

Gradu Amaierako Lana
Fisikako Gradua

LANDAUREN TEORIAREN BERRIKUSKETA

ϕ^4 hamiltondarrak erduztatutako sistemaren
fase-trantsizioen azterketa konputazionala

Egilea:
Malen Etxebarria Etxaniz
Zuzendaria:
Iñigo Etxebarria Alzaga
Zuzendarikidea:
Hegoi Manzano Moro



Aurkibidea

1	Sarrera eta helburuak	1
2	Oinarrizko hainbat kontzeptu	3
2.1	Fase-trantsizioetarako sarrera	3
2.2	Landauren teoria	5
2.3	ϕ^4 hamiltondarra	7
2.4	Bigarren mailako ordena parametroak	8
2.4.1	Landauren teoria	8
2.4.2	ϕ^4 hamiltondarra	10
3	Oinarri konputazionala	11
3.1	Monte Carlo metodoen funtsa	11
3.2	Metropolisen algoritmoa	12
3.2.1	Algoritmoaren funtsa	12
3.2.2	Algoritmoaren inplementazioa	13
4	Fase-trantsizioen simulazioak	17
4.1	Ordena parametro bakarreko kasua	17
4.1.1	Neurketa-metodoa	17
4.1.2	Emaitzak eta eztabaida	18
4.2	Bi ordena parametroko kasua	22
4.2.1	Neurketa-metodoa	22
4.2.2	Emaitzak eta eztabaida	23
4.3	Emaitzen inguruko zenbait ohar	27
5	Ondorioak	29

1. Kapituluia

Sarrera eta helburuak

Landau-ren teoriak [1] fase-trantsizio jarraituen azterketarako tresna indartsua dela erakutsi du 1937an proposatua izan zenetik egunotara arte. Teoria fenomenologiko horrek eskaintzen duen abantailetakoa bat potentzial termodinamikoen singularitateak era analitikoan deskribatzeko aukera da. Halaber, aztergai dituen sistemen simetria eta propietate makroskopikoen arteko erlazioa ezartzen du, fase-trantsizioan ematen den simetria-apurketan arreta berezia jarritz.

Landauren lehenengo proposamenaz geroztik, teoriak garapen handia izan du eta bere aplikazio-esparrua nabarmen zabaldu da. Horrela, azken urteotan Landauren teoria material ferromagnetiko, ferroelastiko eta ferroelektrikoen propietate eta berezitasunen inguruko ikerketetan erabilia izan da [2, 3, 4], baita material multiferroikoen azterketetan ere [5]. Horrez gain, Ginzburg-Landau teoria fenomenologikoaren aitzindaria da, zeinak supereroankortasun-trantsizioa duen aztergaitzat [6]. Hortaz, Landauren teoriaren bitartez azter daitezkeen kasuak eta ireki daitezkeen ikerketa-bideak anitzak dira.

Lan honetan ϕ^4 hamiltondarraren bidez erduztatutako sistema baten fase-trantsizioa aztertuko da Landauren teoriaren bitartez. Bi dira bere helburu nagusiak. Landauren teoria aztertzea da lehenengoa, bere irismena, izan ditzakeen mugak edo aplikatzerako orduan suerta daitezkeen arazoak zehaztuz. Horretarako, sistema fisiko bat konputazionalki erduztatu eta haren fase-trantsizioak simulatuko dira, lortutako emaitzen bidez teoriaren inguruko ondorioak atera ahal izateko. Sistema fisikoa erduztatzeko ϕ^4 hamiltondarra erabiliko da, fase-trantsizio estrukturalen oinarritzko fisika aintzat hartzen duen eredu mikroskopikoa [7], eta fase-trantsizioak Monte Carlo metodoen bidez simulatuko dira, zehazki, Metropolis-en algoritmoa erabiliz.

Bi kasu analogo aztertuko dira: ordena parametro bakarreko sistemari dagokiona, batetik, eta bi ordena parametroko sistemari dagokiona, bestetik. Azterketaren abiapuntua Landauren energia askea izango da, eta hori lortu ahal izateko energia aske horren definizio estatistikoa oinarritutako metodo bat jarraituko da [7]. Hori ordena parametro bakarreko kasura aplikatua izan da literaturan, baina ez bi ordena parametrokora eta, horrenbestez, lanaren bigarren helburua aipatutako metodoaren hedapen bat proposatu eta inplementatzea da, bi ordena parametroko kasuan ere Landauren teoriaren azterketa egin ahal izateko.

Atal hau amaitutzat jo aurretik, lanaren egitura azalduko da. Lehenik eta behin, lanaren oinarri teorikoa ezarriko da 2. kapituluan, hurrengo kapituluetan sarritan errepikatuko diren kontzeptuak azalduko dira bertan, besteak beste, Landauren teoria edo ϕ^4 hamiltondarraren inguruko zenbait orokortasun. Lan honekin zuzenean lotuta ez dauden zenbait gai ere aipatuko dira fase-trantsizioen inguruko ikuspegi orokorrago bat ematearren, hala nola berretzaile kritikoa edo unibertsaltasunarena. Ondoren, 3. kapituluan Monte Carlo metodoen eta Metropolisen algoritmoaren funtsezko teoria aurkeztuko da, baita azken horren bidez ϕ^4 eredua inplementatzeko jarraitu beharreko urratsak azaldu ere. Aipatutako bi kapituluek lanaren zati teorikoa osatzen dute.

Beharrezko kontzeptu guztiak azalduta, lanaren zati praktikoari ekingo zaio 4. kapituluan. Erabilitako neurketa-metodoa eta jarraitutako prozedurak azalduko dira lehenik, eta horren bidez lortutako emaitzak aurkeztuko dira ondoren. Landauren teoria aplikatuko da simulatutako fase-trantsizioen tenperatura kritikoa kalkulatzeko, eta horrela teoriaren inguruko ondorioak atera ahal izango dira. Kapitulu honetako simulazio eta neurketak egiteko sortu diren programen kodeak ez dira memoria honetan gehitu, baina GitHub plataformako `malenetxeberrria/GrALa-Fis` errepositorioan daude eskuragarri.

2. Kapitulu

Oinarrizko hainbat kontzeptu

Kapitulu honetan lan osoan zehar jorratuko diren gaiak aurkeztu eta laburki azalduko dira. Gehienbat era kualitatibo edo teorikoan hitz egingo da eta beharrezkoa den kasuetan bakarrik emango da azalpen matematikoa. Horrela, lehenik eta behin, fase-trantsizioetarako sarrera bat egingo da, jarraian horien azterketarako erabiliko den Landaren teoria aurkeztuko da eta, azkenik, konputazionalki inplementatuko den ϕ^4 eredua azalduko da, aurkeztutako kontzeptuak simulazioen bidez aztertzea ahalbidetuko duena.

2.1 Fase-trantsizioetarako sarrera

Sistema batek fase-trantsizio bat jasaten du bere energia askean edo haren deribatueta-ko batean singularitate bat agertzen denean. Horrelakoetan sistemaren propietateetan aldaketa zorrotz bat ikusi ohi da, hala nola egoera likidotik gaseosorako edo fase paramagnetikotik ferromagnetikorako trantsizioetan gertatzen den moduan [8].

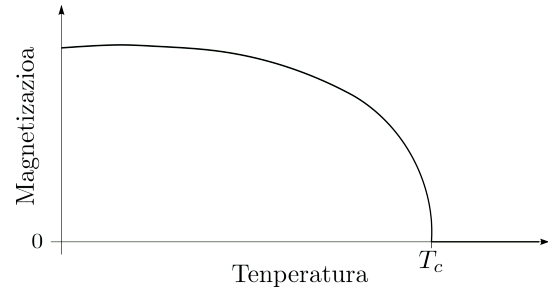
Fase-trantsizioen lehenengo sailkapena Ehrenfest-ek proposatu zuen 1933an, Keesom eta kideek helio likidoaren λ -trantsizioa aurkitu ostean [9]. Fase-trantsizioak ordena desberdinetan banatzen dira bertan, ordena hori singularitateren bat duen energia askearen deribatu txikiena izanik. Horrela, lehenengo ordenako fase-trantsizioek ez-jarraitasun bat dute energia askearen lehenengo deribatuan; era berean, bigarren ordenako fase-trantsizioen lehenengo deribatua jarraitua da, baina bigarrena ez. Esaterako, fase likidotik solidorako trantsizioa lehenengo ordenakoa da, eta fase-trantsizio ferromagnetikoa bigarren ordenakoa [10]. Sailkapen eskema horrek ordena altuagoak onartzen baditu ere, Ehrenfestek lehenengo eta bigarren ordenak soilik aztertu zituen.

Sailkapen horrek jauzi finituak baino ez zituen kontuan hartzen, eta laster ondorioztatu zen jauzi infinituak aintzat hartzea beharrezkoa zela [8, 9]. Hortaz, egun bi fase-trantsizio mota besterik ez da kontsideratzen: lehenengo ordenakoak —funtsean, bero sorra dakartenenak, sistemaren entropia ez-jarraitua delako— eta jarraituak, Ehrenfest-en sailkapenean bigarren, hirugarren eta ordena altuagoko fase-trantsizioak biltzen direlarik [10].

Simetriaren ikuspuntutik ere egin ohi da azterketa, fase-trantsizioek sistemaren simetria-apurketa dakartelako —sarritan, baina ez beti [10]—. Ohiko adibidea likidotik solidorako fase-trantsizioa da. Simetria-apurketa dago likidoan puntu guztiak baliokideak direlako, ez dago ez norabide ez ardatz berezirik, eta sistemak translazio eta errotazio simetria osoa

du; egoera solidoan, aldiz, simetria-eragiketa kopurua murriztu egiten da, eta ardatz eta norabide bereziak agertu [10]. Fase-trantsizio ferromagnetikoan berdin, 2.1. irudian ikus daitekeen moduan: temperatura kritikotik behera¹ materialak berehalako magnetizazioa agertzen du —temperatura kritikotik gora nulua dena—, magnetizazioarekiko perpendikularra den ardatzean errotazio simetria galduz. Sistemak simetria bat edo bestea du, ez dago “tarteko simetriarik”, eta, beraz, ezinezkoa da aldaketak era jarraituan gertatzea [10, 11]. Horren ondorio dira fase-trantsizioetako ez-jarraitasunak, bai energia askearen lehenengo deribatuan, bai ordena altuagokoetan.

Horrekin lotuta, *ordena parametroa* definitzen da, sistemaren ordena eta desordenari buruz berri ematen duena nolabait. Funtsean, fase-trantsizioan nulua izatetik balio ez-nulu bat izatera pasatzen den aldagaia da (ikus 2.1. irudia). Horrenbestez, temperatura kritikotik gora sistemak simetria osoa du eta ordena parametroa nulua da; fase-trantsizioaren ostean, simetria apurtu egiten da eta ordena parametroak balio ez-nulu bat hartzen du. Sistema magnetikoen adibidean, ordena parametroa magnetizazio bektorea da, eta sistemak simetria zein norabidetan apurtu duen adierazten du [12].



2.1. Irudia: Sistema magnetikoaren magnetizazioaren balio absolutua temperaturaren menpe adierazita, kanpoko eremu magnetikoa nulua den kasuan. Magnetizazioaren balio negatiboek dagokien kurba irudikatutakoren horizontalarekiko simetrikoa da, eremua nulua izanik balio positibo eta negatiboak guztiz baliokideak baitira.

Fase-trantsizio jarraituen azterketa honetan garrantzia handia du potentzial termodinamikoetan ematen diren singularitateen forma eta portaera ulertzeak. Horrek *berretzaile kritiko*en definizioa darama: potentzial termodinamikoek puntu kritikoaren inguruan duten forma berretura moduan adieraztea ahalbidetzen duten parametroak [13]. Adibide moduan, izan bedi $F(t)$ funtzio orokor bat,

$$F(t) \sim |t|^\lambda, \quad \text{non } t \equiv \frac{T - T_c}{T_c}, \quad (2.1)$$

ekuazioaren bitartez adieraz daitekeena. Berretzaile kritikoa λ da bertan. Azpimarratu beharra dago (2.1) ekuazioak $F(t)$ -ren portaera asintotikoa adierazten duela soilik eta, horrenbestez, $t \rightarrow 0$ denean baino ez dela izango hurbilketa egokia [8].

Horrela, adibide bezala sistema magnetikoa hartuz, eremu nuluko magnetizazioaren modulua $m \sim (-t)^\beta$ moduan adierazten da, non β teoriko zein esperimenterki kalkula daitekeen. Kalkulu teorikoaren kasuan, sistemaren eredu bat erabili beharko da, eta ondorioztatutako balioa horren menpe egongo da; hiru dimentsioko Ising-en ereduaren esaterako, $\beta = 0.33$ lortzen da [8]. Balio esperimentalak, berriz, 0.30 eta 0.36 artekoa dela behatu da [13]. Bestalde, magnetizazioaz gain, beste hainbat potentzial termodinamikoren berretzaileak ere definitzen dira, hala nola susceptibilitate eta bero espezifikoarenak, γ eta α deituak, hurrenez hurren.

¹ Fase-trantsizioa gertatzen den temperatura *temperatura kritikoa* da, T_c ikurrak adierazi ohi dena. Termodinamikako lege bat ez bada ere, ezagunak diren fase-trantsizio jarraitu gehienetan simetria handiko fasea temperatura altuari dagokio, eta simetria murriztukoa temperatura baxuari [11].

Hona hemen berretzaile horien inguruko kontzepturik interesgarriena: zenbait sistema ezberdinek berretzaile kritiko berdinak dituzte, hau da, sistemarekiko menpekotasun oso txikia dute. *Unibertsaltasuna* deritzo horri eta Guggenheim-ek argi frogatu zuen 1945ean zortzi fluido ezberdinen fase-trantsizioen koexistentzia kurbek bat egiten zutela —eta, hala, denek $\beta = 1/3$ berretzaile² bera zutela— erakustean [14]. Are gehiago, izaera desberdineko sistemen artean ere berretzaile berdinak behatzen dira, hala nola magnetiko eta gas-likido sistemetan; eta, beraz, berretzaile kritikoak unibertsalak direla esan ohi da.

