

ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ
КАЗАНСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

ДЕМИНОВ Р.Г., САЙКИН С.К., ПРОШИН Ю.Н.

ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ МЕТОДЫ
В ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКЕ

(Учебные задания)

Казань 2000

Печатается по решению Редакционно-издательского совета физического факультета

УДК 53.072; 530.1; 530.145

Деминов Р.Г., Сайкин С.К., Прошин Ю.Н. Вычислительные методы в теоретической физике. Учебные задания для студентов 3, 4 курса и магистрантов физического факультета. Казань, 2000, 36 с.

Настоящие задания предназначены для использования студентами 3, 4 курсов и магистрантами физического факультета при изучении курсов, связанных с компьютерным моделированием и численным решением. В сборнике представлены задания по теоретической физике, для решения которых предлагается использовать различные методы компьютерного моделирования и численного решения с применением языков программирования Си++, Паскаль, Фортран и вычислительных пакетов Matlab, Maple, Mathematica и MathCad. Важным является и качество представления результатов вычислений, чему посвящены задания на построение рисунков к статьям и отчетам, построение графиков в пакете Origin и написания краткого отчета по проделанной работе в текстовом редакторе WinWord.

Научный редактор:

Прошин Ю.Н., докт. физ.-мат наук, профессор кафедры теоретической физики КГУ.

Рецензент:

Фишман А.И., докт. физ.-мат. наук, профессор кафедры общей физики КГУ.

Издание подготовлено при поддержке ФЦП “ИНТЕГРАЦИЯ”

1. Некоторые причины появления ошибок в численных решениях

1.1. Найти минимальное число ε , используемое компьютером при вычислениях по умолчанию, определить количество значащих цифр используемых при численных расчетах, выяснить возможности его увеличения (уменьшения). (На примере языков программирования *Cu*, *Паскаль*, *Фортран*, или вычислительных пакетов *MatLab*, *Maple*, *Mathematica*, *MathCad*).

1.2. Рассмотреть и оценить *ошибку при округлении*, возникающую при расчетах на компьютере. Рассчитать $\exp(x)$ при отрицательных x по следующим формулам:

$$e^x = 1 + x + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^3}{3!} + \dots + \frac{x^n}{n!},$$
$$e^x = 1 / (1 - x + \frac{x^2}{2!} - \frac{x^3}{3!} + \dots + (-1)^n \frac{x^n}{n!}).$$

Какое значение n необходимо для получения достаточно точного результата (7 значащих цифр)? При вычислениях в качестве возможных вариантов использовать следующие значения x (-2.7, -5.5, -8, -20, -100)

1.3. Проверить *неустойчивость алгоритмов (погрешность действия)* на примере вычисления интеграла

$$E_n = \int_0^1 x^n e^{x-1} dx \quad (n = 1, 2, 3, \dots)$$

при помощи рекуррентной формулы

$$E_n = \int_0^1 x^n e^{x-1} dx = x^n e^{x-1} \Big|_0^1 - n \int_0^1 x^{n-1} e^{x-1} dx = 1 - n \cdot E_{n-1}, \quad (n = 2, 3, \dots),$$

E_1 вычислить аналитически и построить таблицу значений E_n при $n = 1, 2, \dots, 20$. Оценить возникающую ошибку.

Повторить вычисления, изменив алгоритм на *устойчивый* $\Rightarrow E_{n-1} = \frac{1-E_n}{n}$

Аналитически и численно оценить ошибку при вычислениях E_n для $n=19, 18, \dots, 1$ при выборе начального значения $E_{20}=0$ (показать, что начальная ошибка $\delta_{20} < 1/21$ и далее *уменьшается!*).

1.4. На примере нахождения корня полинома показать, что задача может быть *чувствительна* к малым ошибкам, допущенным при представлении

исходных данных. Например, корни уравнения $p(x)=(x-2)^2=0$ равны двум, при изменении свободного члена на малую величину $\varepsilon=10^{-6} \Rightarrow (x-2)^2=\varepsilon$ изменение в корнях много больше: $x_{1,2}=2\pm 10^{-3}$. Этот тип неустойчивости еще более выражен у полиномов более высокой степени. Корни следующего полиномиального уравнения

$$p(x) = 0, \text{ где } p(x) = (x-1)\cdot(x-2)\cdot\dots\cdot(x-20) = x^{20} - 210x^{19} + \dots$$

суть *реальные* числа от 1 до 20 и хорошо разделены.

Задание: Изменить коэффициент при x^{19} : $(-210) \Rightarrow (-210+10^{-23})$ и проследить численно за катастрофическим изменением решения [1].

2. Численные методы интегрирования

2.1 Метод трапеций и метод Симпсона

Необходимо составить программу для численного интегрирования заданной функции $f(x)$ с заданной точностью ε :

$$I = \int_a^b f(x) dx .$$

Метод Симпсона обеспечивает более высокую точность, чем метод трапеций при интегрировании регулярных функций, т.е. функций, которые можно аппроксимировать полиномом. Метод заключается в следующем: область интегрирования разбивается на четное число интервалов n . Площадь под кривой $f(x)$ находится по формуле:

$$S_n = \frac{1}{3} (f(x_0) + 2f(x_1) + 4f(x_2) + 2f(x_3) + \dots + 2f(x_{n-2}) + 4f(x_{n-1}) + f(x_n)) \cdot \Delta x,$$

где $\Delta x=h$ - длина интервала, затем число интервалов увеличивается в 2 раза и снова рассчитывается площадь. Если величина $\varepsilon_{rel}=(S_{2n}-S_n)/S_n$ находится в пределах допустимой относительной погрешности, то вычисления прекращаются, в противном случае число интервалов увеличивается в 2 раза и описанная выше процедура повторяется до тех пор, пока не будет достигнута требуемая точность. Скорость убывания относительной погрешности зависит от структуры самой функции. В некоторых случаях использование метода *трапеций* оказывается более предпочтительным.

