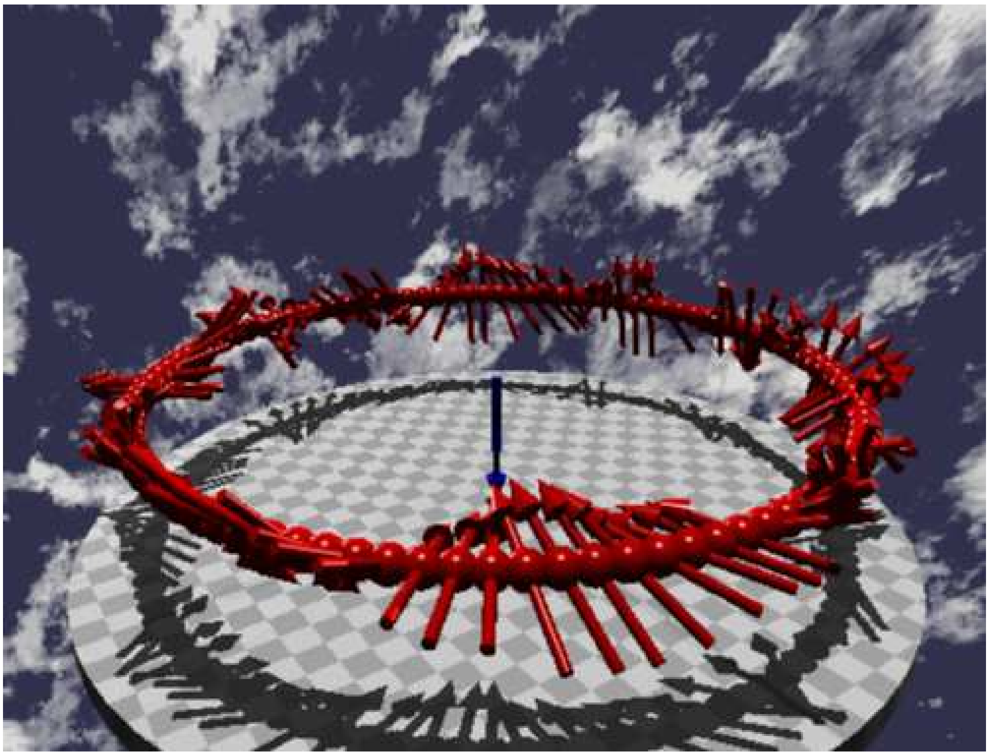
Spin-Systeme



Gliederung:

- Modellierung
- Ergodizität und Konvergenz
- Anwendungen
- Ausblick

Deterministische Spin-Dynamik

Kaum zu glauben! - **Deterministische** dynamische Gleichungen können **kanonische** Verteilungen produzieren!

Trick:

- Um ein **kanonisches** Ensemble (T, N, V const., $\frac{dE}{dt} \neq 0$) in $\Gamma(q,p)$ zu bekommen, erzeuge man ein

  mikrokanonisches Ensemble (E', N', V' const.) in einem $\Gamma(q,p,\zeta)$!

- Unter der Bedingung, daß sich die Gleichgewichtsverteilung als $\rho(q,p,\zeta) \propto \exp\{-\beta\,[H(q,p) + g(\zeta)]\}$ darstellen läßt,

  simuliert der zusätzliche Freiheitsgrad ζ *in* $\Gamma(q,p,\zeta)$ *das Wärmebad "aus der Sicht" von* $\Gamma(q,p)$*!*

