DIPLOMOVÁ PRÁCE

1983

Petr KULHÁNEK

MATEMATICKO FYZIKÁLNÍ FAKULTA UNIVERSITY KARLOVY

Katedra matematické fyziky

D I P L O M O V Á   P R Á C E

Studium některých dvoudimenzionálních mřížových modelů feromagnetik metodami Monte Carlo

Vypracoval : Petr Kulhánek

Vedoucí dipl..práce : RNDr. Roman Kotecký, CSc.,
KMF MFF UK

P R A H A   1 9 8 3

Prohlašuji, že jsem práci vypracoval samostatně za pomoci literatury uvedené v seznamu.

Petr Kulhánek

Děkuji RNDr. Koteckému za vedení této práce a za jeho cenné rady a připomínky. Můj dík patří také pracovníkům Výpočetního centra UK.

O B S A H

Ú V O D

Tato práce se zabývá problematikou dvoudimenzionálních mřížových modelů feromagnetik a jejich modelování na počítači. Práce je rozdělena do tří částí.

V části I je popis metody Monte Carlo použité při sestavování programu a popis výsledného programu.

V části II jsou shrnuty základní poznatky o Pottsově modelu a Z_Q modelu. Dále je zaveden Z_Q^P model jako přirozený přechod mezi Z_Q a Pottsovým modelem. Je diskutována problematika duality uvedených modelů a zjištěna selfduálnost modelu Z_6^5. Pro model Z_6^5 byly spočteny a v závěru části II přehledně sepsány do tabulky hodnoty veličin ω_n, $\tilde{\omega}_n$, které charakterizují původní a jemu duální model.

V části III jsou graficky znázorněny výsledky počítačových experimentů, prováděných na počítači EC 1040 ve Výpočetním centru Univerzity Karlovy. Na základě těchto výsledků byl v této části práce proveden odhad kritických teplot jednotlivých modelů.

I. 1. Monte Carlo metody pro mřížové modely.

Uvažujme dvoudimenzionální čtvercovou mříž Λ s N vrcholy. V každém vrcholu a je lokalizovaný spin, který může nabývat hodnoty $q_a \in \{1, 2, \dots Q\}$. Konfiguraci na celé mříži označme $K \equiv \{q_a\}_{a=1}^{N}$. Interakce mezi spiny systému je zadána Hamiltonovou funkcí $\mathcal{H}_N(K)$.

Ze statistického hlediska lze na náš systém nazírat dvojím způsobem. Buď při dané teplotě T sledujeme systém delší časový úsek a zajímá nás množina konfigurací $\{K_i\}_T$, kterými systém prošel nebo sledujeme současně velký soubor našich systémů a potom $\{K_i\}_T$ označuje okamžitou množinu konfigurací všech systémů souboru. Při dostatečně velkém časovém intervalu, resp. souboru s velkým počtem členů lze očekávat, že pro pravděpodobnost výskytu k-té konfigurace v $\{K_i\}_T$ platí v termodynamické rovnováze při teplotě T Boltzmanovo rozdělení:

$$(1) \quad P_k^{eq} \sim e^{-\beta \mathcal{H}_N(K_k)}$$

, kde $\beta = \frac{1}{k_B T}$ je inverzní teplota, k_B Boltz. konst.

Nechť $A(K)$ je libovolná pozorovatelná systému /například energie, magnetizace, atd./ Střední hodnotou při teplotě T chápeme výraz

$$(2) \quad \langle A \rangle = \frac{\sum_i A(K_i)\, P_i^{eq}}{\sum_i P_i^{eq}} = \frac{\sum_i A(K_i)\, e^{-\beta \mathcal{H}_N(K_i)}}{\sum_i e^{-\beta \mathcal{H}_N(K_i)}}$$

Suma ce probíhá přes všechny možné konfigurace systému. Při výpočtech volné energie a jejích derivací hraje základní roli partiční suma Z:

$$(3) \quad Z = \sum_i e^{-\beta \mathcal{H}_N(K_i)}$$

Vzhledem k tomu, že sčítání přes všechny konfigurace znamená velké množství součtů přes jednotlivé stupně volnosti systému není vhodné při výpočtu používat přímé numerické metody. Ani náhodný Monte Carlo /MC/ výběr bodů sumace není vhodný vzhledem k faktoru $e^{-\beta \mathcal{H}_N}$, který se může měnit o mnoho řádů. Účinnější je vybrat "statisticky reprezentativní" posloupnost konfigurací ${}^R\{K_i\}$, která simuluje soubor stavů v termodynamické rovnováze při teplotě $T = \frac{1}{k_B \beta}$. Označme P_i pravděpodobnost výskytu konfigurace K_i v reprezentativní posloupnosti. Nyní je třeba reprezentativní posloupnost zkonstruovat tak, aby $P_i \to P_i^{eq}$. Tuto konstrukci lze provést Markovským procesem, který je určen pravděpodobností přechodu $w_{i \to j}$ z konfigurace K i do konfigurace Kj. Postačující podmínkou pro konvergenci $P_i \to P_i^{eq}$ je vztah,

$$(4a) \qquad P_i^{eq}\, w_{i \to j} = P_j^{eq}\, w_{j \to i}$$

který musí splňovat pravděpodobnosti $w_{i \to j}$. Tato podmínka zajišťuje, že matice $w_{i \to j}$ má za vlastní vektor Boltzmanovo rozdělení a tedy převede soubor v termodynamické rovnováze na sebe. Z věty o kontrahujícím zobrazení lze potom ukázat, že $P_i \to P_i^{eq}$ [10,16]. Podmínka (4a) vyjadřuje fakt, že v termodynamické rovnováze je počet systémů souboru přecházejících z Ki do Kj roven počtu systémů souboru přecházejících z Kj do Ki. Pomocí Boltzmanova rozdělení /1/ ji lze přepsat do tvaru

$$(4b) \qquad \frac{w_{i \to j}}{w_{j \to i}} = e^{-\beta(\mathcal{H}_N(K_j) - \mathcal{H}_N(K_i))}$$

Veličinu $\langle A \rangle$ bude nyní možné odhadnout prostým středováním přes naši reprezentativní posloupnost /[2]:

$$(5) \qquad \langle A \rangle \approx \bar{A} = \frac{1}{M} \sum_{{}^R\{K_i\}_{i=1}^M} A(K_i)$$

Při M dosti velkém $\bar{A}$ dobře aproximuje $\langle A \rangle$.

Podmínka /4/ neurčuje $w_{i \to j}$ jednoznačně. Reprezentativní posloupnost ${}^R\{K_i\}$ lze získat tak, že K_i, K_{i+1} se od sebe liší jen hodnotami spinových proměnných na nějaké podmnožině $S \subset \exp \Lambda$, kde $\exp \Lambda$ označuje množinu všech podmnožin Λ. Specielně se K_i, K_{i+1} mohou lišit jen hodnotou spinu v jediném vrcholu mříže. V tomto případě další člen reprezentativní posloupnosti získáme tak, že systematicky nebo náhodně vybíráme vrchol mříže $\underline{a}$ a v tomto vrcholu zaměníme spin s odpovídající pravděpodobností. Ani nyní není podmínkou /4/ určena $w_{i \to j}$ jednoznačně. Podmínku /4/ lze splnit například následujícím výběrem $w_{i \to j}$:

$$(6a) \qquad w_{i \to j} = 1/2 \left[1 - \operatorname{th} \left(\frac{\beta \delta \mathcal{H}}{2} \right) \right]$$

$$(6b) \qquad w_{i \to j} = \begin{cases} e^{-\beta \delta \mathcal{H}} & \text{pro } \delta \mathcal{H} > 0 \\ 1 & \text{pro } \delta \mathcal{H} \le 0 \end{cases}$$

$$(6c) \qquad w_{i \to j} = e^{-\beta \mathcal{H}_N(K_j)} \Big/ \sum_k e^{-\beta \mathcal{H}_N(K_k)}$$

Ve všech výrazech $\delta \mathcal{H} = \mathcal{H}_N(K_j) - \mathcal{H}_N(K_i)$ a předpokládáme, že dvě po sobě jdoucí konfigurace se liší jen hodnotou spinu ve vrcholu $\underline{a}$ mříže.

Metoda /6b/ /Metropolisova metoda/ náhodně vybere novou konfiguraci K_j. Je-li $\delta\mathcal{H} \leq 0$ považujeme K_j za další člen reprezentativní posloupnosti. Je-li $\delta\mathcal{H} > 0$ generujeme náhodné číslo $\xi \in (0,1)$. Pro $\xi \leq e^{-\beta\delta\mathcal{H}}$ považujeme K_j za novou konfiguraci reprezentativní posloupnosti, pro $\xi > e^{-\beta\delta\mathcal{H}}$ ponecháme původní konfiguraci K_i jako nový člen reprezentativní posloupnosti.

Metoda/6 c/ /metoda teplotní lázně/ je pomalejší než Metropolisova metoda /díky nutnosti počítat sumu ve jmenovateli/, ale rychleji konverguje k termodynamické rovnováze a tedy v aproximaci /5/ lze vzít menší počet členů. To je způsobeno tím, že výběr nové konfigurace nezávisí na původní hodnotě spinu ve vrcholu $\underline{a}$, kde výměnu provádíme.

I. 2. Dynamická interpretace metody MC

Skutečný dynamický vývoj systému v rámci klasické mechaniky je deterministicky určen počátečními podmínkami a Hamiltonovou funkcí $\mathcal{H}_N$. Časový vývoj pozorovatelných $A(K)$ je dán kanonickými rovnicemi

$$(7) \qquad \frac{dA}{dt} = [A, \mathcal{H}_N]_P$$

kde vpravo stojí Poissonova závorka veličin $\mathcal{H}_N, A$.

Z hlediska výše popsané MC metody lze také sledovat časový vývoj systému, ale interpretace je poněkud odlišná. Označme v případě, že systém není v termodynamické rovnováze $P_i(t)$ pravděpodobnost, že se systém nachází v čase t v konfiguraci K_i. Časovou škálu chápeme jako parametr rostoucí s generováním každého dalšího prvku reprezentativní posloupnosti ${}^R\{K_i\}$. Za jednotku volíme 1 MCS /Monte Carlo step / odpovídající systematickému proběhnutí celé mříže spinů metodou MC. Vzhledem k velkému počtu iterací při počítačových experimentech můžeme parametr t považovat za spojitý. Základním vztahem pro nerovnovážné procesy potom je

$$(8) \qquad \frac{dP_i}{dt} = \sum_j P_j(t)\, w_{j\to i} - \sum_j P_i(t)\, w_{i\to j}$$

První člen napravo představuje všechny procesy, ve kterých se uskutečňuje přechod z ostatních stavů do stavu i a druhý člen naopak procesy, při kterých se přechází ze stavu i do jiných stavů.

Specielně v termodynamické rovnováze je $P_j(t) = P_j^{eq}$ a z podmínky /4/ máme

$$(9) \quad \frac{dP_i}{dt} = \sum_j \left(P_j^{eq} w_{j\to i} - P_i^{eq} w_{i\to j} \right) = 0$$

Střední hodnotu pozorovatelné $A(K)$ nyní chápeme analogicky jako ve výrazu /2/:

$$(10) \quad \langle A(t) \rangle = \frac{\sum_i A(K_i)\, P_i(t)}{\sum_i P_i(t)}$$

Takto chápaný časový vývoj systému neodpovídá skutečnému dynamickému vývoji, který je dán Hamiltonovou funkcí a počáteční konfigurací. Zde získáváme informaci jen o relaxaci středních hodnot pozorovatelných. Zadáme-li teplotu a počáteční konfiguraci, potom MC metoda simuluje proces, při kterém systém vnořený do okolí s teplotou T relaxuje k termodynamické rovnováze při této teplotě. Získáme správné odhady středních hodnot pozorovatelných a mnoho dalších cenných informací o systému.

Každé pozorovatelné $A(K)$ se přiřazuje t. zv. relaxační funkce ϕ_A a relaxační čas τ_A . Jsou definovány vztahy:

$$(11) \quad \phi_A(t) = \frac{\langle A(t) \rangle - \lim_{t\to\infty} \langle A(t) \rangle}{\langle A(0) \rangle - \lim_{t\to\infty} \langle A(t) \rangle}$$

$$(12) \quad \tau_A = \int_0^\infty \phi_A(t)\, dt$$

Výraz $\lim\limits_{t \to \infty} \langle A(t) \rangle$ ve vztahu /11/ představuje rovnovážnou střední hodnotu pozorovatelné $\underline{A}$ pro již zrelaxovaný systém.

I. 3. Chyby a nepřesnosti při metodě MC

Výpočet MC metodou lze v podstatě provádět dvojím způsobem. Buď sledujeme relaxaci systému z různých počátečních konfigurací při konstantní teplotě T nebo provádíme teplotní změny: Zadáme počáteční konfiguraci K_0 a počáteční teplotu T_0 a provedeme příslušný MC výpočet středních hodnot sledovaných pozorovatelných. Poslední konfiguraci systému potom chápeme jako výchozí konfiguraci pro teplotu $T_0 + \Delta T$ atd. Tento výpočet je ovšem podstatně náročnější na počítačový čas než pouhá relaxace při konstantní teplotě. Při obou způsobech výpočtu používáme přibližnou MC metodu a může proto dojít k celé řadě nepřesností a chyb.

Problémy přesnosti metod MC jsou často diskutovány v literatuře [2a, 10, 11].

Na základě teoretických úvah a dlouholetých zkušeností s MC simulacemi autoři dospívají k následujícím závěrům:

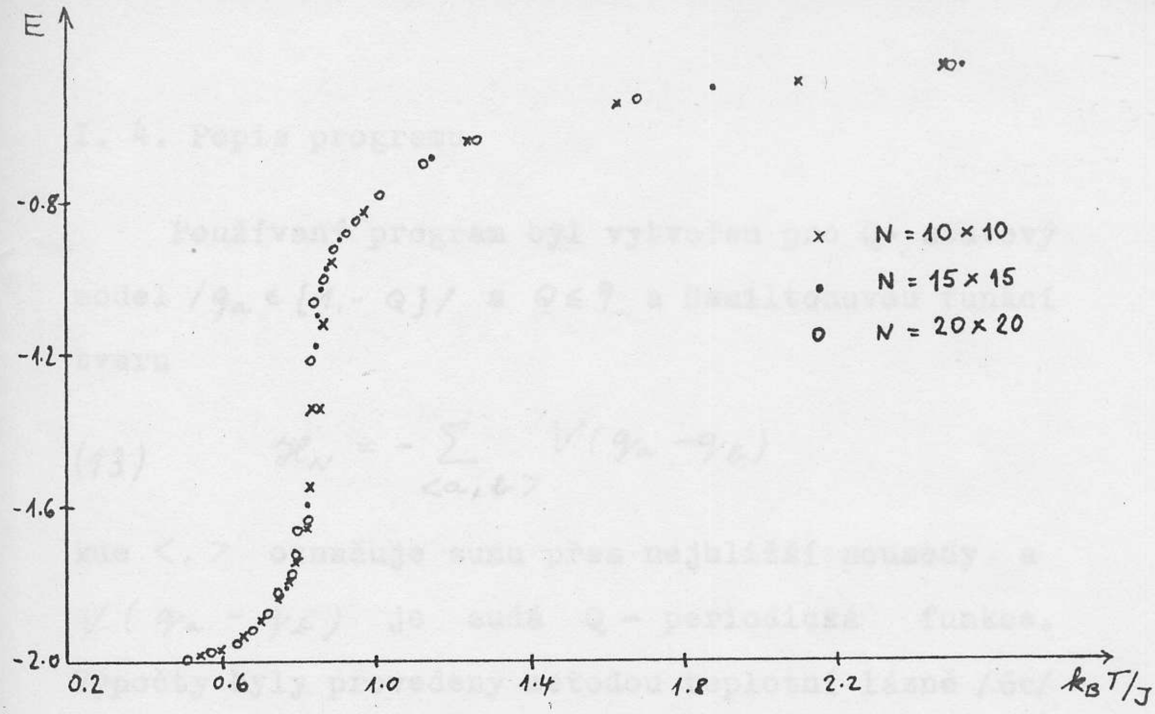
/A/ Chyby způsobené generátory náhodných čísel nebyly vůbec pozorovány. Jako generátor náhodných čísel se zpravidla používá multiplikativní generátor [15] $c_{n+1} = \lambda c_n \ (\mathrm{mod}\ P)$, kde pro binární počítač je $P = 2^k$. Volíme-li $\lambda = 3 \ (\mathrm{mod}\ 8)$, t. j. $\lambda = 8i + 3$ / i přirozené/ dosáhneme maximální možné periody generátoru $P/4$. Tato perioda bývá zpravidla mnohonásobně vyšší než počet prováděných MC iterací. Vhodnou volbou i a k lze zajistit i potřebné statistické vlastnosti generátoru.

/ B / Metody MC selhávají v těch oblastech teplot, kde se neúměrně prodlužují relaxační časy / například v okolí kritických teplot/. V těchto oblastech teplot nelze provést rozumné MC středování.