Задание: Проинтегрировать функцию двумя способами (методом *трапеций* и *Симпсона*) с относительной погрешностью $\varepsilon_{rel}=10^{-5}$. Построить гра-

фики $S(n)$ и $\varepsilon_{rel}(n)$. Определить, какой из методов является более предпочтительным, для данной функции.

Примечание: Предусмотреть выход из процедуры интегрирования по 3 заданным параметрам численного интегрирования:

- по абсолютной точности $\varepsilon_{abs} \rightarrow |I_k - I_{k-1}| < \varepsilon_{abs}$
- по относительной точности $\varepsilon_{rel} \rightarrow |(I_k - I_{k-1})/I_{k-1}| < \varepsilon_{rel}$
или $|I_k - I_{k-1}| < \varepsilon_{rel}|I_{k-1}|$, чтобы избежать возможного деления на 0
- по числу разбиений $N_{max} \rightarrow n_k > N_{max}$ (в этом случае необходимо вывести на печать сообщение об аварийном прекращении вычисления и о текущих значениях I , $\varepsilon_{abs}^k = |I_k - I_{k-1}|$, $\varepsilon_{rel}^k = |(I_k - I_{k-1})/I_{k-1}|$).

Здесь введены такие обозначения: n_k - текущее число разбиений исходного интервала (взять $n_k = 2n_{k-1}$, при этом текущий шаг интегрирования $h_k = (b-a)/n_k$). I_k - текущее значение интеграла на k шаге; I_{k-1} - значение интеграла на предыдущем ($k-1$) шаге. В качестве начальных значений взять $n_1 = 10$, $I_0 = (F(a) + F(b))(b-a)/2$. Параметры интегрирования $\varepsilon_{abs} = 0.0001$, $\varepsilon_{rel} = 0.001$, $N_{max} = 320$.

Сравнить результаты с точными значениями интегралов (если они известны).

$$1) f(x) = x^4 + 3x^3 + 5x^2 - 1 \\ 0 \leq x \leq 1$$

$$6) f(x) = x \cdot e^{-x} \\ -1 \leq x \leq 1$$

$$2) f(x) = \frac{x-1}{3x^2+1} \\ 0 \leq x \leq 2$$

$$7) f(x) = \frac{\sin(x)}{x^2+1} \\ -1 \leq x \leq 1$$

$$3) f(x) = e^x + e^{-x} \\ 0 \leq x \leq 1$$

$$8) f(x) = Ei(-x) \\ 0.1 \leq x \leq 1$$

$$4) f(x) = \sin^2(x) \\ 0 \leq x \leq \pi$$

$$9) f(x) = Li(x) \\ 2 \leq x \leq \pi$$

$$5) f(x) = e^{\cos(x)} \\ 0 \leq x \leq \pi$$

$$10) f(x) = erf(x) \\ 0 \leq x \leq 1$$

$$11) f(x) = \ln(x^2 + 1) \\ 0 \leq x \leq 1$$

12) Построить таблицу значений эллиптических интегралов первого рода

$$F(\varphi, \alpha) = \int_0^{\varphi} \frac{d\varphi}{\sqrt{1 - \sin^2 \alpha \sin^2 \varphi}} = F(x, k) = \int_0^{\arcsin(x)} \frac{dx}{\sqrt{1 - x^2} \sqrt{1 - k^2 x^2}},$$

где $x = \sin \varphi$, $k = \sin \alpha$ для $0^\circ < \varphi < 90^\circ$ с шагом 10° , и $0^\circ < \alpha < 75^\circ$ с шагом 15°

Интегралы с бесконечными пределами.

Из оценки асимптотики подынтегрального выражения найти значение для верхнего предела b интеграла

$$I(a, \infty) = \int_a^{\infty} f(x) dx = I(a, b) + I(b, \infty),$$

при котором $|I(a, b)| \gg |I(b, \infty)|$. Вычислить интеграл $I(a, b) \cong I(a, \infty)$.

Примечание: b можно найти из условия $|I(b, \infty)| < \varepsilon_{abs}$. После вычисления интеграла проверяется условие $|I(b, \infty)| / |I(a, b)| < \varepsilon_{rel}$, при невыполнении которого b может быть увеличено.

$$1) I = \int_0^{\infty} \frac{x \sin mx}{a^2 + x^2} dx, a > 0, m \geq 0$$

$$4) I = \int_0^{\infty} \frac{x^3 \sin mx}{4a^4 + x^4} dx, a > 0, m > 0$$

$$2) I = \int_0^{\infty} x^n e^{-ax} dx, a > 0, n > 0$$

$$5) I = \int_0^{\infty} \frac{\sin(x/a)}{x(b^2 + x^2)} dx, a > 0, b > 0$$

$$3) I = \int_0^{\infty} e^{-bx^2} \sin ax^2 dx, a > 0, b > 0$$

2.2 Интегрирование методом Монте-Карло

Метод трапеций и метод Симпсона удобно использовать для одномерных интегралов. Если размерность интегралов возрастает, то удобнее воспользоваться методом *выборочного среднего*, который основан на принципе Монте-Карло. Согласно этому методу, интеграл от функции $f(x, y, z, \dots)$ на прямоугольном интервале $a_x \leq x \leq b_x$, $a_y \leq y \leq b_y$, $a_z \leq z \leq b_z, \dots$ выражается формулой:

$$S_n = (b_x - a_x)(b_y - a_y)(b_z - a_z) \dots \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n f(x_i, y_i, z_i \dots),$$

где $x_i, y_i, z_i \dots$ - набор случайных чисел распределенных с одинаковой вероятностью в области интегрирования, а n - количество испытаний.