Modellierung

Erweiterung der KBB[a]-Methode auf Spin-Systeme

- Spin Systeme haben keine kinetische Energie
- Formulierung der KBB-Methode in nicht-kanonischen Variablen
- Zusätzliche Nebenbedingung: $\left|\dot{\vec{S}}_i\right| = \dot{\vec{S}}_i \cdot \vec{S}_i + \vec{S}_i \cdot \dot{\vec{S}}_i = 0$

$$
\begin{aligned}
\frac{d}{dt}\,\vec{S}_i &= \frac{\partial H}{\partial \vec{S}_i} \times \vec{S}_i - h(\zeta)\,\vec{F}_i\left(\vec{S}_i\right) \\
\vec{F}_i\left(\vec{S}_i\right) &= \vec{A}_i - \vec{S}_i \frac{\left(\vec{A}_i \cdot \vec{S}_i\right)}{S_i^2}
\end{aligned}
$$

(Postulierte) Phasenraumdichte:

$$
f\left(\vec{S}_i, \zeta\right) = \exp\left\{-\frac{1}{T}\left[H\left(\vec{S}_i\right) + \frac{g(\zeta)}{\alpha}\right]\right\}
$$

[a] D. Kusnezov, A. Bulgac, W. Bauer, Ann. of Phys. **204** (1990) 155

Zeitentwicklung von $f(\vec{S}_i, \zeta)$ via generalisierter *Liouville*-Gleichung:

$$\frac{d}{dt}\, f(\vec{S}_i, \zeta) \quad = \quad \frac{\partial f}{\partial t} + \sum_{j=1}^{3N} \frac{\mathcal{D}(f \dot{S}_j)}{\mathcal{D} S_j} + \frac{\partial (f \dot{\zeta})}{\partial \zeta}$$

Die Nebenbedingung $||\vec{S}_i|| = const$ wird dabei von der *tangential wirkenden* Phasenraumableitung

$$\frac{\mathcal{D}\vec{X}}{\mathcal{D}S_j} \quad = \quad \frac{\partial \vec{X}}{\partial S_j} - \frac{S_j}{S^2}\left(\frac{\partial \vec{X}}{\partial \vec{S}} \cdot \vec{S}\right)$$

erfüllt! Mit dem Ansatz $\frac{d\dot{\zeta}}{d\zeta} = 0$ erhält man die Bewegungsgleichung für ζ