2.2 Landauren teoria

Landauek 1937an proposatua, teoria fenomenologiko honen helburua fase-trantsizio jarraituak deskribatuko dituen adierazpen analitiko bat eskaintzea da. Potentzial termodinamikoak ordena parametroaren berretura-serie moduan adieraztean datza, serie horretan sistemaren simetriak baimendutako gaiak bakarrik hartuz. Esaterako, sistema magnetiko bati dagokion energia askea —kanpoko eremua nulua izanik—

$$\mathcal{F}(T, m) = \mathcal{F}_0(T) + a_2(T) m^2 + a_4(T) m^4 + \dots \quad (2.2)$$

ekuazioaren³ bidez idatz daiteke, non m magnetizazioa den eta \mathcal{F}_0 , a_2 eta a_4 tenperaturaren menpeko koefizienteak. Berretzaile bikoitidun gaiak soilik agertzearen arrazoia sistemaren simetria da: haiek baino ez dute ahalbidetzen \mathcal{F} magnetizazioaren zeinu aldaketaren aurrean aldaezina izatea [8]; hori hala izan behar da magnetizazio balio positibo eta negatiboak baliokideak direlako eremua nulua denean.

Orekako magnetizazioa energia askea minimizatzen⁴ duena da. Hortaz, sistema magnetikoaren adibidean

$$\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial m} = 2 a_2(T) m + 4 a_4(T) m^3 = 0 \quad (2.3)$$

ekuazioaren ebazpenak orekako magnetizazioaren balioak emango ditu, hau da,

$$m_{01} = 0, \quad m_{02} = \pm \sqrt{-\frac{a_2(T)}{2 a_4(T)}}.$$

Bi balio horien artean sistemari dagokiona a_2 koefizienteak zehazten du: a_2 positiboa bada, energia askeak minimo bakarra du m_{01} puntuan (m_{02} irudikaria baita) eta, beraz, hori izango da magnetizazioa; aldiz, a_2 negatiboa denean, bi minimo simetriko daude $\pm m_{02}$ puntuetan eta bi horietako bat da magnetizazioa, 2.2. irudian adierazi den moduan.

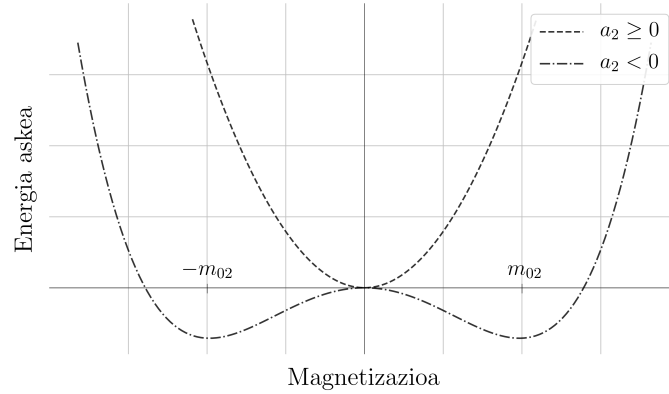
Horrek a_2 koefiziente soil bat baino gehiago dela erakusten du, bere zeinuak sistemaren fasea zehazten baitu. Hala, tenperatura kritikotik gora orekako magnetizazioa nulua da eta $a_2(T > T_c)$ positiboa; tenperatura baxuko fasean, aldiz, magnetizazioak $\pm m_{02}$ balioa

² Gas-likido sistemetan β hurrengo moduan definitzen da: $(\rho_l - \rho_g) \sim (-t)^\beta$, non ρ dentsitatea den.

³ Berretura-seriea ez da halabeharrez laugarren gaien amaitzen, eta orokorrean maila altuagoko gaiak ere ager daitezke energia askean. Hala ere, m txikia bada [11] eta tenperatura T_c ingurukoa [8], hurbilketa egokitzat hartzen da seriea laugarren gaien ebakitzea.

⁴ Ohartu $a_4(T) > 0$ baldintza bete behar dela sistemaren egonkortasun termodinamikoa berma dadin edo, bestela esanda, energia askea minimizatzen duen ordena parametroak balio finituren bat izan dezan, ez infinitua [13].

du eta $a_2(T < T_c)$ negatiboa da; eta, azkenik, temperatura kritikoan $a_2(T_c) = 0$ da. Fase-trantsizioa jarraitua izanik, $a_2(T)$ funtzioa ere hala izan beharko da; gainera, tenperaturarekiko menpekotasun lineala du eta, horrenbestez, $a_2(T) = \tilde{a}_2(T - T_c)$ eran idatz daiteke [8, 11], \tilde{a}_2 konstantea izanik.



2.2. Irudia: Landauren teoriak proposatutako energia askearen kurbak a_2 koefizientearen arabera. a_2 positiboa izatetik negatiboa izatera igarotzean, m_{01} energia askearen minimoa izatetik maximoa izatera pasa eta magnetizazioa $-m_{02}$ edo m_{02} minimoan egonkortzen da. Kanpoko eremurik egon ezean, biak guztiz baliokideak dira energia zein simetriaren ikuspuntutik eta, ondorioz, sistemak probabilitate berdina du magnetizazio bat edo bestea erakusteko.

Singularitateak funtzio analitiko baten bitartez deskribatzea da Landauren teoria abantailarik handiena, eta horren adibide da berretzaile kritikoak —singularitate horien adierazle— kalkulatzeko gaitasuna. Horrela, (2.3) ekuazioa t aldagaiaren menpe idatziz,

$$2\tilde{a}_2 T_c t + 4a_4(T_c) m^2 = 0 \quad (2.4)$$

ekuazioa lor daiteke, non $a_4(T_c)$ erabiltzen den berretzaile kritikoaren azterketa T_c inguruan egiten delako. Magnetizazioa bakanduz, $m \sim (-t)^{1/2}$ formako ekuazioa lortu eta $\beta = 1/2$ berretzaile kritikoaren ondorioztatzen da. Baina hori ez dator bat aurreko atalean aurkeztutako balioekin, ez Isingen ereduak ondorioztatzen duenarekin, ezta esperimentalki kalkulaturakoarekin ere ($\beta = 1/3$ inguruan biak); eta, horrenbestez, teoriak ez ditu berretzaile kritiko zuzenak aurreratzen.

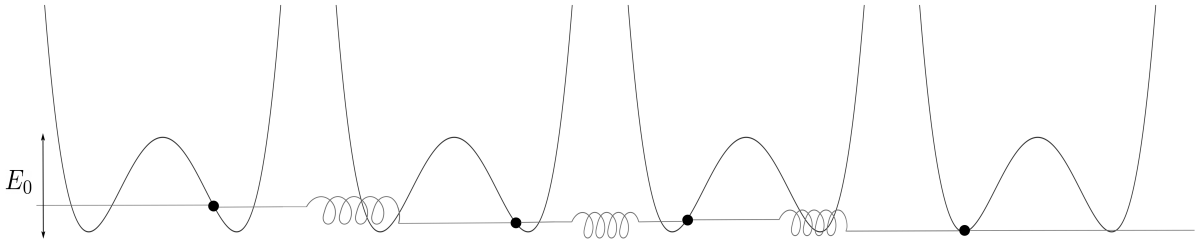
Landauren teoria *batezbesteko eremuen teorian* oinarritzen da, eta horren ondorioa da berretzaile kritiko okerrak aurrerata. Partikula eta elkarrekintza ugariko sistematan erabilia, batezbesteko eremuen teoriak honako hau suposatzen du: partikula batek beste guztiekin indibidualki elkarreragin beharrean, sistema osoaren batezbesteko egoerarekin elkarreragiten duela, batezbesteko hori eremu efektibo⁵ bat bailitzan [15]. Hurbilketa horrek problemaren tratamendu matematikoa nabarmen errazten du, elkarrekintzarekin lotutako gaia izaten baita zailtasun handiena dakarrena. Baina hurbilketa orok zehaztasun eza dakar; kasu honetan, partikulen arteko elkarrekintza batezbesteko eremuarekin ordezkatzeko sistemaren fluktuazioak arbuatzen dira. Esan bezala, horren ondorioz berretzaile kritiko okerrak aurrerata dira, izan ere, fluktuazio horiek sistemaren portaera kritikoaren ezaugarri garrantzitsuenetako bat dira [10].

⁵ Adibidez, sistema magnetiko batean eremu efektiboa espin guztien batezbestekoa izango litzake, hau da, magnetizazioa; Landauren teoriak magnitude horrekin egiten du lan, eta batezbesteko eremuen teorian oinarritzen dela esan daiteke, beraz.

Hala ere, horrek ez du esan nahi Landauren teoria baliagarria ez denik. Fase-trantsizioen deskribapen kualitatibo zuzen eta argia egiten du, eta, beraz, tresna egokia da —lehenengo hurbilketan behintzat— haien azterketarako. Horrez gain, sistemaren singularitateak (2.2) bezalako adierazpen analitiko baten bitartez deskribatzea abantaila handia da eta, gainera, ordena parametroaren simetriaren garrantzia azpimarratzen du [8].

2.3 ϕ^4 hamiltondarra

Landauren teoria aztertu ahal izateko fase-trantsizioa jasango duen sistema bat kontsideratu beharra dago, partikula kopuru handia izango duena, noski. Ez denez bideragarria partikula guzti horien arteko elkarrekintza mikroskopikoak era zehatzean kalkulatzeko, hori sinplifikatzen duten ereduak erabiltzen dira, betiere sistemaren ezaugarri fisiko garrantzitsuenak kontuan hartuz. Horrela, nahiz eta portaera mikroskopikoa sinplifikatua izan, ereduak sistemak jasaten dituen gertaera makroskopikoak agerraraziko ditu, hala nola magnetizazio aldaketa sistema magnetikoan.



2.3. Irudia: ϕ^4 hamiltondarraren adierazpen grafikoaren kasua, dimentsio bakarreko katearen kasua. “Partikula” beltzek sare-puntu bakoitzeko ϕ_i aldagai lokalaren balioa adierazten dute, eta malgukiek lehenengo auzokideen arteko akoplamendu harmonikoa.

Lan honetan ϕ^4 eredu mikroskopikoa erabiliko da. Sare egitura bat kontsideratzen da, sare-puntu bakoitzean aldagai lokal eta jarraitu bat izanik; haietako bakoitza potentzial-putzu bikoitz eta finitu baten menpe dago, eta lehenengo auzokideekin akoplatuta elkarrekintza harmoniko baten bidez (ikus 2.3. irudia) [7]. Ezaugarri horiek adierazteko

$$H = E_0 \sum_i (\phi_i^2 - 1)^2 + \frac{1}{2} C \sum_i \sum_j^{NN} (\phi_j - \phi_i)^2 \quad (2.5)$$

hamiltondarra erabiltzen da, non ϕ sare-puntu bakoitzeko aldagaia den, E_0 potentzial-putzuen sakonera eta C akoplamendu-konstantea⁶. Lehenengo batugaiak potentzial-putzu bikoitza adierazten du eta batukarian erabiltzen den i azpiindizeak sare-puntu bakoitzari egiten dio erreferentzia; ohartu, gainera, potentzial-putzuen minimoak $\phi_i = \pm 1$ puntuetan daudela kokatuta. Bigarren batugaiak akoplamendu harmonikoa adierazten du; bertan i sare-puntuaren lehenengo auzokideak izendatzeko j azpiindizea erabiltzen da, NN lehenengo auzokide kopurua izanik.

⁶ Ereduaren ezaugarri garrantzitsu bat haren parametroen arteko erlazioa da. $C/E_0 \rightarrow \infty$ limiteak fase-trantsizio *displazibo* bat adierazten du, hau da, atomoen desplazamendu txiki eta kolektiboetan oinarritutako trantsizio bat [16]; $C/E_0 \rightarrow 0$ limitea, ordea, *ordena-desordena* fase-trantsizio bati dagokio, hala nola fase-trantsizio ferromagnetikoari.

Limite termodinamikoan ordena parametroa aldagai lokal guztien arteko batezbestekoa bezala definitzen da, hots,

$$Q = \frac{1}{N} \sum_i \phi_i, \quad (2.6)$$

non Q ordena parametroa eta N sareko sare-puntu kopurua diren [7]. Horrenbestez, fase-trantsizioko simetria-apurketa “partikula” gehienak —guztiak, batezbestean— potentzialaren putzu berdineran lerratzearen ondorioa da, horrek ahalbidetzen baitu ordena parametroak balio ez-nulu bat izatea. Simetriari dagokionez, (2.5) hamiltondarra aldaezina da ϕ_i aldagai lokal guztien zeinu aldaketaren aurrean eta, ondorioz, sistemaren energia askea ere ordena parametroaren zeinu aldaketarekiko aldaezina izango da. Ez hori bakarrik, ϕ^4 hamiltondarretik abiatuz Landauren teoriak auresandako energia askea ondorioztatzen dela ere frogatu daiteke [17]; hortaz, teoria makroskopikoa eta eredu mikroskopikoa bateragarriak dira, eta ϕ^4 hamiltondarra egokia da Landauren teoriaren azterketarako.

2.4 Bigarren mailako ordena parametroak

Orain arte emandako azalpen eta adibideetan ordena parametro bakarra —lehen mailakoa— kontsideratu bada ere, zenbait fase-trantsiziotan ordena parametro gehiago kontuan hartu beharra dago. Lehen mailakoen antzera, bigarren mailako ordena parametroak fase-trantsizioan aldaketaren bat jasaten duten aldagaiak dira, baina horiek ez dute simetria-apurketa berririk⁷ eragiten [19], haien aldaketa lehen mailako ordena parametroek induzitzen dute.