Задание: вычислить интеграл методом Монте-Карло для данного количества испытаний ($n=5000$).

$$1) f(x) = x^4 + 3x^3 - y^3 + 5y^2$$

$$0 \leq x \leq 1, \quad 0 \leq y \leq 1$$

$$6) f(x) = \cos(x + y)$$

$$0 \leq x \leq \pi, \quad -\pi/2 \leq y \leq \pi/2$$

$$2) f(x) = 5x^2 + 3xy + y^2 - 1$$

$$0 \leq x \leq 1, \quad 0 \leq y \leq 1$$

$$7) f(x) = \sin x \cdot \sin y$$

$$x^2 + y^2 \leq 1$$

$$3) f(x) = \frac{x^2}{25} - \frac{y^2}{9} + 3$$

$$x^2 + y^2 \leq 9$$

$$8) f(x) = e^{x-y}$$

$$0 \leq x \leq 1, \quad 0 \leq y \leq 1$$

$$4) f(x) = x^4 + 3x^3 y^2 + 5x^2 y^3$$

$$x^2 + y^2 \leq 1$$

$$9) f(x) = \sqrt{y} \cdot \operatorname{erf}(x)$$

$$0 \leq x \leq 1, \quad 0 \leq y \leq 1$$

$$5) f(x) = \frac{2x^4 + 3x}{3y^4 + 2y + 3}$$

$$0 \leq x \leq 1, \quad 1 \leq y \leq 3$$

Сравнить полученные значения: а) с точным (если оно известно), б) с аналогом метода прямоугольников (с тем же числом итераций).

Чтобы оценить величину ошибки полученного значения интеграла, рассчитаем стандартное отклонение средних

$$\sigma^2 = \langle S^2 \rangle - \langle S \rangle^2,$$

где

$$\langle S^2 \rangle = \frac{1}{m} \sum_{j=1}^m S_{jn}^2,$$

$$\langle S \rangle = \frac{1}{m} \sum_{j=1}^m S_{jn},$$

для $m=10$ различных измерений, состоящих из одинакового числа испытаний. На приведенных выше примерах покажите, что стандартное отклоне-

ние средних σ_m связано с дисперсией σ для одного измерения соотношением

$$\sigma_m = \frac{\sigma}{\sqrt{n}}.$$

2.3. Интегрирование методом Монте-Карло с неравномерным распределением вероятности (выборка по значимости)

В некоторых случаях, для более быстрой сходимости интеграла от функции необходимо производить неравномерную выборку точек в области интегрирования. Другими словами, выбирать точки в области быстрого изменения функции с большей вероятностью, чем в пологой области. Так как компьютер генерирует случайные числа, равномерно распределенные в интервале $0 < x < 1$, то нам необходимо на основе компьютерного генератора создать собственный генератор случайных чисел, используя заданную функцию распределения плотности вероятности (см. пп. 10.7-10.8 [12]).

Задание: Построить генератор случайных чисел, распределенных по следующему закону:

$$1) p(x) = \begin{cases} 2 - 3x, & 0 \leq x \leq 1 \\ 0 & \end{cases}$$

$$5) p(x) = \begin{cases} xe^x, & 0 \leq x \leq \pi \\ 0 & \end{cases}$$

$$2) p(x) = \begin{cases} a^{-x}, & 0 \leq x \leq 1 \\ 0 & \end{cases}$$

$$6) p(x) = \begin{cases} \cos^2(x), & 0 \leq x \leq \pi \\ 0 & \end{cases}$$

$$3) p(x) = \begin{cases} \frac{1}{2x+3}, & -1 \leq x \leq 1 \\ 0 & \end{cases}$$

$$7) p(x) = \begin{cases} e^{x^2}, & 0 \leq x \leq 1 \\ 0 & \end{cases}$$

$$4) p(x) = \begin{cases} \frac{x^2+1}{3+x}, & 0 \leq x \leq 2 \\ 0 & \end{cases}$$

$$8) p(x) = \begin{cases} erf(x), & -1 \leq x \leq 1 \\ 0 & \end{cases}$$

Вычислить следующие интегралы методами *выборочного среднего* и *выборки по значимости*, сравнить результаты интегрирования и рассчитать вероятную ошибку (количество испытаний $n=2000$):

$$1) F(x) = \int_0^{\infty} (x+2x^2)e^{-x} dx, \quad p(x) = e^{-x},$$

$$2) F(x) = \int_0^{2\pi} \sin(x) \cdot e^{-x} dx, \quad p(x) = e^{-x},$$

$$3) F(x) = \int_0^1 e^{-x^2} dx, \quad p(x) = e^{-x},$$

$$4) F(x) = \int_0^{\pi} \frac{1}{x^2 + \cos^2(x)} dx, \quad p(x) = e^{-ax},$$

Определите значение a , которое минимизирует дисперсию.

$$5) F(x) = \int_{\pi/2}^{\pi} \sin(x) \cdot \ln(x) dx, \quad p(x) = ?,$$

Выберите самостоятельно функции распределения случайных чисел.

Какое количество испытаний необходимо провести при интегрировании методом *выборочного среднего*, чтобы получить такую же вероятную ошибку?

3. Численное решение систем дифференциальных уравнений

Задача Коши заключается в решении систем обыкновенных дифференциальных уравнений первого порядка, представляемых в виде

$$\frac{dy_j}{dx} = F_j(x, Y_j),$$

где $j=1 \div N$ – номер каждой зависимой переменной y_j , x – независимая переменная; Y_j – векторы переменных $y_1, y_2, \dots, y_j, \dots, y_N$; F_j – правая часть каждого из уравнений. Задача Коши сводится к интегрированию дифференциальных уравнений. Порядок метода численного интегрирования при этом определяет и порядок метода решения системы [2].

3.1. Маятник с затуханием и периодическим возбуждением (теоретическая механика, динамический хаос). Метод Эйлера

Метод Эйлера – простейший метод численного решения дифференциальных уравнений, которые при этом заменяются на разностные уравнения

$$y_{j(i+1)} = y_{ji} + h \cdot F(x_i, Y_{ji}).$$

Здесь h – постоянный шаг, i – номер шага: $x_i = x_0 + i \cdot h$. Начальные значения x_0 и y_{j0} даны. Погрешность метода пропорциональна h^2 и убывает с уменьшением h , при этом растет время вычислений.

Задание: Смоделировать движение маятника, построив фазовый портрет механической системы в плоскости переменных $v = \dot{\theta}$, $u = \theta$ и отображение Пуанкаре. Разобрать два варианта маятника.

