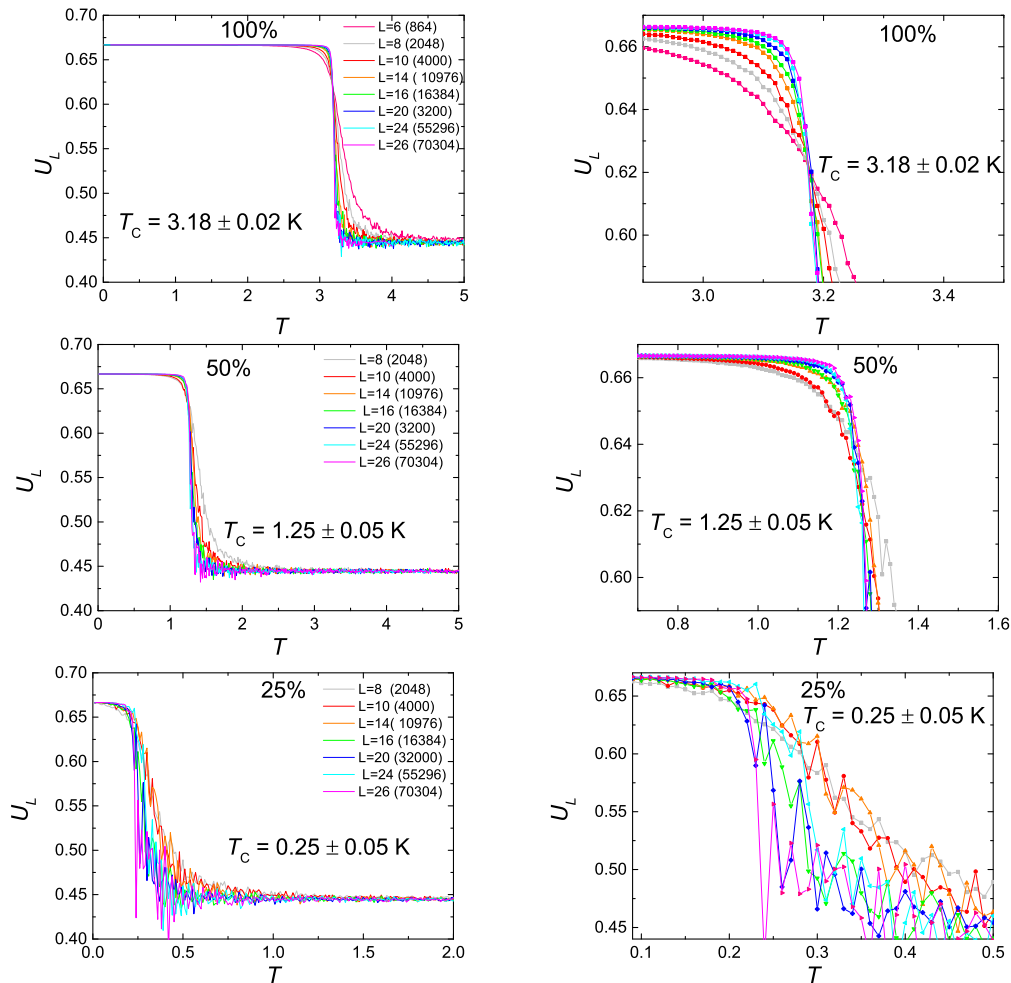
Χρειάζεται και μια μέθοδος ανεξάρτητη της γραμμικής διάστασης του πλέγματος για τον προσδιορισμό της κρίσιμης θερμοκρασίας. Μια τέτοια είναι η μέθοδος του συσσωρευτή 4ης τάξης συσσωρευτής τέταρτης τάξης ( $U_L$  method).

### 3.1.3 Ο συσσωρευτής τέταρτης τάξης

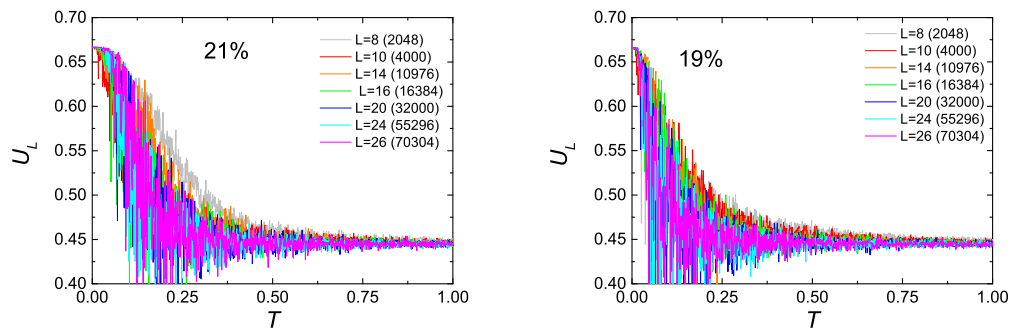
Όπως έχει σχολιαστεί και στην θεωρία ο συσσωρευτής τέταρτης τάξης ( $U_L$ ) για την μαγνήτιση ανά σπιν είναι

$$U_4 = 1 - \frac{\langle m^4 \rangle}{3\langle m^2 \rangle^2}. \quad (3.5)$$

Ο συσσωρευτής απόδεικνύεται [31] πως για  $T < T_c$  τείνει στο  $2/3$  ενώ για  $T > T_c$  τείνει στα  $4/9$ . Ενώ για  $\xi \gg L$  κοντά στο κρίσιμο σημείο ο συσσωρευτής παίρνει μια συγκεκριμένη τιμή που ελάχιστα εξαρτάται από την γραμμική διάσταση  $L$  του πλέγματος. Αυτή η ιδιότητα του συσσωρευτή 4ης τάξης τον καθιστά χρήσιμο στον υπολογισμό της κρίσιμης θερμοκρασίας  $T_c$  βρίσκοντας το σημείο τομής (fixed point) των συναρτήσεων  $U^*$  για διαφορετικά  $L$ . Παρακάτω φαίνονται τα σημεία τομής (fixed points) και οι εκτιμήσεις των κρίσιμων θερμοκρασιών για κάθε ποσοστό κατάληψης. Για τα ποσοστά 21% και 19% στη θερμοκρασιακή περιοχή που μας ενδιέφερε τα σφάλματα ήταν μεγάλα και δεν μπορέσαμε να προσδιορίσουμε τιμή για την κρίσιμη θερμοκρασία.



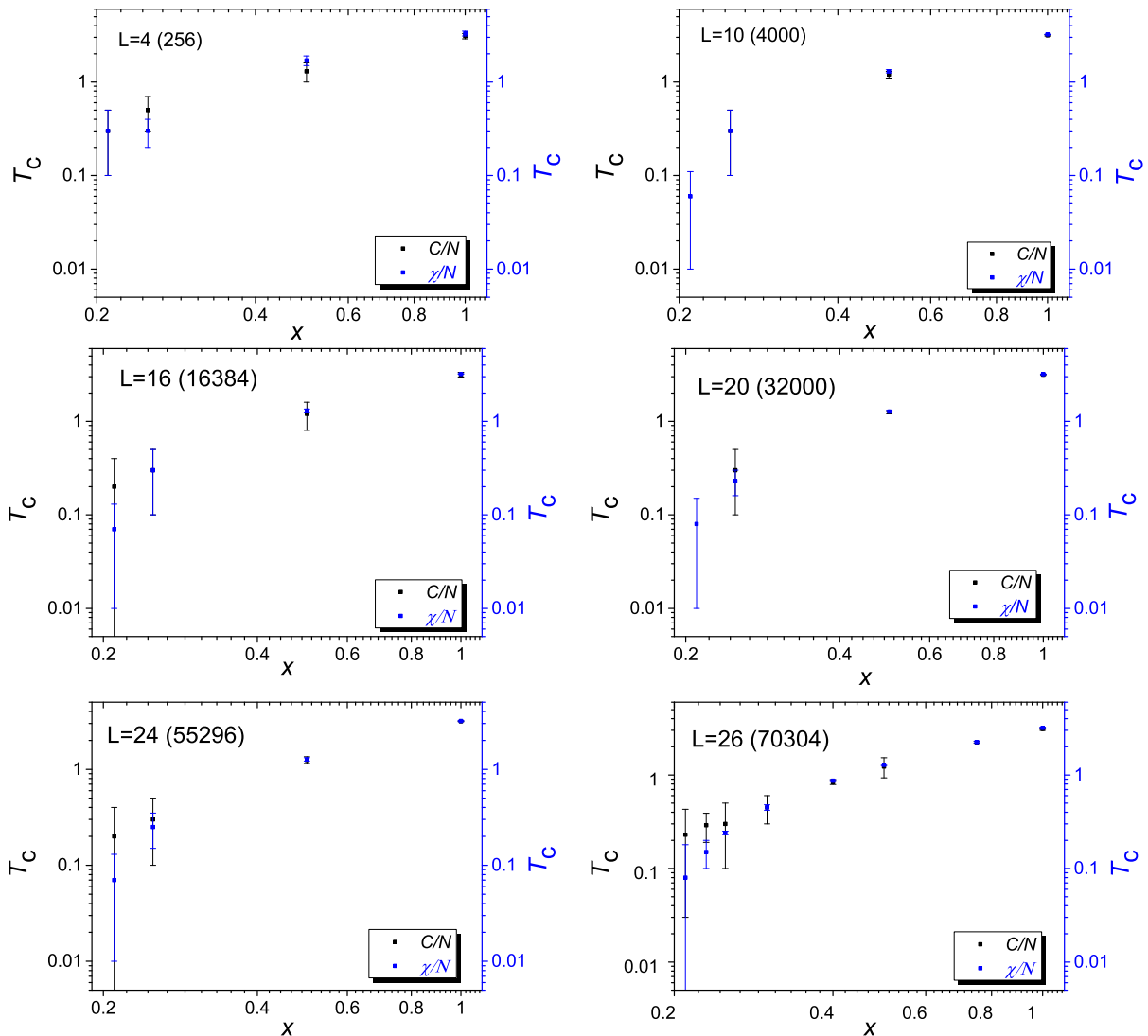
Σχήμα 3.13: Ο συσσωρευτής τέταρτης τάξης σαν συνάρτηση της θερμοκρασίας σε fcc πλέγμα για διάφορα μεγέθη πλεγμάτων, με γραμμική διάσταση  $L = 8, 10, 14, 16, 20, 24, 26$ , με ποσοστά κατάληψης μαγνητικών δοτών  $p = 0.100$  (100%),  $p = 0.50$  (50%),  $p = 0.25$  (25%).



Σχήμα 3.14: Ο συσσωρευτής τέταρτης τάξης σαν συνάρτηση της θερμοκρασίας σε fcc πλέγμα για διάφορα μεγέθη πλεγμάτων, με γραμμική διάσταση  $L = 8, 10, 14, 16, 20, 24, 26$ , με ποσοστά κατάληψης μαγνητικών δοτών  $p = 0.21$  (21%) και  $p = 0.19$  (19%).

### 3.1.4 Εκτίμηση κρίσιμων θερμοκρασιών

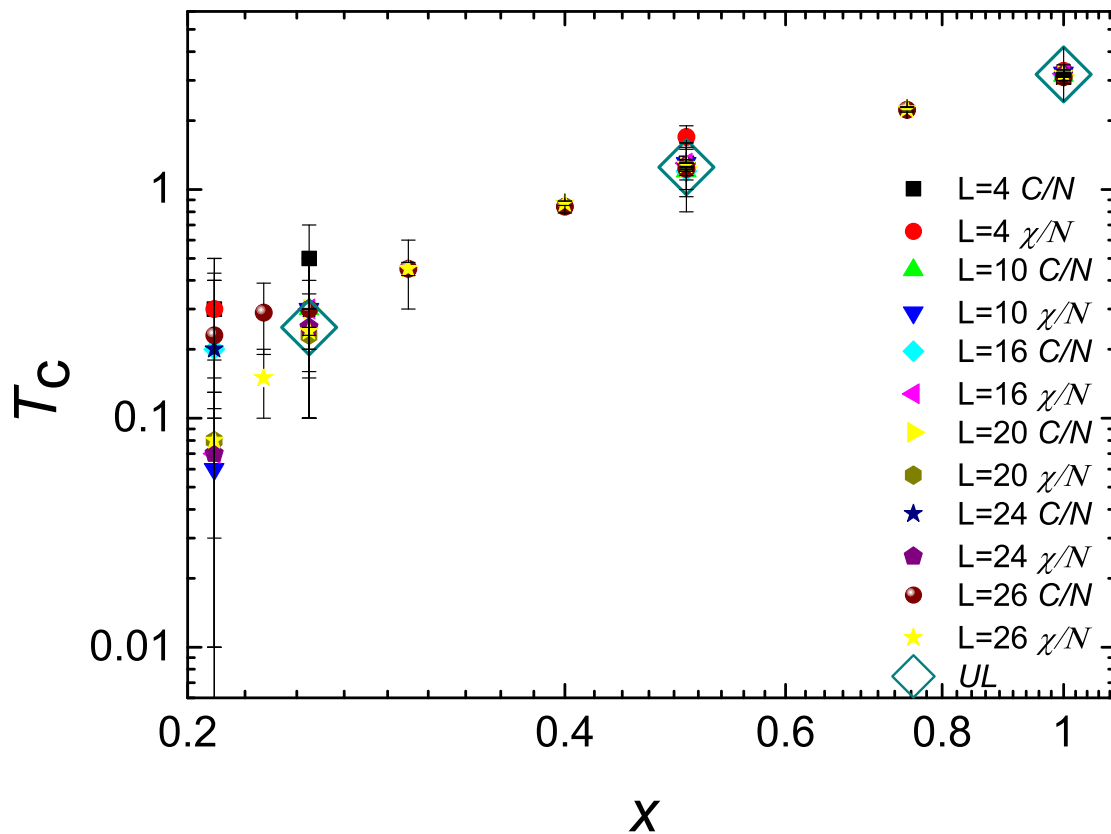
Για να παρουσιαστούν καλύτερα τα αποτελέσματα για την εκτίμηση των κρίσιμων θερμοκρασιών ζωγραφίζονται σε λογαριθμικές κλίμακες οι κρίσιμες θερμοκρασίες σαν συνάρτηση της πιθανότητας κατάληψης μαγνητικών δοτών. Παρουσιάζονται οι μέθοδοι της ειδικής θερμότητας ( $C/N$ ) και της μαγνητικής επιδεκτικότητας ( $\chi/N$ ). Στο τέλος συνοψίζονται οι μέθοδοι εκτίμησης της κρίσιμης



Σχήμα 3.15: Οι κρίσιμες θερμοκρασίες σαν συνάρτηση της πιθανότητας κατάληψης μαγνητικών δοτών εκτιμημένες από τα διαγράμματα της ειδικής θερμότητας και της μαγνητικής επιδεκτικότητας μαζί με το σφάλμα τους για διάφορα μεγέθη πλεγμάτων, με γραμμική διάσταση  $L = 4, 10, 16, 20, 24, 26$

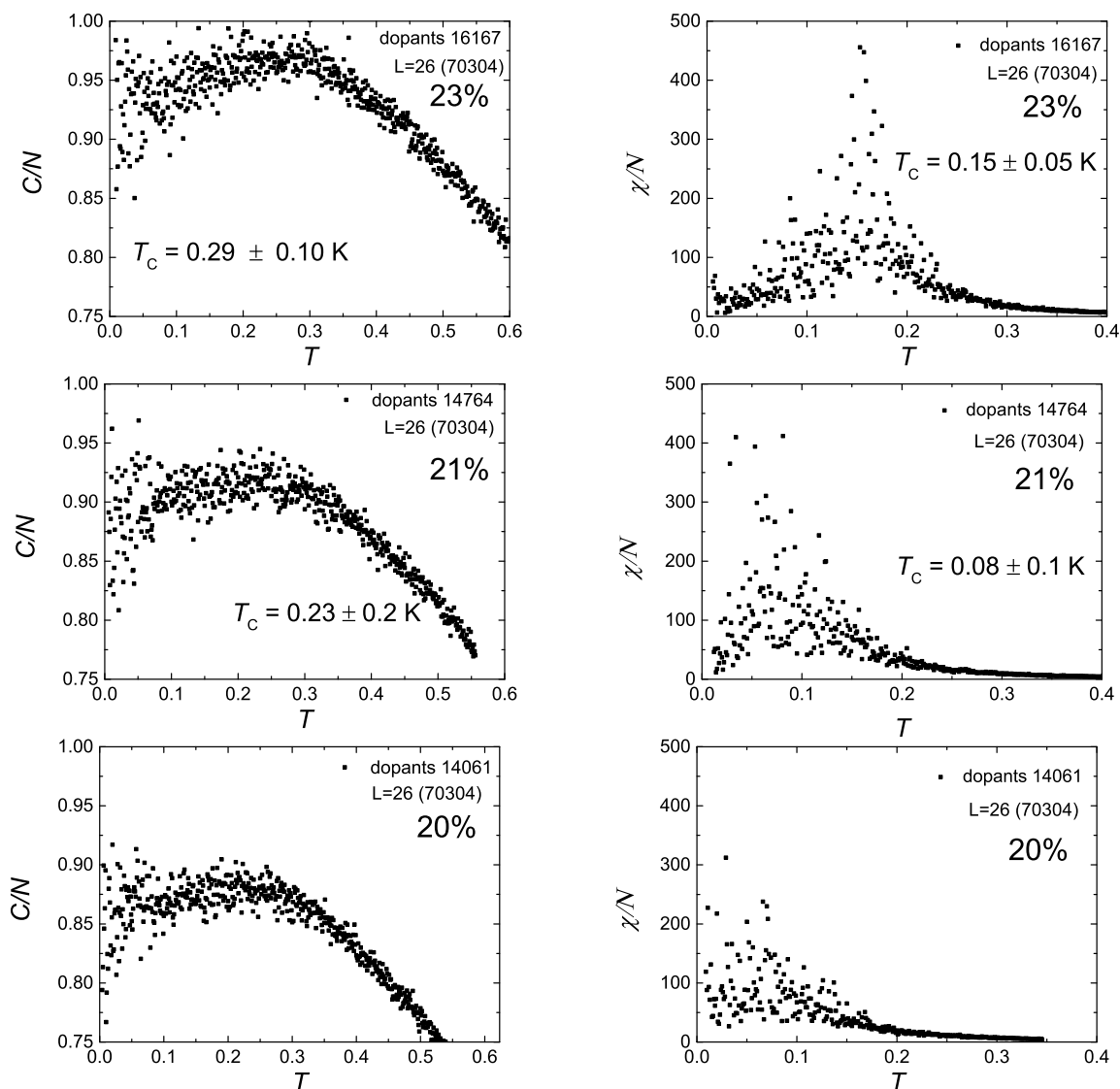
θερμοκρασίας σε ένα διάγραμμα στο οποίο υπάρχει και η  $U_L$  method. Όπως φαίνεται, όσο μεγαλώνει το  $L$  τόσο πιο κοντά είναι τα αποτελέσματα των δύο μεθόδων ειδικής θερμότητας  $C/N$

και μαγνητικής επιδεκτικότητας  $\chi/N$ . Τα αποτελέσματα από το  $U_L$  method είναι κάπου στο ενδιάμεσο. Η μέθοδος ειδικής θερμότητας  $C/N$  φαίνεται να έχει μεγαλύτερα σφάλματα από αυτή της μαγνητικής επιδεκτικότητας  $\chi/N$ . Τέλος, όσο μικραίνει το ποσοστό κατάληψης μεγαλώνει το σχετικό σφάλματα στον υπολογισμό της κρίσιμης, ιδιαίτερα από το 25% και κάτω.



Σχήμα 3.16: Οι κρίσιμες θερμοκρασίες σαν συνάρτηση της πιθανότητας κατάληψης μαγνητικών δοτών. Εκτιμημένες από τα διαγράμματα της ειδικής θερμότητας και της μαγνητικής επιδεκτικότητας μαζί με το σφάλμα τους. Συνοπτικό διάγραμμα όπου φαίνονται όλα τα μεγέθη μαζί και είναι μαζί και οι κρίσιμες που βρέθηκαν με την βοήθεια του συσσωρευτή 4ης τάξης για την μαγνήτιση ανά σπιν. Οι υπολογισμοί αφορούν fcc πλέγμα για διάφορα μεγέθη πλεγμάτων, με γραμμική διάσταση  $L = 4, 10, 16, 20, 24, 26$ .

### 3.1.5 Εκτίμηση πιθανότητας διήθησης



Σχήμα 3.17: Η ειδική θερμότητα ανά σπιν (αριστερά) και η μαγνητική επιδεκτικότητα ανά σπιν σαν (δεξιά) συνάρτηση της θερμοκρασίας σε fcc πλέγμα γραμμικής διάστασης  $L = 26$  (70304), με ποσοστά κατάληψης  $p = 0.23$  (23%),  $p = 0.21$  (21%),  $p = 0.20$  (20%).

Όπως αναφέρθηκε στην βιβλιογραφία υπάρχει κρίσιμο ποσοστό κατάληψης κάτω από το οποίο δεν έχουμε σιδηρομαγνητικό υλικό και για το πλέγμα fcc, λαμβάνοντας υπόψιν μόνο την αλληλεπίδραση πρώτων γειτόνων, το ποσοστό αυτό κατάληψης (site percolation threshold of fcc lattice) είναι 0.198 19.8% [28]. Εδώ φαίνονται τα ποσοστά κατάληψης  $p = 0.23$  (23%),  $p = 0.21$  (21%),  $p = 0.20$  (20%) για  $L = 26$  (70304) με αναπαράσταση θερμοδυναμικών μεγεθών ειδικής θερμότητας ανά σπιν και μαγνητικής επιδεκτικότητας ανά σπιν, εκ των οποίων το  $p = 0.21$  (21%) έχει

ήδη φανεί στα προηγούμενα διαγράμματα. Φαίνεται καθαρά στο 23% η μυτερή κορυφή της ειδικής θερμότητας που όσο πλησιάζουμε το 20% παύει να είναι μυτερή και να τείνει στο 1 για  $T = 0$  J/k<sub>B</sub>. Πιο καθαρά όμως φαίνεται στην μαγνητική επιδεκτικότητα που για μόλις 20% χάνεται η κορυφή. Η μέθοδος προσέγγισης μας δεν είναι σε θέση να προσδιορίσει με ακρίβεια το κρίσιμο ποσοστό κατάληψης ωστόσο φαίνεται να συμφωνούν τα αποτελέσματα μας με την βιβλιογραφία.

### 3.1.6 Εκτίμηση κρίσιμων εκθετών για πλήρως κατειλημμένο πλέγμα

Η εκτίμηση των κρίσιμων εκθετών μπορεί να γίνει χρησιμοποιώντας τις σχέσεις κλιμάκωσης πεπερασμένου μεγέθους.

$$m = L^{-\beta/\nu} \tilde{m}(L/\xi) = L^{-\beta/\nu} \tilde{m}(L^{1/\nu}t) \quad (3.6)$$

$$\chi/N = L^{\gamma/\nu} \tilde{\chi}(L/\xi) = L^{\gamma/\nu} \tilde{\chi}(L^{1/\nu}t) \quad (3.7)$$

$$c = L^{-\alpha/\nu} \tilde{C}(L/\xi) = L^{-\alpha/\nu} \tilde{C}(L^{1/\nu}t) \quad (3.8)$$

Λογαριθμίζοντας τις σχέσεις

$$\log m = -\frac{\beta}{\nu} \log L + \log \tilde{m}(L^{1/\nu}t) \quad (3.9)$$

$$\log \chi/N = \frac{\gamma}{\nu} \log L + \log \tilde{\chi}(L^{1/\nu}t) \quad (3.10)$$

$$\log c = -\frac{\alpha}{\nu} \log L + \log \tilde{c}(L^{1/\nu}t) \quad (3.11)$$

Επίσης, όπως έχειδειχθεί [31], [41] η κλιμάκωση του μεγίστου της κλίσεως του συσσωρευτή τέταρτης τάξης μπορεί να δώσει μια εκτίμηση για τον εκθέτη  $\nu$ .

$$\log \left. \frac{dU_L}{d\beta} \right|_{max} = -\frac{1}{\nu} \log L + \log \tilde{f}(L^{1/\nu}t) \quad (3.12)$$

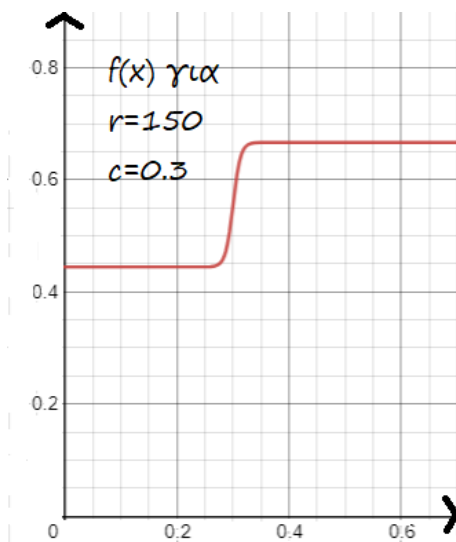
Επειδή οι συναρτήσεις  $\tilde{m}(L^{1/\nu}t)$ ,  $\tilde{\chi}(L^{1/\nu}t)$ ,  $\tilde{C}(L^{1/\nu}t)$  και  $\tilde{f}(L^{1/\nu}t)$  είναι σχεδόν ανεξάρτητες του μεγέθους του πλέγματος και άρα ανεξάρτητες της γραμμικής διάστασης του πλέγματος  $L$  τότε για συγκεκριμένη σταθερή θερμοκρασία οι ποσότητες  $\log m$ ,  $\log \chi/N$ ,  $\log C$  και  $\log \left. \frac{dU_L}{d\beta} \right|_{max}$  συναρτήσει του  $\log L$  είναι γραμμικές με κλίσεις  $-\frac{\beta}{\nu}$ ,  $\frac{\gamma}{\nu}$ ,  $\frac{\alpha}{\nu}$  και  $\frac{1}{\nu}$  αντίστοιχα.

Όπως φαίνεται για τον υπολογισμό των υπόλοιπων κρίσιμων εκθετών είναι σημαντικό αρχικά να προσδιοριστεί ο κρίσιμος εκθέτης  $\nu$ , για τον οποίο χρειαζόμαστε την κλιμάκωση της παραγώγου του συσσωρευτή τέταρτης τάξης για την μαγνήτιση ανά σπιν. Επειδή η εκτίμηση της παραγώγου για μια ποσότητα για την οποία δεν έχουμε την αναλυτική σχέση της σαν συνάρτηση της θερμοκρασίας της είναι δύσκολο να γίνει χωρίς μεγάλα υπολογιστικά σφάλματα, είναι εμφανές πως

χρειάζεται μια συνάρτηση ικανή να περιγράψει την εξάρτηση του συσσωρευτή  $U_L$  από την αντίστροφη θερμοκρασία  $x = \beta = \frac{1}{k_B T}$ . Επειδή η συνάρτηση αυτή φαίνεται να είναι σαν σκαλοπάτι που από την μια μεριά τείνει στο  $2/3$  και από την άλλη στο  $4/9$  μια μορφή συνάρτησης κατάλληλη να περιγράψει την εξάρτηση είναι η εξής

$$f(x) = \frac{ae^{cx} + be^{rx}}{e^{cx} + e^{rx}} \quad (3.13)$$

Η οποία έχει όρια όταν  $x \rightarrow -\infty$  τότε  $\lim_{x \rightarrow -\infty} f(x) = a = 4/9$  και όταν  $x \rightarrow +\infty$  τότε  $\lim_{x \rightarrow +\infty} f(x) = b = 2/3$ . Η κλίση της ελέγχεται από το  $r$  και η μετατόπιση στον οριζόντιο άξονα από το  $c$ .



Σχήμα 3.18: Η συνάρτηση  $f(x)$  ενδεικτικά για  $r = 150$ ,  $c = 0.3$ .

Υπολογίζοντας την πρώτη και δεύτερη παράγωγο της  $f(x)$

$$f'(x) = \frac{(b-a)re^{rx}e^{cx}}{(e^{cx} + e^{rx})^2} \quad (3.14)$$

$$f''(x) = \frac{(b-a)r^2e^{rx}e^{cx}[(e^{cx} + e^{rx}) - 2e^{rx}]}{(e^{cx} + e^{rx})^3} \quad (3.15)$$

Για να βρούμε το ακρότατο της πρώτης παραγώγου πρέπει να μηδενίζεται η δεύτερη παράγωγος

$$(b-a)r^2e^{rx}e^{cx}[(e^{cx} + e^{rx}) - 2e^{rx}] = 0 \quad (3.16)$$

$$(e^{cx} + e^{rx}) = 2e^{rx} \quad (3.17)$$

$$x = c \quad (3.18)$$

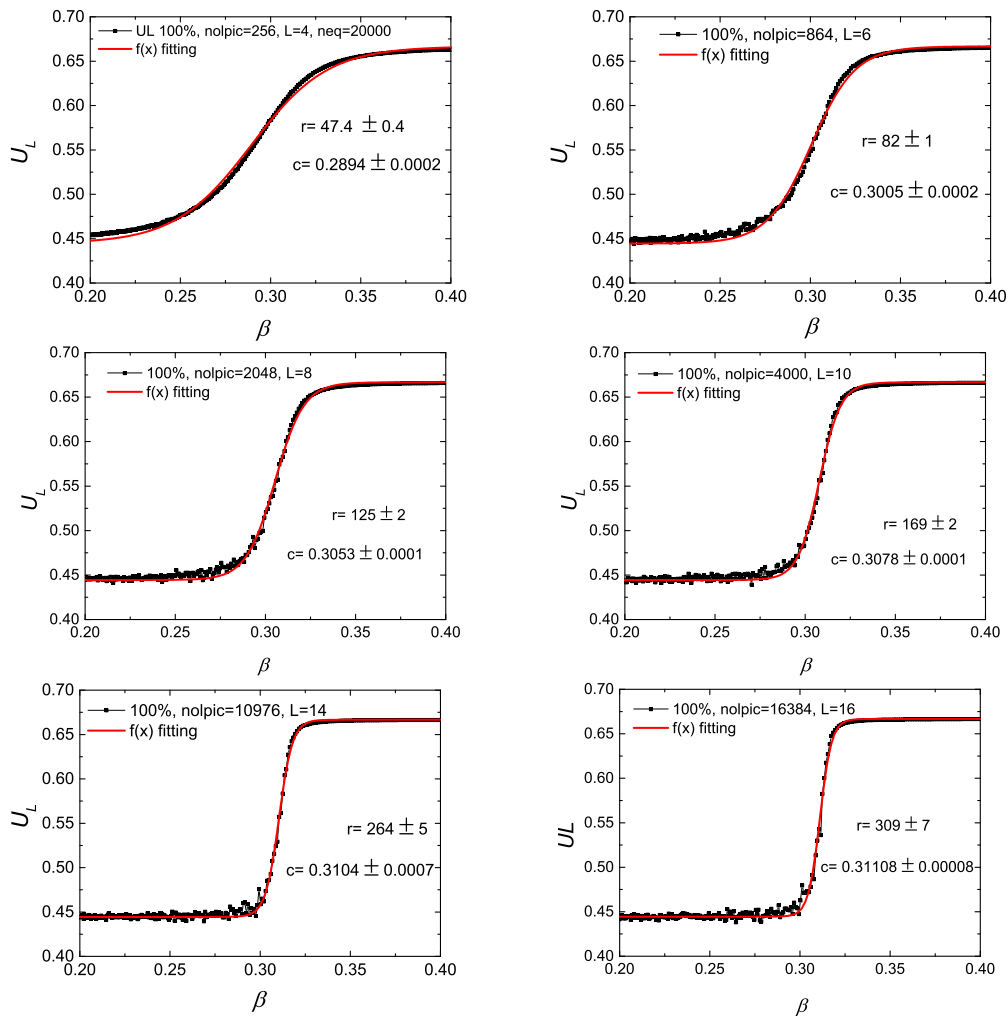


Και η τιμή της συνάρτησης και της πρώτης παραγώγου όταν  $x = c$  είναι

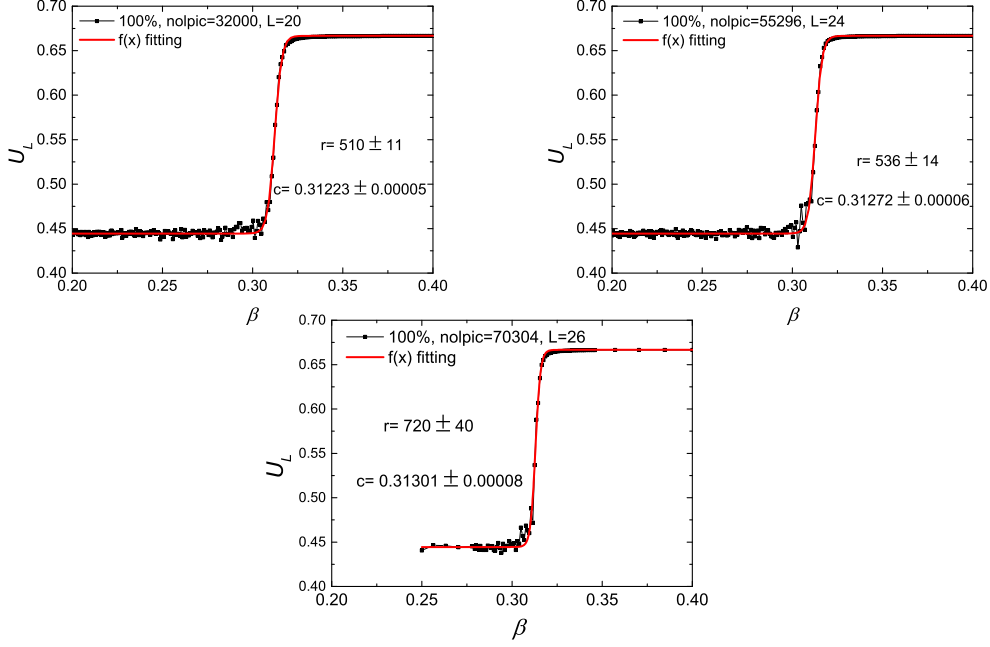
$$f(c) = \frac{a + b}{2} = \frac{5}{9} \quad (3.19)$$

$$f'(c) = \frac{(b - a)r}{4} = \frac{2r}{36} \quad (3.20)$$

Όπως φαίνεται η παράμετρος  $r$  καθορίζει της μέγιστη παράγωγο του  $U_L$  σε κάθε περίπτωση. Υπολογίζοντας με προσομοίωση Monte Carlo τους συσσωρευτές τέταρτης τάξης για την μαγνήτιση ανά σπιν σαν συνάρτηση της αντίστροφης θερμοκρασίας  $\beta = \frac{1}{k_B T} = \frac{1}{T}$  ( $k_B = 1$ ) και κάνοντας την προσαρμογή της  $f(x)$  στις γραφικές παραστάσεις του  $U_L(\beta)$  μπορούμε να εκτιμήσουμε το  $r$ . Γνωρίζοντας το  $r$  υπολογίζεται η μέγιστη παράγωγος του  $U_L$  ως προς  $\beta$ .



Σχήμα 3.19: Ο συσσωρευτής 4ης τάξης για την μαγνήτιση ανά σπιν σαν συνάρτηση της αντίστροφης θερμοκρασίας  $U_L(\beta)$ . Έχει γίνει προσαρμογή στην συνάρτηση  $f(x)$  ώστε να προσδιοριστεί το  $r$ .



Σχήμα 3.20: Ο συσσωρευτής 4ης τάξης για την μαγνήτιση ανά σπιν σαν συνάρτηση της αντίστροφης θερμοκρασίας  $U_L(\beta)$ . Έχει γίνει προσαρμογή στην συνάρτηση  $f(x)$  ώστε να προσδιοριστεί το  $r$ .

Έπειτα για κάθε  $L$  υπολογίζεται η μέγιστη παράγωγος του  $f(x)$  και βρίσκοντας τους λογαρίθμους της μέγιστης παραγωγού του  $U_L$  ( $\log \max_{\text{der}}$ ) και τον λογάριθμο του  $L$  ( $\log L$ ), ζωγραφίζουμε το διάγραμμα και να βρούμε από την κλίση της ευθείας το  $1/\nu$ . Η κλίση προκύπτει  $1/\nu = 1.426 \pm 0.039$  και άρα το  $\nu = 0.701 \pm 0.019$

Δεδομένου ότι ισχύουν οι σχέσεις,

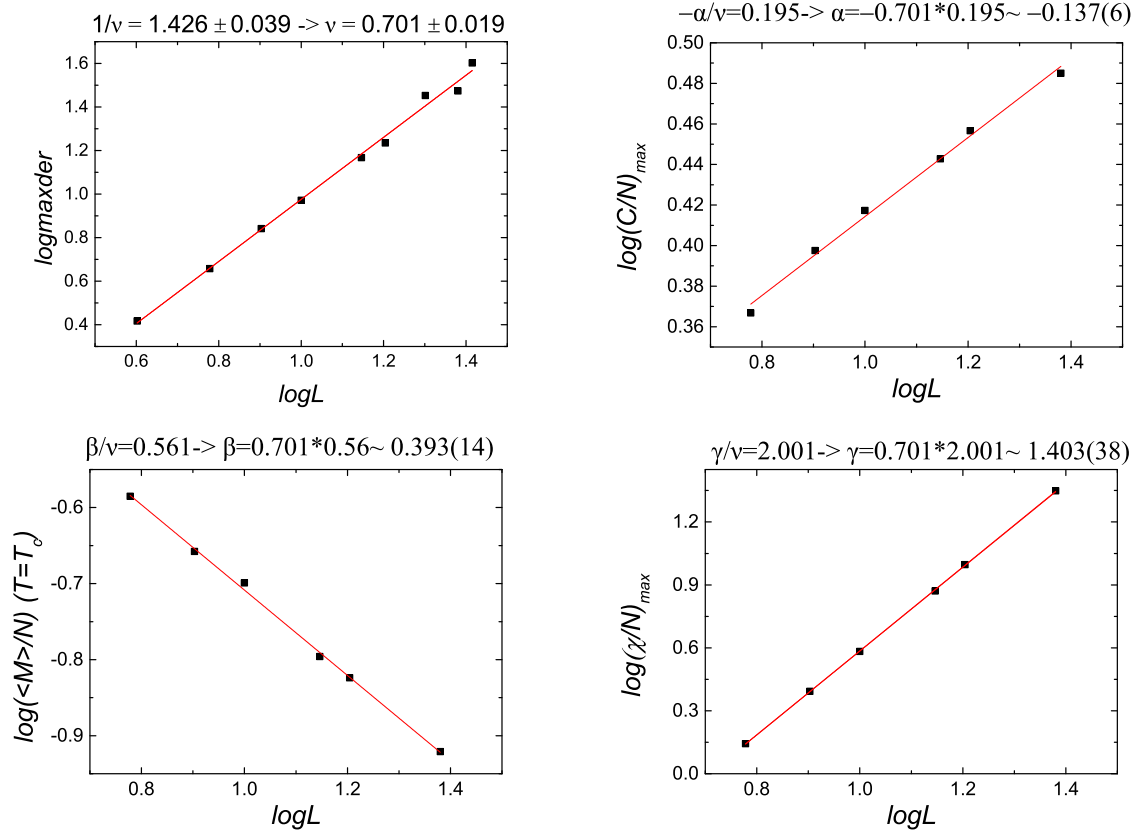
$$\log m = -\frac{\beta}{\nu} \log L + \log \tilde{m}(L^{1/\nu}t) \quad (3.21)$$

$$\log \chi/N = \frac{\gamma}{\nu} \log L + \log \tilde{\chi}(L^{1/\nu}t) \quad (3.22)$$

$$\log c = -\frac{\alpha}{\nu} \log L + \log \tilde{c}(L^{1/\nu}t) \quad (3.23)$$

αν στην κρίσιμη θερμοκρασία πάρουμε την τιμή της μαγνήτισης ανά σπιν και ζωγραφίσουμε τον λογάριθμο της  $\log m$  σαν συνάρτηση του  $\log L$ , θα πάρουμε μια ευθεία με κλίση  $-\frac{\beta}{\nu}$ , από όπου μπορεί να προσδιοριστεί ο κρίσιμος εκθέτης  $\beta$ . Επίσης το ίδιο ισχύει για την μέγιστη τιμή της ειδικής θερμότητας ανά σπιν σαν συνάρτηση του  $\log L$ , μόνο που τότε η κλίση είναι  $-\frac{\alpha}{\nu}$  και από εκεί μπορεί να προσδιοριστεί το  $\alpha$ . Τέλος, κάνουμε το ίδιο και για την μέγιστη τιμή της μαγνητικής επιδεκτικότητας σαν συνάρτηση του  $\log L$  και τότε η κλίση είναι  $\frac{\gamma}{\nu}$  και από εκεί μπορεί να προσδιοριστεί το  $\gamma$ . Έτσι από τα παρακάτω διαγράμματα προσδιορίζονται οι κρίσιμοι εκθέτες  $\beta$ ,

$\alpha$  και  $\gamma$ . Αξίζει να σχολιαστεί πως στον προσδιορισμό των  $\alpha$  και  $\gamma$  δεν χρησιμοποιούμε την κρίσιμη θερμοκρασία απλά την μέγιστη τιμή των αντίστοιχων θερμοδυναμικών ποσοτήτων. Όμως στην περίπτωση του  $\beta$  η ακριβής εκτίμηση της κρίσιμης θερμοκρασίας για κάθε  $L$  είναι σημαντική για τον προσδιορισμό την τιμής την μαγνήτισης ανά σπιν στο κρίσιμο σημείο. Σε αυτή την περίπτωση η εκτίμηση επηρεάζεται και από το γεγονός η εκτίμηση του  $T_c$  ενέχει κάποιο σφάλμα.



Σχήμα 3.21: Οι λογάριθμοι των ποσοτήτων του μέγιστου της παραγώγου του συσσωρευτή τέταρτης τάξης για την μαγνήτιση ανά σπιν, της ειδικής θερμότητας ανά σπιν, της μαγνήτισης ανά σπιν και της μαγνητικής επιδεκτικότητας ανά σπιν στην κρίσιμη θερμοκρασία σαν συνάρτηση του  $\log L$ . Από την κλίση των ευθειών αυτών προκύπτουν οι κρίσιμοι εκθέτες.

Οι κρίσιμοι εκθέτες για την περίπτωση των πρώτων γειτόνων προκύπτουν

$\alpha$ ( $\delta\alpha$ )	$\beta$ ( $\delta\beta$ )	$\gamma$ ( $\delta\gamma$ )	$\nu$ ( $\delta\nu$ )
-0.137(6)	0.393(14)	1.403(38)	0.701(19)

Οι εκθέτες της βιβλιογραφίας sc, bcc, fcc [32], [43] είναι προσδιορισμένοι με μέθοδο ιστογράμματος και της επανάκανονικοποίησης αντίστοιχα και οι δύο είναι πιο ακριβείς. Επίσης και τα δύο

Εκθέτης	παρούσα εργασία	sc, bcc, fcc [32]	[43]	fcc [32]	[44]
$\alpha(\delta\alpha)$	-0.137(6)	-0.117(7)	-0.115(9)	-0.125(16)	-0.16(3)
$\beta(\delta\beta)$	0.393(14)	0.3624(28)	0.3645(25)	0.362(11)	0.38(2)
$\gamma(\delta\gamma)$	1.403(38)	1.391(5)	1.386(4)	1.400(14)	1.40(3)
$\nu(\delta\nu)$	0.701(19)	0.7056(20)	0.705(3)	0.708(5)	0.72(1)

αφορούν τριδιάστατα πλέγματα όχι συγκεκριμένα fcc και συγκρίνονται με τα αποτελέσματα μας για πλέγμα fcc στα πλαίσια της οικουμενικότητας. Δεδομένου ότι οι υπολογισμοί μας έγιναν για fcc πλέγματα μπορούμε να συγκρίνουμε και με τα αποτελέσματα τις βιβλιογραφίας για fcc πλέγμα. Βλέποντας την σύγκριση με τα δεδομένα φαίνεται στα πλαίσια των σφαλμάτων να συμφωνούν και με την μέθοδο ιστογράμματος fcc [32] και με την μέθοδο ανάπτυξης σε σειρές [44].

## 3.2 Πλέγμα fcc με δεύτερους γείτονες

Έπειτα μελετάται το πλέγμα fcc λαμβάνοντας υπόψιν την αλληλεπίδραση πρώτων και δεύτερων γειτόνων. Στο πλέγμα αυτό μειώνεται το ποσοστό μαγνητικών προσμίξεων σταδιακά. Συγκεκριμένα, έχοντας προσθέσει μαγνητικές προσμίξεις σε ποσοστά κατάληψης πλέγματος  $p = 1$  (100%),  $p = 0.5$  (50%),  $p = 0.25$  (25%),  $p = 0.15$  (21%) και  $p = 0.125$  (12.5%). Σύμφωνα με την βιβλιογραφία το κρίσιμο ποσοστό κατάληψης, κάτω από το οποίο δεν έχουμε σιδηρομαγνητικό υλικό, για το πλέγμα fcc, λαμβάνοντας υπόψιν την αλληλεπίδραση πρώτων και δεύτερων γειτόνων, είναι 0.136 13.6% [45].

Το ολοκλήρωμα ανταλλαγής πρώτων γειτόνων θεωρήθηκε  $J_1$  μονάδα. Τα αποτελέσματα παρουσιάζονται για το ολοκλήρωμα ανταλλαγής  $J_2$  δεύτερων γειτόνων να φθίνει σαν i)  $1/r$ , όπου  $r$  η απόσταση πρώτων γειτόνων), άρα  $J_2 = \sqrt{2}/2$  και ii)  $1/r^2$ , άρα  $J_2 = 1/2$ .

Οι προσομοιώσεις Monte Carlo έγιναν στις θερμοκρασιακές περιοχές: i)  $T \in [0.01, 5.0]$  με βήμα εκατοστού για το ποσοστό κατάληψης 100% στο μέγεθος  $L = 10$  και  $T \in [0.1, 5.0]$  με βήμα δέκατου για το ποσοστό κατάληψης 100% στο μέγεθος  $L = 16$ , ii)  $T \in [0.01, 4.0]$  με βήμα εκατοστού για το ποσοστό κατάληψης 50% iii)  $T \in [0.01, 2.0]$  με βήμα εκατοστού για το ποσοστό κατάληψης 25%, iv)  $T \in [0.001, 1]$  με βήμα χιλιοστού για το ποσοστό κατάληψης 15% και v)  $T \in [0.0001, 0.5]$  με βήμα δεκάκις χιλιοστού για το ποσοστό κατάληψης 12.5%. Υπολογίστηκαν τα θερμοδυναμικά μεγέθη για δύο μεγέθη πλεγμάτων, με γραμμική διάσταση  $L = 10, 16$ . Αυτά ισχύουν και την περίπτωση που το ολοκλήρωμα ανταλλαγής  $J_2$  δεύτερων γειτόνων να φθίνει σαν  $1/r$  αλλά και σαν  $1/r^2$ , στις ίδιες θερμοκρασιακές περιοχές και με μοναδική εξαίρεση το ποσοστό κατάληψης 100% στην περίπτωση που φθίνει σαν  $1/r^2$  η θερμοκρασιακή περιοχή είναι  $T \in [0.01, 4.8]$  ή  $T \in [0.1, 4.8]$  αντίστοιχα για  $L = 10$  και  $L = 16$  με τα ίδια βήματα.

Το σύστημα αφέθηκε να ισορροπήσει για 2000 sweeps και για τα δύο μεγέθη πλεγμάτων με γραμμική διάσταση  $L = 10, 16$ . Η χρονοσειρά έχει συνολικά χρονικά βήματα  $\mathcal{N} = n_{av} = 200.000$  Έτσι υπολογίζονται τα θερμοδυναμικά μεγέθη που παρουσιάζονται στην συνέχεια.

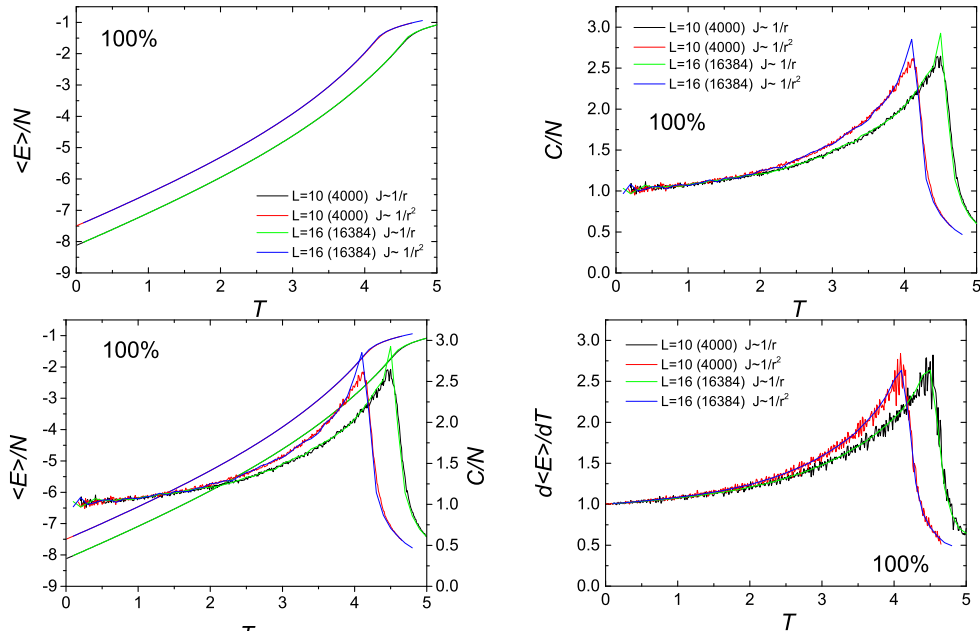
### 3.2.1 Η μέση ενέργεια και η ειδική θερμότητα

Ακολουθούν τα αποτελέσματα για την μέση ενέργεια ανά σπιν καθώς και την ειδική θερμότητα ανά σπιν για κάθε ποσοστό κατάληψης.

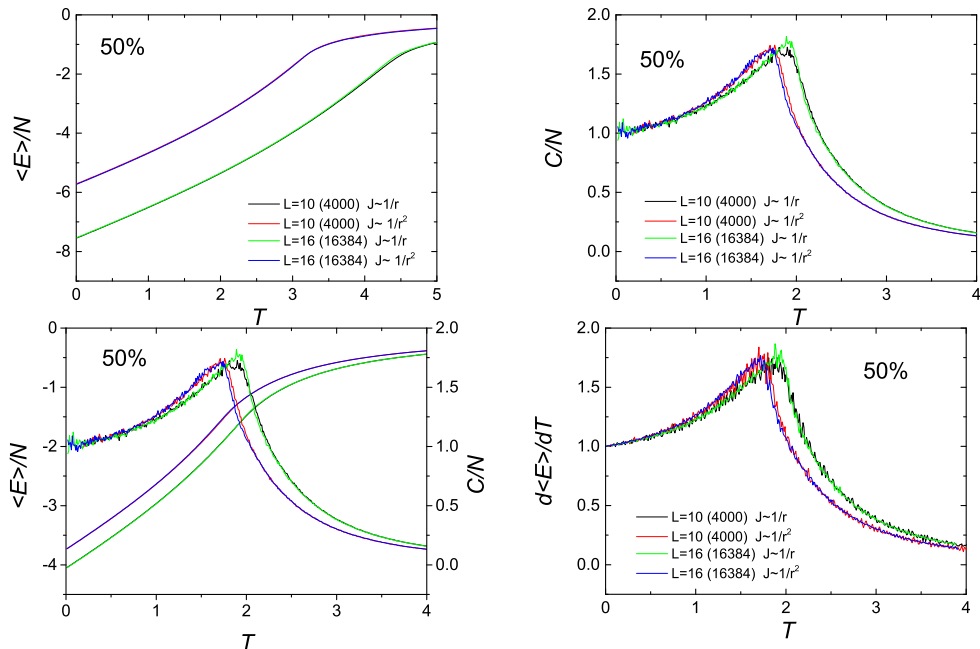
Η κόκκινη με τη μπλε γραμμή <sup>1</sup> καθώς και η μαύρη με την πράσινη <sup>2</sup> για τα ποσοστά 100% και 50% σχεδόν ταυτίζονται για διαφορετικά  $L$  και οι μέσες ενέργειες ανά σπιν και οι ειδικές θερμότητες ανά σπιν. Στην περίπτωση του 25% οι μέσες ενέργειες διαφέρουν λίγο ενώ οι κορυφές της ειδικής θερμότητας σχεδόν ταυτίζονται. Στην περίπτωση του 15% οι μέσες ενέργειες πάλι διαφέρουν λίγο ενώ οι κορυφές της ειδικής θερμότητας σχεδόν ταυτίζονται για την περίπτωση του  $1/r$ . Οι κορυφές της ειδικής θερμότητας ανά σπιν στην περίπτωση του  $J$  φθίνοντος σαν  $1/r$  είναι

<sup>1</sup>που αφορούν την περίπτωση που το  $J_2$  φθίνει σαν  $1/r^2$

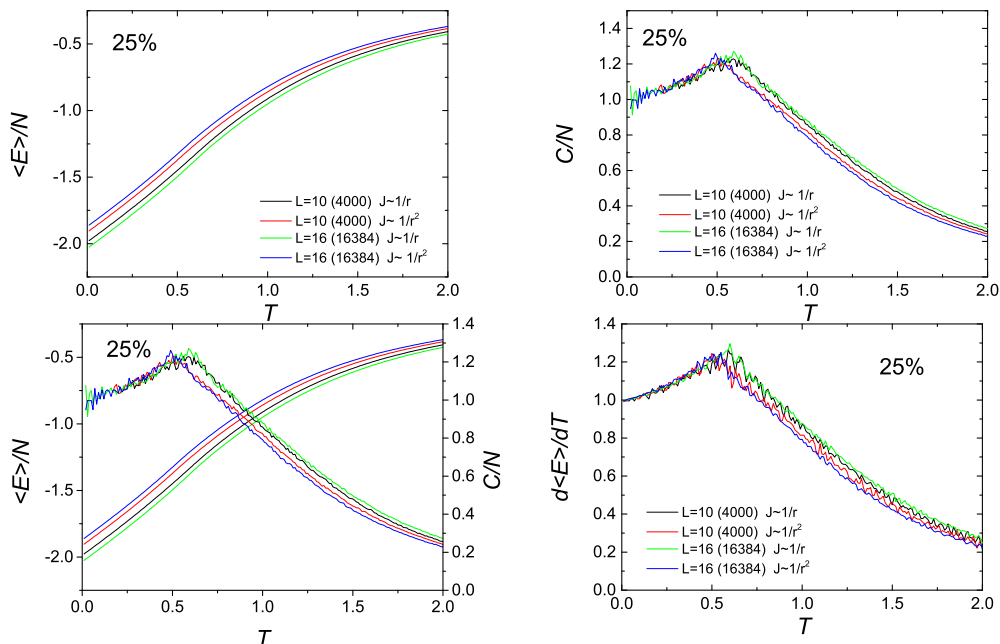
<sup>2</sup>που αφορούν την περίπτωση που το  $J_2$  φθίνει σαν  $1/r^2$



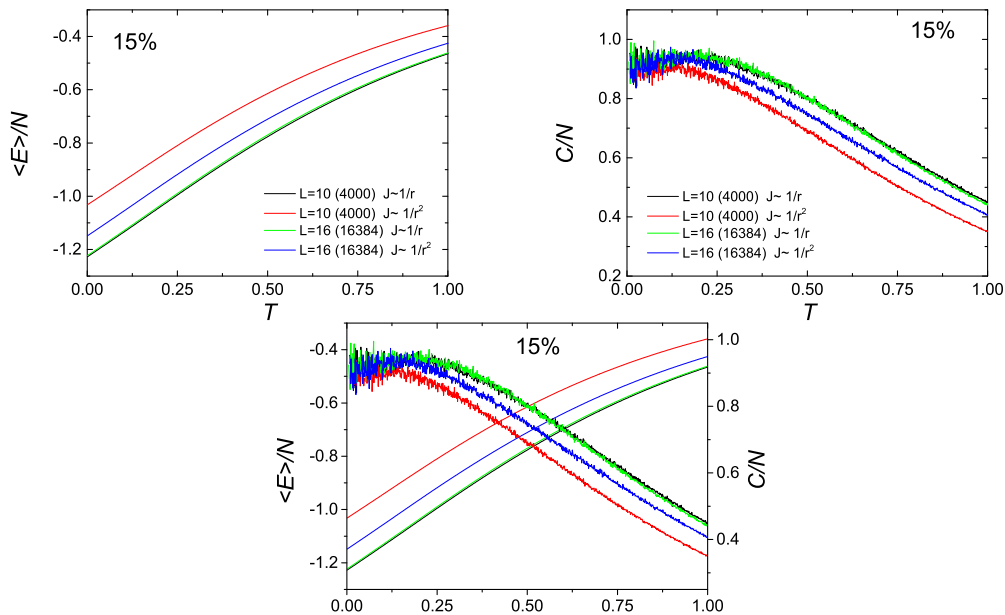
Σχήμα 3.22: Μέση ενέργεια ανά σπιν, η ειδική θερμότητα ανά σπιν ξεχωριστά και σε κοινό διάγραμμα και η παράγωγος της ενέργειας σαν συνάρτηση της θερμοκρασίας για διάφορα μεγέθη πλεγμάτων, με γραμμική διάσταση  $L = 10, 16$  για ποσοστό κατάληψης μαγνητικών δοτών 100%. Τα ολοκληρώματα ανταλλαγής για δεύτερους γείτονες έχουν υποτεθεί πως πέφτουν είτε σαν  $1/r$  είτε σαν  $1/r^2$ .