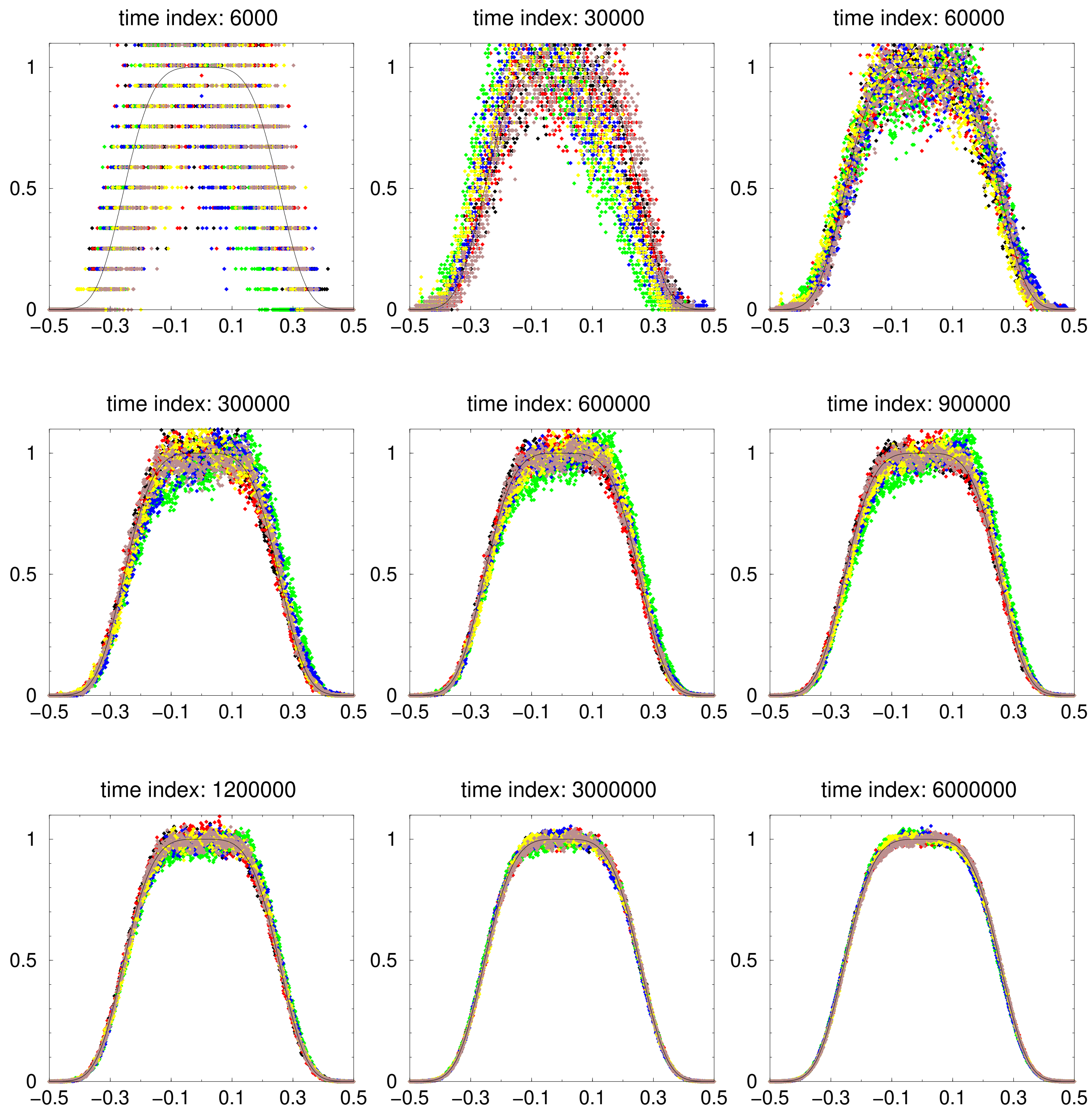
$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt}\,\zeta \quad &= \quad \alpha \sum_i \left(\frac{\partial\, H}{\partial\, \vec{S}_i} \cdot \vec{F}_i - T \frac{\partial}{\partial\, \vec{S}_i} \cdot \vec{F}_i \right) \\
h(\zeta) \quad &= \quad \frac{dg(\zeta)}{d\zeta}
\end{aligned}$$

Über die Kopplung $h(\zeta)$ kann die *zu erwartende* thermische Verteilung des Dämons ζ eingestellt werden. Z.B.

$$\begin{aligned}
h(\zeta) \quad &= \quad \zeta^3 \\
f\left(\vec{S}_i, \zeta\right) \quad &= \quad \exp\left\{ -\frac{1}{T}\left[H\left(\vec{S}_i\right) + \frac{\zeta^4}{4\alpha} \right] \right\}
\end{aligned}$$

Ergodizität

Thermische Verteilung von 6 Dämonen



Konvergenz

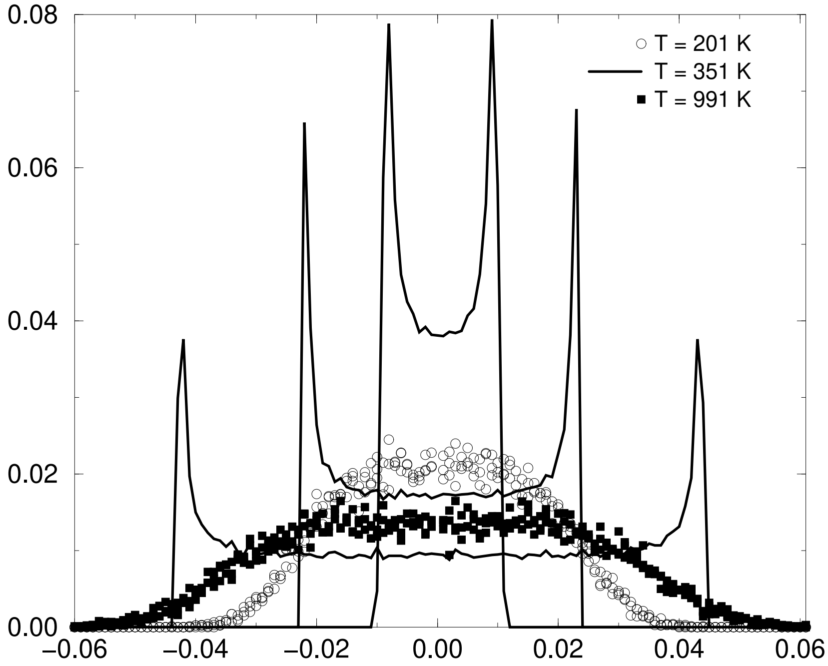
Verbesserung der Konvergenzeigenschaften via ...