(Вариант I) Точка подвеса у математического маятника с массой движется по вертикали с амплитудой $2Aml^2$ и частотой ω . Масса маятника m , длина l . Уравнение Ньютона для угла θ имеет вид

$$\ddot{\theta} + \gamma\dot{\theta} + \left[\omega_0^2 + 2A \cos \omega t \right] \sin \theta = 0,$$

где $\omega_0^2 = \frac{g}{l}$ - собственная частота колебаний маятника, γ - коэффициент затухания.

(Вариант II) На математический маятник действует возбуждающая сила

$F = Aml^2 \cos(\omega t)$. Уравнение Ньютона для угла θ имеет вид

$$\ddot{\theta} + \gamma\dot{\theta} + \omega_0^2 \sin \theta = A \cos \omega t$$

Рассмотреть изменение периода колебаний маятника при различных начальных условиях (зависит ли решение от них?) для следующих случаев и пояснить полученные результаты:

- 1) (а) $\omega_0=1$, $A=0$ (внешняя сила отсутствует), $\gamma=0$; 0.05; 0.2; 0.5; 1.
(б) $\omega_0=1$, $\gamma=0$ (силы трения нет), $A=0$; 0.1; 0.2; 0.85; 1; 2, для $\omega=1$.
(в) $\omega_0=1$, $\omega=2$ (период внешней силы π), $\gamma=0.2$, $A=0.85$. Переходный период проигнорировать.
- 2) $\omega_0=1$, $\omega=2$, $\gamma=0$ (силы трения нет), управляющий параметр $A=0$; 0.25; 0.5; 0.75; 0.85; 0.95; 1.00; 1.02;...; 1.031; 1.033; 1.036; 1.05. Найти периоды и аттракторы.
- 3) Найти значения параметров, при которых возникает первая бифуркация типа удвоения периода $\pi \rightarrow 2\pi$ ($A_1 \approx 0.79$), исследовать дальнейшее поведение системы и найти значения A_n , при которых происходит следующие подобные бифуркации. Проверить δ -формулу Фейгенбаума для квадратичного отображения:

$$\delta = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{A_{n+1} - A_n}{A_{n+2} - A_{n+1}} \quad (1)$$

- 4) Повторить вычисления пп. 2-3 для $\gamma=0.05$; 0.1; 0.2; 0.4; 0.6; 1.0.

3.2. Исследование явления фононной лавины - численное решение уравнений Фонэна-Стрендберга (Метод Рунге - Кутта – Фельберга)

Метод Рунге-Кутта четвертого порядка является наиболее распространенным методом решения систем [2] при шаге интегрирования $h=const$. Его достоинством является высокая точность – погрешность $R \sim h^5$ – и меньшая склонность к возникновению неустойчивости решения.

Автоматическое изменение шага в ходе решения систем дифференциальных уравнений необходимо, если решение требуется получить с заданной точностью. При высокой точности (погрешность $\varepsilon < 10^{-3}$) и решении в виде кривых, с сильно различающейся крутизной, автоматическое изменение шага обеспечивает уменьшение общего числа шагов в несколько раз, резко уменьшает вероятность возникновения числовой неустойчивости, дает более равномерное расположение точек графика кривых (решений).

Метод Рунге-Кутта-Фельберга с автоматическим изменением шага дает более точную оценку погрешности (в сравнении с другими методами Рунге-Кутта) на каждом шаге и реализуется следующим алгоритмом:

1. Задаем число уравнений N , погрешность ε , начальный шаг интегрирования $h=H_0$ и начальные значения $x_0, y_{10}, \dots, y_{N0}$.
2. С помощью 6 циклов с управляющей переменной $j=1, 2, \dots, N$ вычисляем коэффициенты:

$$k_{0j} = h \cdot F_j(x_j; Y_{ji});$$

$$k_{1j} = h \cdot F_j\left(x_j + \frac{2}{9}h; Y_{ji} + \frac{2}{9}k_{0j}\right);$$

$$k_{2j} = h \cdot F_j\left(x_j + \frac{1}{3}h; Y_{ji} + \frac{1}{12}k_{0j} + \frac{1}{4}k_{1j}\right);$$

$$k_{3j} = h \cdot F_j\left(x_j + \frac{3}{4}h; Y_{ji} + \frac{69}{128}k_{0j} - \frac{143}{128}k_{1j} + \frac{135}{64}k_{2j}\right);$$

$$k_{4j} = h \cdot F_j\left(x_j + h; Y_{ji} - \frac{17}{12}k_{0j} + \frac{27}{4}k_{1j} - \frac{27}{5}k_{2j} + \frac{16}{15}k_{3j}\right);$$

$$k_{5j} = h \cdot F_j\left(x_j + \frac{5}{6}h; Y_{ji} + \frac{65}{432}k_{0j} - \frac{5}{16}k_{1j} + \frac{13}{16}k_{2j} + \frac{4}{27}k_{3j} + \frac{5}{144}k_{4j}\right).$$

3. Находим (в последнем цикле) значение

$$y_{j(i+1)} = y_{ji} + \frac{1}{9}k_{0j} + \frac{9}{20}k_{2j} + \frac{16}{45}k_{3j} + \frac{1}{12}k_{4j}$$

и погрешность

$$R_{j(i+1)} = \frac{1}{150}k_{0j} - \frac{3}{100}k_{2j} + \frac{16}{75}k_{3j} + \frac{1}{20}k_{4j} - \frac{6}{25}k_{5j}.$$

В этом методе погрешность – разность приращений $y_{j(i+1)}$, вычисленных по двум формулам: порядка 4 и порядка 5. Последняя формула не приводится, но использована для вычисления $R_{j(i+1)}$.

4. Проверяем выполнение условий:

если $R_{j(i+1)} > \varepsilon$, шаг h уменьшается вдвое;

если $R_{j(i+1)} < \varepsilon/20$, шаг h увеличивается вдвое.