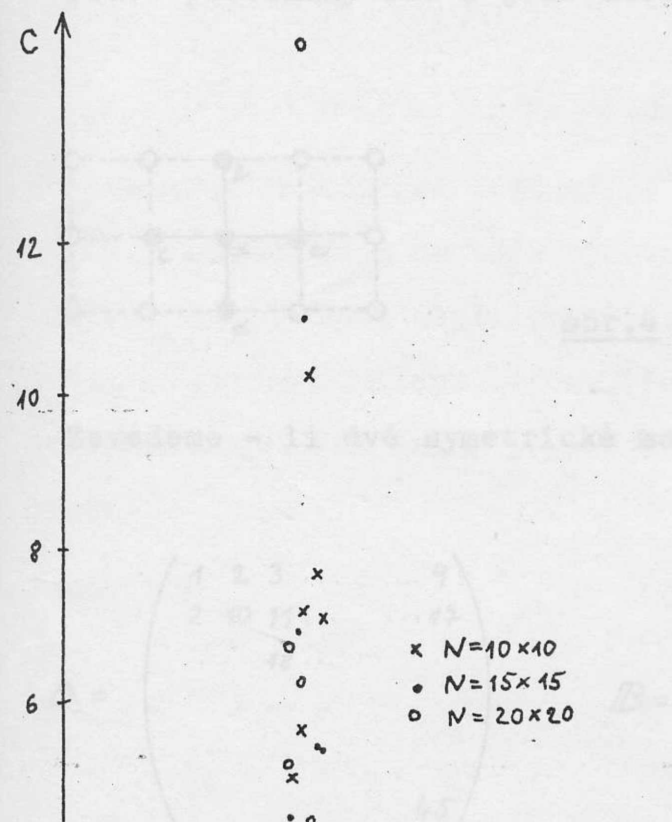
/ C / Závislost na velikosti mříže můžeme omezit vhodnou volbou okrajových podmínek / např. periodických/. Pro konečnou mříž mají všechny pozorovatelné analytické chování i tam, kde pro nekonečnou mříž divergují. Na obr. 1 , 2 a 3 jsou průběhy energie, měrného tepla a susceptibility počítané metodou MC pro Pottsův model s Q = 6 pro mříže 10x10, 15x15, 20x20 s periodickou okrajovou podmínkou.

Z obrázků je vidět, že změny průběhu energie v závislosti na velikosti mříže jsou minimální, ovšem liší se průběhy měrného tepla a susceptibility počítané pomocí korelací. Pro větší mříž jsou křivky $C(T)$ a $\chi(T)$ strmější.

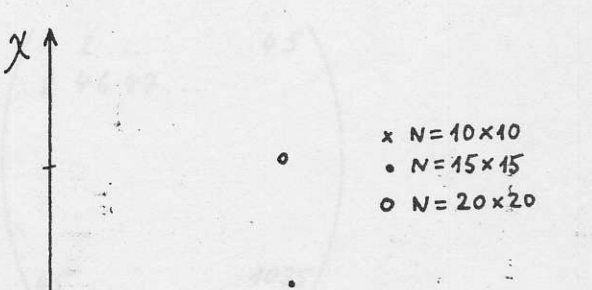
/ D / Podstatný vliv může mít to, že středujeme přes konečný časový interval Δt . V oblasti kritických teplot nemůžeme volit Δt dostatečně veliké / větší než relaxační čas/. Toto může vést k efektu hystereze při teplotním cyklu / teplota probíhá od T min do T max a zpět do T min/. Chyby způsobené středováním přes konečný časový interval jsou větší v Metropolisově metodě /6b/ než v metodě teplotní lázně / 6c/, protože metoda teplotní lázně má kratší relaxační časy / t.j. rychleji konverguje k termodynamické rovnováze/.



obr. 1 POTTSŮV MODEL S Q=6



obr. 2 POTTSŮV MODEL S Q=6



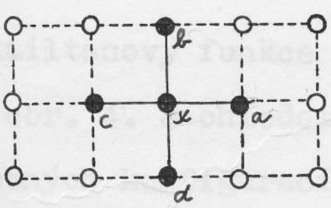
obr. 3 POTTSŮV MODEL S Q=6

I. 4. Popis programu

Používaný program byl vytvořen pro Q- stavový model $/q_a \in \{1, \dots Q\}/$ s $Q \leq 9$ a Hamiltonovou funkcí tvaru

$$(13) \qquad \mathcal{H}_N = - \sum_{\langle a, b \rangle} V(q_a - q_b)$$

kde $\langle , \rangle$ označuje sumu přes nejbližší sousedy a $V(q_a - q_b)$ je sudá Q - periodická funkce. Výpočty byly provedeny metodou teplotní lázně /6c/ s mříží probíhanou systematicky po řádcích. Označme právě probíhaný bod a jeho okolí podle obr.4



obr.4 - Okolí bodu x

Zavedeme - li dvě symetrické matice

$$\mathbb{A} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \dots & \dots 9 \\ 2 & 10 & 11 \dots & \dots 17 \\ & & 18 \dots & \\ & & & \\ & & & 45 \end{pmatrix} \qquad \mathbb{B} = \begin{pmatrix} 1 & 2 \dots & & 45 \\ 2 & 46 & 47 \dots & \\ & & & \\ & & & \\ 45 & & & 1035 \end{pmatrix}$$

lze konfiguraci okolí (a,b,c,d) bodu x přiřadit charakteristické číslo J následujícím postupem:

$$J1 = \mathbb{A}(q_a, q_b)$$

$$(14) \qquad J2 = \mathbb{A}(q_c, q_d)$$

$$J = \mathbb{B}(J1, J2)$$

Číslo J charakterizuje konfiguraci okolí vrcholu x s využitím symetrií

$$\mathcal{H}_{\tilde{\Lambda}}(q_a, q_b, q_c, q_d, q_x) = \mathcal{H}_{\tilde{\Lambda}}(q_b, q_a, q_c, q_d, q_x)$$

$$(15) \qquad \mathcal{H}_{\tilde{\Lambda}}(q_a, q_b, q_c, q_d, q_x) = \mathcal{H}_{\tilde{\Lambda}}(q_a, q_b, q_d, q_c, q_x)$$

$$\mathcal{H}_{\tilde{\Lambda}}(q_a, q_b, q_c, q_d, q_x) = \mathcal{H}_{\tilde{\Lambda}}(q_c, q_d, q_a, q_b, q_x)$$

Hamiltonovy funkce pro část mříže $\tilde{\Lambda}$ zobrazenou v obr. 4. S ohledem na tyto symetrie existuje 1035 různých konfigurací okolí vrcholu x mříže. ($J \in \{1, 2, \dots 1035\}$). Vzhledem k tomu, že interakce probíhá jen přes nejbližší sousedy je ve vztahu /6c/ možno psát:

$$(16) \qquad w_{i \to j} = \frac{e^{-\beta \mathcal{H}_{\tilde{\Lambda}}(K_j)}}{\sum_k e^{-\beta \mathcal{H}_{\tilde{\Lambda}}(K_k)}}$$

Pravděpodobnosti $w_{i \to j}$ závisí jen na nové konfiguraci

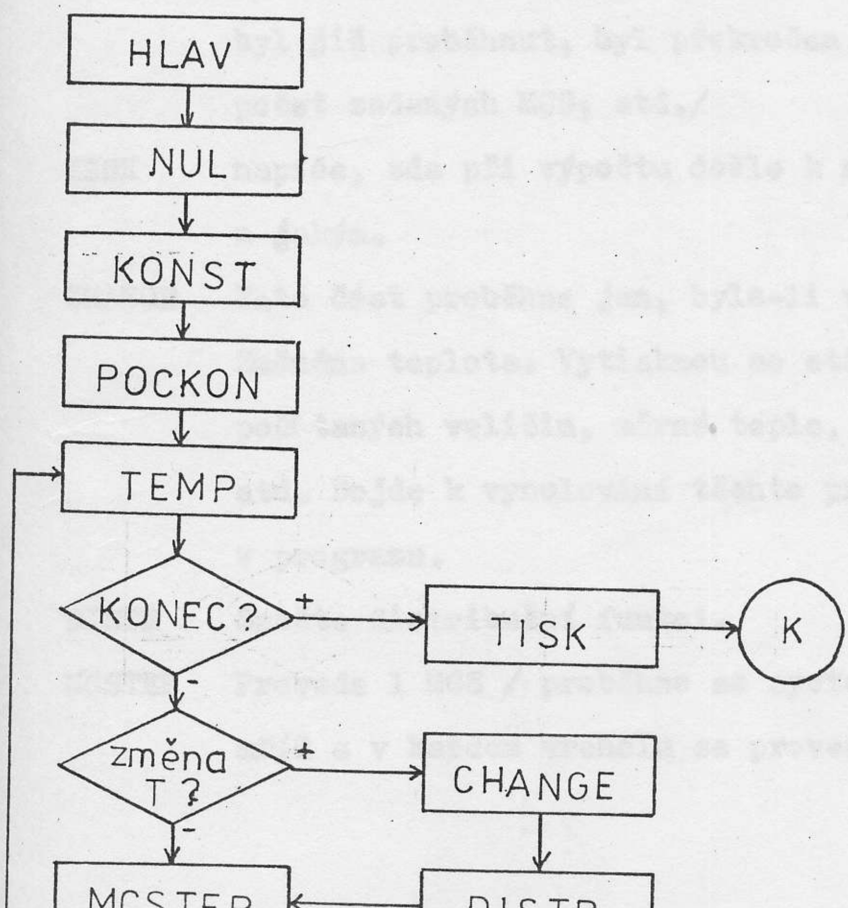
$\tilde{\Lambda}$ ve vrcholu <u>x</u> a okolí (a, b, c, d) , a proto je lze předem pro danou teplotu napočítat do tabulky velikosti 1035 x 9 tvaru $w(J, q_x)$ $J=1, \cdots 1035$

$$q_x = 1, \cdots Q$$

Při $Q < 9$ zůstávají zbývající místa v tabulce nevyužitá. Z těchto hodnot byla v programu ještě před zahájením MC výpočtu spočtena distribuční funkce

$$(17) \qquad D(J,K) = \sum_{q_x=1}^{K} w(J, q_x) \qquad J = 1, \cdots 1035$$
$$K = 1, \cdots Q$$

Dále byla použita standartní MC metoda. Základní struktura programu je na obr. 5.



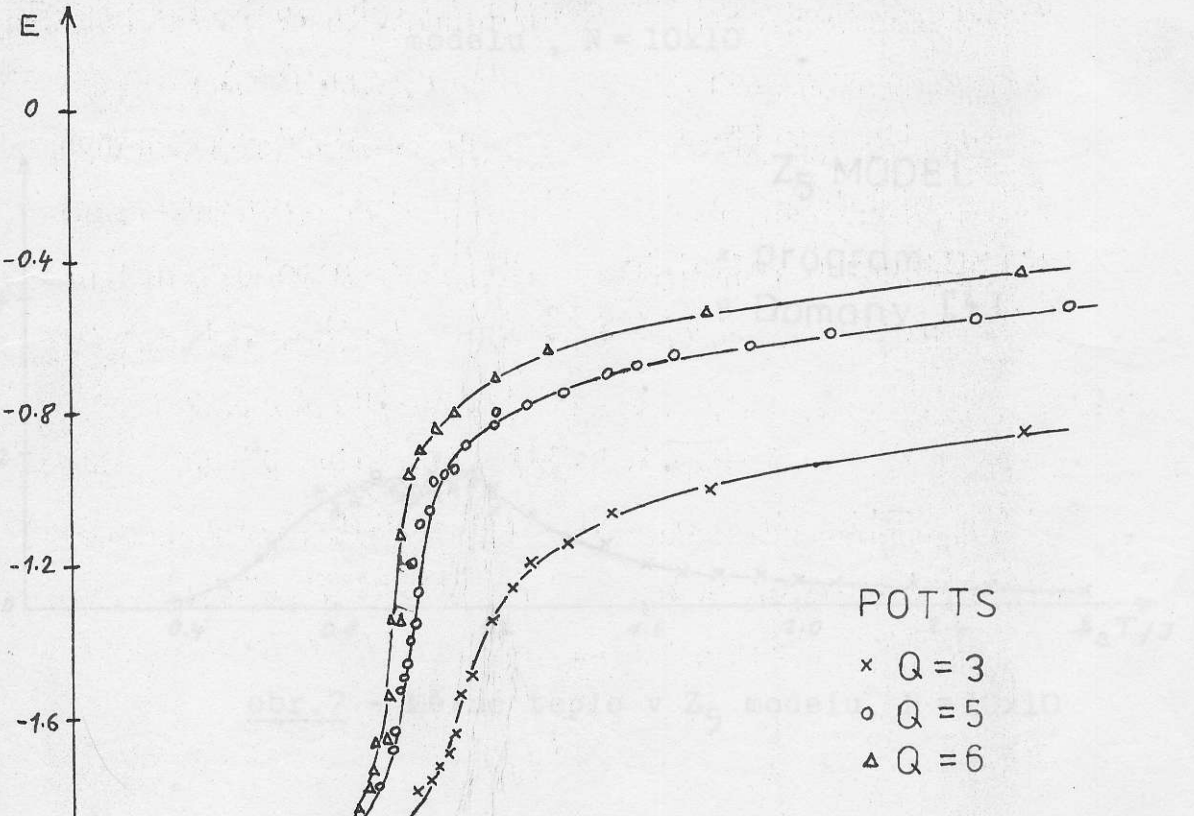
obr.5 - Struktura programu

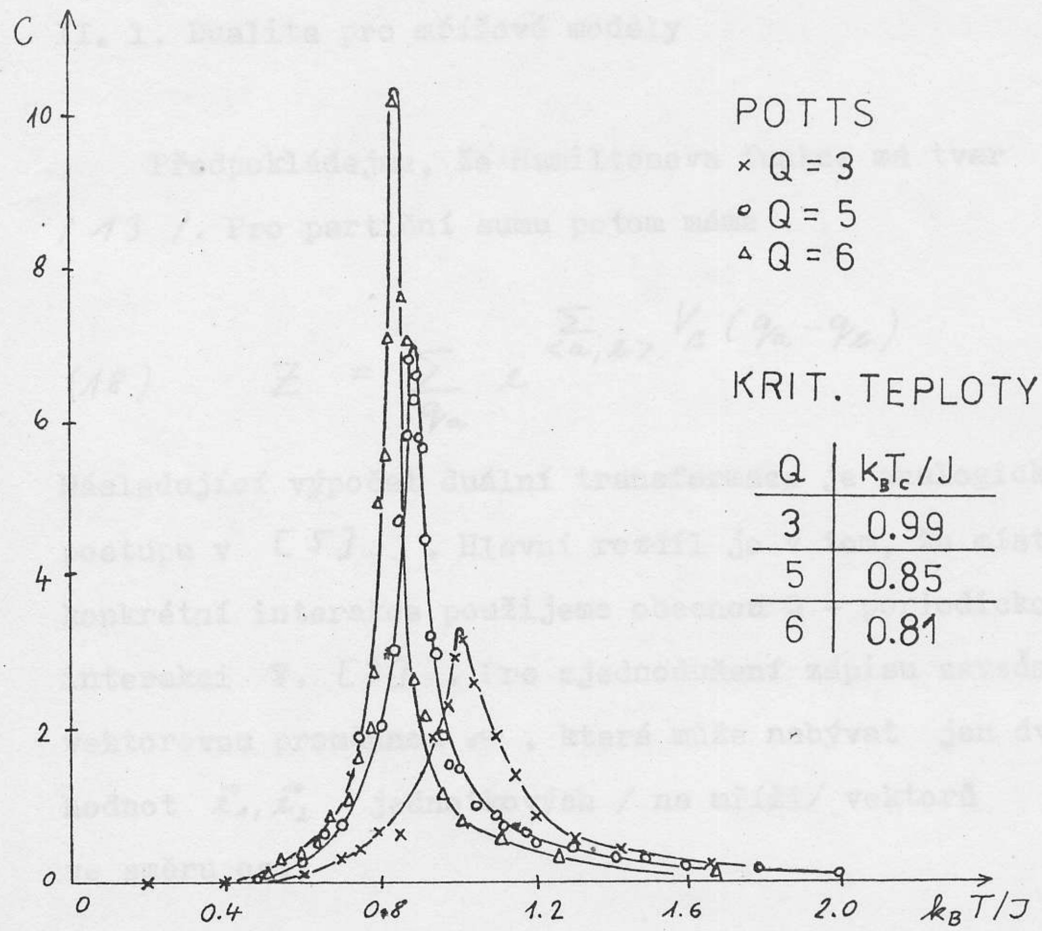
Hlavní úseky programu provádí tyto úlohy :

