

Министерство общего и профессионального образования Российской Федерации
Московский физико-технический институт (государственный университет)

Диплом
"Исследование спектра 2D Бозе жидкости с
дальнодействием"

студент 528 гр. Мозгунов Евгений

научные руководители:
проф. М.В. Фейгельман,
проф. Л.Н. Щур

Москва, 2009

Содержание

1	История вопроса	2
2	Выбор модели	3
3	Корреляторы	4
4	Эквивалентная задача	5
5	Монте-Карло	5
6	Измерения	7
7	Парма	13

1 История вопроса

1) Теория:

В данной работе изучается частный случай 2D задачи о бозе частицах с не малым взаимодействием. Чтобы понять, чем выделен 2D случай, кратко упомянем, что известно про эту задачу для разных размерностей пространства:

1D: Имеется множество работ на эту тему и методов решения.

3D: теория Боголюбова (как разложение по малому взаимодействию или плотности. Важно то, что число частиц в конденсате макроскопически велико).

2D: зависит от потенциала взаимодействия. В принципе, можно проделать выкладки, аналогичные 3D случаю:

Вторичное квантование + малое взаимодействие $\rightarrow \hat{a}_0^\dagger \hat{a}_0 \sim N_0$ приводит \hat{H} к квадратичному \rightarrow преобразование Боголюбова

Но это не соответствует реальным 2D системам. В них число частиц в конденсате не макроскопическое.

Утверждение:

При конечных температурах конденсат не может существовать в 2D - его разрушают флуктуации фазы.

Доказательство:

Проинтегрируем число надконденсатных частиц при $\mu = 0$ и получим расходимость при $T > 0$.

Более того, даже при $T=0$ в основном состоянии не всегда можно говорить о конденсате. Например, модель в этой работе его не содержит (см. далее)

2) Реальные системы

Выше предполагалось, что основное состояние - сверхтекучая жидкость. Но физически очевидна другая возможность - образование 2D решетки. Есть одна хорошо известная система, описываемая моделью 2D бозонов, где как раз реализуются оба этих случая - *вихревые линии в ВТСП*. Действительно, решетка вихрей - хорошо известный объект, а существование вихревой жидкости предсказано в некоторой области фазовой диаграммы. Значение термина "вихревая жидкость" состоит в том, что при описании 3D сверхпроводника на языке 2D бозонов эти бозоны находятся в состоянии квантовой жидкости. Обычно это описание проводят на языке функциональных интегралов. Если формально заменить пространственную координату z вдоль линий на временную, то статсумма для конфигураций вихревых линий перейдет в интеграл по путям для бозонов. Обзор этих выкладок можно найти в [1]

Знание реальной системы позволяет сказать несколько слов про потенциал взаимодействия частиц. Говорят о взаимодействии частиц с калибровочным полем, при этом статический потенциал зависит от r по двумерному закону Кулона $V(r) = e^2 \ln|r|$, но есть и запаздывающий потенциал, который устроен значительно сложнее и не мал по сравнению со статическим (постоянная тонкой структуры получается ~ 1).

Впервые вопрос о наличии или отсутствии сверхтекучести в жидкостном состоянии был поднят в [2]. Там также приведен второй пример физической системы, в которой реализуется обсуждаемая модель: liquid of Holons (возникающая в RVB теориях для Моттовского изолятора)

Сформулирована общая для этих систем проблема:

При изменении константы связи происходит переход из фазы жидкости в решеточную фазу. При этом появляется long range orientational order и quasi long range positional order и пропадает сверхтекучесть. Происходят ли эти два события при одном значении константы взаимодействия, или при двух различных? Существует ли промежуточная фаза, т.е. несверхтекучая жидкость - основное состояние некоего гамильтониана?

Фазовую диаграмму 2D бозе системы с кулоновским взаимодействием уже измеряли [3], в их работе был обнаружен единственный фазовый переход 1-го рода из несверхтекучего решеточного состояния в сверхтекучее жидкое.

2 Выбор модели

Свободу в выборе модели можно использовать и выбрать систему с особыми свойствами (скрытой суперсимметрией и точно известной многочастичной в.ф. основного состояния, см. далее), облегчающими ее исследование. А именно, следуя [4], составим \hat{H} из операторов

$$i\hat{q}_{i,\alpha} = \frac{\partial}{\partial r_{k,\alpha}} - 2\alpha \left(\sum_{j \neq k} \frac{r_{k,\alpha} - r_{j,\alpha}}{|r_j - r_k|^2} - \pi n r_{k,\alpha} \right) \quad (1)$$

$$i\hat{q}_{i,\alpha}^\dagger = \frac{\partial}{\partial r_{k,\alpha}} + 2\alpha \left(\sum_{j \neq k} \frac{r_{k,\alpha} - r_{j,\alpha}}{|r_j - r_k|^2} - \pi n r_{k,\alpha} \right) \quad (2)$$

где индекс i нумерует частицы, а α - орты. Такая структура оператора обладает двумя замечательными свойствами:

- 1) существует волновая функция, которую обнуляет любой оператор $q_{i,\alpha}$

$$\Psi_0(r_1, \dots, r_N) = c \prod_{j>k} |r_j - r_k|^{2\alpha} e^{-\pi\alpha n \sum_i r_i^2} \quad (3)$$

- 2) операторы q и q^\dagger коммутируют на функцию только от координат.

Выберем гамильтониан так, чтобы Ψ_0 была основным состоянием:

$$H = \frac{1}{2m} \sum_{j,\alpha} q_{j,\alpha}^\dagger q_{j,\alpha} \quad (4)$$

Основному состоянию соответствует нулевая энергия. Ψ_0 описывает диск из частиц, равномерно распределенных с плотностью n . Это можно увидеть, проинтегрировав Ψ_0 по координатам всех кроме одной частиц.

Заметим также, что множитель $1/2m$ можно убрать изменением единиц измерения энергии, а плотность системы выбрать любой соответствующим изменением единиц измерения длины. Таким образом, в задаче есть всего один безразмерный параметр α .