Задание: В случае двухуровневых систем кинетика фононного узкого горла описывается системой двух уравнений для разности населенности уровней и числа резонансных фононов:

$$\begin{aligned} -\frac{dx}{dt} &= \frac{1}{\tau}(zx + x - 1), \\ \frac{dz}{dt} &= -\frac{z}{\tau_{ph}} + b\frac{dx}{dt}, \end{aligned}$$

где $x = T_0/T_z$, $z = (n - n_0)/n_0$.

Здесь T_0 , T_z - температуры термостата и спиновой системы, n - число неравновесных фононов, n_0 - их равновесное значение, τ - время спин-решеточной релаксации, τ_{ph} - время жизни фононов в отсутствие спин-фононного взаимодействия, величина b представляет собой отношение теплоемкости системы спинов к "теплоемкости" неравновесных фононов.

Если первоначально привести спиновую систему в сильно неравновесное состояние - добиться инверсии заселенностей спиновых уровней с помощью быстрого адиабатического прохождения или 180° -ного импульса большой мощности (когда T_z и $x < 0$), то, в условиях фононного узкого горла ($\sigma = b\tau_{ph} / \tau \gg 1$), возникает фононная лавина.

Полагая $\tau = 5 \cdot 10^{-2} \text{ с}$, $\tau_{ph} = 3 \cdot 10^{-5} \text{ с}$, $b = 2.5 \cdot 10^4$, учитывая, что при $t = 0$ $z = 0$, проследить временную эволюцию спиновой системы (x) и неравновесных фононов (z) при следующих начальных значениях x : -1, -0.75, -0.5. Построить соответствующие графики. При численном решении использовать метод Рунге - Кутты – Фельберга (сравнить его с методом Эйлера по быстродействию и точности).

3.4. Уравнения в частных производных гиперболического типа. Метод секток

Задание: Используя алгоритмы второго порядка, приведенные в [4], составить программы для решения первой и третьей краевых задач.

Результат должен быть представлен в виде таблицы значений функции $U(x,y)$ размером 11 на 11. При решении использовать шаг, как минимум 1/100 от данного интервала, если это возможно. В этом случае на печать выводится каждое 10 значение $U(x,y)$.

$$a) \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} - 2 \frac{\partial^2 U}{\partial y^2} = e^{xy} (y^2 - 2x^2) - \cos x + 2 \sin y, \quad 0 \leq x \leq 1, \quad 0 \leq y \leq 1$$

$$U(x,0)=1+\cos x, \quad U(0,y)=y, \quad U(1,y)=e^y+\sin y+0.54, \quad \left. \frac{\partial U}{\partial y} \right|_{y=0} = 1+x;$$

$$b) \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 U}{\partial y^2} - 8xy = 0, \quad 0 \leq x \leq 1, \quad 0 \leq y \leq 1,$$

$$U(x,0)=x, \quad U(0,y)=y, \quad U(1,y)=1-y, \quad \left. \frac{\partial U}{\partial y} \right|_{y=0} = 0;$$

$$c) \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} - 2 \frac{\partial^2 U}{\partial y^2} = e^{ky} (y^2 - 2x^2) - \cos x + 2 \sin y, \quad 0 \leq x \leq 1, \quad 0 \leq y \leq 1,$$

$$U(x,0)=1+\cos x, \quad \left. \frac{\partial U}{\partial y} \right|_{y=0} = 1+x, \quad \left(\frac{\partial U}{\partial x} + \delta_1(y)U(x,y) \right) \Big|_{x=0} = y(\sin y + 3),$$

$$\left(\frac{\partial U}{\partial x} + \delta_2(y)U(x,y) \right) \Big|_{x=1} = e^y (y^2 + y) + y^2 (\sin y + 0.54) - 0.84,$$

$$\delta_1(y)=y, \quad \delta_2(y)=y^2;$$

$$d) \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} - 4 \frac{\partial^2 U}{\partial y^2} = xy, \quad 0 \leq x \leq 1, \quad 0 \leq y \leq 1,$$

$$U(x,0) = x^2, \quad \left. \frac{\partial U}{\partial y} \right|_{y=0} = 8x - 2, \quad \left(\frac{\partial U}{\partial x} + \delta_1(y)U(x,y) \right) \Big|_{x=0} = y^2,$$

$$\left(\frac{\partial U}{\partial x} + \delta_2(y)U(x,y) \right) \Big|_{x=1} = 5y^3 + 4y, \quad \delta_1(y)=y, \quad \delta_2(y)=y^2.$$

4. Компьютерное моделирование рождения хаоса в детерминированной системе. Последовательность бифуркаций Фейгенбаума для квадратичного отображения

4.1. Смоделировать поведение простого квадратичного отображения

$$x_{n+1} = f(x_n) = Ax_n(1-x_n), \quad 0 \leq A \leq 4. \quad (2)$$

4.2. Изменяя параметр A исследовать каскад бифуркаций Фейгенбаума (бифуркаций удвоения периода) (з. 7.1, 7.3 [12]), построив функции $f(x_n)$, $F=f^2(x_n)$, $F^2=f^4(x_n)$. Найти последовательность бифуркационных значений параметра A : $A_0=1, A_1, A_2, A_3, \dots$. Проверить формулу (1).

4.3. Исследовать хаотический режим отображения (2) (з. 7.2 [12])

4.4 Исследовать поведение "неподвижных точек" кратности 1, 2, 4 для отображения (2) и построить "лестницу" Ламерея (з. 7.4 [12]).

4.5 Рассмотреть другие одномерные отображения

$$x_{n+1} = f(x_n) = x_n \exp[r(1-x_n)]; \quad x_{n+1} = f(x_n) = r[1-(2x_n-1)^4].$$

Выполнить для них задания 4.1.-4.3.

4.6 Рассмотреть двумерное отображение Хенона

$$x_{n+1} = y_n + 1 - a(x_n)^2; \quad y_{n+1} = bx_n,$$

проитерировать для него первые 1000 (10000) точек для $a = 1.4, b=0.3, \{x_0=0, y_0=0\}$ (использовать следующую область для выведения точек на график - $\{-1.5 \leq x \leq 1.5; -0.45 \leq y \leq 0.45\}$).