HLAV	provede úvodní tis k hlavičky
NUL	nuluje všechny proměnné a pole
KONST	zadá konstanty, matice $\mathbb{A}, \mathbb{B}$, načte a vytiskne parametry úlohy. Parametry vyjadřují např. způsob změny teploty, kolik MCS má probíhat relaxace, kolik MCS se budou počítat střední hodnoty, které proměnné se budou na mříži sledovat, atd.
POCKON	zadá počáteční konfiguraci
TEMP	po zvoleném počtu MCS změní teplotu
KONEC	rozhodne, zda má být ukončen výpočet /ve výpočtu nastala chyba, určený rozsah teplot byl již proběhnut, byl překročen maximální počet zadaných MCS, atd./
TISK	napíše, zda při výpočtu došlo k nějakým chybám a jakým.
CHANGE	Tato část proběhne jen, byla-li v části TEMP Změněna teplota. Vytisknou se střední hodnoty počítaných veličin, měrné teplo, susceptibilita atd. Dojde k vynulování těchto proměnných v programu.
DISTR	Spočte distribuční funkci.
MCSTEP	Provede 1 MCS / proběhne se systematicky celá mříž a v každém vrcholu se provede MC interace/

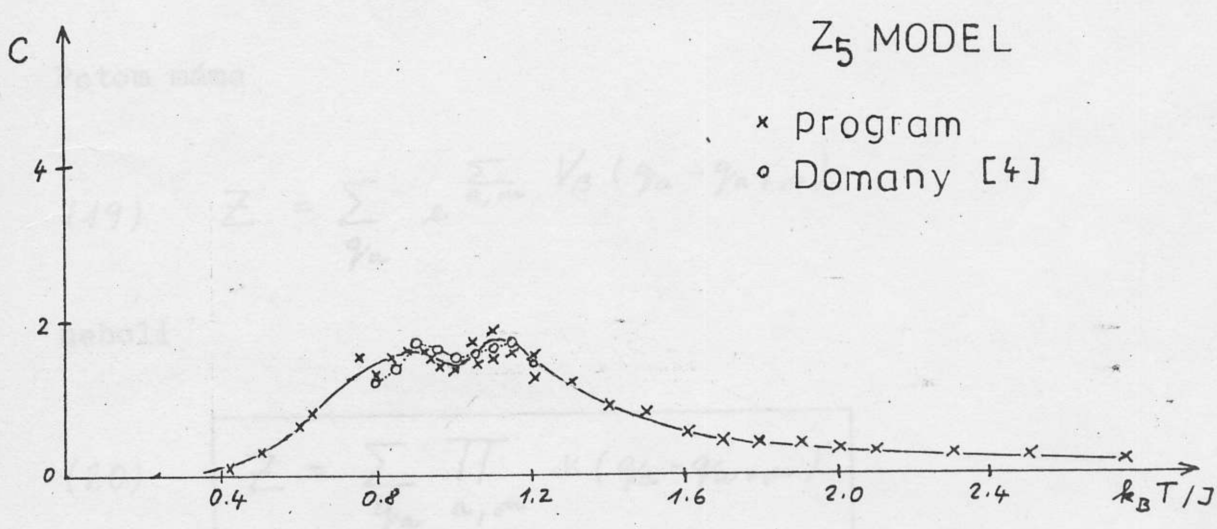
COUNT   Počítá veličiny zadané načtenými parametry. Po zvoleném počtu kroků tiskne mříž a počítané hodnoty.

V programu byl použit multiplikativní generátor náhodných čísel $c_{n+1} = (2^{16}+3)c_n \,(\mathrm{mod}\ 2^{31})$ s periodou 2^{29}. Při výpočtech byla volena periodická okrajová podmínka a počáteční konfigurace $q_a = 1$ ve všech vrcholech <u>a</u> mříže.
Program byl testován pomocí Pottsova modelu $(V(q_a,q_b) = J\delta_{q_a q_b})$ a Z_Q modelu $\left(V(q_a,q_b) = J\cos\left(\frac{2\pi}{Q}(q_a - q_b)\right)\right)$.
Výsledná závislost energie a měrného tepla na teplotě pro Pottsův model s Q = 3,5,6 je na obr. 6. Tvar křivek dobře souhlasí s teoreticky spočtenými kritickými teplotami. Na obr. 7 je výsledek MC výpočtu měrného tepla modelu Z 5 v porovnání s obdobným výpočtem provedeným v [4].





obr.6 - Měrné teplo a energie v Pottsově modelu , N = 10x10



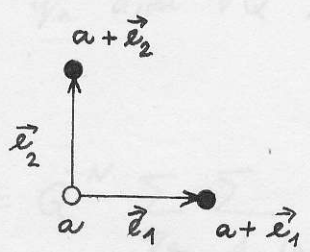
obr.7 - Měrné teplo v Z_5 modelu, N = 10x10

II. 1. Dualita pro mřížové modely

Předpokládejme, že Hamiltonova funkce má tvar / 13 /. Pro partiční sumu potom máme

$$(18) \qquad Z = \sum_{q_a} e^{\sum_{\langle a,b\rangle} V_\beta (q_a - q_b)}$$

Následující výpočet duální transformace je analogický postupu v [5] . Hlavní rozdíl je v tom, že místo konkrétní interakce použijeme obecnou Q - periodickou interakci V. [3] . Pro zjednodušení zápisu zaveďme vektorovou proměnnou μ , která může nabývat jen dvou hodnot $\vec{e}_1, \vec{e}_2$ jednotkových / na mříži/ vektorů ve směru os:



obr.8 - Význam zápisu $a+\mu$

Potom máme

$$(19) \qquad Z = \sum_{q_a} e^{\sum_{a,\mu} V_\beta (q_a - q_{a+\mu})}$$

neboli

$$(20) \qquad \boxed{Z = \sum_{q_a} \prod_{a,\mu} x(q_a - q_{a+\mu})}$$

kde $x(r) \equiv x_r = e^{V_\beta(r)}$ je Q- periodická sudá funkce

s hodnotami: $x_0, x_1, \dots x_{Q-1}$

Fourierův rozvoj pro $x_r(\beta)$ má tvar

$$(21a) \qquad x_r = \frac{1}{\sqrt{Q}} \sum_{s=0}^{Q-1} \tilde{x}_s \, e^{i\frac{2\pi}{Q} rs}$$

$$(21b) \qquad \tilde{x}_s = \frac{1}{\sqrt{Q}} \sum_{r=0}^{Q-1} x_r \, e^{-i\frac{2\pi}{Q} sr}$$

Dosadíme-li Fourierův rozvoj do partiční sumy a provedeme-li následující úpravy, dostaneme:

$$Z = \sum_{q_a} \prod_{a,\mu} \frac{1}{\sqrt{Q}} \sum_{s=0}^{Q-1} \tilde{x}_s \, e^{i\frac{2\pi}{Q}(q_a - q_{a+\mu})s} =$$

$$= Q^{-N} \sum_{q_a} \sum_{s_\mu(a)} \left(\prod_{a,\mu} \tilde{x}_{s_\mu(a)} \right) e^{\sum_{a,\mu} i\frac{2\pi}{Q}(q_a - q_{a+\mu}) s_\mu(a)} =$$

$$= Q^{-N} \sum_{s_\mu(a)} \left(\prod_{a,\mu} \tilde{x}_{s_\mu(a)} \right) \sum_{q_a} e^{\sum_a i\frac{2\pi}{Q} q_a \sum_\mu \nabla_\mu s_\mu(a)} =$$

$$= Q^{-N} \sum_{s_\mu(a)} \left(\prod_{a,\mu} \tilde{x}_{s_\mu(a)} \right) \prod_a \sum_{q=1}^{Q} e^{i\frac{2\pi}{Q} q \sum_\mu \nabla_\mu s_\mu(a)} =$$

$$= \sum_{s_\mu(a)} \left(\prod_{a,\mu} \tilde{x}_{s_\mu(a)} \right) \prod_a \delta_{0,\, \nabla_\mu s_\mu(a) (\mathrm{mod}\, Q)}$$

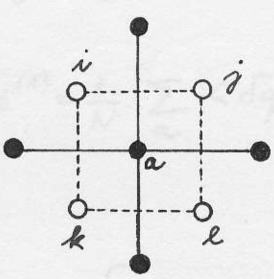
Operátor ∇_μ má tento význam:

$$(22) \qquad \nabla_\mu f(a) = f(a) - f(a-\mu)$$

Omezení $\sum_\mu \nabla_\mu s_\mu(a) = 0 \ (\mathrm{mod}\ Q)$ lze řešit tak, že položíme

$$(23) \qquad s_\mu(a) = (n_i - n_j)\ (\mathrm{mod}\ Q),$$

kde $\underline{i}$, $\underline{j}$ jsou body na duální mříži, jejichž spojnice protíná hranu $(a, a+\mu)$ původní mříže a $n_i \in \{1, 2 \ldots Q\}$:



$$\left.\begin{array}{l} s_1(a) = n_l - n_j \\ s_1(a-\vec{e}_1) = n_k - n_i \end{array}\right\} \Rightarrow \nabla_1 s_1 = n_l - n_j - n_k + n_i$$

$$\left.\begin{array}{l} s_2(a) = n_j - n_i \\ s_2(a-\vec{e}_2) = n_l - n_k \end{array}\right\} \Rightarrow \nabla_2 s_2 = n_j - n_i - n_l + n_k$$

<u>obr.9</u> - Řešení omezení $\nabla_1 s_1 + \nabla_2 s_2 = 0$

Konečný vztah pro partiční sumu tedy je

$$(24) \qquad \boxed{Z = \sum_{n_i} \prod_{\langle i,j \rangle} \tilde{x}_{n_i - n_j}}$$

Porovnáním /20/ a /24/ vidíme, že model /13/ je duální s modelem, ve kterém je x_r nahrazeno $\tilde{x}_r$ podle vztahu /21/.

II. 2. Pottsův model ve dvou dimenzích

Pottsův dvoudimenzionální model je Q - stavový model s interakcí danou Hamiltonovou funkcí

$$\mathcal{H}_N = -J \sum_{\langle a,b \rangle} \delta_{q_a,q_b} \qquad q_a \in \{1,2 \ldots Q\} \tag{25}$$

Spin s hodnotou $q_a = j$ si můžeme představit jako jednotkový vektor ve směru daném úhlem $\frac{2\pi}{Q} j$. Zaveďme pro náš systém následující nejčastěji používané charakteristické veličiny [2,7,9]:

$N_j = \sum_a \delta_{q_a,j}$ počet vrcholů mříže se spinem orientovaným ve směru j

$M^{(1)} = \frac{1}{N} \sum_a \langle \delta_{q_a,1} \rangle$ magnetizace na vrchol mříže ve směru 1 / parametr uspořádání /

$m_a = \delta_{q_a,1}$ okamžitá magnetizace ve vrcholu a

$\chi^{(1)} = \frac{\beta}{N} (\langle N_1^2 \rangle - \langle N_1 \rangle^2)$ isotermální susceptibilita ve směru 1 na vrchol mříže

$\chi = \frac{\beta}{NQ} \sum_j (\langle N_j^2 \rangle - \langle N_j \rangle^2)$ celková isotermální susceptibilita na vrchol mříže

$G(x) = \langle m_a m_b \rangle - \langle m_a \rangle \langle m_b \rangle$ korelace ($x = |a-b|$)

$\xi^{-1} = m = -\lim_{x\to\infty} \frac{\ln G(x)}{x}$ $\xi \ldots$ korelační délka, $m \ldots$ inversní kor. délka / hmotnost /

$E = -J/N \cdot \sum_{\langle a,b \rangle} \delta_{q_a,q_b}$ energie na vrchol mříže

$C = N(\beta J)^2 (\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2)$ měrné teplo

Veličina ξ má význam charakteristického rozměru fluktuací systému. Pro dosti velká $x=|a-b|$ mimo T_c korelace $G(x)$ ubývá exponencielně : $G(x)\sim e^{-mx}$. V kritické teplotě je inverzní korelační délka nulová, veličiny χ, ξ, C mocninně divergují. Tedy v okolí kritické teploty

$$(26) \quad C(T) \sim \left(1-\frac{T}{T_c}\right)^{-\alpha}$$

$$(27) \quad M^{(1)}(T) \sim \left(1-\frac{T}{T_c}\right)^{+\beta}$$

$$(28) \quad \chi(T) \sim \left(1-\frac{T}{T_c}\right)^{-\gamma}$$

$$(29) \quad \xi(T) \sim \left(1-\frac{T}{T_c}\right)^{-\nu}$$

kde $\alpha, \beta, \gamma, \nu$ se nazývají kritické koeficienty. V jejich definici je nutné odlišit, ze které fáze se ke kritické teplotě blížíme.

Pottsův model má jediný fázový přechod v $\beta_c = \ln(1+\sqrt{Q})/J$ / viz dále /. Nízkoteplotní fáze je uspořádaná hmotná fáze s narušenou Z_Q symetrií. Uspořádání probíhá na velké vzdálenosti / t. zv. long range order /. Vysokoteplotní fáze je neuspořádaná hmotná fáze s neporušenou Z_Q symetrií. V obou fázích tedy dochází k exponenciálnímu poklesu korelací se vzdáleností, pouze v T_c korelace ubývají s jistou mosninou vzdálenosti / algebraicky / .

Kritickou teplotu můžeme určit pomocí duální transformace /20-24/. Snadno zjistíme

$x_0 = e^{\beta J}$

$x_i = 1 \qquad i = 1,2,\dots Q-1$, tj.

(30) $$\boxed{\omega(\beta) \equiv \frac{x_i}{x_0} = e^{-\beta J}}$$

Partiční suma je jen funkcí ω : $Z = Z(\omega)$

Transformované veličiny mají tvar :

$$\tilde{x}_0 = \frac{1}{\sqrt{Q}} \left(e^{\beta J} + Q - 1 \right)$$

$$\tilde{x}_i = \frac{1}{\sqrt{Q}} \left(e^{\beta J} - 1 \right)$$

(31) $$\boxed{\tilde{\omega}(\beta) \equiv \frac{\tilde{x}_i}{\tilde{x}_0} = \frac{e^{\beta J} - 1}{e^{\beta J} + Q - 1}}$$

Pottsův model je tedy selfduální jestliže položíme

$$\tilde{\omega}(\beta) = \omega(\tilde{\beta}) \quad , \text{tj}$$

(32) $$\tilde{\beta} = \ln \frac{e^{\beta J} + Q - 1}{e^{\beta J} - 1}$$

Předpokládáme -li existenci jediného fázového přechodu je $\tilde{\beta}_c = \beta_c$ a z /32/ vypočteme

(33) $$J\beta_c = \ln \left(1 + \sqrt{Q} \right)$$

Typické konfigurace v jednotlivých fázích a průběhy E(T), C(T) a χ(T) jsou znázorněny v kapitole III.

II.3. Z_Q model ve dvou dimenzích

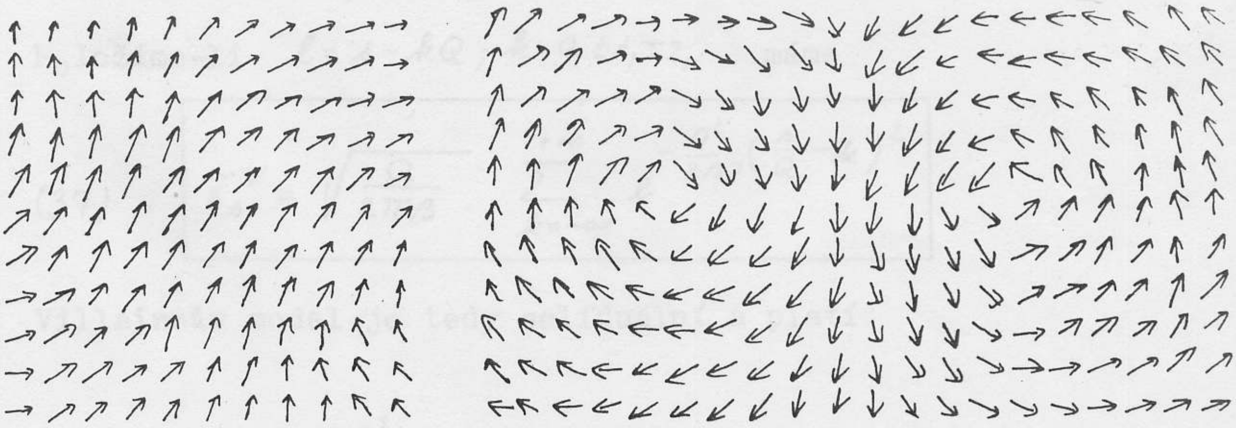
Z_Q modelem nazýváme model s interakcí danou Hamiltonovou funkcí

$$(34) \qquad \mathcal{H}_N = -J \sum_{\langle a,b \rangle} \cos \frac{2\pi}{Q} (q_a - q_b) \qquad q_a \in \{1, \dots Q\}$$

Veličiny charakterizující systém zavádíme analogicky jako pro Pottsův model. Magnetizací ve směru 1 rozumíme:

$$(35) \qquad M^{(1)} = \frac{1}{N} \left\langle \sum_{i=1}^{Q} N_i \cos \frac{2\pi}{Q}(i-1) \right\rangle$$