Kasu horren adibide bat fase-trantsizio ferroelektrikoa da, non material batek berehalako polarizazio elektrikoa agertzen duen, lehen mailako ordena parametroa polarizazio hori izanik —fase-trantsizio ferromagnetikoan magnetizazioa den bezalaxe—. Polarizazioaren jatorria sare kristalinoko ioien desplazamendua da, eta horren eraginez egiturak jasandako deformazioa da, hain zuzen ere, bigarren mailako ordena parametroa [19]. *Fase-trantsizio estruktural* bat da azken hori, izenak dioen moduan, materiaren egitura kristalinoaren aldaketa edo distortsioan oinarrituta dagoena [22], eta aipatutako deformazioekin lotura zuzena duena, beraz. Hori dela eta, bigarren mailako ordena parametroak aintzat hartzea funtsezkoa da fase-trantsizio estrukturalen azterketan [18].

2.4.1 Landauren teoria

Landauren teoriaren hasierako helburua ordena parametro bakarreko fase-trantsizio jarraituen azterketa egitea zen, baina laster hedatu zen beste hainbat kasu aintzat hartu ahal izateko, hala nola lehenengo ordenako fase-trantsizioak edo bi ordena parametroko kasua [19]. Azken hori aztertu nahi da lan honetan, eta hurrengo energia askea proposatu da horretarako⁸:

$$\mathcal{F}(T, Q_1, Q_2) = \mathcal{F}_0(T) + a_2(T) Q_1^2 + a_4(T) Q_1^4 + b_2(T) Q_2^2 + c(T) Q_1 Q_2 + \dots \quad (2.7)$$

⁷ Lehen mailakoek apurtutako simetria-eragiketaren bat hautsi dezakete bigarren mailakoek ere, baina ez gehiago [18]; simetria-apurketa ahulagoa dela esan daiteke, beraz.

⁸ Literaturan beste hainbat adierazpen aurki daitezke [18, 20, 21].

non Q_1 eta Q_2 lehen eta bigarren mailako ordena parametroak diren, eta c haien arteko akoplamendu bilineal konstantea. Sistemaren egonkortasun termodinamikoa bermatzeko $a_4(T) > 0$ izan behar da oraingo honetan ere.

Ohartu proposatutako adierazpena (2.2) ekuazioaren hedapen bat besterik ez dela: lehen mailako ordena parametroaren ekarpena aipatutako ekuazioak deskribatutakoa da, eta gai koadratiko bat gehitu zaio bigarren mailakoaren ekarpena adierazteko. Simetria da hori horrela izatearen arrazoia: sistemaren simetria-apurketa (2.2) ekuazioaren bidez erduztatzen da, baina bigarren mailako ordena parametroak ez du simetria-apurketa berririk eragiten, eta ondorioz dagokion energia askearen ekarpena ez da laugarren mailako polinomio baten bidez adierazten.

Bestalde, ordena parametroen arteko akoplamendu bilineala ere gehitu zaio adierazpenari. Hori horrela, energia askea aldaezina da bi ordena parametroen aldibereko zeinu aldaketaren aurrean, ordena parametro bakarreko kasuan gertatzen denaren antzera.

Fase-trantsizioaren tenperatura kritikoa energia askea minimizatuz ondoriozta daiteke oraingoan ere, eta

$$\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial Q_1} = 2 a_2(T) Q_1 + 4 a_4(T) Q_1^3 + c(T) Q_2 = 0 \quad (2.8)$$

$$\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial Q_2} = 2 b_2(T) Q_2 + c(T) Q_1 = 0 \quad (2.9)$$

ekuazioak planteatzen dira horretarako. Lehenik eta behin, (2.9) ekuazioa ebazten da

$$Q_{20} = -\frac{c(T)}{2 b_2(T)} Q_{10} \quad (2.10)$$

orekako balioa lortuz bigarren mailako ordena parametroarentzat, ondoren, azken hori (2.8) ekuazioan ordezkatu eta

$$Q_{101} = 0, \\ Q_{102} = \pm \sqrt{-\frac{a_2^*(T)}{4 a_4(T)}}, \quad \text{non } a_2^*(T) \equiv 2 a_2(T) - \frac{c(T)^2}{2 b_2(T)},$$

balioak lortzen dira. Horrela, a_2^* koefizienteak sistemaren fasea zehazten du: positiboa denean lehen mailako ordena parametroa Q_{101} da, eta sistema tenperatura altuko fasea dago; negatiboa bada, berriz, ordena parametroa $\pm Q_{102}$ da, eta sistema tenperatura baxuko fasean dago. Ondorioz, ordena parametro bakarreko kasuan gertatzen den moduan, tenperatura kritikoa $a_2^*(T_c) = 0$ da, baina kasu honetan tenperatura kritikoa gora egiten du.

Lehen mailako ordena parametroa ezagututa, bigarren mailakoa (2.10) ekuazioaren bidez ondoriozta daiteke. Tenperatura kritikotik gora $Q_1 = 0$ denean, Q_2 ere halaxe izango da, eta energia askeak jatorrian kokatutako minimo bakar bat izango du. Aitzitik, fase-trantsizioaren ondoren $Q_1 \neq 0$ denean, Q_2 ordena parametroak ere balio ez-nuluren bat hartuko du —aurkako zeinuduna izango dena b_2 eta c koefizienteek zeinu berdina baldin badute— eta energia askeak bi minimo izango ditu, beraz.

2.4.2 ϕ^4 hamiltondarra

Bigarren mailako ordena parametroa barne hartzen duen eredu mikroskopikoa

$$H = H_1 + H_2 + \gamma \sum_i \phi_{1i} \phi_{2i} \quad (2.11)$$

da, non ϕ_1 eta ϕ_2 lehen eta bigarren mailako ordena parametroei dagozkien aldagai lokalak diren, eta H_1 eta H_2 bakoitzari dagokion hamiltondarra, hurrenez hurren. Ordena parametroak (2.6) ekuazioan adierazi bezala kalkulatzeko dira, horrela Q_1 eta Q_2 lortuz. Haien arteko elkarrekintza bilineal eta lokala hirugarren batugaiak deskribatzen du, γ dagokion akoplamendu-konstantea izanik. H_1 hamiltondarra (2.5) ekuazioan adierazitakoa izango da —baina ϕ_1 , E_{01} eta C_1 ikurrak erabiliz—, horrek deskribatzen baitu lehen mailako ordena parametroaren portaera; eta bigarren mailako ordena parametroarentzat, berriz,

$$H_2 = E_{02} \sum_i \phi_{2i}^2 + \frac{1}{2} C_2 \sum_i \sum_j^{NN} (\phi_{2j} - \phi_{2i})^2 \quad (2.12)$$

hamiltondarra erabiliko da. Azken horretan potentziala jatorrian zentratutakoa eta putzu bakarrekoa da, parabola bat, izan ere, bigarren mailako ordena parametroak ez du simetria-apurketa berririk eragiten, aurreko azpiatalean aipatu den moduan. Parametroei dagokienez, E_{02} parabolaren zabalerarekin dago lotuta, C_2 lehenengo auzokideen arteko akoplamendu-konstantea da, eta i eta j azpiindizeek (2.5) adierazpenean duten esanahi berbera dute.

Parabolaren erpina $\phi_2 = 0$ puntuan egonik badirudi Q_2 uneoro nulua izango dela, baina lehen mailako ordena parametroarekin duen akoplamendua dela eta, simetria-apurketan Q_2 balio ez-nuluak hartzera irits daiteke —betiere, γ parametroaren arabera—. Landaren teoria oinarritzat izanik, ondorio berdina atera da (2.10) ekuazioari erreparatuz. Dena den, bigarren mailako ordena parametroak balio txikiak hartu ohi ditu eta, beraz, simetria murriztuko fasean distortsioak adierazten dituela esaten da [18].

Simetriaren inguruko iruzkin bat egingo da amaitzeko. Ohartu (2.11) hamiltondarra ϕ_{1i} eta ϕ_{2i} aldagai lokal guztien aldibereko zeinu aldaketaren aurrean aldaezina dela. Aldagai lokal horiek ordena parametroekin zuzenki lotuta daude eta, horrenbestez, aipatutako hamiltondarraren bidez erduztatutako sistemaren energia askea ere ordena parametro horien aldibereko zeinu aldaketaren aurrean aldaezina izatea espero da. Hortaz, (2.11) hamiltondarra aurreko azpiatalean proposatutako (2.7) energia askea aztertzeke eredu egokia dela ondorioztatu da.

3. Kapituluia

Oinarri konputazionala

ϕ^4 hamiltondarra da, beraz, fase-trantsizioak eta haien inguruko Landaren teoria aztertzeke erabiliko den sistema erduztatuko duena; eta Monte Carlo metodoen bidez inplementatuko da, hamiltondarra numerikoki ebatzi ahal izateko. Monte Carlo metodoak ausazkotasunean oinarritzen dira problema konplexuak ebazteko, hala nola fisika estatistikokoak, partikula kopuru handiko sistemekin lan egin beharra baitago bertan. Lan honetan Metropolisen algoritmoa erabiliko da, Monte Carlo metodo guztien artean ezagunena behar bada, eta Fortran programazio-lengoiaren bidez inplementatuko da. Kapitulu honetan inplementazio horren nondik norakoak azalduko dira.

3.1 Monte Carlo metodoen funtsa

Monte Carlo metodoen helburua, fisika estatistikoaren testuinguruan behintzat, sistema jakin baten propietate makroskopikoren bat bere konfigurazio mikroskopikoetan (mikrogoeretan) oinarrituz zehaztea da. Teorian, hori itxarotako balioa kalkulatzuz egiten da,

$$\langle f \rangle = \sum_{\mu} f_{\mu} p_{\mu} = \frac{\sum_{\mu} f_{\mu} e^{-\beta E_{\mu}}}{\sum_{\mu} e^{-\beta E_{\mu}}} \quad (3.1)$$

ekuazioaren bitartez, alegia, non f zehaztu nahi den propietatea eta $\langle f \rangle$ bere itxarotako balioa diren; $\beta = 1/k_B T$ da, k_B Boltzmann-en konstantea eta T tenperatura¹ izanik. Hemen, funtsean, f propietateak sistemaren μ mikrogoera bakoitzean duen f_{μ} balioen arteko batezbesteko haztatua egiten da, balio horietako bakoitza mikrogoerari dagokion p_{μ} probabilitatearekin —Boltzmann banaketak zehaztua— biderkatuz. Baina horrek arazo larri bat du: sistema txikienetan izan ezik, mikrogoera kopurua handiegia da eta $\langle f \rangle$ ezin da (3.1) ekuazioaren bidez kalkulatu.

Arazo hori konpontzeko Monte Carlo metodoek mikrogoera multzo bat besterik ez dute kontsideratzen, baina ez edozein multzo, Boltzmann banaketan oinarritutakoa baizik —non μ mikrogoera jakin bat izateko probabilitatea Boltzmann banaketak zehazten duena den, p_{μ} , alegia—, oreka termikoan dauden sistemetan beha daitekeen moduan. *Garrantzizko laginketa* deritzo horri, eta froga daiteke teknika horren bidez lortutako M mikrogoeradun multzoari dagokion itxarotako balioa

¹ Sistema oreka termikoan dagoela suposatzen da [23].

$$f_M = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M f_{\mu i} \quad (3.2)$$

ekuazioaren bidez kalkula daitekeela; noski, zenbat eta handiagoa izan M mikrogoera kopurua orduan eta zehatzagoa izango da f_M balioa.

Horrenbestez, multzoa osatuko duten mikrogoera horiek aurkitzea da orain gakoa, eta *Markov katearen* bidez egiten da hori [23]. Xehetasunak alde batera utziz, mekanismo horrek hasierako mikrogoera edo konfigurazio batetik abiatuz beste bat sortzen du, guztiz ausazkoa dena; ondoren, konfigurazio berri horretan oinarrituz beste bat sortzen da, eta prozesu hau behin eta berriro errepikatuz mikrogoera segida bat lortzen da. Sorrera ausazkoa bada ere, baldintza eta arau jakin batzuk bete behar dira mikrogoera segida edo multzoa Boltzmann banaketaren arabera izan dadin.

Hainbat baldintza bete behar ditu Markov kateak² baina esanguratsuen *balantze xehatuarena* da, funtsean, multzoa Boltzmann banaketaren arabera dela ziurtatzen duena [23], eta matematikoki

$$p_\mu P(\mu \rightarrow \nu) = p_\nu P(\nu \rightarrow \mu) \quad (3.3)$$

ekuazioaren bitartez adieraz daitekeena, non $P(\mu \rightarrow \nu)$ sistemak μ mikrogoeratik abiatuz ν mikrogoerara igartzeko duen probabilitatea den. Hortaz, p_μ eta p_ν Boltzmann banaketak zehaztutako probabilitateak izanik, hurrengo ekuazioa ondoriozta daiteke:

$$\frac{P(\mu \rightarrow \nu)}{P(\nu \rightarrow \mu)} = \frac{p_\nu}{p_\mu} = e^{-\beta(E_\nu - E_\mu)}, \quad (3.4)$$

zeinak bi mikrogoeren arteko trantsizio probabilitatea haien arteko energia-diferentziarekin erlazionatzen duen. Ohartu horrek ez dituela trantsizio probabilitateak guztiz mugatzen, eta haien aukeraketan nolabaiteko askatasuna dagoela, beraz. Horrela, (3.4) baldintza betetzen duen edozein trantsizio probabilitate kontsideratuz, Markov kateak mikrogoera multzo egokia sortuko du, eta itxarotako balioa (3.2) ekuazioaren bidez kalkulatu ahal izango da. Kasu honetan Metropolisen algoritmoak proposatutako trantsizio probabilitateekin egingo da lan, hurrengo atalean azaldu den moduan.