- Erweiterung um zusätzliche Dämonen-Freiheitsgrade
- Optimierung der Ankopplung an das Wärmebad

Konvergenz

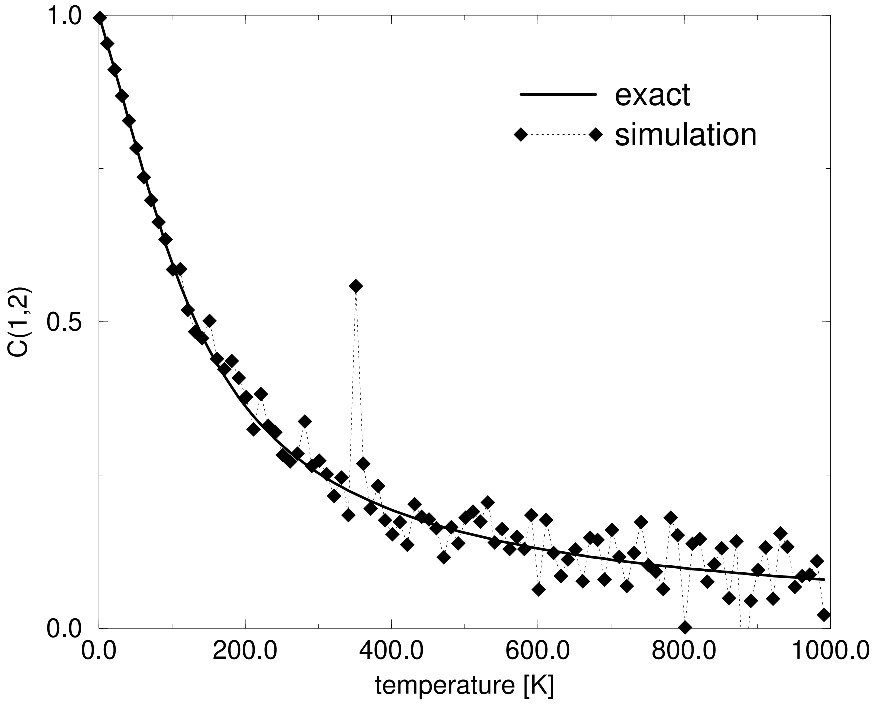
Spin dimer – thermal distribution of 3 demons

effect of fixed coupling parameter



Spin dimer – pair correlation function

fixed heat bath coupling



Konvergenz

- Ankopplung zu klein $\longrightarrow$ Dämon entkoppelt zu isolierter Mode im Phasenraum
  $\Longrightarrow$ System verhält sich nicht ergodisch und kann kein thermodynamisches Gleichgewicht erreichen!