Pro $Q \leq 4$ má Z_Q model jediný fázový přechod. Nízkoteplotní i vysokoteplotní fáze mají podobné chování jako v Pottsově modelu. Pro $Q > 4$ má Z_Q model dva fázové přechody v teplotách T_c a T_k $(T_c < T_k)$. Mezi nízkoteplotní hmotnou uspořádanou fází $(T < T_c)$ a vysokoteplotní hmotnou neuspořádanou fází $(T > T_k)$ se objevuje střední fáze $(T \in (T_c, T_k))$. Střední fáze je nehmotná $(m = 0)$ a tedy korelace klesají se vzdáleností algebraicky - stupeň mocniny se spojitě mění s teplotou / t. zv. "soft" chování /. Střední fáze Z_Q modelu je velmi podobná nízkoteplotní fázi ve spojitém Z_{XY} modelu, která je charakteristická pomalu se měnícími konfiguracemi - například typickými dvojicemi vírů.



obr.10 - Typické spin od spinu se pomalu měnící / tj. s nízkou energií / konfigurace nízkoteplotní fáze Z_{XY} [12,13]

S rostoucím Q $T_c \to 0$ a $T_\kappa \to T_K$. Uspořádaná nízkoteplotní fáze zaniká a Z_Q model přechází v spojitý model Z_{XY} s jediným Kosterlitz - Thoulessovým fázovým přechodem T_K. Odvození těchto vlastností je v [5] provedeno na základě rozboru chování selfduálního Villainova modelu s interakcí

$$(36) \qquad \boxed{\mathcal{X}_r^V = \sum_{m=-\infty}^{+\infty} e^{-2\pi^2\beta J\left(\frac{r}{Q}-m\right)^2}}$$

Provedeme-li Fourierův rozvoj funkce $\mathcal{X}_r^V$ máme

$$\mathcal{X}_r^V = \frac{1}{\sqrt{2\pi\beta J}} \sum_{l=-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{l^2}{2\beta J}} e^{i\frac{2\pi l}{Q}r}$$

Z duální transformace máme /21/

$$\tilde{\mathcal{X}}_s^V = \frac{1}{\sqrt{2\pi\beta Q J}} \sum_r \sum_{l=-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{l^2}{2\beta J}} e^{i\frac{2\pi r}{Q}(l-s)} =$$

$$= \sqrt{\frac{Q}{2\pi\beta J}} \sum_{l=-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{l^2}{2\beta J}} \delta_{0,\,l-s\,(\mathrm{mod}\,Q)}$$

Položíme-li $\ell = s - kQ$; $k = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots$ máme

$$(37) \qquad \boxed{\tilde{x}_s^V = \sqrt{\frac{Q}{2\pi\beta}} \sum_{k=-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{Q^2}{2\beta J}\left(\frac{s}{Q} - k\right)^2}}$$

Villainův model je tedy selfduální a platí

$$(38) \qquad \tilde{\beta}\beta = \frac{Q^2}{4\pi^2 J^2}$$

Ve Villainově modelu tedy kritické inversní teploty splňují $\beta_c^V \beta_k^V = \frac{Q^2}{4\pi^2 J^2}$. V [5] jsou uvedeny důvody, proč se ve Villainově modelu objevuje střední fáze a na základě nerovností analogických GKS ukázáno, že tato fáze zůstane zachována i v Z_Q .

II.4. Z_Q^P model

Z_Q^P modelem nazvěme model s interakcí danou Hamiltonovou funkcí

$$(39)\qquad \mathcal{H}_N = -\frac{J}{P}\sum_{\langle a,b\rangle}\sum_{k=1}^{P}\cos\frac{2\pi k}{Q}(q_a-q_b) \qquad q_a\in\{1,\cdots Q\}, \quad P\le Q$$

Pro $P=Q$ přejde $\mathcal{H}_N$ v Hamiltonovu funkci Pottsova modelu a pro $P=1$ v Hamiltonovu funkci Z_Q modelu. Magnetizaci ve směru $\underline{1}$ na vrchol mříže lze definovat takto :

$$(40)\qquad M^{(1)} = \frac{1}{NP}\sum_{k=1}^{P}\sum_{i=1}^{Q}\left\langle N_i\cos\frac{2\pi k}{Q}(i-1)\right\rangle$$

Tento vztah při $P=Q$ resp. $P=1$ opět přejde ve vztah pro Pottsův resp. Z_Q model. Ostatní veličiny volíme analogicky jako pro Pottsův model. Model Z_Q^P se pro různá P zdá být přirozeným přechodem mezi Z_Q a Pottsovým modelem. Z duální transformace /20 -24/ máme

$$(41)\qquad x_r = e^{\frac{\beta J}{P}\sum_{k=1}^{P}\cos\frac{2\pi k r}{Q}} \qquad r=0,1,\cdots Q-1$$

$$(42)\qquad \tilde{x}_s = \frac{1}{\sqrt{Q}}\sum_{r=0}^{Q-1} e^{\frac{\beta J}{P}\sum_{k=1}^{P}\cos\frac{2\pi k r}{Q}}\, e^{-i\frac{2\pi}{Q}sr} \qquad s=0,1,\cdots Q-1$$

Opět můžeme zavést veličiny

$$(43)\qquad w_r = \frac{x_r}{x_0} = e^{-\beta J}x_r \qquad r=\cancel{0},1,\cdots Q-1$$

$$(44)\qquad \tilde{w}_r = \frac{\tilde{x}_r}{\tilde{x}_0} \qquad r=\cancel{0},1,\cdots Q-1$$

Vidíme, že model Z_Q^P není obecně selfduální. Snadno se lze přesvědčit, že ani obdobné zobecnění Villainova modelu V_Q na V_Q^P není selfduální. Nelze tedy provést důkaz existence střední fáze analogickým způsobem jako v [5]. To ovšem možnost existence střední fáze nevylučuje. Například v [1,3] uvažují o existenci střední fáze pro všechny modely s Q periodickou interakcí pro Q 5.

Ze vztahu /43,44/ pomocí /41,42/ byly pro model Z_6^P vypočteny veličiny $\omega_r, \tilde{\omega}_s$. Výsledné hodnoty jsou seřazeny v tabulce 1. Z tabulky je patrné, že kromě Pottsova modelu Z_6^6 je selfduální i Z_6^5 model položíme -li

$$(45) \qquad e^{-6\tilde{\beta}J/5} = \frac{e^{\beta J} - e^{-\beta J/5}}{e^{\beta J} + 5e^{-\beta J}} \quad , \text{neboli}$$

$$(46) \qquad \tilde{\beta}J = \frac{5}{6} \ln \frac{e^{\beta J} + 5e^{-\beta J}}{e^{\beta J} - e^{-\beta J/5}}$$

Z /45/ můžeme určit selfduální bod $\tilde{\beta} = \beta$:

$$e^{-6\beta J/5} = \frac{e^{\beta J} - e^{-\beta J/5}}{e^{\beta J} + 5e^{-\beta J}} \Rightarrow$$

$$5e^{-12\beta J/5} + 2e^{-6\beta J/5} - 1 = 0$$

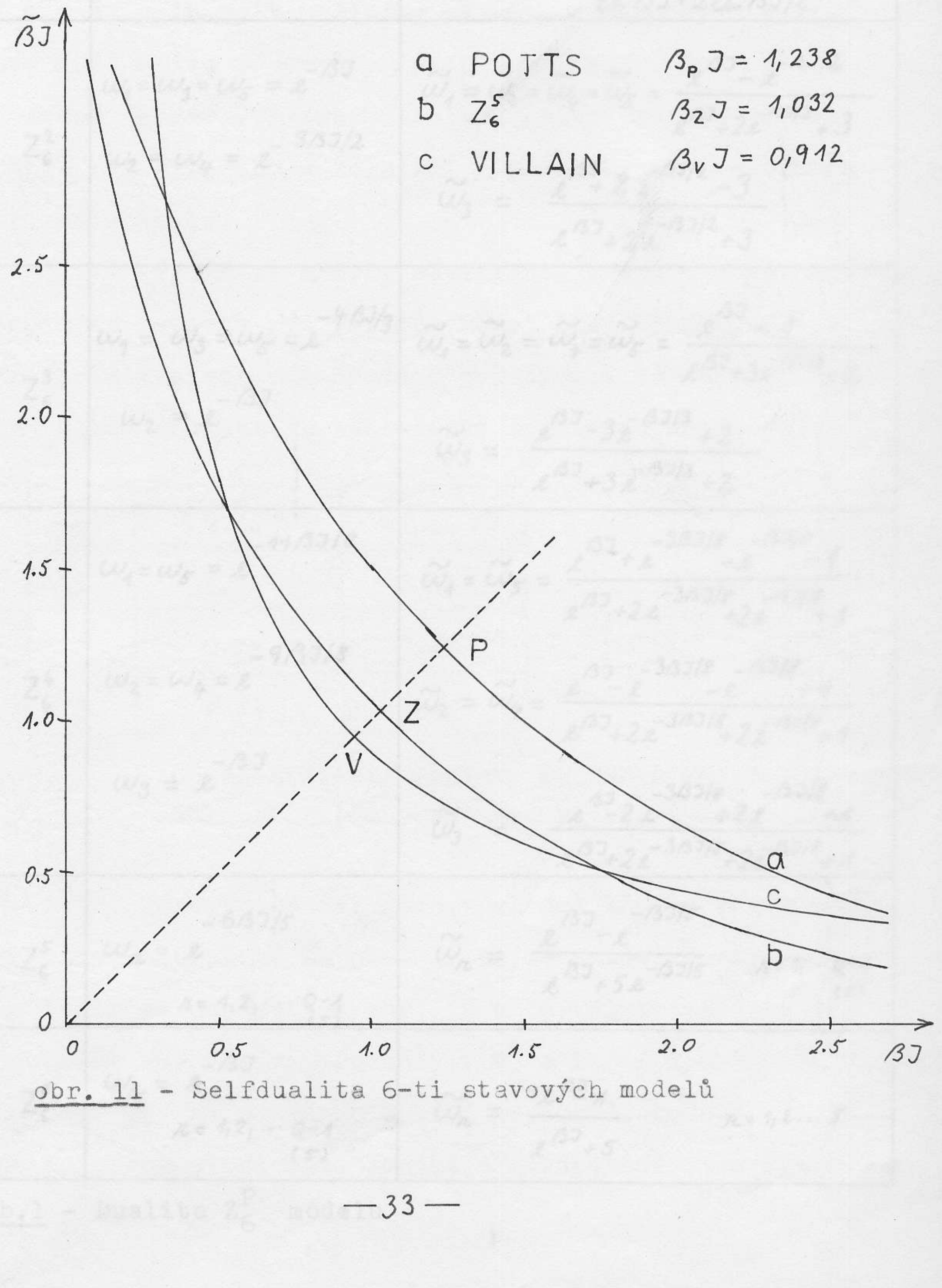
a ze substituce $y = e^{-6\beta J/5}$ máme

$$5y^2 + 2y - 1 = 0 \Rightarrow$$

$$y = \frac{-1 + \sqrt{6}}{5}$$,tedy

$$(47) \qquad \beta_{DUAL} J = \frac{5}{6} \ln \frac{5}{-1+\sqrt{6}} \approx 1{,}032$$

Selfduální linie 6-ti stavového Pottsova, Villainova a Z_6^5 modelu jsou vyneseny ze vztahů /32/,/38/,/46/ do grafu na obr. 11 .



obr. 11 - Selfdualita 6-ti stavových modelů

Model	ω_r	$\tilde{\omega}_r$
Z_6^1	$\omega_1=\omega_5=e^{-\beta J/2}$ $\omega_2=\omega_4=e^{-3\beta J/2}$ $\omega_3=e^{-2\beta J}$	$\tilde{\omega}_1=\tilde{\omega}_5=\dfrac{sh\,\beta J+sh\,\beta J/2}{ch\,\beta J+2ch\,\beta J/2}$ $\tilde{\omega}_2=\tilde{\omega}_4=\dfrac{ch\,\beta J-ch\,\beta J/2}{ch\,\beta J+2ch\,\beta J/2}$ $\tilde{\omega}_3=\dfrac{sh\,\beta J-2sh\,\beta J/2}{ch\,\beta J+2ch\,\beta J/2}$
Z_6^2	$\omega_1=\omega_3=\omega_5=e^{-\beta J}$ $\omega_2=\omega_4=e^{-3\beta J/2}$	$\tilde{\omega}_1=\tilde{\omega}_2=\tilde{\omega}_4=\tilde{\omega}_5=\dfrac{e^{\beta J}-e^{-\beta J/2}}{e^{\beta J}+2e^{-\beta J/2}+3}$ $\tilde{\omega}_3=\dfrac{e^{\beta J}+2e^{-\beta J/2}-3}{e^{\beta J}+2e^{-\beta J/2}+3}$
Z_6^3	$\omega_1=\omega_3=\omega_5=e^{-4\beta J/3}$ $\omega_2=e^{-\beta J}$	$\tilde{\omega}_1=\tilde{\omega}_2=\tilde{\omega}_4=\tilde{\omega}_5=\dfrac{e^{\beta J}-1}{e^{\beta J}+3e^{-\beta J/3}+2}$ $\tilde{\omega}_3=\dfrac{e^{\beta J}-3e^{-\beta J/3}+2}{e^{\beta J}+3e^{-\beta J/3}+2}$
Z_6^4	$\omega_1=\omega_5=e^{-11\beta J/8}$ $\omega_2=\omega_4=e^{-9\beta J/8}$ $\omega_3=e^{-\beta J}$	$\tilde{\omega}_1=\tilde{\omega}_5=\dfrac{e^{\beta J}+e^{-3\beta J/8}-e^{-\beta J/8}-1}{e^{\beta J}+2e^{-3\beta J/8}+2e^{-\beta J/8}+1}$ $\tilde{\omega}_2=\tilde{\omega}_4=\dfrac{e^{\beta J}-e^{-3\beta J/8}-e^{-\beta J/8}+1}{e^{\beta J}+2e^{-3\beta J/8}+2e^{-\beta J/8}+1}$ $\tilde{\omega}_3=\dfrac{e^{\beta J}-2e^{-3\beta J/8}+2e^{-\beta J/8}-1}{e^{\beta J}+2e^{-3\beta J/8}+2e^{-\beta J/8}+1}$
Z_6^5	$\omega_r=e^{-6\beta J/5}$ $r=1,2,\dots Q-1$ (5)	$\tilde{\omega}_r=\dfrac{e^{\beta J}-e^{-\beta J/5}}{e^{\beta J}+5e^{-\beta J/5}}$ $r=1,\dots Q-1$ (5)
Z_6^6	$\omega_r=e^{-\beta J}$ $r=1,2,\dots Q-1$ (5)	$\tilde{\omega}_r=\dfrac{e^{\beta J}-1}{e^{\beta J}+5}$ $r=1,2\dots 5$

Tab.1 - Dualita Z_6^P modelu

III. 1. MC simulace průběhu E(T) a C(T) .

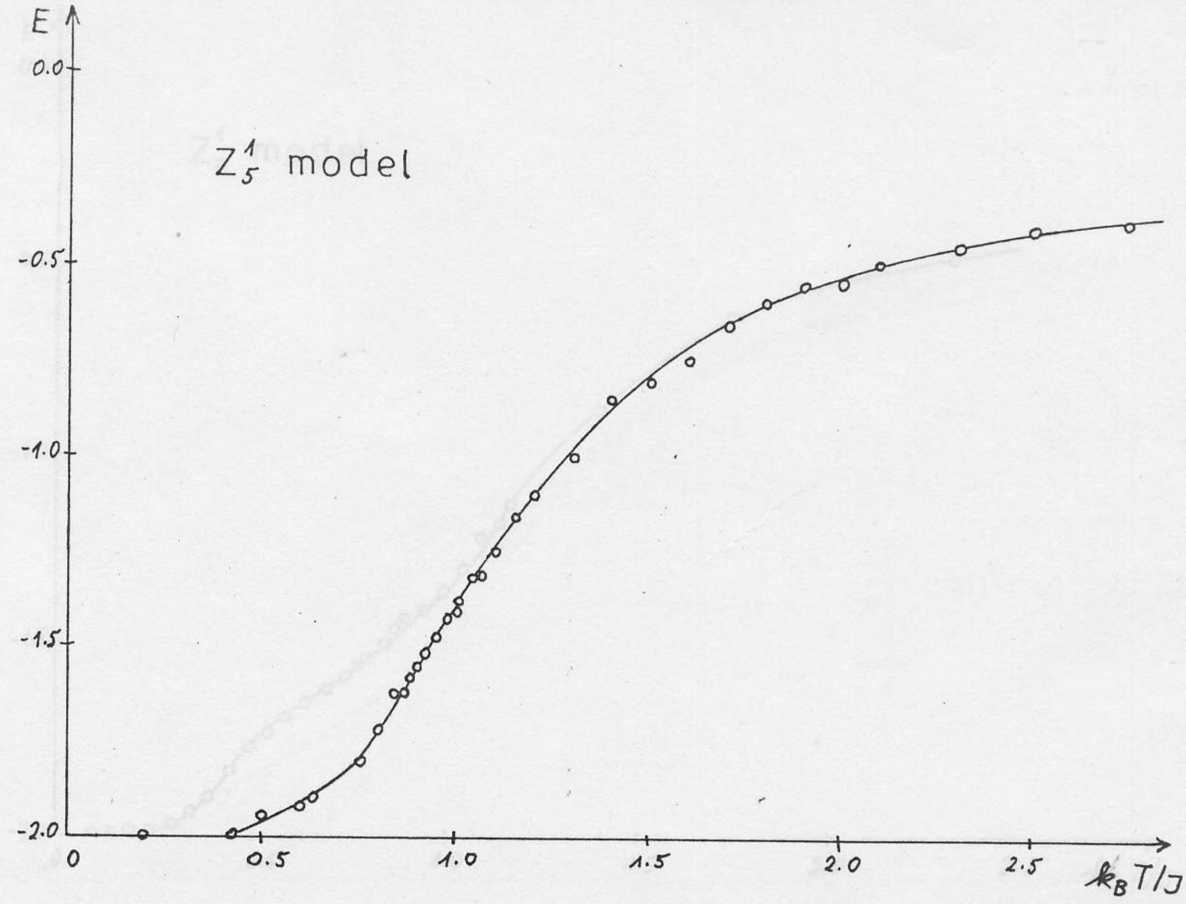
MC simulace byla prováděna výše popsaným programem / metodou teplotní lázně / na počítači EC 1040 ve VC UK . Za počáteční konfiguraci byla volena konfigurace s $q_a = 1$ ve všech vrcholech a mříže. Energie i měrné teplo byly počítány ze vztahů uvedených v II.2 pro malé mříže s rozměry 10x10 až 20x20 . Na všech grafech je ve vzájemném souladu poloha maxima měrného tepla / počítaného z korelací / s velikostí směrnice křivky energie.