Осталось убедиться, что взаимодействие в данном гамильтониане сводится к кулоновскому. Запишем H в явном виде:

$$H = \frac{1}{2m} \sum_i \left[-\nabla_i^2 + 2\alpha \sum_{j \neq i} \nabla_i^2 \ln|r_i - r_j| + 4\alpha^2 \sum_{j \neq i, k \neq i} \nabla_i \ln|r_i - r_j| \nabla_i \ln|r_i - r_k| + (2\pi\alpha n)^2 r_i^2 \right] \quad (5)$$

Потенциальная энергия содержит двухчастичное V_2 и трехчастичное взаимодействие V_3 . Заметим, что V_2 содержит δ -функцию и спадает как $\frac{1}{r^2}$. 2D кулоновский потенциал получается, если проинтегрировать V_3 по координатам одной из частиц с плотностью n . Итак,

$$V_2^{\text{eff}}(r) = -\frac{g^2}{2\pi} \ln r + V_2(r) \quad (6)$$

Здесь сила кулоновского взаимодействия $g = 4\pi\alpha\sqrt{\frac{n}{m}}$

По аналогии с плазмой у такой системы на малых волновых векторах возбуждения имеют конечную энергию, равную плазменной частоте $\omega_0 = \sqrt{\frac{ng^2}{m}}$

3 Корреляторы

Дальнейшие построения потребуют корреляторов:

$$\Pi_{\alpha\beta}^{\text{reg}}(\mathbf{r} - \mathbf{r}', t - t') = \langle J_\alpha(\mathbf{r})J_\beta(\mathbf{r}') \rangle; \quad K(\mathbf{r} - \mathbf{r}', t - t') = \langle \rho(\mathbf{r})\rho(\mathbf{r}') \rangle \quad (7)$$

Полезно записать эти величины в импульсном представлении.

Рассмотрим на примере, как провести интегрирование.

Задача:

Выразить структурный фактор $S(k, t)$ через среднее от функции координат частиц.

Решение: Запишем функцию корреляции плотностей $n(r) = \sum_i \delta(r - r_i)$

$$\langle n(r_1, t)n(r_2, 0) \rangle = \left\langle \sum_i \delta(r_1 - r_i(t)) \sum_j \delta(r_2 - r_j(0)) \right\rangle \quad (8)$$

Времена для краткости не пишем. Сделаем фурье преобразование по разности координат и усреднение по объему :

$$\begin{aligned} & \frac{1}{V} \int \int d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \langle n(r_1)n(r_2) \rangle e^{ik(r_1 - r_2)} = \\ &= \frac{1}{V} \int \int d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \sum_i \sum_j \langle \delta(r_i - r_1)\delta(r_j - r_2) \rangle e^{ik(r_1 - r_2)} = \\ &= \frac{1}{V} \sum_i \sum_j \langle e^{ik(r_i - r_j)} \rangle = \frac{1}{V} \left\langle \sum_i e^{ikr_i} \sum_j e^{-ikr_j} \right\rangle = \\ &= \frac{1}{V} \langle n_k n_{-k} \rangle = S(k) \end{aligned} \quad (9)$$

Восстановив в выкладках времена $r_i(t), r_j(0)$, получим окончательную формулу:

$$S(k, t) = \frac{1}{V} \langle n_k(t)n_{-k}(0) \rangle = \frac{1}{V} \left\langle \sum_i e^{ikr_i(t)} \sum_j e^{-ikr_j(0)} \right\rangle \quad (10)$$

Любой коррелятор с запаздыванием содержит в себе информацию о спектре:

$$\langle GS | A_k^\dagger(t) A_k(0) | GS \rangle = |\langle GS | A_k | k \rangle|^2 e^{-i\omega_k t} \quad (11)$$

Здесь для простоты принято, что оператор A_k переводит основное состояние в состояние $|k\rangle$, также являющееся собственным для гамильтониана системы. Далее рассматривается более общий случай, когда возбуждается суперпозиция состояний с разными энергиями.

$$S(k, t) = \sum_\lambda |\langle GS | n_k | \lambda \rangle|^2 e^{-i\omega_\lambda t} \quad (12)$$

С этой точки речь пойдет о численном моделировании. Симуляция, о которой пойдет речь в дальнейшем, производит вычисление в мнимом времени зависимости $S(k, it)$ ((18), см. также [6]). Поэтому интерес представляет задача нахождения по функции $S(k, it)$ всех величин ω_λ и весов в правой части.

Эта задача решается с применением сложной процедуры *Стохастического Аналитического Продолжения*[5], но для целей работы в большинстве случаев будет хватать одномоментного приближения (одно слагаемое в сумме по состояниям (11)).

Вычисление $S(k, it)$ потребует использования хорошо известной эквивалентности между рассмотренной задачей и следующей.

4 Эквивалентная задача

Рассмотрим классическое броуновское движение в самом общем виде:

$$\gamma \frac{dr_{j,\alpha}}{dt} = -\frac{\partial W\{\mathbf{r}_i\}}{\partial r_{j,\alpha}} + \xi_{j,\alpha}(t) \quad (13)$$

Обычное условие на $\xi(t)$:

$$\overline{\xi_{j,\alpha}(t)\xi_{k,\beta}(t')} = 2\gamma T \delta_{jk} \delta_{\alpha\beta} \delta(t-t'). \quad (14)$$

Следующий шаг - Уравнение Фоккера-Планка:

$$\gamma \frac{\partial \mathcal{P}\{\mathbf{r}_i\}}{\partial t} = \sum_{j,\alpha} \frac{\partial}{\partial r_{j,\alpha}} \left(\frac{\partial W}{\partial r_{j,\alpha}} + T \frac{\partial}{\partial r_{j,\alpha}} \right) \mathcal{P}\{\mathbf{r}_i\}, \quad (15)$$

А его можно заменой $\mathcal{P}\{\mathbf{r}_i\} = e^{-W/2T} \Psi\{\mathbf{r}_i\}$ привести к уравнению, похожему на уравнение Шрёдингера.

$$\gamma \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \sum_{j,\alpha} \left\{ T \frac{\partial^2 \Psi}{\partial r_{j,\alpha}^2} + \left[\frac{1}{2} \frac{\partial^2 W}{\partial r_{j,\alpha}^2} - \frac{1}{4T} \left(\frac{\partial W}{\partial r_{j,\alpha}} \right)^2 \right] \Psi \right\}. \quad (16)$$

Чтобы это уравнение при замене $t \rightarrow it$ перешло в уравнение Шрёдингера с нужным гамильтонианом, следует правильно выбрать $W\{\mathbf{r}_i\}$:

$$W\{\mathbf{r}_i\} = -4\alpha T \sum_{j>k} \ln |\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_k| + 2\pi\alpha T n \sum_i r_i^2. \quad (17)$$

Это удалось сделать благодаря суперсимметричности задачи.