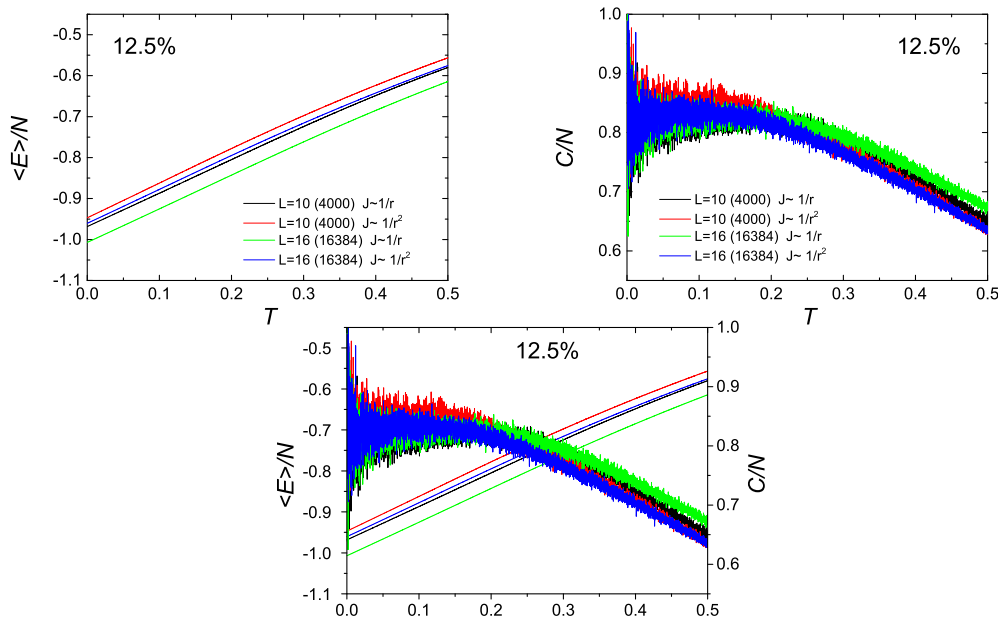
Σχήμα 3.23: Μέση ενέργεια ανά σπιν, η ειδική θερμότητα ανά σπιν ξεχωριστά και σε κοινό διάγραμμα και η παράγωγος της ενέργειας σαν συνάρτηση της θερμοκρασίας για διάφορα μεγέθη πλεγμάτων, με γραμμική διάσταση  $L = 10, 16$  για ποσοστό κατάληψης μαγνητικών δοτών 50%. Τα ολοκληρώματα ανταλλαγής για δεύτερους γείτονες έχουν υποτεθεί πως πέφτουν είτε σαν  $1/r$  είτε σαν  $1/r^2$ .



Σχήμα 3.24: Μέση ενέργεια ανά σπιν, η ειδική θερμότητα ανά σπιν ξεχωριστά και σε κοινό διάγραμμα και η παράγωγος της ενέργειας σαν συνάρτηση της θερμοκρασίας για διάφορα μεγέθη πλεγμάτων, με γραμμική διάσταση  $L = 10, 16$  για ποσοστό κατάληψης μαγνητικών δοτών 25%. Τα ολοκληρώματα ανταλλαγής για δεύτερους γείτονες έχουν υποτεθεί πως πέφτουν είτε σαν  $1/r$  είτε σαν  $1/r^2$ .



Σχήμα 3.25: Μέση ενέργεια ανά σπιν, η ειδική θερμότητα ανά σπιν ξεχωριστά και σε κοινό διάγραμμα σαν συνάρτηση της θερμοκρασίας για διάφορα μεγέθη πλεγμάτων, με γραμμική διάσταση  $L = 10, 16$  για ποσοστό κατάληψης μαγνητικών δοτών 15%. Τα ολοκληρώματα ανταλλαγής για δεύτερους γείτονες έχουν υποτεθεί πως πέφτουν είτε σαν  $1/r$  είτε σαν  $1/r^2$ .



Σχήμα 3.26: Μέση ενέργεια ανά σπιν και η ειδική θερμότητα ανά σπιν ξεχωριστά και σε κοινό διάγραμμα σαν συνάρτηση της θερμοκρασίας για διάφορα μεγέθη πλεγμάτων, με γραμμική διάσταση  $L = 10, 16$  για ποσοστό κατάληψης μαγνητικών δοτών 12.5%. Τα ολοκληρώματα ανταλλαγής για δεύτερους γείτονες έχουν υποθεθεί πως πέφτουν είτε σαν  $1/r$  είτε σαν  $1/r^2$ .

ελαφρά ψηλότερα καθώς η μέγιστη κλίση της μέσης ενέργειας ανά σπιν είναι ελαφρά πιο απότομη τότε.

### 3.2.2 Η μαγνήτιση και η μαγνητική επιδεκτικότητα

Ακολουθούν τα αποτελέσματα για την μαγνήτιση ανά σπιν καθώς και την μαγνητική επιδεκτικότητα ανά σπιν για κάθε ποσοστό κατάληψης.

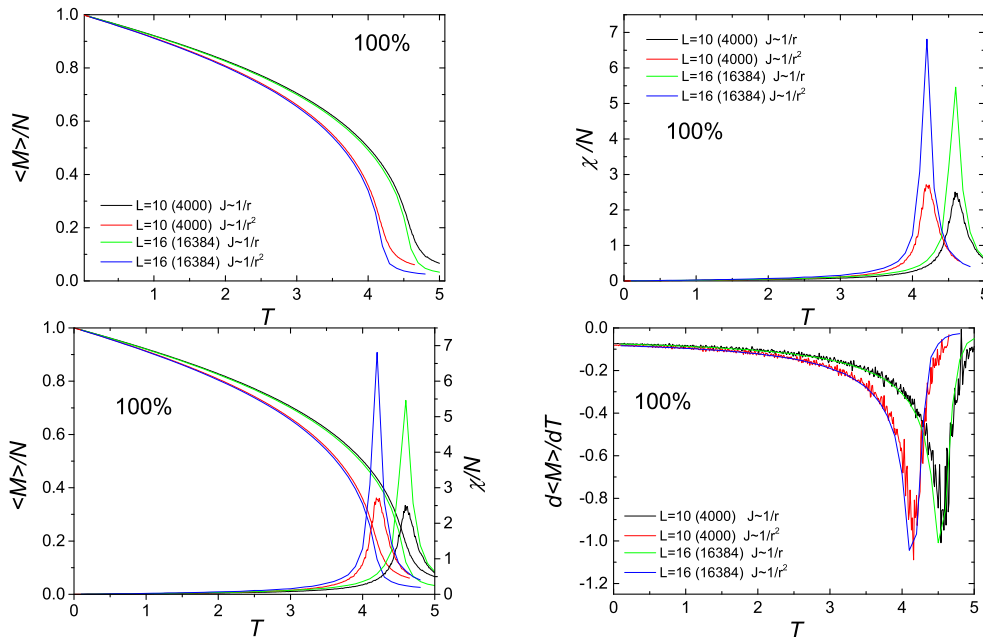
Στην περίπτωση της μαγνήτισης η κόκκινη και η μπλε γραμμή<sup>3</sup> καθώς και η μαύρη με την πράσινη<sup>4</sup> για τα όλα τα ποσοστά μηδενίζονται πιο απότομα για  $L$  μεγαλύτερο όμως παρουσιάζουν παρόμοια συμπεριφορά. Γι αυτό και οι κορυφές της μαγνητικής επιδεκτικότητας ανά σπιν για μεγαλύτερο  $L$  είναι ψηλότερες καθώς η κλίση σε αυτή την περίπτωση είναι πιο απότομη. Στην περίπτωση που το  $J_2$  φθίνει σαν  $1/r^2$  φαίνεται (ιδιαίτερα για μικρά  $L$ ) πως οι κορυφές είναι ελάχιστα ψηλότερες καθώς η μαγνήτιση στο κρίσιμο σημείο τότε έχει λίγο πιο απότομη κλίση.

Σχολιάζοντας την συνολική εικόνα και για την μέση ενέργεια ανά σπιν και την μαγνήτιση ανά

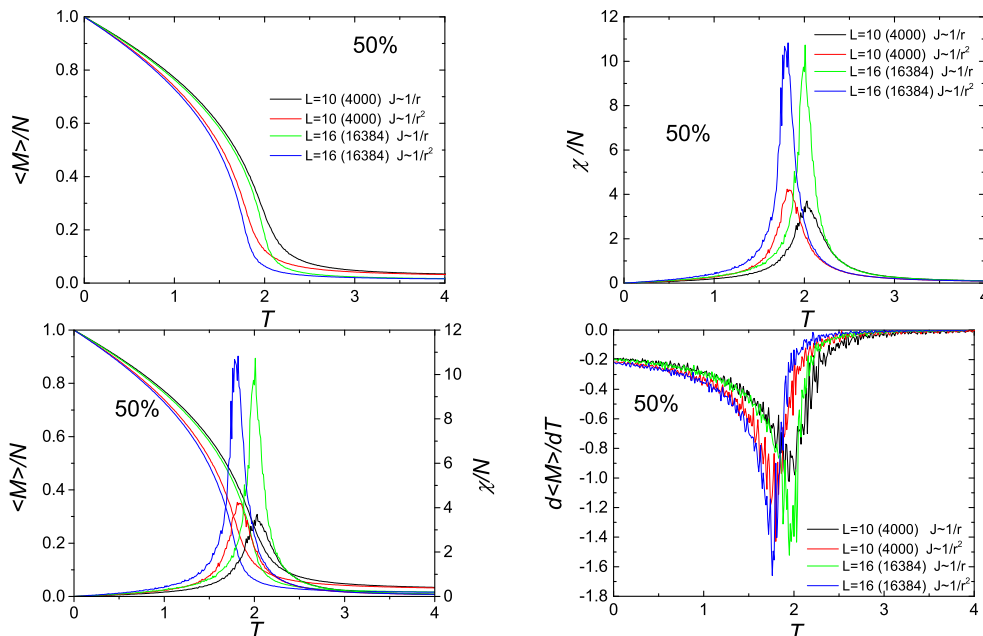
<sup>3</sup>που αφορούν την περίπτωση που το  $J_2$  φθίνει σαν  $1/r^2$

<sup>4</sup>που αφορούν την περίπτωση που το  $J_2$  φθίνει σαν  $1/r$

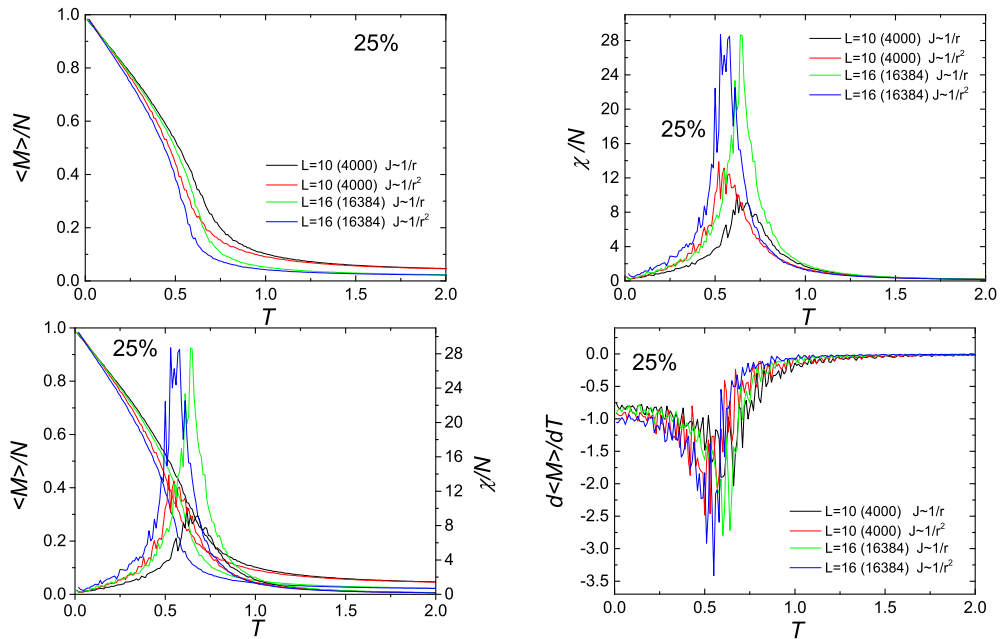




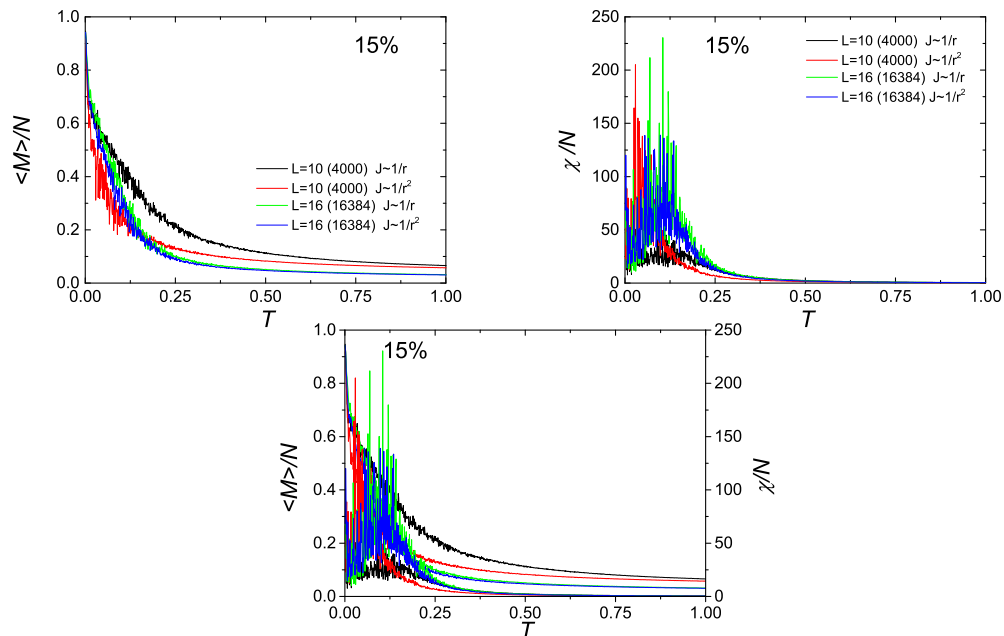
Σχήμα 3.27: Η μαγνήτιση ανά σπιν, η μαγνητική επιδεικτικότητα ανά σπιν ξεχωριστά και σε κοινό διάγραμμα και η παράγωγος της μαγνήτισης σαν συνάρτηση της θερμοκρασίας για διάφορα μεγέθη πλεγμάτων, με γραμμική διάσταση  $L = 10, 16$  για ποσοστό κατάληψης μαγνητικών δοτών 100%. Τα ολοκληρώματα ανταλλαγής για δεύτερους γείτονες έχουν υποτεθεί πως πέφτουν είτε σαν  $1/r$  είτε σαν  $1/r^2$ .



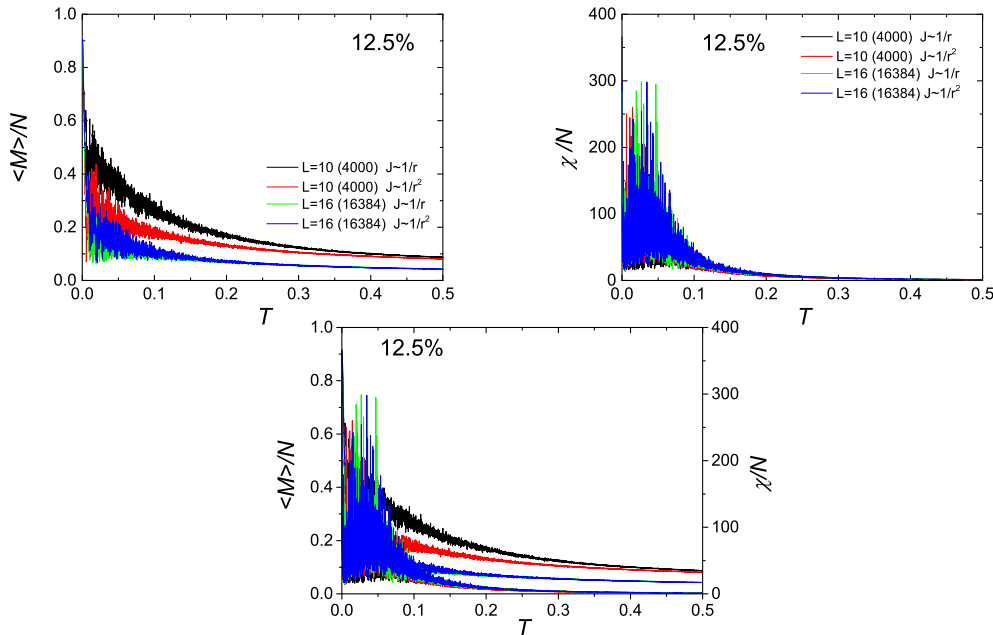
Σχήμα 3.28: Η μαγνήτιση ανά σπιν, η μαγνητική επιδεικτικότητα ανά σπιν ξεχωριστά και σε κοινό διάγραμμα και η παράγωγος της μαγνήτισης σαν συνάρτηση της θερμοκρασίας για διάφορα μεγέθη πλεγμάτων, με γραμμική διάσταση  $L = 10, 16$  για ποσοστό κατάληψης μαγνητικών δοτών 50%. Τα ολοκληρώματα ανταλλαγής για δεύτερους γείτονες έχουν υποτεθεί πως πέφτουν είτε σαν  $1/r$  είτε σαν  $1/r^2$ .



Σχήμα 3.29: Η μαγνήτιση ανά σπιν, η μαγνητική επιδεκτικότητα ανά σπιν ξεχωριστά και σε κοινό διάγραμμα και η παράγωγος της μαγνήτισης σαν συνάρτηση της θερμοκρασίας για διάφορα μεγέθη πλεγμάτων, με γραμμική διάσταση  $L = 10, 16$  για ποσοστό κατάληψης μαγνητικών δοτών 25%. Τα ολοκληρώματα ανταλλαγής για δεύτερους γείτονες έχουν υποτεθεί πως πέφτουν είτε σαν  $1/r$  είτε σαν  $1/r^2$ .



Σχήμα 3.30: Η μαγνήτιση ανά σπιν, η μαγνητική επιδεκτικότητα ανά σπιν ξεχωριστά και σε κοινό διάγραμμα σαν συνάρτηση της θερμοκρασίας για διάφορα μεγέθη πλεγμάτων, με γραμμική διάσταση  $L = 10, 16$  για ποσοστό κατάληψης μαγνητικών δοτών 15%. Τα ολοκληρώματα ανταλλαγής για δεύτερους γείτονες έχουν υποτεθεί πως πέφτουν είτε σαν  $1/r$  είτε σαν  $1/r^2$ .



Σχήμα 3.31: Η μαγνήτιση ανά σπιν και η μαγνητική επιδεκτικότητα ανά σπιν ξεχωριστά και σε κοινό διάγραμμα σαν συνάρτηση της θερμοκρασίας για διάφορα μεγέθη πλεγμάτων, με γραμμική διάσταση  $L = 10, 16$  για ποσοστό κατάληψης μαγνητικών δοτών 12.5%. Τα ολοκληρώματα ανταλλαγής για δεύτερους γείτονες έχουν υποθεθεί πως πέφτουν είτε σαν  $1/r$  είτε σαν  $1/r^2$ .

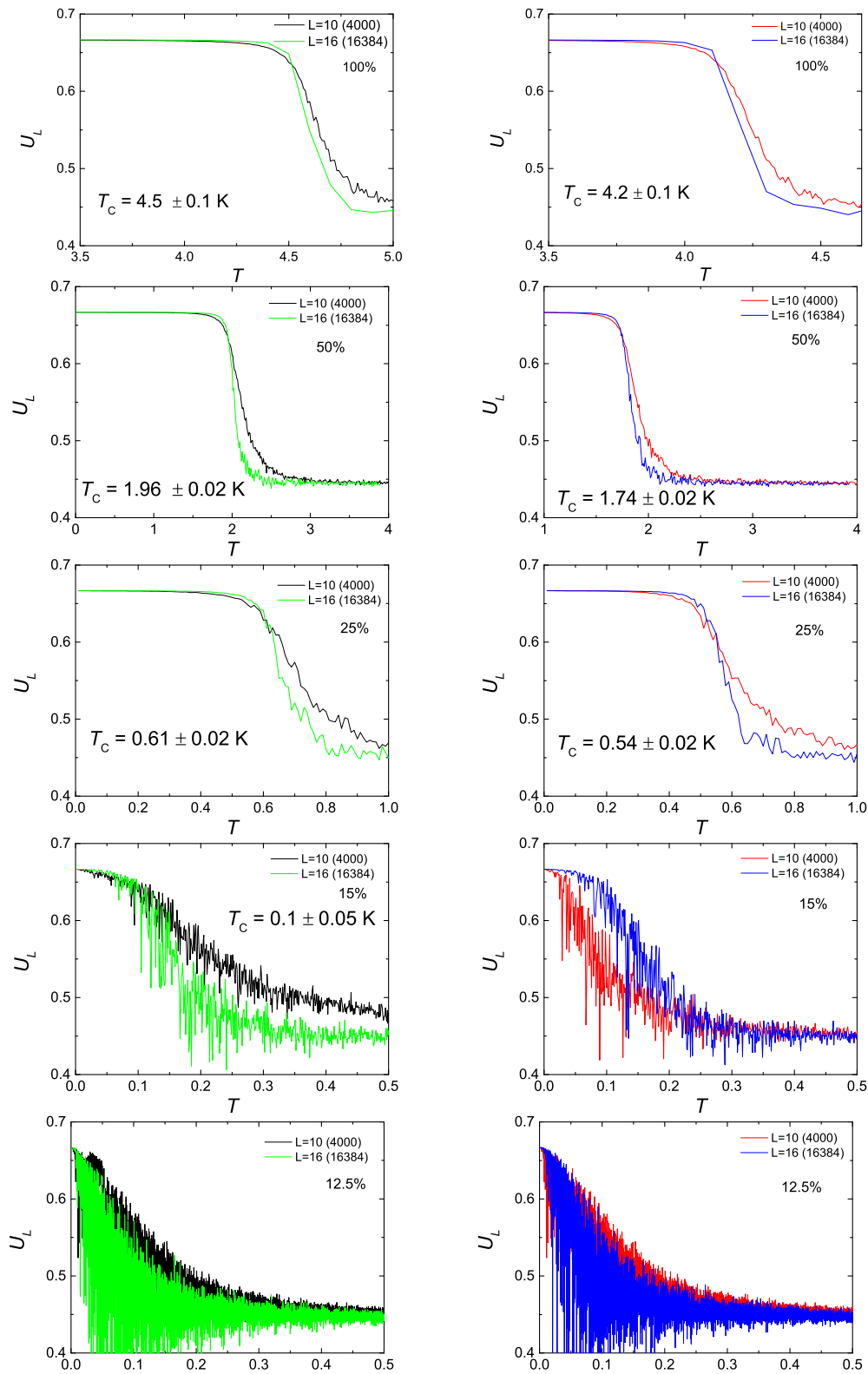
σπιν, όπως φαίνεται από τη μορφή των διαγραμμάτων, η ανάλυση είναι παρόμοια με εκείνη που έχει σχολιαστεί στην περίπτωση των πρώτων γειτόνων. Μέχρι και το 25% που δεν είναι στο όριο του κρίσιμου ποσοστού κατάληψης φαίνεται καθαρά πως το όριο της ειδικής θερμότητας για μηδενική θερμοκρασία είναι η μονάδα και η κορυφή της ειδικής θερμότητας παραμένει μυτερή. Επίσης, γίνεται λιγότερο μυτερή η κορυφή της ειδικής θερμότητας καθώς μικραίνει το ποσοστό κατάληψης και λιγότερο απότομη η μεταβολή στην κλίση της μέσης ενέργειας στο κρίσιμο σημείο. Για την μαγνήτιση όσο πιο μικρό είναι το ποσοστό κατάληψης τόσο μεγαλύτερη διαφορά στην κλιμάκωση εμφανίζουν μεταξύ τους τα  $L$ .

Οι ψευδοκρίσιμες φαίνονται ελαφρώς διαφορετικές για διαφορετικά  $J_2$ . Συγκεκριμένα στην περίπτωση που φθίνει σαν  $1/r^2$  παρουσιάζεται μικρότερη  $T_c$  και αυτό επιβεβαιώνεται σε όλες τις περιπτώσεις διαφορετικών ποσοστών κατάληψης. Δεδομένου πως η αλληλεπίδραση τότε είναι ασθενέστερη, η τάξη χάνεται πιο εύκολα, δηλαδή σε μικρότερη θερμοκρασία άρα το αποτέλεσμα είναι αναμενόμενο. Όσο μικραίνει το ποσοστό κατάληψης οι δύο κορυφές είναι όλο και πιο κοντά και άρα και οι κρίσιμες διαφέρουν λιγότερο.

### 3.2.3 Ο συσσωρευτής τέταρτης τάξης

Ακολουθούν τα αποτελέσματα για τον συσσωρευτή τέταρτης τάξης για την μαγνήτιση ανά σπιν για κάθε ποσοστό κατάληψης. Πάλι φαίνεται οι κρίσιμες να είναι ελαφρώς διαφορετικές για διαφορετικά  $J_2$ . Συγκεκριμένα στην περίπτωση που φθίνει σαν  $1/r^2$  παρουσιάζεται μικρότερη  $T_c$

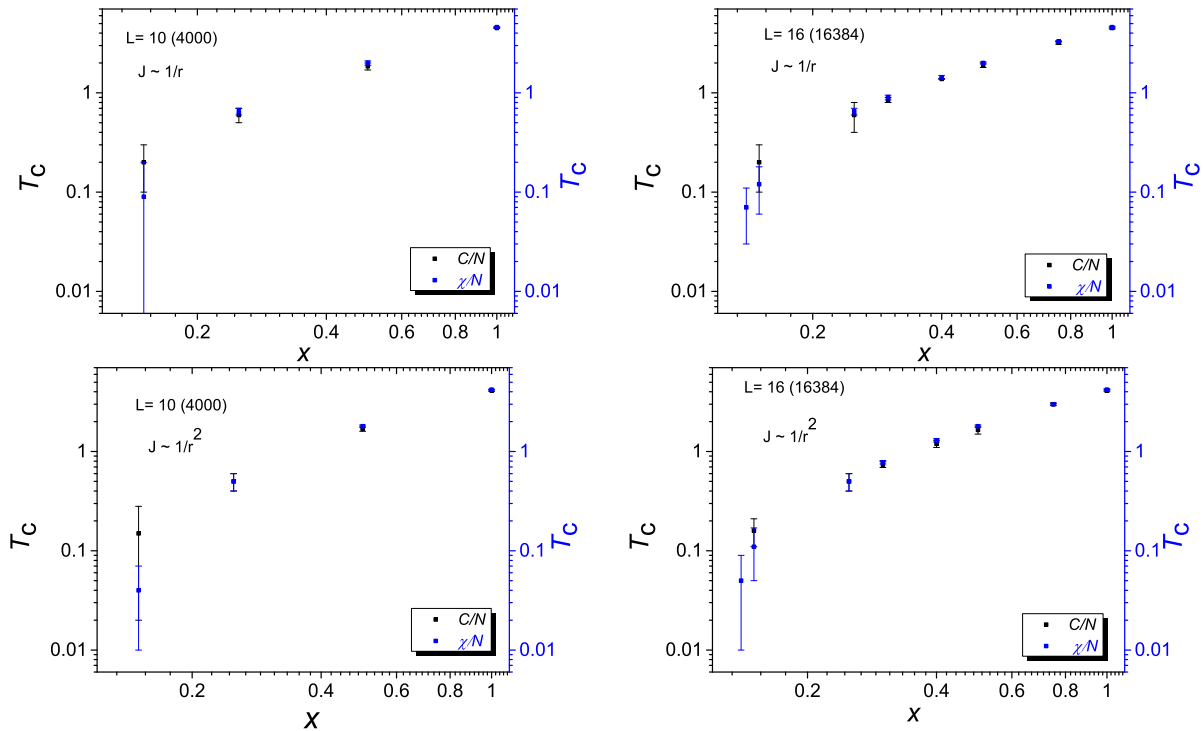
για όλα τα ποσοστά κατάληψης. Όσο μικραίνει το ποσοστό κατάληψης μαγνητικών προσμίξεων, αυξάνονται τα σφάλματα. Όταν τα ολοκληρώματα ανταλλαγής για δεύτερους γείτονες έχουν υποτεθεί πως πέφτουν είτε σαν  $1/r$  μέχρι το ποσοστό κατάληψης 15%, που είναι πάνω από την κρίσιμη πιθανότητα  $p_c = 13.6\%$ , μπορεί να γίνει εκτίμηση της κρίσιμης θερμοκρασίας ενώ στο ποσοστό κατάληψης 12.5% όχι. Όταν τα ολοκληρώματα ανταλλαγής για δεύτερους γείτονες πέφτουν σαν  $1/r^2$  μέχρι το ποσοστό κατάληψης 25% μπορεί να γίνει εκτίμηση της κρίσιμης θερμοκρασίας ενώ στο ποσοστό κατάληψης 15% και κάτω όχι. Ισχύουν τα σχόλια που συζητήθηκαν και για την περίπτωση πρώτων γειτόνων για τα όρια του συσσωρευτή σε μηδενική και άπειρη θερμοκρασία.



Σχήμα 3.32: Ο συσσωρευτής  $T$  τέταρτης τάξης σαν συνάρτηση της θερμοκρασίας για διάφορα μεγέθη πλεγμάτων, με γραμμική διάσταση  $L = 10, 16$ , με ποσοστά κατάληψης  $p = 0.100$  (100%),  $p = 0.50$  (50%),  $p = 0.25$  (25%),  $p = 0.15$  (15%) και  $p = 0.125$  (12.5%). Τα ολοκληρώματα ανταλλαγής για δεύτερους γείτονες έχουν υποτεθεί πως πέφτουν είτε σαν  $1/r$  (αριστερή στήλη) είτε σαν  $1/r^2$  (δεξιά στήλη).

### 3.2.4 Εκτίμηση κρίσιμων θερμοκρασιών

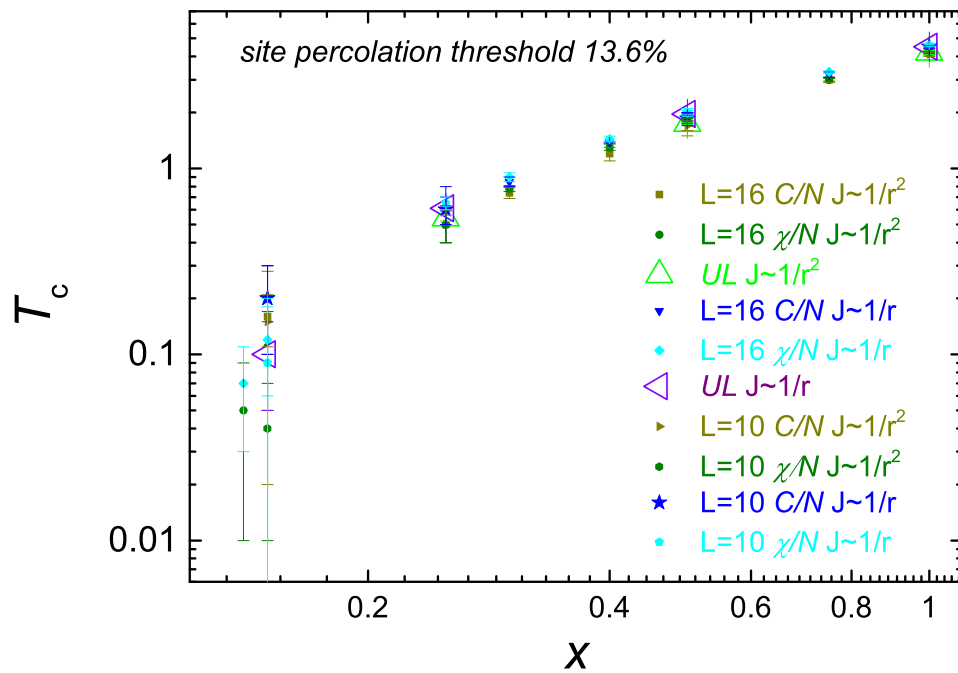
Παρουσιάζονται τα αποτελέσματα για την εκτίμηση των κρίσιμων θερμοκρασιών και ζωγραφίζονται σε λογαριθμικές κλίμακες οι κρίσιμες θερμοκρασίες σαν συνάρτηση της πιθανότητας κατάληψης μαγνητικών δοτών. Παρουσιάζονται οι μέθοδοι της ειδικής θερμότητας ( $C/N$ ) και της μαγνητικής επιδεκτικότητας ( $\chi/N$ ).



Σχήμα 3.33: Οι κρίσιμες θερμοκρασίες σαν συνάρτηση της πιθανότητας κατάληψης μαγνητικών δοτών εκτιμημένες από τα διαγράμματα της ειδικής θερμότητας και της μαγνητικής επιδεκτικότητας μαζί με το σφάλμα τους για διάφορα μεγέθη πλεγμάτων, με γραμμική διάσταση  $L = 10, 16$ .

Στο τέλος συνοψίζονται οι μέθοδοι εκτίμησης της κρίσιμης θερμοκρασίας σε ένα διάγραμμα στο οποίο υπάρχει και η  $U_L$  method.

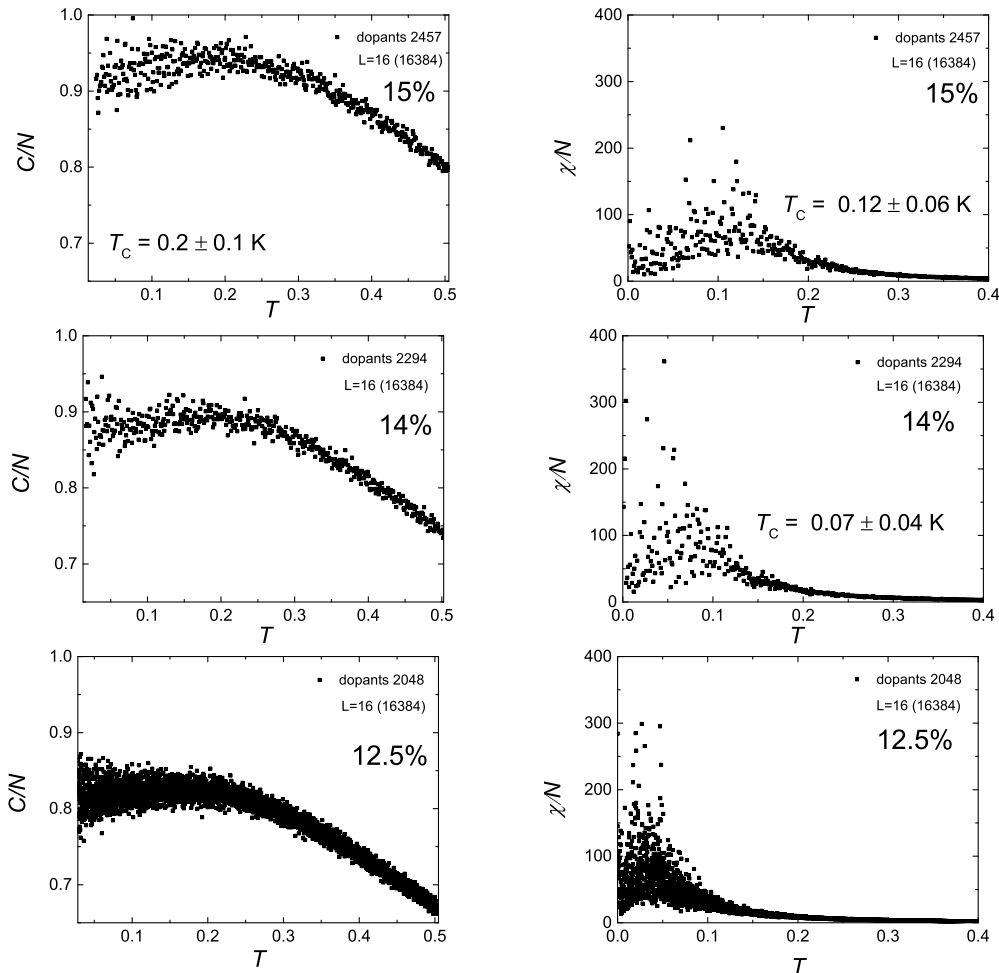
Όπως φαίνεται όσο μεγαλώνει το  $L$  τόσο πιο κοντά είναι τα αποτελέσματα των δύο μεθόδων ειδικής θερμότητας  $C/N$  και μαγνητικής επιδεκτικότητας  $\chi/N$ . Τα αποτελέσματα από το  $U_L$  method είναι κάπου στο ενδιάμεσο. Η μέθοδος ειδικής θερμότητας  $C/N$  φαίνεται να έχει μεγαλύτερα σφάλματα από αυτή της μαγνητικής επιδεκτικότητας  $\chi/N$ . Τέλος, μικραίνει το ποσοστό κατάληψης μαγνητικών προσμίξεων, μεγαλώνει το σχετικό σφάλματα στον υπολογισμό της κρίσιμης.



Σχήμα 3.34: Οι κρίσιμες θερμοκρασίες σαν συνάρτηση της πιθανότητας κατάληψης μαγνητικών δοτών. Εκτιμημένες από τα διαγράμματα της ειδικής θερμότητας και της μαγνητικής επιδεκτικότητας μαζί με το σφάλμα τους. Συνοπτικό διάγραμμα όπου φαίνονται όλα τα μεγέθη μαζί και είναι μαζί και οι κρίσιμες που βρέθηκαν με την βοήθεια του συσσωρευτή 4ης τάξης για την μαγνήτιση ανά σπιν. Οι υπολογισμοί αφορούν fcc πλέγμα για διάφορα μεγέθη πλεγμάτων, με γραμμική διάσταση  $L = 10, 16$ . Με αποχρώσεις του μπλε είναι η περίπτωση που τα ολοκληρώματα ανταλλαγής για δεύτερους γείτονες πέφτουν σαν  $1/r$  ενώ οι αποχρώσεις του πράσινου είναι οι περιπτώσεις που πέφτει σαν  $1/r^2$ .

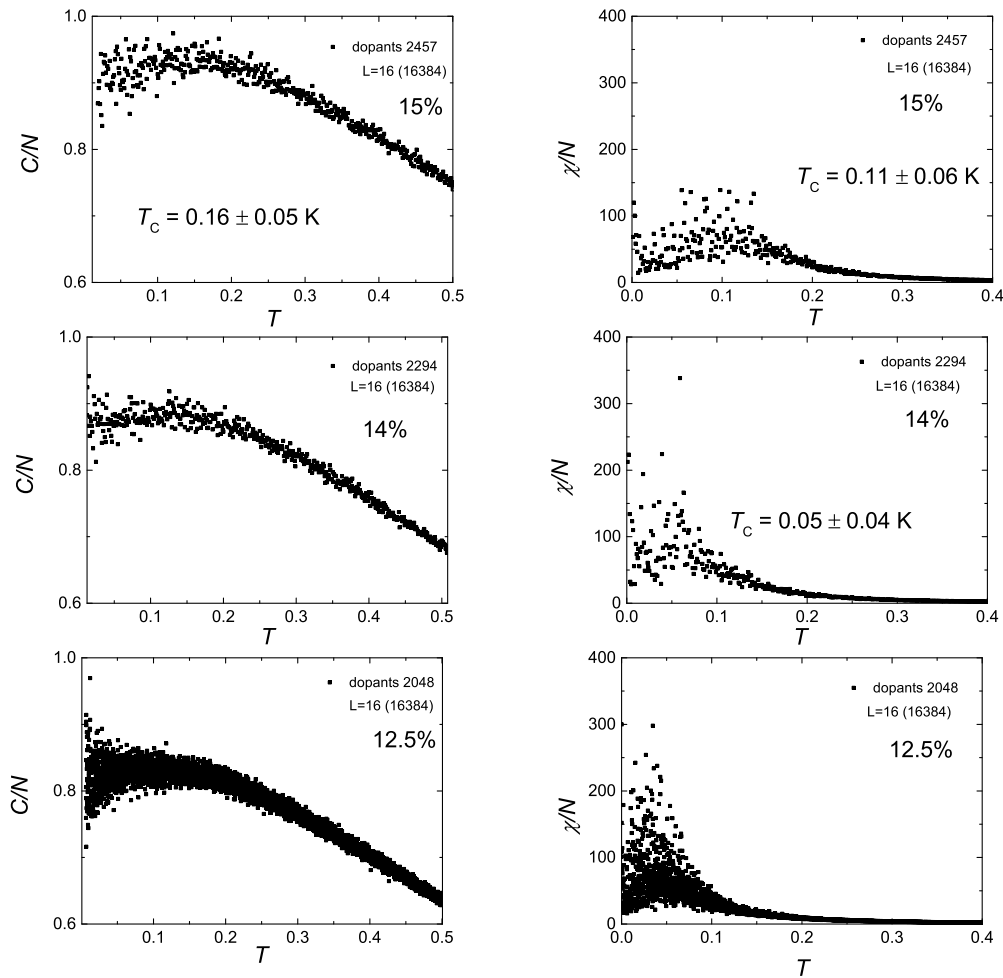
### 3.2.5 Εκτίμηση πιθανότητας διήθησης

Το κρίσιμο ποσοστό κατάληψης για το πλέγμα fcc λαμβάνοντας υπόψιν την αλληλεπίδραση πρώτων γειτόνων και δευτέρων είναι 0.136 13.6% [45]. Εδώ φαίνονται τα ποσοστά κατάληψης  $p = 0.15$  (15%),  $p = 0.14$  (14%),  $p = 0.125$  (12.5%) για  $L = 16$  (16384) με αναπαράσταση θερμοδυναμικών μεγεθών ειδικής θερμότητας ανά σπιν και μαγνητικής επιδεκτικότητας ανά σπιν. Τα ποσοστά 15% και 12.5% είχαν ήδη παρουσιαστεί σε προηγούμενα διαγράμματα. Φαίνεται στο 15% η μυτερή κορυφή της ειδικής θερμότητας όσο πλησιάζουμε το 14% παύει να είναι μυτερή και να τείνει στο 1 για  $T = 0$  (J/k<sub>B</sub>). Όπως φαίνεται στην μαγνητική επιδεκτικότητα μόλις 12.5% η κορυφή έχει σχεδόν πλησιάσει το μηδέν. Η μέθοδος προσέγγισης μας δεν είναι σε θέση να προσδιορίσει με ακρίβεια το κρίσιμο ποσοστό κατάληψης, ωστόσο φαίνεται να συμφωνούν τα αποτελέσματα μας με την βιβλιογραφία.



Σχήμα 3.35: Η ειδική θερμότητα ανά σπιν (αριστερά) και η μαγνητική επιδεκτικότητα ανά σπιν σαν (δεξιά) συνάρτηση της θερμοκρασίας σε fcc πλέγμα γραμμικής διάστασης  $L = 16$  (16384), με ποσοστά κατάληψης  $p = 0.15$  (15%),  $p = 0.14$  (14%),  $p = 0.125$  (12.5%). Αυτά τα διαγράμματα είναι για την περίπτωση που τα ολοκληρώματα ανταλλαγής για δεύτερους γείτονες πέφτουν σαν  $1/r$ .





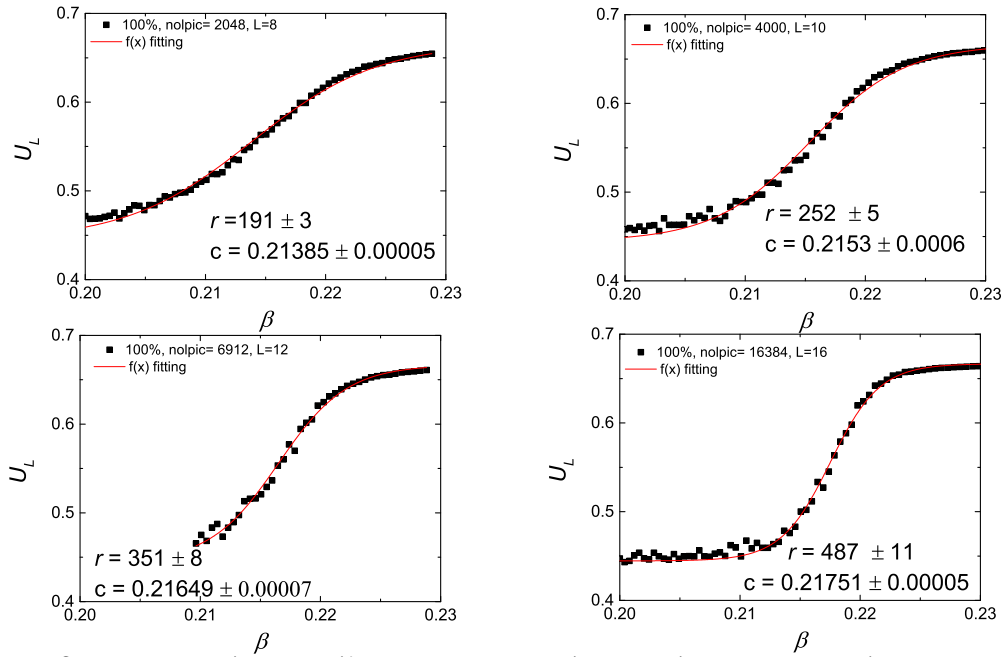
Σχήμα 3.36: Η ειδική θερμότητα ανά σπιν (αριστερά) και η μαγνητική επιδεικτικότητα ανά σπιν (δεξιά) συνάρτηση της θερμοκρασίας σε *fcc* πλέγμα γραμμικής διάστασης  $L = 16$  (16384), με ποσοστά κατάληψης  $p = 0.15$  (15%),  $p = 0.14$  (14%),  $p = 0.125$  (12.5%). Αυτά τα διαγράμματα είναι για την περίπτωση που τα ολοκληρώματα ανταλλαγής για δεύτερους γείτονες πέφτουν σαν  $1/r^2$ .

### 3.2.6 Εκτίμηση κρίσιμων εκθετών για πλήρως κατειλημμένο πλέγμα

Με αντίστοιχο τρόπο με αυτόν που αναλύθηκε στην περίπτωση πρώτων γειτόνων εκτιμούνται οι κρίσιμοι εκθέτες για την περίπτωση αλληλεπίδρασης γειτόνων 1ης και 2ης τάξης.

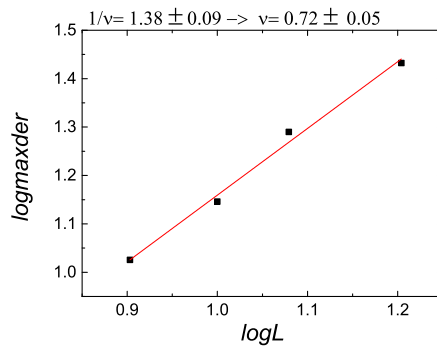
#### 3.2.6.1 Περίπτωση $J$ φθίνοντος σαν $1/r$

Υπολογίζοντας με προσομοίωση Monte Carlo τους συσσωρευτές τέταρτης τάξης για την μαγνήτιση ανά σπιν σαν συνάρτηση της αντίστροφης θερμοκρασίας  $\beta = \frac{1}{k_B T} = \frac{1}{T}$  ( $k_B = 1$ ) και κάνοντας την προσαρμογή της  $f(x)$  στις γραφικές παραστάσεις του  $U_L(\beta)$  μπορούμε να εκτιμήσουμε το  $r$ . Γνωρίζοντας το  $r$  υπολογίζεται η μέγιστη παράγωγος του  $U_L$  ως προς  $\beta$ .



Σχήμα 3.37: Ο συσσωρευτής 4ης τάξης για την μαγνήτιση ανά σπιν σαν συνάρτηση της αντίστροφης θερμοκρασίας  $U_L(\beta)$ . Έχει γίνει προσαρμογή στην συνάρτηση  $f(x)$  ώστε να προσδιοριστεί το  $r$ .

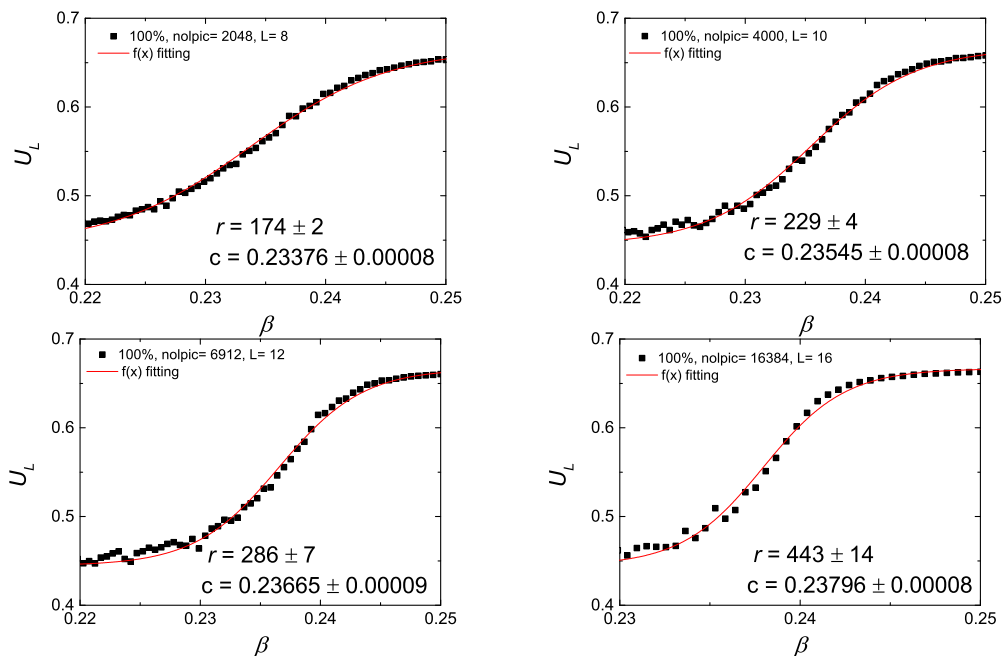
Ο κρίσιμος εκθέτης  $\nu$  για την περίπτωση των δεύτερων γειτόνων και  $J$  φθίνοντος σαν  $1/r$  προκύπτει  $\nu = 0.72(3)$ . Έγινε προσπάθεια να εκτιμηθούν και οι κρίσιμοι εκθέτες  $\alpha$  και  $\gamma$  μελετώντας την κλιμάκωση του μεγίστου της ειδική θερμότητας ανά σπιν και της μαγνητικής επιδεκτικότητας ανά σπιν αντίστοιχα. Όμως, επειδή δεν υπήρξε ο υπολογιστικός χρόνος να αυξηθεί το  $neq$  (χρόνος ισορροπίας) και το  $n_{av}$  (συνολικά χρονικά βήματα) κατάλληλα ώστε για μικρά βήματα της θερμοκρασίας στην κρίσιμη περιοχή να μπορούσαμε να έχουμε αξιόπιστες τιμές με κατάλληλα μικρά σφάλματα για τα μέγιστα των  $C/N$  και  $\chi/N$ , δεν θεωρούνται αξιόπιστες οι εκτιμήσεις. Οι προσεγγίσεις είναι οι εξής για τον υπολογισμό του  $\alpha(\delta\alpha) = -0.15(1)$  και του  $\gamma(\delta\gamma) = 1.40(10)$ .



