

Лабораторная работа № 3

XY-модель

На основе программы для расчета свойств 2D ферромагнетика в рамках модели Изинга, разработать программу для моделирования с помощью XY-модели. Рассчитать среднюю энергию системы на 1 спин, намагниченности системы на 1 спин и теплоемкость системы. Построить в gnuplot графики $E(T)$, $M(T)$, $C(T)$.

Кроме того, необходимо визуализировать полученную конечную конфигурацию для каждого значения температуры, т.е. на последнем шаге МК моделирования для каждой T , используя ParaView.

Классическая XY-модель (иногда также называемая классической моделью ротора (ротатора) или модель $O(2)$) представляет собой решетчатую модель статистической механики. Это частный случай n -векторной модели для $n = 2$.

В 2D XY-модели классические спины единичной длины в двумерной решетке могут вращаться в плоскости решетки. Гамильтониан (энергия) для взаимодействия ближайших соседей определяется следующим образом:

$$H(\mathbf{s}) = -J \sum_{i \neq j} \mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_j = -J \sum_{i \neq j} \cos(\theta_i - \theta_j)$$

Где $-\pi < \theta_i \leq \pi$

Для МК моделирования: необходимо генерировать новое направление угла θ_i , а не просто умножать на -1, как для модели Изинга, для расчета новой энергии E_2 .

Намагниченность в среднем равна 0, поэтому необходимо считать средний квадрат намагниченности по формуле ниже:

$$\frac{\langle M^2 \rangle}{\langle N^2 \rangle} = \frac{1}{N^2} \left\langle \left(\sum_{i=1}^N \sin(\theta_i) \right)^2 + \left(\sum_{i=1}^N \cos(\theta_i) \right)^2 \right\rangle$$

Переход Березинского — Костерлица — Таулеса (БКТ-переход) или топологический фазовый переход — фазовый переход в двумерной XY-модели. Это переход из состояния связанных пар вихрь-антивихрь при низких температурах в состояние с неспаренными вихрями и антивихрями при некоторой критической температуре. БКТ-переходы можно наблюдать в некоторых двумерных системах в физике конденсированных сред, которые аппроксимируются с помощью XY-модели (топологическая фаза материи), в том числе в массиве джозефсоновских контактов и в тонких сверхпроводящих гранулированных пленках.

Нобелевскую премию по физике в 2016 году присудили Дэвиду Таулесу, Майклу Костерлицу и Дункану Холдейну «за теоретические открытия топологических фазовых переходов и топологических фаз материи». Топологический фазовый переход обнаружен двумя из них и в настоящее время называется переходом Костерлица-Таулеса (или Березинского — Костерлица — Таулеса. В. Березинский, советский физик, который умер в 1980 году, независимо работал над теми же аспектами перехода в 70-е годы). Этот фазовый переход весьма своеобразен, поскольку он встречается в двумерных системах (как тонкие слои материи или поверхности кристалла) и имеет топологический характер.