Утверждение: Эквивалентность этих трех подходов обеспечивает равенство корреляторов :

$$\langle \Psi_0 | F\{\mathbf{r}_i\} | \Psi_0 \rangle = \overline{\langle F\{\mathbf{r}_i\} \rangle_L}. \quad (18)$$

(доказательство см. [6])

Правая часть - среднее по ланжевеновской динамике, которая легко моделируется с помощью метода Монте Карло.

5 Монте-Карло

В данном случае под методом Монте-Карло подразумевается разностная схема для уравнения

$$\gamma \frac{dr_{j,\alpha}}{dt} = -\frac{\partial W\{\mathbf{r}_i\}}{\partial r_{j,\alpha}} + \xi_{j,\alpha}(t) \quad (19)$$

$$\gamma(r_{j,\alpha}((n+1)\tau) - r_{j,\alpha}(n\tau)) = -\frac{\partial W\{\mathbf{r}(n\tau)_i\}}{\partial r_{j,\alpha}} \tau + \int_{n\tau}^{(n+1)\tau} \xi_{j,\alpha}(t) dt \quad (20)$$

Последнее слагаемое случайно, имеет гауссово распределение шириной $\sim \sqrt{\tau}$

С помощью симуляции обновляются координаты частиц. Выждав достаточное для релаксации время, можно измерять **физические величины**:

1) *структурный фактор*

$$S_k(t) = \langle n_k(0)n_{-k}(t) \rangle = \langle |n_k|^2 \rangle \quad (21)$$

$n_k = \sum_j e^{i(kr_j)}$. Динамический структурный фактор измерен в этой работе, что дало новую информацию про спектр системы (см. результаты).

2) *orientational order parameter*

Это величина, характеризующая плавление. Для ее нахождения по данной конфигурации частиц необходимо построить триангуляцию Делоне - так у каждой определяются ближайшие соседи. После этого можно измерить величину:

$$\langle |\psi_6| \rangle = \left\langle \left| \frac{1}{N} \sum_1^N \frac{1}{n_{NN}} \sum_1^{n_{NN}} \exp(i6\theta_{ij}) \right| \right\rangle \quad (22)$$

В решеточной фазе $\langle |\psi_6| \rangle$ - константа, меньшая единицы, в жидкости обычно ноль. Статистическая ошибка в определении $\langle |\psi_6| \rangle$ пропорциональна т.н. угловой восприимчивости:

$$\chi_6 = \langle |\psi_6|^2 \rangle - \langle |\psi_6| \rangle^2 \quad (23)$$

которая имеет пик в точке плавления.

3) Чтобы получить возможность (и это новый результат) измерить *токовый коррелятор*, воспользуемся формулами, известными про эту модель:

$$\Psi_0(r_1, \dots, r_N) = c \prod_{j>k} |r_j - r_k|^{2\alpha} e^{-\pi\alpha n \sum_i r_i^2} \quad (24)$$

Оператор \hat{q} обнуляет основное состояние $\hat{q}\Psi_0 = 0$:

$$\frac{\partial}{\partial r_{k,\alpha}} \Psi_0 = 2\alpha \left(\sum_{j \neq k} \frac{r_{k,\alpha} - r_{j,\alpha}}{|r_j - r_k|^2} - \pi n r_{k,\alpha} \right) \Psi_0 \quad (25)$$

С помощью этого соотношения можно записать токовый коррелятор (использовано определение оператора тока)

$$\begin{aligned} \Pi_{\alpha\beta}^{\text{reg}}(\mathbf{r} - \mathbf{r}', t - t') &= \langle J_\alpha(\mathbf{x}) J_\beta(\mathbf{x}') \rangle = \\ &= \frac{-1}{4m^2} \int \Psi_0^* \sum_{j \neq k} \left(\frac{\partial}{\partial r_{k,\alpha}} \delta(r - r_k) + \delta(r - r_k) \frac{\partial}{\partial r_{k,\alpha}} \right) e^{i\hat{H}(t-t')} \left(\frac{\partial}{\partial r_{j,\beta}} \delta(r' - r_j) + \delta(r' - r_j) \frac{\partial}{\partial r_{j,\beta}} \right) \Psi_0 dr_1 \dots dr_N \end{aligned} \quad (26)$$

только через координаты. Тогда можно будет найти его из Ланжевеновской динамики.

В импульсном пространстве:

$$\Pi_{k,\alpha\beta}(t) = \langle J_{k,\alpha}^*(0) J_{k,\beta}(t) \rangle \quad (28)$$

$$J_{k,\alpha} = \int J_\alpha(r) e^{i(kr)} d^2r = \frac{-i}{2m} \sum_j e^{i(kr_j)} (ik_\alpha + 2\nabla_{j,\alpha}) \quad (29)$$

При действии на основное состояние

$$J_{k,\alpha} = \frac{-i}{2m} \sum_j e^{i(kr_j)} \left[ik_\alpha + 4\alpha \left(\sum_{j \neq k} \frac{r_{k,\alpha} - r_{j,\alpha}}{|r_j - r_k|^2} - \pi n r_{k,\alpha} \right) \right] \quad (30)$$

Среднее $\langle J_{k,\alpha}^*(0) J_{k,\beta}(it) \rangle_L$ в принципе позволит найти сверхтекучую плотность (см. формулу для n_s из статьи [5]).

6 Измерения

Компьютерная симуляция, основы.