Σχήμα 3.38: Ο λογάριθμος του μέγιστου της παραγώγου του συσσωρευτή τέταρτης τάξης για την μαγνήτιση ανά σπιν στην κρίσιμη θερμοκρασία σαν συνάρτηση του  $\log L$ .

### 3.2.6.2 Περίπτωση $J$ φθίνοντος σαν $1/r^2$

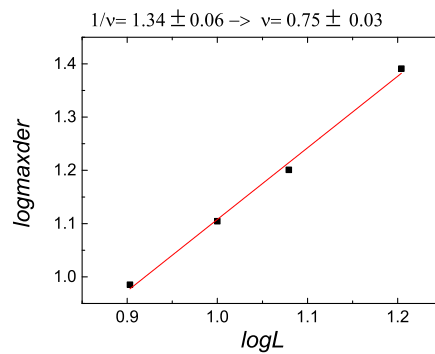
Υπολογίζοντας με προσομοίωση Monte Carlo τους συσσωρευτές τέταρτης τάξης για την μαγνήτιση ανά σπιν συνάρτηση της αντίστροφης θερμοκρασίας  $\beta = \frac{1}{k_B T} = \frac{1}{T}$  ( $k_B = 1$ ) και κάνοντας την προσαρμογή της  $f(x)$  στις γραφικές παραστάσεις του  $U_L(\beta)$  μπορούμε να εκτιμήσουμε το  $r$ . Γνωρίζοντας το  $r$  υπολογίζεται η μέγιστη παράγωγος του  $U_L$  ως προς  $\beta$ .



Σχήμα 3.39: Ο συσσωρευτής 4ης τάξης για την μαγνήτιση ανά σπιν σαν συνάρτηση της αντίστροφης θερμοκρασίας  $U_L(\beta)$ . Έχει γίνει προσαρμογή στην συνάρτηση  $f(x)$  ώστε να προσδιοριστεί το  $r$ .

Έπειτα από την κλιμάκωση των μεγεθών

Ο κρίσιμος εκθέτης  $\nu$  για την περίπτωση των δεύτερων γειτόνων και  $J$  φθίνοντος σαν  $1/r^2$  προ-



Σχήμα 3.40: Ο λογάριθμος του μέγιστου της παραγώγου του συσσωρευτή τέταρτης τάξης για την μαγνήτιση ανά σπιν στην κρίσιμη θερμοκρασία σαν συνάρτηση του  $\log L$ .

κύπτει  $\nu = 0.75(3)$ . Έγινε προσπάθεια να εκτιμηθούν και οι κρίσιμοι εκθέτες  $\alpha$  και  $\gamma$  μελετώντας την κλιμάκωση του μεγίστου της ειδική θερμότητας ανά σπιν και της μαγνητικής επιδεκτοκότητας ανά σπιν αντίστοιχα. Όμως, επειδή δεν υπήρξε ο υπολογιστικός χρόνος να αυξηθεί το  $neq$  (χρόνος ισορροπίας) και το  $nav$  (συνολικά χρονικά βήματα) κατάλληλα ώστε για μικρά βήματα της θερμοκρασίας στην κρίσιμη περιοχή να μπορέσουμε να έχουμε αξιόπιστες τιμές με κατάλληλα μικρά σφάλματα για τα μέγιστα των  $C/N$  και  $\chi/N$ , δεν θεωρούνται αξιόπιστες οι εκτιμήσεις. Οι προσεγγίσεις είναι οι εξής για τον υπολογισμό του  $\alpha(\delta\alpha) = -0.15(3)$  και του  $\gamma(\delta\gamma) = 1.53(7)$ .

### 3.3 Πλέγμα fcc με τρίτους γείτονες

Έπειτα μελετάται το πλέγμα fcc λαμβάνοντας υπόψη την αλληλεπίδραση πρώτων, δεύτερων και τρίτων γειτόνων. Στο πλέγμα αυτό κατανέμονται μαγνητικές προσμίξεις σε ποσοστά κατάληψης  $p = 1$  (100%),  $p = 0.5$  (50%),  $p = 0.25$  (25%),  $p = 0.15$  (21%),  $p = 0.125$  (12.5%),  $p = 0.07$  (7%) και  $p = 0.05$  (5%). Σύμφωνα με την βιβλιογραφία, το κρίσιμο ποσοστό κατάληψης κάτω από το οποίο δεν έχουμε σιδηρομαγνητικό υλικό για το πλέγμα fcc, λαμβάνοντας υπόψη την αλληλεπίδραση πρώτων, δεύτερων γειτόνων και τρίτων γειτόνων, είναι 0.061 6.1% [45].

Το ολοκλήρωμα ανταλλαγής πρώτων γειτόνων  $J_1$  θεωρήθηκε μονάδα. Τα αποτελέσματα παρουσιάζονται για τα ολοκληρώματα ανταλλαγής  $J_2$ ,  $J_3$  δεύτερων, τρίτων γειτόνων να φθίνουν σαν i)  $1/r$ , όπου  $r$  η απόσταση των γειτόνων, άρα  $J_2 = \sqrt{2}/2$ ,  $J_3 = \sqrt{3}/3$  και σαν ii)  $1/r^2$ , άρα  $J_2 = 1/2$ ,  $J_3 = 1/3$ .

Οι προσομοιώσεις Monte Carlo έγιναν στις θερμοκρασιακές περιοχές: i)  $T \in [0.01, 10.0]$  με βήμα εκατοστού για το ποσοστό κατάληψης 100% στο μέγεθος  $L = 10$  και  $T \in [0.1, 10.0]$  με βήμα δέκατου για το ποσοστό κατάληψης 100% στο μέγεθος  $L = 16$ , ii)  $T \in [0.01, 5.0]$  με βήμα εκατοστού για το ποσοστό κατάληψης 50% iii)  $T \in [0.01, 2.0]$  με βήμα εκατοστού για το ποσοστό κατάληψης 25%, iv)  $T \in [0.001, 1.5]$  με βήμα χιλιοστού για το ποσοστό κατάληψης 15%, v)  $T \in [0.0001, 1.0]$  με βήμα δεκάκις χιλιοστού για  $L = 10$  και με βήμα χιλιοστού για  $L = 16$  για το ποσοστό κατάληψης 12.5%, vi)  $T \in [0.0001, 0.4]$  με βήμα δεκάκις χιλιοστού για το ποσοστό κατάληψης 7% και vii)  $T \in [0.0001, 0.4]$  με βήμα δεκάκις χιλιοστού για το ποσοστό κατάληψης 5%. Υπολογίστηκαν τα θερμοδυναμικά μεγέθη για δύο μεγέθη πλεγμάτων, με γραμμική διάσταση  $L = 10, 16$ . Αυτά ισχύουν και στην περίπτωση που το ολοκλήρωμα ανταλλαγής να φθίνει σαν  $1/r$  αλλά και σαν  $1/r^2$ , στις ίδιες θερμοκρασιακές περιοχές. Με μοναδική εξαίρεση το ποσοστό κατάληψης 100% στην περίπτωση που φθίνει σαν  $1/r^2$  η θερμοκρασιακή περιοχή είναι  $T \in [0.01, 8.0]$  ή  $T \in [0.1, 8.0]$  αντίστοιχα για  $L = 10$  και  $L = 16$  με τα ίδια βήματα.

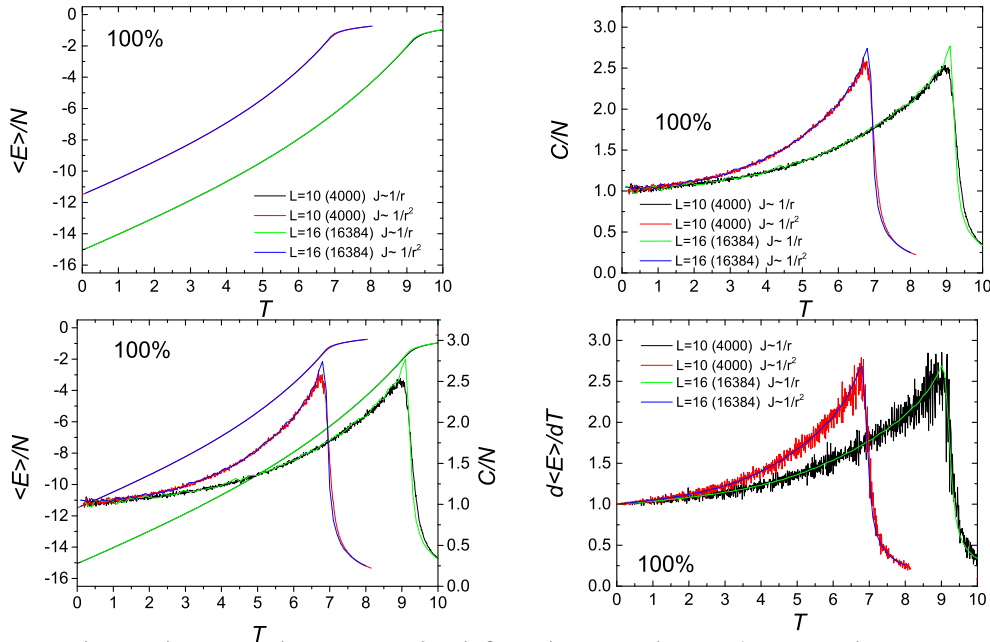
Το σύστημα αφέθηκε να ισορροπήσει για 2000 sweeps και για τα δύο μεγέθη πλεγμάτων με γραμμική διάσταση  $L = 10, 16$ . Η χρονοσειρά έχει συνολικά χρονικά βήματα  $\mathcal{N} = n_{av} = 200.000$  Έτσι υπολογίζονται τα θερμοδυναμικά μεγέθη που παρουσιάζονται στην συνέχεια.

#### 3.3.1 Η μέση ενέργεια και η ειδική θερμότητα

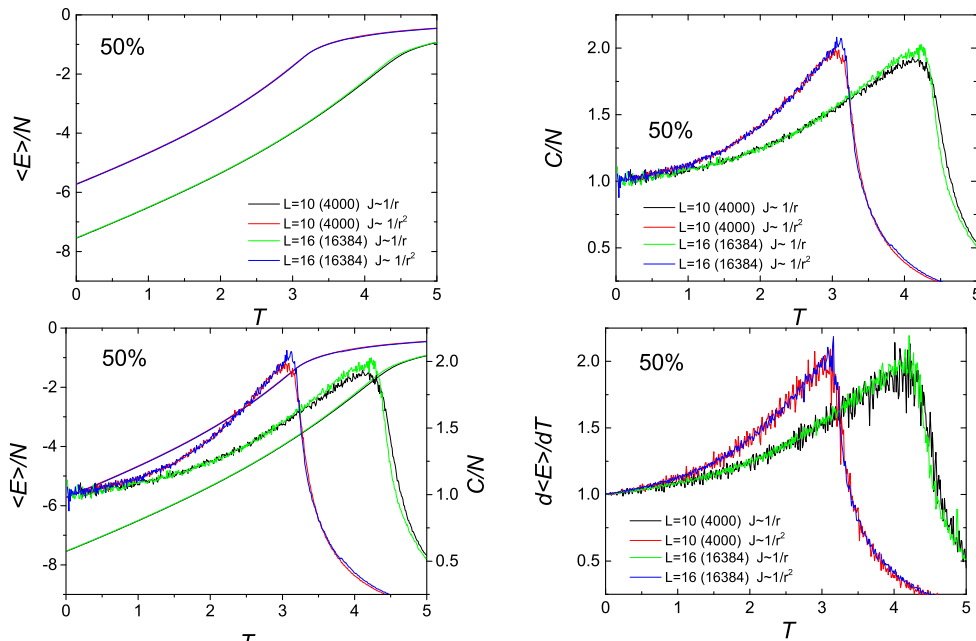
Η κόκκινη με τη μπλε γραμμή <sup>5</sup> καθώς και η μαύρη με την πράσινη <sup>6</sup> για τα ποσοστά 100% και 50% σχεδόν ταυτίζονται για διαφορετικά  $L$  και οι μέσες ενέργειες ανά σπιν και οι ειδικές θερμότητες ανά σπιν. Στην περίπτωση του 25% οι μέσες ενέργειες διαφέρουν λίγο ενώ οι κορυφές της ειδικής θερμότητας σχεδόν ταυτίζονται. Στην περίπτωση του 25% οι μέσες ενέργειες και οι

<sup>5</sup> που αφορούν την περίπτωση που το  $J$  φθίνει σαν  $1/r^2$

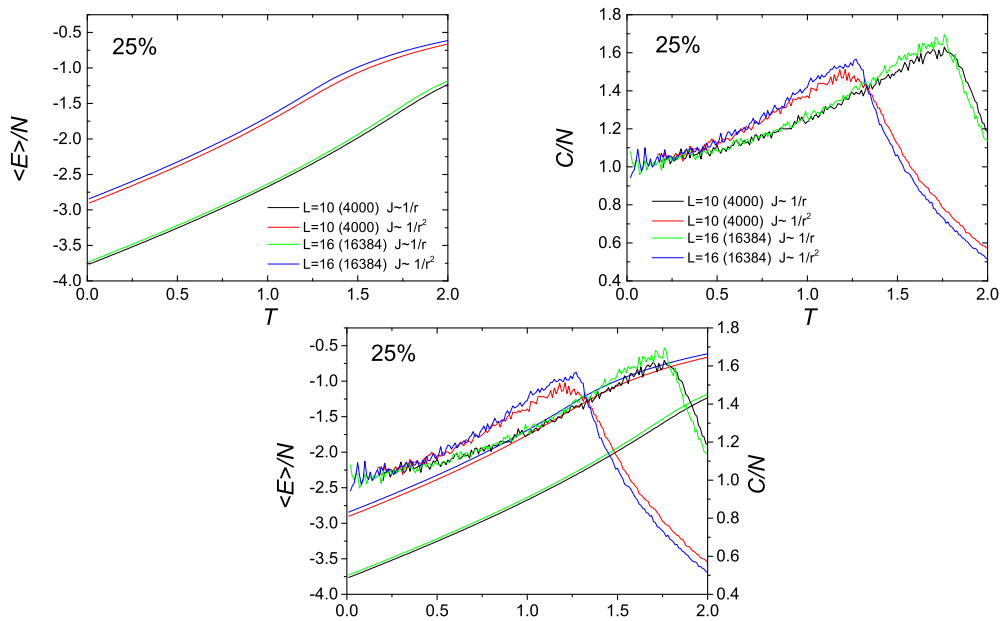
<sup>6</sup> που αφορούν την περίπτωση που το  $J$  φθίνει σαν  $1/r^2$



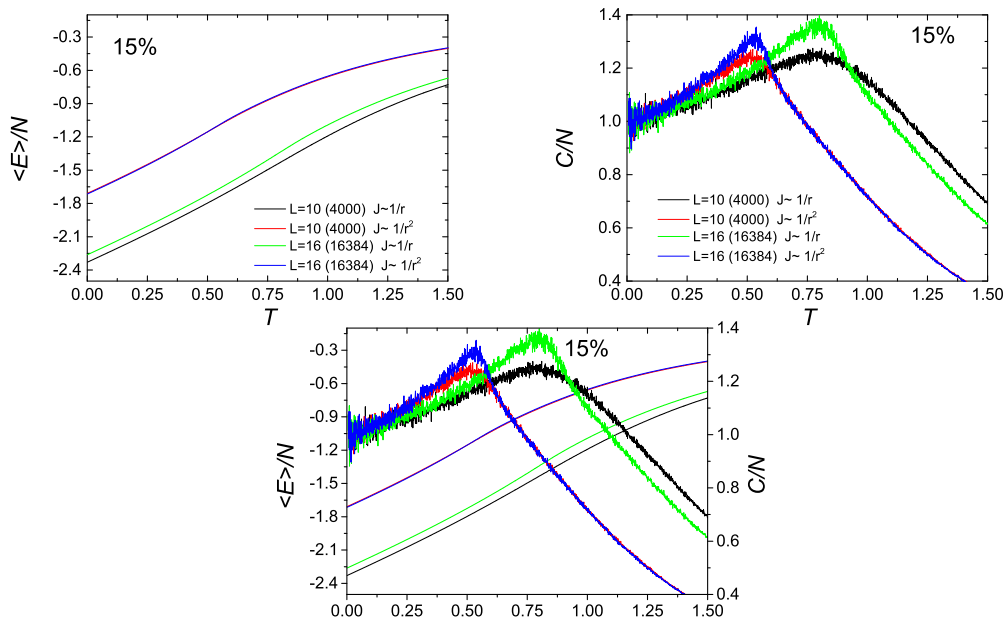
Σχήμα 3.41: Μέση ενέργεια ανά σπιν, η ειδική θερμότητα ανά σπιν ξεχωριστά και σε κοινό διάγραμμα και η παράγωγος της ενέργειας σαν συνάρτηση της θερμοκρασίας για διάφορα μεγέθη πλεγμάτων, με γραμμική διάσταση  $L = 10, 16$  για ποσοστό κατάληψης μαγνητικών δοτών 100%. Τα ολοκληρώματα ανταλλαγής για τρίτους γείτονες έχουν υποτεθεί πως πέφτουν είτε σαν  $1/r$  είτε σαν  $1/r^2$ .



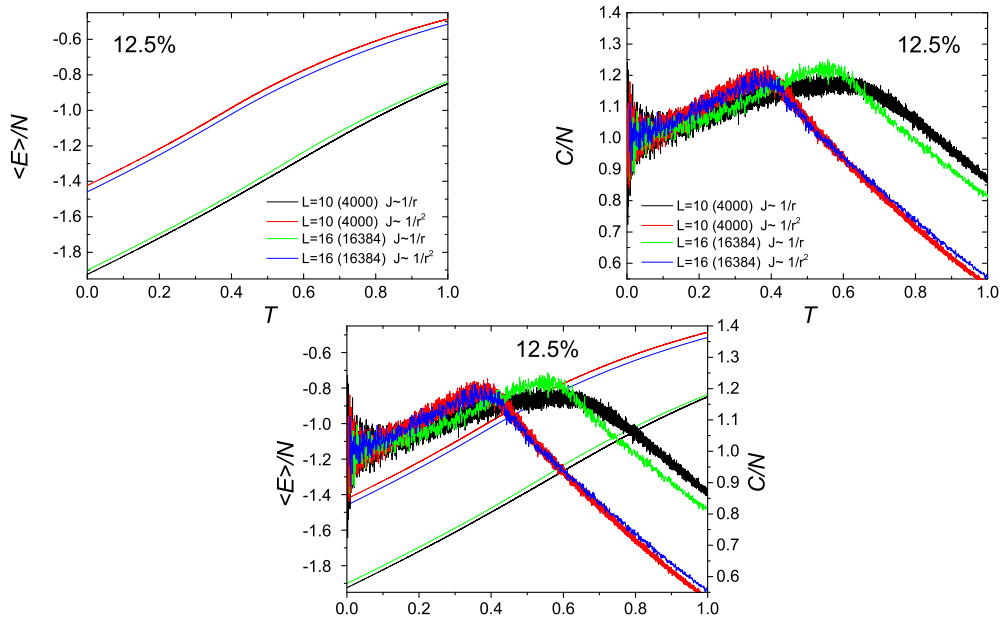
Σχήμα 3.42: Μέση ενέργεια ανά σπιν, η ειδική θερμότητα ανά σπιν ξεχωριστά και σε κοινό διάγραμμα και η παράγωγος της ενέργειας σαν συνάρτηση της θερμοκρασίας για διάφορα μεγέθη πλεγμάτων, με γραμμική διάσταση  $L = 10, 16$  για ποσοστό κατάληψης μαγνητικών δοτών 50%. Τα ολοκληρώματα ανταλλαγής για τρίτους γείτονες έχουν υποτεθεί πως πέφτουν είτε σαν  $1/r$  είτε σαν  $1/r^2$ .



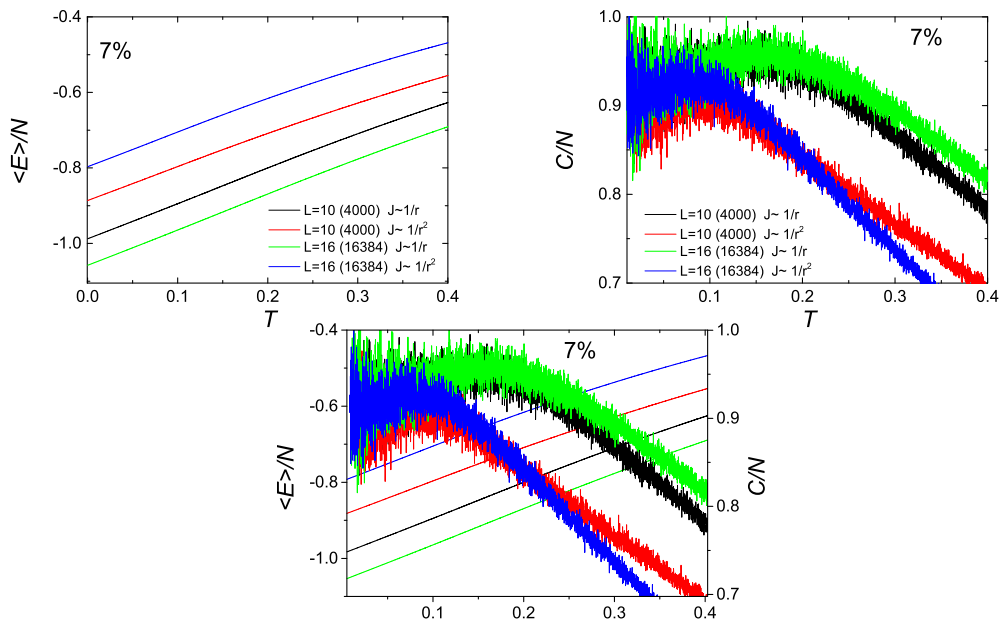
Σχήμα 3.43: Μέση ενέργεια ανά σπιν, η ειδική θερμότητα ανά σπιν ξεχωριστά και σε κοινό διάγραμμα σαν συνάρτηση της θερμοκρασίας για διάφορα μεγέθη πλεγμάτων, με γραμμική διάσταση  $L = 10, 16$  για ποσοστό κατάληψης μαγνητικών δοτών 25%. Τα ολοκληρώματα ανταλλαγής για τρίτους γείτονες έχουν υποτεθεί πως πέφτουν είτε σαν  $1/r$  είτε σαν  $1/r^2$ .



Σχήμα 3.44: Μέση ενέργεια ανά σπιν, η ειδική θερμότητα ανά σπιν ξεχωριστά και σε κοινό διάγραμμα σαν συνάρτηση της θερμοκρασίας για διάφορα μεγέθη πλεγμάτων, με γραμμική διάσταση  $L = 10, 16$  για ποσοστό κατάληψης μαγνητικών δοτών 15%. Τα ολοκληρώματα ανταλλαγής για τρίτους γείτονες έχουν υποτεθεί πως πέφτουν είτε σαν  $1/r$  είτε σαν  $1/r^2$ .

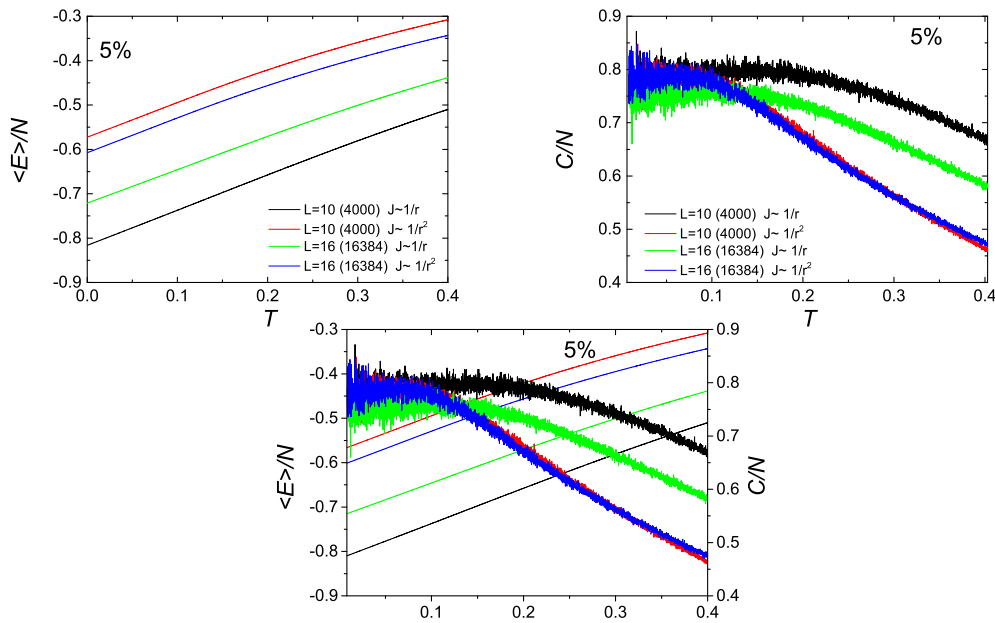


Σχήμα 3.45: Μέση ενέργεια ανά σπιν, η ειδική θερμότητα ανά σπιν ξεχωριστά και σε κοινό διάγραμμα σαν συνάρτηση της θερμοκρασίας για διάφορα μεγέθη πλεγμάτων, με γραμμική διάσταση  $L = 10, 16$  για ποσοστό κατάληψης μαγνητικών δοτών 12.5%. Τα ολοκληρώματα ανταλλαγής για τρίτους γείτονες έχουν υποτεθεί πως πέφτουν είτε σαν  $1/r$  είτε σαν  $1/r^2$ .



Σχήμα 3.46: Μέση ενέργεια ανά σπιν, η ειδική θερμότητα ανά σπιν ξεχωριστά και σε κοινό διάγραμμα σαν συνάρτηση της θερμοκρασίας για διάφορα μεγέθη πλεγμάτων, με γραμμική διάσταση  $L = 10, 16$  για ποσοστό κατάληψης μαγνητικών δοτών 7%. Τα ολοκληρώματα ανταλλαγής για τρίτους γείτονες έχουν υποτεθεί πως πέφτουν είτε σαν  $1/r$  είτε σαν  $1/r^2$ .





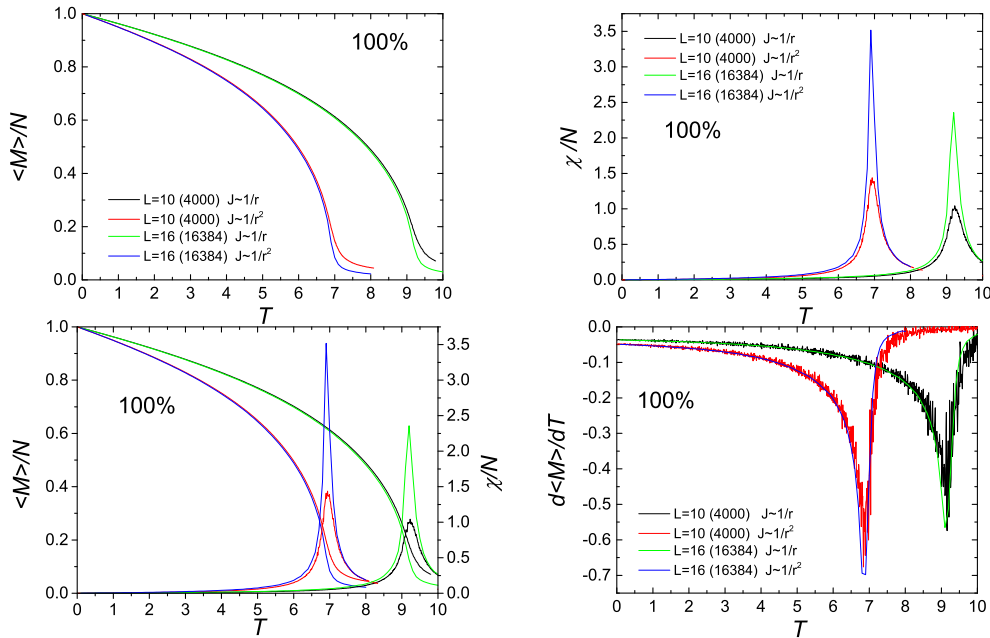
Σχήμα 3.47: Μέση ενέργεια ανά σπιν, η ειδική θερμότητα ανά σπιν ξεχωριστά και σε κοινό διάγραμμα σαν συνάρτηση της θερμοκρασίας για διάφορα μεγέθη πλεγμάτων, με γραμμική διάσταση  $L = 10, 16$  για ποσοστό κατάληψης μαγνητικών δοτών 5%. Τα ολοκληρώματα ανταλλαγής για τρίτους γείτονες έχουν υποτεθεί πως πέφτουν είτε σαν  $1/r$  είτε σαν  $1/r^2$ .

κορυφές της ειδικής θερμότητας διαφέρουν ελάχιστα. Στην περίπτωση των 15% και 12.5% οι μέσες ενέργειες και οι κορυφές της ειδικής θερμότητας πάλι διαφέρουν λίγο ενώ η διαφορά είναι μικρότερη για την περίπτωση του  $1/r$  καθώς στο  $L = 10$  η περίπτωση  $1/r^2$  δεν δίνει τόσο μυτερή κορυφή. Στην περίπτωση του 7% οι διαφορές είναι πιο μεγάλες καθώς έχουν μεγαλώσει αρκετά τα σφάλματα. Οι κορυφές έχουν γίνει λιγότερο μυτερές, καθώς είμαστε κοντά στο κρίσιμο ποσοστό κατάληψης 6.1%. Οι κορυφές της ειδικής θερμότητας ανά σπιν στην περίπτωση του  $J$  φθίνοντας σαν  $1/r$  είναι ελαφρά ψηλότερα, καθώς η μέγιστη κλίση της μέσης ενέργειας ανά σπιν είναι ελαφρά πιο απότομη τότε, για ποσοστά από 25% και μικρότερα.

Επίσης μέχρι και το 12.5%, που δεν είναι κοντά στο όριο του κρίσιμου ποσοστού κατάληψης, φαίνεται καθαρά πως το όριο της ειδικής θερμότητας για μηδενική θερμοκρασία είναι η μονάδα και η κορυφή της ειδικής θερμότητας παραμένει μυτερή. Επίσης γίνεται λιγότερο μυτερή, η κορυφή της ειδικής θερμότητας, καθώς μικραίνει το ποσοστό κατάληψης και λιγότερο απότομη η μεταβολή στην κλίση της μέσης ενέργειας στο κρίσιμο σημείο. Όπως φαίνεται επίσης όταν μεγαλώνει η γραμμική  $L$  διάσταση του πλέγματος τόσο πιο απότομη είναι η μεταβολή στην κλίση της μέσης ενέργειας ανά σπιν κατά την αλλαγή φάσης και άρα η μυτερή κορυφή της ειδικής θερμότητας μεγαλώνει και μετατοπίζεται σε ελαφρώς μεγαλύτερες θερμοκρασίες.

### 3.3.2 Η μαγνήτιση και η μαγνητική επιδεκτικότητα

Ακολουθούν τα αποτελέσματα για την μαγνήτιση ανά σπιν καθώς και την μαγνητική επιδεκτικότητα ανά σπιν για κάθε ποσοστό κατάληψης.

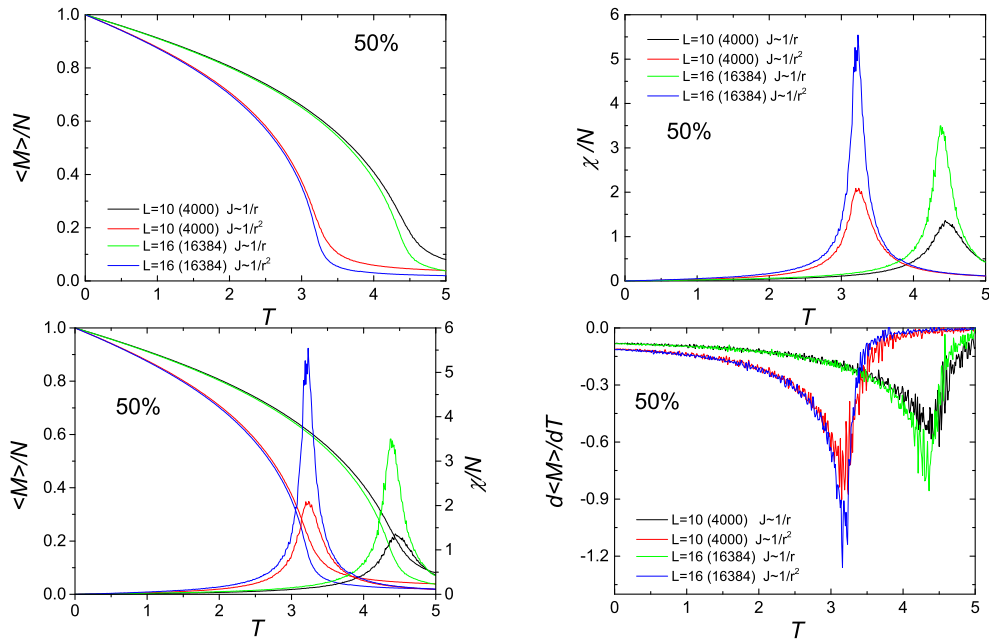


Σχήμα 3.48: Η μαγνήτιση ανά σπιν, η μαγνητική επιδεκτικότητα ανά σπιν ξεχωριστά και σε κοινό διάγραμμα και η παράγωγος της μαγνήτισης σαν συνάρτηση της θερμοκρασίας για διάφορα μεγέθη πλεγμάτων, με γραμμική διάσταση  $L = 10, 16$  για ποσοστό κατάληψης μαγνητικών δοτών 100%. Τα ολοκληρώματα ανταλλαγής για τρίτους γείτονες έχουν υποτεθεί πως πέφτουν είτε σαν  $1/r$  είτε σαν  $1/r^2$ .

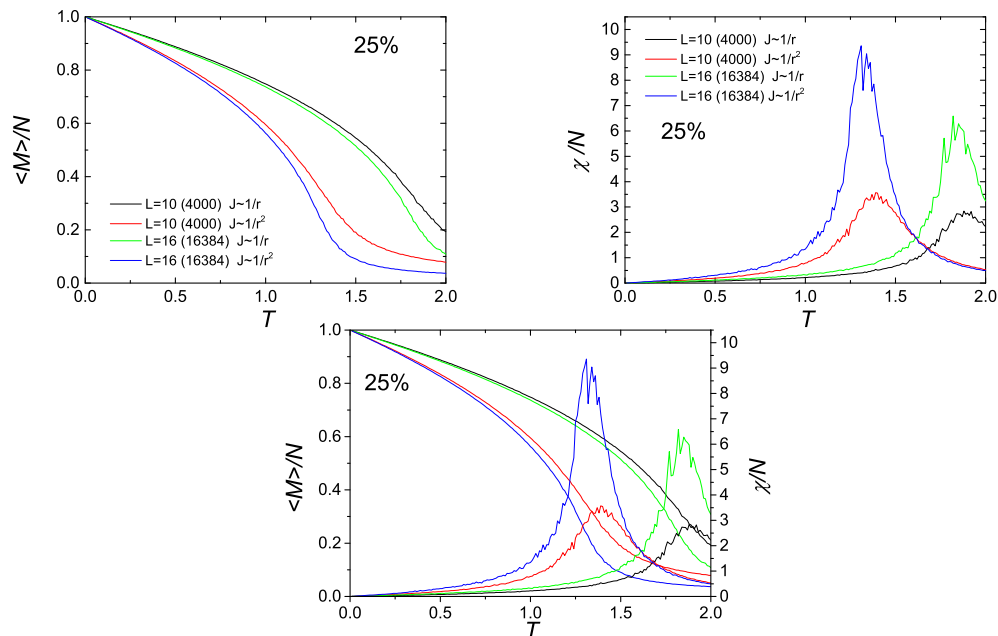
Πάλι για την μαγνήτιση, όσο πιο μικρό είναι το ποσοστό κατάληψης τόσο μεγαλύτερη διαφορά στην κλιμάκωση εμφανίζουν μεταξύ τους τα  $L$ . Η κόκκινη και η μπλε γραμμή <sup>7</sup> καθώς και η μαύρη με την πράσινη <sup>8</sup> για τα όλα τα ποσοστά μηδενίζονται πιο απότομα για  $L$  μεγαλύτερο όμως παρουσιάζουν παρόμοια συμπεριφορά. Γι' αυτό και οι κορυφές της μαγνητικής επιδεκτικότητας ανά σπιν για μεγαλύτερο  $L$  είναι ψηλότερες, καθώς η κλίση σε αυτή την περίπτωση είναι πιο απότομη. Στην περίπτωση που το  $J_2$  φθίνει σαν  $1/r^2$  φαίνεται πως οι κορυφές είναι ψηλότερες καθώς η μαγνήτιση στο κρίσιμο σημείο τότε έχει λίγο πιο απότομη κλίση. Επίσης οι ψευδοκρίσιμες φαίνονται ελαφρώς διαφορετικές για διαφορετικά  $J$ . Συγκεκριμένα στην περίπτωση που φθίνει σαν

<sup>7</sup> που αφορούν την περίπτωση που το  $J$  φθίνει σαν  $1/r^2$

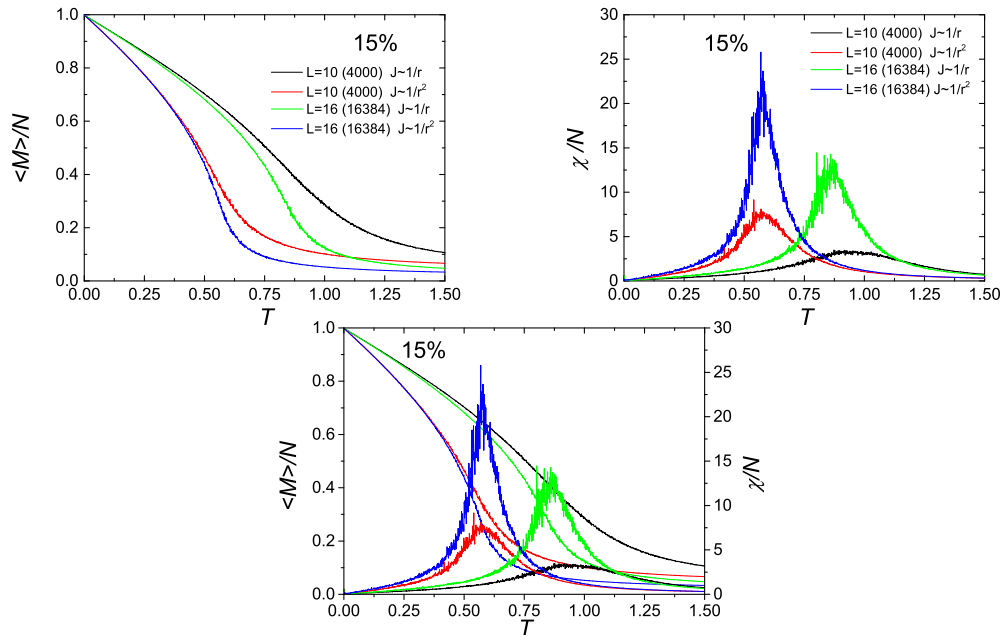
<sup>8</sup> που αφορούν την περίπτωση που το  $J$  φθίνει σαν  $1/r$



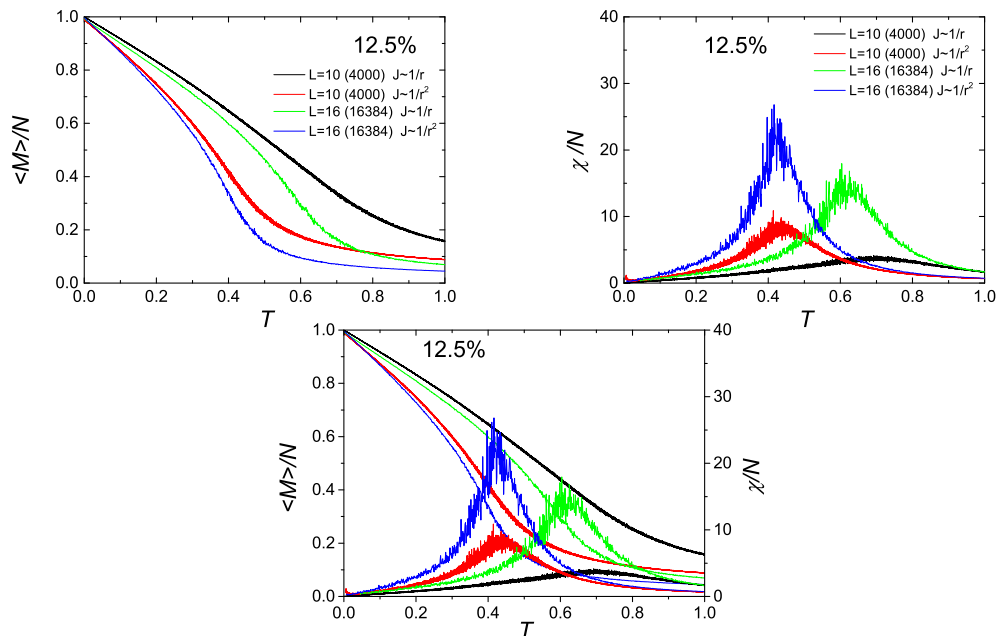
Σχήμα 3.49: Η μαγνήτιση ανά σπιν, η μαγνητική επιδεκτικότητα ανά σπιν ξεχωριστά και σε κοινό διάγραμμα και η παράγωγος της μαγνήτισης σαν συνάρτηση της θερμοκρασίας για διάφορα μεγέθη πλεγμάτων, με γραμμική διάσταση  $L = 10, 16$  για ποσοστό κατάληψης μαγνητικών δοτών 50%. Τα ολοκληρώματα ανταλλαγής για τρίτους γείτονες έχουν υποτεθεί πως πέφτουν είτε σαν  $1/r$  είτε σαν  $1/r^2$ .



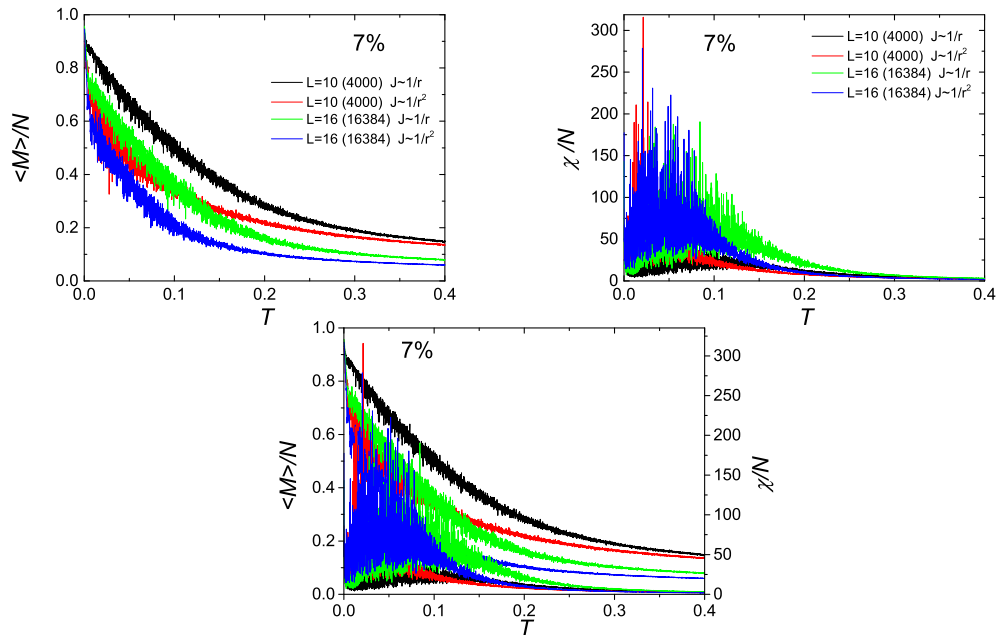
Σχήμα 3.50: Η μαγνήτιση ανά σπιν, η μαγνητική επιδεκτικότητα ανά σπιν ξεχωριστά και σε κοινό διάγραμμα σαν συνάρτηση της θερμοκρασίας για διάφορα μεγέθη πλεγμάτων, με γραμμική διάσταση  $L = 10, 16$  για ποσοστό κατάληψης μαγνητικών δοτών 25%. Τα ολοκληρώματα ανταλλαγής για τρίτους γείτονες έχουν υποτεθεί πως πέφτουν είτε σαν  $1/r$  είτε σαν  $1/r^2$ .



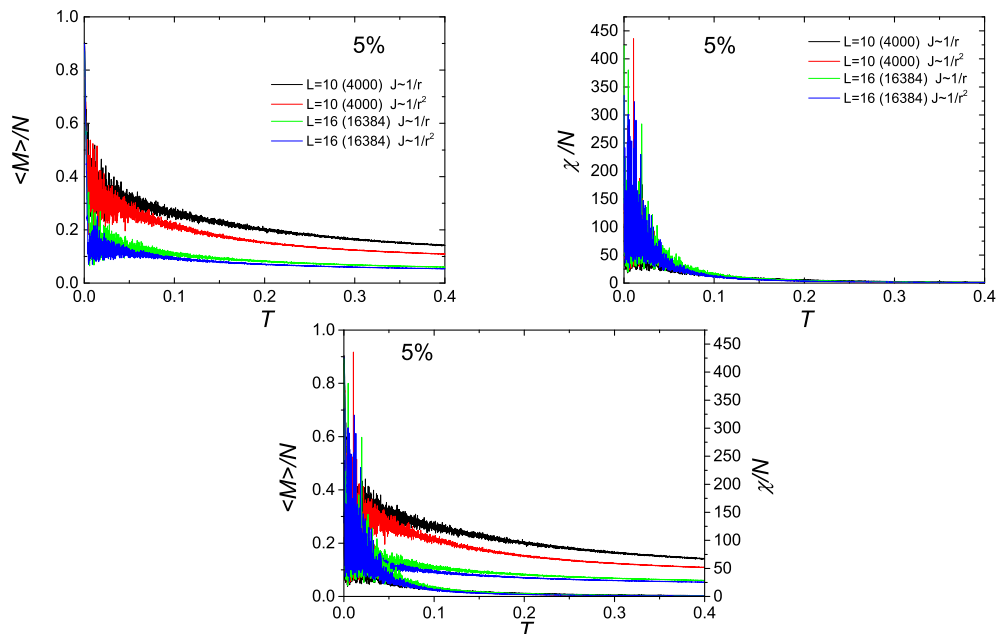
Σχήμα 3.51: Η μαγνήτιση ανά σπιν, η μαγνητική επιδεκτικότητα ανά σπιν ξεχωριστά και σε κοινό διάγραμμα σαν συνάρτηση της θερμοκρασίας για διάφορα μεγέθη πλεγμάτων, με γραμμική διάσταση  $L = 10, 16$  για ποσοστό κατάληψης μαγνητικών δοτών 15%. Τα ολοκληρώματα ανταλλαγής για τρίτους γείτονες έχουν υποτεθεί πως πέφτουν είτε σαν  $1/r$  είτε σαν  $1/r^2$ .



Σχήμα 3.52: Η μαγνήτιση ανά σπιν, η μαγνητική επιδεκτικότητα ανά σπιν ξεχωριστά και σε κοινό διάγραμμα σαν συνάρτηση της θερμοκρασίας για διάφορα μεγέθη πλεγμάτων, με γραμμική διάσταση  $L = 10, 16$  για ποσοστό κατάληψης μαγνητικών δοτών 12.5%. Τα ολοκληρώματα ανταλλαγής για τρίτους γείτονες έχουν υποτεθεί πως πέφτουν είτε σαν  $1/r$  είτε σαν  $1/r^2$ .



Σχήμα 3.53: Η μαγνήτιση ανά σπιν, η μαγνητική επιδεκτικότητα ανά σπιν ξεχωριστά και σε κοινό διάγραμμα σαν συνάρτηση της θερμοκρασίας για διάφορα μεγέθη πλεγμάτων, με γραμμική διάσταση  $L = 10, 16$  για ποσοστό κατάληψης μαγνητικών δοτών 7%. Τα ολοκληρώματα ανταλλαγής για τρίτους γείτονες έχουν υποτεθεί πως πέφτουν είτε σαν  $1/r$  είτε σαν  $1/r^2$ .

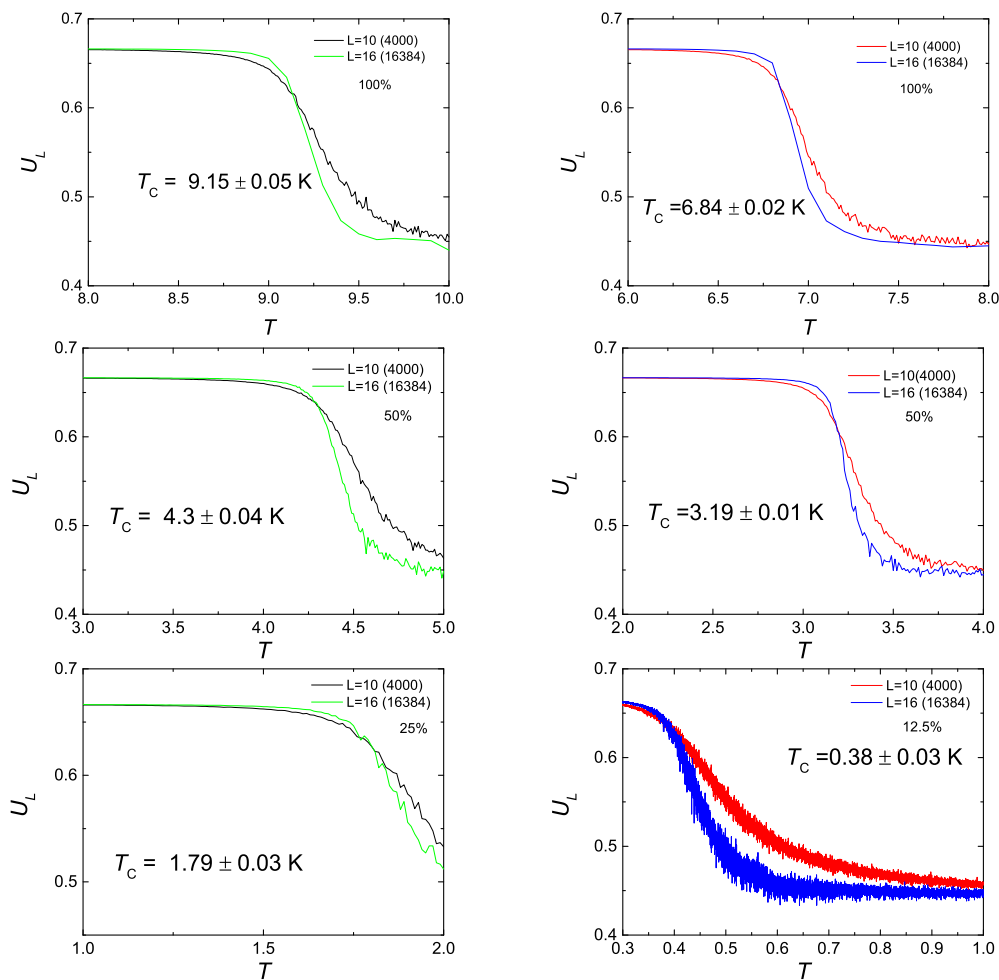


Σχήμα 3.54: Η μαγνήτιση ανά σπιν, η μαγνητική επιδεκτικότητα ανά σπιν ξεχωριστά και σε κοινό διάγραμμα σαν συνάρτηση της θερμοκρασίας για διάφορα μεγέθη πλεγμάτων, με γραμμική διάσταση  $L = 10, 16$  για ποσοστό κατάληψης μαγνητικών δοτών 5%. Τα ολοκληρώματα ανταλλαγής για τρίτους γείτονες έχουν υποτεθεί πως πέφτουν είτε σαν  $1/r$  είτε σαν  $1/r^2$ .