3.2 Metropolisen algoritmoa

3.2.1 Algoritmoaren funtsa

Metropolisen algoritmoak zuzenean trantsizio probabilitateekin lan egin beharrean hurrengo bereizketa kontsideratzen du:

$$P(\mu \rightarrow \nu) = g(\mu \rightarrow \nu) A(\mu \rightarrow \nu), \quad (3.5)$$

² Besteak beste, μ mikrogoera batetik abiatuz beste ν mikrogoera bat lortzeko probabilitatea denborarekiko independentea izan behar da, eta μ eta ν egoeren menpekota soilik; bestalde, *ergodikotasun* baldintza ere bete behar da, abiapuntutzat edozein mikrogoera izanik beste edozein mikrogoera lor daitekeela ziurtatzen duena. Lan honetan ez da gai horien inguruan sakonduko, baina informazio gehiago nahi duen orori Newman eta Barkema-ren *Monte Carlo Methods in Statistical Physics* [23] liburuko 2. kapitulua gomendatzen zaio.

non $g(\mu \rightarrow \nu)$ gaia *aukeraketa probabilitatea* —hots, algoritmoak μ mikroegoeratik abiatuz ν sortzeko duen probabilitatea— den, eta $A(\mu \rightarrow \nu)$ *onarpen ratioa*. Azken horrek zera adierazten du: μ mikroegoeran dagoen sistemak algoritmoak sortutako ν mikroegoerara igarotzeko duen probabilitatea, hau da, sistemak egoera berria onartzeko duen probabilitatea.

Balantze xehatuaren baldintza (3.5) ekuazioaren bidez berridatz daiteke; bestalde, algoritmoak mikroegoera edo konfigurazio berriak ausaz sortzen dituela kontuan izanik, $g(\mu \rightarrow \nu)$ aukeraketa probabilitate guztiak berdinak direla ondoriozta daiteke, μ eta ν edozein izanda ere. Hartara, (3.4) ekuazioa onarpen ratioen menpe soilik idatz daiteke eta, beraz, Metropolisen algoritmoak hori besterik ez du aintzakotzat hartuko; zehatzago, proposatutako onarpen ratioa

$$A(\mu \rightarrow \nu) = \begin{cases} e^{-\beta(E_\nu - E_\mu)} & E_\nu - E_\mu > 0 \text{ bada} \\ 1 & \text{bestela} \end{cases} \quad (3.6)$$

da [23]. Horrenbestez, algoritmoak $\mu \rightarrow \nu$ trantsizioa onartzeko bi aukera daude: $E_\nu \leq E_\mu$ bada, trantsizioa beti onartuko da; eta aurkako kasuan, aldiz, trantsizioa onartzeko probabilitatea $e^{-\beta(E_\nu - E_\mu)}$ da. Hauxe da, beraz, Metropolisen algoritmoaren oinarria: (3.6) ekuazioaz baliatzen da Markov katea inplementatu eta neurtu beharreko propietate makroskopikoa (3.2) ekuazioaren bidez kalkulatzeko. Hortaz, helburua algoritmoa inplementatuko duen programa bat idaztea da orain, eta horretarako eman beharreko pausu nagusiak jarraian azaldu dira.

3.2.2 Algoritmoaren inplementazioa

Lehenik eta behin, sistema sortu beharra dago. Aurreko kapituluan esan bezala, ϕ^4 hamiltondarrarekin lan egiteko sare egitura bat kontsideratzen da, sare-puntu bakoitzean ϕ aldagai lokal bat izanik. Hori konputazionalki adierazteko zenbaki errealean bektore bat erabiliko da, non elementu bakoitza sare-puntu bakoitzeko aldagai lokala den; eta horrela, adibidez, $L \times L$ bi dimentsioko sistema karratu bat L^2 luzerako bektore baten bidez adieraziko da. Nahiz eta ohiko aukera ez izan —izan ere, intuitiboagoa da sistemaren dimentsio bereko matrize bat erabiltzea dimentsio bakarreko bektore bat baino— adierazpen horrek mugalde baldintza helikoidalak (ikus 3.1. irudia) erabiltzea ahalbidetzen du, eta hori abantaila bat da konputazio-denbora nabarmen murrizten baitu [23].

				0	1	2	3
0	1	2	3	4	5	6	7
4	5	6	7	8	9	10	11
8	9	10	11	12	13	14	15
12	13	14	15	0	1	2	3
0	1	2	3	4	5	6	7
4	5	6	7	8	9	10	11
8	9	10	11	12	13	14	15
12	13	14	15				

3.1. Irudia: Mugalde baldintza helikoidalaren adierazpen grafikoa 4×4 neurriko sare karratu baten kasuan.

Horrela, algoritmoa inplementatzeko jarraitu beharreko urratsak hurrengoak dira:

- i.* Sistemaren hasierako konfigurazioa aukeratu eta hura adieraziko duen bektorea ($\Phi_{k=0}$ ikurraren bidez izendatuko dena) horren arabera hasieratzen da. Konfigurazio hori edozein izan daiteke — ϕ aldagai guztiak 1, 0 edo -1 kontsideratzen dituen, edo ausazkoa—, Markov katea horren arabera izango da baina ez du bukaerako emaitza guztiz baldintzatuko.

- ii. Oinarriztat aurreko Φ_k konfigurazioa izanik, Φ_{k+1} konfigurazio berria sortzen da. Horretarako Φ_k bektoreko elementu bat (ϕ_i) ausazko eran aukeratu eta balio berri bat esleitzen zaio zorizko zenbaki erreal bat ($\Delta\phi$) gehituz,

$$\phi_i \leftarrow \phi_i + \Delta\phi, \quad \text{non } \Delta\phi \in [-\delta, \delta].$$

Hemen δ *zabalera parametroa* da, $\Delta\phi$ zenbakiak izan ditzakeen balioak mugatzen dituena; eta, ϕ^4 ereduaren kasuan, 0.3 eta 0.7 artean aukeratu ohi da algoritmoa optimoa izan dadin [24].

- iii. Konfigurazio zahar eta berriaren arteko energia-diferentzia kalkulatzen da ϕ^4 hamiltondarrean oinarrituz,

$$\Delta E = E_{k+1} - E_k.$$

- iv. ΔE zero edo negatiboa bada, konfigurazio berria onartu eta bektorea eguneratu egiten da $\Phi_k \leftarrow \Phi_{k+1}$ esleipenaren bitartez. ΔE positiboa bada, ordea, $e^{-\beta\Delta E}$ probabilitatea kalkulatzen da lehenik, eta $[0, 1)$ tarteko r zorizko zenbaki bat sortu ondoren. Hartara, $r < e^{-\beta\Delta E}$ bada, konfigurazio berria onartu eta $\Phi_k \leftarrow \Phi_{k+1}$ esleipena egiten da; bestela, konfigurazio berria baztertu eta Φ_k dagoen moduan uzten da.

- v. Neurtu beharreko propietate edo magnitudea Φ_k bektorean oinarrituz kalkulatzen da, eta bere balioa gorde. Lan honen kasuan magnitude hori ordena parametroa da, (2.6) ekuazioaren bidez kalkulatzen dena, Φ_k bektoreko ϕ gai guztiak batu eta N elementu kopuru totalarekin zatituz, alegia.

- vi. Azkenik, k kontagailua inkrementatu eta ii. urratsera itzultzen da; prozesua behar bestetan errepikatzen da, multzo edo segidan nahikoa konfigurazio izan arte. Bukatzeko, konfigurazio bakoitzean neurtutako Q_k ordena parametro guztien arteko batezbestekoa kalkulatzen da, (3.2) ekuazioak adierazi duen moduan.

Horrela kalkulatzen da, beraz, T tenperatura jakin batean³ sistemaren Q ordena parametroa —bere itzarotako balioa, zehatzago esanda—. Praktikan, konfigurazio bakoitzean lortutako Q_k balioak indibidualki aztertuz, zera beha daiteke: Markov katearen hasieran neurtutako balioak nahiko aldakorak dira, baina katearen puntu batean egonkortu egiten dira eta, hortik aurrera, batezbesteko balio baten inguruan fluktuatzen dute; sistema oreka egoerara iritsi dela esan ohi da orduan.

Lortutako konfigurazio multzoa estatistikoki esanguratsua izan dadin —eta, ondorioz, amaierako neurketa zuzena—, beharrezkoa da sistema oreka egoerara iritsi⁴ eta bertan denbora nahikoa iragatea, oreka egoerako konfigurazioetan neurtuko baitira Q_k balio egoikiak. Horrenbestez, hori kontuan izan behar da algoritmoak egin beharreko iterazio edo *Monte Carlo urrats* kopurua hautatzean.

³ Fase-trantsizio bat simulatzeko prozesu bera jarraitzen da, baina T jakin baterako bakarrik egin beharrean, tarte bateko zenbait tenperatura balioetarako.

⁴ Sistemak horretarako behar duen denbora tarteari —edo, hobeto esanda, errepikapen edo iterazio kopuruari— *termalizazioa* deritzo. Praktikan, Monte Carlo simulazioetan termalizazio urrats kopuru bat finkatu ohi da sistema oreka egoerara iritsi dadin, eta ez da inolako Q_k baliorik neurtzen algoritmoak iterazio horiek egin arte, hau da, sistema orekatu arte.

Dena dela, sistemaren portaera tenperaturaren araberakoa da, fase-trantsizioko tenperatura kritikoaren inguruko eskualdean bereziki interesgarria izanik. Xehetasunak alde batera utzita⁵, neurtu beharreko propietatearen fluktuazio handiak nagusitzen dira eskualde horretan, *fluktuazio kritiko* deitu ohi direnak. Horrek neurketaren errore estatistikoa nabarmen handitzen du eta, ondorioz, Metropolisen algoritmoak zehaztasuna galtzen du aipatutako eskualdean [23]. Praktikan, komenigarria izan ohi da eskualde horretan burututako simulazioen termalizazio eta Monte Carlo urrats kopurua handitzea fluktuazio kritikoaren eragina txikitzeko, baina kontuan izan behar da neurketa zehatzak lortzeko beharrezkoa den iterazio kopurua —eta konputazio-denbora, beraz— oso bizkor hazten dela fase-trantsiziora gerturatu ahala.

Neurketaren zehaztasunean eragina duen beste faktore bat sistemaren neurria da. Monte Carlo simulazioak burutzeko limite termodinamikoetik urrun dauden neurri finitudun sistemak kontsideratu ohi dira, eta horrek neurketaren zehaztasun eza dakar tenperatura kritikoan ematen diren singularitateak erreproduzitzea lortzen ez delako. Noski, zenbat eta handiagoa izan sistema orduan eta zehatzagoa da neurketa, baina kontuan izan beharra dago sistema handiekin lan egiteak konputazio-denbora oso luzeak eskatzen dituela eta, ondorioz, gai honekin lotutako erroreak ohikoak dira praktikan [23].

⁵ Honek *klusterren* eraketa eta haien *korrelazio luzeraren* dibergentziarekin du zerikusia. Lan honetan ez da gai horien inguruan sakonduko, baina informazio gehiago nahi duen orori Newman eta Barkema-ren *Monte Carlo Methods in Statistical Physics* [23] liburuko 3.7 atala gomendatzen zaio.

4. Kapituluia

Fase-trantsizioen simulazioak

Kapitulu honen helburu nagusia Landauren teoria aztertzea da. Horretarako, azalduko metodoak erabiliz, ϕ^4 hamiltondarra implementatuko da, sistema fisiko bat ereduiztatuko duena. Azken horren fase-trantsizioa simulatuko da, eta dagokion tenperatura kritikoa kalkulatu Landauren teoriaren bitartez; bukatzeko, emaitza hori tenperatura kritikoaren zuzeneko neurketarekin alderatuko da. Azterketa ordena parametro bakarreko kasurako egingo da lehenik, eta bigarren mailako ordena parametroa gehituko da ondoren.

4.1 Ordena parametro bakarreko kasua

4.1.1 Neurketa-metodoa

Azterketaren abiapuntua *Landauren energia askea* da, hots, soilik Q ordena parametro eta T tenperaturaren menpekotasuna duen potentzial termodinamiko osatugabea, eta

$$\mathcal{F}_L(Q, T) = -k_B T \ln(\mathcal{Z}(Q)) \quad (4.1)$$

ekuazioaren bidez adieraz daitekeena. Bertan $\mathcal{Z}(Q)$ partizio-funtzio osatugabea da, hau da, ordena parametroarena izan ezik, sistemaren askatasun-gradu guztiak integratuta dituen partizio-funtzioa. Landauren energia askearen berezitasuna zuzenean Q ordena parametroaren $P(Q)$ probabilitate-banaketatik ondoriozta daitekeela da, izan ere,

$$P(Q) = \frac{\mathcal{Z}(Q)}{\mathcal{Z}} \quad (4.2)$$

da, \mathcal{Z} oreka egoerako partizio-funtzioa izanik; eta horrela hurrengo lor daiteke:

$$\Delta\mathcal{F}_L(Q, T) = \mathcal{F}_L(Q, T) - \mathcal{F} = -k_B T \ln(P(Q)), \quad (4.3)$$

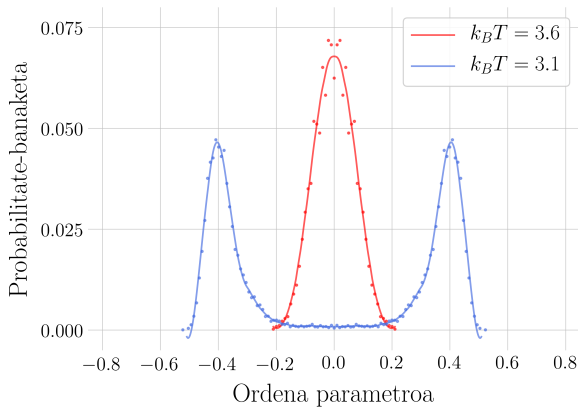
non \mathcal{F} oreka egoerako energia askea den [7]. Hauxe da, beraz, jarraitutako prozedura: tenperatura jakin baterako ordena parametroa neurtzen da Monte Carlo metodoaren bidez, simulazioa n_P bider errepikatu eta neurtutako ordena parametro guztiak gorde egiten dira, balio horietan oinarrituz $P(Q)$ probabilitate-banaketa sortzen da¹ eta, azkenik, sare-puntu bakoitzeko Landauren energia askea —haren aldakuntza, hobeto esanda— kalkulatu da (4.3) ekuazioan oinarrituz.

¹ Funtsean, lortutako Q balio guztien histograma bat eraiki eta ondoren normalizatu egiten da.