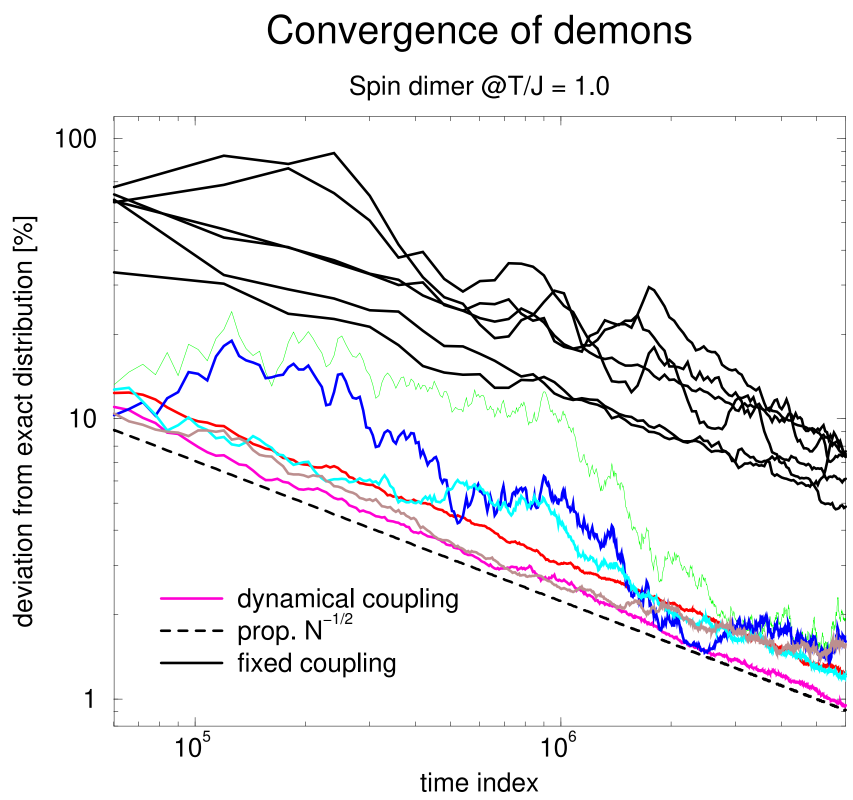
- Ankopplung zu groß $\longrightarrow$ Numerik wird ungenau bzw. langwierig
  $\Longrightarrow$ System verhält sich ergodisch; jedoch zu großer Rechenaufwand!

Optimierung der Ankopplung an das Wärmebad

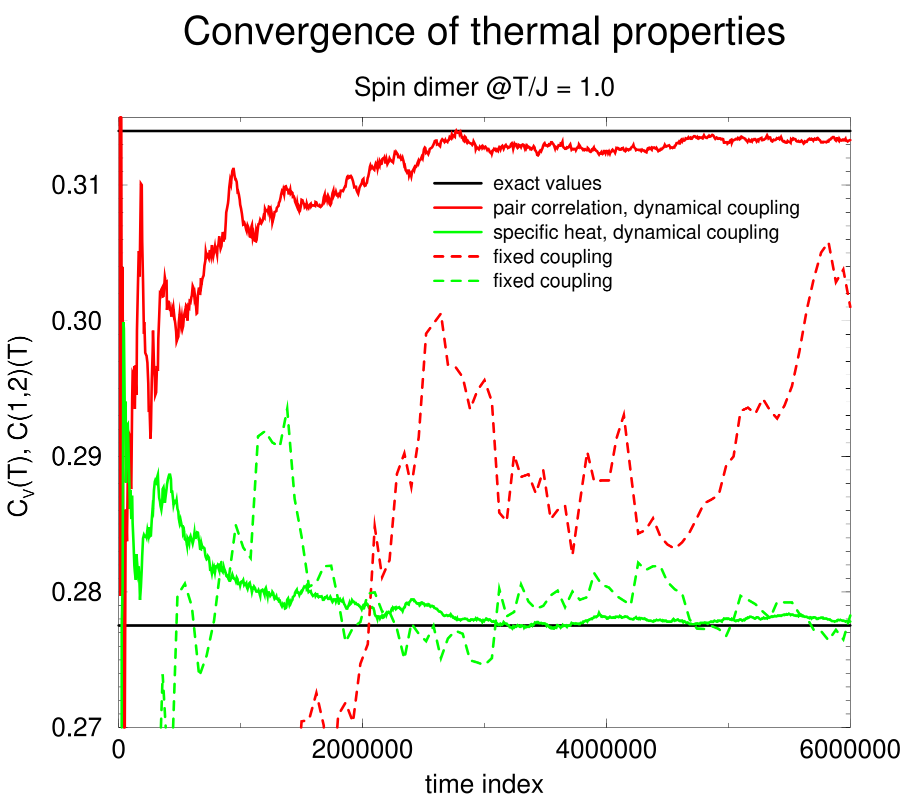
$$\alpha(t_N) \quad = \quad \frac{1}{T}\sum_{i=1}^{T}\alpha(t_i)\cdot\exp\{s - N(t_i)\}$$