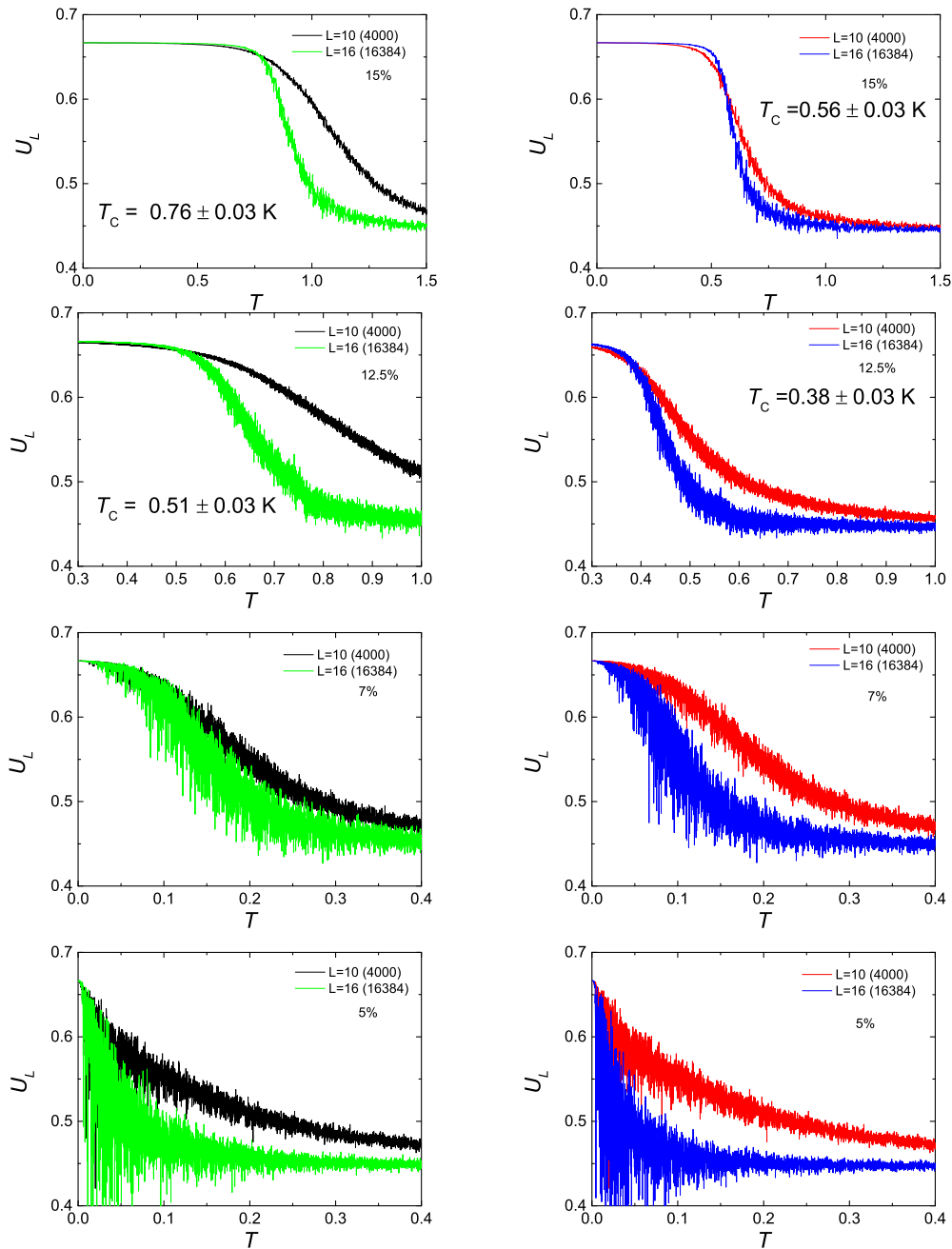
$1/r^2$  παρουσιάζεται μικρότερη  $T_c$  και αυτό επιβεβαιώνεται σε όλες τις περιπτώσεις διαφορετικών ποσοστών κατάληψης, όπως είδαμε και στην ανάλυση των δεύτερων γειτόνων. Όσο μικραίνει το ποσοστό κατάληψης οι δύο κορυφές είναι όλο και πιο κοντά και άρα και οι κρίσιμες διαφέρουν λιγότερο.

### 3.3.3 Ο συσσωρευτής τέταρτης τάξης

Ακολουθούν τα αποτελέσματα για τον συσσωρευτή τέταρτης τάξης για την μαγνήτιση ανά σπιν. Πάλι φαίνεται οι κρίσιμες να είναι ελαφρώς διαφορετικές για διαφορετικά  $J$ . Συγκεκριμένα στην περίπτωση που φθίνει σαν  $1/r^2$  παρουσιάζεται μικρότερη  $T_c$  για όλα τα ποσοστά κατάληψης. Όσο μικραίνει το ποσοστό κατάληψης μαγνητικών προσμίξεων, αυξάνονται τα σφάλματα. Μέχρι το ποσοστό κατάληψης 7% μπορεί να γίνει εκτίμηση της κρίσιμης θερμοκρασίας ενώ στα ποσοστά κατάληψης 6% και 5% όχι. Ισχύουν τα σχόλια που συζητήθηκαν και για την περίπτωση πρώτων γειτόνων για τα όρια του συσσωρευτή σε μηδενική και άπειρη θερμοκρασία.



Σχήμα 3.55: Ο συσσωρευτής τέταρτης τάξης σαν συνάρτηση της θερμοκρασίας για διάφορα μεγέθη πλεγμάτων, με γραμμική διάσταση  $L = 10, 16$ , με ποσοστά κατάληψης  $p = 0.100$  (100%),  $p = 0.50$  (50%) και  $p = 0.25$  (25%). Τα ολοκληρώματα ανταλλαγής για τρίτους γείτονες έχουν υποτεθεί πως πέφτουν είτε σαν  $1/r$  (αριστερή στήλη) είτε σαν  $1/r^2$  (δεξιά στήλη).

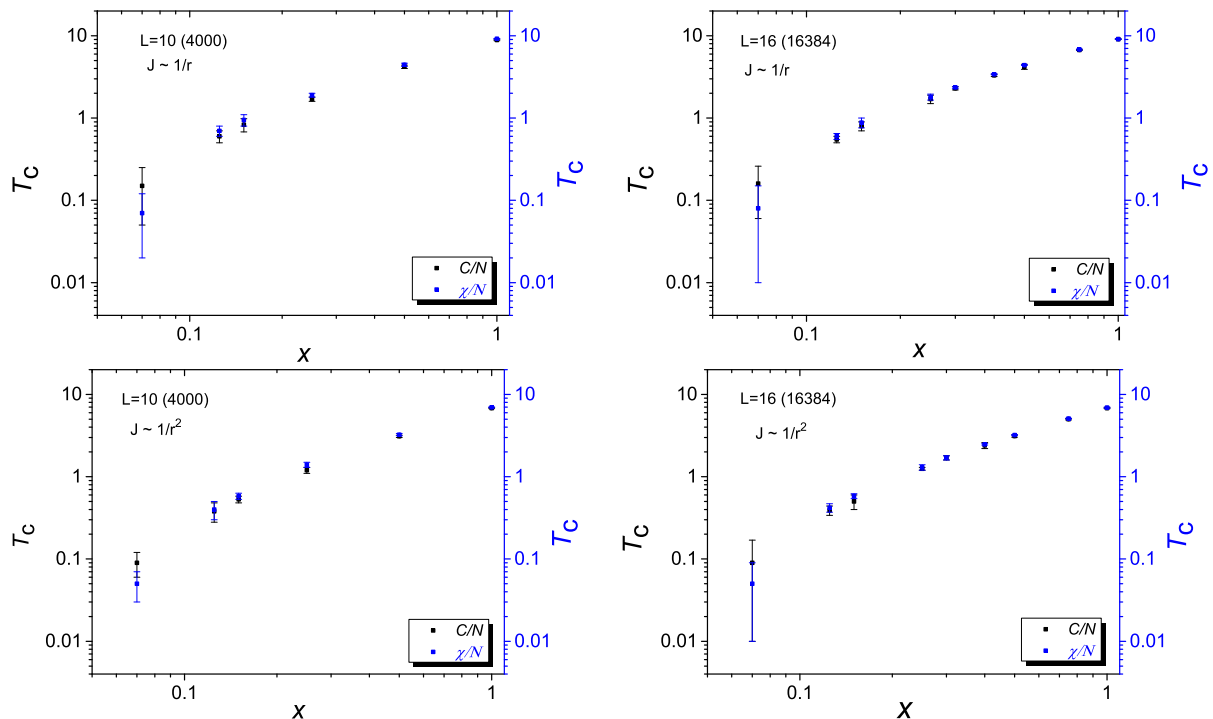


Σχήμα 3.56: Ο συσσωρευτής τέταρτης τάξης σαν συνάρτηση της θερμοκρασίας για διάφορα μεγέθη πλεγμάτων, με γραμμική διάσταση  $L = 10, 16$ , με ποσοστά κατάληψης  $p = 0.15$  (15%),  $p = 0.125$  (12.5%),  $p = 0.07$  (7%) και  $p = 0.05$  (5%). Τα ολοκληρώματα ανταλλαγής για τρίτους γείτονες έχουν υποτεθεί πως πέφτουν είτε σαν  $1/r$  (αριστερή στήλη) είτε σαν  $1/r^2$  (δεξιά στήλη).



### 3.3.4 Εκτίμηση κρίσιμων θερμοκρασιών

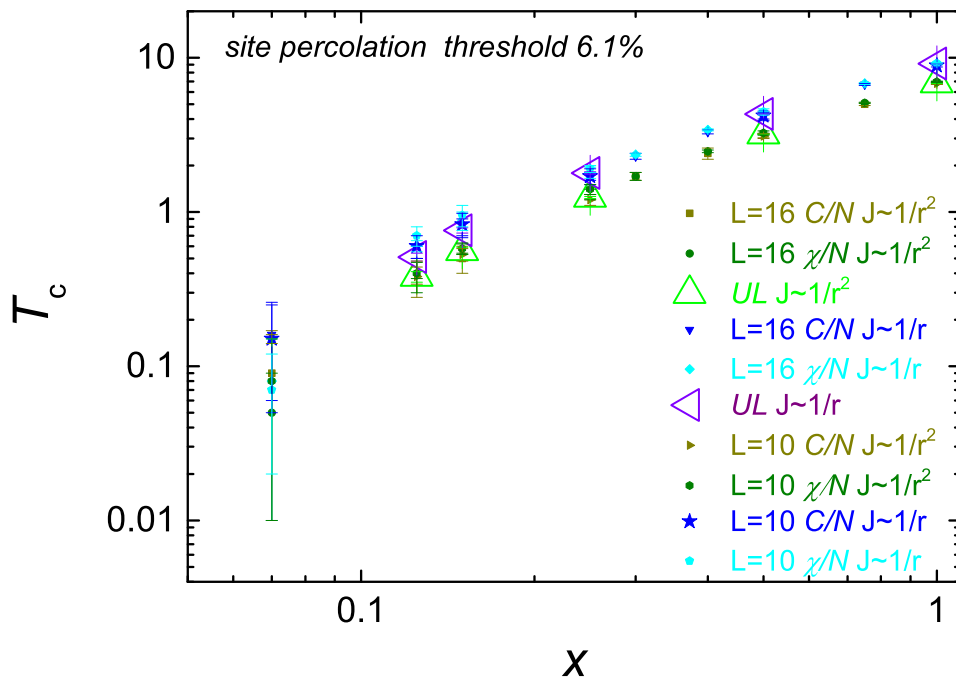
Παρουσιάζονται τα αποτελέσματα για την εκτίμηση των κρίσιμων θερμοκρασιών και ζωγραφίζονται σε λογαριθμικές κλίμακες οι κρίσιμες θερμοκρασίες σαν συνάρτηση της πιθανότητας κατάληψης μαγνητικών δοτών. Παρουσιάζονται οι μέθοδοι της ειδικής θερμότητας ( $C/N$ ) και της μαγνητικής επιδεκτικότητας ( $\chi/N$ ).



Σχήμα 3.57: Οι κρίσιμες θερμοκρασίες σαν συνάρτηση της πιθανότητας κατάληψης μαγνητικών δοτών εκτιμημένες από τα διαγράμματα της ειδικής θερμότητας και της μαγνητικής επιδεκτικότητας μαζί με το σφάλμα τους για διάφορα μεγέθη πλεγμάτων, με γραμμική διάσταση  $L = 10, 16$

Στο τέλος συνοψίζονται οι μέθοδοι εκτίμησης της κρίσιμης θερμοκρασίας σε ένα διάγραμμα στο οποίο υπάρχει και η  $U_L$  method.

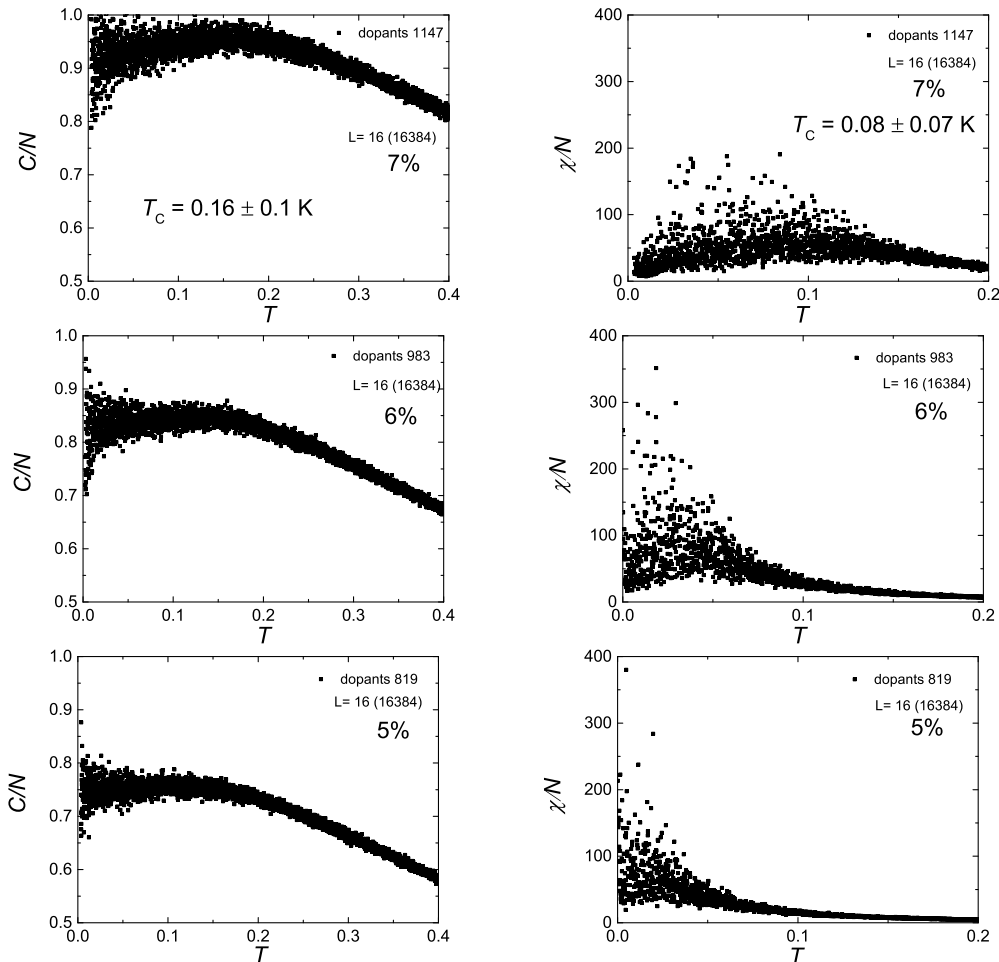
Όπως φαίνεται όσο μεγαλώνει το  $L$  τόσο πιο κοντά είναι τα αποτελέσματα των δύο μεθόδων, ειδικής θερμότητας  $C/N$  και μαγνητικής επιδεκτικότητας  $\chi/N$ . Τα αποτελέσματα από το  $U_L$  method είναι κάπου στο ενδιάμεσο. Η μέθοδος ειδικής θερμότητας  $C/N$  φαίνεται να έχει μεγαλύτερα σφάλματα από αυτή της μαγνητικής επιδεκτικότητας  $\chi/N$ . Τέλος, όσο μικραίνει το ποσοστό κατάληψης μαγνητικών δοτών μεγαλώνει το σχετικό σφάλματα στον υπολογισμό της κρίσιμης.



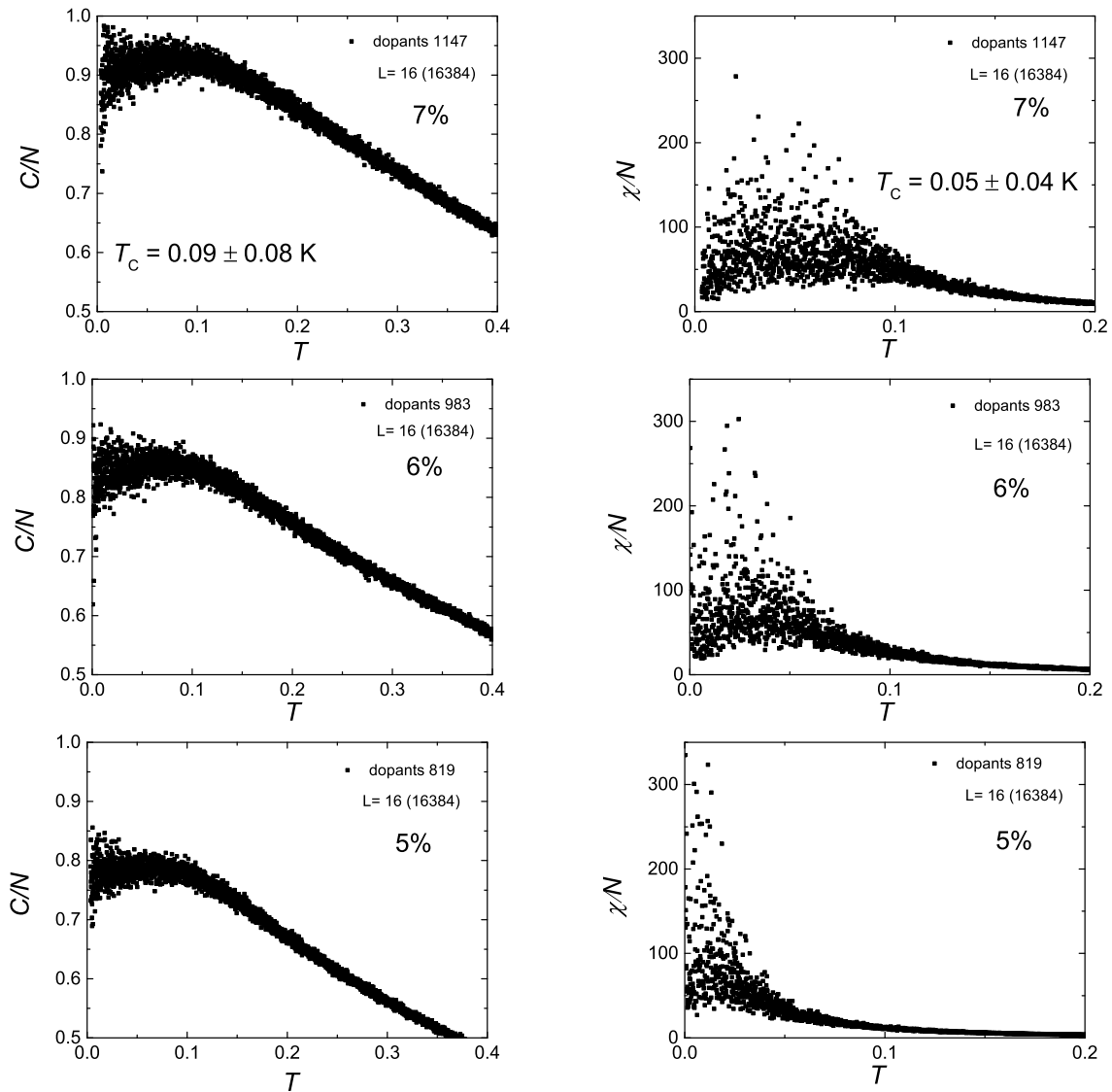
Σχήμα 3.58: Οι κρίσιμες θερμοκρασίες σαν συνάρτηση της πιθανότητας κατάληψης μαγνητικών δοτών. Εκτιμημένες από τα διαγράμματα της ειδικής θερμότητας και της μαγνητικής επιδεκτικότητας μαζί με το σφάλμα τους. Συνοπτικό διάγραμμα όπου φαίνονται όλα τα μεγέθη μαζί και είναι μαζί και οι κρίσιμες που βρέθηκαν με την βοήθεια του συσσωρευτή 4ης τάξης για την μαγνήτιση ανά σπιν. Οι υπολογισμοί αφορούν fcc πλέγμα για διάφορα μεγέθη πλεγμάτων, με γραμμική διάσταση  $L = 10, 16$ . Με απόχρωσεις του μπλέ είναι η περίπτωση που τα ολοκληρώματα ανταλλαγής πέφτουν σαν  $1/r$  ενώ οι απόχρωσεις του πράσινου είναι οι περιπτώσεις που πέφτουν σαν  $1/r^2$ .

### 3.3.5 Εκτίμηση πιθανότητας διήθησης

Το κρίσιμο ποσοστό κατάληψης για το πλέγμα fcc λαμβάνοντας υπόψιν την αλληλεπίδραση πρώτων, δεύτερων και τρίτων γειτόνων είναι 0.061 6.1% [45]. Εδώ φαίνονται τα ποσοστά κατάληψης  $p = 0.07$  (7%),  $p = 0.06$  (6%),  $p = 0.05$  (5%) για  $L = 16$  (16384) με αναπαράσταση θερμοδυναμικών μεγεθών ειδικής θερμότητας ανά σπιν και μαγνητικής επιδεκτικότητας ανά σπιν. Τα ποσοστά 7% και 5% είχαν ήδη παρουσιαστεί σε προηγούμενα διαγράμματα. Φαίνεται στο 7% η μυτερή κορυφή, της ειδικής θερμότητας, που όσο πλησιάζουμε το 6% παύει να είναι μυτερή και να τείνει στο 1 για  $T = 0$  J/k<sub>B</sub>. Όπως φαίνεται στην μαγνητική επιδεκτικότητα μόλις στο 5% η κορυφή έχει σχεδόν πλησιάσει το μηδέν. Η μέθοδος προσέγγισης μας δεν είναι σε θέση να προσδιορίσει με ακρίβεια το κρίσιμο ποσοστό κατάληψης, ωστόσο φαίνεται να συμφωνούν τα αποτελέσματα μας με την βιβλιογραφία.



Σχήμα 3.59: Η ειδική θερμότητα ανά σπιν (αριστερά) και η μαγνητική επιδεκτικότητα ανά σπιν σαν (δεξιά) συνάρτηση της θερμοκρασίας σε fcc πλέγμα γραμμικής διάστασης  $L = 16$  (16384), με ποσοστά κατάληψης  $p = 0.07$  (7%),  $p = 0.06$  (6%),  $p = 0.05$  (5%). Αυτά τα διαγράμματα είναι για την περίπτωση που τα ολοκληρώματα ανταλλαγής πέφτουν σαν  $1/r$ .



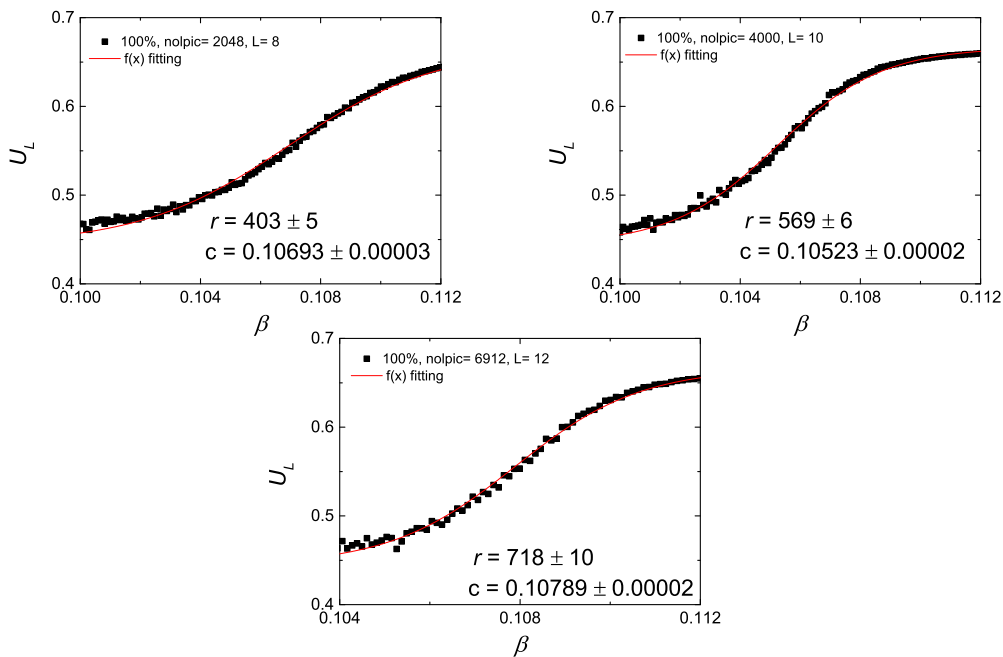
Σχήμα 3.60: Η ειδική θερμότητα ανά σπιν (αριστερά) και η μαγνητική επιδεικτικότητα ανά σπιν (δεξιά) συνάρτηση της θερμοκρασίας σε fcc πλέγμα γραμμικής διάστασης  $L = 16$  (16384), με ποσοστά κατάληψης  $p = 0.07$  (7%),  $p = 0.06$  (6%),  $p = 0.5$  (5%). Αυτά τα διαγράμματα είναι για την περίπτωση που τα ολοκληρώματα ανταλλαγής πέφτουν σαν  $1/r^2$ .

### 3.3.6 Εκτίμηση κρίσιμων εκθετών για πλήρως κατειλημμένο πλέγμα

Με αντίστοιχο τρόπο με αυτόν που αναλύθηκε στην περίπτωση πρώτων γειτόνων εκτιμούνται οι κρίσιμοι εκθέτες για την περίπτωση αλληλεπίδρασης γειτόνων 1ης, 2ης τάξης και 3ης τάξης.

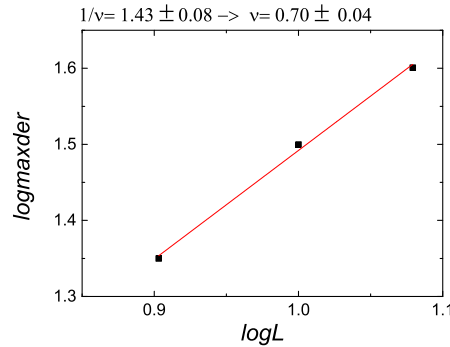
#### 3.3.6.1 Περίπτωση $J$ φθίνοντος σαν $1/r$

Υπολογίζοντας με προσομοίωση Monte Carlo τους συσσωρευτές τέταρτης τάξης για την μαγνήτιση ανά σπιν σαν συνάρτηση της αντίστροφης θερμοκρασίας  $\beta = \frac{1}{k_B T} = \frac{1}{T}$  ( $k_B = 1$ ) και κάνοντας την προσαρμογή της  $f(x)$  στις γραφικές παραστάσεις του  $U_L(\beta)$  μπορούμε να εκτιμήσουμε το  $r$ . Γνωρίζοντας το  $r$ , υπολογίζεται η μέγιστη παράγωγος του  $U_L$  ως προς  $\beta$ .



Σχήμα 3.61: Ο συσσωρευτής 4ης τάξης για την μαγνήτιση ανά σπιν σαν συνάρτηση της αντίστροφης θερμοκρασίας  $U_L(\beta)$ . Έχει γίνει προσαρμογή στην συνάρτηση  $f(x)$  ώστε να προσδιοριστεί το  $r$ .

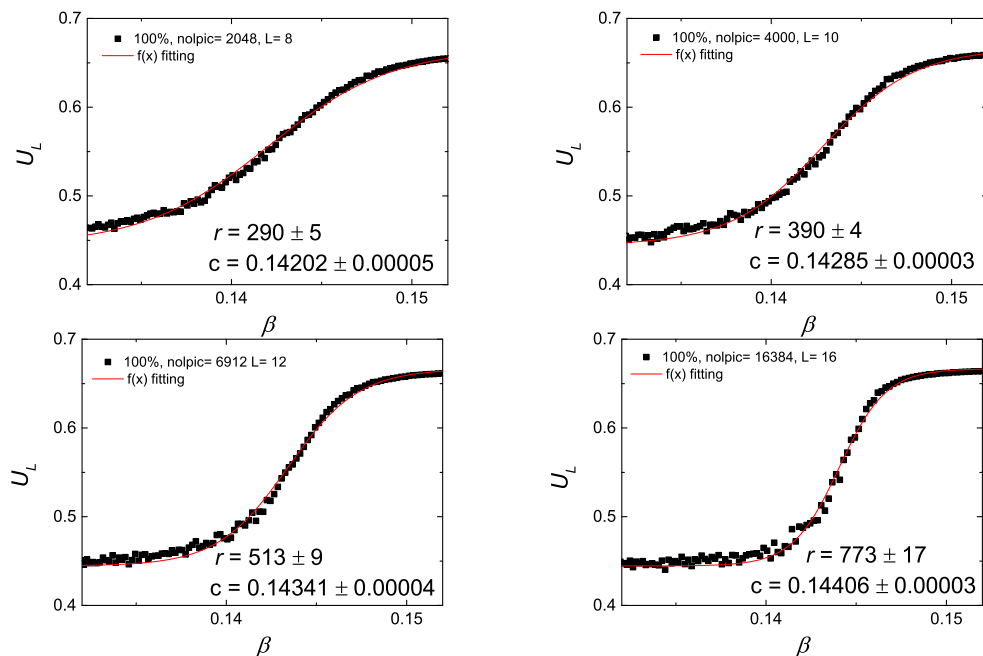
Ο κρίσιμος εκθέτης  $\nu$  για την περίπτωση των τρίτων γειτόνων και  $J$  φθίνοντος σαν  $1/r$  προκύπτει  $\nu = 0.70(4)$ . Έγινε προσπάθεια να εκτιμηθούν και οι κρίσιμοι εκθέτες  $\alpha$  και  $\gamma$  μελετώντας την κλιμάκωση του μεγίστου της ειδικής θερμότητας ανά σπιν και της μαγνητικής επιδεκτικότητας ανά σπιν αντίστοιχα. Όμως επειδή δεν υπήρξε ο υπολογιστικός χρόνος να αυξηθεί το  $neq$  και το  $nau$  κατάλληλα, ώστε για μικρά βήματα της θερμοκρασίας στην κρίσιμη περιοχή να μπορέσουμε να έχουμε αξιόπιστες τιμές με κατάλληλα μικρά σφάλματα για τα μέγιστα των  $C/N$  και  $\chi/N$ , δεν θεωρούνται αξιόπιστες οι εκτιμήσεις. Οι προσεγγίσεις είναι οι εξής για τον υπολογισμό του  $\alpha(\delta\alpha) = -0.14(2)$  και του  $\gamma(\delta\gamma) = 1.24(7)$ .



Σχήμα 3.62: Ο λογάριθμος του μέγιστου της παραγώγου του συσσωρευτή τέταρτης τάξης για την μαγνήτιση ανά σπιν στην κρίσιμη θερμοκρασία σαν συνάρτηση του  $\log L$ .

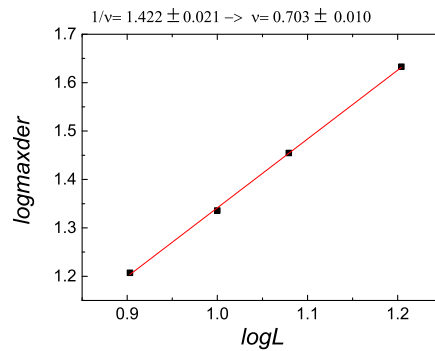
### 3.3.6.2 Περίπτωση $J$ φθίνοντος σαν $1/r^2$

Υπολογίζοντας με προσομοίωση Monte Carlo τους συσσωρευτές τέταρτης τάξης για την μαγνήτιση ανά σπιν σαν συνάρτηση της αντίστροφης θερμοκρασίας  $\beta = \frac{1}{k_B T} = \frac{1}{T}$  ( $k_B = 1$ ) και κάνοντας την προσαρμογή της  $f(x)$  στις γραφικές παραστάσεις του  $U_L(\beta)$  μπορούμε να εκτιμήσουμε το  $r$ . Γνωρίζοντας το  $r$  υπολογίζεται η μέγιστη παράγωγος του  $U_L$  ως προς  $\beta$ .



Σχήμα 3.63: Ο συσσωρευτής 4ης τάξης για την μαγνήτιση ανά σπιν σαν συνάρτηση της αντίστροφης θερμοκρασίας  $U_L(\beta)$ . Έχει γίνει προσαρμογή στην συνάρτηση  $f(x)$  ώστε να προσδιοριστεί το  $r$ .

Ο κρίσιμος εκθέτης  $\nu$  για την περίπτωση των τρίτων γειτόνων και  $J$  φθίνοντος σαν  $1/r^2$  προκύπτει  $\nu = 0.703(10)$ . Έγινε προσπάθεια να εκτιμηθούν και οι κρίσιμοι εκθέτες  $\alpha$  και  $\gamma$



Σχήμα 3.64: Ο λογάριθμος του μέγιστου της παραγώγου του συσσωρευτή τέταρτης τάξης για την μαγνήτιση ανά σπιν στην κρίσιμη θερμοκρασία σαν συνάρτηση του  $\log L$ .

μελετώντας την κλιμάκωση του μέγιστου της ειδική θερμότητας ανά σπιν και της μαγνητικής επιδεκτικότητας ανά σπιν αντίστοιχα. Όμως επειδή δεν υπήρξε ο υπολογιστικός χρόνος να αυξηθεί το  $neq$  και το  $nav$  κατάλληλα, ώστε για μικρά βήματα της θερμοκρασίας στην κρίσιμη περιοχή να μπορέσουμε να έχουμε αξιόπιστες τιμές με κατάλληλα μικρά σφάλματα για τα μέγιστα των  $C/N$  και  $\chi/N$ , δεν θεωρούνται αξιόπιστες οι εκτιμήσεις. Οι προσεγγίσεις είναι οι εξής για τον υπολογισμό του  $\alpha(\delta\alpha) = -0.13(4)$  και του  $\gamma(\delta\gamma) = 1.34(2)$ .

### 3.4 Πλέγμα fcc με τέταρτους γείτονες

Έπειτα μελετάται το πλέγμα fcc λαμβάνοντας υπόψιν την αλληλεπίδραση πρώτων, δεύτερων, τρίτων και τέταρτων γειτόνων. Στο πλέγμα κατανέμονται μαγνητικές προσμίξεις σε ποσοστά κατάληψης  $p = 1$  (100%),  $p = 0.5$  (50%),  $p = 0.25$  (25%),  $p = 0.15$  (21%),  $p = 0.125$  (12.5%),  $p = 0.06$  (6%) και  $p = 0.04$  (4%). Σύμφωνα με την βιβλιογραφία, το κρίσιμο ποσοστό κατάληψης κάτω από το οποίο δεν έχουμε σιδηρομαγνητικό υλικό για το πλέγμα fcc, λαμβάνοντας υπόψιν την αλληλεπίδραση πρώτων, δεύτερων γειτόνων τρίτων γειτόνων και τέταρτων γειτόνων, είναι 0.05 5% [45].

Το ολοκλήρωμα ανταλλαγής πρώτων γειτόνων  $J_1$  θεωρήθηκε μονάδα. Τα αποτελέσματα παρουσιάζονται για τα ολοκληρώματα ανταλλαγής  $J_2, J_3, J_4$  δεύτερων, τρίτων, τέταρτων γειτόνων να φθίνουν σαν i)  $1/r$ , όπου  $r$  η απόσταση των γειτόνων, άρα  $J_2 = \sqrt{2}/2, J_3 = \sqrt{3}/3, J_4 = \sqrt{4}/4 = 1/2$  και σαν ii)  $1/r^2$ , άρα  $J_2 = 1/2, J_3 = 1/3, J_4 = 1/4$ .

Οι προσομοιώσεις Monte Carlo έγιναν στις θερμοκρασιακές περιοχές: i)  $T \in [0.01, 12.5]$  με βήμα εκατοστού για το ποσοστό κατάληψης 100% στο μέγεθος  $L = 10$  και  $T \in [0.1, 12.5]$  με βήμα δέκατου για το ποσοστό κατάληψης 100% στο μέγεθος  $L = 16$ , ii)  $T \in [0.01, 6.5]$  με βήμα εκατοστού για το ποσοστό κατάληψης 50% iii)  $T \in [0.01, 5.0]$  με βήμα εκατοστού για το ποσοστό κατάληψης 25%, iv)  $T \in [0.001, 1.5]$  με βήμα χιλιοστού για το ποσοστό κατάληψης 15%, v)  $T \in [0.001, 1.5]$  με βήμα χιλιοστού για το ποσοστό κατάληψης 12.5%, vi)  $T \in [0.0001, 0.4]$  με βήμα δεκάκις χιλιοστού για το ποσοστό κατάληψης 6% και vii)  $T \in [0.0001, 0.4]$  με βήμα δεκάκις χιλιοστού για το ποσοστό κατάληψης 4%. Υπολογίστηκαν τα θερμοδυναμικά μεγέθη για δύο μεγέθη πλεγμάτων, με γραμμική διάσταση  $L = 10, 16$ . Αυτά ισχύουν και στην περίπτωση που το ολοκλήρωμα ανταλλαγής να φθίνει σαν  $1/r$  αλλά και σαν  $1/r^2$  στις ίδιες θερμοκρασιακές περιοχές.

Το σύστημα αφέθηκε να ισορροπήσει για 2000 sweeps και για τα δύο μεγέθη πλεγμάτων με γραμμική διάσταση  $L = 10, 16$ . Η χρονοσειρά έχει συνολικά χρονικά βήματα  $\mathcal{N} = n_{av} = 200.000$

Έτσι υπολογίζονται τα θερμοδυναμικά μεγέθη που παρουσιάζονται στην συνέχεια.

#### 3.4.1 Η μέση ενέργεια και η ειδική θερμότητα

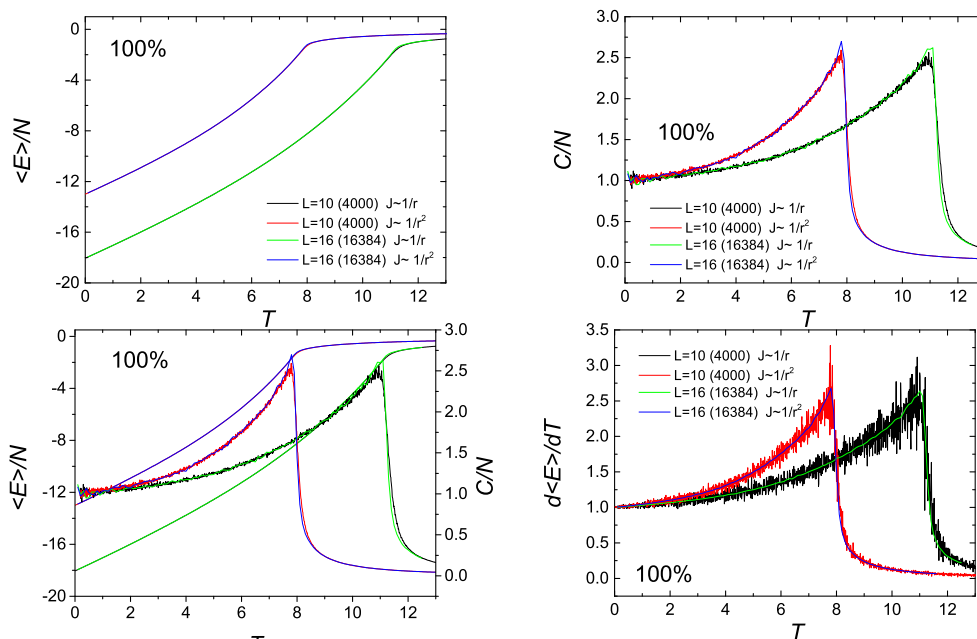
Η κόκκινη με τη μπλε γραμμή<sup>9</sup> καθώς και η μαύρη με την πράσινη<sup>10</sup> για τα ποσοστά 100% και 50% σχεδόν ταυτίζονται για διαφορετικά  $L$  και οι μέσες ενέργειες ανά σπιν και οι ειδικές θερμότητες ανά σπιν. Στην περίπτωση του 25%, του 15% και του 12.5% οι μέσες ενέργειες διαφέρουν λίγο ιδιαίτερα στην περίπτωση που το  $J$  φθίνει σαν  $1/r$  όπως και οι κορυφές της ειδικής θερμότητας ενώ για την περίπτωση που το  $J$  φθίνει σαν  $1/r^2$  σχεδόν ταυτίζονται. Στην περίπτωση του 6% οι μέσες ενέργειες και οι κορυφές της ειδικής θερμότητας διαφέρουν ελάχιστα για την περίπτωση  $J$  φθίνοντος σαν  $1/r^2$  και περισσότερο στην περίπτωση  $J$  φθίνοντος σαν  $1/r$ . Οι κορυφές έχουν γίνει λιγότερο μυτερές καθώς είμαστε κοντά στο κρίσιμο ποσοστό κατάληψης 5%. Οι κορυφές της ειδικής θερμότητας ανά σπιν στην περίπτωση του  $J$  φθίνοντος σαν  $1/r$  είναι ελαφρά ψηλότερα, καθώς η μέγιστη κλίση της μέσης ενέργειας ανά σπιν είναι ελαφρά πιο απότομη τότε, για ποσοστά από 25% και μικρότερα.

<sup>9</sup>που αφορούν την περίπτωση που το  $J$  φθίνει σαν  $1/r^2$

<sup>10</sup>που αφορούν την περίπτωση που το  $J$  φθίνει σαν  $1/r^2$



Επίσης μέχρι και το 12.5%, που δεν είναι στο όριο του κρίσιμου ποσοστού κατάληψης, φαίνεται καθαρά πως το όριο της ειδικής θερμότητας για μηδενική θερμοκρασία είναι η μονάδα και η κορυφή της ειδικής θερμότητας παραμένει μυτερή. Επίσης γίνεται λιγότερο μυτερή καθώς μικραίνει το ποσοστό κατάληψης και λιγότερο απότομη η μεταβολή στην κλίση της μέσης ενέργειας στο κρίσιμο σημείο. Όπως φαίνεται επίσης όταν μεγαλώνει η γραμμική  $L$  διάσταση του πλέγματος τόσο πιο απότομη είναι η μεταβολή στην κλίση της μέσης ενέργειας ανά σπιν κατά την αλλαγή φάσης και άρα η μυτερή κορυφή της ειδικής θερμότητας μεγαλώνει και μετατοπίζεται σε ελαφρώς μεγαλύτερες θερμοκρασίες.

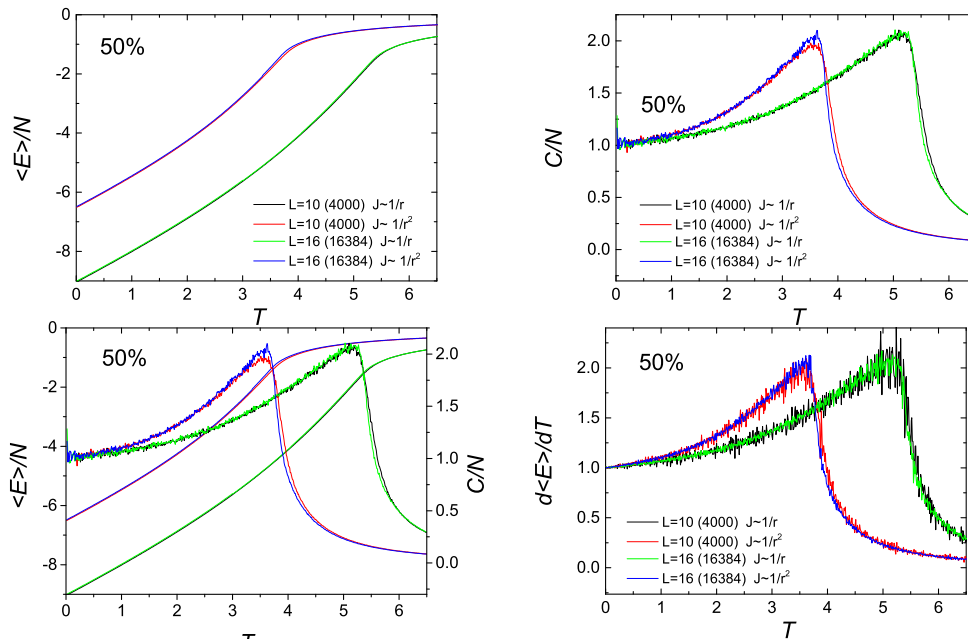


Σχήμα 3.65: Μέση ενέργεια ανά σπιν, η ειδική θερμότητα ανά σπιν ξεχωριστά και σε κοινό διάγραμμα και η παράγωγος της ενέργειας σαν συνάρτηση της θερμοκρασίας για διάφορα μεγέθη πλεγμάτων, με γραμμική διάσταση  $L = 10, 16$  για ποσοστό κατάληψης μαγνητικών δοτών 100%. Τα ολοκληρώματα ανταλλαγής για τέταρτους γείτονες έχουν υποτεθεί πως πέφτουν είτε σαν  $1/r$  είτε σαν  $1/r^2$ .

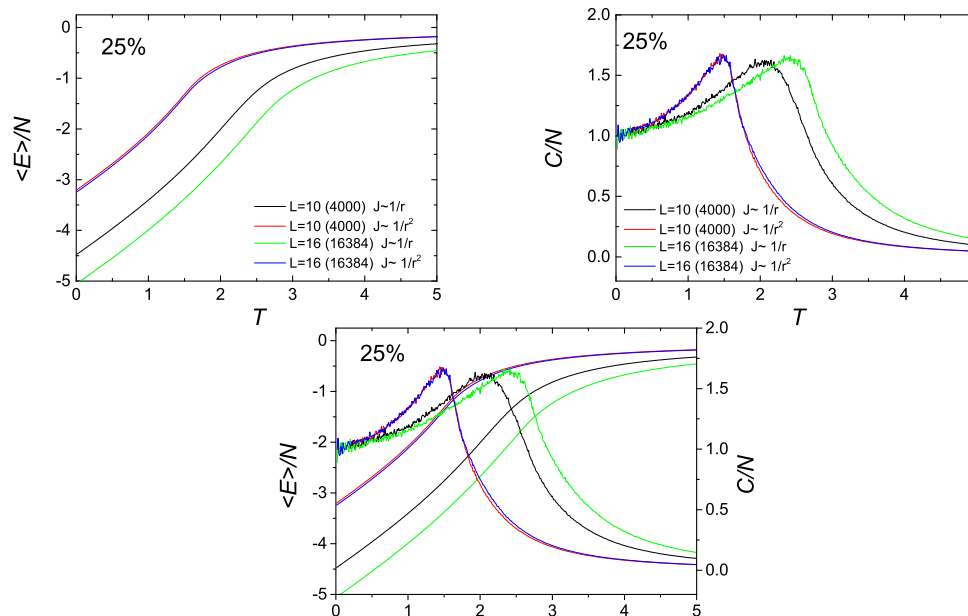
### 3.4.2 Η μαγνήτιση και η μαγνητική επιδεκτικότητα

Ακολουθούν τα αποτελέσματα για την μαγνήτιση ανά σπιν καθώς και την μαγνητική επιδεκτικότητα ανά σπιν για κάθε ποσοστό κατάληψης.

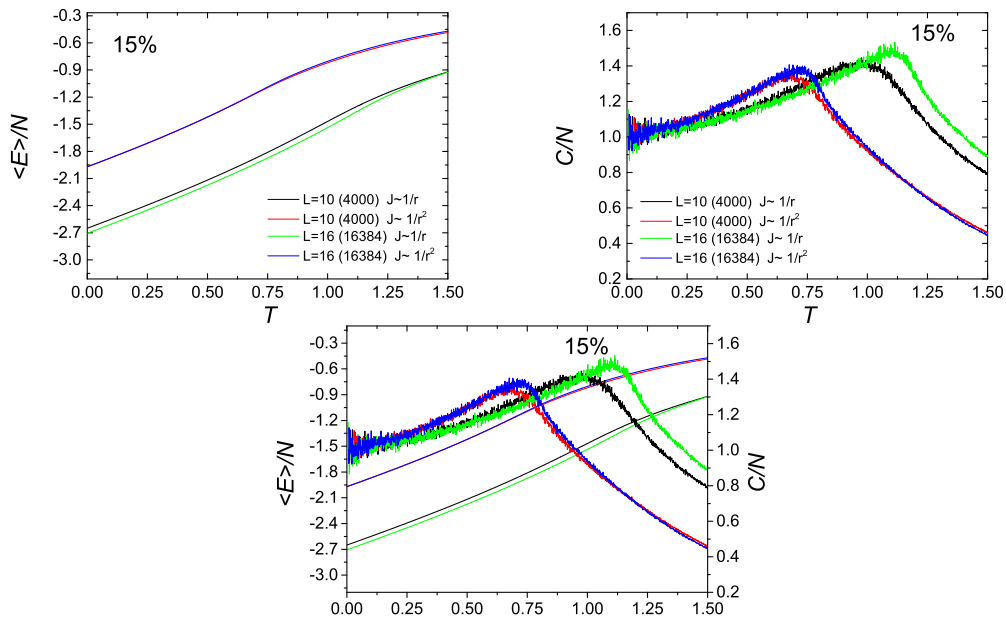
Για πιο μικρά ποσοστά κατάληψης είναι μεγαλύτερη η κλιμάκωση που εμφανίζουν μεταξύ τους



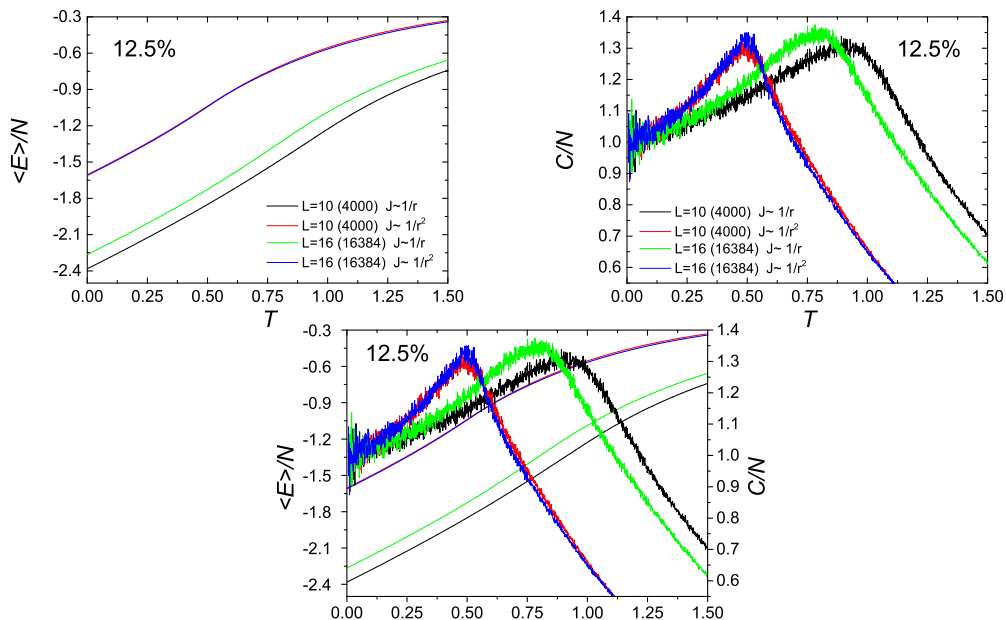
Σχήμα 3.66: Μέση ενέργεια ανά σπιν, η ειδική θερμότητα ανά σπιν ξεχωριστά και σε κοινό διάγραμμα και η παράγωγος της ενέργειας σαν συνάρτηση της θερμοκρασίας για διάφορα μεγέθη πλεγμάτων, με γραμμική διάσταση  $L = 10, 16$  για ποσοστό κατάληψης μαγνητικών δοτών 50%. Τα ολοκληρώματα ανταλλαγής για τέταρτους γείτονες έχουν υποτεθεί πως πέφτουν είτε σαν  $1/r$  είτε σαν  $1/r^2$ .



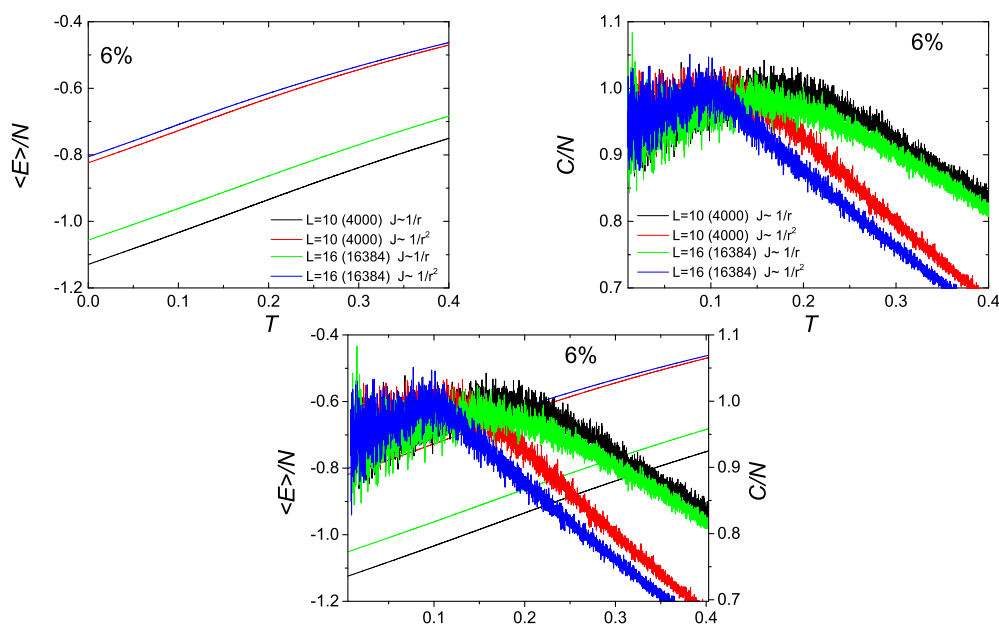
Σχήμα 3.67: Μέση ενέργεια ανά σπιν, η ειδική θερμότητα ανά σπιν ξεχωριστά και σε κοινό διάγραμμα σαν συνάρτηση της θερμοκρασίας για διάφορα μεγέθη πλεγμάτων, με γραμμική διάσταση  $L = 10, 16$  για ποσοστό κατάληψης μαγνητικών δοτών 25%. Τα ολοκληρώματα ανταλλαγής για τέταρτους γείτονες έχουν υποτεθεί πως πέφτουν είτε σαν  $1/r$  είτε σαν  $1/r^2$ .