Изменить начальные значения $\{x_0=0.63135448, y_0=0.18940634\}$, сравнить полученные две кривые.

Увеличить шкалу графика $\{0.5 \leq x \leq 0.75; 0.15 \leq y \leq 0.21\}$ и построить новый график для второго начального значения (при необходимости увеличить число вычисляемых точек). По возможности повторить процедуру для $\{0.6305 \leq x \leq 0.6325; 0.1889 \leq y \leq 0.1895\}$.

Видно ли "самоподобие тракторий", существует ли область на плоскости, которую точки не могут покинуть (*странный аттрактор* Хенона)?

5. Теория возмущений в квантовой механике (вариационный метод Рунца)

С заданной точностью ε найти оценку сверху энергии основного состояния гармонического осциллятора (з. 7.27 [5])

$$E = \min_{\alpha} E(\alpha) = \int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{G}^*(x, \alpha) \hat{H}(x, \alpha) \mathcal{G}(x, \alpha) dx,$$

где $\hat{H} = \frac{\hat{p}_k^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2}$, используя пробные функции:

a) $\mathcal{G}(x, \alpha) = c \exp(-\alpha x^2)$, $c = \sqrt{\frac{2\alpha}{\pi}}$,

b) $\mathcal{G}(x, \alpha) = c(1 + \alpha x^2) \exp(-\alpha x^2)$, $c = \frac{16}{27} \sqrt{\frac{2\alpha}{\pi}}$,

с) $\mathcal{G}(x, \alpha) = c(1 + \alpha x^2) \exp(-\alpha x^2)$, $c = \frac{16}{27} \sqrt{\frac{2\alpha}{\pi}}$,

d) $\mathcal{G}(x, \alpha) = c(1 - \alpha|x|)$, $c = \sqrt{\frac{3\alpha}{2}}$.

Сравнить с точным решением $E = \hbar\omega/2$ и аналитическими решениями [5].

Примечание: Перед решением необходимо, во-первых, обезразмерить параметры задачи - перейти к атомным единицам и, во-вторых, получить аналитические оценки для пределов интеграла.

6. Нахождение зависимости средней величины компоненты спина S_z от температуры для простой кубической решетки (квантовая статистика)

Среднее значение компоненты спина S_z , находящегося в узлах простой кубической решетки (a - постоянная решетки), удовлетворяет следующей системе уравнений

$$\frac{\langle S_z \rangle}{N} \sum_{\mathbf{k}} \text{cth} \frac{E_{\mathbf{k}}}{2k_B T} = \frac{1}{2},$$

где $E_{\mathbf{k}} = -2J \langle S_z \rangle \{3 - \cos k_x a - \cos k_y a - \cos k_z a\}$ - энергия обменного взаимодействия.

Используя переход от суммирования по волновому вектору \mathbf{k} к интегрированию

$$\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \dots \Rightarrow \frac{V}{(2\pi)^3} \int_{-\pi/a}^{\pi/a} \int_{-\pi/a}^{\pi/a} \int_{-\pi/a}^{\pi/a} \dots dk_x dk_y dk_z, \quad (3)$$

меняя температуру T , найти зависимость $\langle S_z \rangle$ от температуры (положить $k_B T_c \cong 2J$, $V=a^3$). Построить график.

Замечание: перед решением обезразмерить задачу ($t=T/T_c$ и т.д.).

7. Вычисление плотности одноэлектронных состояний (квантовая статистика)

Плотность одноэлектронных состояний $\rho(\varepsilon)$ в полосе со спектром $\varepsilon(\mathbf{k})$ определяется, как известно, соотношением

$$\rho(\varepsilon) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \delta(\varepsilon - \varepsilon(\mathbf{k})),$$

где суммирование идет по первой зоне Бриллюэна.

Для двумерной квадратной решетки закон дисперсии можно записать

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = -2t(\cos k_x + \cos k_y),$$

а для простой кубической решетки

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = -2t(\cos k_x + \cos k_y + \cos k_z).$$

Здесь постоянная решеток положена равной единице, t есть интеграл перекока между ближайшими соседями, а N - полное число узлов.

Осуществляя переход от суммирования к интегрированию (при $N \rightarrow \infty$) (см. формулу (3)), вычислить плотность состояний для двумерной квадратной и простой кубической решеток и построить соответствующие графики ($2t\rho = f(\varepsilon / 2t)$).

8. Нахождение параметров теории из сравнения с экспериментальными данными. Метод наименьших квадратов

Пусть имеются набор экспериментальных точек $\{x_i^{\text{exp}}, y_i^{\text{exp}}\}$ ($i=1,2,\dots,N$) и теоретическое выражение, которое должно описывать этот эксперимент $y^{\text{th}}(x, \alpha, \beta, \gamma, \dots) = f(x, \alpha, \beta, \gamma, \dots)$. Здесь $\alpha, \beta, \gamma, \dots$ - параметры теории, которые должны быть найдены из условия "наилучшего" совпадения теории и эксперимента. Условие для нахождения $\alpha^{\text{th}}, \beta^{\text{th}}, \gamma^{\text{th}}, \dots$ - теоретических (подгоночных) параметров записывается в следующем виде

$$F(\alpha_{\text{th}}, \beta_{\text{th}}, \gamma_{\text{th}}, \dots) = \min_{\alpha, \beta, \gamma, \dots} F(\alpha, \beta, \gamma, \dots),$$

где
$$F(\alpha, \beta, \gamma, \dots) = \sum_{i=1}^N [y^{th}(x_i, \alpha, \beta, \gamma, \dots) - y^{exp}(x_i)]^2$$

Составить программу для нахождения подгоночных параметров для произвольной функции f , зависящей

а) от одного параметра; б) от двух параметров; в) от n параметров.