Программа моделирует ланжевеновские частицы. Координаты $x_i(t), y_i(t)$ обновляются с каждым шагом разностной схемы. Можно измерить любую функцию координат $f(x_1, y_1, \dots, x_n, y_n)$, то есть через промежутки времени $t_m > \tau$ (больше времени релаксации системы) N_0 раз вычислять значение функции f по массиву x_i, y_i и затем усреднить:

$$\langle f \rangle = \frac{1}{N_0} \sum_{m=1}^{N_0} f(x(mt), y(mt)) \quad (31)$$

Погрешность: самый простой способ оценки погрешности — разбить отрезок $[1, N_0]$ на 10 блоков равного размера, и измерить блочные средние

$$\langle f \rangle_j = \frac{1}{0.1N_0} \sum_{m=0.1N_0j}^{0.1N_0(j+1)} f(x(mt), y(mt)) \quad (32)$$

Тогда погрешность измерения $\langle f \rangle$ дается простой формулой:

$$\langle f^2 \rangle - \langle f \rangle^2 = \frac{1}{10^2} \sum_{j=1}^{10} (\langle f \rangle - \langle f \rangle_j)^2 \quad (33)$$

Динамические корреляторы вида $\langle n(t)n(0) \rangle$ не измерить без дополнительного действия: надо, выждав t_m перед каждым измерением, начать сохранять в специальный массив значения x_i, y_i через равные промежутки времени Δt . Когда массив заполнится, координаты для вычисления $n(0)$ берутся из первого его элемента, а для вычисления $n(t)$ из элемента с номером $t/\Delta t$.

Вся последовательность $\langle n(\Delta t)n(0) \rangle, \langle n(2\Delta t)n(0) \rangle, \langle n(3\Delta t)n(0) \rangle \dots$ таким образом измеряется. Затем процедура повторяется N_0 раз. Средние находятся по первой формуле. Не спутайте:

Δt - расстояние между точками на графике $\langle n(t)n(0) \rangle$

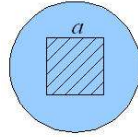
τ - шаг разностной схемы, внутренний параметр моделирования. (см. ур-е (20))

Первые измерения.

В этой части для ясности изложения не упомянуты некоторые трудности, возникающие на практике при измерениях рассматриваемых величин.

Однородность системы необходимо проверить. Напомним, что система имеет форму диска, плотность частиц внутри которого должна быть постоянной, а снаружи ноль. Измерялась $\langle n(r) \rangle$, усредненная по маленькому объему. Действительно, уже на расстоянии $0.2R$ от края диска отклонение плотности частиц от значения параметра n в модели лежит в пределах погрешности.

Конечность размеров системы определяет также возможные значения волнового вектора k , от которого зависят физические величины в импульсном представлении. Все теоретические выкладки, использующие фурье преобразование, велись ранее в предположении бесконечной и однородной системы, то есть k принимал непрерывный ряд значений. Теперь надо было бы использовать новый базис собственных функций (бесселевых для диска), у которых k принимает дискретный набор значений. Чтобы избежать использования нулей бесселевых функций и нефизичного граничного условия на краю диска, сделаем следующее:

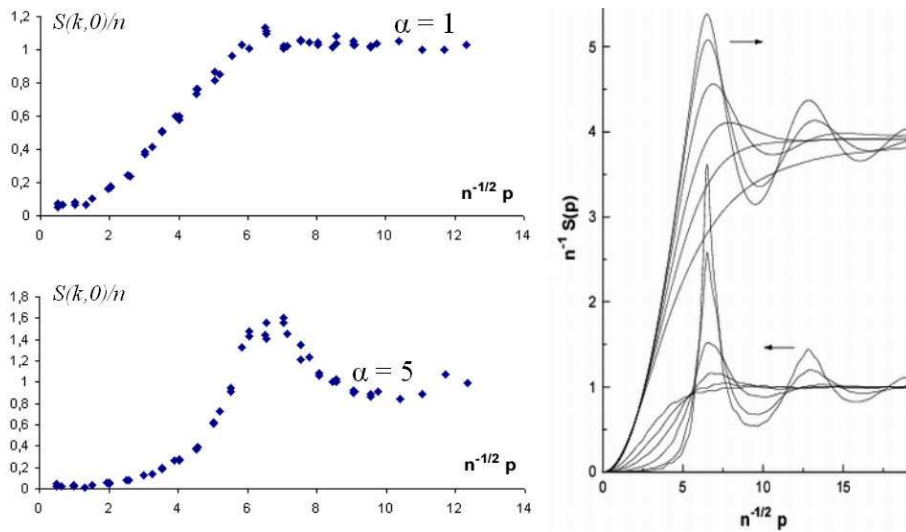


Учитываем при вычислении фурье-образов только частицы, попавшие в заштрихованный квадрат. Накладываем периодические гран-условия и получаем

$$k_x, k_y = \frac{2\pi n}{a}$$

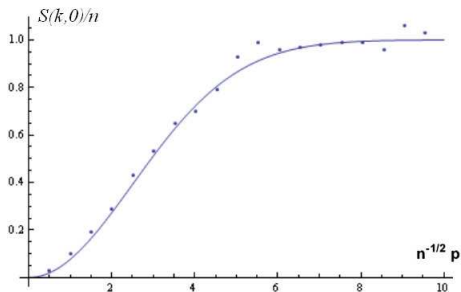
Теперь собственно измерения.

Начнем со статического структурного фактора $\langle n_{-k} n_k \rangle$, вычисление происходит по формуле (10). $\alpha = 1$ и $\alpha = 5$; $\tau = 0.0002$; удобно сравнить результаты с работой [5]:



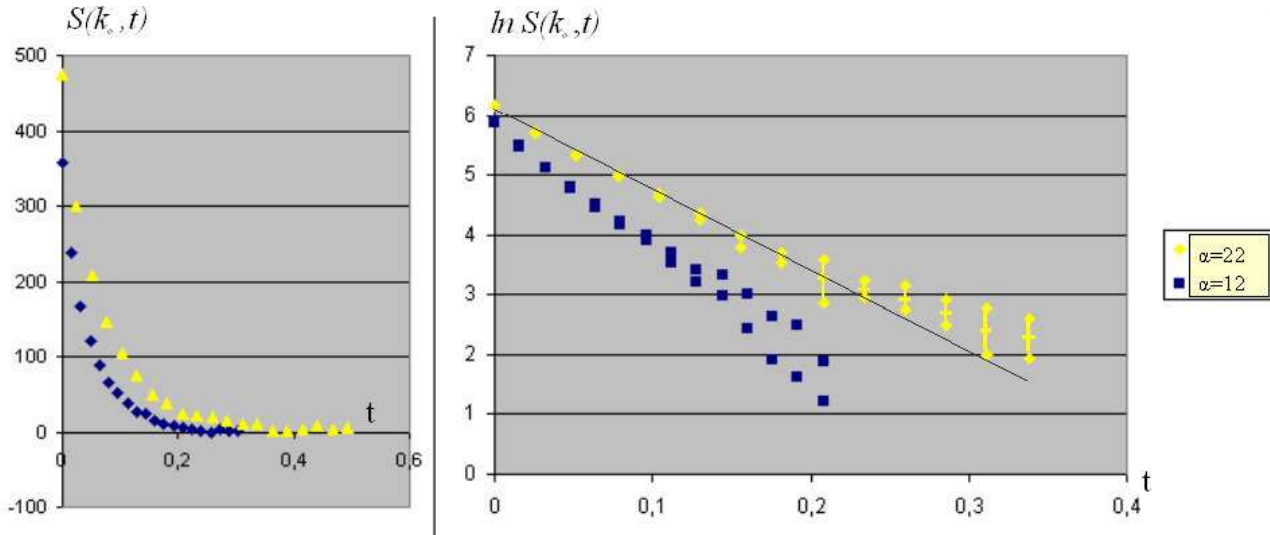
$\alpha = 0.5$; $\tau = 0.0002$; На этом значении α имеется аналитическое выражение для $S(k)$:

$$S_{1/2}(p) = n[1 - \exp(-p^2/4\pi n)] \tag{34}$$



Разброс точек - погрешность симуляции.

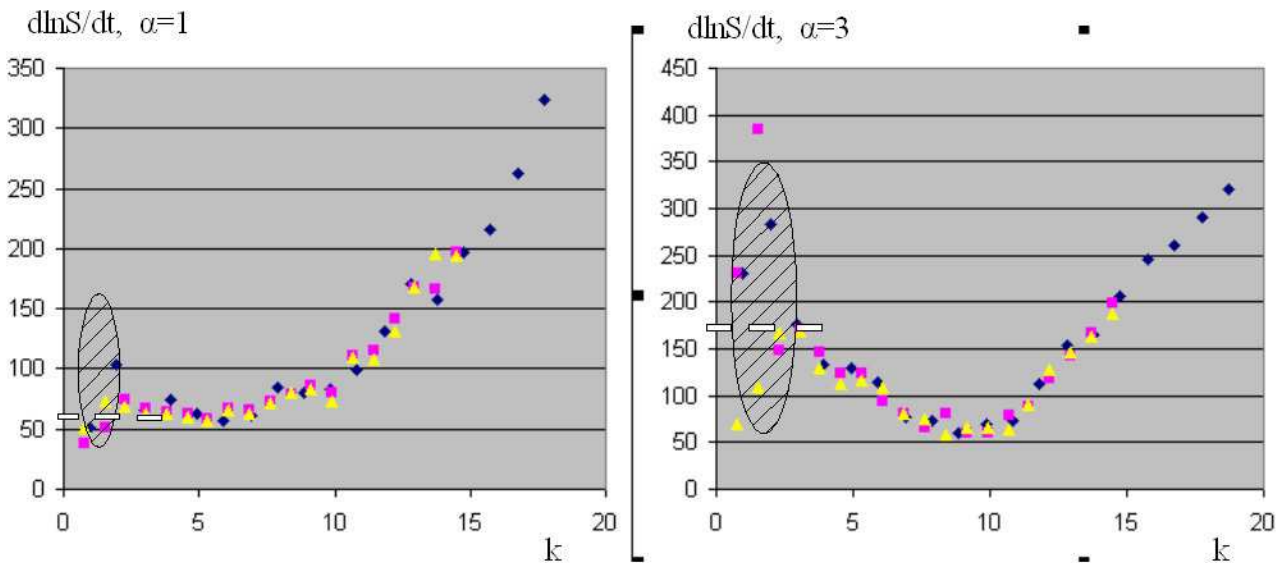
Из специально проведенных измерений получено, что пик структурного фактора приходится на $k_0 \approx 6.5n^{(1/2)}$. Измерим динамический структурный фактор $\langle n_{-k}(t)n_k(0) \rangle$ на этом волновом векторе: $\tau = 0.0002$;



В логарифмическом масштабе (справа) точки хорошо ложатся на прямую, что оправдывает применение одномоментного приближения. Конечно, желтый график слегка изменяет свой наклон, но с учетом погрешностей это трудно заметить. Отклонение графиков в логарифмическом масштабе от прямых означает неприменимость одномоментного приближения и действительно наблюдается при некоторых специальных условиях (см. далее).

Поведение спектра

Измеряя аналогичным образом наклоны этих прямых для разных k , можно представить как выглядит спектр: ($d \ln S / dt =$ энергии возбуждения, первый момент, см. (11))



Заштрихована область больших погрешностей. Белым пунктиром показана плазменная частота - теоретический предел при $k \rightarrow 0$. Здесь $n = 2.3$; $k_0 \approx 10$