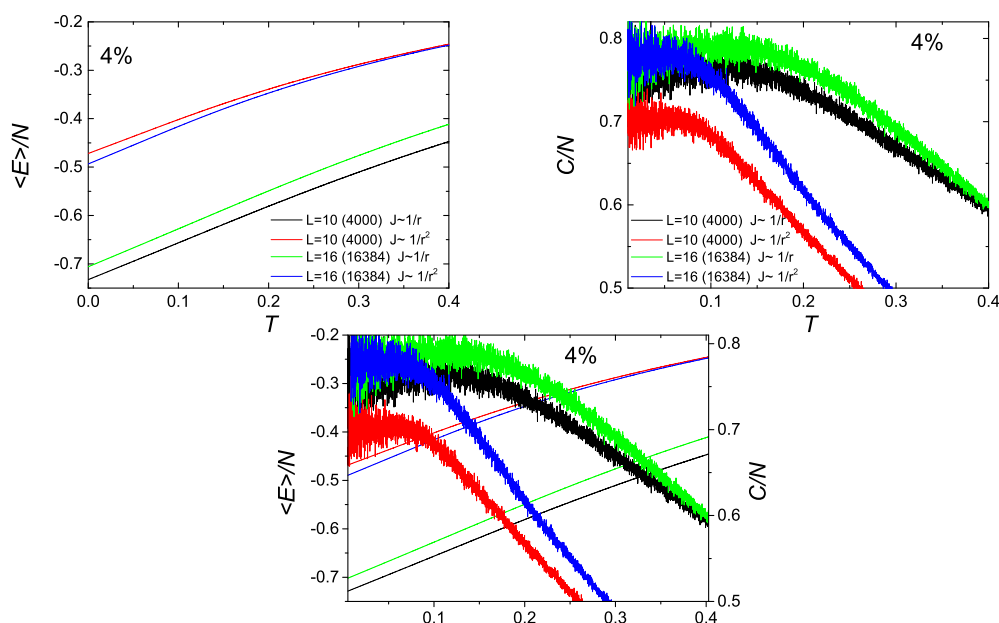
Σχήμα 3.68: Μέση ενέργεια ανά σπιν, η ειδική θερμότητα ανά σπιν ξεχωριστά και σε κοινό διάγραμμα σαν συνάρτηση της θερμοκρασίας για διάφορα μεγέθη πλεγμάτων, με γραμμική διάσταση  $L = 10, 16$  για ποσοστό κατάληψης μαγνητικών δοτών 15%. Τα ολοκληρώματα ανταλλαγής για τέταρτους γείτονες έχουν υποτεθεί πως πέφτουν είτε σαν  $1/r$  είτε σαν  $1/r^2$ .



Σχήμα 3.69: Μέση ενέργεια ανά σπιν, η ειδική θερμότητα ανά σπιν ξεχωριστά και σε κοινό διάγραμμα σαν συνάρτηση της θερμοκρασίας για διάφορα μεγέθη πλεγμάτων, με γραμμική διάσταση  $L = 10, 16$  για ποσοστό κατάληψης μαγνητικών δοτών 12.5%. Τα ολοκληρώματα ανταλλαγής για τέταρτους γείτονες έχουν υποτεθεί πως πέφτουν είτε σαν  $1/r$  είτε σαν  $1/r^2$ .

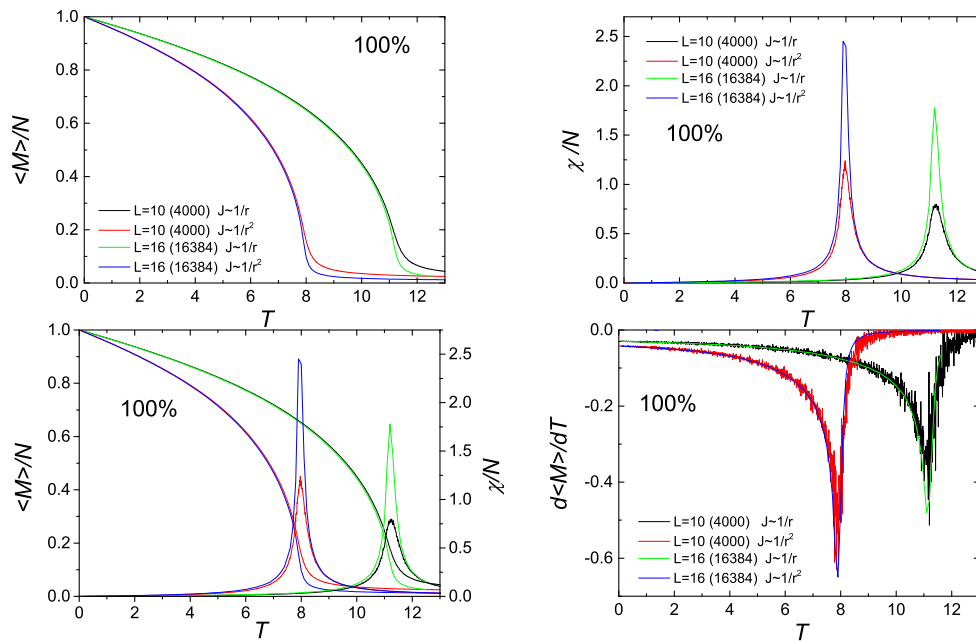


Σχήμα 3.70: Μέση ενέργεια ανά σπιν, η ειδική θερμότητα ανά σπιν ξεχωριστά και σε κοινό διάγραμμα σαν συνάρτηση της θερμοκρασίας για διάφορα μεγέθη πλεγμάτων, με γραμμική διάσταση  $L = 10, 16$  για ποσοστό κατάληψης μαγνητικών δοτών  $6\%$ . Τα ολοκληρώματα ανταλλαγής για τέταρτους γείτονες έχουν υποτεθεί πως πέφτουν είτε σαν  $1/r$  είτε σαν  $1/r^2$ .



Σχήμα 3.71: Μέση ενέργεια ανά σπιν, η ειδική θερμότητα ανά σπιν ξεχωριστά και σε κοινό διάγραμμα σαν συνάρτηση της θερμοκρασίας για διάφορα μεγέθη πλεγμάτων, με γραμμική διάσταση  $L = 10, 16$  για ποσοστό κατάληψης μαγνητικών δοτών  $4\%$ . Τα ολοκληρώματα ανταλλαγής για τέταρτους γείτονες έχουν υποτεθεί πως πέφτουν είτε σαν  $1/r$  είτε σαν  $1/r^2$ .

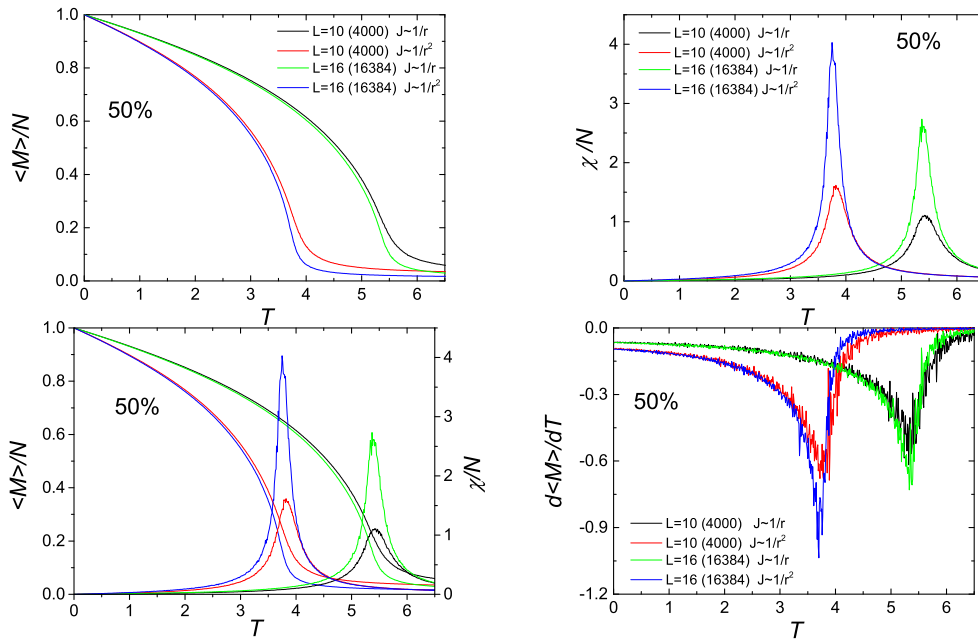
τα  $L$ . Η κόκκινη και η μπλε γραμμή <sup>11</sup> καθώς και η μαύρη με την πράσινη <sup>12</sup> για τα όλα τα ποσοστά μηδενίζονται πιο απότομα για  $L$  μεγαλύτερο όμως παρουσιάζουν παρόμοια συμπεριφορά. Γι' αυτό και οι κορυφές της μαγνητικής επιδεκτικότητας ανά σπιν για μεγαλύτερο  $L$  είναι ψηλότερες, καθώς η κλίση σε αυτή την περίπτωση είναι πιο απότομη. Στην περίπτωση που το  $J$  φθίνει σαν  $1/r^2$  φαίνεται πως οι κορυφές είναι ψηλότερες, καθώς η μαγνήτιση στο κρίσιμο σημείο τότε έχει λίγο πιο απότομη κλίση. Στην περίπτωση που φθίνει σαν  $1/r$  παρουσιάζεται μικρότερη  $T_c$  και αυτό επιβεβαιώνεται σε όλες τις περιπτώσεις διαφορετικών ποσοστών κατάληψης όπως είδαμε και στην ανάλυση των δεύτερων και τρίτων γειτόνων. Όσο μικραίνει το ποσοστό κατάληψης οι δύο κορυφές είναι όλο και πιο κοντά και άρα και οι κρίσιμες θερμοκρασίες διαφέρουν λιγότερο.



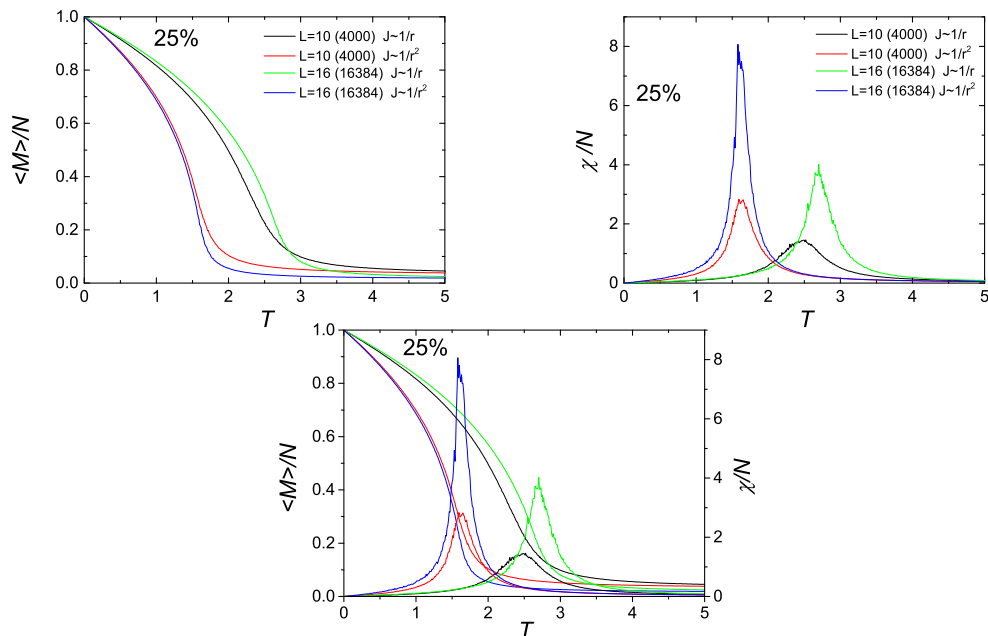
Σχήμα 3.72: Η μαγνήτιση ανά σπιν, η μαγνητική επιδεκτικότητα ανά σπιν ξεχωριστά και σε κοινό διάγραμμα και η παράγωγος της μαγνήτισης σαν συνάρτηση της θερμοκρασίας για διάφορα μεγέθη πλεγμάτων, με γραμμική διάσταση  $L = 10, 16$  για ποσοστό κατάληψης μαγνητικών δοτών 100%. Τα ολοκληρώματα ανταλλαγής για τέταρτους γείτονες έχουν υποτεθεί πως πέφτουν είτε σαν  $1/r$  είτε σαν  $1/r^2$ .

<sup>11</sup> που αφορούν την περίπτωση που το  $J$  φθίνει σαν  $1/r^2$

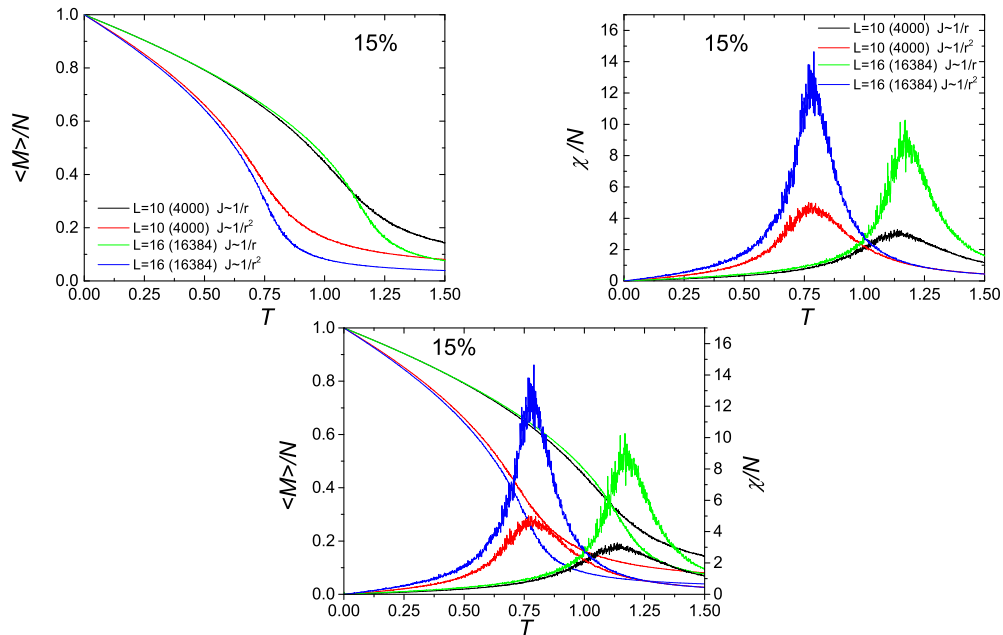
<sup>12</sup> που αφορούν την περίπτωση που το  $J$  φθίνει σαν  $1/r$



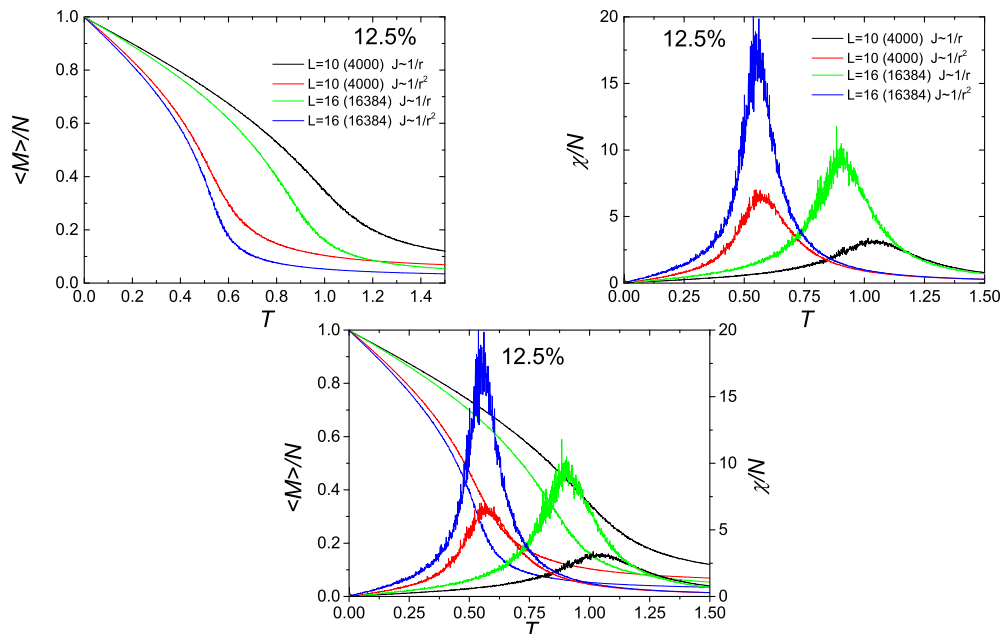
Σχήμα 3.73: Η μαγνήτιση ανά σπιν, η μαγνητική επιδεκτικότητα ανά σπιν ξεχωριστά και σε κοινό διάγραμμα και η παράγωγος της μαγνήτισης σαν συνάρτηση της θερμοκρασίας για διάφορα μεγέθη πλεγμάτων, με γραμμική διάσταση  $L = 10, 16$  για ποσοστό κατάληψης μαγνητικών δοτών 50%. Τα ολοκληρώματα ανταλλαγής για τέταρτους γείτονες έχουν υποτεθεί πως πέφτουν είτε σαν  $1/r$  είτε σαν  $1/r^2$ .



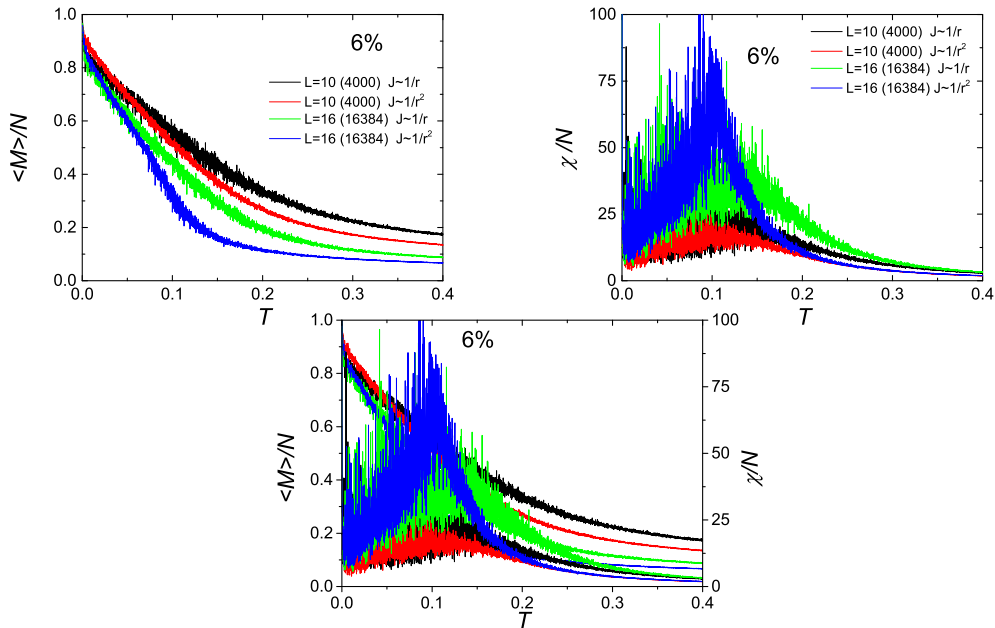
Σχήμα 3.74: Η μαγνήτιση ανά σπιν, η μαγνητική επιδεκτικότητα ανά σπιν ξεχωριστά και σε κοινό διάγραμμα σαν συνάρτηση της θερμοκρασίας για διάφορα μεγέθη πλεγμάτων, με γραμμική διάσταση  $L = 10, 16$  για ποσοστό κατάληψης μαγνητικών δοτών 25%. Τα ολοκληρώματα ανταλλαγής για τέταρτους γείτονες έχουν υποτεθεί πως πέφτουν είτε σαν  $1/r$  είτε σαν  $1/r^2$ .



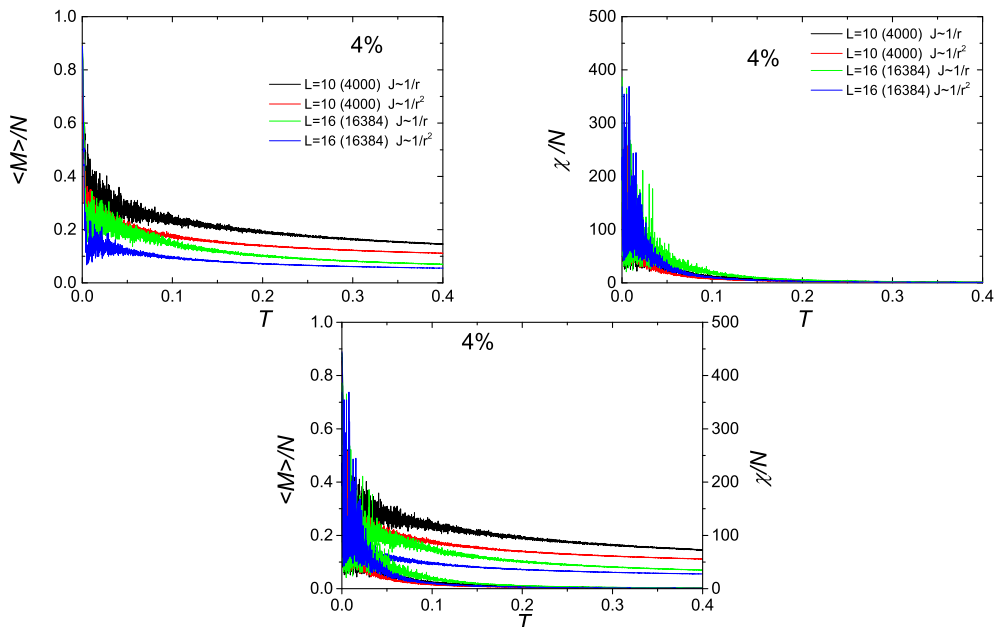
Σχήμα 3.75: Η μαγνήτιση ανά σπιν, η μαγνητική επιδεκτικότητα ανά σπιν ξεχωριστά και σε κοινό διάγραμμα σαν συνάρτηση της θερμοκρασίας για διάφορα μεγέθη πλεγμάτων, με γραμμική διάσταση  $L = 10, 16$  για ποσοστό κατάληψης μαγνητικών δοτών 15%. Τα ολοκληρώματα ανταλλαγής για τέταρτους γείτονες έχουν υποτεθεί πως πέφτουν είτε σαν  $1/r$  είτε σαν  $1/r^2$ .



Σχήμα 3.76: Η μαγνήτιση ανά σπιν, η μαγνητική επιδεκτικότητα ανά σπιν ξεχωριστά και σε κοινό διάγραμμα σαν συνάρτηση της θερμοκρασίας για διάφορα μεγέθη πλεγμάτων, με γραμμική διάσταση  $L = 10, 16$  για ποσοστό κατάληψης μαγνητικών δοτών 12.5%. Τα ολοκληρώματα ανταλλαγής για τέταρτους γείτονες έχουν υποτεθεί πως πέφτουν είτε σαν  $1/r$  είτε σαν  $1/r^2$ .



Σχήμα 3.77: Η μαγνήτιση ανά σπιν, η μαγνητική επιδεικτικότητα ανά σπιν ξεχωριστά και σε κοινό διάγραμμα σαν συνάρτηση της θερμοκρασίας για διάφορα μεγέθη πλεγμάτων, με γραμμική διάσταση  $L = 10, 16$  για ποσοστό κατάληψης μαγνητικών δοτών 6%. Τα ολοκληρώματα ανταλλαγής για τέταρτους γείτονες έχουν υποτεθεί πως πέφτουν είτε σαν  $1/r$  είτε σαν  $1/r^2$ .

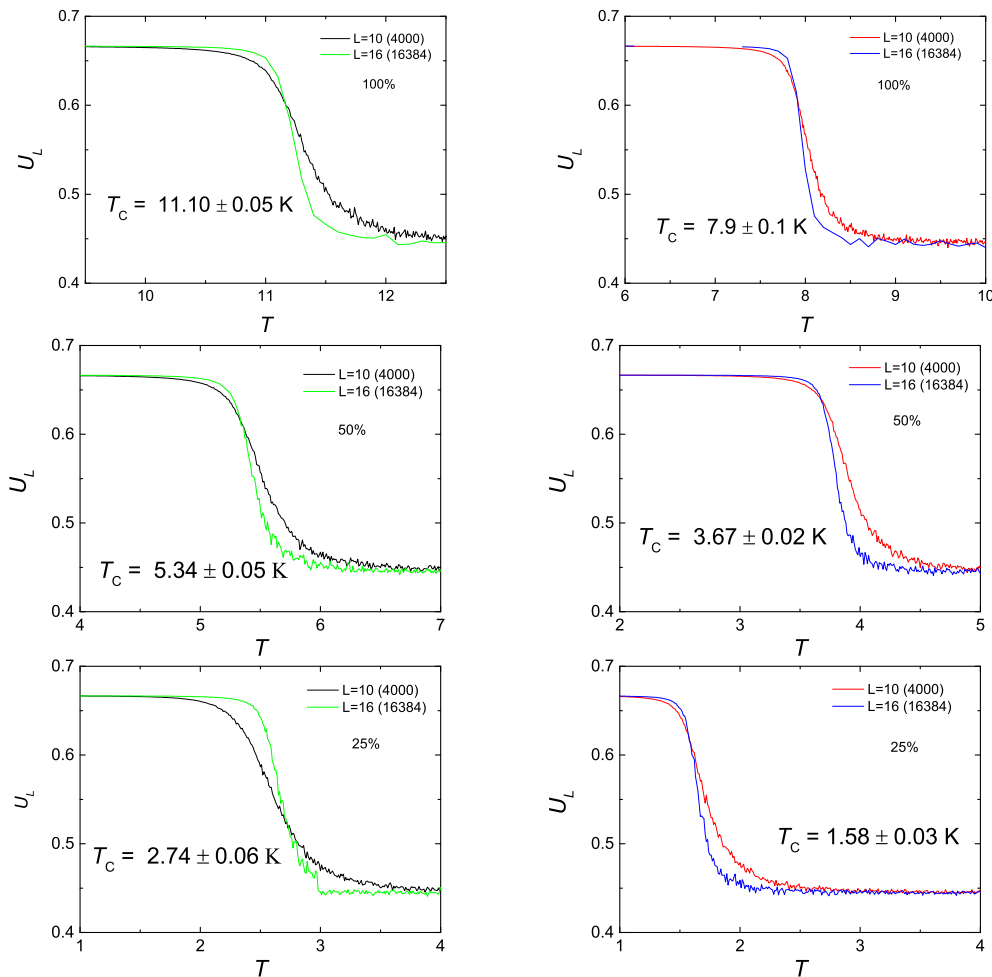


Σχήμα 3.78: Η μαγνήτιση ανά σπιν, η μαγνητική επιδεικτικότητα ανά σπιν ξεχωριστά και σε κοινό διάγραμμα σαν συνάρτηση της θερμοκρασίας για διάφορα μεγέθη πλεγμάτων, με γραμμική διάσταση  $L = 10, 16$  για ποσοστό κατάληψης μαγνητικών δοτών 4%. Τα ολοκληρώματα ανταλλαγής για τέταρτους γείτονες έχουν υποτεθεί πως πέφτουν είτε σαν  $1/r$  είτε σαν  $1/r^2$ .

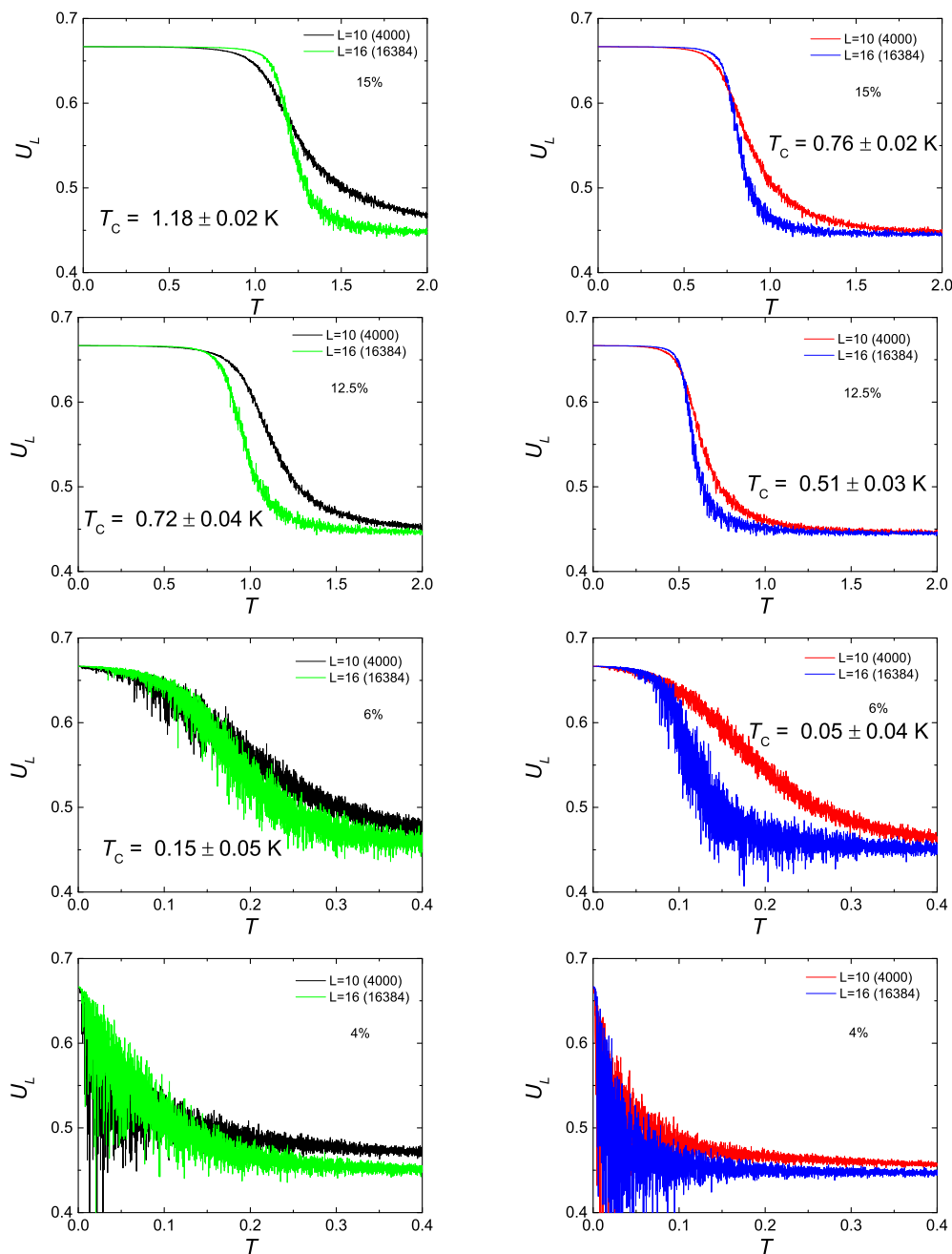


### 3.4.3 Ο συσσωρευτής τέταρτης τάξης

Ακολουθούν τα αποτελέσματα για τον συσσωρευτή τέταρτης τάξης για την μαγνήτιση ανά σπιν. Πάλι φαίνεται οι κρίσιμες να είναι ελαφρώς διαφορετικές για διαφορετικά  $J$ . Συγκεκριμένα στην περίπτωση που φθίνει σαν  $1/r^2$  παρουσιάζεται μικρότερη  $T_c$  για όλα τα ποσοστά κατάληψης. Όσο μικραίνει το ποσοστό κατάληψης μαγνητικών προσομίξεων αυξάνονται τα σφάλματα. Μέχρι το ποσοστό κατάληψης 6% μπορεί να γίνει εκτίμηση της κρίσιμης θερμοκρασίας ενώ στο ποσοστό κατάληψης 4% όχι. Ισχύουν τα σχόλια που συζητήθηκαν και για την περίπτωση πρώτων γειτόνων για τα όρια του συσσωρευτή σε μηδενική και άπειρη θερμοκρασία.



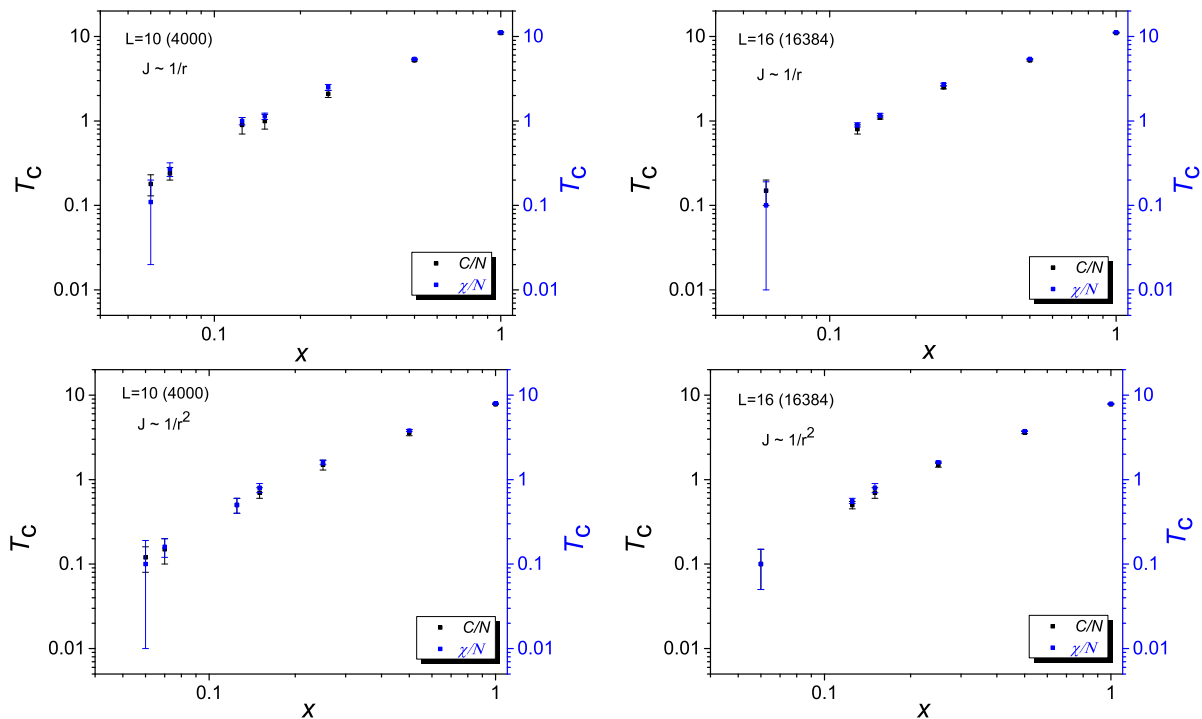
Σχήμα 3.79: Ο συσσωρευτής τέταρτης τάξης σαν συνάρτηση της θερμοκρασίας για διάφορα μεγέθη πλεγμάτων, με γραμμική διάσταση  $L = 10, 16$ , με ποσοστά κατάληψης  $p = 0.100$  (100%),  $p = 0.50$  (50%) και  $p = 0.25$  (25%). Τα ολοκληρώματα ανταλλαγής για τρίτους γείτονες έχουν υποτεθεί πως πέφτουν είτε σαν  $1/r$  (αριστερή στήλη) είτε σαν  $1/r^2$  (δεξιά στήλη).



Σχήμα 3.80: Ο συσσωρευτής τέταρτης τάξης σαν συνάρτηση της θερμοκρασίας για διάφορα μεγέθη πλεγμάτων, με γραμμική διάσταση  $L = 10, 16$ , με ποσοστά κατάληψης  $p = 0.15$  (15%),  $p = 0.125$  (12.5%),  $p = 0.06$  (6%) και  $p = 0.04$  (4%). Τα ολοκληρώματα ανταλλαγής για τρίτους γείτονες έχουν υποτεθεί πως πέφτουν είτε σαν  $1/r$  (αριστερή στήλη) είτε σαν  $1/r^2$  (δεξιά στήλη).

### 3.4.4 Εκτίμηση κρίσιμων θερμοκρασιών

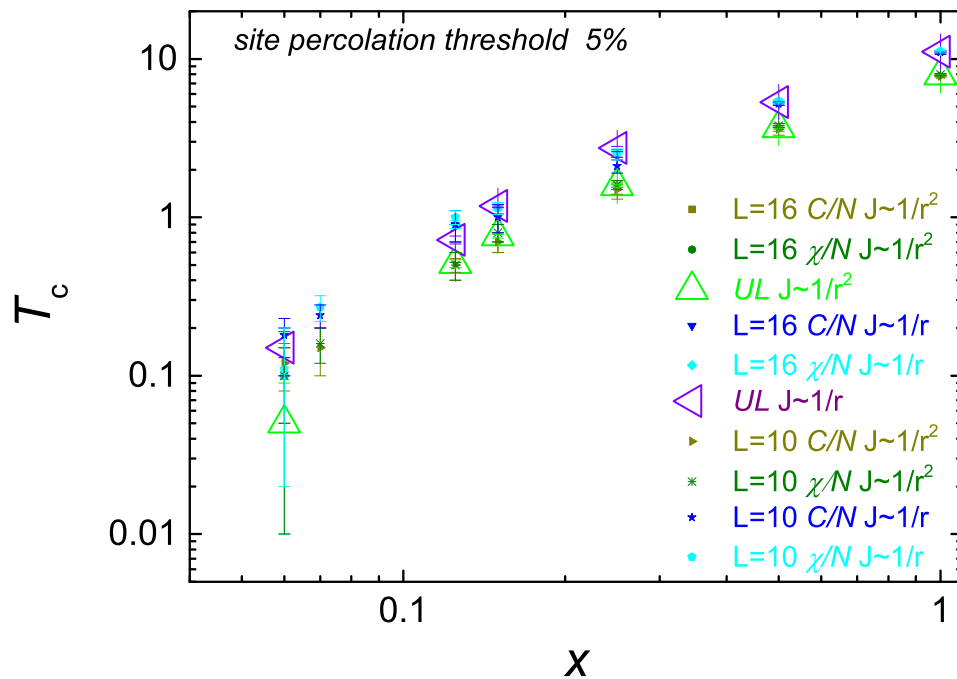
Παρουσιάζονται τα αποτελέσματα για την εκτίμηση των κρίσιμων θερμοκρασιών και ζωγραφίζονται σε λογαριθμικές κλίμακες οι κρίσιμες θερμοκρασίες σαν συνάρτηση της πιθανότητας κατάληψης μαγνητικών δοτών. Παρουσιάζονται οι μέθοδοι της ειδικής θερμότητας ( $C/N$ ) και της μαγνητικής επιδεκτικότητας ( $\chi/N$ ).



Σχήμα 3.81: Οι κρίσιμες θερμοκρασίες σαν συνάρτηση της πιθανότητας κατάληψης μαγνητικών δοτών εκτιμημένες από τα διαγράμματα της ειδικής θερμότητας και της μαγνητικής επιδεκτικότητας μαζί με το σφάλμα τους για διάφορα μεγέθη πλεγμάτων, με γραμμική διάσταση  $L = 10, 16$ .

Στο τέλος συνοψίζονται οι μέθοδοι εκτίμησης της κρίσιμης θερμοκρασίας σε ένα διάγραμμα στο οποίο υπάρχει και η  $U_L$  method.

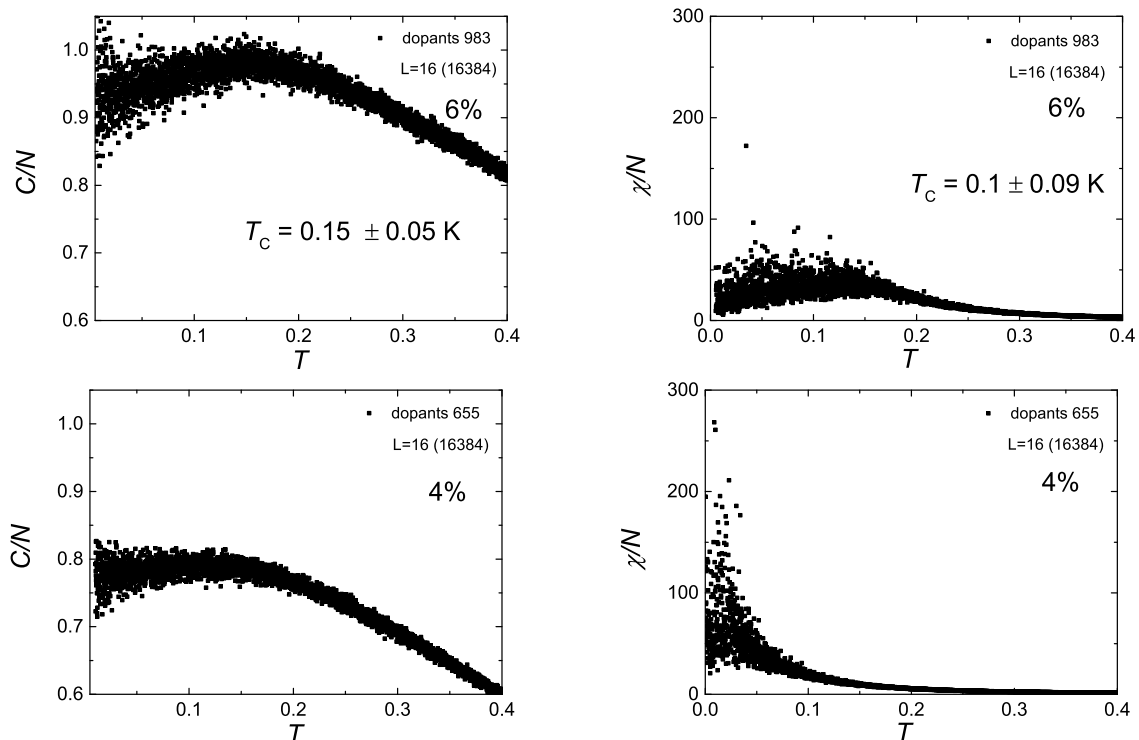
Όπως φαίνεται όσο μεγαλώνει το  $L$  τόσο πιο κοντά είναι τα αποτελέσματα των δύο μεθόδων, της ειδικής θερμότητας  $C/N$  και μαγνητικής επιδεκτικότητας  $\chi/N$ . Τα αποτελέσματα από το  $U_L$  method είναι κάπου στο ενδιάμεσο. Η μέθοδος ειδικής θερμότητας  $C/N$  φαίνεται να έχει μεγαλύτερα σφάλματα από αυτή της μαγνητικής επιδεκτικότητας  $\chi/N$ . Τέλος, όσο μικραίνει το ποσοστό κατάληψης μαγνητικών προσιμύσεων μεγαλώνει το σχετικό σφάλματα στον υπολογισμό της κρίσιμης θερμοκρασίας.



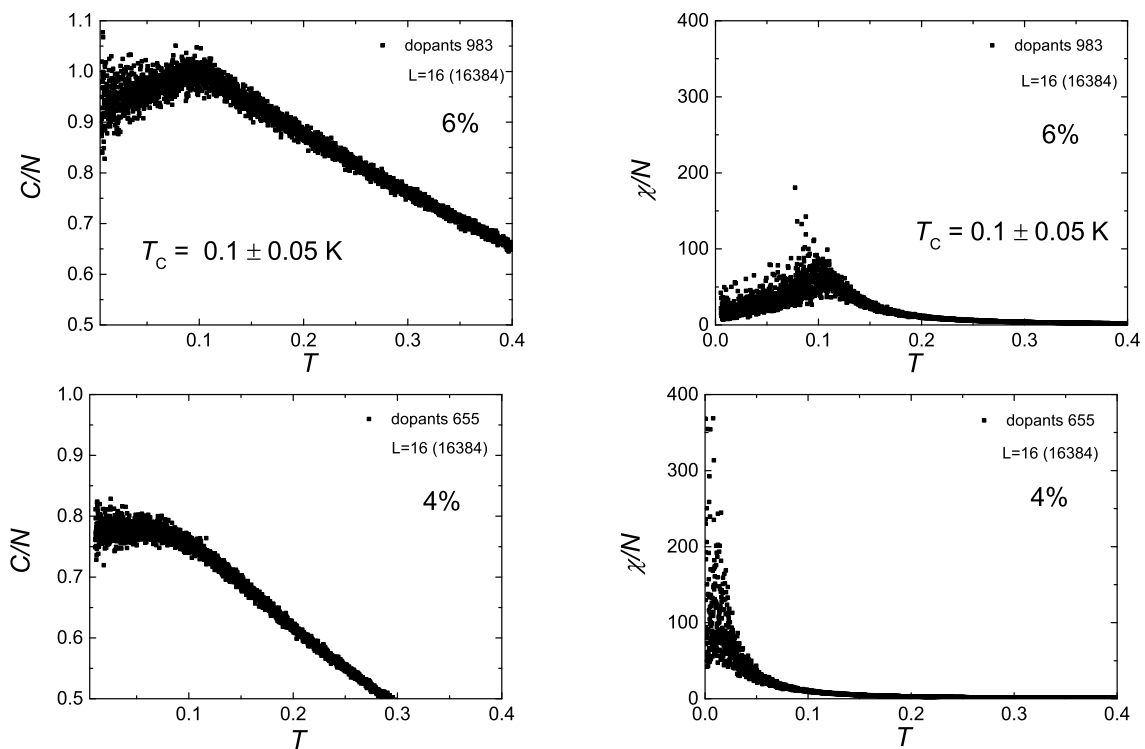
Σχήμα 3.82: Οι κρίσιμες θερμοκρασίες σαν συνάρτηση της πιθανότητας κατάληψης μαγνητικών δοτών. Εκτιμημένες από τα διαγράμματα της ειδικής θερμότητας και της μαγνητικής επιδεκτικότητας μαζί με το σφάλμα τους. Συνοπτικό διάγραμμα όπου φαίνονται όλα τα μεγέθη μαζί και είναι μαζί και οι κρίσιμες που βρέθηκαν με την βοήθεια του συσσωρευτή 4ης τάξης για την μαγνήτιση ανά σπιν. Οι υπολογισμοί αφορούν *fcc* πλέγμα για διάφορα μεγέθη πλεγμάτων, με γραμμική διάσταση  $L = 10, 16$ . Με απόχρωσεις του μπλέ είναι η περίπτωση που τα ολοκληρώματα ανταλλαγής πέφτουν σαν  $1/r$  ενώ οι απόχρωσεις του πράσινου είναι οι περιπτώσεις που πέφτουν σαν  $1/r^2$ .

### 3.4.5 Εκτίμηση πιθανότητας διήθησης

Το κρίσιμο ποσοστό κατάληψης για το πλέγμα fcc λαμβάνοντας υπόψιν την αλληλεπίδραση πρώτων, δεύτερων, τρίτων και τέταρτων γειτόνων (site percolation threshold of fcc lattice) είναι 0.05 5% [45]. Εδώ φαίνονται τα ποσοστά κατάληψης  $p = 0.06$  (6%) και  $p = 0.04$  (4%) για  $L = 16$  (16384) με αναπαράσταση θερμοδυναμικών μεγεθών ειδικής θερμότητας ανά σπιν και μαγνητικής επιδεκτικότητας ανά σπιν. Και τα δύο ποσοστά είχαν ήδη παρουσιαστεί σε προηγούμενα διαγράμματα. Φαίνεται στο 6% η μύτερη κορυφή της ειδικής θερμότητας που όσο πλησιάζουμε το 4% παύει να είναι μύτερη και να τείνει στο 1 για  $T = 0$  J/k<sub>B</sub>. Στην μαγνητική επιδεκτικότητα μόλις στο 4% η κορυφή έχει σχεδόν πλησιάσει το μηδέν. Επίσης στην περίπτωση που το  $J$  φθίνει σαν  $1/r^2$  η κορυφή είναι πιο καθαρή στο ποσοστό 6% και φαίνεται πιο έντονα η αλλαγή στα χαρακτηριστικά των θερμοδυναμικών μεγεθών όταν έχει φτάσει σε ποσοστό 4%. Η μέθοδος προσέγγισης μας δεν είναι σε θέση να προσδιορίσει με ακρίβεια το κρίσιμο ποσοστό κατάληψης, ωστόσο φαίνεται να συμφωνούν τα αποτελέσματα μας με την βιβλιογραφία.



Σχήμα 3.83: Η ειδική θερμότητα ανά σπιν (αριστερά) και η μαγνητική επιδεκτικότητα ανά σπιν σαν (δεξιά) συνάρτηση της θερμοκρασίας σε fcc πλέγμα γραμμικής διάστασης  $L = 16$  (16384), με ποσοστά κατάληψης  $p = 0.06$  (6%) και  $p = 0.04$  (4%). Αυτά τα διαγράμματα είναι για την περίπτωση που τα ολοκληρώματα ανταλλαγής πέφτουν σαν  $1/r$ .



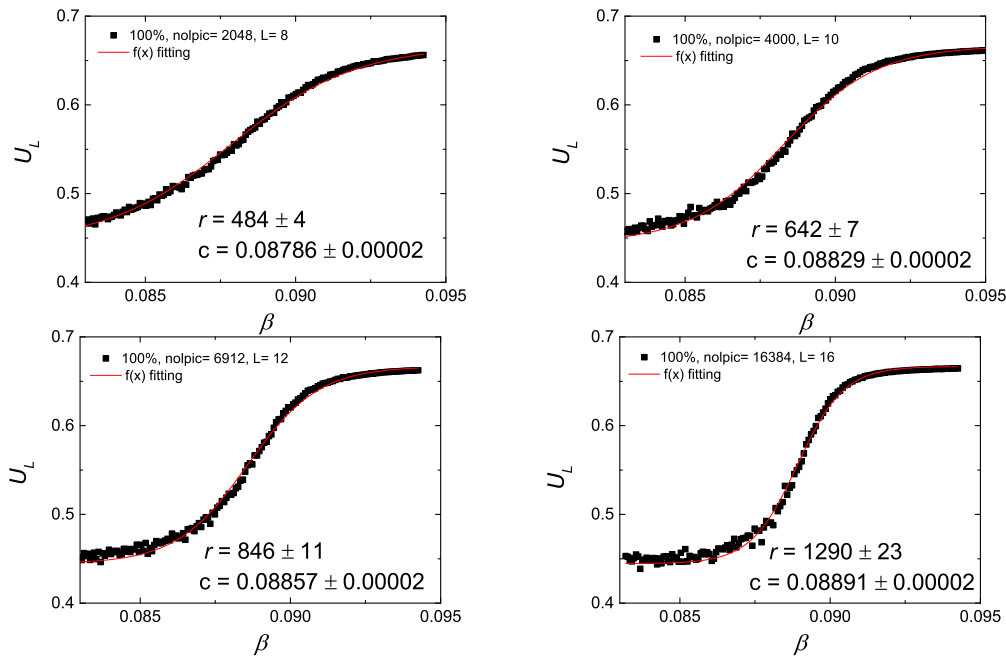
Σχήμα 3.84: Η ειδική θερμότητα ανά σπιν (αριστερά) και η μαγνητική επιδεκτικότητα ανά σπιν σαν (δεξιά) συνάρτηση της θερμοκρασίας σε fcc πλέγμα γραμμικής διάστασης  $L = 16$  (16384), με ποσοστά κατάληψης  $p = 0.06$  (6%) και  $p = 0.4$  (4%). Αυτά τα διαγράμματα είναι για την περίπτωση που τα ολοκληρώματα ανταλλαγής πέφτουν σαν  $1/r^2$ .

### 3.4.6 Εκτίμηση κρίσιμων εκθετών για πλήρως κατειλημμένο πλέγμα

Με αντίστοιχο τρόπο με αυτόν που αναλύθηκε στην περίπτωση πρώτων γειτόνων εκτιμούνται οι κρίσιμοι εκθέτες για την περίπτωση αλληλεπίδρασης γειτόνων 1ης, 2ης τάξης 3ης τάξης και 4ης τάξης.

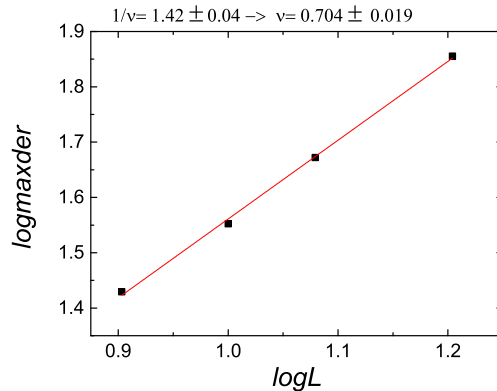
#### 3.4.6.1 Περίπτωση $J$ φθίνοντος σαν $1/r$

Υπολογίζοντας με προσομοίωση Monte Carlo τους συσσωρευτές τέταρτης τάξης για την μαγνήτιση ανά σπιν σαν συνάρτηση της αντίστροφης θερμοκρασίας  $\beta = \frac{1}{k_B T} = \frac{1}{T}$  ( $k_B = 1$ ) και κάνοντας την προσαρμογή της  $f(x)$  στις γραφικές παραστάσεις του  $U_L(\beta)$  μπορούμε να εκτιμήσουμε το  $r$ . Γνωρίζοντας το  $r$  υπολογίζεται η μέγιστη παράγωγος του  $U_L$  ως προς  $\beta$ .



Σχήμα 3.85: Ο συσσωρευτής 4ης τάξης για την μαγνήτιση ανά σπιν σαν συνάρτηση της αντίστροφης θερμοκρασίας  $U_L(\beta)$ . Έχει γίνει προσαρμογή στην συνάρτηση  $f(x)$  ώστε να προσδιοριστεί το  $r$ .