mit
$T = \sum_{i=1}^{N-1} t_i$,
$s = 1.0 \,..\, 2.0$,
$N(t_i)$ = Anzahl der Integrationsschritte pro Zeitintervall t_i

Konvergenz

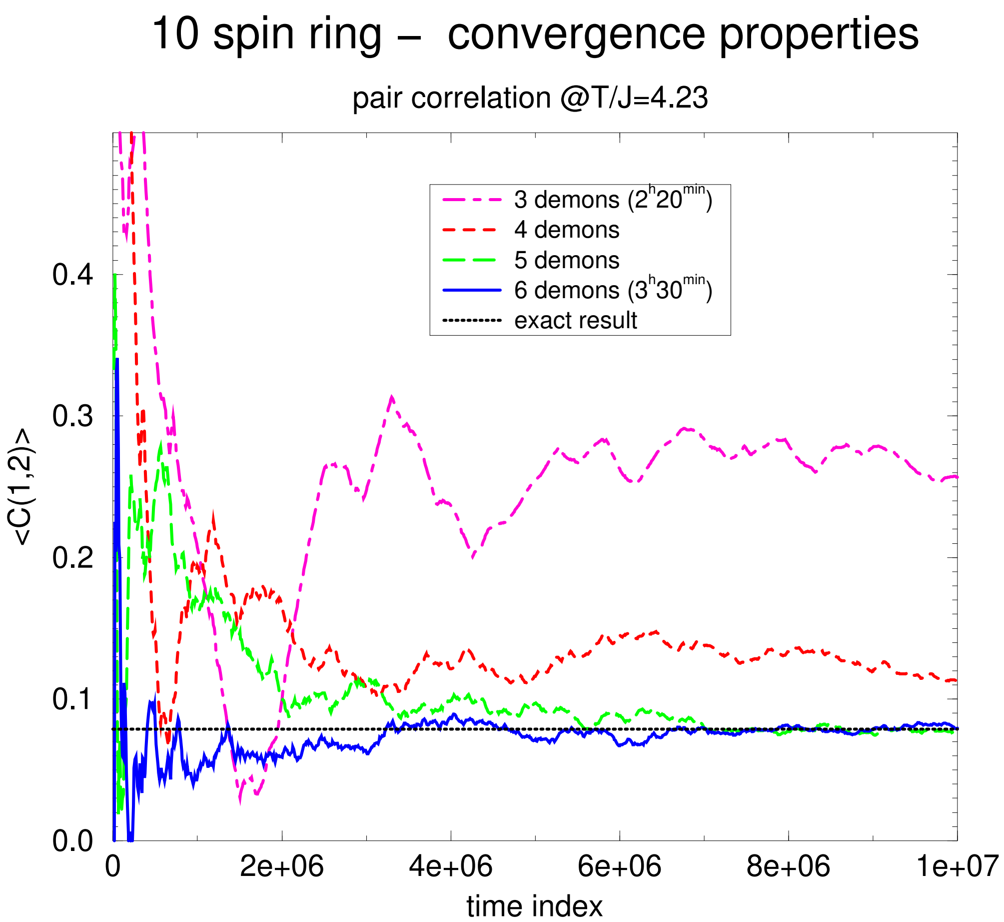


Convergence of demons
Spin dimer @T/J = 1.0
deviation from exact distribution [%]
100
10
1
10^5
10^6
time index
dynamical coupling
prop. $N^{-1/2}$
fixed coupling



