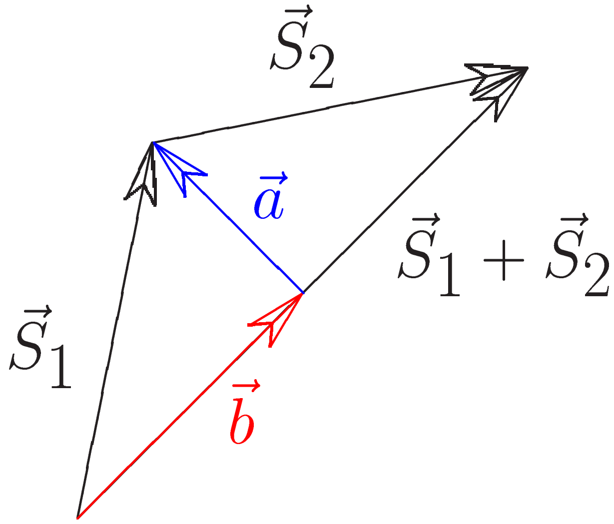
INSTITUT FÜR THEORETISCHE PHYSIK
TECHNISCHE UNIVERSITÄT BRAUNSCHWEIG
Mendelssohnstr. 3, 38106 Braunschweig

Dr. A. Honecker
a.honecker@tu-bs.de
Tel.: 391 5190

Kawasaki-Dynamik im Heisenberg-Modell

Zweck dieses Algorithmus ist, eine vorgegebene Gesamtmagnetisierung $\vec{M}$ durch die Dynamik zu erhalten. Dazu sollen zwei benachbarte Spins $\vec{S}_1$ und $\vec{S}_2$ ($\|\vec{S}_i\| = 1$) so aktualisiert werden, daß ihre Summe $\vec{S}_1 + \vec{S}_2$ erhalten bleibt. Wie im folgenden skizziert, bedeutet dies eine Drehung um den Vektor $\vec{S}_1 + \vec{S}_2$:



Man liest ab, daß

$$\vec{b} = \frac{1}{2}\left(\vec{S}_1 + \vec{S}_2\right), \qquad \vec{a} = \vec{S}_1 - \vec{b} = \frac{1}{2}\left(\vec{S}_1 - \vec{S}_2\right).$$

Die Komponente $\vec{a}$ gilt es durch einen zufälligen Vektor gleicher Länge zu ersetzen, der senkrecht auf $\vec{S}_1 + \vec{S}_2$ steht. Wir wählen dazu zuerst einen zufälligen Einheitsvektor $\vec{e}$, der gleichverteilt auf der Oberfläche der Einheitskugel S^2 ist.

1. Ist $\vec{S}_1 + \vec{S}_2 = 0$, so wählen wir

   $$\vec{S}_1' = \vec{e}, \qquad \vec{S}_2' = -\vec{e}$$

   (offensichtlich ist mit dieser Wahl $\vec{S}_1' + \vec{S}_2' = 0$).

2. Für $\vec{S}_1 + \vec{S}_2 \neq 0$ konstruiert man den Vektor

   $$\vec{n} = \vec{e} \times \left(\vec{S}_1 + \vec{S}_2\right)$$

   und ersetzt dann die $\vec{a}$-Komponente in $\vec{S}_i$ durch ihn:

   $$\vec{S}_1' = \vec{S}_1 - \vec{a} + \vec{n}\,\frac{\|\vec{a}\|}{\|\vec{n}\|}, \qquad \vec{S}_2' = \vec{S}_2 + \vec{a} - \vec{n}\,\frac{\|\vec{a}\|}{\|\vec{n}\|}.$$

Diese Paar-Aktualisierung kann man nun in den bekannten *Metropolis*-Algorithmus einbauen:

1. Wähle ein Verbindung $\langle i, j \rangle$ (zufällig oder systematisch).

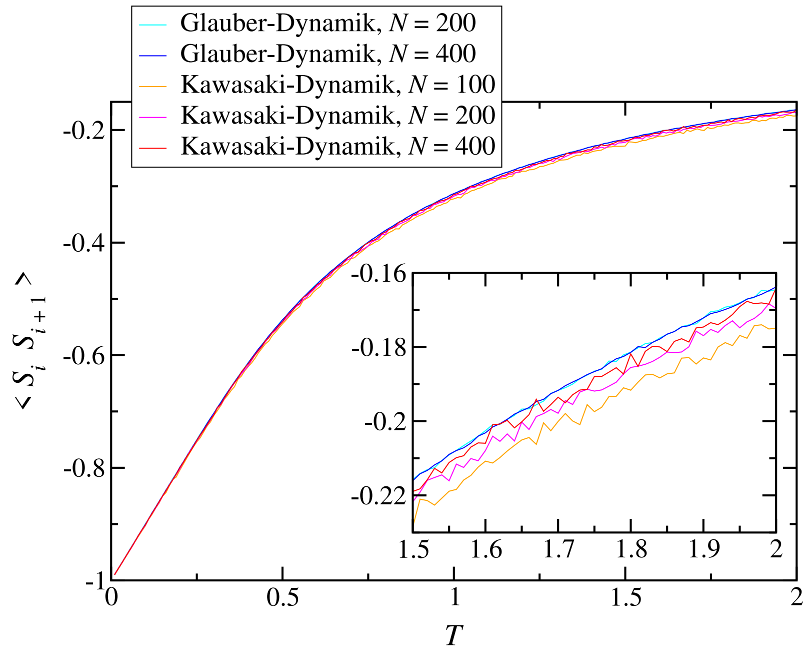
2. Konstruiere zu den Spins $\vec{S}_i$ und $\vec{S}_j$ wie oben beschrieben versuchsweise neue Spins $\vec{S}_i'$ und $\vec{S}_j'$.

3. Ist die Energie der neuen Konfiguration niedriger, übernimm sie immer. Steigt die Energie, so übernimm die neue Konfiguration mit Wahrscheinlichkeit
$$p = \mathrm{e}^{-\Delta E/T} .$$

Durch die Punkte 2. und 3. wird detailliertes Gleichgewicht sichergestellt. Ergodizität in dem Unterraum mit vorgegebener Gesamtmagnetisierung $\vec{M}$ ist nicht ganz offensichtlich – beachte die

Übungsaufgabe: Argumentiere, daß Kawasaki-Dynamik in dem Unterraum mit vorgegebenem $\vec{M}$ ergodisch ist !

Hier beschränken wir uns auf einen Test, daß die oben beschriebene Kawasaki-Dynamik funktiniert. Wir betrachten dazu eine antiferromagnetische Heisenberg-Kette der Länge N mit periodischen Randbedingungen und $h = 0$ (d.h. $\vec{M} = \vec{0}$). Als Test berechnen wir die Temperatur-Abhängigkeit der Energie pro Bindung $\langle \vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+1} \rangle$ sowohl mit Glauber- als auch Kawasaki-Dynamik. Das Ergebnis einer Simulation zeigt folgendes Bild[1]:



Beobachtungen:

1. Glauber-Dynamik hat deutlich kleinere Finite-Size-Effekte als Kawasaki-Dynamik.

2. Glauber-Dynamik liefert kleinere statistische Schwankungen als Kawasaki-Dynamik[2].

3. Beide Algorithmen liefern den gleichen thermodynamischen Grenzfall für $N \to \infty$, d.h. Kawasaki-Dynamik funktioniert !

Fazit: Für Thermodynamik ist Glauber-Dynamik (in diesem Fall) effizienter. Kawasaki-Dynamik erhält die Gesamtmagnetisierung $\vec{M}$ und kann zum Studium von Fragen der Spin-Dynamik eingesetzt werden.

[1] Man beachte, daß aufgrund der antiparallelen Einstellung $\langle \vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+1} \rangle \to -1$ für $T \to 0$.

[2] Die Zahl der Updates wurde bei der Kawasaki-Dynamik in obigem Bild mindestens genauso groß gewählt wie bei Glauber.