Ο κρίσιμος εκθέτης  $\nu$  για την περίπτωση των τέταρτων γειτόνων και  $J$  φθίνοντος σαν  $1/r$  προκύπτει  $\nu = 0.704(19)$ . Έγινε προσπάθεια να εκτιμηθούν και οι κρίσιμοι εκθέτες  $\alpha$  και  $\gamma$  μελετώντας την κλιμάκωση του μεγίστου της ειδικής θερμότητας ανά σπιν και της μαγνητικής επιδεκτικότητας ανά σπιν αντίστοιχα. Όμως επειδή δεν υπήρξε ο υπολογιστικός χρόνος να αυξηθεί το  $n_{eq}$  και το  $n_{av}$  κατάλληλα, ώστε για μικρά βήματα της θερμοκρασίας στην κρίσιμη περιοχή να μπορέσουμε να έχουμε αξιόπιστες τιμές με κατάλληλα μικρά σφάλματα για τα μέγιστα των



Σχήμα 3.86: Ο λογάριθμος του μέγιστου της παραγώγου του συσσωρευτή τέταρτης τάξης για την μαγνήτιση ανά σπιν στην κρίσιμη θερμοκρασία σαν συνάρτηση του  $\log L$ .

$C/N$  και  $\chi/N$ , δεν θεωρούνται αξιόπιστες οι εκτιμήσεις. Οι προσεγγίσεις είναι οι εξής για τον υπολογισμό του  $\alpha(\delta\alpha) = -0.134(15)$  και του  $\gamma(\delta\gamma) = 1.25(4)$ .

### 3.4.6.2 Περίπτωση $J$ φθίνοντος σαν $1/r^2$

Υπολογίζοντας με προσομοίωση Monte Carlo τους συσσωρευτές τέταρτης τάξης για την μαγνήτιση ανά σπιν συνάρτηση της αντίστροφης θερμοκρασίας  $\beta = \frac{1}{k_B T} = \frac{1}{T} = (k_B = 1)$  και κάνοντας την προσαρμογή της  $f(x)$  στις γραφικές παραστάσεις του  $\hat{U}_L(\beta)$  μπορούμε να εκτιμήσουμε το  $r$ . Γνωρίζοντας το  $r$  υπολογίζεται η μέγιστη παράγωγος του  $U_L$  ως προς  $\beta$ .

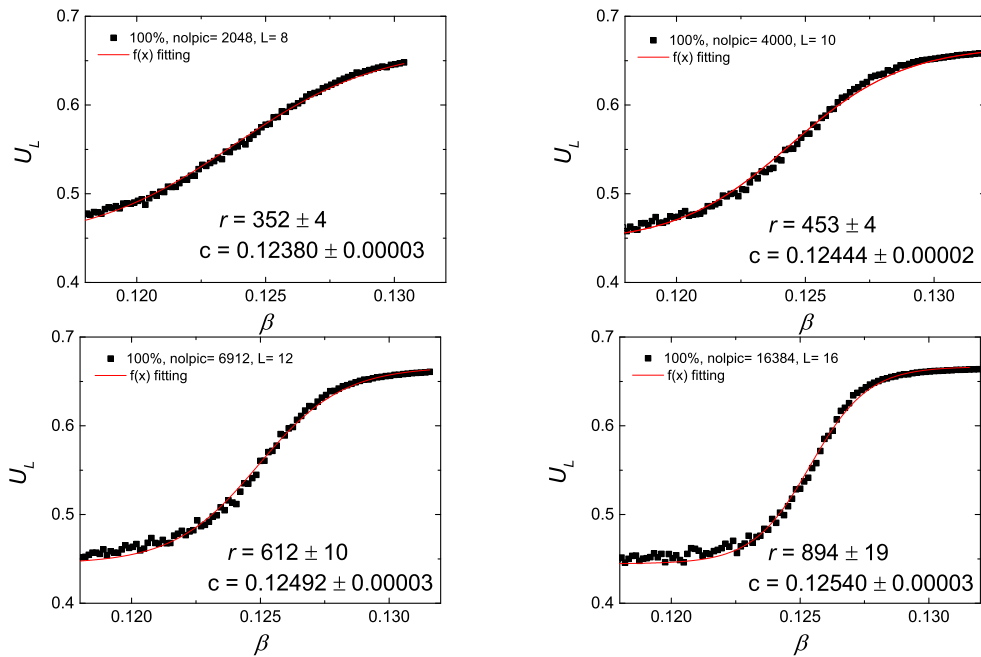
Ο κρίσιμος εκθέτης  $\nu$  για την περίπτωση των τέταρτων γειτόνων και  $J$  φθίνοντος σαν  $1/r^2$  προκύπτει  $\nu = 0.73(3)$ . Έγινε προσπάθεια να εκτιμηθούν και οι κρίσιμοι εκθέτες  $\alpha$  και  $\gamma$  μελετώντας την κλιμάκωση του μέγιστου της ειδική θερμότητας ανά σπιν και της μαγνητικής επιδεκτικότητας ανά σπιν αντίστοιχα. Όμως επειδή δεν υπήρξε ο υπολογιστικός χρόνος να αυξηθεί το  $neq$  και το  $n_{av}$  κατάλληλα, ώστε για μικρά βήματα της θερμοκρασίας στην κρίσιμη περιοχή να μπορέσουμε να έχουμε αξιόπιστες τιμές με κατάλληλα μικρά σφάλματα για τα μέγιστα των  $C/N$  και  $\chi/N$ , δεν θεωρούνται αξιόπιστες οι εκτιμήσεις. Οι προσεγγίσεις είναι οι εξής για τον υπολογισμό του  $\alpha(\delta\alpha) = -0.097(12)$  και του  $\gamma(\delta\gamma) = 1.33(7)$ .

Συνοψίζοντας οι εκτιμήσεις για τους κρίσιμους εκθέτες:

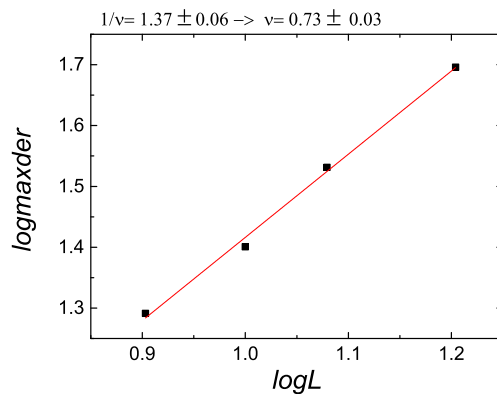
Εκθέτης	$n = 1$
$\alpha(\delta\alpha)$	-0.137(6)
$\beta(\delta\beta)$	0.393(14)
$\gamma(\delta\gamma)$	1.403(38)

Φαίνεται από τις εκτιμήσεις για 1ους, 2ους, 3ους και 4ους γείτονες πως το  $\nu$  βγαίνει στα πλαίσια των σφαλμάτων προκύπτει το ίδιο όπως αναμενόταν λόγω της οικουμενικότητας. Η εκτίμηση για





Σχήμα 3.87: Ο συσσωρευτής 4ης τάξης για την μαγνήτιση ανά σπιν σαν συνάρτηση της αντίστροφης θερμοκρασίας  $U_L(\beta)$ . Έχει γίνει προσαρμογή στην συνάρτηση  $f(x)$  ώστε να προσδιοριστεί το  $r$ .



Σχήμα 3.88: Ο λογάριθμος του μέγιστου της παραγώγου του συσσωρευτή τέταρτης τάξης για την μαγνήτιση ανά σπιν στην κρίσιμη θερμοκρασία σαν συνάρτηση του  $\log L$ .

πρώτους γείτονες, επειδή έχουν ληφθεί δεδομένα από περισσότερα μεγέθη  $L$ , είναι πιο ακριβής. Για τις περιπτώσεις 2ων, 3ων και 4ων γειτόνων τα δεδομένα από τις προσομοιώσεις ήταν πιο φτωχά όμως αυξάνοντας την τάξη των γειτόνων τα αποτελέσματα βελτιώνονται.

Εκθέτης	$n = 1$	$n = 2$	$n = 3$	$n = 4$
$\nu(\delta\nu)_{J- > 1/r}$	0.701(19)	0.72(3)	0.70(4)	0.704(19)
$\nu(\delta\nu)_{J- > 1/r^2}$	0.701(19)	0.75(3)	0.703(10)	0.73(3)

# Κεφάλαιο 4

## ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΕΩΝ ΣΤΟ ΥΛΙΚΟ (Ga,Mn)N

### 4.1 Πλέγμα fcc στο υλικό $\text{Ga}_{1-x}\text{Mn}_x\text{N}$ (zinc-blende)

Έπειτα μελετάται το πλέγμα fcc για το υλικό  $\text{Ga}_{1-x}\text{Mn}_x\text{N}$ . Ουσιαστικά πρόκειται για υλικό GaN με προσμίξεις Mn. Κάθε φορά αραιώνεται σταδιακά η περιεκτικότητα σε μαγνητικές προσμίξεις Mn. Συγκεκριμένα εμφανίζονται αποτελέσματα για τις περιπτώσεις όπου το  $x = 1$ ,  $x = 0.5$ ,  $x = 0.25$ ,  $x = 0.125$ ,  $x = 0.0625$ ,  $x = 0.03125$  και  $x = 0.015625$ .

Τα ολοκληρώματα ανταλλαγής  $J$  που χρησιμοποιήθηκαν λαμβάνοντας υπόψιν έως και τους 16ους πλησιέστερους γείτονες είναι αυτά που αναφέρονται στην βιβλιογραφία [15] και υπολογίστηκαν βασιζόμενα στην προσέγγιση ισχυρής δέσμησης (tight-binding-approach).

Οι προσομοιώσεις Monte Carlo έγιναν στις θερμοκρασιακές περιοχές: i)  $T \in [10, 700]$  με βήμα  $\Delta T = 10$  K για  $x = 1$ , ii)  $T \in [10, 430]$  με βήμα  $\Delta T = 10$  K για το  $x = 0.5$ , iii)  $T \in [10, 250]$  με βήμα  $\Delta T = 10$  K για  $x = 0.25$ , iv)  $T \in [1, 100]$  με βήμα  $\Delta T = 1$  K για  $x = 0.125$ , v)  $T \in [1, 50]$  με βήμα  $\Delta T = 1$  K για  $x = 0.0625$ , vi)  $T \in [0.1, 10]$  με βήμα  $\Delta T = 0.1$  K για  $x = 0.03125$ , vii)  $T \in [0.01, 1]$  με βήμα  $\Delta T = 0.01$  K για  $x = 0.015625$ . Υπολογίστηκαν τα θερμοδυναμικά μεγέθη για διάφορα μεγέθη πλεγμάτων, με γραμμική διάσταση  $L = 8, 12, 16, 24, 26$ .

Το σύστημα αφέθηκε να ισορροπήσει για 2000 sweeps. Η χρονοσειρά έχει συνολικά χρονικά βήματα  $\mathcal{N} = n_{\text{av}} = 200.000$ .

Έτσι υπολογίζονται τα θερμοδυναμικά μεγέθη που παρουσιάζονται στην συνέχεια.

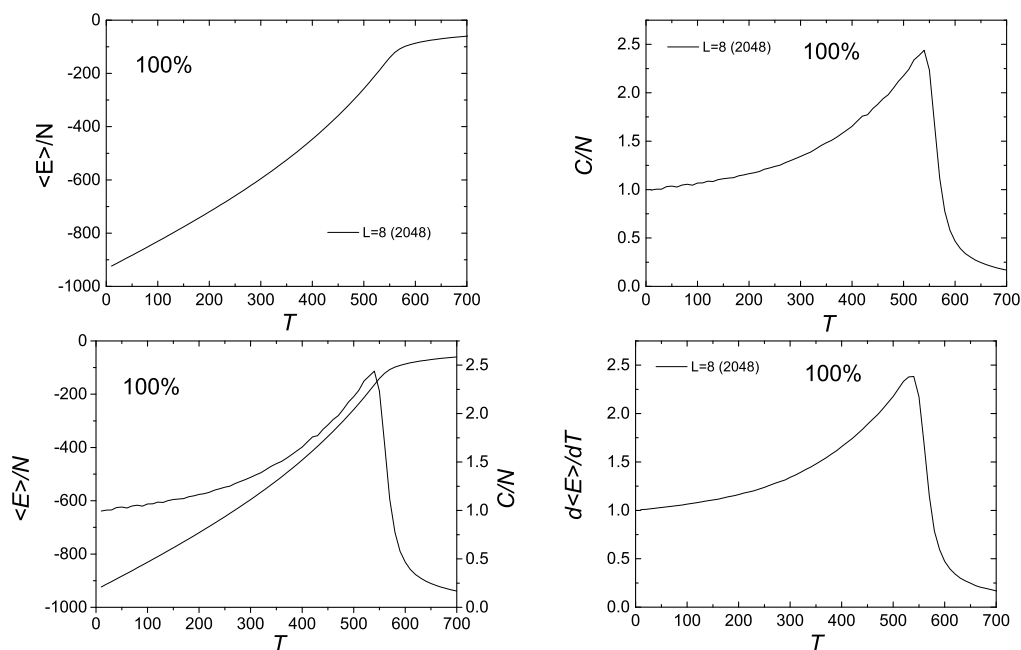
#### 4.1.1 Η μέση ενέργεια και η ειδική θερμότητα

Ακολουθούν τα αποτελέσματα για την μέση ενέργεια ανά σπιν καθώς και την ειδική θερμότητα ανά σπιν για κάθε ποσοστό κατάληψης.

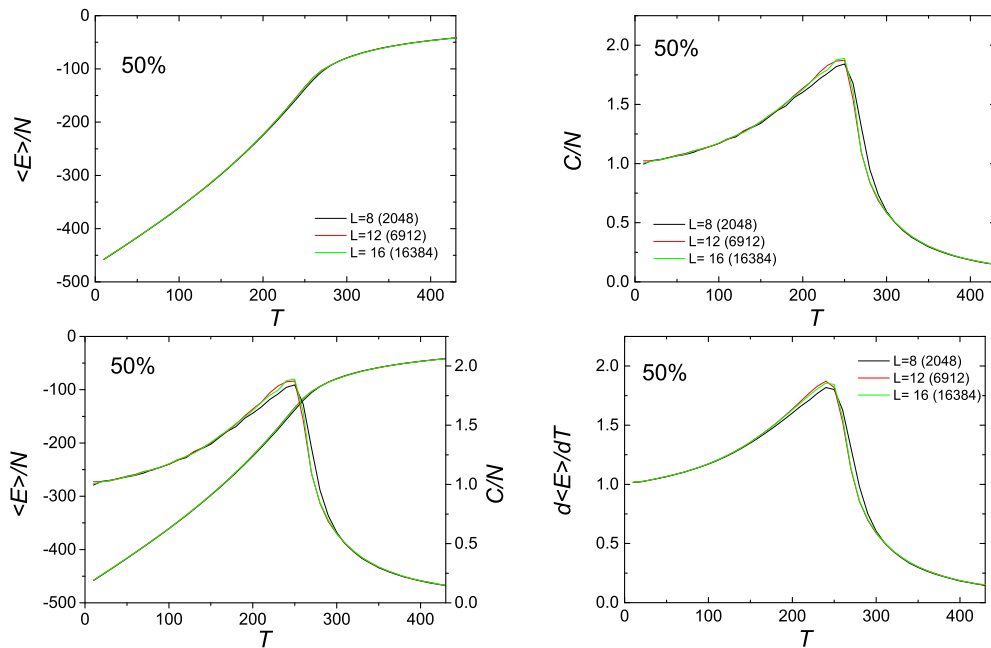
Για τα ποσοστά 100% ( $x = 1$ ), 50% ( $x = 0.5$ ) και 25% ( $x = 0.25$ ) σχεδόν ταυτίζονται για διαφορετικά  $L$  και οι μέσες ενέργειες ανά σπιν και οι ειδικές θερμότητες ανά σπιν. Στην περίπτωση του 12.5% ( $x = 0.125$ ) οι μέσες ενέργειες διαφέρουν λίγο και οι κορυφές της ειδικής θερμότητας σχεδόν ταυτίζονται. Στην περίπτωση του 6.25% ( $x = 0.0625$ ) οι μέσες ενέργειες και οι κορυφές της ειδικής θερμότητας διαφέρουν όλο και περισσότερο, με την γραμμική διάσταση πλέγματος  $L = 8$  να ξεχωρίζει από την υπόλοιπες ως το μικρότερο πλέγμα. Οι κορυφές έχουν γίνει λιγότερο μυτερές. Οι κορυφές της ειδικής θερμότητας ανά σπιν είναι θορυβώδεις για τα

ποσοστά 3.125% ( $x = 0.03125$ ) και 1.5625% ( $x = 0.015625$ ) και οι μέσες ενέργειες όσο πιο μικρή είναι η περιεκτικότητα του Mn τόσο πιο πολύ διαφέρουν μεταξύ τους.

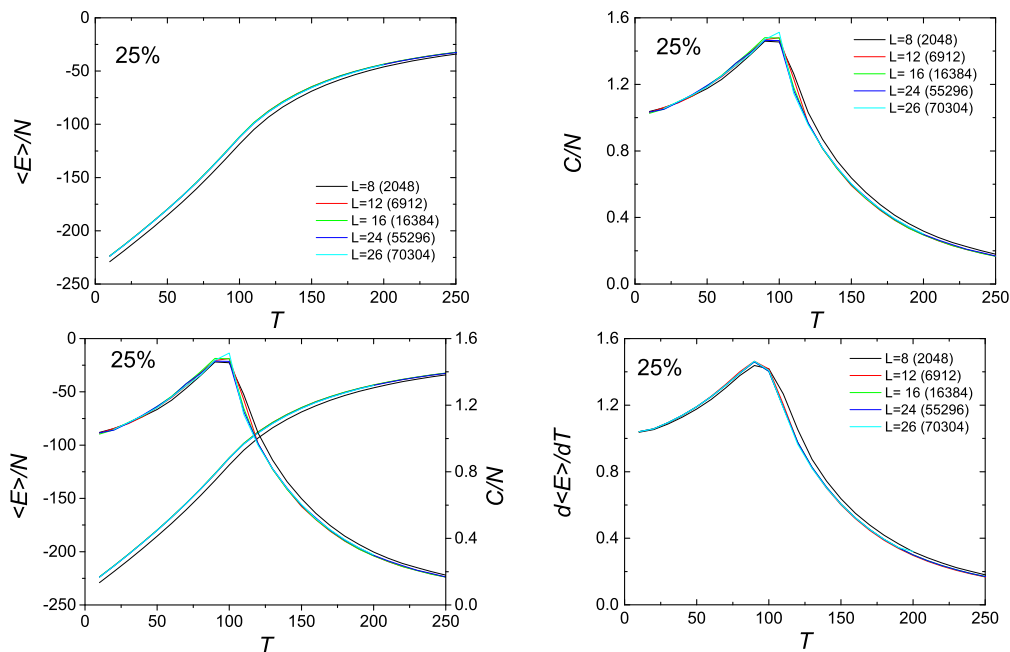
Επίσης μέχρι και το 3.125% φαίνεται καθαρά πως το όριο της ειδικής θερμότητας για μηδενική θερμοκρασία είναι η μονάδα και η κορυφή της ειδικής θερμότητας παραμένει μωτερή αν και θορυβώδης. Γίνεται λιγότερο μωτερή για 1.5625% και κατεβαίνει λίγο χαμηλότερα από το όριο της ειδικής θερμότητας για μηδενική θερμοκρασία (μονάδα).



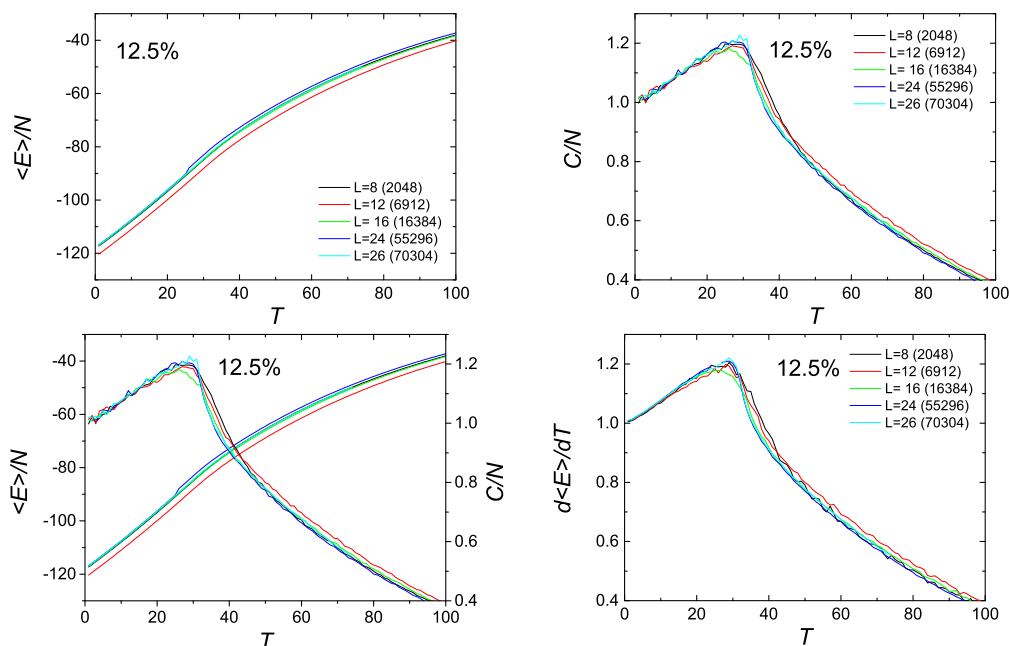
Σχήμα 4.1: Μέση ενέργεια ανά σπιν, η ειδική θερμότητα ανά σπιν ξεχωριστά και σε κοινό διάγραμμα και η παράγωγος της ενέργειας σαν συνάρτηση της θερμοκρασίας για διάφορα μεγέθη πλεγμάτων, με γραμμική διάσταση  $L = 8, 12, 16, 24, 26$  για το υλικό  $MnN$  με βήμα  $\Delta T = 10$  K.



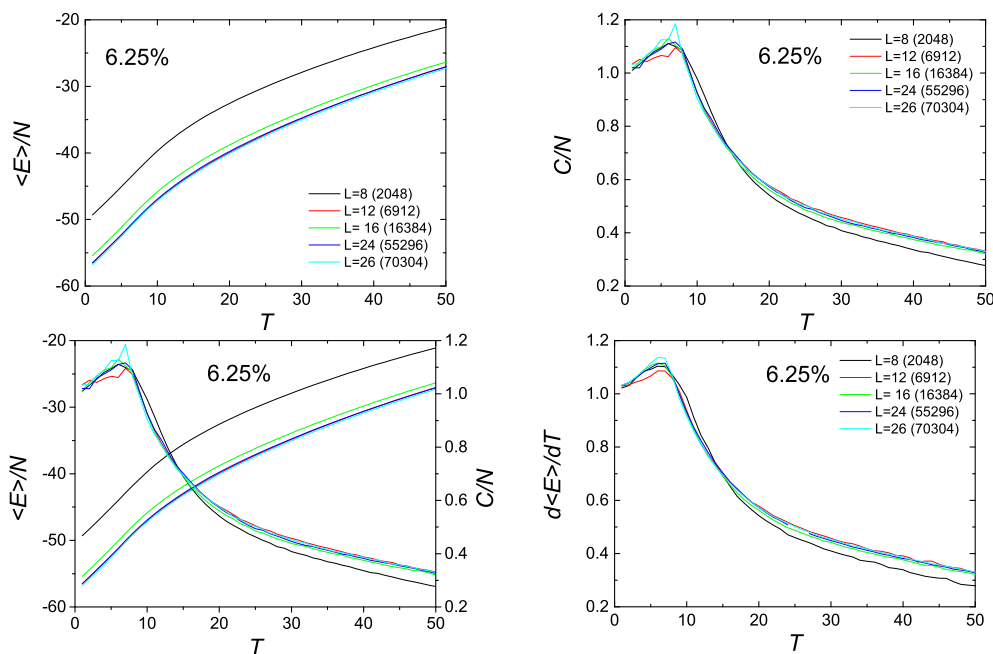
Σχήμα 4.2: Μέση ενέργεια ανά σπιν, η ειδική θερμότητα ανά σπιν ξεχωριστά και σε κοινό διάγραμμα και η παράγωγος της ενέργειας σαν συνάρτηση της θερμοκρασίας για διάφορα μεγέθη πλεγμάτων, με γραμμική διάσταση  $L = 8, 12, 16, 24, 26$  για το υλικό  $Ga_{0.5}Mn_{0.5}N$  με βήμα  $\Delta T = 10$  K.



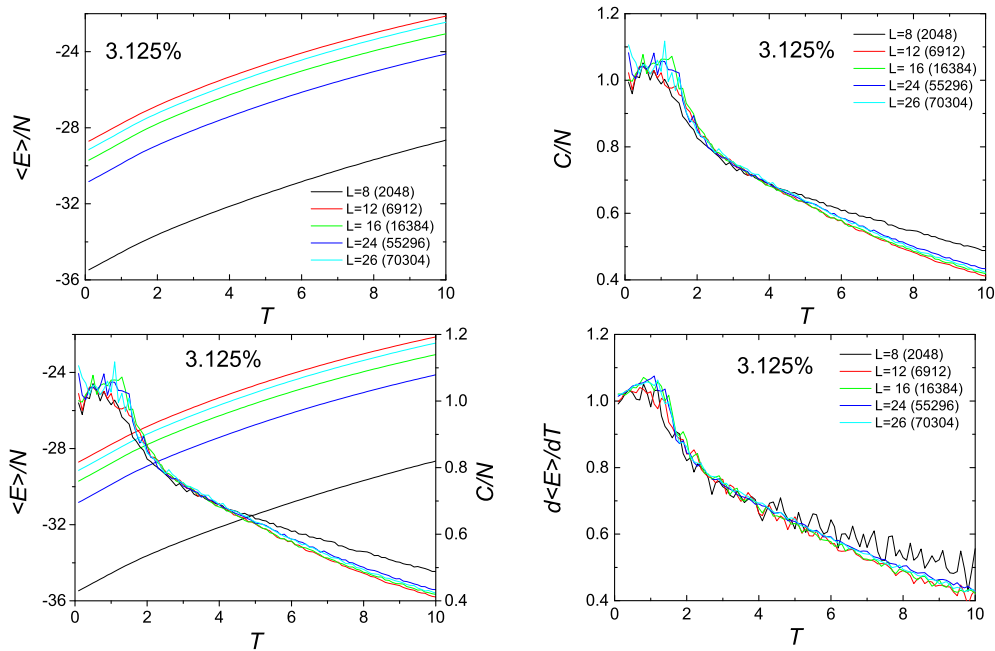
Σχήμα 4.3: Μέση ενέργεια ανά σπιν, η ειδική θερμότητα ανά σπιν ξεχωριστά και σε κοινό διάγραμμα και η παράγωγος της ενέργειας σαν συνάρτηση της θερμοκρασίας για διάφορα μεγέθη πλεγμάτων, με γραμμική διάσταση  $L = 8, 12, 16, 24, 26$  για το υλικό  $Ga_{0.75}Mn_{0.25}N$  με βήμα  $\Delta T = 10$  K.



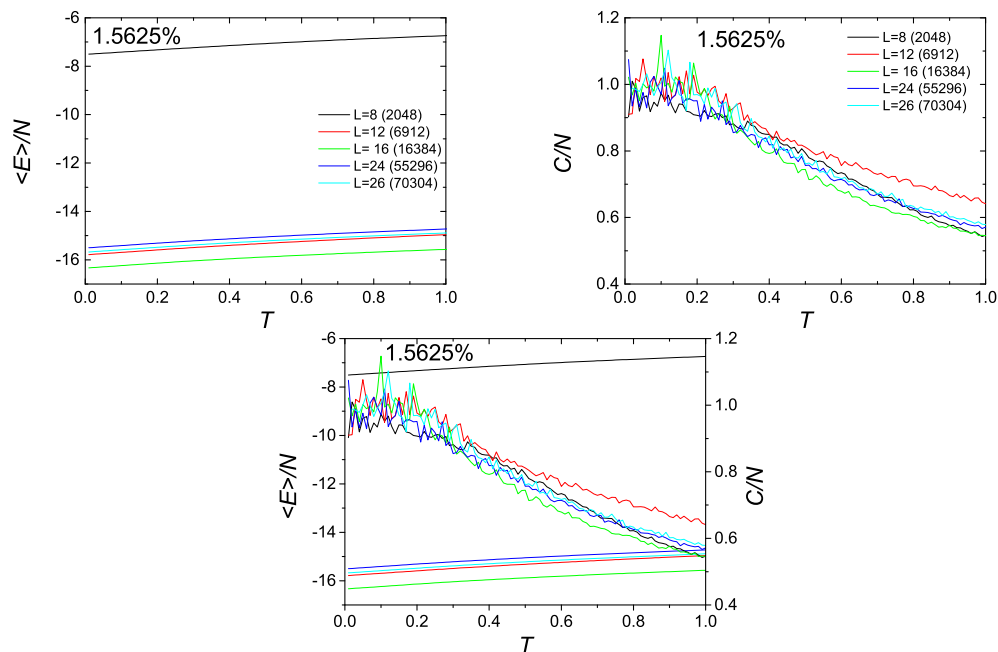
Σχήμα 4.4: Μέση ενέργεια ανά σπιν, η ειδική θερμότητα ανά σπιν ξεχωριστά και σε κοινό διάγραμμα και η παράγωγος της ενέργειας σαν συνάρτηση της θερμοκρασίας για διάφορα μεγέθη πλεγμάτων, με γραμμική διάσταση  $L = 8, 12, 16, 24, 26$  για το υλικό  $Ga_{0.875}Mn_{0.125}N$  με βήμα  $\Delta T = 1$  K.



Σχήμα 4.5: Μέση ενέργεια ανά σπιν, η ειδική θερμότητα ανά σπιν ξεχωριστά και σε κοινό διάγραμμα και η παράγωγος της ενέργειας σαν συνάρτηση της θερμοκρασίας για διάφορα μεγέθη πλεγμάτων, με γραμμική διάσταση  $L = 8, 12, 16, 24, 26$  για το υλικό  $Ga_{0.9375}Mn_{0.0625}N$  με βήμα  $\Delta T = 1$  K.



Σχήμα 4.6: Μέση ενέργεια ανά σπιν, η ειδική θερμότητα ανά σπιν ξεχωριστά και σε κοινό διάγραμμα και η παράγωγος της ενέργειας σαν συνάρτηση της θερμοκρασίας για διάφορα μεγέθη πλεγμάτων, με γραμμική διάσταση  $L = 8, 12, 16, 24, 26$  για το υλικό  $Ga_{0.96875}Mn_{0.03125}N$  με βήμα  $\Delta T = 0.1$  K.

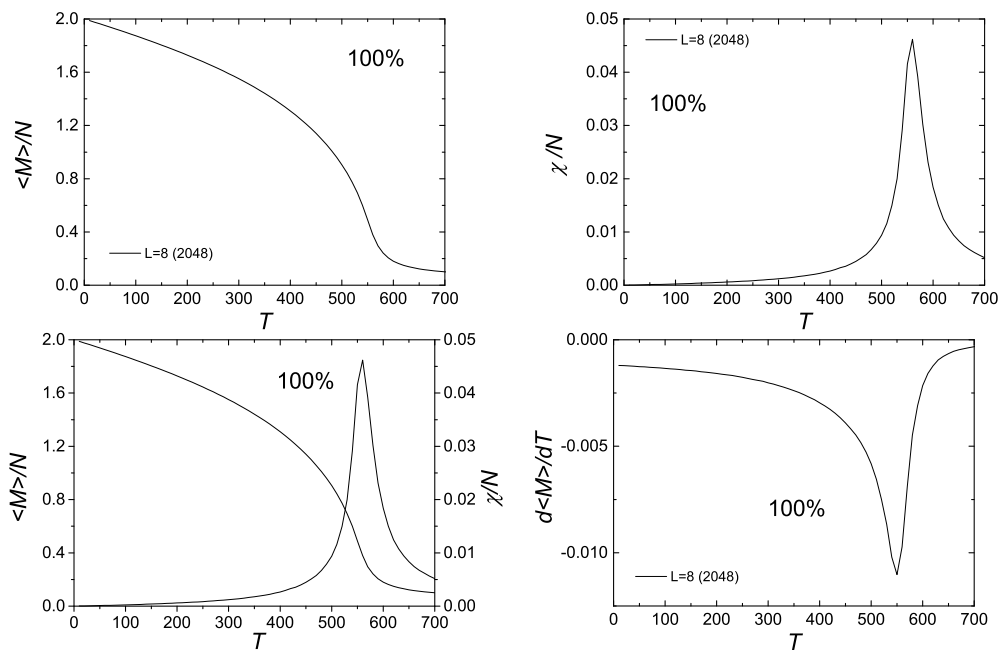


Σχήμα 4.7: Μέση ενέργεια ανά σπιν, η ειδική θερμότητα ανά σπιν ξεχωριστά και σε κοινό διάγραμμα σαν συνάρτηση της θερμοκρασίας για διάφορα μεγέθη πλεγμάτων, με γραμμική διάσταση  $L = 8, 12, 16, 24, 26$  για το υλικό  $Ga_{0.984375}Mn_{0.015625}N$  με βήμα  $\Delta T = 0.01$  K.

### 4.1.2 Η μαγνήτιση και η μαγνητική επιδεκτικότητα

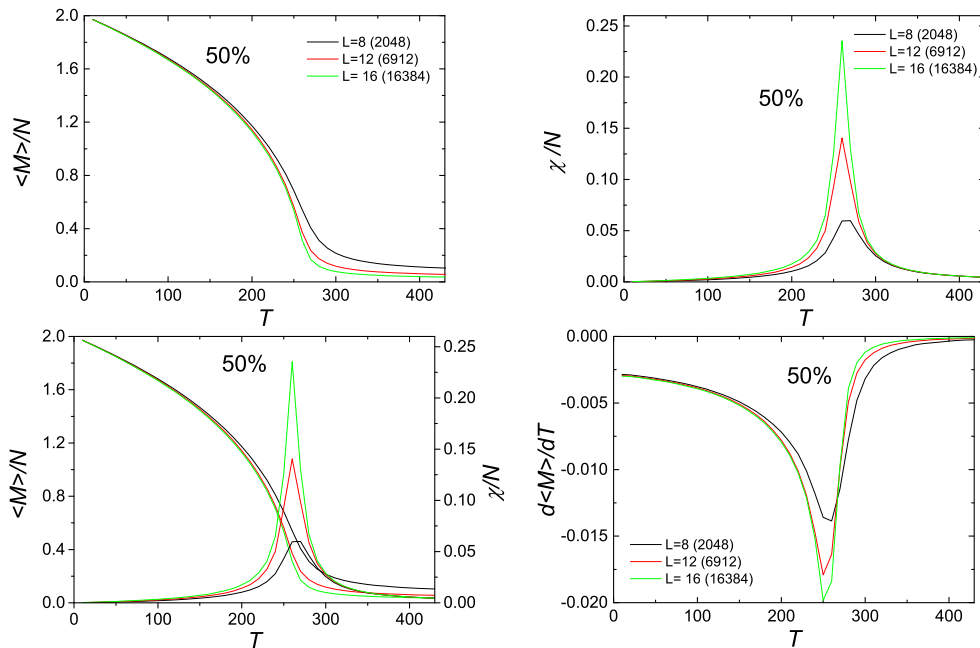
Ακολουθούν τα αποτελέσματα για την μέση μαγνήτιση ανά σπιν καθώς και την μαγνητική επιδεκτικότητα ανά σπιν για κάθε ποσοστό κατάληψης.

Ο μηδενισμός της μαγνήτισης γίνεται όλο και πιο απότομα όσο μεγαλώνει το  $L$ . Όσο πιο μεγάλο είναι το  $L$  τόσο μικρότερη είναι και η διαφορά στην κλίση ανάμεσα στα διάφορα  $L$ . Για πιο μικρά ποσοστά κατάληψης Mn είναι μεγαλύτερη η κλιμάκωση που εμφανίζουν μεταξύ τους τα  $L$ . Ειδικά το  $L = 8$  για μικρά ποσοστά διαφέρει αρκετά από τα υπόλοιπα. Αυτή η διαφορά στην κλιμάκωση εμφανίζεται με το ίδιο τρόπο και στις μαγνητικές επιδεκτικότητες. Όπου όσο μεγαλώνει το  $L$  και η κλίση στον μηδενισμό της μαγνήτισης μεγαλώνει και το μέγιστο της μαγνητικής επιδεκτικότητας. Ωστόσο όσο πιο μεγάλα  $L$  συγκρίνουμε μεταξύ τους τόσο πιο μικρή η διαφορά μεταξύ τους. Επιπρόσθετα τα μέγιστα της μαγνητικής επιδεκτικότητας εμφανίζονται σε όλο και μικρότερες θερμοκρασίες, συνεπώς μετατοπίζονται κάθε φορά αριστερά.

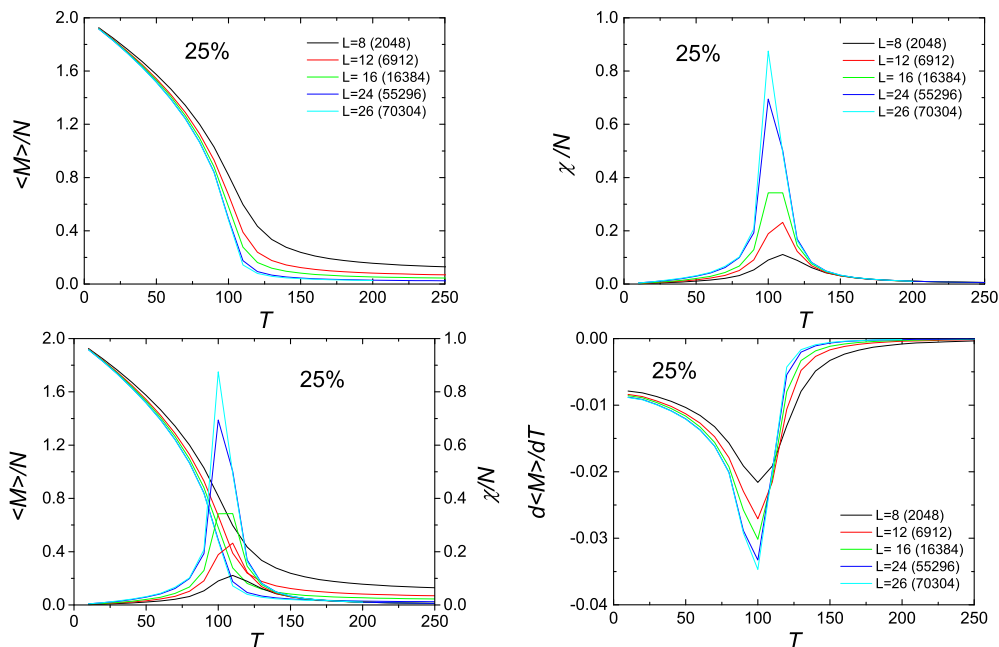


Σχήμα 4.8: Η μαγνήτιση ανά σπιν, η μαγνητική επιδεκτικότητα ανά σπιν ξεχωριστά και σε κοινό διάγραμμα και η παράγωγος της μαγνήτισης σαν συνάρτηση της θερμοκρασίας για διάφορα μεγέθη πλεγμάτων, με γραμμική διάσταση  $L = 8, 12, 16, 24, 26$  για το υλικό  $MnN$  με βήμα  $\Delta T = 10 K$ .

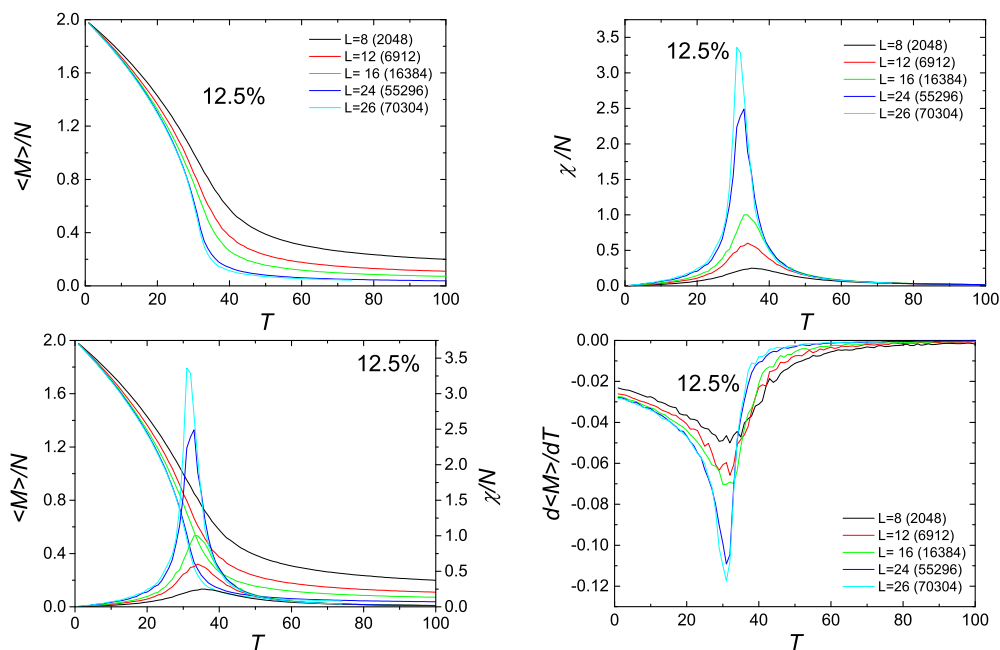




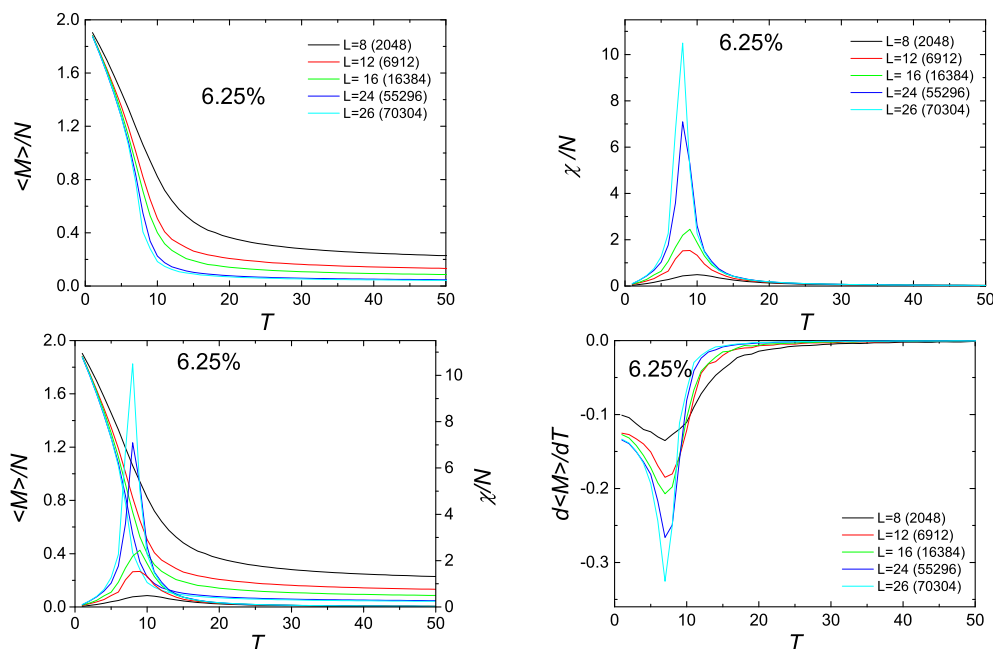
Σχήμα 4.9: Η μαγνήτιση ανά σπιν, η μαγνητική επιδεκτικότητα ανά σπιν ξεχωριστά και σε κοινό διάγραμμα και η παράγωγος της μαγνήτισης σαν συνάρτηση της θερμοκρασίας για διάφορα μεγέθη πλεγμάτων, με γραμμική διάσταση  $L = 8, 12, 16, 24, 26$  για το υλικό  $Ga_{0.5}Mn_{0.5}N$  με βήμα  $\Delta T = 10$  K.



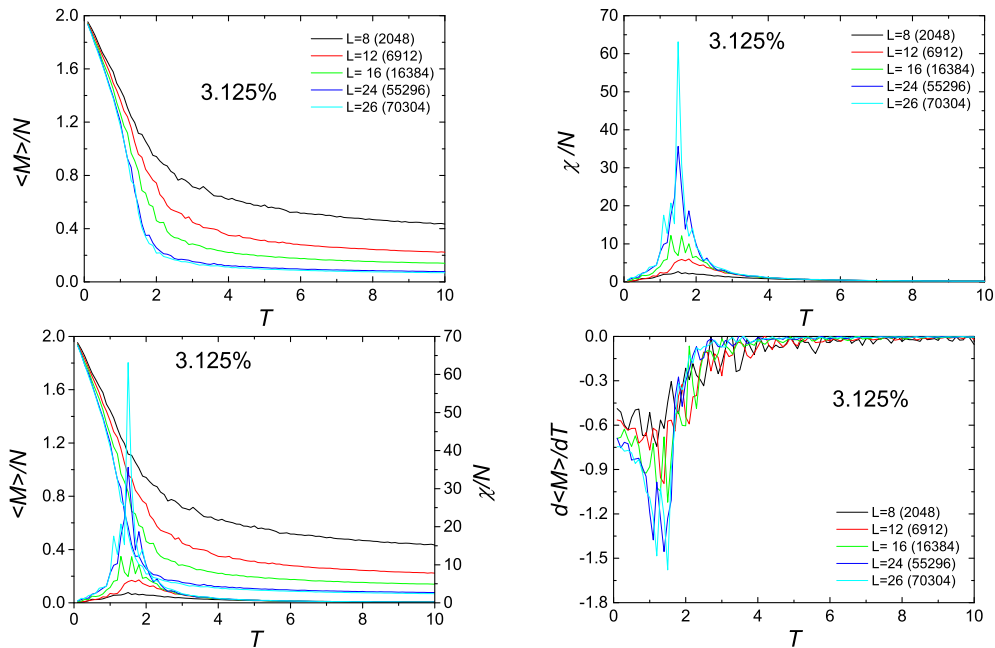
Σχήμα 4.10: Η μαγνήτιση ανά σπιν, η μαγνητική επιδεκτικότητα ανά σπιν ξεχωριστά και σε κοινό διάγραμμα και η παράγωγος της μαγνήτισης σαν συνάρτηση της θερμοκρασίας για διάφορα μεγέθη πλεγμάτων, με γραμμική διάσταση  $L = 8, 12, 16, 24, 26$  για το υλικό  $Ga_{0.75}Mn_{0.25}N$  με βήμα  $\Delta T = 10$  K.



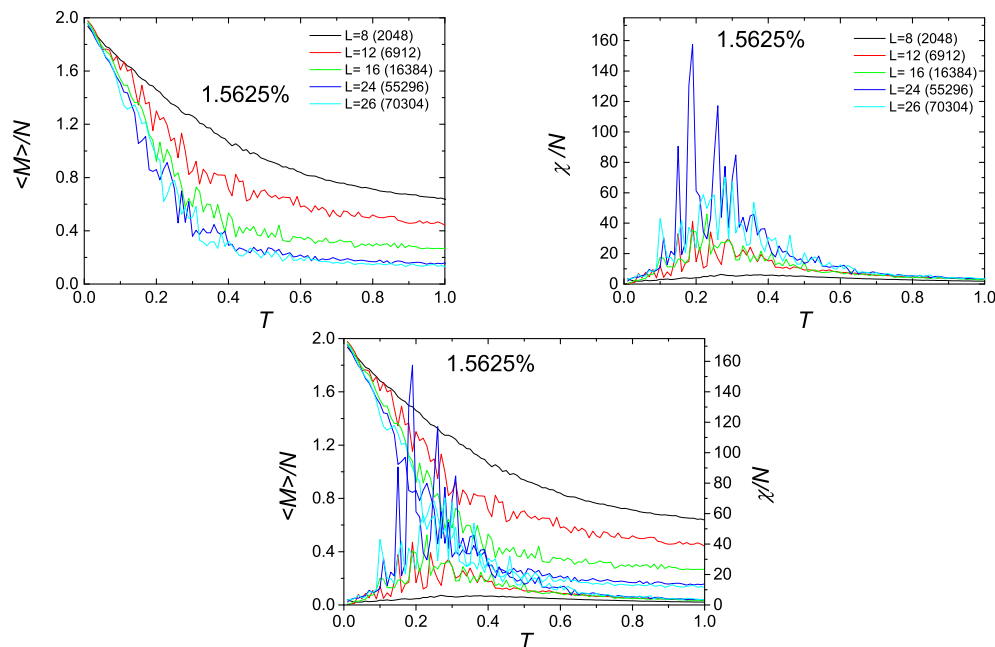
Σχήμα 4.11: Η μαγνήτιση ανά σπιν, η μαγνητική επιδεκτικότητα ανά σπιν ξεχωριστά και σε κοινό διάγραμμα και η παράγωγος της μαγνήτισης σαν συνάρτηση της θερμοκρασίας για διάφορα μεγέθη πλεγμάτων, με γραμμική διάσταση  $L = 8, 12, 16, 24, 26$  για το υλικό  $Ga_{0.875}Mn_{0.125}N$  με βήμα  $\Delta T = 1$  K.



Σχήμα 4.12: Η μαγνήτιση ανά σπιν, η μαγνητική επιδεκτικότητα ανά σπιν ξεχωριστά και σε κοινό διάγραμμα και η παράγωγος της μαγνήτισης σαν συνάρτηση της θερμοκρασίας για διάφορα μεγέθη πλεγμάτων, με γραμμική διάσταση  $L = 8, 12, 16, 24, 26$  για το υλικό  $Ga_{0.9375}Mn_{0.0625}N$  με βήμα  $\Delta T = 1$  K.



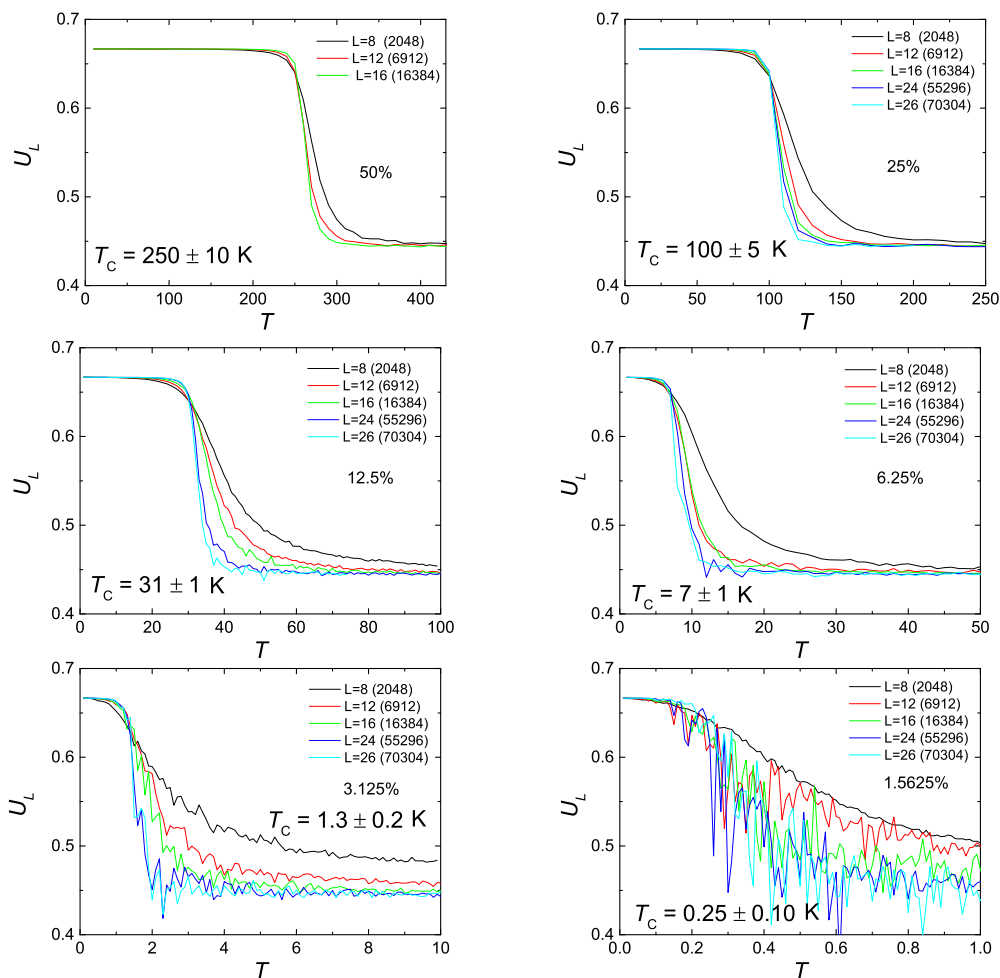
Σχήμα 4.13: Η μαγνήτιση ανά σπιν, η μαγνητική επιδεκτικότητα ανά σπιν ξεχωριστά και σε κοινό διάγραμμα και η παράγωγος της μαγνήτισης σαν συνάρτηση της θερμοκρασίας για διάφορα μεγέθη πλεγμάτων, με γραμμική διάσταση  $L = 8, 12, 16, 24, 26$  για το υλικό  $Ga_{0.96875}Mn_{0.03125}N$  με βήμα  $\Delta T = 0.1$  K.



Σχήμα 4.14: Η μαγνήτιση ανά σπιν, η μαγνητική επιδεκτικότητα ανά σπιν ξεχωριστά και σε κοινό διάγραμμα σαν συνάρτηση της θερμοκρασίας για διάφορα μεγέθη πλεγμάτων, με γραμμική διάσταση  $L = 8, 12, 16, 24, 26$  για το υλικό  $Ga_{0.984375}Mn_{0.015625}N$  με βήμα  $\Delta T = 0.01$  K.