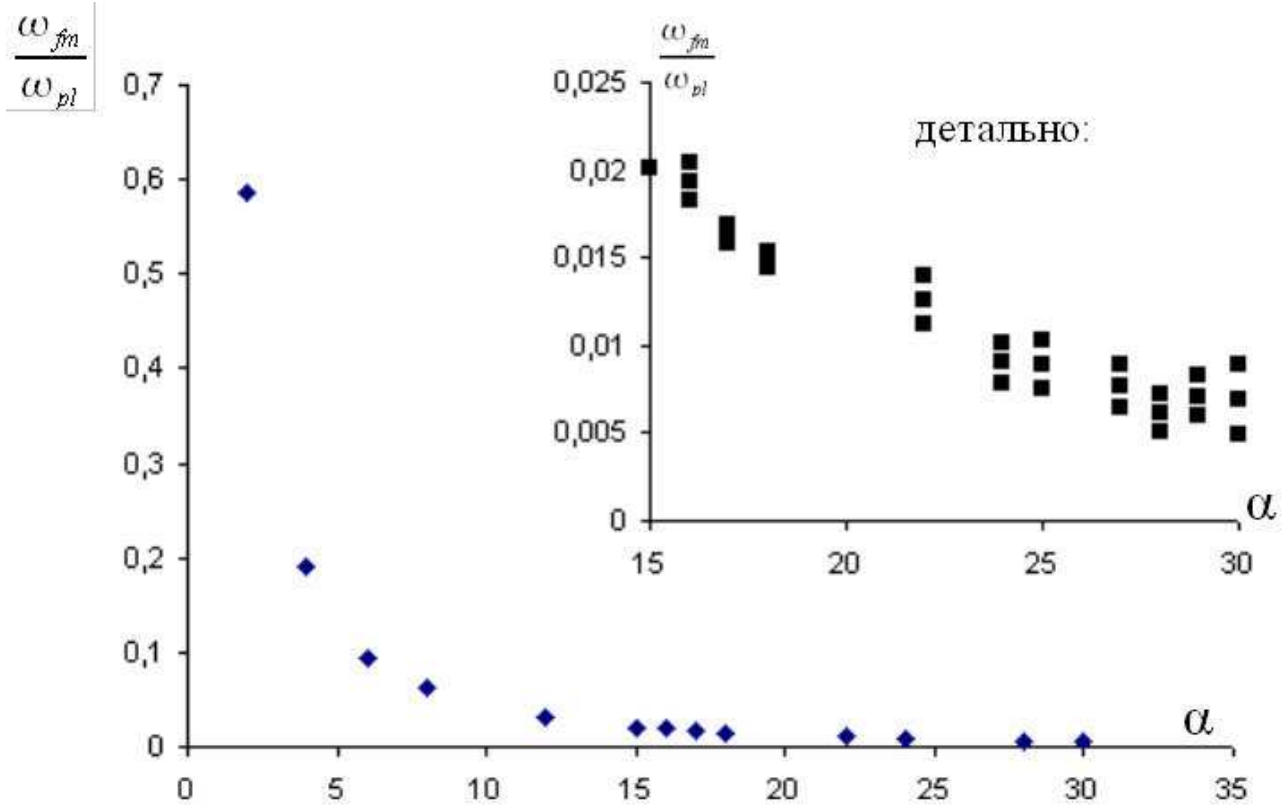
Причина больших погрешностей при $k \rightarrow 0$ будет разъяснена позднее.

Следует заметить важный факт: с ростом α минимум функции $\omega(k)$ опускается. Это было предсказано теоретически в [4]. Было найдено два первых члена разложения $\omega(k)$ в ряд при $k \rightarrow 0$:

$$\omega(k) - \omega_{pl} = -\alpha \frac{k^2}{2} \quad (35)$$

(здесь $2m = 1$ для простоты)

Особый интерес представляет возможность касания графиком $\omega(k)$ оси. Построим по проведенным измерениям график зависимости минимума $\omega_{fm}(k_0)$ наклона от α :



Видим, что нет ярко выраженного изменения в характере зависимости $S(k_0, t)$ (ожидалось, например, степенное убывание по времени вместо экспоненциального) - просто наклон графиков становится все менее и менее заметным. Уместен вопрос: может ли эта симуляция вообще "заметить" мягкую моду в спектре? Есть пример работы, где показано, что $\omega_{fm}(k)$ можно использовать для доказательства касания спектром нуля[7]. Но там речь идет о другой задаче. Чтобы увидеть теоретически предсказанную мягкую моду (в решеточном состоянии на векторе обратной решетки) в этой задаче, надо прибегнуть к специальному приему (см. измерения для решетки)

Трудности измерений. Причина погрешностей

При измерениях в области больших α время, необходимое для получения точных результатов, сильно возрастает.

Утверждение 1: величину шага симуляции τ (см. ур-е (20)) надо выбрать не больше характерной длительности процессов в системе $1/\omega_{pl}$ так что $\tau_{max} \sim 1/\alpha$

Утверждение 2: длительность каждого измерения T какой-то определенной энергии ω_{fm} должна по крайней мере превышать $1/\omega_{fm}$

Это дает оценку длительности симуляции:

$$N_0 \frac{T}{\tau} = N_0 \frac{\omega_{pl}}{\omega_{fm}} \quad (36)$$

напомним, что N_0 - число измерений, и в идеале погрешность $\sim 1/\sqrt{N_0}$

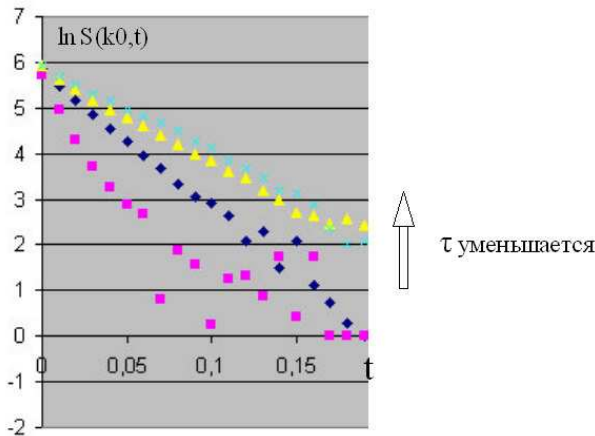
Глядя на график $(\omega_{fm}/\omega_{pl})_\alpha$, можно увидеть, что время вычислений растет как степень α

Более того, из утверждения 1 следует, что необходимо менять τ в зависимости от α , причем теоретически сложно предсказать коэффициент этой зависимости, поэтому зависимость $\tau(\alpha)$ была экспериментально измерена до начала всех измерений. Как это делалось:

При неправильном τ каждый шаг симуляции вычисляется с погрешностью. Эта погрешность систематическая, поэтому аддитивно накапливается с временем t . На графиках динамического структурного фактора $S(k, t)$ это накопление можно наблюдать

$$S_{\tau_1}(k, t) - S_{\tau_2}(k, t) = ct \tag{37}$$

Где индекс τ_1 обозначает, что измерения проводятся на этом шаге. При последовательном уменьшении шага в два раза получается следующая серия графиков:

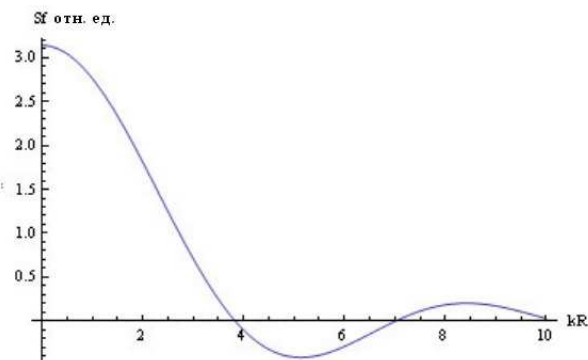


Таким образом можно составить таблицу разрешенных значений τ (таких, что при их уменьшении вдвое различие в графиках не превышает погрешности измерений)

α	1	2	5	10	20	30
τ	0,0008	0,0004	0,0002	0,0002	0,0001	0,00005

Эти значения получены для $k = k_0$. Для других k они являются несколько завышенными. Дело в том, что ошибка в наклоне больше в области высоких энергий (больших наклонов), поэтому при измерениях в области $k \rightarrow 0$, где $\omega_{fm}(k) \approx \omega_{pl}(\alpha)$, необходимо уменьшить приблизительно в α раз значения τ в таблице. Это одна из причин больших погрешностей в этой области.

Есть еще одна неточность работы симуляции. Напомним, что при измерениях структурного фактора была выбрана коробка axa , и только частицы, лежащие в ней, учитывались. Конечно, в пределе бесконечной системы такой выбор не повлияет на результаты. Но в симуляции размеры коробки не так велики: $a = 8, 2$; $n = 2, 3$. А система имеет форму диска радиуса R . Как следствие, у структурного фактора появляется finite-size поправка вида:

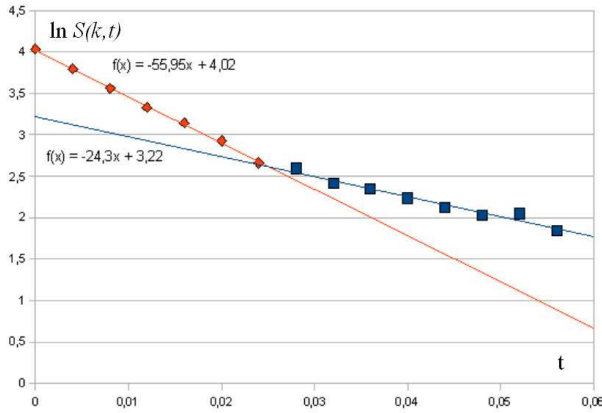


Амплитуда поправки незначительна, но может быть определена только экспериментально. Напомним, что у этого графика важны только точки на волновых векторах $k_x, k_y = 2\pi l/a$ и результат измерения поправки может существенно отличаться от ожидаемого вида. В этой симуляции $\Delta S \approx 0.05n$ (напомним, что структурный фактор нормируется на плотность n). По графикам видно, что опять же этот эффект затрудняет измерения только в области $k \rightarrow 0$.

Обсудим также границы применимости одномоментного приближения. Прежде всего вспомним, что в действительности динамические корреляторы зависят от времени не как $e^{-\lambda t}$, а посредством более общей формулы $\sum_i c_i e^{-\lambda_i t}$, так что множество энергий λ_i и весов c_i характеризует многочастичные состояния системы, которые возбуждаются при действии оператора (в нашем случае n_k) [7].

Одномоментное приближение - это, по сути, предположение, что оператор n_k возбуждает состояние с одной квазичастицей импульса k и больше ничего. На самом деле это не так:

1) могут возбуждаться высокоэнергетические состояния с двумя и более квазичастицами. Причем вес таких состояний даже не обязательно мал по сравнению с весом возбуждения одной квазичастицы. Но слагаемое в S , соответствующее высокоэнергетическим состояниям, быстро затухает. Поэтому можно надеяться увидеть этот вклад, уменьшив Δt и τ :



Эта зависимость измерена на $k = 2.8$ при $\alpha = 1$ с достаточной точностью, чтобы говорить о двух участках. Конечно наклон красной прямой - не более чем оценка для второй энергии.

Здесь $\omega_{pl} = 60$

Видно, что при усреднении наклона по интервалу $[0; 0.15]$ вклад от красных точек не повлияет на измеренную ω_{fm} , поэтому предыдущие измерения считаем достоверными в пределах погрешности.

2) Возможен и более тщательный подход к исследованию спектра: когда предполагается, что сумма по состояниям содержит с небольшими весами все возможные энергии, далее ставится вычислительная задача выбрать из бесчисленного множества конфигураций физически достоверную. Существует алгоритм решения этой задачи - Stochastic Analytic Continuation [5]. Применение этого алгоритма в статье [7] позволило получить для квантовой многочастичной задачи полный график плотности состояний $g(E, k)$. Интересно, что эти результаты в большинстве случаев не соответствовали результатам одномоментного приближения.

Решеточные измерения.