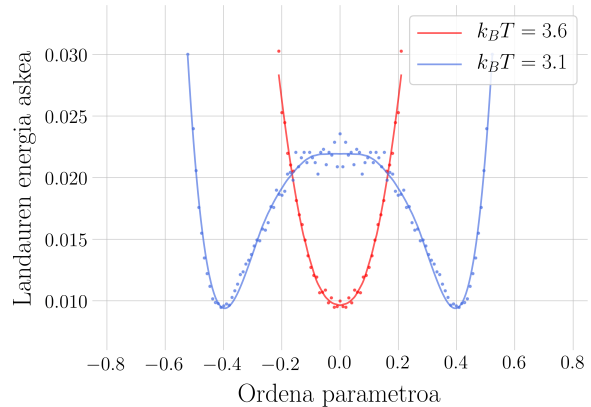
Honako hauek dira simulazioetan erabilitako parametroak. Sistematzat $L = 10$ alde-dun hiru dimentsioko $L \times L \times L$ sare kubikoa hartu da; (2.5) hamiltondarrari dagokionez, $E_0 = 1.0$ eta $C = 2.0$ parametroak hautatu dira; eta Metropolisen algoritmoa inplementatzeko $\delta = 0.45$ zabalera parametroa, 5×10^4 urratseko termalizazioa eta 10^5 Monte Carlo urrats erabili dira. Ordena parametroaren banaketa-probabilitatea lortzeko $n_P = 10^4$ neurketa egin dira, eta neurtutako balioak jatorriarekiko simetrizatu dira [7], ordena parametroa positiboa eta negatiboa izateko probabilitateak berdinak izan behar baitira ϕ^4 hamiltondarraren simetria dela eta.

4.1.2 Emaitzak eta eztabaida

Hasteko, bi tenperatura baliotarako lortutako banaketa-probabilitateak 4.1. irudian adierazi dira. Bertan bi fase antzeman daitezke: $k_B T = 3.6$ energiari² dagokion kurbak maximo bakar bat du jatorrian, eta ordena parametroa nulua izango da, beraz; bestalde, $k_B T = 3.1$ denean, kurbak bi maximo simetriko ditu ± 0.4 balioen inguruan, eta horietako bat izango da sistemari dagokion ordena parametroa probabilitate handiz. Hau da, tenperatura jaitsi ahala ordena parametroaren balioa nulua izatetik ez-nulua izatera pasatzen da, eta adierazitako bi tenperaturen artean fase-trantsizioa gertatzen dela ondoriozta daiteke, beraz. Aurrerago zehaztuko da dagokion tenperatura kritikoa.



4.1. Irudia: Probabilitate-banaketa $k_B T = 3.6$ eta $k_B T = 3.1$ kasuetarako. Kurben maximoek sistemaren ordena parametroa zehazten dutenez, adierazitako kasu bakoitza fase desberdin bati dagokiola ondorioztatzen da. Puntuak Monte Carlo simulazioen emaitzak dira, jatorriarekiko simetrizaturuta; eta lerroek, berriz, puntuen doikuntza adierazten dute.



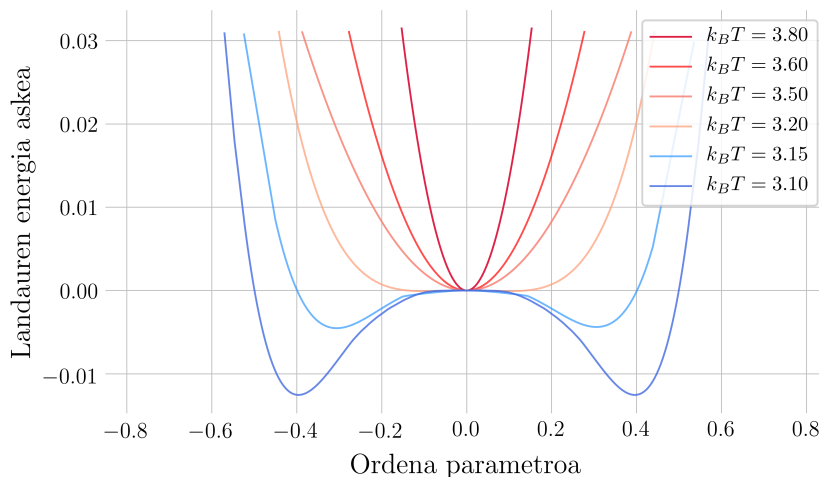
4.2. Irudia: Sare-puntu bakoitzeko Landauren energia askea $k_B T = 3.6$ eta $k_B T = 3.1$ kasuetarako. Kasu honetan minimoek zehazten dute ordena parametroa, eta adierazitako kasu bakoitza fase desberdin bati dagokiola ondorioztatzen da horretan oinarrituz. Probabilitate-banaketako puntuetan (4.3) ekuazioa aplikatuz lortu dira hemengo puntuak, eta lerroak haien doikuntzak dira.

Probabilitate-banaketatik abiatuta, sare-puntuko Landauren energia askea kalkulatu da (4.3) ekuazioan oinarrituz, 4.2. irudian adierazi den moduan. Ordena parametroari dagokionez, aurreko paragrafoan ateratako ondorio berdinak atera daitezke oraingoan energia askearen minimoetan oinarrituz. Halaber, Landauren teoria gogora ekarriz, bertan proposatutako energia askeak (ikus 2.2. irudia) hemen lortutakoarekin duen antzekotasuna garbia da.

² Nahiz eta parametro esanguratsua tenperatura izan, ez da k_B konstantea ordezkatu eta $k_B T$ balioarekin egin da lan, zeinak energiaren dimentsioa duen.

Antzekotasun horretaz baliatuz zehaztuko da tenperatura kritikoa. Horretarako, simulazioen bidez lortutako Landauren energia askearen kurbak laugarren mailako polinomio baten bidez doitu eta tenperatura bakoitzari dagokion a_2 koefizientea (ikus (2.2) ekuazioa) lortuko da. Landauren teoriak dioenez, tenperatura kritikoa $a_2(T_c) = 0$ da eta, hartara, baldintza hori betetzen duen kasua bilatuz T_c aurkituko da.

Hortaz, prozedura errepikatu eta sare-puntuko Landauren energia askea kalkulatu da $k_B T \in [2.9, 3.8]$ tarteko hainbat baliotarako; haietako batzuk 4.3. irudian adierazi dira. Jakina bada ere tenperatura kritikoa $k_B T_c \in (3.1, 3.6)$ tartean dagoela, tarte handiagoa aztertzea erabaki da energia askeak tenperaturarekiko duen menpekotasuna ikertzeko.



4.3. Irudia: Sare-puntuko Landauren energia askea hainbat $k_B T$ baliotarako (argiago ikusi ahal izateko, puntuen doikuntza besterik ez da irudikatu, eta lerroak extrapolatu eta bertikalarekiko desplazatu dira). Fase-trantsizioa beha daiteke hemen: tenperatura jaitsi ahala, parabolak zabaldu eta minimo bakarra izatetik bi minimo simetrikoki izatera igarotzen dira, hots, ordena parametroa nulua izatetik ez-nulua izatera pasatzen da.

Puntuen laugarren mailako doikuntza polinomikoa egin da³ ostean, eta bi joera behatu dira orduan: tenperatura altuko kasuetan, $k_B T \in [3.2, 3.8]$ tartean, energia askearen kurba ondo egokitu da laugarren mailako polinomiora; ez da hala izan tenperatura baxuko kasuetan, bertan laugarren mailako doikuntzaren errorea handia izan da eta seigarren mailako gaien ekarpena kontsideratu behar izan da. Hori kuantitatiboki adierazteko, doikuntzen determinazio-koefizientea —funtsean, doikuntzaren egokitasuna adierazten duena— kalkulatu da erregresio-analisan oinarrituz, 4.1. taulan ikusi daitekeenez.

Lortutako emaitzen inguruko hausnarketa bat egingo da tenperatura kritikoa kalkularekin jarraitu baino lehen. Seigarren mailako gaiak kontsideratu behar izateak ez du esan nahi Landauren teoria zuzena ez denik; are gehiago, ohartu (2.2) ekuazioan ez dela berretura-seriea laugarren mailako gaitara mugatzen, maila altuagoko gaiak hartzeko aukera ere ematen dela. Dagoeneko aipatu da berretura-seriea laugarren mailan ebakitzeko baldintzetako bat ordena parametroa —bere balio absolutua, hobeto esanda— txikia izatea dela [11] eta, beraz, zentzuzkoa da seigarren mailako gaiak behar izatea tenperatura jaitsi ahala, ordena parametroa handitu egiten baita orduan (ikus 4.5. irudia).

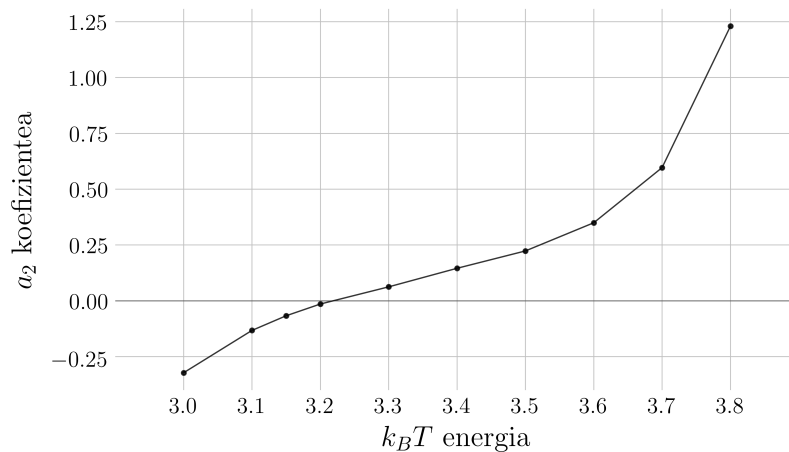
³ Monte Carlo simulazioetan lortutako datuen kudeaketa Python programazio-lengoiaren bidez egin da. Erakutsitako irudietako doikuntzak egiteko Savitzky eta Golay-ren metodoa erabili da [25], SciPy liburutegiko `savgol_filter` funtzioaren bidez [26]; doikuntza polinomikoa koefizienteak lortzeko, berriz, NumPy liburutegiko `polyfit` funtzioa erabili da, karratu minimoen printzipioan oinarritua [27].

Hala ere, tenperatura kritikoa kalkulatzeko laugarren mailako doikuntzatik lortutako a_2 koefizientea erabiliko da, eta kontuan izan beharko da koefiziente horrek okerra izateko arriskua duela doikuntzaren errorea handia den tenperaturetan.

Laugarren mailako doikuntza		Seigarren mailako doikuntza	
$k_B T$	R^2	$k_B T$	R^2
2.90	0.6195	2.90	0.7182
3.00	0.7439	3.00	0.9763
3.10	0.8267	3.10	0.9858
3.15	0.8778	3.15	0.9665
3.20	0.9935	3.20	0.9966
3.30	0.9853	3.30	0.9883
3.40	0.9937	3.40	0.9937
3.50	0.9894	3.50	0.9896
3.60	0.9932	3.60	0.9942
3.70	0.9960	3.70	0.9963
3.80	0.9990	3.80	0.9990

4.1. Taula: Determinazio-koefizientea doikuntzaren maila eta $k_B T$ balioaren arabera. Determinazio-koefizientea batetik zenbat eta hurbilago egon, hobe da doikuntza [28]. Bai lau eta bai seigarren mailako doikuntzen kasuan R^2 batetik aldentzen da tenperatura jaitsi ahala, eta, beraz, orokorrean zailagoa da energia askearen puntu multzoa 4. edo 6. mailako polinomio baten bidez hurbiltzea tenperatura baxua denean. Dena dela, koefizienteak jasandako aldaketa askoz bortitzagoa da laugarren mailako doikuntzan.

Temperatura kritikoa ondorioztatzeko helburuaz, laugarren mailako doikuntzaren bidez lortutako a_2 koefizienteak $k_B T$ energiaren menpe adierazi dira 4.4. irudian ($k_B T = 2.9$ balioari dagokion koefizientea alde batera uztea erabaki da doikuntzaren errore handia dela eta).

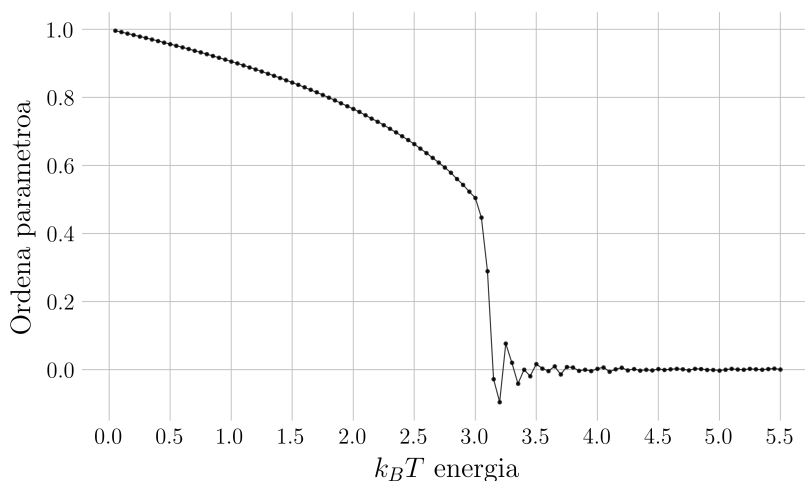


4.4. Irudia: Laugarren mailako doikuntzan lortutako a_2 koefizienteak $k_B T$ energiaren menpe. Landuren teoriaren arabera, tenperatura kritikoa kurba eta ardatz horizontalaren arteko ebaki-puntuari dagokio, eta $k_B T_c = 3.22$ da, beraz.