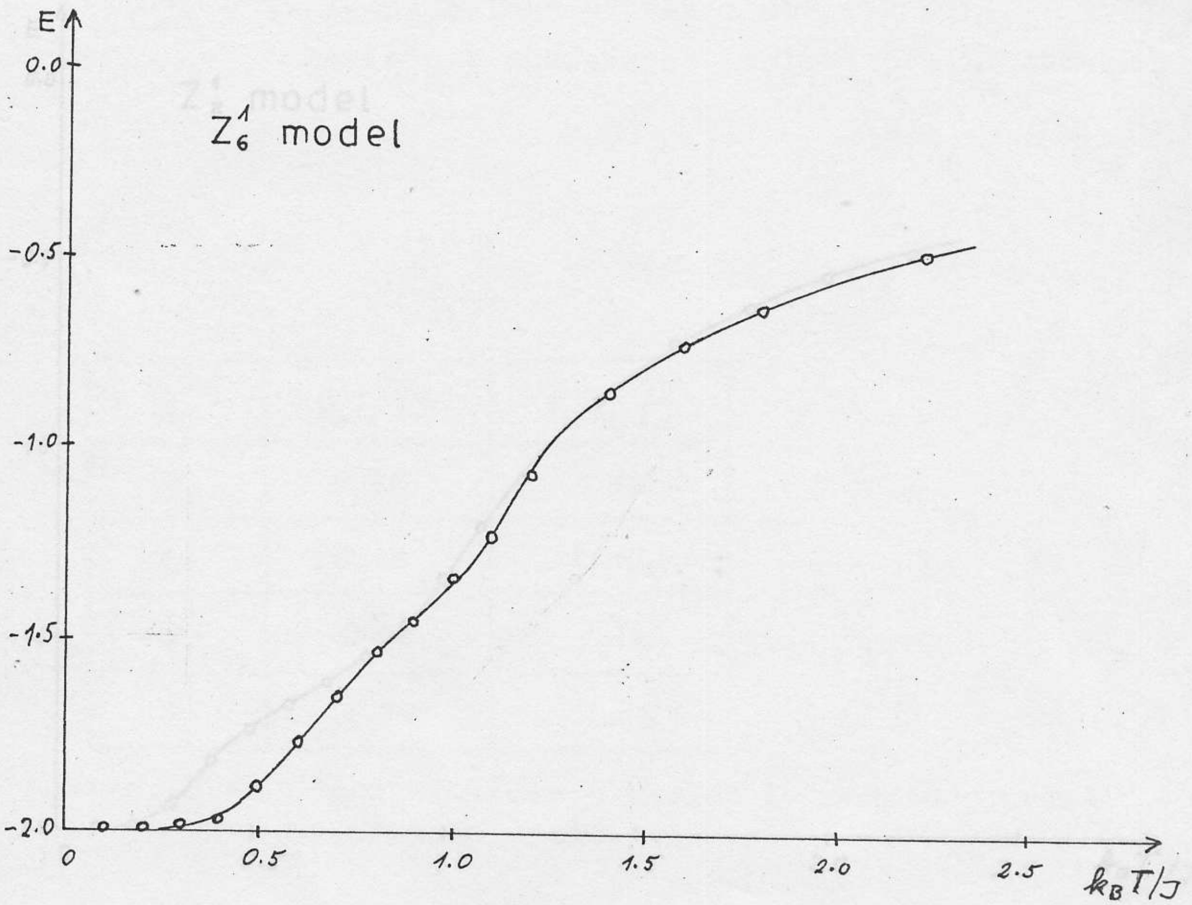
Výsledné křivky závislosti energie a měrného tepla na teplotě pro Pottsův model jsou na obr. 6. Kritická teplota odhadnutá z polohy maxima měrného tepla dobře souhlasí s teoreticky spočtenou hodnotou :

Q	kT_c/J	$kT_{c\,teor}/J$
3	1.01	0.99
5	0.88	0.85
6	0.83	0.81

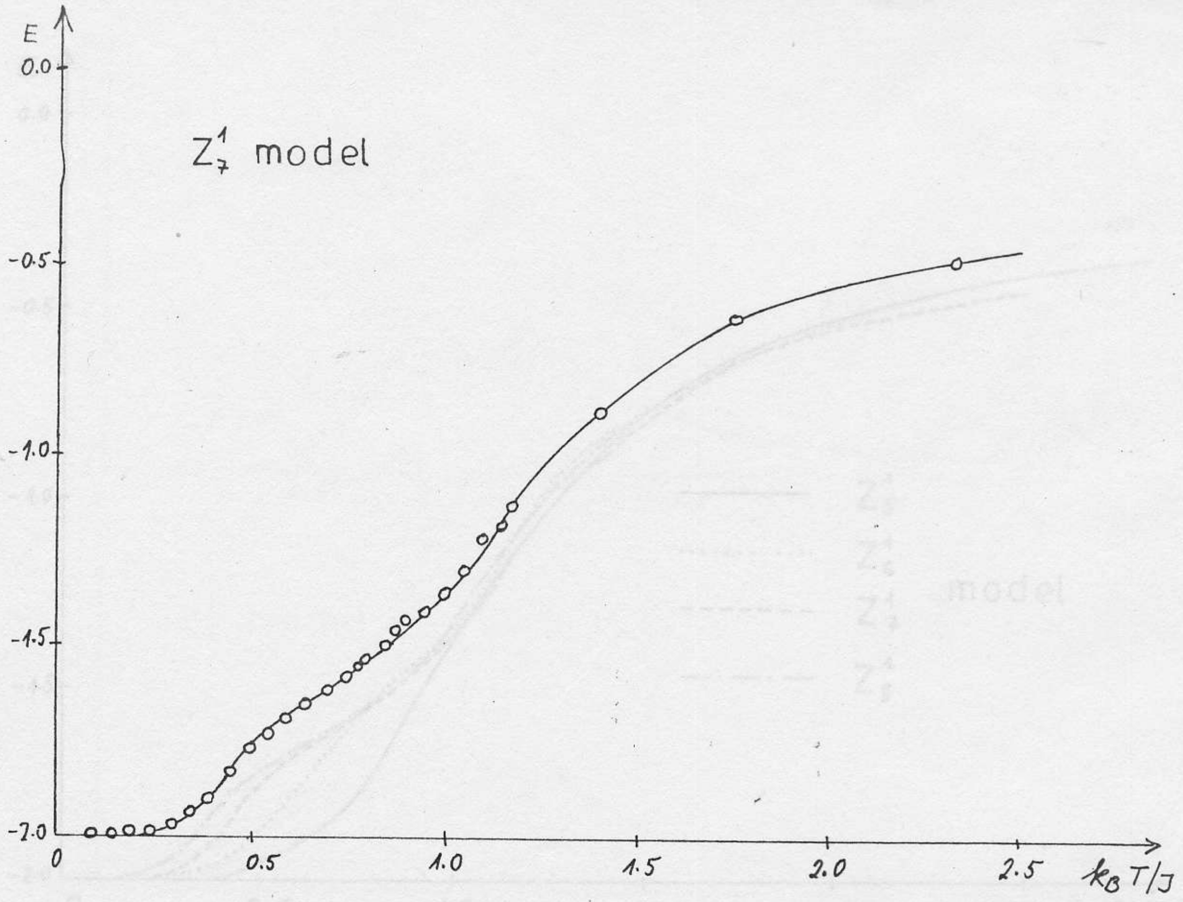
Tab. 2. - Odhad kritické teploty Pottsova modelu z křivky C(T) v porovnání s teor. hodnotami.

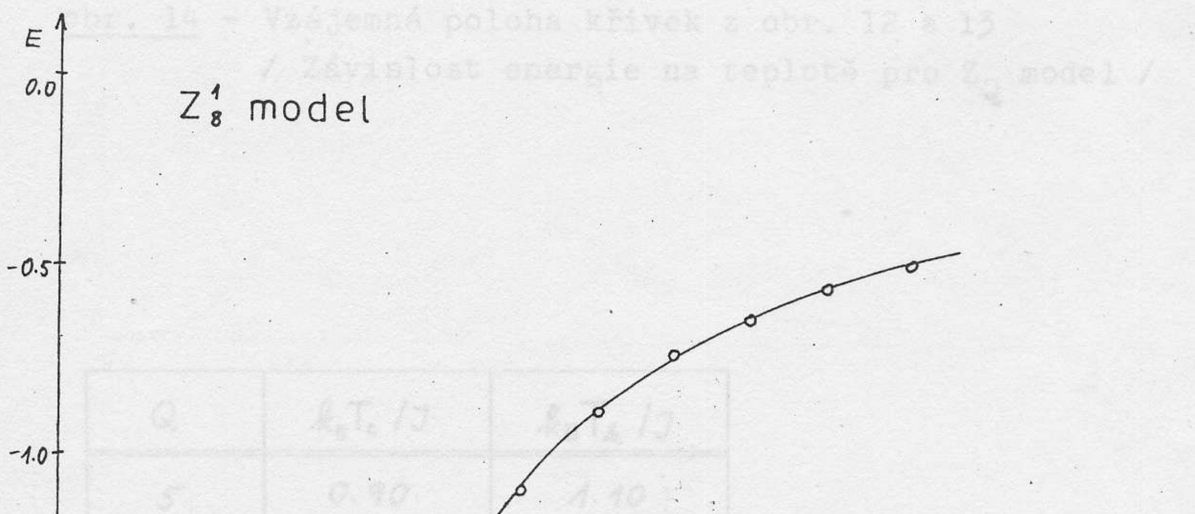
Pro Z_Q model jsou výsledné křivky závislosti energie na teplotě na obr. 12 až 14 a závislosti měrného tepla na teplotě na obr. 15 a 16. Skutečně jsou detekovány dva fázové přechody v T_c a T_k / $T_c < T_k$ /. Hodnota T_k se s změnou Q mění nepatrně, hodnota T_c se snižuje v souladu s teoretickou předpovědí $\lim_{Q \to \infty} T_c = 0$ / viz tab 3 /.



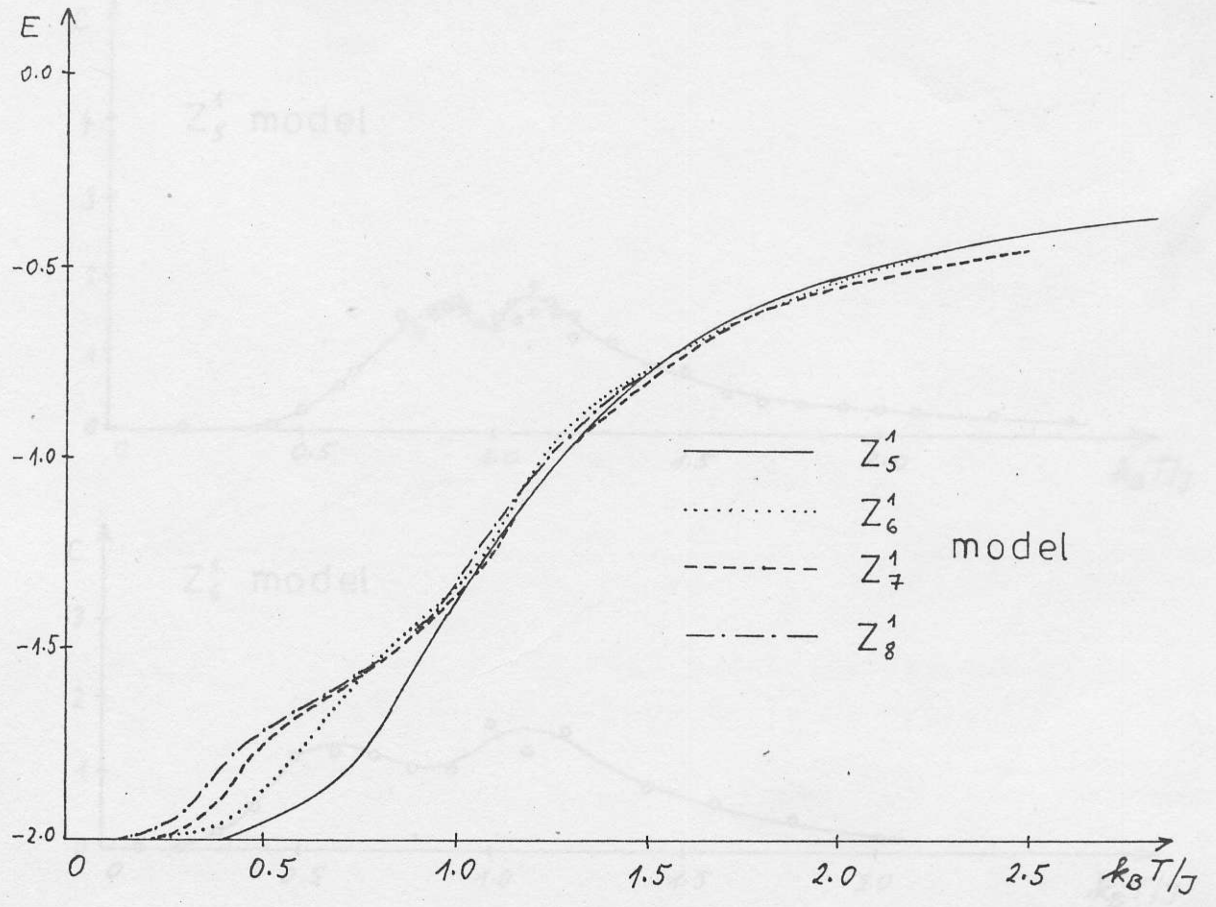


obr. 12 - Závislost energie na teplotě / Z_Q model /





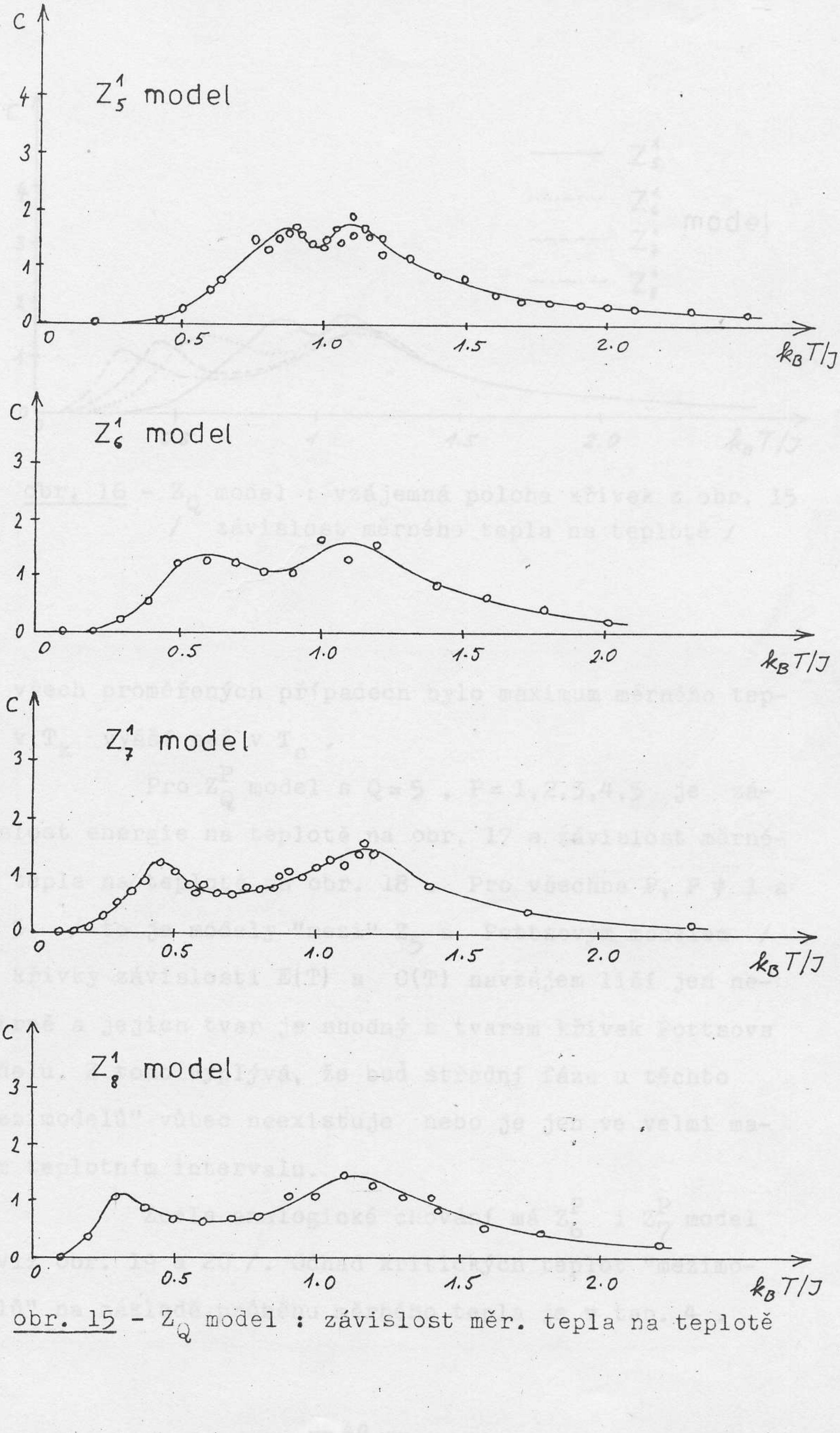
obr. 13 - Závislost energie na teplotě / Z_Q model /