8.1. Ширина линии ПРЭП в магнии

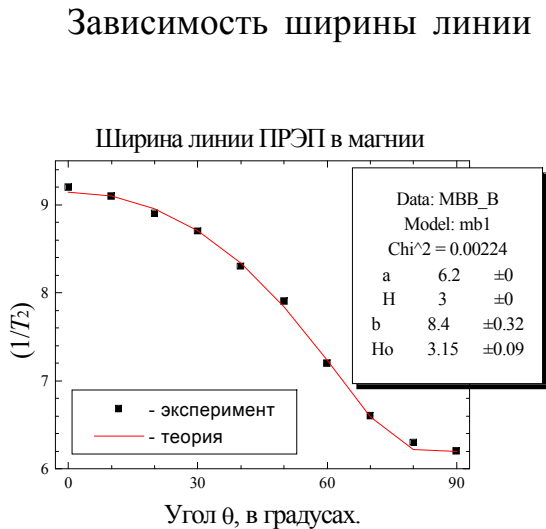


Рис. 1 Подгонка теории под эксперимент (*Origin*).

Зависимость ширины линии парамагнитного резонанса на электродах проводимости (ПРЭП) в магнии от угла наклона постоянного магнитного поля относительно гексагональной оси кристалла θ определяется следующей формулой

$$(1/T_2)^{th} = a + b \exp\left(-\frac{H_0}{H \cos \theta}\right), \quad \text{где}$$

$a = 6,2 \times 10^9 \text{ c}^{-1}$ - вклад в ширину линии, не зависящий от θ ; второе слагаемое в формуле описывает влияние магнитного пробоя; $H = 3 \text{ кГс}$ - величина магнитного поля; H_0 - характерное поле магнитного пробоя,

b - подгоночный параметр.

В следующих задачах методом наименьших квадратов найти

а) b ($H_0 = 5,85 \text{ кГс}$)

θ (°)	0	10	20	30	40	50	60	70	80	90
$(1/T_2)^{exp} (10^9 \text{ c}^{-1})$	9,0	9,0	8,7	8,3	7,8	7,2	6,6	6,3	6,2	6,2

б) H_0 и b

θ (°)	0	10	20	30	40	50	60	70	80	90
$(1/T_2)^{exp} (10^9 \text{ c}^{-1})$	9,2	9,1	8,9	8,7	8,3	7,9	7,2	6,6	6,3	6,2

в) H_0 и b

θ (°)	0	10	20	30	40	50	60	70	80	90
$(1/T_2)^{exp} (10^9 \text{ c}^{-1})$	9,1	9,0	8,7	8,4	7,9	7,3	6,7	6,3	6,2	6,2

Использовать при подгонке программу *Origin* (под Windows) или *MinSq* (под DOS). Построить графики теоретических и экспериментальных зависимостей.

Замечание: Не забыть перейти к радианам и избежать деления на нуль.

8.2. Парамагнитный резонанс на парамагнитных примесях в сверхпроводнике

Для ширины линии парамагнитного резонанса на парамагнитных примесях в сверхпроводнике получена следующая формула

$$\frac{\Delta H}{\Delta H_0} = \frac{2}{kT} \int_{\Delta}^{\infty} \frac{\varepsilon(\varepsilon + \Gamma) + \Delta^2}{\sqrt{\varepsilon^2 - \Delta^2} \sqrt{(\varepsilon + \Gamma)^2 - \Delta^2}} f(\varepsilon)[1 - f(\varepsilon + \Gamma)] d\varepsilon,$$

где $\Delta H(T)$ - ширина линии парамагнитного резонанса, $\Delta H_0 = \Delta H(T_c)$ - ширина линии в "нормальной" фазе, k - постоянная Больцмана,

$f(\varepsilon) = \frac{1}{1 + \exp(\varepsilon / kT)}$ - распределение Ферми, T - температура, T_c - температура

перехода из "нормальной" фазы в сверхпроводящую, Γ - параметр ($\Gamma/k=20K$). Составить программу для нахождения табличной зависимости $\Delta(T)$, зная таблицу экспериментальных значений ($T_c=93K$). Построить график $\Delta(T)$.

T (К)	93	83,7	71	62	50	40	20	0,4
$H/\Delta H_0$	1	0,818	0,364	0,09	0,01	0,001	0,0	0,0

8.3. Нахождение параметров диэлектрической релаксации в пористых стеклах

Скорость диэлектрической релаксации τ в пористых стеклах до недавнего времени описывалась формулой Фогеля - Фулхера - Тамманна (ФФТ)

$$\tau = \tau_0 \exp\left\{\frac{C}{T - T_0}\right\}, \quad (4)$$

где τ_0 - характерное время молекулярных колебаний, T_0 - переходная температура для идеального стекла, C - константа.

В экспериментальных работах израильских физиков было показано, что формула ФФТ хорошо описывает лишь низкотемпературное поведение скорости релаксации. Нигматуллиным Р.Р. и Рябовым Я.Е. (кафедра теоре-

тической физики КГУ) была предложена другая модель для описания указанного процесса

$$\tau = \tau_0 \exp \left\{ \frac{H_a}{kT} + C e^{-\frac{H_a}{kT}} \right\}. \quad (5)$$

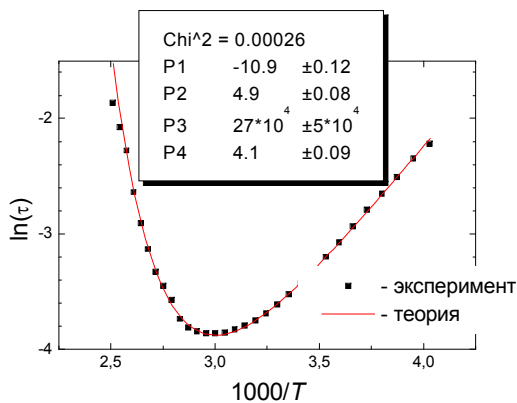


Рис.2 Вариант подгонки скорости диэлектрической релаксации под экспериментальные данные.

метров и значение минимизируемой величины. Использовать *Origin* или *MinSq*.