Oinarri teorikoko 2.2. atalean aipatutako ideia bat gogoratuko da hemen: a_2 koefizienteak tenperaturarekiko menpekotasun lineala duela. Argi dago 4.4. irudian adierazitakoa ez dela inondik inora lineala bere osotasunean, baina nolabaiteko tarte lineal bat antze-man daiteke $k_B T = 3.1$ eta 3.5 balioen artean. Hortaz, egindako neurketen arabera,

a_2 koefizientearen linealtasuna soilik temperatura kritikoaren inguruko tarte txiki baten berma daiteke. Hala eta guztiz ere, kontuan hartu beharra dago doikuntzan izandako erroreek koefizienteengan eragina dutela, eta horrek bai temperatura kritikoaren kalkulura eta bai linealtasunaren inguruko ondorioa zehaztasun eza ekar dezakeela.

Atal hau amaitutzat jo aurretik, fase-trantsizioaren Monte Carlo simulazio bat egin da, aurreko prozedura jarraitu beharrean, temperatura bakoitzari dagokion ordena parametroa zuzenean neurtuz. Horrek temperatura kritikoaren beste balio bat ondorioztatzea ahalbidetuko du, ondoren Landauren teoriaren bidez lortutakoarekin alderatuko dena. Parametroei dagokienez, 10^5 urratseko termalizazioa eta 5×10^6 Monte Carlo urrats erabili dira oraingoa, gainerako parametroak atal honen sarreran azaldutakoak izanik. Horrela, sistemaren ordena parametroa neurtu da $k_B T \in (0.0, 5.5]$ tartean $\delta T = 0.05$ urratsa kontsideratuz, 4.5. irudian ikus daitekeenez.



4.5. Irudia: Sistemaren ordena parametroa $k_B T$ energiaren menpe irudikatuta. Fase-trantsizioa garbi antzematen da hemen: temperatura altuetan ordena parametroa nulua da, temperatura kritikoa $k_B T_c = 3.15$ da, eta temperatura hori baino baxuagoa denean ordena parametroak balio ez-nuluak hartzen ditu.

Diferentzia txikia bada ere, temperatura kritikoaren bi balioak ez datoz bat: Landauren teoriaren bidez $k_B T_c = 3.22$ lortu da, eta zuzeneko neurketaren bitartez $k_B T_c = 3.15$. Laugarren mailako doikuntzaren erroreak eragina izan dezake diferentzia horretan, baina badirudi eragile nagusia simulazioetatik lortutako Landauren energia askearen forma dela. Hori agerian geratzen da 4.3. irudian $k_B T = 3.15$ kasuko kurbari erreparatzean: sakonak ez badira ere, kurbak bi minimo simetriko ditu ± 0.3 balioetan; ondorioz, doikuntzan lortutako a_2 koefizientea nulua izan beharrean negatiboa da, eta 4.4. iruditik ondorioztatutako temperatura kritikoa $k_B T = 3.15$ baino gorago dago.

Arazo hori temperatura kritikoaren inguruko eskualdean baino ez da behatu eta, horrenbestez, ordena parametroak eskualde horretan izandako fluktuazio kritikoaren eragina dela ondorioztatu da. Zuzeneko neurketa eta Landauren energia askea lortzeko egindako neurketen arteko alde nagusia simulazioan erabilitako termalizazio eta Monte Carlo urrats kopurua da eta, beraz, badirudi aipatutako arazoa azken kasu horretan urrats kopurua handituz konpon litekeela. Dena den, errepikatu beharra dago temperatura kritikoaren arteko diferentzia txikia dela; hortaz, Landauren teoriaren bitartez lortutako balioa guztiz zehatza ez bada ere, ontzat emango da.

4.2 Bi ordena parametroko kasua

Atal honetan bigarren mailako ordena parametroa gehituko zaio arestian aztertutako sistemari. Ordena parametroen probabilitate-banaketa bi dimentsiokoa izango da oraingoan, eta hori kalkulatu ahal izateko aurreko atalean jarraitutako neurketa-metodoaren eraldaketa bat proposatuko da hemen. Horrela, Landauren energia askea lortu ahal izango da, eta aurreko ataleko prozedura berdina jarraitu. Azkenik, adierazpen konputazionalari dagokionez, ordena parametro bakoitzeko bektore bana erabiliko da (Φ_{1k} eta Φ_{2k}), eta bien arteko elkarrekintzaren bitartez ordena parametroen akoplamendu bilineala erduztatuko da.

4.2.1 Neurketa-metodoa

Landauren energia askea da oraingo honetan ere azterketaren abiapuntua. Ordena parametroaren probabilitate-banaketa bi dimentsiokoa da kasu honetan, eta $\mathcal{Z}(Q_1, Q_2)$ partizio-funtzio osatugabearekin erlazionatuta dago (4.2) ekuazioak adierazi duen moduan. Horrela, Landauren energia askea —haren aldakuntza, hobeto esanda—

$$\Delta\mathcal{F}_L(Q_1, Q_2, T) = \mathcal{F}_L(Q_1, Q_2, T) - \mathcal{F} = -k_B T \ln(P(Q_1, Q_2)) \quad (4.4)$$

ekuazioaren bidez kalkula daiteke, $P(Q_1, Q_2)$ bi dimentsioko probabilitate-banaketa izanik. Azken hori ez da zuzenean simulazioetatik lortzen: aurreko atalean esan bezala, simulazioetatik ordena parametro bakoitzari dagokion —eta n_P elementudun— balio multzo bat lortzen da, eta ondoren $P(Q_1, Q_2)$ sortzen da bertako elementuetan oinarrituz.

Akoplamendu bilineala dela eta, ordena parametroen neurketak ez dira independenteak eta, beraz, probabilitateen biderketa-erregela orokorra erabili beharra dago $P(Q_1, Q_2)$ sortzeko. Horren arabera, Q_{1i} eta Q_{2j} balioak —non i eta j zenbaki osoak diren, eta neuritutako ordena parametro jakin bat adierazten duten— batera neurtzeko probabilitatea

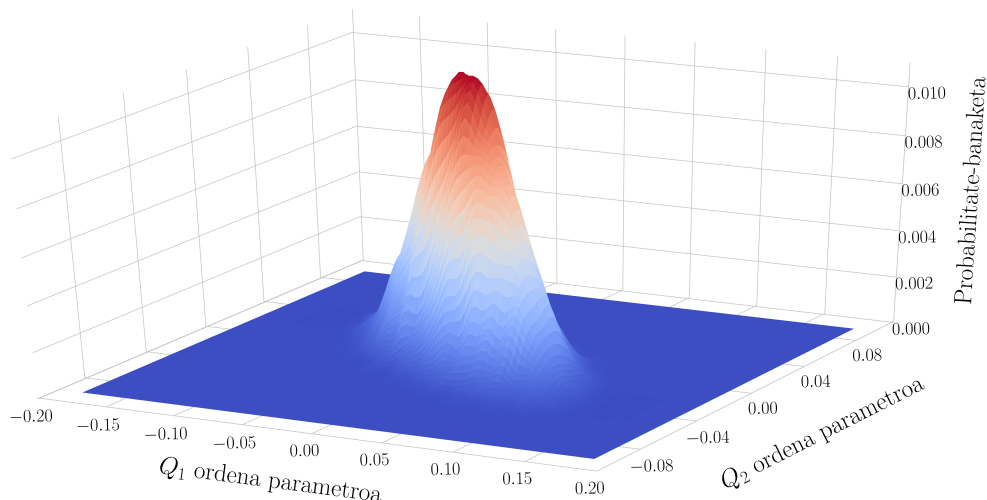
$$P(Q_{1i}, Q_{2j}) = P(Q_{1i}) P(Q_{2j}|Q_{1i}) \quad (4.5)$$

ekuazioaren bidez kalkula daiteke, non $P(Q_{1i})$ Q_{1i} neurtzeko probabilitatea den, eta $P(Q_{2j}|Q_{1i})$ Q_{1i} neurtu dela jakinik Q_{2j} neurtzeko probabilitatea [29]. Horrela, Monte Carlo simulazioetan neurtutako Q_{1i} eta Q_{2j} balio guztien arteko konbinaketa guztientzat (4.5) ekuazioa aplikatu eta bi dimentsioko probabilitate-banaketa lortzen da. Behin hori kalkulatuta, sare-puntuko Landauren energia askearen aldakuntza kalkulatzeko (4.4) ekuazioaren bidez.

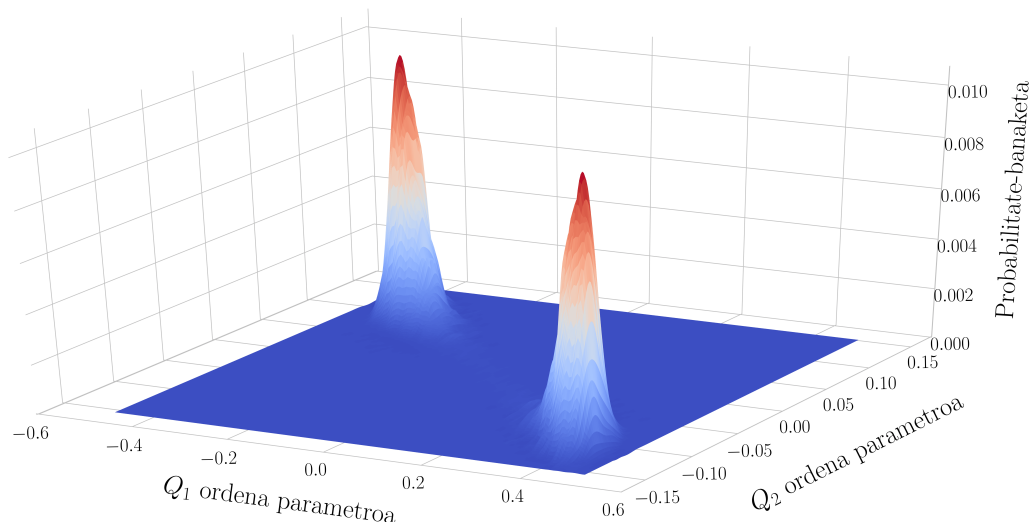
Honako hauek dira erabilitako parametroak. Aurreko atalean bezala, $L = 10$ aldedun hiru dimentsioko sare kubikoa hartu da; hamiltondarrari dagokionez, $E_{01} = E_{02} = 1.0$, $C_1 = C_2 = 2.0$ eta $\gamma = 0.5$ parametroak hautatu dira; eta simulazioan $\delta = 0.45$ zabalera parametroa, 5×10^4 urratseko termalizazioa eta 10^5 Monte Carlo urrats erabili dira. Ordena parametroen banaketa-probabilitatea lortzeko $n_P = 10^4$ neurketa egin dira, haietako bakoitzean Q_1 eta Q_2 neurtuz. Aurreko kasuan bezala, lortutako balioak jatorriarekiko simetrizatu dira ordena parametroen —lehen zein bigarren mailako— balio positibo eta negatiboak neurtzeko probabilitateak berdinak izan behar direlako (2.11) hamiltondarraren simetria dela eta.

4.2.2 Emaitzak eta eztabaida

Lehenik eta behin, ordena parametroen probabilitate-banaketa lortu da $k_B T = 3.90$ eta $k_B T = 3.25$ kasuetarako, 4.6. eta 4.7. irudietan⁴ ikus daitekeen moduan. Bi fase bereiz daitezke irudiotan: $k_B T = 3.90$ denean gainazalaren maximoa jatorrian dago, eta ordena parametroak nuluak izango dira probabilitate handiz; $k_B T = 3.25$ kasuan, berriz, gainazalak bi maximo ditu ($\pm 0.4, \mp 0.12$) puntuen inguruan, eta bi horietako bat izango da sistemaren ordena parametroak zehaztuko dituen. Horrenbestez, adierazitako bi temperaturan artean tenperatura kritikoa dagoela ondoriozta daiteke.



4.6. Irudia: Ordena parametroen $P(Q_1, Q_2)$ probabilitate-banaketa $k_B T = 3.90$ kasuan. Maximoa jatorrian dago kokatuta eta, irudi honetan ongi antzematen ez bada ere, gainazala diagonalean dago orientatuta. Hortaz, $Q_1 = Q_2 = 0.0$ neurtzeko probabilitatea da maximoa, baina diagonal horretako balio txikiak neurtzeko probabilitatea ere badago, gainazala ez baita oso zorrotza.

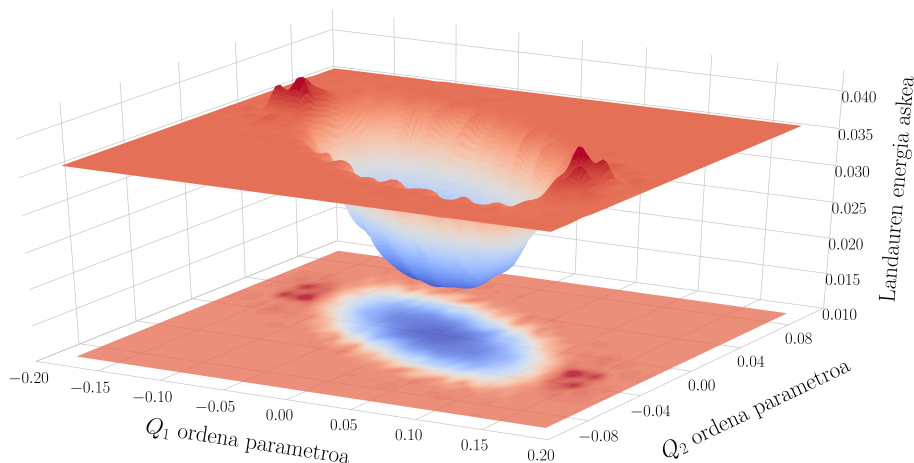


4.7. Irudia: Ordena parametroen $P(Q_1, Q_2)$ probabilitate-banaketa $k_B T = 3.25$ kasuan. Maximoak $(Q_1, Q_2) = (0.4, -0.12)$ eta $(-0.4, 0.12)$ puntuen inguruan daude, eta sistemak batari edo besteari dagokion ordena parametroen konfigurazioa izateko probabilitatea berdina da.