Convergence of thermal properties
Spin dimer @T/J = 1.0
$C_V(T)$, C(1,2)(T)
0.31
0.30
0.29
0.28
0.27
0
2000000
4000000
6000000
time index
exact values
pair correlation, dynamical coupling
specific heat, dynamical coupling
fixed coupling
fixed coupling

Konvergenz


10 spin ring – convergence properties
pair correlation @T/J=4.23
3 demons (2h20min)
4 demons
5 demons
6 demons (3h30min)
exact result
<C(1,2)>
0.0
0.1
0.2
0.3
0.4
0
2e+06
4e+06
6e+06
8e+06
1e+07
time index

Anwendung

Heisenberg-Modell

$$H\left(\vec{S}^{\alpha}\right) = -\frac{1}{2}\sum_{\alpha,\delta} J_{\delta}\vec{S}^{\alpha}\cdot\vec{S}^{\alpha+\delta} - \frac{1}{2}g\mu_B\sum_{\alpha}\vec{H}\cdot\vec{S}^{\alpha} - D\sum_{\alpha}(S_z^{\alpha})^2$$

$\alpha = 1...N, \delta \in \{NN\}$
$\vec{H}$ = externes Magnetfeld
J_{δ} = Kopplungskonstanten
$J_{\delta} > 0$ für ferro-, $J_{\delta} < 0$ für antiferromagnetisch
g = g-Faktor
μ_B = Bohr-Magneton
D = Anisotropie-Konstante

Interessanter Spezialfall ...

- Ein-dimensionale (offene) Spin-Kette mit Nächster-Nachbar-Wechselwirkung
- Zustandsintegral läßt sich exakt berechnen (*Fisher*, 1963), und damit auch ...
- die spezifische Wärme $C_V(T)$, die Paarkorrelationen $C(i,j)(T)$ und die statische Suszeptibilität $\chi(H=0,T)$

Observablen

- Magnetisierung:

$$M(T) = \frac{1}{N} \left\langle \left[(\sum_{i=1}^{N} S_x^i)^2 + (\sum_{i=1}^{N} S_y^i)^2 + (\sum_{i=1}^{N} S_z^i)^2 \right]^{1/2} \right\rangle$$

- Paarkorrelation:

$$C(i,j)(T) = \left\langle \vec{S}^i \cdot \vec{S}^j \right\rangle - \left\langle \vec{S}^i \right\rangle \left\langle \vec{S}^j \right\rangle$$

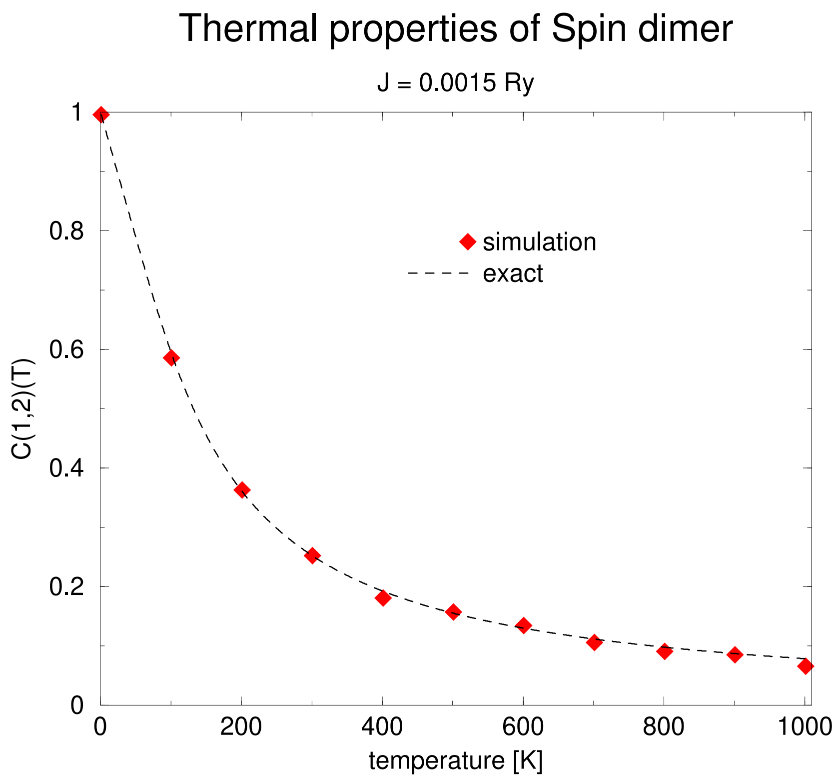
- Suszeptibilität:

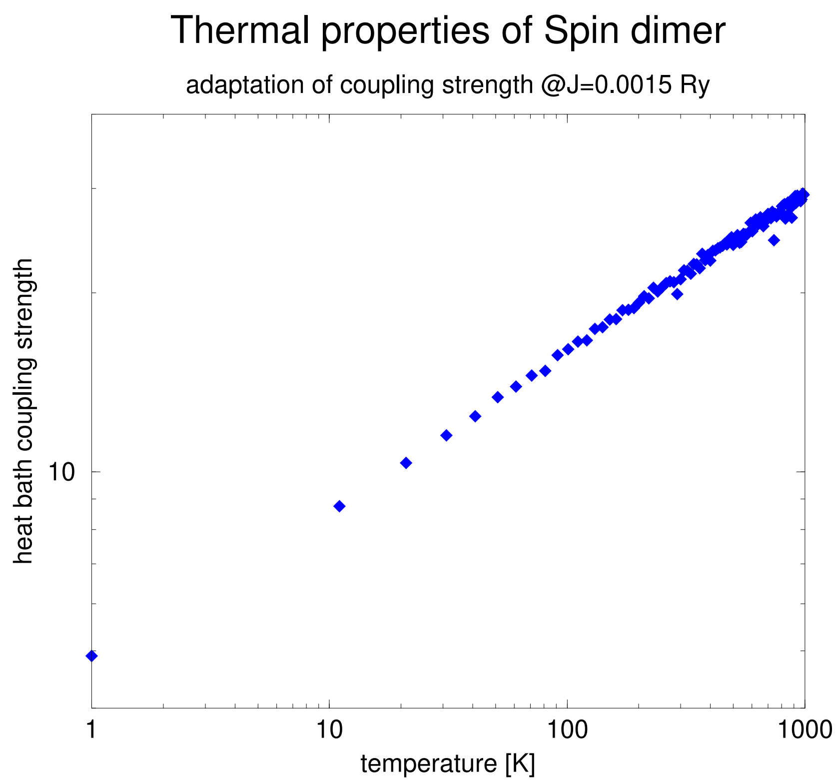
$$\chi(T) = \frac{1}{NkT} \sum_{i,j=1}^{N} \left\langle \vec{S}^i \cdot \vec{S}^j \right\rangle - \left\langle \vec{S}^i \right\rangle \left\langle \vec{S}^j \right\rangle$$

- Spezifische Wärme:

$$C_V(T) = \frac{1}{NkT^2} \left(\left\langle E^2 \right\rangle - \langle E \rangle^2 \right)$$

Anwendungen





Ausblick

- Simulation von Gleichgewichts- und Nichtgleichgewichtsprozessen in Molekülen, Clustern und Festkörpern (Phasenübergänge, **Dynamik(!?)**, Relaxationen etc.)
- Vergleich mit **stochastischer** Methode
- Modellierung von Quanteneffekten
- Visualisierung der Ergebnisse