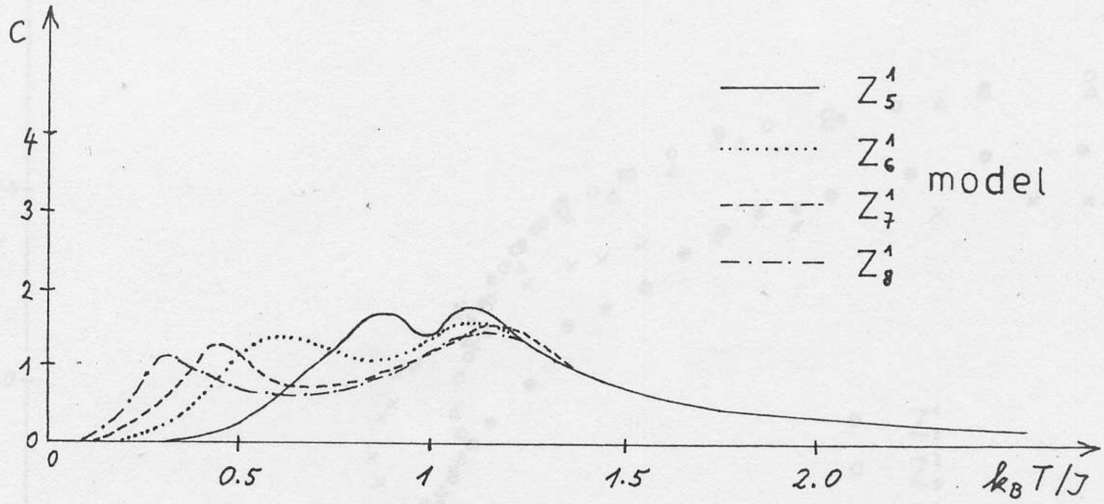
obr. 14 - Vzájemná poloha křivek z obr. 12 a 13
/ Závislost energie na teplotě pro Z_Q model /

Q	$k_B T_c/J$	$k_B T_\ell/J$
5	0.90	1.10
6	0.60	1.10
7	0.45	1.16
8	0.29	1.12

tab. 3 -- Odhad kritických teplot Z_Q modelu z průběhu měrného tepla.



<u>obr. 15</u> - Z_Q model : závislost měr. tepla na teplotě

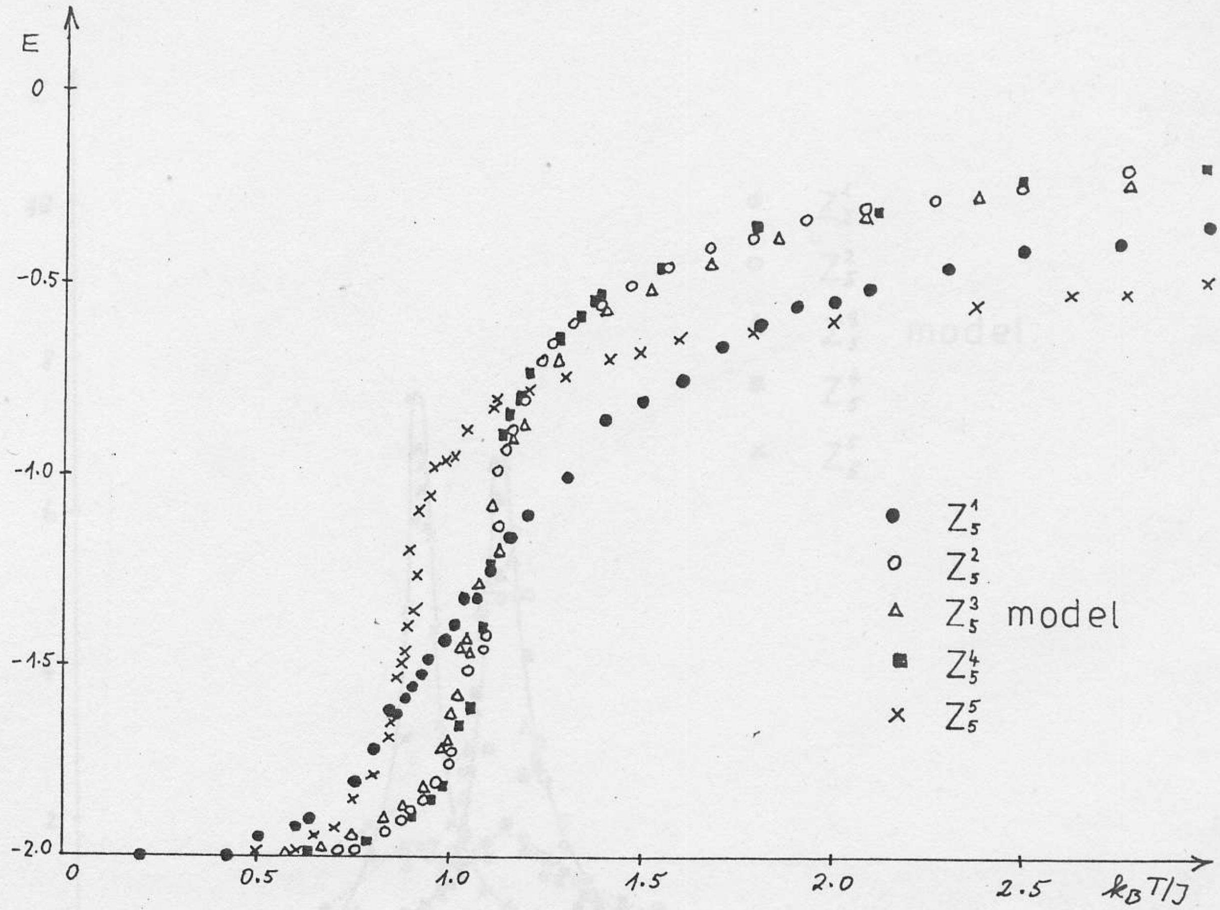


obr. 16 - Z_Q model : vzájemná poloha křivek z obr. 15 / závislost měrného tepla na teplotě /

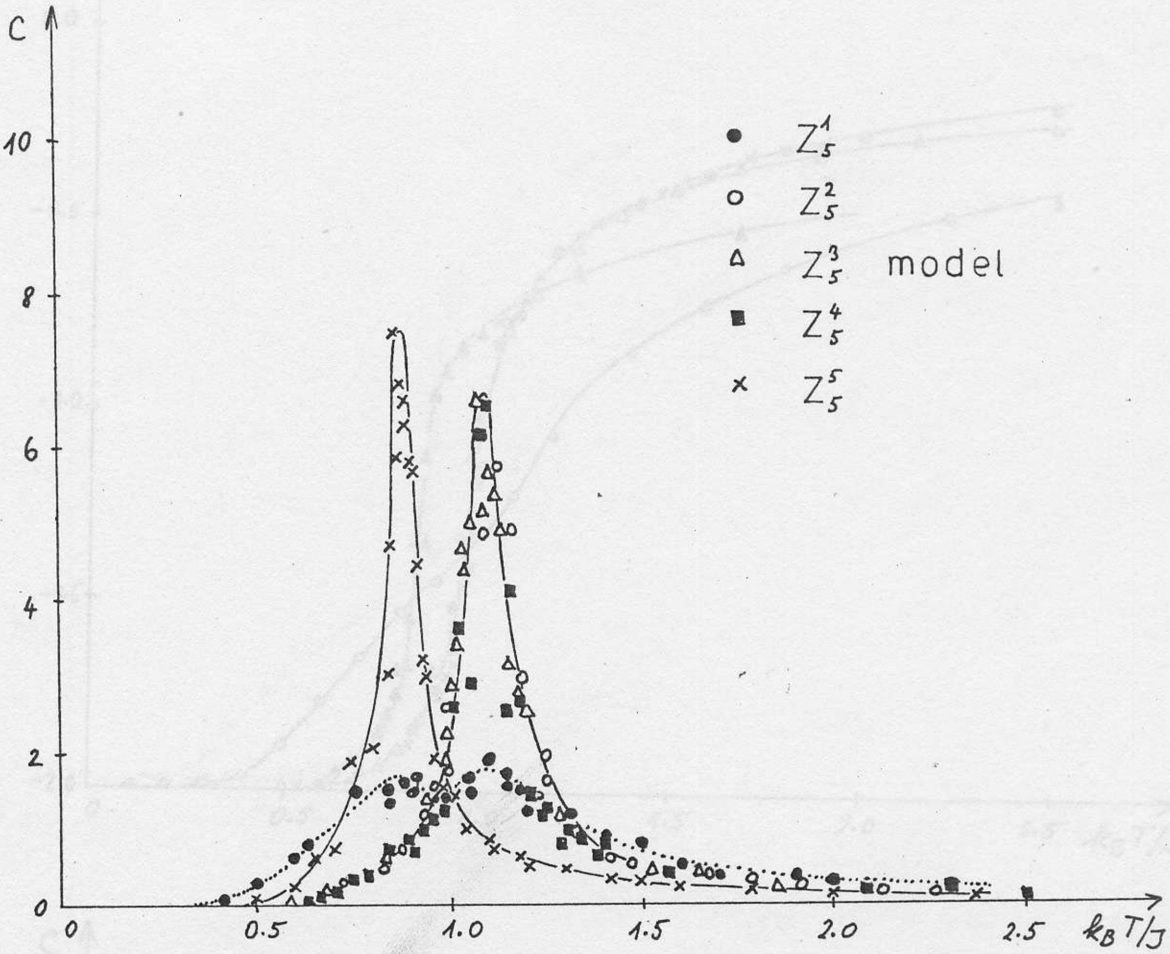
Ve všech proměřených případech bylo maximum měrného tepla v T_k vyšší než v T_c .

Pro Z_Q^P model s $Q=5$, $P=1,2,3,4,5$ je závislost energie na teplotě na obr. 17 a závislost měrného tepla na teplotě na obr. 18 . Pro všechna P, $P \neq 1$ a $P \neq 5$ / to je modely "mezi" Z_5 a Pottsovým modelem / se křivky závislosti E(T) a C(T) navzájem liší jen nepatrně a jejich tvar je shodný s tvarem křivek Pottsova modelu. Z toho vyplývá, že buď střední fáze u těchto "mezimodelů" vůbec neexistuje nebo je jen ve velmi malém teplotním intervalu.

Zcela analogické chování má Z_6^P i Z_7^P model / viz obr. 19 a 20 /. Odhad kritických teplot "mezimodelů" na základě průběhu měrného tepla je v tab. 4 .



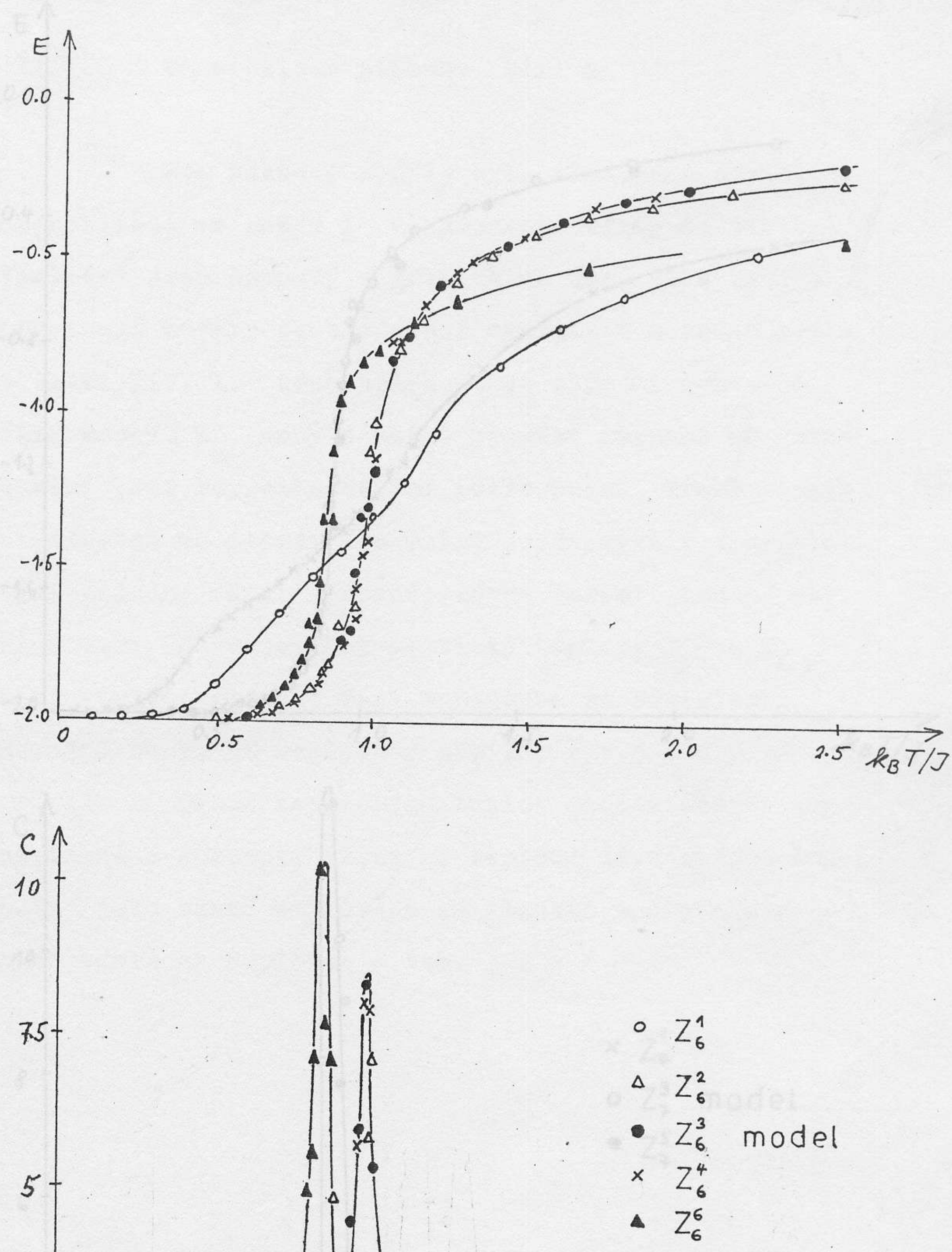
obr. 17 - Z_5^P model : závislost energie na teplotě; nahoře-hodnoty z MC , dole-proložené křivky