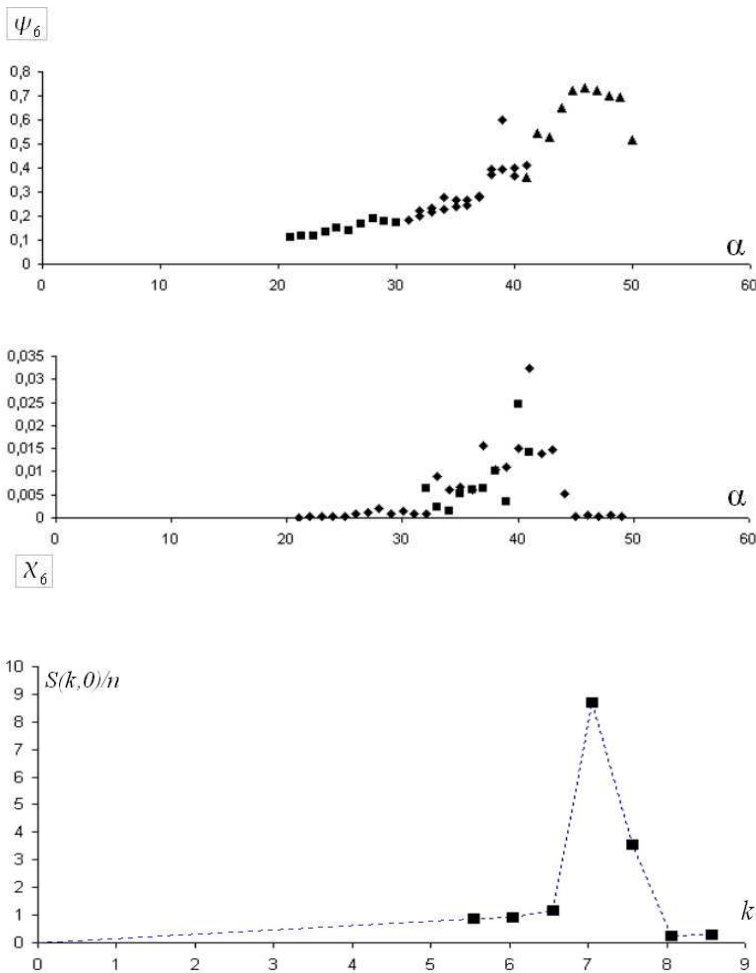
Любые измерения в области кристаллизации $\alpha > 30$ приводят к большим погрешностям. Тем не менее удалось измерить изменение параметра порядка ψ_6 (см. (22)) в зависимости от α . Напомним, что ожидается его появление при $\alpha \approx 36$ (эта цифра не следует ни из каких измерений в этой работе, она получена в работе [8]) В точке перехода восприимчивость χ_6 (см. (23)) максимальна.

Симуляция измеряет комплексную величину ψ_6 . Ее можно использовать для уточнения значений структурного фактора и энергий. Из определения величины ψ_6 можно вывести, что направление брегговского вектора дается углом $\frac{1}{6} \text{Arg} \psi_6 + \frac{\pi}{6}$. Для решеточного состояния с quasi long-range positional order и long-range orientational order понятие брегговского направления хорошо определено.

В бесконечной решетке для поворота брегговского направления требуется бесконечное время, а у структурного фактора имеются степенные особенности, если вектор k направлен по брегговскому направлению. В симуляции же размер системы конечен, она со временем поворачивается вокруг центра, и за этим вращением можно следить с помощью величины ψ_6 . Чтобы найти брегговские пики в структурном факторе, надо перед каждым измерением находить этот угол по значению ψ_6 . Затем проводится измерение, причем в формуле для вычисления S волновой вектор k выбирается в соответствии с текущим брегговским направлением (раньше k был фиксирован). Полученные значения S усредняются обычным образом. Эта процедура выполнена для $\alpha = 37$ (см. график $S(k)$ ниже). Частота, соответствующая пику, оказалась существенно меньше чем полученная в обычной симуляции с усреднением по направлениям :

$$\omega_{fm} < 0.001\omega_{pl}(\alpha = 37) \quad (38)$$

Сверху вниз: параметр порядка ориентации связей , восприимчивость, пик S :



Пунктир нанесен для удобства (мало точек). Измеряя больше точек и увеличивая размер системы, можно в принципе найти особенность.

7 Парма

Для расчетов используется:

Управляющий узел:

Процессор: 4*Intel (R) Xeon (R) (5160, 3.00 ГГц, 4МБ Кэш), то есть на материнской плате два двухъядерных чипа архитектуры Intel CoreDuo;

ОЗУ: 8ГБ 667МГц
Диск-хранилище: 1500 ГБ
Вычислительные узлы - 4 штуки:
Процессор: 4*Intel (R) Xeon (R) (5160, 3.00 ГГц, 4МБ Кэш), то есть на материнской плате два двухъядерных чипа архитектуры Intel CoreDuo;
ОЗУ: 16ГБ 667МГц
Диск: 200 ГБ
Сеть - у каждого узла по две сетевых карты, встроенных в материнскую плату, 1Гб (одна для NFS, другая для MPI).
Производительность: на тестах LINPACK для одного расчетного узла 35,6 гигафлопс, для 4-х узлов - 103,5 гигафлопс.

Я благодарен авторам статьи [4] за ценные указания и создателям системы параллельных вычислений на Парме за оказанное доверие.

Список литературы

- [1] G. Blatter, M. V. Feigel'man, V. B. Geshkenbein, A. I. Larkin, V. M. Vinokur. Vortices in high-temperature superconductors. *Rev. Mod. Phys.* **66**, 1125 (1994)
- [2] M. V. Feigel'man, V. B. Geshkenbein, L. B. Ioffe, A. I. Larkin, Two-dimensional Bose liquid with strong gauge-field interaction. *Phys. Rev. B* **48**, 16641 (1993)
- [3] B. K. Clark, M. Casula, and D. M. Ceperley. Hexatic and mesoscopic phases in the 2D quantum Coulomb system, *Phys. Rev. Lett.* **103**, 055701 (2009)
- [4] M. V. Feigel'man, M. A. Skvortsov. Supersymmetric model of a 2D long-range bose liquid. *Nucl. Phys. B* **506** [FS], 665 (1997)
- [5] A. W. Sandvik, Stochastic method for analytic continuation of quantum Monte Carlo data. *Phys. Rev. B* **57**, 10287 (1998)
- [6] C. L. Henley, Classical to quantum dynamics at Rokhsar-Kivelson points. [arXiv:cond-mat/0311345v1](https://arxiv.org/abs/cond-mat/0311345v1)
- [7] A. M. Lauchli, S. Capponi, F. F. Assaad, Dynamical dimer correlations at bipartite and non-bipartite Rokhsar-Kivelson points. *J. Stat. Mech.* (2008) P01010
- [8] Ph. Choquard and J. Clerouin, Cooperative Phenomena below Melting of the One-Component Two-Dimensional Plasma. *Phys.Rev.Lett.***50**, 2086 (1983).