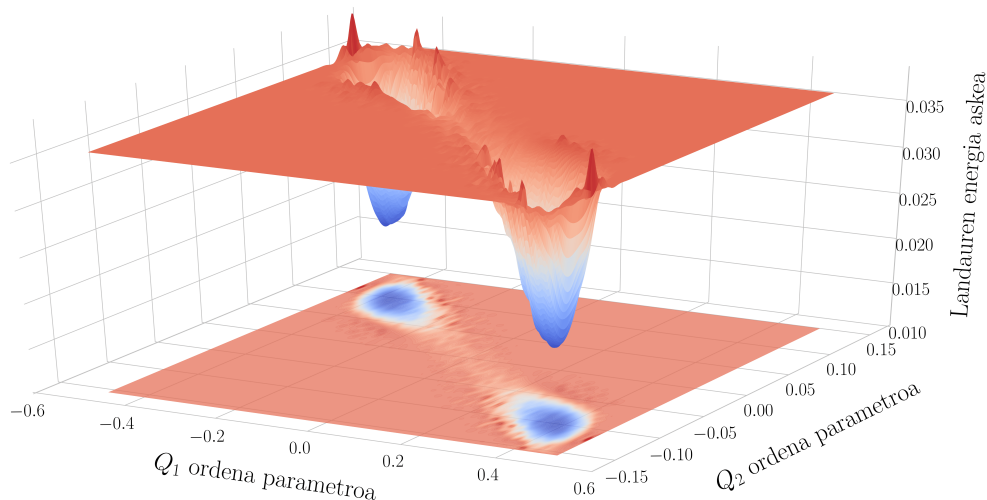
⁴ Zuzenean probabilitate-banaketa irudikatu beharrean, gainazalak leunduak izan dira interpolatuz eta SciPy liburutegiko `bisplrep` eta `bisplev` funtzioak erabiliz, `spline` funtzioetan oinarrituak [26]. Horrela aurrerago egingo den gainazalen doikuntza erraztea espero da.

Espero bezala, probabilitate-banaketek (2.7) hamiltondarraren simetria berdina dute, hau da, probabilitate-banaketaren balioa ordena parametroen aldibereko zeinu aldaketaren aurrean aldaezina da. Hori, batez ere, 4.7. irudian antzeman daiteke. Ondorioz, temperatura baxuko fasean ordena parametroek aurkako zeinua dute, eta sistemak konfigurazio bat edo bestea —hau da, Q_1 positibo eta Q_2 negatiboduna edo alderantzizkoa— izateko probabilitate berdina dago.

Probabilitate-banaketak lortuta, sare-puntuako Landaren energia askea kalkulatu da (4.4) ekuazioaren bidez, 4.8. eta 4.9. irudietan adierazi den moduan. Simetria eta orekako ordena parametroei dagokienez, probabilitate-banaketaren grafikoetatik ateratako ondorio berberak atera daitezke hemen. Fase-trantsizioari dagokionez, honako hau esan liteke: temperatura jaitsi ahala, 4.8. irudiko putzua estutzen eta diagonalean zehar hedatzen hasiko da; temperatura kritikora iristean, putzuaren bi muturrak apur bat sakondu eta minimo bihurtuko dira; eta temperaturak behera jarraitu ahala, minimoak are gehiago sakondu eta elkarrengandik aldentuko dira.



4.8. Irudia: Sare-puntuako Landaren energia askea $k_B T = 3.90$ kasuan. Gainazalaren minimoak zehazten ditu ordena parametroak eta, beraz, $Q_1 = Q_2 = 0.0$ neurtuko da probabilitate handiz. Dena dela, putzua zabala da eta jatorriaren inguruko balio txikiak neurtzeko probabilitatea ere badago.



4.9. Irudia: Sare-puntuako Landaren energia askea $k_B T = 3.25$ kasuan. Gainazalaren minimoak $(Q_1, Q_2) = (0.4, -0.12)$ eta $(-0.4, 0.12)$ puntuaren inguruan daude, eta sistemak batari edo besteari dagokion ordena parametroen konfigurazioa izateko probabilitatea berdina da.

Aurreko atalean bezala, hurrengo pausua Landauren energia askea adierazten duten gainazalen doikuntza polinomikoa egitea da, horrela, tenperatura bakoitzeko a_2^* koefizientea osatzen duten a_2 , b_2 eta c lortuz, tenperatura kritikoa ondorioztatu ahal izateko. Horrenbestez, gainazalak (2.7) ekuazioak adierazitako polinomioen bidez hurbildu dira⁵ $k_B T \in [3.10, 3.90]$ tartean.

Ordena parametro bakarreko kasuan bezala, doikuntzaren egokitasuna tenperaturaren arabera izan da. Tenperatura altuetan, ordena parametroak txikiak diren heinean, gainazalak ondo egokitu dira (2.7) ekuazioak adierazitako polinomioetara; aldiz, doikuntzaren errorea handiagoa izan da tenperatura baxuan. Hori hobetzeko helburuaz, maila altuagoko gaiak⁶ hartu dira, baina ez da hobekuntza nabaririk behatu eta (2.7) adierazpeneko gaiak, besterik ez, kontsideratzea erabaki da. Aurreko atalean egin den moduan, doikuntza bakoitzari dagokion determinazio-koefiziente moldatua⁷ kalkulatu eta 4.2. taulan bildu da. Ordena parametro bakarreko kasuarekin alderatuz, oro har doikuntzaren errorea handiagoa izan da bi ordena parametroko kasu honetan.

$k_B T$	R_{adj}^2
3.10	0.6929
3.20	0.7724
3.25	0.8271
3.30	0.8916
3.40	0.9253
3.50	0.9292
3.60	0.9574
3.70	0.9712
3.80	0.9685
3.90	0.9727

4.2. Taula: Determinazio-koefiziente moldatua $k_B T$ balioaren arabera. Tenperatura jaitsi ahala koefizientea batetik urruntzen dela beha daiteke, eta horrek tenperatura baxuetan Landauren energia askearen gainazalak doitzea zailagoa dela adierazten du.

Horrela, tenperatura bakoitzari dagozkion a_2 , b_2 eta c koefizienteak lortu eta a_2^* kalkulatu da; tenperatura kritikoa ondorioztatzeke helburuaz, koefiziente horiek $k_B T$ energiaren menpe adierazi dira 4.10. irudian. Lortutako kurba ez da lineala aztertutako tarte osoan zehar, baina tenperatura kritikoaren inguruko $k_B T = 3.25$ eta 3.6 balioen artean nolabaiteko joera lineala duela beha daiteke. Hortaz, ordena parametro bakarreko kasuan teoriak

⁵ Doikuntza polinomikoa NumPy liburutegiko `lstsq` funtzioaren bidez egin da, karratu minimoen printzipioan oinarritua [27]. Horretarako, 4.8. eta 4.9. irudietako gainazalen zati laua —probabilitate nuludun puntuek osatzen dutena, hain zuzen ere— arbuiatu eta gainerako puntuak baino ez dira aintzakotzat hartu.

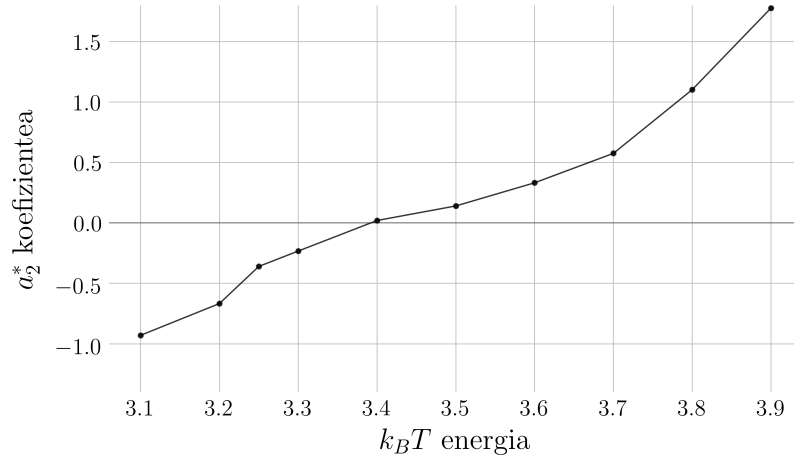
⁶ Zehazki, $Q_1^2 Q_2^2$, $Q_1^3 Q_2$ eta $Q_1^4 Q_2^2$ gaiak; ohartu hiruek ahalbidetzen dutela Landauren energia askea ordena parametroen aldibereko zeinu aldaketarekiko aldaezina izatea.

⁷ Xehetasunak alde batera utziz, determinazio-koefiziente moldatua (*adjusted coefficient of determination* ingelesez) aldagai aske bat baino gehiago dagoen kasuetan erabiltzen da eta doikuntzaren egokitasuna adierazten du, ohiko R^2 determinazio-koefizienteak bezalaxe. Honako hau da bere definizioa:

$$R_{adj}^2 = 1 - (1 - R^2) \frac{n - 1}{n - m - 1},$$

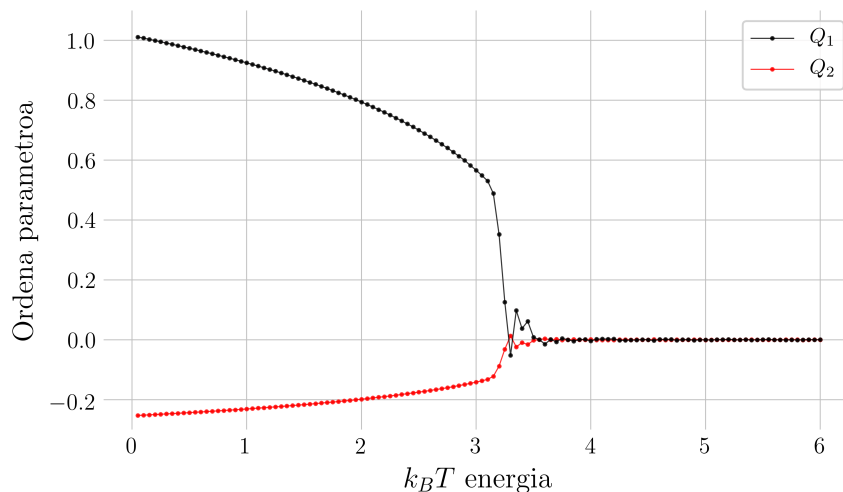
non R^2 determinazio-koefizientea, m aldagai aske kopurua eta n puntu kopurua diren [28].

aurrezandako $a_2(T)$ funtzioaren linealtasuna bi ordena parametroko kasura ere orokortu daiteke, oraingo honetan $a_2^*(T)$ izanik sistemaren fasea zehazten duen funtzioa.



4.10. Irudia: Gainazalen doikuntzetatik ondorioztatutako a_2^* koefizientea $k_B T$ energiaren menpe irudikatuta. Landauren teoriaren arabera, T_c tenperatura kritikoa kurba eta ardatz horizontalaren arteko ebaki-puntuari dagokio, hortaz, $k_B T_c = 3.39$ da kasu honetan.

Atal honekin bukatzeko, fase-trantsizioaren Monte Carlo simulazioak egin dira tenperatura kritikoa zuzenean neurketa Landauren teoriaren bidez ondorioztatu denarekin alderatzeko, ordena parametro bakarreko kasuan egin den bezalaxe. Oraingo honetan 5×10^5 urratseko termalizazioa eta 5×10^6 Monte Carlo urrats erabili dira, gainontzeko parametroak atal honen sarreran zehaztutakoak izanik. Horrela, sistemaren lehen eta bigarren mailako ordena parametroak neurtu dira $k_B T \in (0.0, 6.0]$ tartean $\delta T = 0.05$ urratsa kontsideratuz, 4.11. irudian adierazi den moduan.



4.11. Irudia: Sistemaren ordena parametroak $k_B T$ energiaren menpe irudikatuta. Fase-trantsizioa garbi antzeman daiteke: tenperatura altuetan ordena parametroak nuluak dira, tenperatura kritikoa $k_B T_c = 3.30$ da, eta tenperatura hori baino baxuagoa denean ordena parametroek balio ez-nuluak hartzen dituzte, aurkako zeinudunak.

Ordena parametroek uneoro aurkako zeinua dutela beha daiteke, (2.10) ekuazioak⁸

⁸ Ekuazio horren arabera, b_2 eta c koefizienteek zeinu berdina izan behar dute lehen eta bigarren mailako ordena parametroek aurkako zeinua izan dezaten, eta halaxe gertatu da egindako doikuntza guztien kasuan.

adierazi duen moduan. Halaber, argi dago bigarren mailako ordena parametroaren balio absolutua lehen mailakoarena baino nabari txikiago dela, oinarri teorikoko 2.4.2. azpiatlean aipatu bezala.

Tenperatura kritikoari dagokionez, zuzeneko neurketa eta Landauren teoriaren bidez ondorioztatutako $k_B T_c = 3.30$ eta $k_B T_c = 3.39$ balioak ez datoz bat, ordena parametro bakarreko kasuan gertatu denaren antzera. Oraingoan doikuntzaren errorea handiagoa izan da eta baliteke, beraz, horrek Landauren teoriaren bidez kalkulaturako tenperatura kritikoan eragina izatea; hala ere, aurreko kasuan bezala, eragile nagusia simulazioetatik lortutako Landauren energia askearen forma da. Hori garbi ikus daiteke, esaterako, $k_B T = 3.25$ kasuari erreparatzean: 4.9. irudiaren arabera, lehen mailako ordena parametroa ± 0.4 balioen inguruan dago, baina 4.11. irudian, berriz, ordena parametro horren balioa ± 0.1 ingurukoa dela ikus daiteke. Antzeko zerbait gertatu da $k_B T = 3.30$ balioarekin ere: Landauren energia askeak bi minimo simetriko dituela behatu da, ondorioz, dagokion a_2^* koefizientea nulua izan beharrean negatiboa da eta, horrenbestez, 4.10. iruditik ondorioztatutako tenperatura kritikoa $k_B T = 3.30$ baino gorago dago.

Aurreko atalean esan bezala, ordena parametroak tenperatura kritikoren inguruko eskualdean dituen fluktuazio kritikoen ondorio da Landauren energia askean behatutako arazo hori eta, hein batean, tenperatura horren inguruan egindako neurketen termalizazio eta Monte Carlo urrats kopurua handituz konpon daiteke. Hala eta gutiz ere, tenperatura kritikoen arteko diferentzia ez da handia izan, eta Landauren teoriaren bidez kalkulaturakoa ontzat hartuko da, beraz.