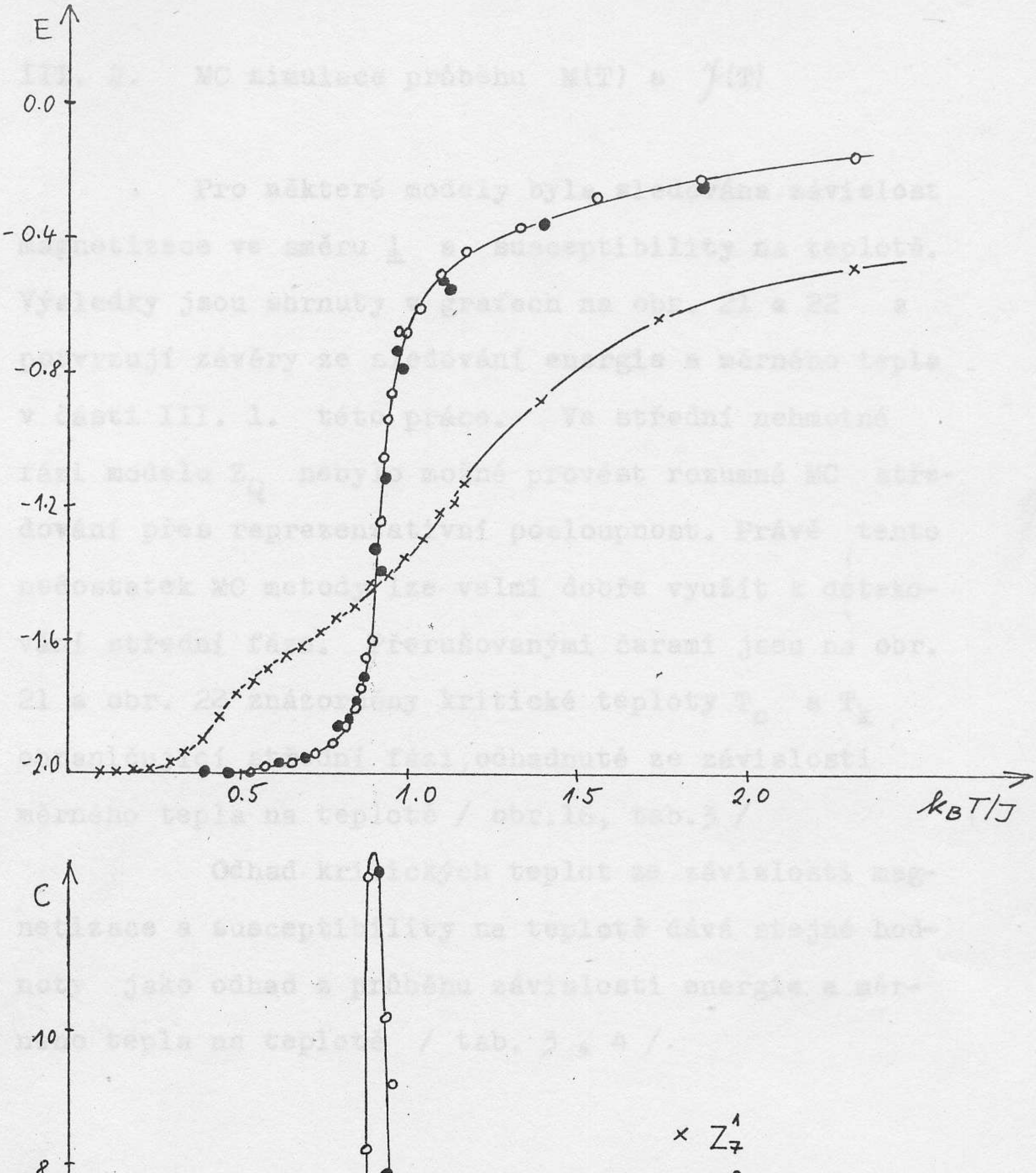
obr. 18 - Z_5^P model : závislost měr. tepla na teplotě

Q	$k_B T_c / J$
5	1.08
6	0.98
7	0.91

tab. 4 - Odhad kritických teplot "mezimodelů " / $P \neq 1$, $P \neq Q$ / z průběhu měrného tepla.



<u>obr. 19</u> - Z_6^P model: záv. energie a měr. tepla na teplotě

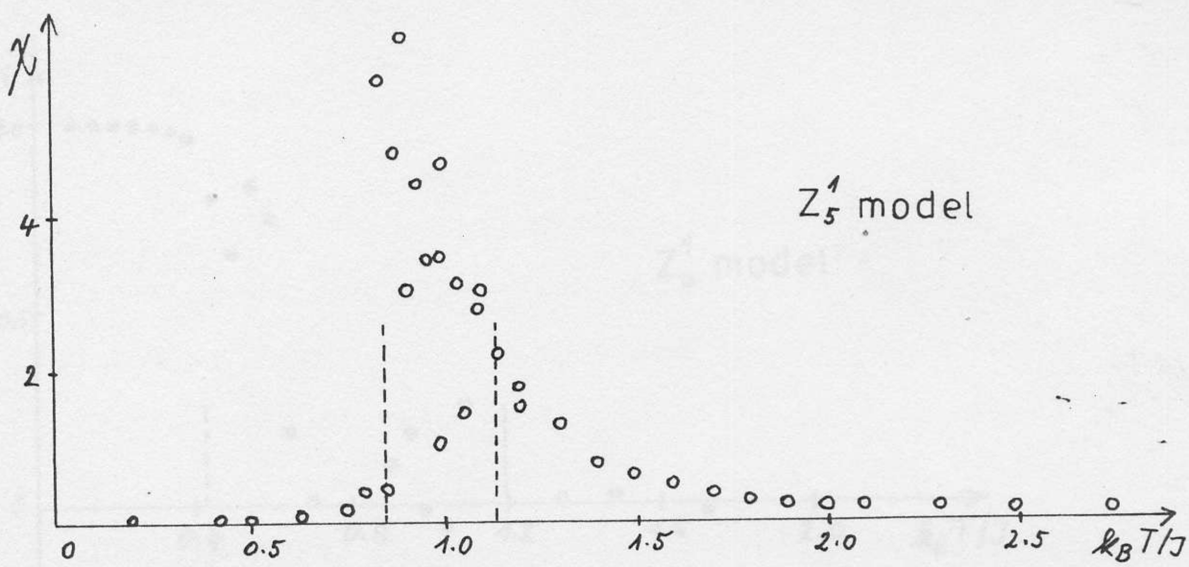


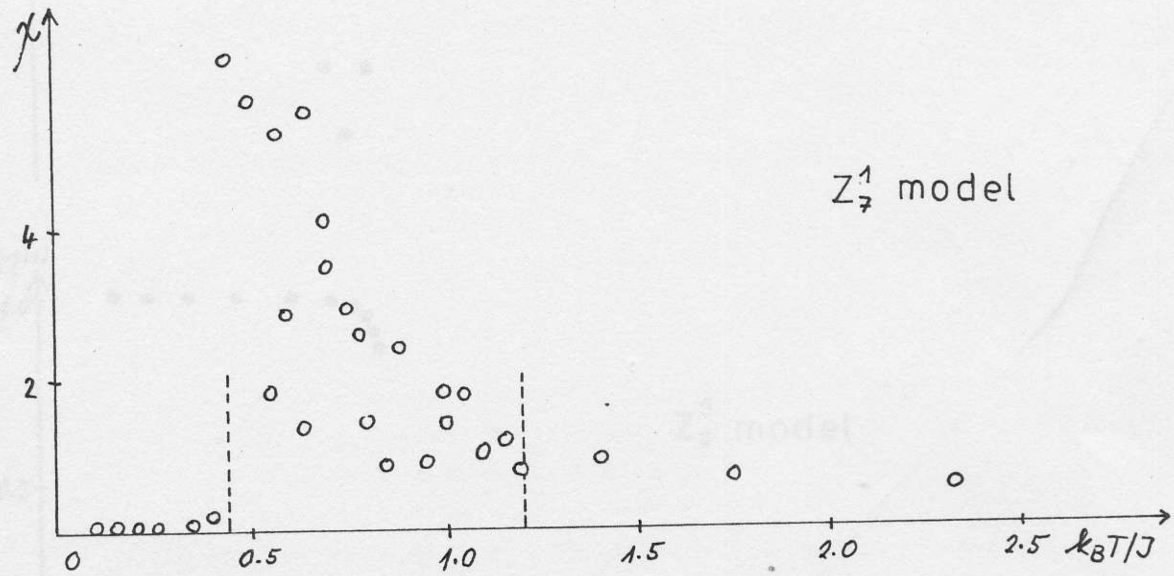
obr.20 Závislost energie a měrného tepla na teplotě / Z_7^P /

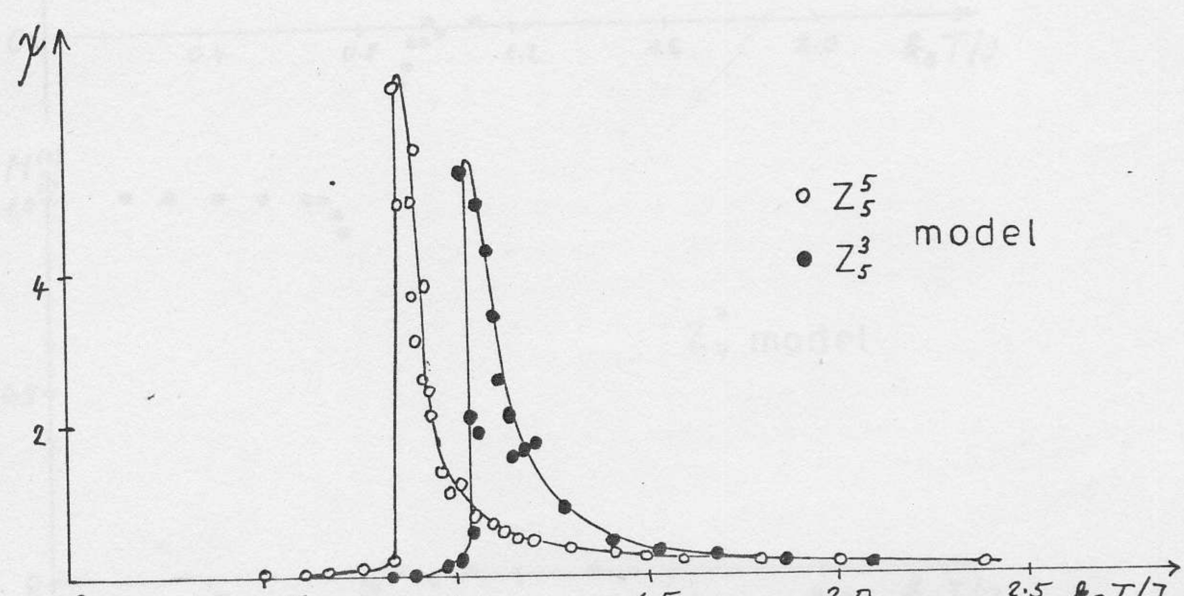
III. 2. MC simulace průběhu M(T) a χ(T)

Pro některé modely byla sledována závislost magnetizace ve směru 1 a susceptibility na teplotě. Výsledky jsou shrnuty v grafech na obr. 21 a 22 a potvrzují závěry ze sledování energie a měrného tepla v části III. 1. této práce. Ve střední nehmotné fázi modelu Z_Q nebylo možné provést rozumné MC středování přes reprezentativní posloupnost. Právě tento nedostatek MC metody lze velmi dobře využít k detekování střední fáze. Přerušovanými čarami jsou na obr. 21 a obr. 22 znázorněny kritické teploty T_c a T_k ohraničující střední fázi, odhadnuté ze závislosti měrného tepla na teplotě / obr.16, tab.3 /

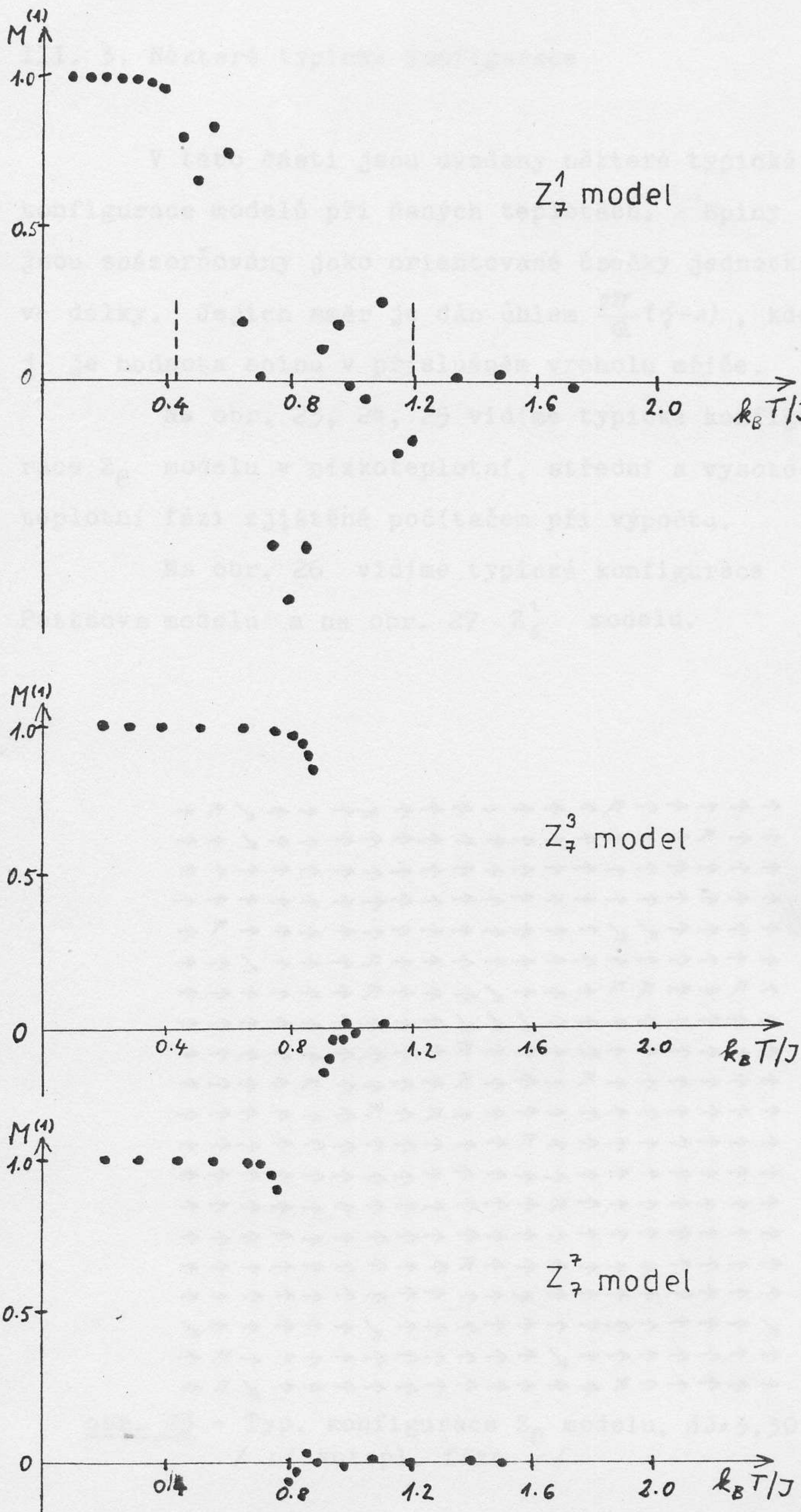
Odhad kritických teplot ze závislosti magnetizace a susceptibility na teplotě dává stejné hodnoty jako odhad z průběhu závislosti energie a měrného tepla na teplotě / tab. 3 , 4 /.







obr. 21 Závislost susceptibility na teplotě



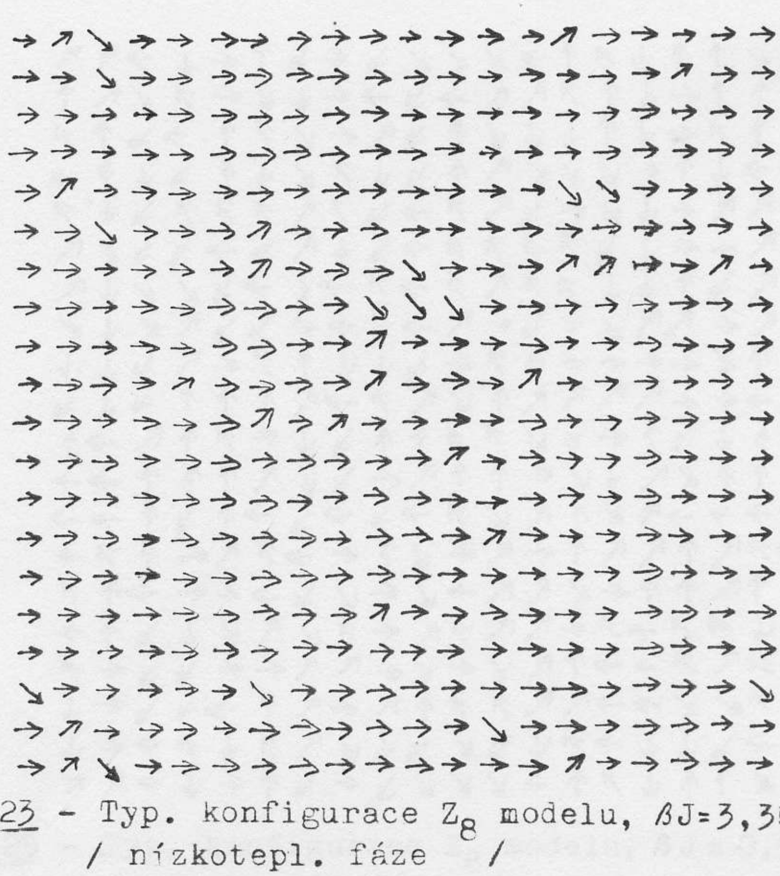
obr. 22 Závislost magnetizace na teplotě

III. 3. Některé typické konfigurace

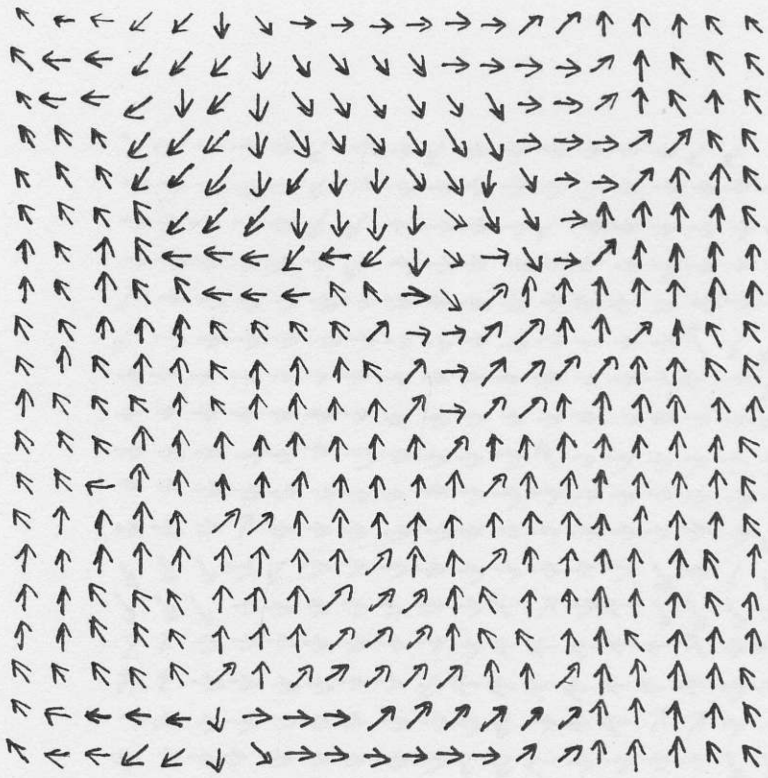
V této části jsou uvedeny některé typické konfigurace modelů při daných teplotách. Spiny jsou znázorňovány jako orientované úsečky jednotkové délky. Jejich směr je dán úhlem $\frac{2\pi}{Q}(j-1)$, kde j je hodnota spinu v příslušném vrcholu mříže.