### 4.1.3 Ο συσσωρευτής τέταρτης τάξης

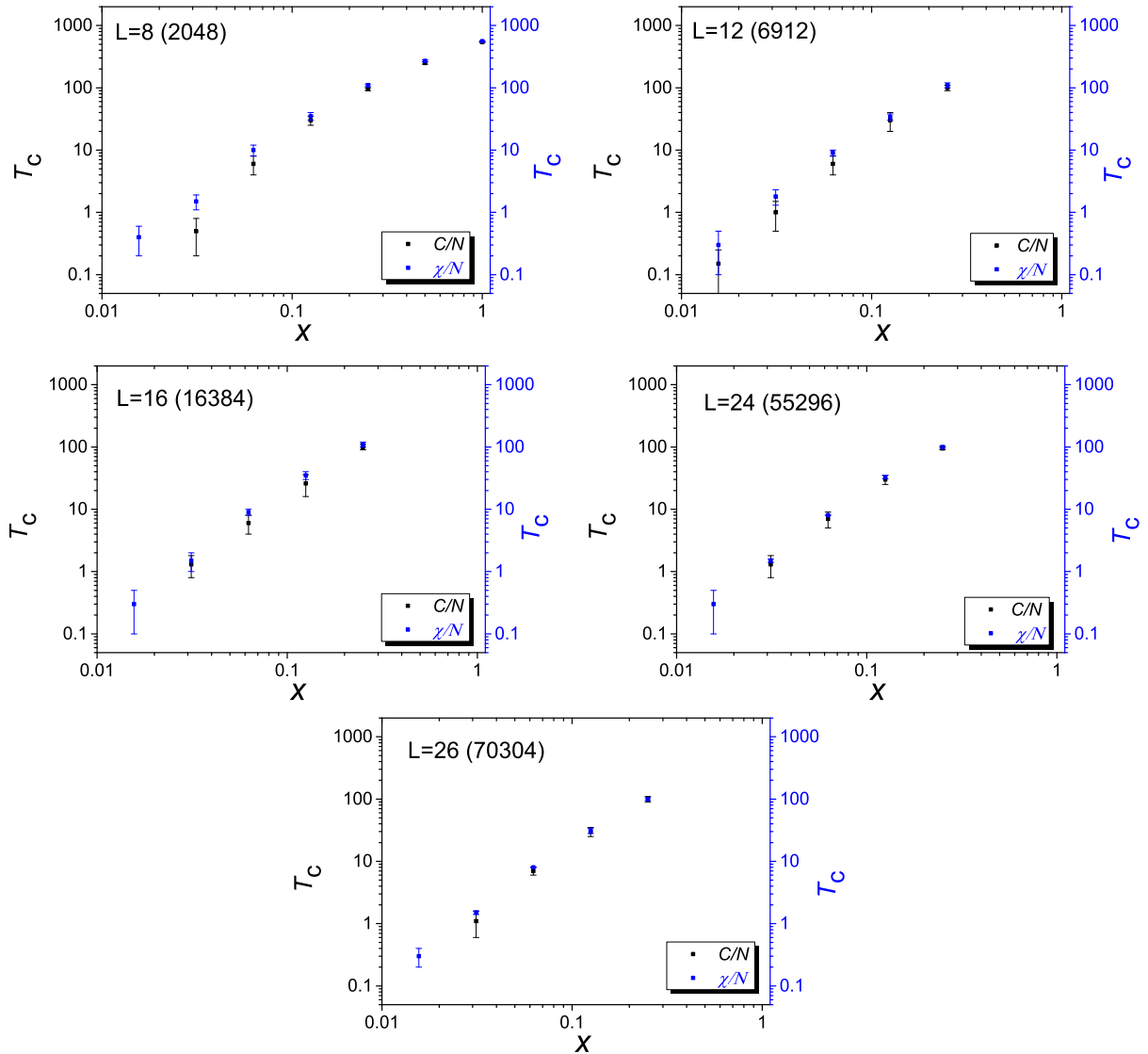
Ακολουθούν τα αποτελέσματα για τον συσσωρευτή τέταρτης τάξης για την μαγνήτιση ανά σπιν για κάθε ποσοστό κατάληψης. Για όλα τα ποσοστά μπορεί να γίνει εκτίμηση της κρίσιμης θερμοκρασίας. Ισχύουν τα σχόλια που συζητήθηκαν και για την περίπτωση πλέγματος fcc με αλληλεπίδραση πρώτων γειτόνων για τα όρια του συσσωρευτή σε μηδενική και άπειρη θερμοκρασία.



Σχήμα 4.15: Ο συσσωρευτής τέταρτης τάξης σαν συνάρτηση της θερμοκρασίας για διάφορα μεγέθη πλεγμάτων, με γραμμική διάσταση  $L = 8, 12, 16, 24, 26$  καθώς μικραίνει το ποσοστό κατάληψης των Mn.

### 4.1.4 Εκτίμηση κρίσιμων θερμοκρασιών

Για να παρουσιαστούν καλύτερα τα αποτελέσματα για την εκτίμηση των κρίσιμων θερμοκρασιών ζωγραφίζονται σε λογαριθμικές κλίμακες οι κρίσιμες θερμοκρασίες σαν συνάρτηση της πιθανότητας

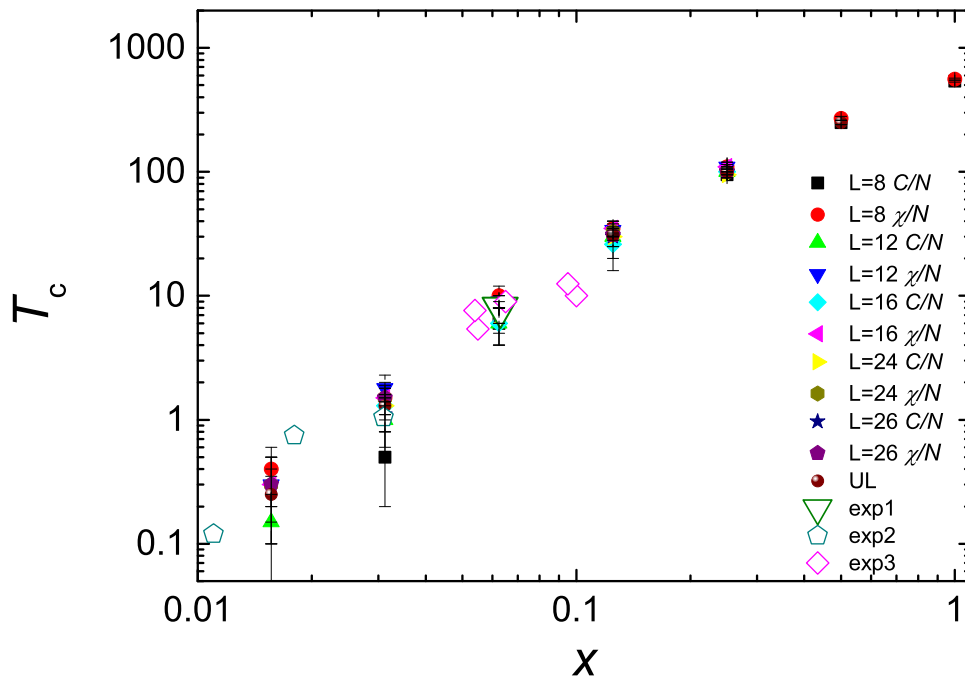


Σχήμα 4.16: Οι κρίσιμες θερμοκρασίες σαν συνάρτηση του  $x$ . Εκτιμημένες από τα διαγράμματα της ειδικής θερμότητας και της μαγνητικής επιδεκτικότητας μαζί με το σφάλμα τους για διάφορα μεγέθη πλεγμάτων, με γραμμική διάσταση  $L = 8, 10, 16, 24, 26$  για το υλικό  $Ga_{1-x}Mn_xN$ .

κατάληψης μαγνητικών δοτών  $x$ . Παρουσιάζονται οι μέθοδοι της ειδικής θερμότητας ( $C/N$ ) και της μαγνητικής επιδεκτικότητας ( $\chi/N$ ).

Στο τέλος συνοψίζονται οι μέθοδοι εκτίμησης της κρίσιμης θερμοκρασίας σε ένα διάγραμμα στο οποίο υπάρχει και η  $U_L$  method αλλά γίνεται και σύγκριση με κάποιες κρίσιμες θερμοκρασίες που έχουν προσδιοριστεί πειραματικά.

Όπως φαίνεται όσο μεγαλώνει το  $L$  τόσο πιο κοντά είναι τα αποτελέσματα των δύο μεθόδων ειδικής θερμότητας  $C/N$  και μαγνητικής επιδεκτικότητας  $\chi/N$ . Τα αποτελέσματα από το  $U_L$  method είναι κάπου στο ενδιάμεσο. Η μέθοδος ειδικής θερμότητας  $C/N$  φαίνεται να έχει μεγαλύτερα σφάλματα από αυτή της μαγνητικής επιδεκτικότητας  $\chi/N$ . Τέλος, όσο μικραίνει το ποσοστό κατάληψης Mn μεγαλώνει το σχετικό σφάλματα στον υπολογισμό της κρίσιμης.

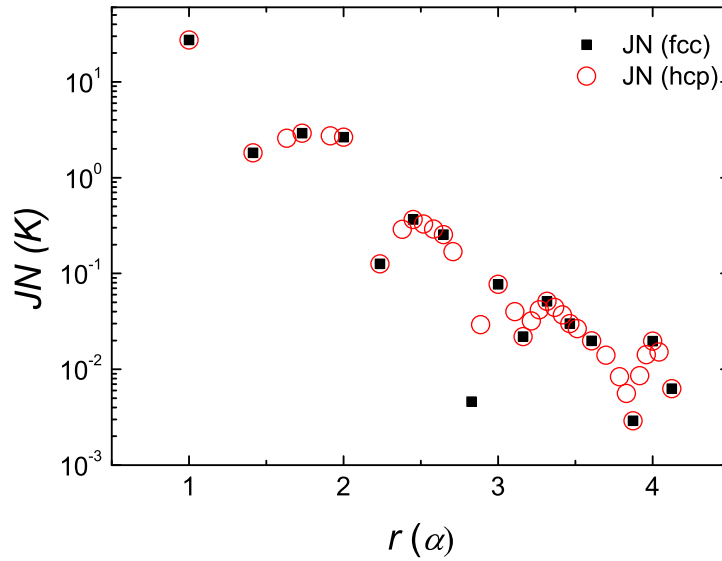


Σχήμα 4.17: Οι κρίσιμες θερμοκρασίες σαν συνάρτηση σαν συνάρτηση του  $x$ . Εκτιμημένες από τα διαγράμματα της ειδικής θερμότητας και της μαγνητικής επιδεκτικότητας μαζί με το σφάλμα τους. Σε συνοπτικό διάγραμμα όπου φαίνονται όλα τα μεγέθη μαζί και είναι μαζί και οι κρίσιμες που βρέθηκαν με την βοήθεια του συσσωρευτή 4ης τάξης για την μαγνήτιση ανά σπιν. Οι υπολογισμοί αφορούν fcc πλέγμα για διάφορα μεγέθη πλεγμάτων, με γραμμική διάσταση  $L = 8, 12, 16, 24, 26$  για το υλικό  $Ga_{1-x}Mn_xN$ . Όπου *exp1* [5], *exp2* [4] και *exp3* [15] οι κρίσιμες που έχουν προσδιοριστεί πειραματικά.

## 4.2 Πλέγμα hcp στο υλικό $\text{Ga}_{1-x}\text{Mn}_x\text{N}$ (wurtzite)

Έπειτα μελετάται το πλέγμα hcp για το υλικό  $\text{Ga}_{1-x}\text{Mn}_x\text{N}$ . Πάλι πρόκειται για υλικό GaN με προσμίξεις Mn. Κάθε φορά μειώνεται σταδιακά η περιεκτικότητα σε μαγνητικές προσμίξεις Mn. Συγκεκριμένα εμφανίζονται αποτελέσματα για τις περιπτώσεις όπου το  $x = 1$ ,  $x = 0.5$ ,  $x = 0.25$ ,  $x = 0.125$ ,  $x = 0.06$ ,  $x = 0.03$  και  $x = 0.015$ . Τα διάφορα μεγέθη πλεγμάτων που παρουσιάζονται είναι  $L = 6$  (216),  $L = 10$  (1000),  $L = 14$  (2744),  $L = 18$  (5832) και  $L = 20$  8000. Εώς και τα ποσοστά αραιώσης μαγνητικών προσμίξεων 12.5% τα  $x$  είναι ακριβώς όσο αναφέρονται. Στις περιπτώσεις όμως που αραιώνεται περισσότερο μόνο για  $L = 10$  (1000) και  $L = 20$  (8000) τα  $x$  είναι ακριβώς  $x = 0.06$ ,  $x = 0.03$  και  $x = 0.015$  τοποθετώντας 60, 30 και 15 dopants αντίστοιχα για  $L = 10$  (1000) και 480, 240 και 120 dopants αντίστοιχα για  $L = 20$  (8000). Ενώ στην περίπτωση  $L = 6$  (216) τοποθετούνται 13 dopants για να πλησιάσουμε το 6% και έτσι  $x = 13/216 \approx 0.060185$  και 6 dopants για να πλησιάσουμε το 3% και έτσι  $x = 6/216 \approx 0.0278$ . Επίσης στην περίπτωση  $L = 14$  (2744) τοποθετούνται 165 dopants για να πλησιάσουμε το 6% και έτσι  $x = 165/2744 \approx 0.060131$ , 83 dopants για να πλησιάσουμε το 3% και έτσι  $x = 83/2744 \approx 0.030248$  και 41 dopants για να πλησιάσουμε το 1.5% και έτσι  $x = 41/2744 \approx 0.014942$ . Τέλος, στην περίπτωση  $L = 18$  (5832) τοποθετούνται 350 dopants για να πλησιάσουμε το 6% και έτσι  $x = 350/5832 \approx 0.060014$ , 175 dopants για να πλησιάσουμε το 3% και έτσι  $x = 175/5832 \approx 0.030007$  και 87 dopants για να πλησιάσουμε το 1.5% και έτσι  $x = 87/5832 \approx 0.014918$ .

Τα ολοκληρώματα ανταλλαγής  $J$  που χρησιμοποιήθηκαν λαμβάνοντας υπόψιν γείτονες έως την ίδια απόσταση για την οποία είχαμε τους 16ους πλησιέστερους γείτονες στο fcc. Μόνο που στην περίπτωση του hcp είναι οι 34οι πλησιέστεροι γείτονες σε αυτή την απόσταση οπότε αυτή είναι και η μέγιστη τάξη γειτόνων για την οποία λαμβάνουμε υπόψιν αλληλεπίδραση. Γενικά τα πλέγματα fcc και hcp έχουν τους ίδιους 1ους και 2ους γείτονες και στην ίδια απόσταση. Επίσης οι 3οι γείτονες για το fcc πλέγμα είναι στην ίδια απόσταση που βρίσκονται οι 4οι γείτονες για τον hcp και παρεμβάλλονται 3οι γείτονες για το hcp σε μια μικρότερη απόσταση όπου στην περίπτωση του fcc δεν υπήρχαν. Σε όλες τις αποστάσεις για τις οποίες το fcc έχει πλησιέστερους γείτονες  $n$  τάξης και το hcp έχει γείτονες μόνο που είναι διαφορετικής τάξης καθώς παρεμβάλλονται και άλλες τάξεις πλησιέστερων γειτόνων σε ενδιάμεσες αποστάσεις. Μόνη εξαίρεση οι 8οι γείτονες για το fcc στην απόσταση των οποίων δεν εντοπίζονται γείτονες στο hcp. Δεδομένου πως τα ολοκληρώματα ανταλλαγής εξαρτώνται από την απόσταση των γειτόνων θεωρήσαμε πως σε ίδιες αποστάσεις ολοκληρώματα ανταλλαγής είναι τα ίδια. Για παράδειγμα το  $J_3$  για το fcc και το  $J_4$  για το hcp είναι ίσα καθώς οι 3οι γείτονες του fcc και οι 4οι γείτονες του hcp βρίσκονται στην ίδια απόσταση. Έτσι για όλες τις αποστάσεις στις οποίες είχαμε πλησιέστερους γείτονες αν και διαφορετικής τάξης χρησιμοποιήθηκαν τα ολοκληρώματα ανταλλαγής του fcc. Τώρα για τις ενδιάμεσες αποστάσεις στις οποίες έχουμε επιπλέον γείτονες για το hcp πλέγμα υπολογίστηκε η διαφορά στην απόσταση μεταξύ των αποστάσεων για τις οποίες είχαμε  $J$  από τους γείτονες στο fcc καθώς και η διαφορά των  $J$  που αντιστοιχούσαν σε αυτές τις αποστάσεις. Έτσι ότι λόγο έχει η ενδιάμεση απόσταση προς την συνολική πολλαπλασιασμένη επί την διαφορά των  $J$  μας δείχνει πόσο πρέπει να μεταβάλλουμε το προηγούμενο  $J$ . Είναι ουσιαστικά σαν να θεωρούμε πως το  $J$  μεταβάλλεται κάθε φορά ενδιάμεσα στα δεδομένα  $J$  που είναι γνωστά σαν γραμμική παρεμβολή με



Σχήμα 4.18: Τα ολοκληρώματα ανταλλαγής για τα πλέγματα fcc και hcp σε μονάδες K σαν συνάρτηση της απόστασης  $r$  σε μονάδες πλεγματικών σταθερών  $a$ .

την απόσταση στο ενδιάμεσο διάστημα.

Οι προσομοιώσεις Monte Carlo έγιναν στις θερμοκρασιακές περιοχές: i)  $T \in [10, 700]$  με βήμα  $\Delta T = 10$  K για  $x = 1$ , ii)  $T \in [10, 430]$  με βήμα  $\Delta T = 10$  K για το  $x = 0.5$ , iii)  $T \in [1, 250]$  με βήμα  $\Delta T = 1$  K για  $x = 0.25$ , iv)  $T \in [1, 100]$  με βήμα  $\Delta T = 1$  K για  $x = 0.125$ , v)  $T \in [1, 50]$  με βήμα  $\Delta T = 1$  K για  $x = 0.06$ , vi)  $T \in [0.01, 5]$  με βήμα  $\Delta T = 0.01$  K για  $x = 0.03$ , vii)  $T \in [0.01, 1]$  με βήμα  $\Delta T = 0.01$  K για  $x = 0.015$ . Υπολογίστηκαν τα θερμοδυναμικά μεγέθη για διάφορα μεγέθη πλεγμάτων, με γραμμική διάσταση  $L = 6, 10, 14, 18, 20$ .

Για τα μεγέθη  $L = 10, 14, 18, 20$  το σύστημα αφέθηκε να ισοροπήσει για 2000 sweeps. Η χρονοσειρά έχει συνολικά χρονικά βήματα  $\mathcal{N} = nav = 200.000$ . Ενώ για το μέγεθος  $L = 6$  το σύστημα αφέθηκε να ισοροπήσει για 200 sweeps. Η χρονοσειρά τότε έχει συνολικά χρονικά βήματα  $\mathcal{N} = nav = 20.000$ .

Έτσι υπολογίζονται τα θερμοδυναμικά μεγέθη που παρουσιάζονται στην συνέχεια.

#### 4.2.1 Η μέση ενέργεια και η ειδική θερμότητα

Ακολουθούν τα αποτελέσματα για την μέση ενέργεια ανά σπιν καθώς και την ειδική θερμότητα ανά σπιν για κάθε ποσοστό κατάληψης.

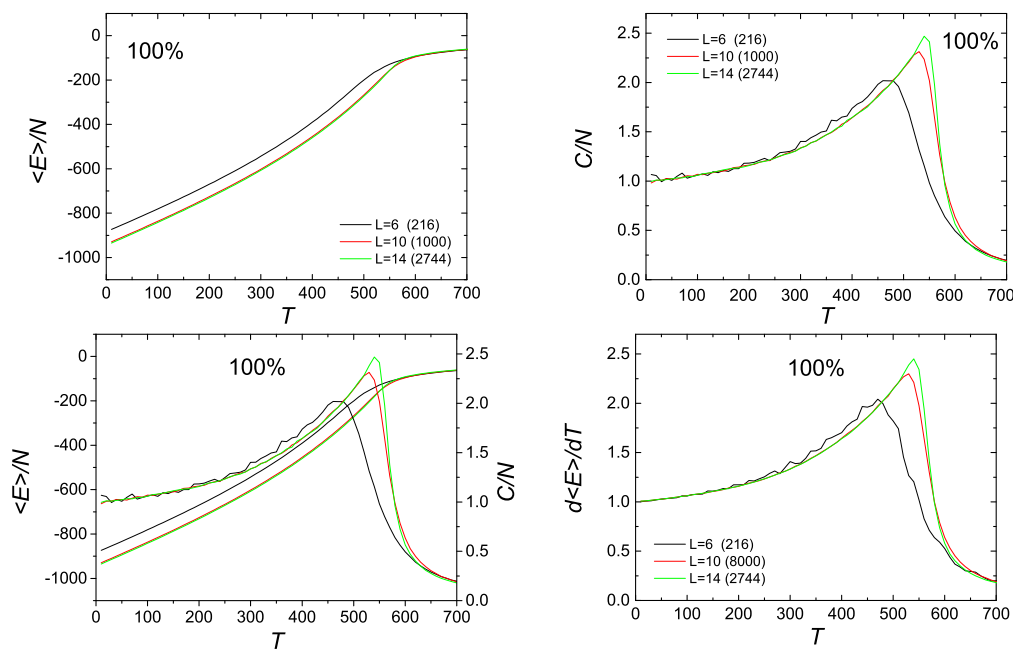
Για τα ποσοστά 100% ( $x = 1$ ) και 50% ( $x = 0.5$ ) σχεδόν ταυτίζονται για διαφορετικά  $L$  και οι μέσες ενέργειες ανά σπιν με εξαίρεση το μικρό πλέγμα που ξεχωρίζει και η μέση ενέργεια του αλλά και η κορυφή της ειδικής θερμότητας που είναι λιγότερο μυτερή. Έπειτα καθώς μικραίνει το ποσοστό κατάληψης οι μέσες ενέργειες ξεκινούν να διαφέρουν και οι κορυφές της ειδικής θερμότητας διαφέρουν όλο και περισσότερο με την γραμμική διάσταση πλέγματος  $L = 6$  να ξεχωρίζει από τις υπόλοιπες ως το μικρότερο πλέγμα. Οι κορυφές έχουν γίνει λιγότερο μυτερές. Οι κορυφές της



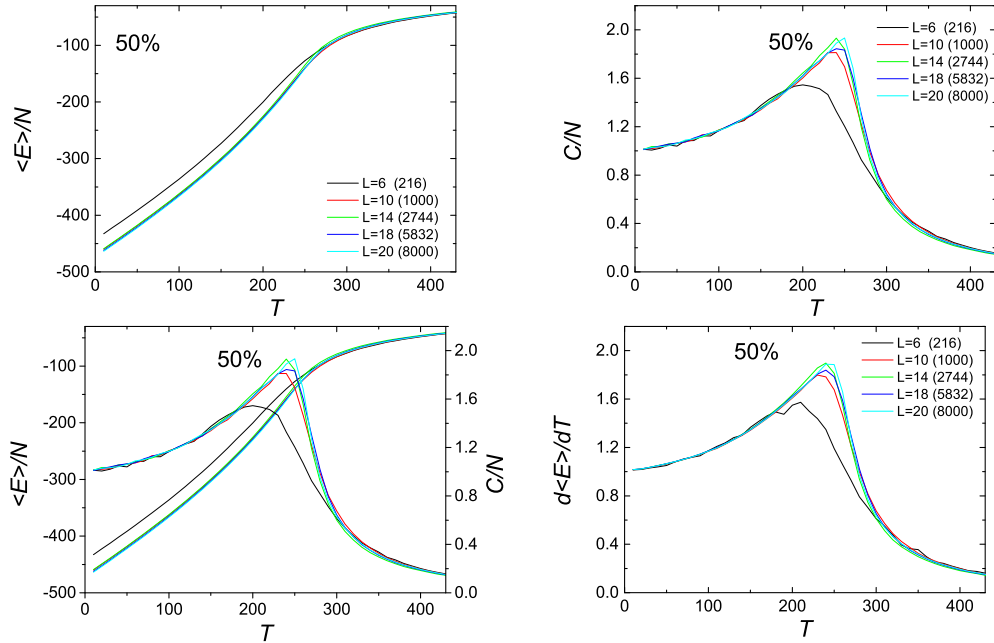
ειδικής θερμότητας ανά σπιν είναι θορυβώδεις για τα ποσοστά 3% ( $x = 0.03$ ) και 1.5% ( $x = 0.015$ ) και όσο και στην περίπτωση του  $L = 6$  που δεν έχει αφεθεί να ισορροπήσει πολλά χρονικά βήματα το σύστημα.

Όπως φαίνεται όσο μεγαλώνει η γραμμική διάσταση του πλέγματος τόσο πιο απότομη είναι η μεταβολή στην κλίση της μέσης ενέργειας ανά σπιν κατά την αλλαγή φάσης άρα και μεγαλύτερη η ειδική θερμότητα του μεγίστου. Επίσης η ψευδοκρίσιμη, από την μέθοδο της ειδικής θερμότητας, είναι μικρότερη από την πραγματική λόγω πεπερασμένου μεγέθους και όσο το  $L$  αυξάνεται αυξάνεται και η εκτίμηση της ψευδοκρίσιμης ώστε να προσεγγίσει την πραγματική.

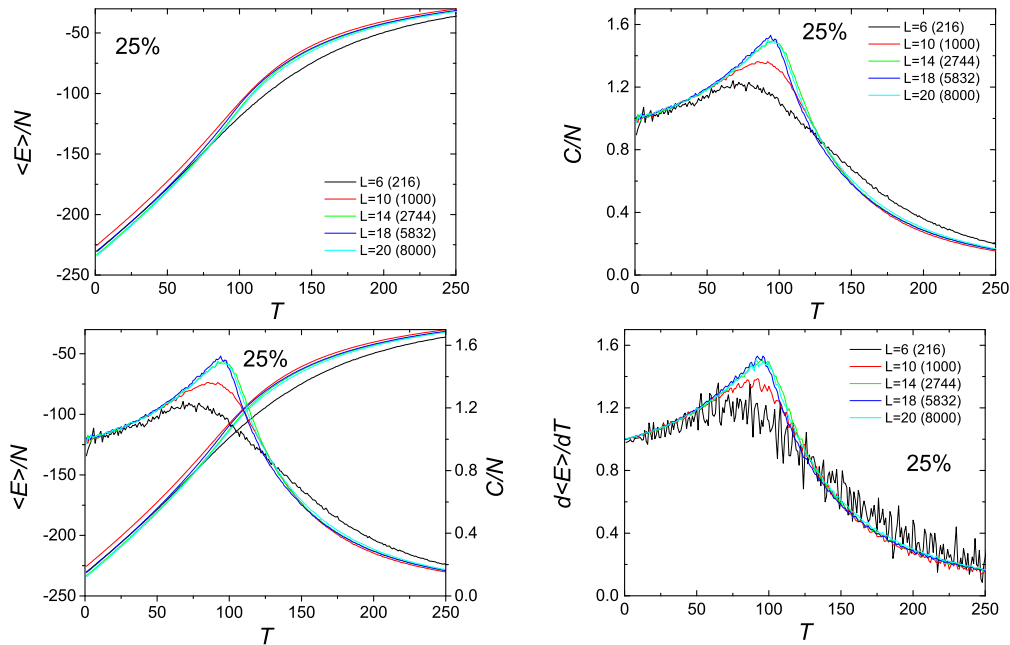
Μέχρι και το 3% φαίνεται καθαρά πως το όριο της ειδικής θερμότητας για μηδενική θερμοκρασία είναι η μονάδα και η κορυφή της ειδικής θερμότητας παραμένει μυτερή αν και θορυβώδης. Μόνο για το  $L = 6$  δεν ισχύει αυτό το όριο καθώς το σύστημα δεν έχει αφεθεί αρκετά χρονικά βήματα να ισορροπήσει. Γίνεται λιγότερο μυτερή για 1.5% και κατεβαίνει λίγο χαμηλότερα από το όριο της ειδικής θερμότητας για μηδενική θερμοκρασία (μονάδα). Για 1.5% στην περίπτωση  $L = 10$  δεν μπορεί να διακριθεί καν κορυφή.



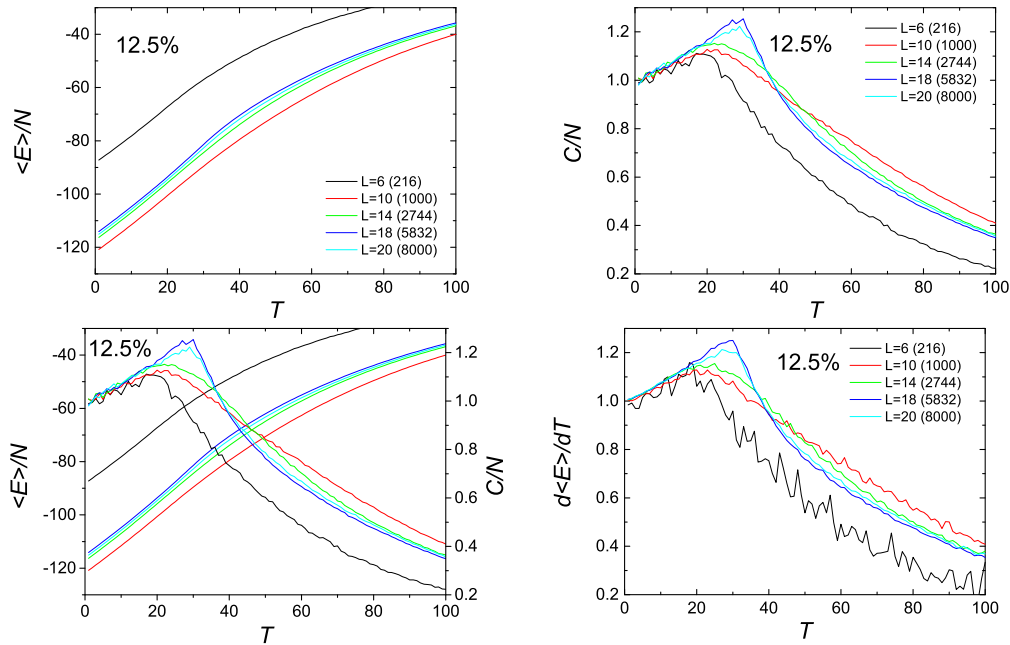
Σχήμα 4.19: Μέση ενέργεια ανά σπιν, η ειδική θερμότητα ανά σπιν ξεχωριστά και σε κοινό διάγραμμα και η παράγωγος της ενέργειας σαν συνάρτηση της θερμοκρασίας για διάφορα μεγέθη πλεγμάτων, με γραμμική διάσταση  $L = 6, 10, 14$  για το υλικό  $MnN$  με βήμα  $\Delta T = 10$  K.



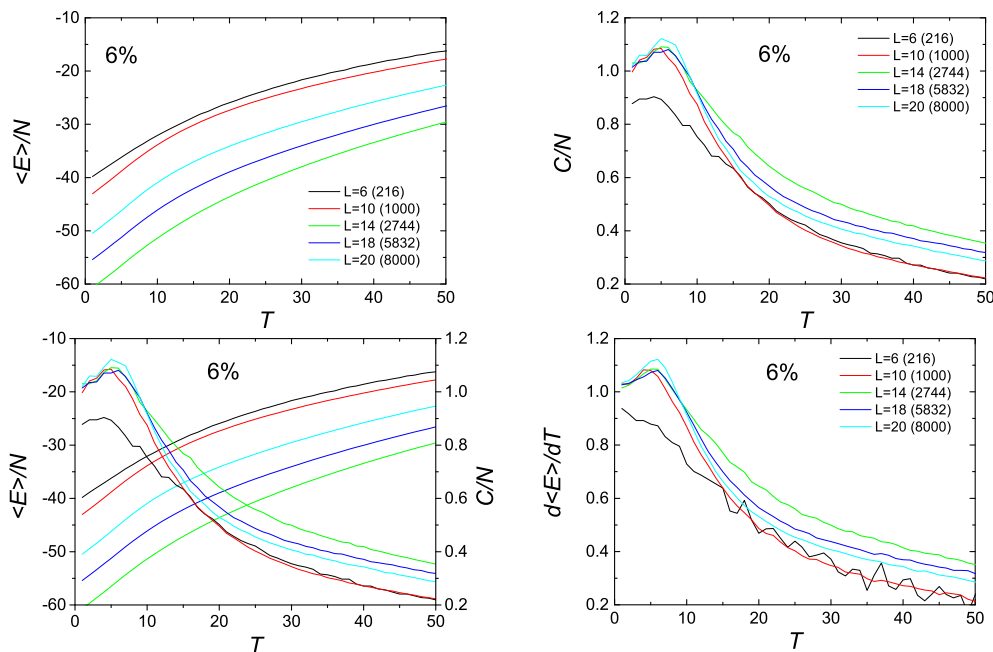
Σχήμα 4.20: Μέση ενέργεια ανά σπιν, η ειδική θερμότητα ανά σπιν ξεχωριστά και σε κοινό διάγραμμα και η παράγωγος της ενέργειας σαν συνάρτηση της θερμοκρασίας για διάφορα μεγέθη πλεγμάτων, με γραμμική διάσταση  $L = 6, 10, 14, 18, 20$  για το υλικό  $Ga_{0.5}Mn_{0.5}N$  με βήμα  $\Delta T = 10$  K.



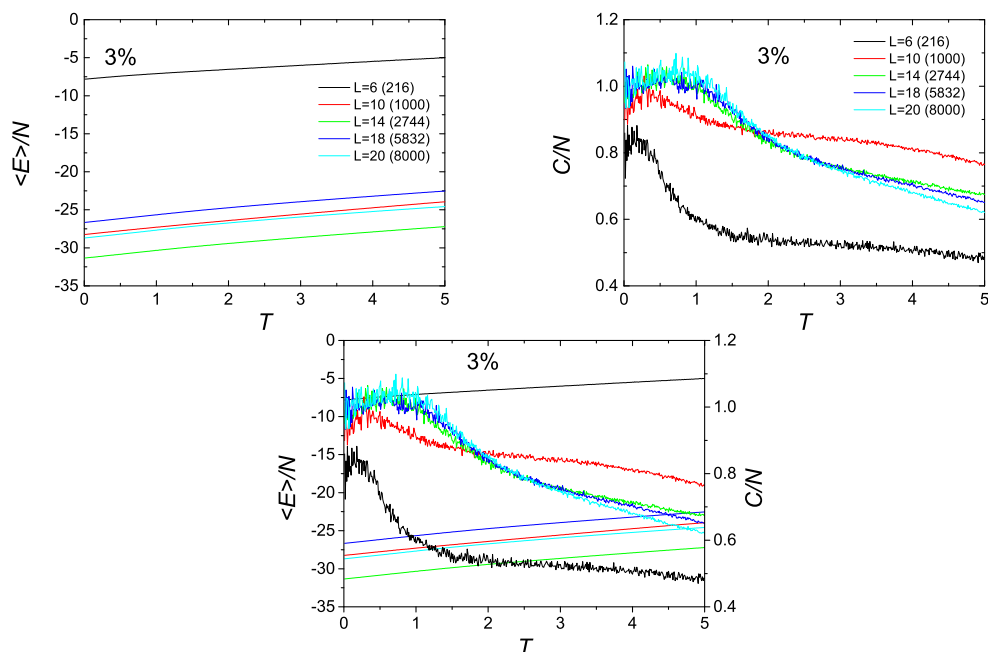
Σχήμα 4.21: Μέση ενέργεια ανά σπιν, η ειδική θερμότητα ανά σπιν ξεχωριστά και σε κοινό διάγραμμα και η παράγωγος της ενέργειας σαν συνάρτηση της θερμοκρασίας για διάφορα μεγέθη πλεγμάτων, με γραμμική διάσταση  $L = 6, 10, 14, 18, 20$  για το υλικό  $Ga_{0.75}Mn_{0.25}N$  με βήμα  $\Delta T = 1$  K.



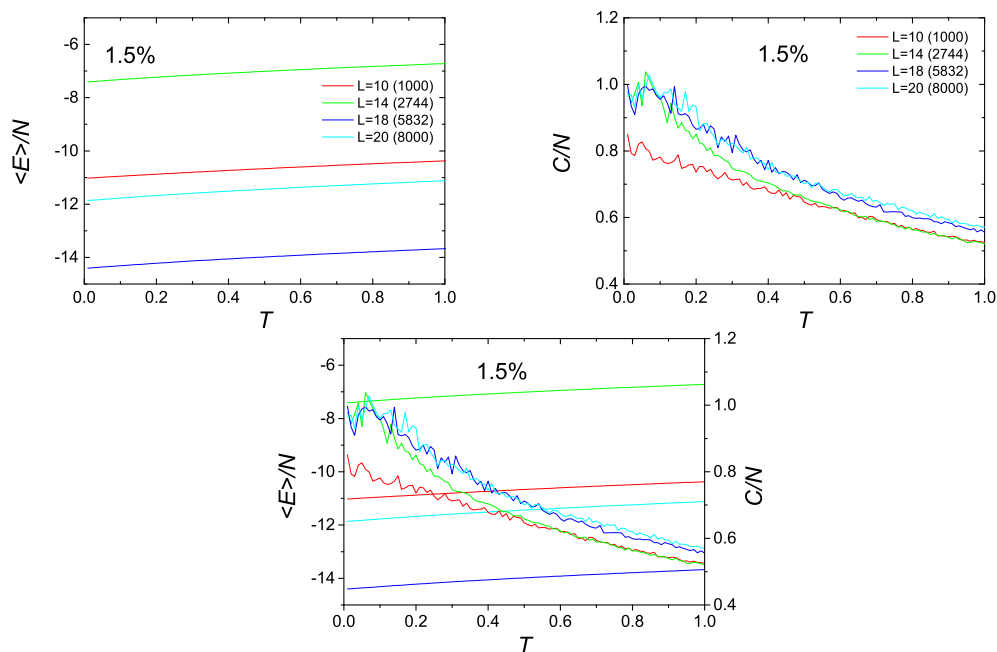
Σχήμα 4.22: Μέση ενέργεια ανά σπιν, η ειδική θερμότητα ανά σπιν ξεχωριστά και σε κοινό διάγραμμα και η παράγωγος της ενέργειας σαν συνάρτηση της θερμοκρασίας για διάφορα μεγέθη πλεγμάτων, με γραμμική διάσταση  $L = 6, 10, 14, 18, 20$  για το υλικό  $Ga_{0.875}Mn_{0.125}N$  με βήμα  $\Delta T = 1$  K.



Σχήμα 4.23: Μέση ενέργεια ανά σπιν, η ειδική θερμότητα ανά σπιν ξεχωριστά και σε κοινό διάγραμμα και η παράγωγος της ενέργειας σαν συνάρτηση της θερμοκρασίας για διάφορα μεγέθη πλεγμάτων, με γραμμική διάσταση  $L = 6, 10, 14, 18, 20$  για το υλικό  $Ga_{0.94}Mn_{0.06}N$  με βήμα  $\Delta T = 1$  K.



Σχήμα 4.24: Μέση ενέργεια ανά σπιν, η ειδική θερμότητα ανά σπιν ξεχωριστά και σε κοινό διάγραμμα σαν συνάρτηση της θερμοκρασίας για διάφορα μεγέθη πλεγμάτων, με γραμμική διάσταση  $L = 6, 10, 14, 18, 20$  για το υλικό  $Ga_{0.97}Mn_{0.03}N$  με βήμα  $\Delta T = 0.01$  K.



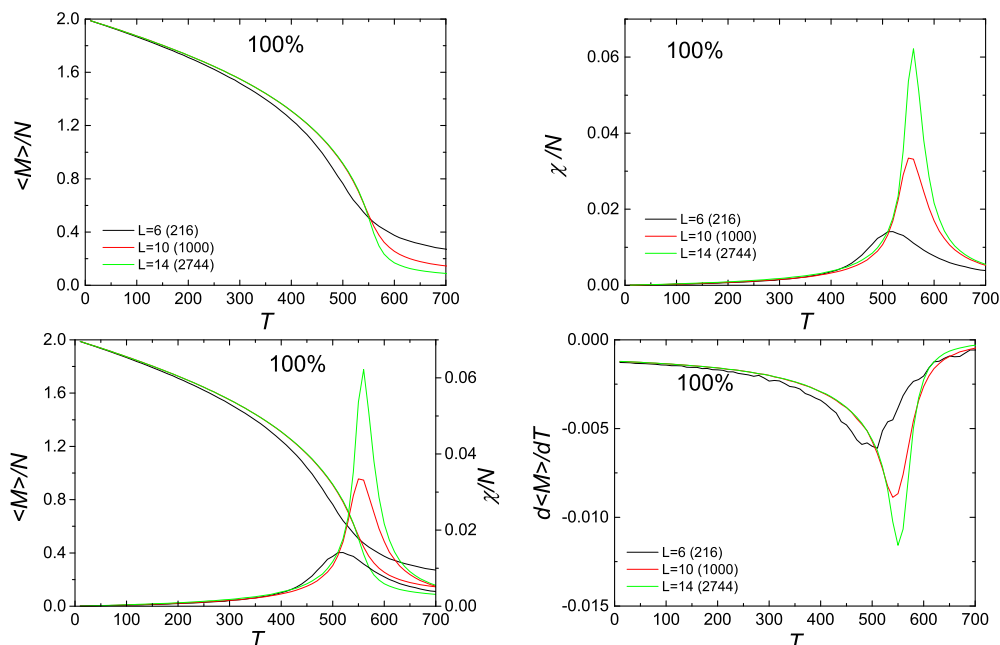
Σχήμα 4.25: Μέση ενέργεια ανά σπιν, η ειδική θερμότητα ανά σπιν ξεχωριστά και σε κοινό διάγραμμα σαν συνάρτηση της θερμοκρασίας για διάφορα μεγέθη πλεγμάτων, με γραμμική διάσταση  $L = 10, 14, 18, 20$  για το υλικό  $Ga_{0.985}Mn_{0.015}N$  με βήμα  $\Delta T = 0.01$  K.

## 4.2.2 Η μαγνήτιση και η μαγνητική επιδεκτικότητα

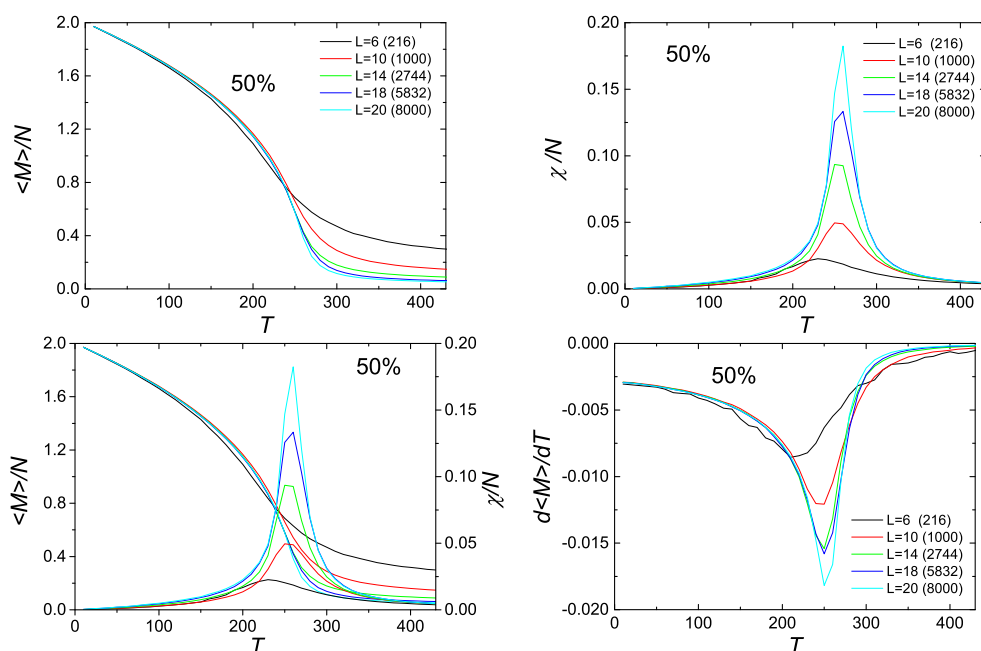
Ακολουθούν τα αποτελέσματα για την μέση μαγνήτιση ανά σπιν καθώς και την μαγνητική επιδεκτικότητα ανά σπιν για κάθε ποσοστό κατάληψης.

Ο μηδενισμός της μαγνήτισης γίνεται όλο και πιο απότομα όσο μεγαλώνει το  $L$ . Όσο πιο μεγάλο είναι το  $L$  τόσο μικρότερη είναι και η διαφορά στην κλίση ανάμεσα στα διάφορα  $L$ . Για πιο μικρά ποσοστά κατάληψης είναι μεγαλύτερη η κλιμάκωση εμφανίζουν μεταξύ τους τα  $L$ . Ειδικά το  $L = 6$  για μικρά ποσοστά διαφέρει αρκετά από τα υπόλοιπα. Αυτή η διαφορά στην κλιμάκωση εμφανίζεται με το ίδιο τρόπο και στις μαγνητικές επιδεκτικότητες. Όπου όσο μεγαλώνει το  $L$  και η κλίση στον μηδενισμό της μαγνήτισης μεγαλώνει και το μέγιστο της μαγνητικής επιδεκτικότητας. Ωστόσο όσο πιο μεγάλα  $L$  συγκρίνουμε μεταξύ τους τόσο πιο μικρή η διαφορά μεταξύ τους. Επιπρόσθετα τα μέγιστα της μαγνητικής επιδεκτικότητας εμφανίζονται σε όλο και μικρότερες θερμοκρασίες, συνεπώς μετατοπίζονται κάθε φορά αριστερά.

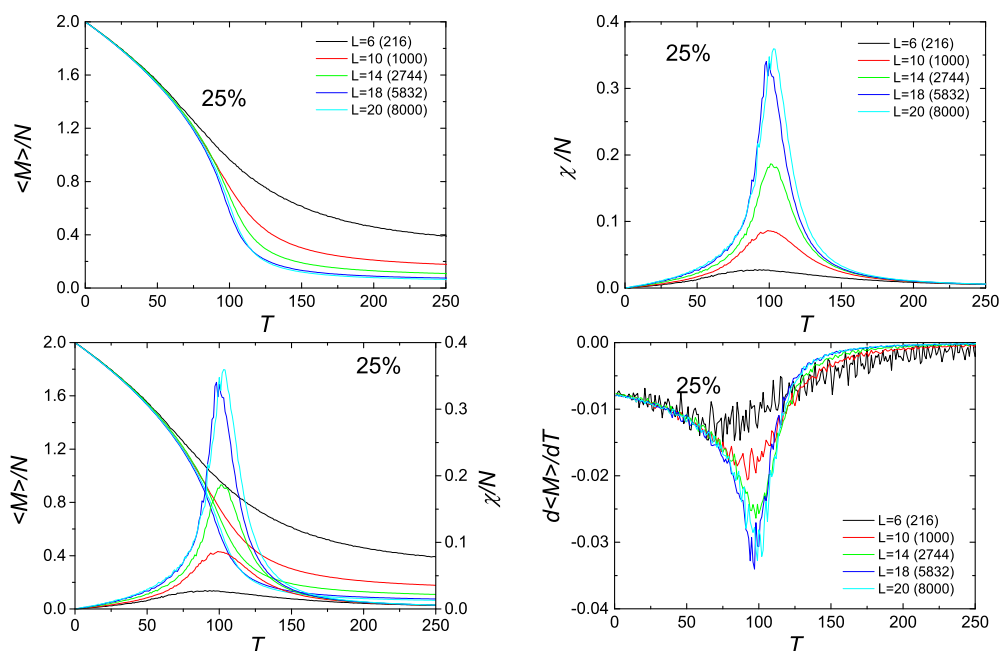
Στις περιπτώσεις 3% και 1.5% οι κορυφές είναι αρκετά θορυβώδεις καθώς αυξάνονται σε αυτές τις περιπτώσεις τα σφάλματα.



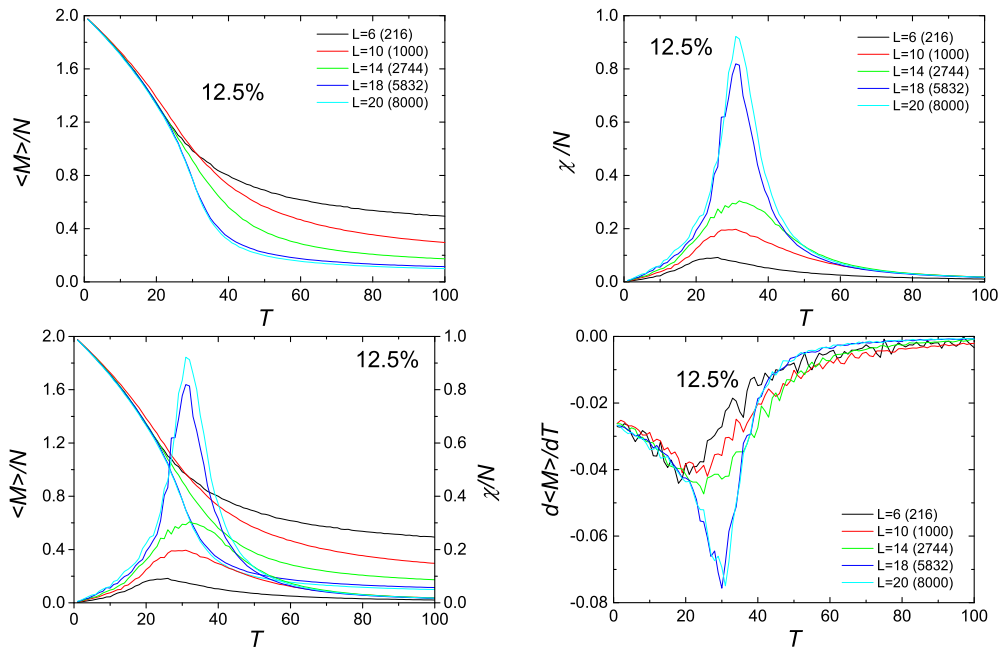
Σχήμα 4.26: Η μαγνήτιση ανά σπιν, η μαγνητική επιδεκτικότητα ανά σπιν ξεχωριστά και σε κοινό διάγραμμα και η παράγωγος της μαγνήτισης σαν συνάρτηση της θερμοκρασίας για διάφορα μεγέθη πλεγμάτων, με γραμμική διάσταση  $L = 6, 10, 14, 18, 20$  για το υλικό  $MnN$  με βήμα  $\Delta T = 10$  K.



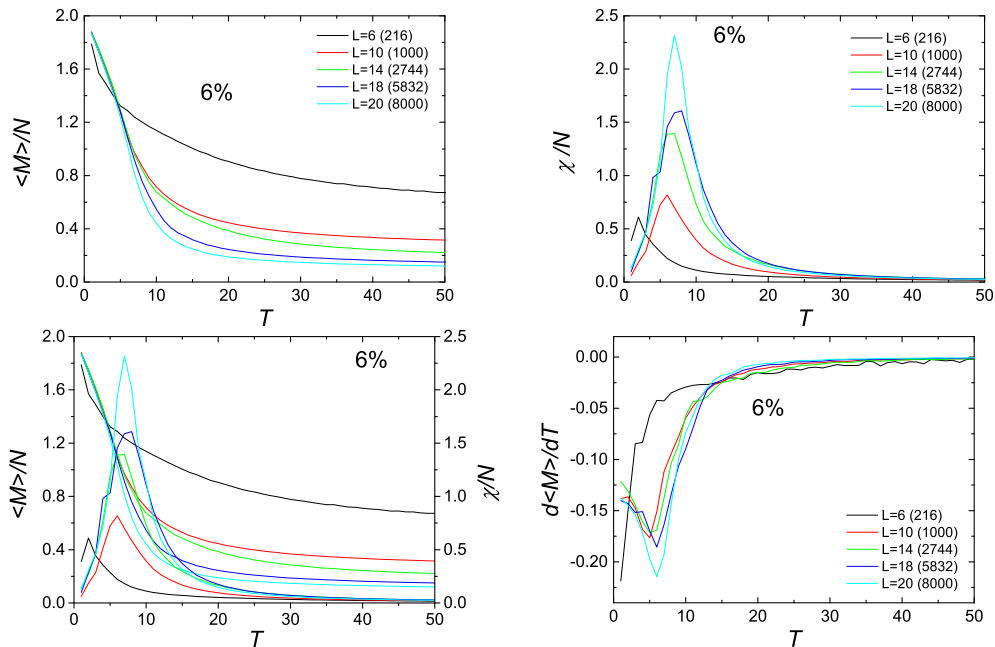
Σχήμα 4.27: Η μαγνήτιση ανά σπιν, η μαγνητική επιδεκτικότητα ανά σπιν ξεχωριστά και σε κοινό διάγραμμα και η παράγωγος της μαγνήτισης σαν συνάρτηση της θερμοκρασίας για διάφορα μεγέθη πλεγμάτων, με γραμμική διάσταση  $L = 6, 10, 14, 18, 20$  για το υλικό  $Ga_{0.5}Mn_{0.5}N$  με βήμα  $\Delta T = 10$  K.