4.3 Emaitzen inguruko zenbait ohar

Azterketa osoaren abiapuntua Landauren energia askearen lorpena izan da eta gai horrekin emango zaio, beraz, hasiera atal honi ere. Hasteko, Landauren energia askea lortzeko erabilitako prozeduraren mugapen bat azpimarratu nahi da: lortutako funtzioen —nola kurba hala gainazalen— definizio-eremua txikia dela, hau da, Landauren energia askea ordena parametroen tarte txiki baterako baino ez dela lortzen. Prozedura ordena parametroen probabilitate-banaketan oinarritzen delako gertatzen da hori, Monte Carlo simulazioetan neurtu ez diren balio guztiei probabilitate nulua dagokie eta ez diote inolako ekarpenik egiten Landauren energia askeari. Bi ordena parametroko kasuan garbi ikus daiteke hori: esperotako minimoez gain, gainazalek zati lau bat dute, teoriar aurkeztutako (2.7) adierazpenarekin inongo zerikusirik ez duena, noski.

Mugapen horrek ez du eragozpen handirik sortu tenperatura altuko eta fase-trantsizioaren inguruko neurketetan —hots, ordena parametroa oso handia ez denean—, baina tenperatura baxuetakoetan bai. Kasu horietan, lortutako kurba eta gainazalak ez dira leunak izan: probabilitate handieneko balioen inguruan zentratutako bi minimo zorrotz eta sakon baino ez dira lortu, elkarrengandik oso urrunduak; eta horixe da, nagusiki, tenperatura baxuetako doikuntzetan errore handiak izatearen arrazoia.

Gisa honetako arazoak konpontzeko *umbrella sampling* deritzon teknika erabil liteke, zeinak Monte Carlo simulazioan probabilitate txikiko konfigurazioak lagintzea ahalbidetzen duen [30].

Horrez gain, Landauren energia askearen lorpenean garrantzitsua izan den faktore bat Monte Carlo simulazioen iterazio kopurua da, zeinak Landauren teoria eta zuzeneko neurketaren bitartez ondorioztatutako tenperatura kritikoen arteko diferentzian eragina izan duen. Landauren energia askearen minimoen kokapenek adierazitako ordena parametroa —bere balio absolutua— zuzeneko neurketak adierazitakoa baino handiagoa izan da fase-trantsizioaren inguruko zenbait tenperaturatan, eta horrexegatik izan dira desberdinak tenperatura kritikoen bi balioak.

Hortaz, erdietsitako Landauren energia askea ez da guztiz zuzena izan, eta 3.2.2. azpiatalean aipatutako fluktuazio kritikoen eragina da hori —baita sistemaren neurri finituarena ere—, arazoa tenperatura kritikoen inguruko eskualdean behatu baita batez ere. Simulazioaren iterazio kopurua txikia denean fluktuazio horien eragina nabariagoa da, hau da, neurtutako ordena parametroak balio tarte handiago baten fluktuatzen du eta, ondorioz, probabilitate-banaketak —eta Landauren energia askeak, beraz— zabalagoak dira; horrek eragiten du aurreko paragrafoan aipatutako arazoa. Hortaz, konponbidea Landauren energia askea lortzeko egindako simulazioen iterazio kopurua handitzea dela ondorioztatu da. Dena dela, 4.5. zein 4.11. irudian garbi ikus daiteke fase-trantsizioaren inguruko tenperatura altuetan ordena parametroak fluktuatu egiten duela, hau da, zuzeneko neurketen kasuan ere fluktuazio kritikoen eragina dagoela, bertako iterazio kopurua handiagoa bada ere.

Atal honekin amaitzeko, bi ordena parametroko kasuaren inguruko ohar bat aipatuko da. Lehenik, azpimarratu beharra dago 4.2.1. azpiatalean proposatutako neurketa-metodoaren bidez lortutako Landauren energia askea eta oinarri teorikoan aurkeztutako (2.7) ekuazioa bateragarriak direla, eta neurketa-metodoa ontzat eman da, beraz. Ordena parametro bakarreko kasuan bezala, doikuntzaren errorea handitu egin da tenperatura jaitsi ahala, baina kasu honetan maila altuko gaien ekarpenak ez du hobekuntza handirik eragin. Noski, erabilitako $Q_1^2 Q_2^2$, $Q_1^3 Q_2$ eta $Q_1^4 Q_2^2$ gaiez gain, beste hainbaten ekarpena ere kontsidera daiteke —hala nola gainerako laugarren eta seigarren mailako gaiena zein maila altuagokoena— eta interesgarria izango litzake, beraz, beste gai horiek Landauren energia askearen doikuntzan duten eragina aztertzea.

5. Kapituluia

Ondorioak

Lan honetan ϕ^4 hamiltondarrak erduztatutako sistemaren fase-trantsizioa aztertu da Landauren teoriaren bitartez. Azterketa tenperatura bakoitzeko Landauren energia askearen lorpenean eta haren ondorengo doikuntzan oinarritu da, eta ordena parametro bakarreko zein bi ordena parametroko kasuetarako egin da. Azken hori aztertu ahal izateko, Landauren energia askea lortzea ahalbidetzen duen metodoaren hedapen bat proposatu da eta, bertatik lortutako emaitzak teoriak auresandakoarekin bateragarriak izan diren heinean, zuzena dela ondorioztatu da.

Monte Carlo simulazioak erabili dira tenperatura bakoitzeko Landauren energia askea kalkulatu zein sistemen fase-trantsizioak simulatzeko, eta erdietsitako emaitzek Landauren teoriaren inguruko zenbait xehetasun argitzeko balio izan dute. Ordena parametro bakarreko kasuan, argi ikusi da energia askea adierazten duen berretura-seriea laugarren gaian ebaki ahal izateko ordena parametroak txikia izan behar duela, seigarren mailako gaiak aintzakotzat hartzea beharrezkoa izan baita fase-trantsizioaren ostean tenperatura jaitsi ahala, hau da, ordena parametroaren balio absolutua handitu ahala. Sistemaren fasea zehazten duen a_2 koefizientearen tenperaturarekiko menpekotasuna ere aztertu da, eta tenperatura kritikoaren inguruan joera lineala duela behatu.

Bi ordena parametroko kasua aztertzeke ordena parametroen arteko akoplamendu bilineala duen energia askea proposatu da oinarri teorikoan, eta simulazioetatik lortutako Landauren energia askea bateragarria izan da horrekin. Espero bezala, doikuntzan izandako errorea handitu egin da tenperatura jaitsi ahala, eta —ordena parametro bakarreko kasuan ez bezala— maila altuagoko gaien ekarpenak ezin izan du errore hori txikitu. Sistemaren fasea zehazten duen a_2^* koefizientearen menpekotasunari dagokionez, tenperatura kritikoaren inguruko tarte estu baten joera lineala duela ikusi da, ordena parametro bakarreko kasuan gertatu denaren antzera.

Landauren teoriak fase-trantsizioaren tenperatura kritikoa kalkulatzeko ahalbidetu du aztertutako bi kasuetan, baina ordena parametroaren zuzeneko neurketak adierazitakoarekin alderatu denean, erdietsitako balioa zuzena ez dela behatu da. Hori Landauren energia askea lortzeko egindako simulazioetan ordena parametroak izandako fluktuazio kritikoen eragina dela ondorioztatu da, baita arazoa ekiditeko tenperatura kritikoaren inguruko simulazioetan termalizazio eta Monte Carlo urrats kopurua handitu beharko litzakeela ere. Garbi ikusi da, beraz, sistemaren portaera kritikoak neurketetan duen eragina eta, dudarik gabe, hurrengo lan baten kontuan hartu beharreko gaia da.

Jakina, sakontzeke geratutako gaiak ez dira gutxi izan, eta lanari amaiera emateko haietako bi aipatuko dira jarraian. Batetik, interesgarria izango litzake bi ordena parametroko kasuan energia askearen beste aldaeraren bat aztertzea, hau da, ordena parametroen arteko akoplamendu bilinealaren ordeztu beste nolabaitekoa kontsideratzea, esaterako, bikoadratikoa. Noski, horretarako ϕ^4 hamiltondarreko akoplamendua ere aldatu beharko litzake. Bestetik, C eta E_0 parametroen arteko zatiduraren bi limiteak azter litezke ordena-desordena eta fase-trantsizio desplaziboak ikertu eta alderatu ahal izateko, lan honetan ez baitzaio arreta berezirik jarri gai horri.

Dena dela, lanaren balioespen orokorra ona da. Landauren teoriaren inguruko kontzeptu nagusiak simulazioetatik lortutako emaitzen bidez egiaztatu ahal izan dira ordena parametro bakarreko kasuan, eta kontzeptuok bi ordena parametroko kasura ere orokortu daitezkeela behatu da; lanaren hasieran finkatutako bi helburuak bete dira. Horrez gain, fase-trantsizioen gaia landu da, haien sailkapena, simetria-apurketak, berretzaile kritikoak eta unibertsaltasunaren inguruko zenbait orokortasun aipatuz. Eta, bukatzeko, fisika estatistikora aplikatutako Monte Carlo metodoen funtsa ulertu eta konputazioak alor horretako problemak —analitikoki ebatz ezin daitezkeenak— era sinplean ebazteko aukera eskaintzen duela argi ikusi da.

Bibliografia

- [1] L. D. Landau, *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **7**, 19 (1937). Ingelesera itzulia: L. D. Landau, *Collected Papers* (Nauka, Moscow, 1969), 1. bol., 234–252 orr.
- [2] H. N. Fang, R. Zhang, B. Liu, Z. K. Tao, M. W. Xiao, X. F. Wang, Z. L. Xie, X. Q. Xiu eta Y. D. Zheng, *AIP Adv.* **3**, 072136 (2013).
- [3] F. J. Romero, M. C. Gallardo, S. A. Hayward, J. Jiménez, J. del Cerro eta E. K. H. Salje, *J. Phys.: Condens. Matter* **16**, 2879 (2004).
- [4] V. B. Shirokov eta M. V. Talanov, *Acta Cryst. Sec. B* **75**, 978 (2019).
- [5] S. Artyukhin, K. T. Delaney, N. A. Spaldin eta M. Mostovoy, *Nat. Mater.* **13**, 42 (2014).
- [6] V. L. Ginzburg eta L. D. Landau, *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **20**, 1064 (1950). Ingelesera itzulia: L. D. Landau, *Collected Papers* (Pergamon Press, Oxford, 1965), 546-568 orr.
- [7] S. Radescu, I. Etxebarria eta J. M. Perez-Mato, *J. Phys.: Condes. Matter* **7**, 585 (1995).
- [8] J. Yeomans, *Statistical Mechanics of Phase Transitions* (Oxford University Press, New York, 1992), 1-63 orr.
- [9] G. Jaeger, *Arch. Hist. Exact Sci.* **53**, 51 (1998).
- [10] S. Blundell eta K. Blundell, *Concepts in Thermal Physics* (Oxford University Press, Oxford, 2010), 320-322 orr.
- [11] L. Landau eta E. Lifshitz, *Statistical Physics*, 2. ed. (Pergamon Press, Oxford, 1969), 424-433 orr.
- [12] J. Sethna, *Statistical Mechanics: Entropy, Order Parameters, and Complexity* (Oxford University Press, Oxford, 2007), 191-194 orr.
- [13] R. Pathria eta P. Beale, *Statistical Mechanics*, 3. ed. (Butterworth Heinemann Elsevier, Amsterdam, 2011), 401-460 orr.
- [14] E. Guggenheim, *J. Chem. Phys* **13**, 253 (1945).
- [15] M. Gitterman eta V. Halpern, *Phase Transitions: A Brief Account With Modern Applications* (World Scientific Publishing, Singapore, 2004), 25-27 orr.

- [16] T. Malcherek, in *EMU Notes In Mineralogy*, by R. Miletiched (Eötvös University Press, Budapest, 2005), 139-140 orr.
- [17] E. K. H. Salje, S. A. Hayward eta W. T. Lee, *Acta Cryst. Sec. A* **61**, 3 (2005).
- [18] R. A. Cowley, *Adv. Phy.* **29**, 1 (1980).
- [19] P. Tolédano, *EPJ Web Conf.* **22**, 00007 (2012).
- [20] I. Etxebarria, J. M. Perez-Mato eta P. Boullay, *Ferroelectrics* **401**, 1 (2010).
- [21] S. Watanabe eta T. Usui, *Prog. Theor. Phys.* **73**, 6 (1985).
- [22] E. K. H. Salje, *Acta Cryst. Sec. A* **47**, 453 (1991).
- [23] M. Newman eta G. Barkema, *Monte Carlo Methods In Statistical Physics* (Oxford University Press, New York, 1999), 3-82 orr.
- [24] U. Wolff, in *Computational Physics: Selected Methods, Simple Exercises, Serious Applications* by K. Hoffmann eta M. Schreibered (Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, 1996), 254 or.
- [25] A. Savitzky eta M. J. E. Golay, *Anal. Chem.* **36**, 1627 (1964).
- [26] P. Virtanen, R. Gommers, T. E. Oliphant, M. Haberland, T. Reddy, D. Cournapeau, E. Burovski, P. Peterson, W. Weckesser, J. Bright *et al.*, *Nat. Methods* **17**, 261 (2020).
- [27] S. van der Walt, S. C. Colbert eta G. Varoquaux, *Comput. Sci. Eng.* **13**, 22 (2011).
- [28] D. Larose eta C. Larose, *Data Mining And Predictive Analytics*, 2. ed. (John Wiley & Sons, Hoboken, 2015), 236-241 orr.
- [29] J. Freund eta G. Simon, *Estadística Elemental*, 8. ed. (Prentice-Hall Hispanoamericana, México, 1994), 140 or.
- [30] G. M. Torrie eta J. P. Valleau, *J. Comput. Phys.* **23**, 187 (1977).