Na obr. 23, 24, 25 vidíme typické konfigurace Z_8 modelu v nízkoteplotní, střední a vysokoteplotní fázi zjištěné počítačem při výpočtu.

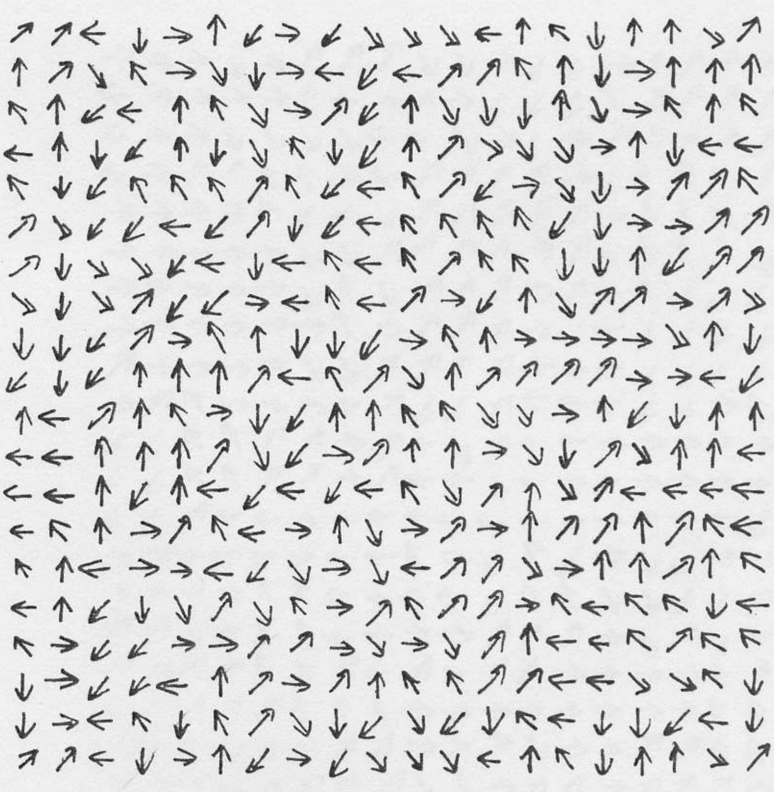
Na obr. 26 vidíme typické konfigurace Pottsova modelu a na obr. 27 Z_6^2 modelu.



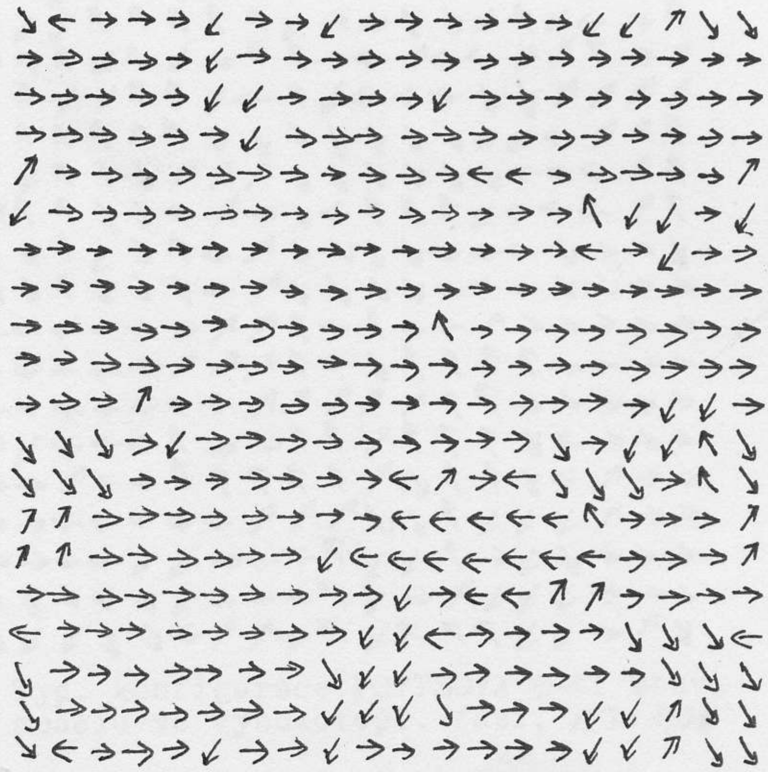
obr. 23 - Typ. konfigurace Z_8 modelu, $\beta J=3,30$ / nízkotepl. fáze /



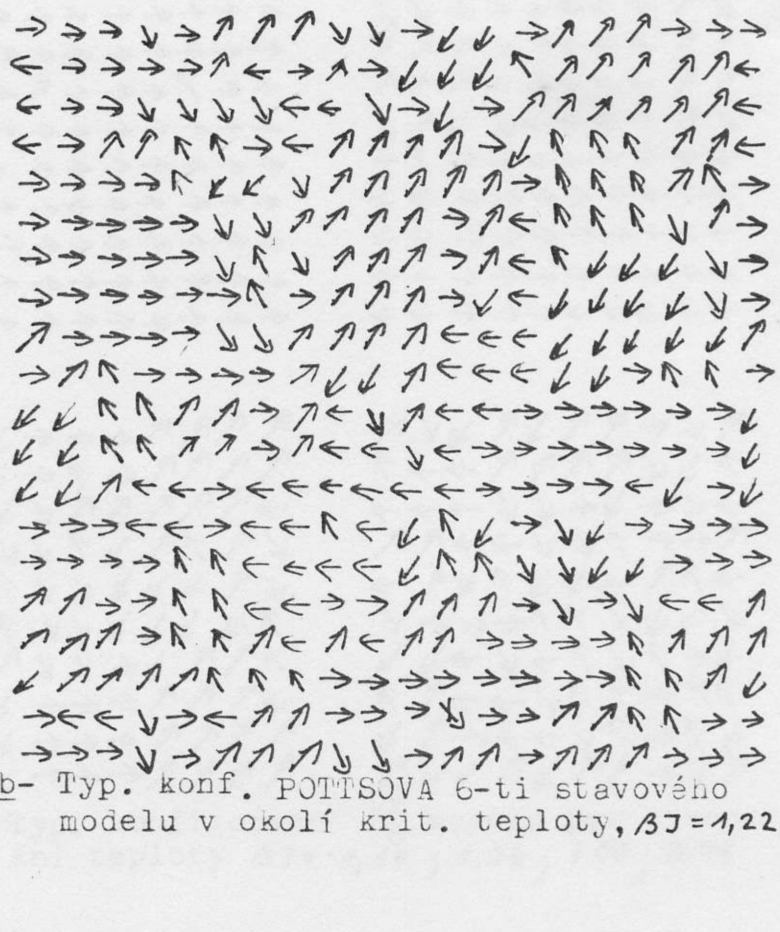
obr. 24 - Typ. konfigurace Z_8 modelu, $\beta J=2{,}50$
/ střední fáze /



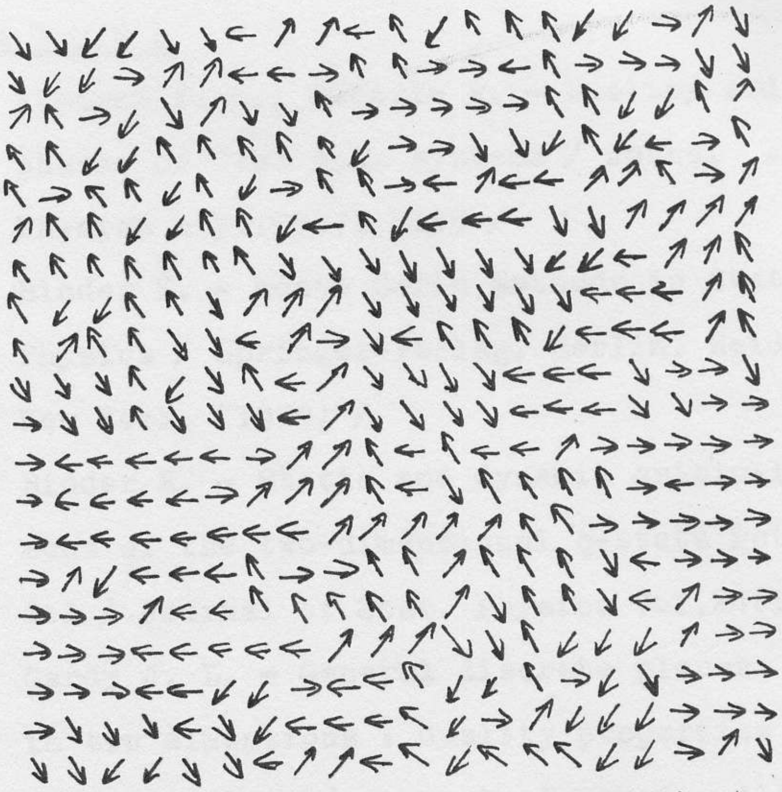
obr. 25 - Typ. konfigurace Z_8 modelu, $\beta J = 0{,}50$
/vysokotepl. fáze /



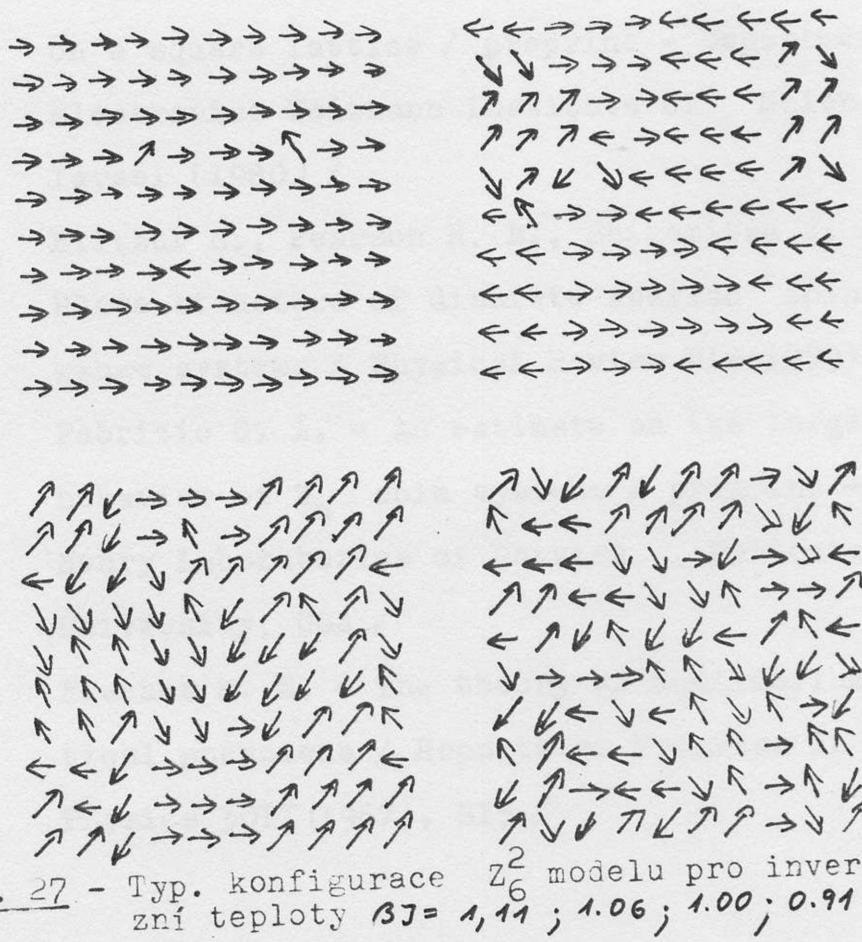
obr. 26a - Typ. konfigurace POTTSOVA 6-ti stavového modelu v nízkotepl. f., $\beta J = 1{,}24$



obr. 26b- Typ. konf. POTTSOVA 6-ti stavového modelu v okolí krit. teploty, $\beta J = 1{,}22$



obr. 26c - Typ. konfigurace POTTSOVA 6-ti stav. modelu ve vysokotepl. fázi, $\beta J = 1{,}08$



obr. 27 - Typ. konfigurace Z_6^2 modelu pro inverzní teploty $\beta J = 1{,}11\ ;\ 1.06\ ;\ 1.00\ ;\ 0.91$

L I T E R A T U R A

[1] Alcaraz F. C., Köberle R. - Duality and the phases of Z(N) spin systems / Jounal of Physics A13(1980), L153 /

[2a] Binder K. - Monte Carlo Methods in Statistical Physics / Springer-Verlag. Berlin. Heidelberg. New York. (1979) /

[2b] Binder K. - Static and dynamic critical phenomena of the two-dimensional q-state Potts model / Journal of Stat. Physics Vol.24(1982),69/

[3] Cardy J. L. - General discrete planar models in two dimensions : duality properties and phase diagrams / Journal of Physics A13(1980), 1507 /

[4] Domany E. - Phase diagram of the Z(5) model on a square lattice / preprint - Department of Electronics Weizmann Institute of Science , Israel (1980) /

[5] Elitzur S., Pearson R. B., Shigemitsu J. - Phase structure of discrete Abelian spin and gauge systems / Physical Review D19(1979),3698/

[6] Fabrizio G. A. - An estimate on the large N behavior of Z_n spin systems / preprint -Joseph Henry Laboratories of Physics , Princeton University, USA /

[7] Fischer M. E. - The theory of equilibrium critical phenomena / Reports on Progress in Physics 30II(1967), 615 /

[8] Grest G. S. - Monte Carlo study of the antiferromagnetic Potts model in two dimensions / Physical Review Letters 46(1981)/

[9] Griffiths R. B. - Regorous results and theorems / Phase Transitions and Critical Phenomena Vo.1 - Academic Press London(1972)/

[10] Hamersley J. M., Handscomb D. C. - Monte Carlo Methods / Methuen and Co., London(1964)/

[11] Kolafa J. - Diplomová práce / MFF UK(1982)/

[12] Kosterlitz J. M., Thouless D. J. - XY model in two dimensions / Journal of Physics C6(1973),1181/

[13] Kosterlitz J. M. /Journal of Physics C7(74),1046/

[14] Marshall W., Lowde R. D. /Reports on Progress in Physics 31(1968),705 /

[15] Olehla M., Věchet V., Olehla J. - Řešení úloh matematické statistiky ve FORTRANU /NADAS 1983/

[16] Sadowski W. - Matematická štatistika / ALFA 1975 /

[17] Temperley H. N. V. - Two-dimensional Ising models /Phase Transitions and Critical Phenomena Vo.1, Academic Press London(1972)/

[18] Thompson C.J. - Mathematical Statistical Mechanics / New York(1971)/

[19] Yoneya T. - Z(N) topological excitations in Yang - Mills theories : duality and confinement / Nuclear Physics B144(1978), 195 /