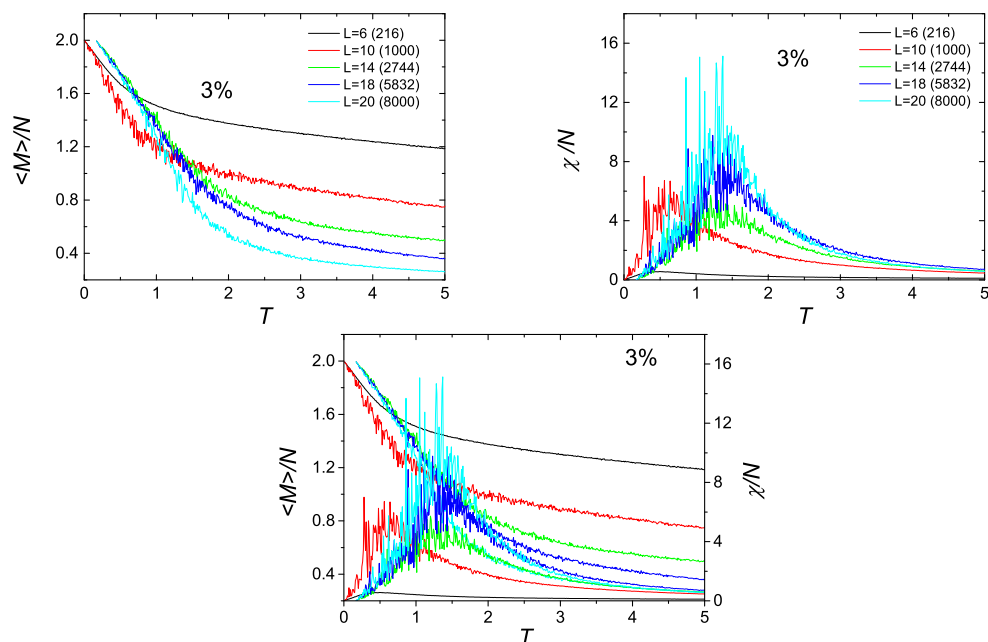
Σχήμα 4.28: Η μαγνήτιση ανά σπιν, η μαγνητική επιδεκτικότητα ανά σπιν ξεχωριστά και σε κοινό διάγραμμα και η παράγωγος της μαγνήτισης σαν συνάρτηση της θερμοκρασίας για διάφορα μεγέθη πλεγμάτων, με γραμμική διάσταση  $L = 6, 10, 14, 18, 20$  για το υλικό  $Ga_{0.75}Mn_{0.25}N$  με βήμα  $\Delta T = 1$  K.



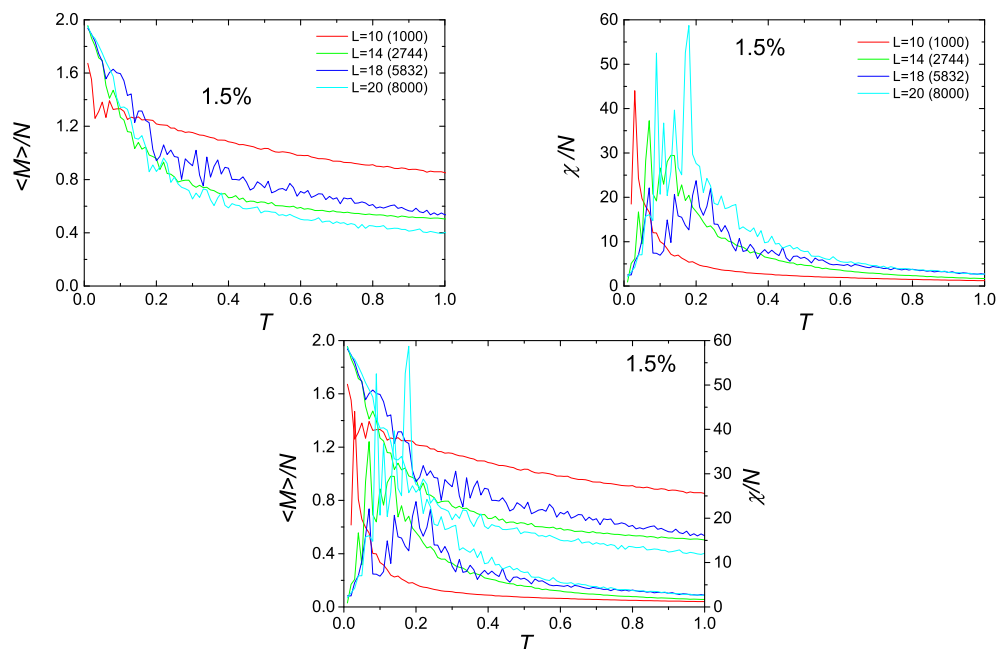
Σχήμα 4.29: Η μαγνήτιση ανά σπιν, η μαγνητική επιδεκτικότητα ανά σπιν ξεχωριστά και σε κοινό διάγραμμα και η παράγωγος της μαγνήτισης σαν συνάρτηση της θερμοκρασίας για διάφορα μεγέθη πλεγμάτων, με γραμμική διάσταση  $L = 6, 10, 14, 18, 24$  για το υλικό  $Ga_{0.875}Mn_{0.125}N$  με βήμα  $\Delta T = 1 K$ .



Σχήμα 4.30: Η μαγνήτιση ανά σπιν, η μαγνητική επιδεκτικότητα ανά σπιν ξεχωριστά και σε κοινό διάγραμμα και η παράγωγος της μαγνήτισης σαν συνάρτηση της θερμοκρασίας για διάφορα μεγέθη πλεγμάτων, με γραμμική διάσταση  $L = 6, 10, 14, 18, 24$  για το υλικό  $Ga_{0.94}Mn_{0.06}N$  με βήμα  $\Delta T = 1 K$ .



Σχήμα 4.31: Η μαγνήτιση ανά σπιν, η μαγνητική επιδεκτικότητα ανά σπιν ξεχωριστά και σε κοινό διάγραμμα σαν συνάρτηση της θερμοκρασίας για διάφορα μεγέθη πλεγμάτων, με γραμμική διάσταση  $L = 6, 10, 14, 18, 24$  για το υλικό  $Ga_{0.97}Mn_{0.03}N$  με βήμα  $\Delta T = 0.01$  K.

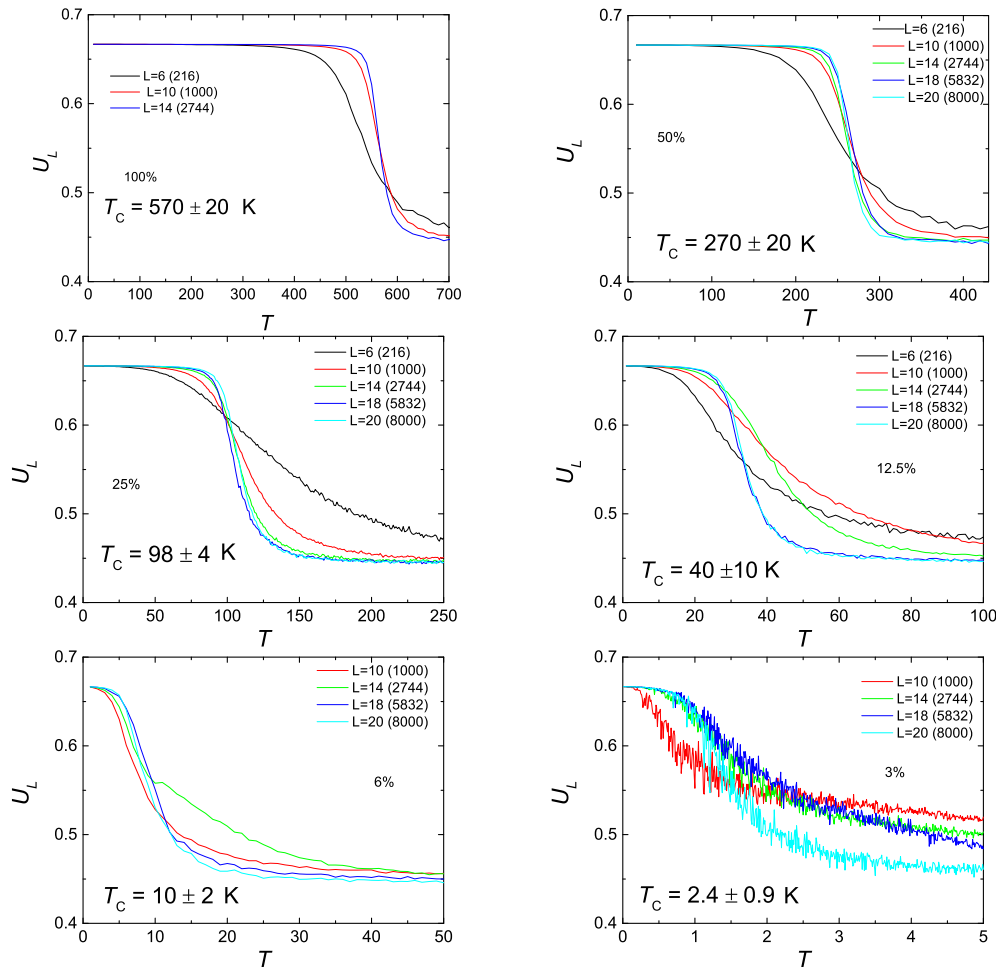


Σχήμα 4.32: Η μαγνήτιση ανά σπιν, η μαγνητική επιδεκτικότητα ανά σπιν ξεχωριστά και σε κοινό διάγραμμα σαν συνάρτηση της θερμοκρασίας για διάφορα μεγέθη πλεγμάτων, με γραμμική διάσταση  $L = 10, 14, 18, 24$  για το υλικό  $Ga_{0.985}Mn_{0.015}N$  με βήμα  $\Delta T = 0.01$  K.



### 4.2.3 Ο συσσωρευτής τέταρτης τάξης

Παρουσιάζονται τα αποτελέσματα για τον συσσωρευτή τέταρτης τάξης για την μαγνήτιση ανά σπιν για κάθε ποσοστό κατάληψης.

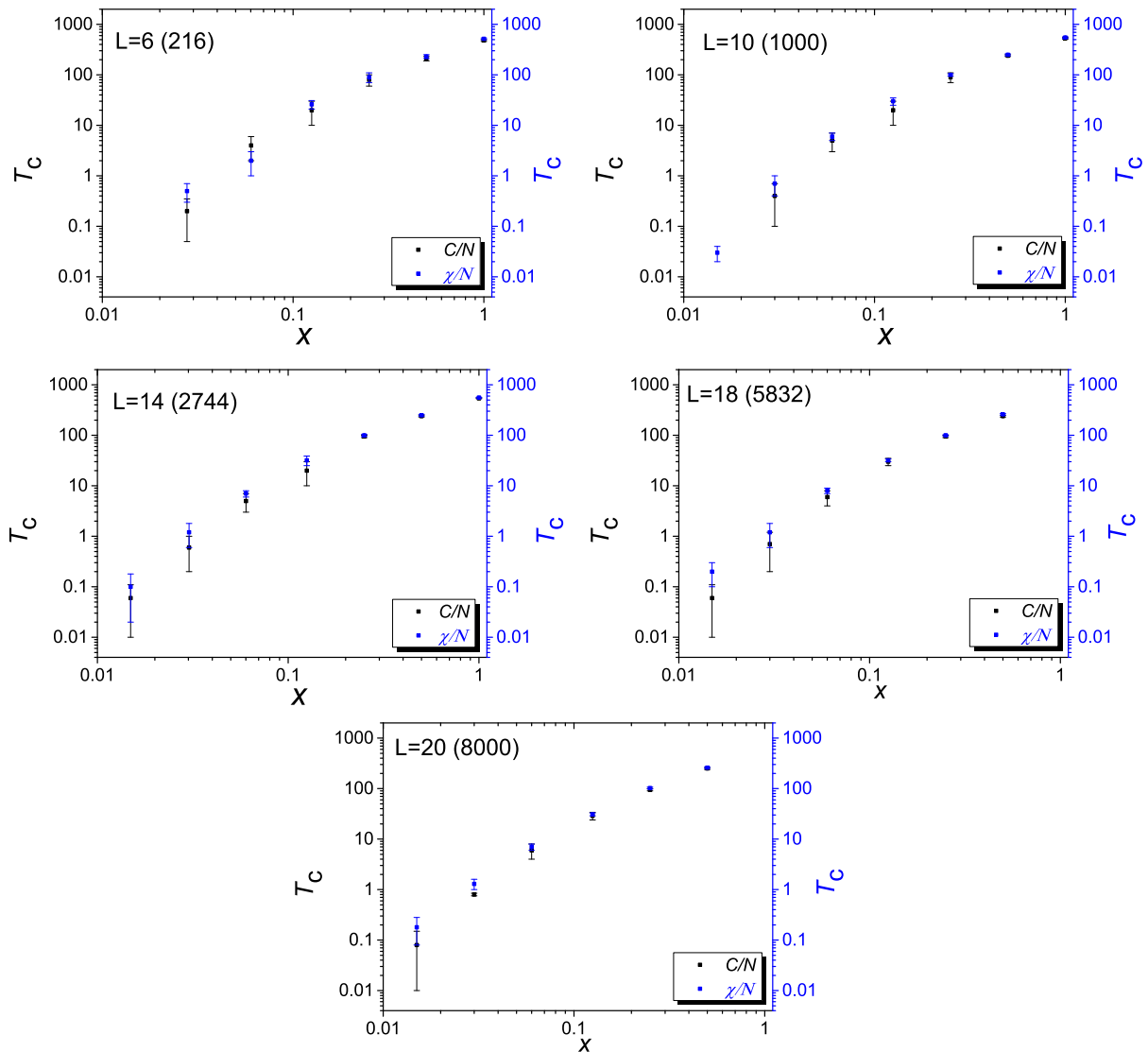


Σχήμα 4.33: Ο συσσωρευτής τέταρτης τάξης σαν συνάρτηση της θερμοκρασίας για διάφορα μεγέθη πλεγμάτων, με γραμμική διάσταση  $L = 6, 10, 14, 18, 20$  καθώς μικραίνει το ποσοστό κατάληψης των Mn.

Για όλα τα ποσοστά μπορεί να γίνει εκτίμηση της κρίσιμης θερμοκρασίας εκτός από το 1.5% που η εικόνα δεν είναι πολλή καθαρή. Ισχύουν τα σχόλια που έχουν ειπωθεί για τα όρια του συσσωρευτή σε μηδενική και άπειρη θερμοκρασία.

#### 4.2.4 Εκτίμηση κρίσιμων θερμοκρασιών

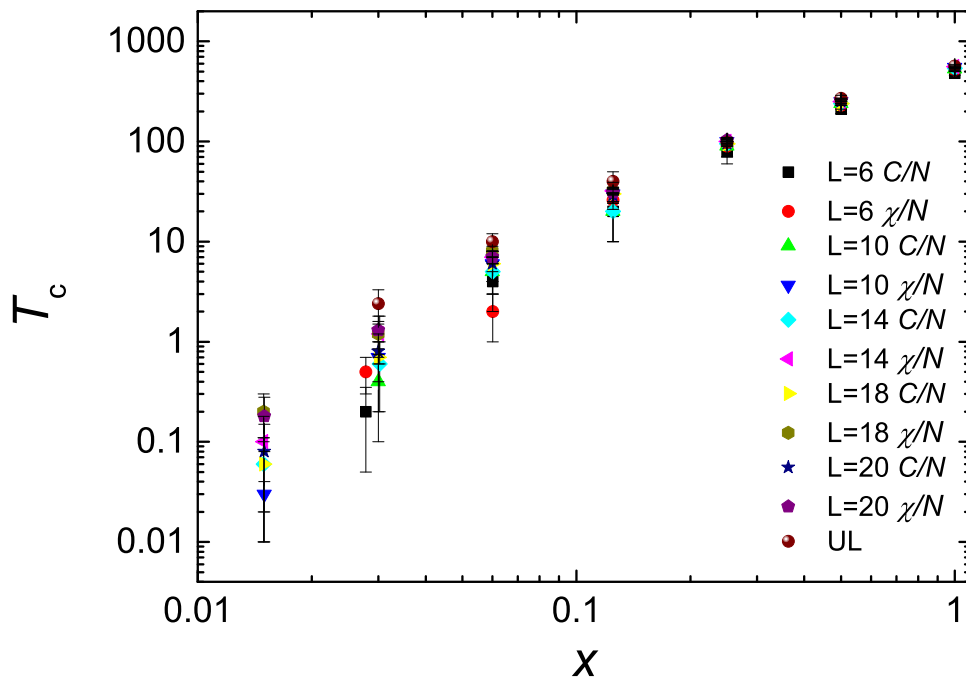
Για να παρουσιαστούν καλύτερα τα αποτελέσματα για την εκτίμηση των κρίσιμων θερμοκρασιών ζωγραφίζονται σε λογαριθμικές κλίμακες οι κρίσιμες θερμοκρασίες σαν συνάρτηση της πιθανότητας κατάληψης μαγνητικών δοτών  $x$ . Παρουσιάζονται οι μέθοδοι της ειδικής θερμότητας ( $C/N$ ) και της μαγνητικής επιδεκτικότητας ( $\chi/N$ ).



Σχήμα 4.34: Οι κρίσιμες θερμοκρασίες σαν συνάρτηση του  $x$ . Εκτιμημένες από τα διαγράμματα της ειδικής θερμότητας και της μαγνητικής επιδεκτικότητας μαζί με το σφάλμα τους για διάφορα μεγέθη πλεγμάτων, με γραμμική διάσταση  $L = 6, 10, 14, 18, 20$  για το υλικό  $Ga_{1-x}Mn_xN$ .

Στο τέλος συνοψίζονται οι μέθοδοι εκτίμησης της κρίσιμης θερμοκρασίας σε ένα διάγραμμα στο οποίο υπάρχει και η  $U_L$  method.

Όπως φαίνεται όσο μεγαλώνει το  $L$  τόσο πιο κοντά είναι τα αποτελέσματα των δύο μεθόδων ειδικής θερμότητας  $C/N$  και μαγνητικής επιδεκτικότητας  $\chi/N$ . Η μέθοδος ειδικής θερμότητας  $C/N$  φαίνεται να έχει μεγαλύτερα σφάλματα από αυτή της μαγνητικής επιδεκτικότητας  $\chi/N$ . Τέλος, όσο μικραίνει το ποσοστό κατάληψης μεγαλώνει το σχετικό σφάλματα στον υπολογισμό της κρίσιμης θερμοκρασίας.



Σχήμα 4.35: Οι κρίσιμες θερμοκρασίες σαν συνάρτηση σαν συνάρτηση του  $x$ . Εκτιμημένες από τα διαγράμματα της ειδικής θερμότητας και της μαγνητικής επιδεκτικότητας μαζί με το σφάλμα τους. Συνοπτικό διάγραμμα όπου φαίνονται όλα τα μεγέθη μαζί και είναι μαζί και οι κρίσιμες που βρέθηκαν με την βοήθεια του συσσωρευτή 4ης τάξης για την μαγνήτιση ανά σπιν. Οι υπολογισμοί αφορούν  $hcp$  πλέγμα για διάφορα μεγέθη πλεγμάτων, με γραμμική διάσταση  $L = 6, 10, 14, 18, 20$  για το υλικό  $Ga_{1-x}Mn_xN$ .

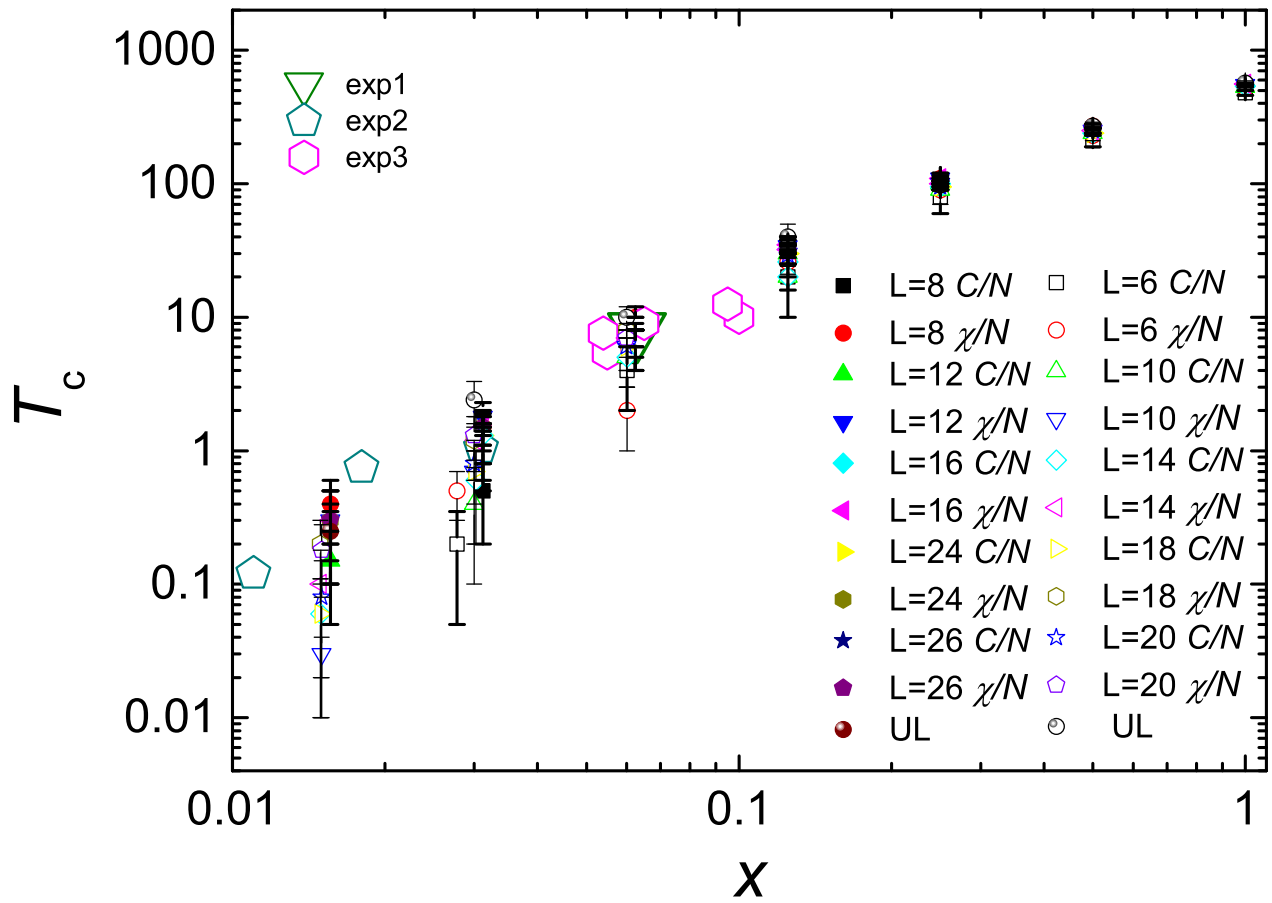
Επειδή και για τα δύο πλέγματα ( $fcc$ ,  $hcp$ ) στα πλαίσια των σφαλμάτων οι κρίσιμες θερμοκρασίες είναι αρκετά κοντά φαίνεται και ένα συγκριτικό διάγραμμα που έχει τις κρίσιμες και για τα δύο πλέγματα. Για το πλέγμα  $hcp$  που τα σύμβολα είναι κενά στο εσωτερικό οι κρίσιμες είναι ελάχιστα μικρότερες από ότι στο  $fcc$ . Οι δύο δομές λοιπόν εμφανίζουν παρόμοια κρίσιμα χαρακτηριστικά κάτι που φαίνεται και από το γεγονός ότι οι κρίσιμες θερμοκρασίες σχεδόν συμπίπτουν και από την ποιοτική εικόνα των διαγραμμάτων των θερμοδυναμικών ποσοτήτων όσο στο σύστημα αλλάζει το ποσοστό κατάληψης Mn (παρόμοια καθαρότητα κορυφών και συμπεριφορά μεγεθών).

Εξάλλου όπως έχει αναφερθεί, όταν αναλύθηκε στην εισαγωγή η σχέση των δύο δομών του υλικού, εμφανίζουν αρκετές ομοιότητες τα δύο πλέγματα και ως προς τις θέσεις γειτόνων καθώς οι πρώτοι και οι δεύτεροι γείτονες είναι ίδιοι και σε πλήθος και σε αποστάσεις. Και γενικά σε όλες σχεδόν τις αποστάσεις που έχει πλησιέστερους γείτονες το  $fcc$  στις ίδιες αποστάσεις έχει

και το hcp πλέγμα πλησιέστερους γείτονες μόνο που είναι διαφορετικής τάξης. Επίσης ο ατομικός παράγοντας καλύψεως και για τις δύο δομές προκύπτει  $\pi\sqrt{18} \approx 0.74$ . Για τις δύο δομές το κατώφλι διήθησης (site percolation threshold) σε προσέγγιση πρώτων γειτόνων προκύπτει ίδιο σύμφωνα με βιβλιογραφία [23]. Έτσι οι δύο δομές εμφανίζουν αρκετές ομοιότητες.

Αξίζει να σχολιαστεί πως σαν ολοκληρώματα ανταλλαγής για το hcp δεν έχουν εισαχθεί τιμές από κάποιον ανεξάρτητο υπολογισμό αλλά θεωρώντας πως το  $J_n$  έχει την ίδια συμπεριφορά συναρτήσεως της απόστασης που είχε και στο fcc. Οπότε με αυτό τον τρόπο έχοντας κάνει αυτή την υπόθεση επάγουμε και μια ανάλογη εικόνα στα αποτελέσματα. Υπάρχει περίπτωση να πρέπει να εισαχθεί κάποια εξάρτηση του  $J$  από τον προσανατολισμό και όχι μόνο από την απόσταση και εκεί τα δύο πλέγματα να εμφανίσουν κάποιες διαφορές στα  $J$  και άρα και στα  $T_c$ . Όμως η μελέτη τέτοιας ανισοτροπίας ξεφεύγει από τους στόχους της εργασίας αυτής.

Επίσης εκτός από τα πειραματικά αποτελέσματα οι εκτιμήσεις των κρίσιμων θερμοκρασιών συμφωνούν στα πλαίσια των σφαλμάτων με τις εικόνες εκτίμησης κρίσιμων θερμοκρασιών με προσομοιώσεις Monte Carlo της βιβλιογραφίας [12], [15].



Σχήμα 4.36: Οι κρίσιμες θερμοκρασίες σαν συνάρτηση του  $x$ . Εκτιμημένες από τα διαγράμματα της ειδικής θερμότητας και της μαγνητικής επιδεκτικότητας μαζί με το σφάλμα τους. Συνοπτικό διάγραμμα όπου φαίνονται όλα τα μεγέθη μαζί και είναι μαζί και οι κρίσιμες που βρέθηκαν με την βοήθεια του συσσωρευτή 4ης τάξης για την μαγνήτιση ανά σπιν. Οι υπολογισμοί αφορούν *fcc* και *hcp* πλέγματα για διάφορα μεγέθη πλεγμάτων για το υλικό  $Ga_{1-x}Mn_xN$ . Όπου *exp1* [5], *exp2* [4] και *exp3* [15] οι κρίσιμες που έχουν προσδιοριστεί πειραματικά.

# Κεφάλαιο 5

## ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ

### 5.1 Συμπεράσματα

Μελετήθηκε η συνεχής αλλαγή φάσης για τριδιάστατο κλασικό σιδηρομαγνήτη Heisenberg. Αρχικά με την βοήθεια της θεωρίας μέσου πεδίου υπολογίστηκαν οι εξισώσεις για τα βασικότερα θερμοδυναμικά μεγέθη (μέση ενέργεια, ειδική θερμότητα, μαγνήτιση και μαγνητική επιδεκτικότητα) μέσω της αυτοσυνεπούς εξίσωσης της μαγνήτισης για αλληλεπιδράσεις πρώτων ( $n = 1$ ), δεύτερων ( $n = 2$ ), τρίτων ( $n = 3$ ) και τέταρτων ( $n = 4$ ) γειτόνων. Οι κρίσιμες θερμοκρασίες μέσω της αυτοσυνεπούς εξίσωσης της μαγνήτισης προκύπτουν

Περίπτωση	Πρώτοι γείτονες	Δεύτεροι γείτονες	Τρίτοι γείτονες	Τέταρτοι γείτονες
$J$ φθίνοντος σαν $1/r^2$	4 J/k <sub>B</sub>	5 J/k <sub>B</sub>	7.666 J/k <sub>B</sub>	8.666 J/k <sub>B</sub>
$J$ φθίνοντος σαν $1/r$	4 J/k <sub>B</sub>	5.414 J/k <sub>B</sub>	10.033 J/k <sub>B</sub>	12.033 J/k <sub>B</sub>

Επίσης οι κρίσιμοι εκθέτες για κάθε περίπτωση στα πλαίσια της προσέγγισης μέσου πεδίου προσδιορίστηκαν από την ασυμπτωτική συμπεριφορά της εξίσωσης αυτοσυνέπειας και προέκυψαν  $\alpha = 0$ ,  $\beta = 0.5$ ,  $\gamma = 1$  και  $\delta = 3$  και δεν διαφοροποιούνται για κάθε  $n$ , γεγονός το οποίο αναδεικνύει τον οικουμενικό χαρακτήρα της κρίσιμης συμπεριφοράς. Τόσο οι κρίσιμοι εκθέτες όσο και κρίσιμες θερμοκρασίες όμως προκύπτουν σχετικά διαφορετικές σε σχέση με αυτά που προβλέπει η θεωρία μέσου πεδίου για τον σιδηρομαγνήτη Heisenberg λόγω του γεγονότος ότι στη θεωρία μέσου πεδίου σε 3 διαστάσεις έχει θεωρηθεί ότι οι διακυμάνσεις γύρω από το μέσο σπιν είναι μικρές. Όμως η κρίσιμη διάσταση  $d$  πάνω από την οποία μπορούν να αγνοηθούν οι διακυμάνσεις είναι  $d > 4$ . Επίσης όσο περισσότερους γείτονες και όσο πιο πολλές διαστάσεις εισάγουμε τόσο πιο πολύ περιορίζονται οι διακυμάνσεις και άρα αυξάνεται η εγχυρότητα της θεωρίας μέσου πεδίου.

Έπειτα έγιναν και προσομοιώσεις Monte Carlo στο πλέγμα fcc αυξάνοντας την τάξη  $n$  των γειτόνων των οποίων λαμβάνουμε υπόψιν την αλληλεπίδραση, για  $n = 1, 2, 3, 4$ . Θεωρήθηκαν πλέγματα διαφόρων μεγεθών  $L$ . Αναλύοντας την ποιοτική μορφή των διαγραμμάτων, στην ψευδοκρίσιμη θερμοκρασία όπου οι διακυμάνσεις, της μέσης ενέργειας και της μαγνήτισης, μεγιστοποιούνται εμφανίζεται μέγιστο η ειδική θερμότητα και η μαγνητική επιδεκτικότητα. Στην ίδια αυτή θερμοκρασία έχει η μέση ενέργεια ανά σπιν και η μαγνήτιση ανά σπιν την μέγιστη κλίση. Επίσης η ειδική θερμότητα φαίνεται να έχει μια πεπερασμένη τιμή ίση με 1 για μηδενική θερμοκρασία.

Όπως φαίνεται όσο μεγαλώνει η γραμμική διάσταση  $L$  του πλέγματος τόσο πιο απότομη είναι η μεταβολή στην κλίση της μέσης ενέργειας ανά σπιν και της μαγνήτισης ανά σπιν κατά την αλλαγή φάσης. Η μαγνήτιση ανά σπιν ξεκινάει από την μονάδα, για μηδενική θερμοκρασία, και από την κρίσιμη θερμοκρασία και μετά τείνει να μηδενιστεί. Φαίνεται πως, όσο μεγαλώνει το  $L$  και η κλίση στον μηδενισμό της μαγνήτισης, μεγαλώνει και το μέγιστο της μαγνητικής επιδεκτικότητας. Όσο πιο μεγάλο είναι το  $L$  μετατοπίζεται η κορυφή της ειδικής θερμότητας σε όλο και μεγαλύτερες θερμοκρασίες και η κορυφή της μαγνητικής επιδεκτικότητας εμφανίζεται σε όλο και μικρότερες θερμοκρασίες. Επίσης, όσο πιο μεγάλο είναι το  $L$  τόσο μικρότερη είναι και η διαφορά ανάμεσα στα διάφορα  $L$ . Ιδιαίτερα, για την μαγνήτιση, διαπιστώνεται πως όσο πιο μικρό είναι το ποσοστό κατάληψης τόσο μεγαλύτερη διαφορά στην κλιμάκωση εμφανίζουν μεταξύ τους τα  $L$ .

Οι ψευδοκρίσιμες θερμοκρασίες που εκτιμώνται από τα μέγιστα της ειδικής θερμότητας είναι μικρότερες σε σχέση με αυτές που εκτιμώνται από τα μέγιστα της μαγνητικής επιδεκτικότητας. Η πραγματική κρίσιμη είναι κάτι ανάμεσα στις δύο εκτιμήσεις με αυτές τις μεθόδους. Για μεγάλο  $L$  οι εκτιμήσεις θα είναι αρκετά κοντά ενώ για  $L \rightarrow \infty$  ταυτίζονται. Έπειτα γίνεται εκτίμηση του  $T_c$  από τα σημεία τομής των  $U_L$  για διαφορετικά  $L$ . Η εκτίμηση αυτή είναι σχεδόν ανεξάρτητη του ανεξάρτητη του  $L$ . Ο συσσωρευτής για  $T < T_c$  τείνει στο  $2/3$  ενώ για  $T > T_c$  τείνει στα  $4/9$ . Ενώ για  $\xi \gg L$  κοντά στο κρίσιμο σημείο ο συσσωρευτής παίρνει μια συγκεκριμένη τιμή που ελάχιστα εξαρτάται από την γραμμική διάσταση  $L$  του πλέγματος. Οι κρίσιμες θερμοκρασίες όσο μικραίνει το ποσοστό κατάληψης μικραίνουν και παρουσιάζονται τα αποτελέσματα σε διαγράμματα λογαριθμικής κλίμακας συναρτήσεως του  $x$  (ποσοστού κατάληψης μαγνητικών προσμίξεων). Για πολύ μικρά ποσοστά, κοντά στο  $p_c$  τα σφάλματα μεγαλώνουν. Επίσης οι κορυφές της ειδικής θερμότητας ανά σπιν και της μαγνητικής επιδεκτικότητας ανά σπιν είναι όλο και λιγότερο μυτερές όσο μικραίνει το ποσοστό των μαγνητικών δοτών.

Οι κορυφές της ειδικής θερμότητας ανά σπιν στην περίπτωση του  $J$  φθίνοντος σαν  $1/r$  είναι ελαφρά ψηλότερα καθώς η μέγιστη κλίση της μέσης ενέργειας ανά σπιν είναι ελαφρά πιο απότομη τότε σε σχέση με την περίπτωση του  $J$  φθίνοντος σαν  $1/r^2$ . Στην περίπτωση που το  $J$  φθίνει σαν  $1/r^2$  φαίνεται (ιδιαίτερα για μικρά  $L$ ) πως οι κορυφές είναι ελάχιστα ψηλότερες σε σχέση με την περίπτωση που το  $J$  φθίνει σαν  $1/r$ , καθώς η μαγνήτιση στο κρίσιμο σημείο τότε έχει λίγο πιο απότομη κλίση. Οι ψευδοκρίσιμες φαίνονται διαφορετικές για διαφορετικά  $J$ . Συγκεκριμένα στην περίπτωση που φθίνει σαν  $1/r^2$  παρουσιάζεται μικρότερη  $T_c$  και αυτό επιβεβαιώνεται σε όλες τις περιπτώσεις διαφορετικών ποσοστών κατάληψης και διαφορετικών  $n$ . Όσο μικραίνει το ποσοστό κατάληψης οι δύο κορυφές είναι όλο και πιο κοντά και άρα και οι κρίσιμες διαφέρουν λιγότερο. Αυξάνοντας το πλήθος των γειτόνων  $n$  αυξάνονται οι κρίσιμες θερμοκρασίες.

Όσο αυξάνεται το  $n$  (τάξη γειτόνων που λαμβάνεται υπόψιν) το υλικό μπορεί να εμπλουτιστεί με όλο και μικρότερα ποσοστά μαγνητικών δοτών συγκεκριμένα για  $n = 1$   $p_c = 0.19$  (19%),  $n = 2$   $p_c = 0.136$  (13.6%),  $n = 3$   $p_c = 0.061$  (6.1%) και  $n = 4$   $p_c = 0.05$  (5%) σύμφωνα με την βιβλιογραφία και τα αποτελέσματα μας φαίνεται να συμφωνούν πως τα  $p_c$  είναι περίπου σε αυτές τις τιμές. Έπειτα από την κλιμάκωση των κρίσιμων μεγεθών προκύπτουν οι κρίσιμοι εκθέτες

Περίπτωση	Εκθέτης	$n = 1$	$n = 2$	$n = 3$	$n = 4$
$J$ φθίνοντος σαν $1/r$	$\nu(\delta\nu)$	0.701(19)	0.72(3)	0.70(4)	0.704(19)
$J$ φθίνοντος σαν $1/r^2$	$\nu(\delta\nu)$	0.701(19)	0.75(3)	0.703(10)	0.73(3)

Εκθέτης	$n = 1$
$\alpha(\delta\alpha)$	-0.137(6)
$\beta(\delta\beta)$	0.393(14)
$\gamma(\delta\gamma)$	1.403(38)

Φαίνεται από τις εκτιμήσεις για 1ους, 2ους, 3ους και 4ους γείτονες πως το  $\nu$  στα πλαίσια των σφαλμάτων προκύπτει το ίδιο όπως αναμενόταν λόγω της οικομενικότητας. Επίσης οι εκτιμήσεις είναι σε γενικές γραμμές σε καλή συμφωνία με τα δεδομένα της βιβλιογραφίας.

Στην συνέχεια έγιναν προσομοιώσεις και για το υλικό  $\text{Ga}_{1-x}\text{Mn}_x\text{N}$ . Το πλέγμα αυτό αρχικά ήταν GaN και άλλαζε σταδιακά η περιεκτικότητα  $x$  σε μαγνητικές προσμίξεις Mn. Η μελέτη έγινε και για τις δύο δομές zinc-blende και wurtzite. Τα ολοκληρώματα ανταλλαγής  $J$  που χρησιμοποιήθηκαν λαμβάνοντας υπόψιν έως και τους 16ους πλησιέστερους γείτονες και χρησιμοποιήθηκαν τιμές της βιβλιογραφίας για zinc-blende δομή ενώ για wurtzite θεωρήθηκαν πως έχουν την ίδια εξάρτηση από το  $r$  όπως στην δομή zinc-blende. Με τις ίδιες 3 μεθόδους εκτιμήθηκαν οι  $T_c$  για διαφορετικές τιμές του  $x$  και για τις δύο δομές και έγιναν διαγράμματα  $T_c - x$  στα οποία εισάχθηκαν και τιμές από πειραματικές εκτιμήσεις της βιβλιογραφίας. Οι δύο δομές βρέθηκε πως εμφανίζουν παρόμοια κρίσιμα χαρακτηριστικά κάτι που φαίνεται και από το γεγονός ότι οι κρίσιμες θερμοκρασίες σχεδόν συμπίπτουν και από την ποιοτική εικόνα των διαγραμμάτων των θερμοδυναμικών ποσοτήτων όσο το  $x$  ελαττώνεται (παρόμοια καθαρότητα κορυφών και συμπεριφορά μεγεθών). Επίσης εκτός από τα πειραματικά αποτελέσματα, που είναι σχετικά κοντά με τις εκτιμήσεις των κρίσιμων θερμοκρασιών, συμφωνούν στα πλαίσια των σφαλμάτων με τις εικόνες εκτίμησης κρίσιμων θερμοκρασιών με προσομοιώσεις Monte Carlo της βιβλιογραφίας. Εισάγοντας  $J_n$  έως  $n = 16$  τάξη γειτόνων μπορεί να φτάσουμε έως περίπου  $x = 0.015$  (1.5%).

Βέβαια υπάρχουν και προτάσεις για επιπλέον διερεύνηση σε ορισμένα θέματα. Μπορεί να εισαχθεί κάποια εξάρτηση του  $J$  από τον προσανατολισμό και όχι μόνο από την απόσταση για την δομή wurtzite και εκεί τα δύο πλέγματα να εμφανίσουν κάποιες διαφορές στα  $J$  και στις  $T_c$ . Επίσης μπορεί να γίνει μια πιο ακριβής εκτίμηση των κρίσιμων εκθετών με μέθοδο ιστογράμματος και να εκτιμηθούν και για πλέγματα, με διάφορα ποσοστά κατάληψης μαγνητικών δοτών, οι κρίσιμοι εκθέτες.



# Βιβλιογραφία

- [1] T. Dietl, H. Ohno, F. Matsukura, J. Cibert and D. Ferrand, Zener Model Description of Ferromagnetism in Zinc-Blende Magnetic Semiconductors, *Science* 287, 1019 (2000).
- [2] A. Bonanni, M. Sawicki, T. Devillers, W. Stefanowicz, B. Faina, Tien Li, T. E. Winkler, D. Sztienkiel, A. Navarro-Quezada, M. Rovezzi, R. Jakiela, A. Grois, M. Wegscheider, W. Jantsch, J. Suffczynski, F.D' Acapito, A. Meingast, G. Kothleitner, and T. Dietl, Experimental probing of exchange interactions between localized spins in the dilute magnetic insulator (Ga,Mn)N, *Phys.Rev.B* 84, 035206 (2011).
- [3] K. Sato and H. Katayama-Yoshida, Material Design of GaN-Based Ferromagnetic Diluted Magnetic Semiconductors, *Jpn. J. Appl. Phys.* 40, L485 (2001); M. van Schilfgaarde and O. N. Mryasov, Anomalous exchange interactions in III-V dilute magnetic semiconductors, *Phys. Rev. B* 63, 233205 (2001); Y. Uspenskii, E. Kulatov, H. Mariette, H. Nakayama and H. Ohta, Ab-initio study of the magnetism in GaAs, GaN, ZnO, and ZnTe-based diluted magnetic semiconductors, *J. Magn. Magn. Mater.* 258, 248 (2003); B. Sanyal, O. Bengone, and S. Mirbt, Electronic structure and magnetism of Mn-doped GaN, *Phys. Rev. B* 68, 205210 (2003); Q. Wang, Q. Sun, P. Jena and Y.Kawazoe, Antiferromagnetic Coupling Driven by Bond Length Contraction near the  $\text{Ga}_{1-x}\text{Mn}_x\text{N}$  Film Surface *Phys. Rev. Lett.* 93, 155501 (2004); M. Wierzbowska, D. Sanchez-Portal and S. Sanvito, Different origins of the ferromagnetic order in (Ga,Mn)As and (Ga,Mn)N, *Phys. Rev. B* 70, 235209 (2004); P. Mahadevan and A. Zunger, Trends in ferromagnetism, hole localization, and acceptor level depth for Mn substitution in GaN, GaP, GaAs and GaSb, *Appl. Phys. Lett.* 85, 2860 (2004); Y.-J.Zhao, P. Mahadevan, and A. Zunger, Comparison of predicted ferromagnetic tendencies of Mn substituting the Ga site in III-V's and in I-III-VI<sub>2</sub> chalcopyrite semiconductors, *Appl. Phys. Lett.* 84, 3753 (2004); L.Bergqvist, O.Eriksson, J.Kudrnovsky, V. Drchal, A. Bergman, L. Nordstrom and I. Turek, Magnetic properties and disorder effects in diluted magnetic semiconductors, *Phys. Rev. B* 72, 195210 (2005); P. Boguslawski and J. Bernholc, Fermi-level effects on the electronic structure and magnetic couplings in (Ga,Mn)N, *Phys. Rev. B* 72, 115208 (2005); K. Sato, P. H. Dederichs and H. Katayama-Yoshida, Exchange Interactions and Curie Temperatures in Dilute Magnetic Semiconductors, *Hyperfine Interact.* 160, 57 (2005); J. Kang, K. J. Chang and H.Katayama-Yoshida, First-Principles Study of Ferromagnetism in Mn-Doped GaN, *J. Supercond.* 18, 55 (2005); X. Luo and R. M. Martin, Jahn-Teller distortion and ferromagnetism in the dilute magnetic semiconductors GaAs:Mn and cubic GaN:Mn, *Phys. Rev. B* 72, 035212 (2005); M.

- Marques, L. G. Ferreira, L. K. Teles, L. M. R. Scolfaro, J. Furthmuller and F. Bechstedt, Magnetic properties of GaN/Mn<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N digital heterostructures: First-principles and Monte Carlo calculations, *Phys. Rev. B* 73, 224409 (2006); N. Tandon, G. P. Das and A. Kshirsagar, Electronic structure of diluted magnetic semiconductors Ga<sub>1-x</sub>Mn<sub>x</sub>N and Ga<sub>1-x</sub>Cr<sub>x</sub>N, *J. Phys. Condens. Matter* 18, 9245 (2006); T. Hynninen, H. Raebiger and J. von Boehm, A multiscale study of ferromagnetism in clustered (Ga,Mn)N, *J. Phys. Condens. Matter* 18, 1561 (2006); K. C. J. Kang, The electronic and magnetic properties of Mn-doped GaN, *Phys. Rev. B* 73, 635 (2006); P. Larson and S. Satpathy, Effect of vacancies on ferromagnetism in GaN:Mn dilute magnetic semiconductors from first-principles, *Phys. Rev. B* 76, 245205 (2007); X. Y. Cui, B. Delley, A. J. Freeman and C. Stampfl, Neutral and charged embedded clusters of Mn in doped GaN from first principles, *Phys. Rev. B* 76, 045201 (2007); T. Hynninen, H. Raebiger and J. von Boehm, Structural and magnetic properties of (Ga,Mn)N from first principles, *Phys. Rev. B* 75, 125208 (2007); P. Larson, Z. S. Popovic and S. Satpathy, Density functional study of ferromagnetism in Mn at GaN/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N interfaces, *Phys. Rev. B* 78, 113308 (2008); J. A. Chan, J. Z. Liu, H. Raebiger, S. Lany, and A. Zunger, Relative stability, electronic structure and magnetism of MnN and (Ga,Mn)N alloys, *Phys. Rev. B* 78, 184109 (2008); N. Gonzalez Szwacki, J. A. Majewski and T. Dietl, Aggregation and magnetism of Cr, Mn, and Fe cations in GaN, *Phys. Rev. B* 83, 184417 (2011).
- [4] M. Sawicki, T. Devillers, S. Galeski, C. Simserides, S. Dobkowska, B. Faina, A. Grois, A. Navarro-Quezada, K. N. Trohidou, J. A. Majewski, T. Dietl, A. Bonanni, Origin of low-temperature magnetic ordering in Ga<sub>1-x</sub>Mn<sub>x</sub>N, *Phys. Rev. B* 85, 205204 (2012).
- [5] E. Sarigiannidou, F. Wilhelm, E. Monroy, R. M. Galera, E. Bellet-Amalric, A. Rogalev, J. Goulon, J. Cibert, and H. Mariette, Intrinsic ferromagnetism in wurtzite (Ga,Mn)N semiconductor, *Phys. Rev. B* 74, 041306(R) (2006).
- [6] G. Kunert, S. Dobkowska, Tian Li, H. Reuther, C. Kruse, S. Figge, R. Jakiela, A. Bonanni, J. Grenzer, W. Stefanowicz, J. von Borany, M. Sawicki, T. Dietl and D. Hommel, Ga<sub>1-x</sub>Mn<sub>x</sub>N epitaxial films with high magnetization, *Appl. Phys. Lett.* 101, 022413 (2012).
- [7] W. Stefanowicz, D. Sztenkiel, B. Faina, A. Grois, M. Rovezzi, T. Devillers, F. D'Acapito, A. Navarro-Quezada, Tien Li, R. Jakiela, M. Sawicki, T. Dietl and A. Bonanni, Structural and paramagnetic properties of dilute Ga<sub>1-x</sub>Mn<sub>x</sub>N, *Phys. Rev. B* 81, 235210 (2010).
- [8] S. Granville, B. J. Ruck, F. Budde, H. J. Trodahl and G. V. M. Williams, Nearest-neighbor Mn antiferromagnetic exchange in Ga<sub>1-x</sub>Mn<sub>x</sub>N, *Phys. Rev. B* 81, 184425 (2010).
- [9] M. Zajac, J. Gosk, M. Kaminska, A. Twardowski, T. Szyszko, and S. Podsiadlo, Paramagnetism and antiferromagnetic d-d coupling in GaMnN magnetic semiconductor, *Appl. Phys. Lett.* 79, 2432 (2001).
- [10] S. Dhar, O. Brandt, A. Trampert, K. J. Friedland, Y. J. Sun, and K. H. Ploog, Observation of spin-glass behavior in homogeneous (Ga,Mn)N layers grown by reactive molecular-beam epitaxy, *Phys. Rev. B* 67, 165205 (2003).

- [11] T. Dietl and H. Ohno, Dilute ferromagnetic semi conductors: Physics and spintronic structures, *Rev. Mod. Phys.* 86, 187 (2014).
- [12] C. Simserides, J. A. Majewski, K. N. Trohidou and T. Dietl, Theory of ferromagnetism driven by superexchange in dilute magnetic semi conductors, *EPJ Web of Conferences* 75, 01003 (2014).
- [13] K. Sato, L. Bergqvist, J. Kudrnovsky, P. H. Dederichs, O. Eriksson, I. Turek, B. Sanyal, G. Bouzerar, H. Katayama-Yoshida, V. A. Dinh, T. Fukushima, H. Kizaki and R. Zeller, First-principles theory of dilute magnetic semiconductors, *Rev. Mod. Phys.* 82, 1633 (2010).
- [14] T. Dietl, F. Matsukura and H. Ohno, Ferromagnetism of magnetic semiconductors: Zhang-Rice limit, *Phys. Rev. B* 66, 033203 (2002).
- [15] S. Stefanowicz, G. Kunert, C. Simserides, J. A. Majewski, W. Stefanowicz, C. Kruse, S. Figge, Tian Li, R. Jakiela, K. N. Trohidou, A. Bonanni, D. Hommel, M. Sawicki, and T. Dietl, Phase diagram and critical behavior of a random ferromagnet  $\text{Ga}_{1-x}\text{Mn}_x\text{N}$ , *Phys. Rev. B* 88, 081201(R) (2013).
- [16] S. Nakamura, Background story of the invention of efficient InGaN blue-light-emitting diodes (Nobel lecture), *Angew. Chem. Int. Ed.*, 54 , pp. 7770-7788 (2015).
- [17] I. Akasaki, Blue light: a fascinating journey (Nobel lecture), *Angew. Chem. Int. Ed.*, 54 , pp. 7750-7763 (2015).
- [18] H. Amano, Growth of GaN layers on sapphire by low-temperature-deposited buffer layers and realization of p-type GaN by magnesium doping and electron beam irradiation (Nobel lecture), *Angew. Chem. Int. Ed.*, 54, pp. 7764-7769 (2015).
- [19] D. Feezell and S. Nakamura, Invention, development, and status of the blue light-emitting diode, the enabler of solid-state lighting, *C. R. Physique* 19 113-13 (2018).
- [20] S. Montanari, Fabrication and characterization of planar Gunn diodes for Monolithic Microwave Integrated Circuits, Phd Thesis, Forschungszentrums Jülich (2005).
- [21] I. Vurgaftman, J. R. Meyer and L. R. Ram-Mohan, Band parameters for III-V compound semiconductors and their alloys, *Applied Physics Review* (2001).
- [22] H. Morkoc, *Handbook of Nitride Semiconductors and Devices*, Vol. 1. Wiley (2008).
- [23] C. D. Lorenz, R. May, R. M. Ziff, Similarity of Percolation Thresholds on the HCP and FCC Lattices, *J. Stat. Phys.* 98, 961 (2000).
- [24] M. Suzuki, T. Uenoyama, A. Yanase, First-principles calculations of effective-mass parameters of AlN and GaN, *Phys. Rev. B* 52, 11, 8132-8139 (1995).
- [25] ESPI Metals. Gallium Nitride (GaN) Semiconductors. AZoM. (2013) <https://www.azom.com/article.aspx?ArticleID=8370>.

- [26] New Semiconductor Materials. Biology Systems. Characteristics and properties Gallium Nitride (GaN) <http://www.matprop.ru/GaN>.
- [27] K. Huang, Statistical Mechanics, Wiley (1987).
- [28] D. Stauffer, Scaling theory of percolation clusters, Physics Reports (Review Section of Physics Letters) 54, No.1 1-74 (1979).
- [29] D. W. Heerman and D. Stauffer, Influence of Boundary Conditions on Square Bond Percolation near  $P_c$ , Z. Physik B - Condensed Matter 40, 133-136 (1980).
- [30] K. Binder and D. W. Heerman, Monte Carlo Simulation in Statistical Physics, Springer (1988).
- [31] K. Binder, Finite Size Scaling Analysis of Ising Model Block Distribution Functions, Z. Phys. B 43, 119 (1981).
- [32] K. Κακλαμάνης, Μεταπτυχιακή διπλωματική εργασία, ΕΚΠΑ (2017).
- [33] P. Mohn, Magnetism in solid state physics, Springer (2005).
- [34] B. D. Gullity and C. D. Graham, Introduction to Magnetic Materials, Wiley (2009).
- [35] S. Chikazumi, Physics of Ferromagnetism, Oxford University Press (1997).
- [36] S. Blundell, Magnetism in Condensed Matter, Oxford Master Series in Condensed Matter Physics (2001).
- [37] N. Metropolis, A. W. Rosenbluth, M. N. Rosenbluth and A. H. Teller, Equation of State Calculations by Fast Computing Machines, J. Chem. Phys. 21, 1087 (1953).
- [38] M. E. J. Newman and G. T. Barkema, Monte Carlo Methods in Statistical Physics, Oxford University Press (1999).
- [39] K. Σιμσερίδης, Καταστάσεις της ύλης Αθήνα: Σύνδεσμος Ελληνικών Ακαδημαϊκών Βιβλιοθηκών (2015). Διαθέσιμο στο: <http://hdl.handle.net/11419/2117>.
- [40] H. Muller-Krumbhaar and K. Binder, Dynamic Properties of the Monte Carlo Method in Statistical Mechanics, J. Stat. Phys. 8, 1 (1973).
- [41] A. M. Ferrenberg and D. P. Landau, Critical behavior of the three-dimensional Ising model: A high-resolution Monte Carlo study, Phys.Rev.B 44, 5081 (1991)
- [42] L. Bergqvist and A. Bergman, Realistic finite temperature simulations of magnetic systems using quantum statistics, Phys. Rev. Materials 2, 013802 (2018).
- [43] J. C. Le Guillou and J. Zinn-Justin, Critical exponents from field theory, Phys. Rev. B 21, 3976 (1980).

- [44] M. Ferer and A. Hamid-Aidinejad, Three-dimensional Heisenberg ferromagnet: A series investigation, *Phys. Rev. B* 34, 6481 (1986).
- [45] T. R. Gawron and M. Cieplak, Site percolation thresholds of fcc lattice, *Acta Physica Polonica A* 80 461 (1991).