9. Суммирование по решетке

9.1 Расчет постоянной Маделунга

Составить программы, реализующие вычисление постоянной Маделунга в ионном кристалле

$$M_i = \sum_j \frac{q_i q_j}{R_{ij}} = q_i \sum_j \frac{q_j}{R_{ij}}$$

на i -ом ионе. Здесь q_i - заряд i -го иона, $R_{ij} = |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|$ - расстояние между i -м и j -м ионами. Суммирование в общем случае ведется по всем ионам кристалла. Для вычисления *решеточной суммы* использовать методы Эвьена и Эвальда [6].

Задание: Сравнить сходимость этих методов на примере вычислений для кристаллов со структурой перовскита ABO_3 и со структурой шеелита ABO_4 . Рассчитать M_i для ионов типа A и B .

По методу Эвьена заряд иона формально делится между всеми группами, в которые он входит, суммарный заряд группы равен нулю. Суммирование проходит по мультиполям: три внешних цикла с постоянными решетки по x, y, z , и один внутренний, перебирающий все ионы группы.

Параметры кубической решетки **перовскита** для разных кристаллов показаны в таблице (a - постоянная решетки при $T=298K$). На рис.3 и 4 показаны элементарные ячейки (q^* - фиктивные заряды Эвьена):

Кристалл	KMgF ₃	KNiF ₃	KCoF ₃	KFeF ₃	KMnF ₃
a (Å) с точностью ± 0.001 Å	3.960	4.014	4.069	4.121	4.190

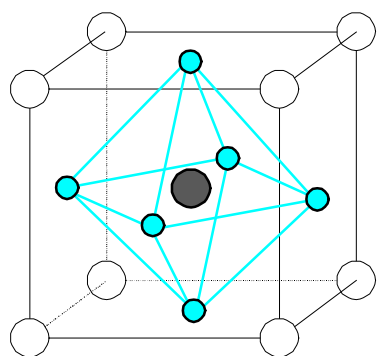
Координаты атомов в элементарной ячейке (рис.3):

A $(a/2, a/2, a/2), (a/2, a/2, -a/2), (a/2, -a/2, a/2), (-a/2, a/2, a/2),$
 $(a/2, -a/2, -a/2), (-a/2, a/2, -a/2), (-a/2, -a/2, a/2), (-a/2, -a/2, -a/2);$

B $(0, 0, 0);$

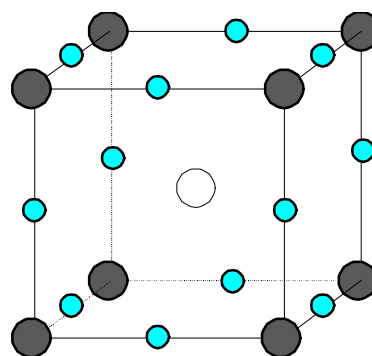
O $(a/2, 0, 0), (0, a/2, 0), (0, 0, a/2), (-a/2, 0, 0), (0, -a/2, 0), (0, 0, -a/2).$

В методе Эвальда сначала проводится суммирование по подрешеткам, каждая из которых состоит из ионов одного типа, отстоящих друг от друга на



- ион типа B ($q=2|e|,$
 $q^*=2|e|$);
- ион типа A ($q=|e|,$
 $q^*=|e|/8$);
- ион типа O (F)
($q=-|e|, q^*=-|e|/2$)

Рис.3 Элементарная ячейка перовскита (ион типа B в центре)



- ион типа B ($q=2|e|,$
 $q^*=|e|/4$);
- ион типа A ($q=|e|,$
 $q^*=|e|$);
- ион типа O (F)
($q=-|e|, q^*=-|e|/4$);

Рис.4 Элементарная ячейка перовскита (ион типа A в центре)

вектор решетки \mathbf{R}_j . Каждая n -я подрешетка описывается своим вектором подрешетки \mathbf{r}_n . Например, решетка с ионом В в центре имеет 5 подрешеток с векторами $\mathbf{r}_B=\mathbf{r}_1=(0,0,0)$, $\mathbf{r}_A=\mathbf{r}_2=(\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2})$, $\mathbf{r}_{O1}=\mathbf{r}_3=(0,0,\frac{1}{2})$, $\mathbf{r}_{O2}=\mathbf{r}_4=(0,\frac{1}{2},0)$, $\mathbf{r}_{O3}=\mathbf{r}_5=(\frac{1}{2},0,0)$.

Для ускорения сходимости сумма по каждой из подрешеток проводится по прямой и обратной решетке (для простоты запишем $\mathbf{r}_n=\mathbf{r}$):

$$\sum_j \frac{1}{|\mathbf{R}_j - \mathbf{r}|} = \frac{4\pi}{V_c} \sum_{q \neq 0} \frac{1}{q^2} e^{-q^2/4\tau^2} e^{i(\mathbf{q}\mathbf{r})} + \sum_{j \neq 0} \frac{1}{|\mathbf{R}_j - \mathbf{r}|} \operatorname{erfc}(\tau|\mathbf{R}_j - \mathbf{r}|) - \frac{2\tau}{\sqrt{\pi}}$$

Здесь \mathbf{q} (Ошибка!, Ошибка!, Ошибка!) – вектор обратной решетки (n_α – целые числа); V_c – объем элементарной ячейки прямой решетки. Параметр τ выбирается так, чтобы обе суммы сошлись с одинаковой скоростью (в нашем случае для перовскита $\tau=\sqrt{\pi/a}$); $\operatorname{erfc}(x)=1-\operatorname{erf}(x)$ – дополнительный интеграл ошибок, для ускорения его вычисления рекомендуется воспользоваться его аппроксимацией рациональными функциями, например, формулой 7.1.26 из справочника [7], стр. 122.

Положения атомов в элементарной ячейке в кристаллах со структурой **шее-лита** ABO_4 для ионов типа А и В (a – постоянная решетки в плоскости xOy , c – вдоль оси симметрии z) задается их координатами (в единицах a и c):

- А $(0, 0, 1/2), (0, 1/2, 3/4), (1/2, 1/2, 0), (1/2, 0, 1/4)$;
 В $(0, 0, 0), (0, 1/2, 1/4), (1/2, 1/2, 1/2), (1/2, 0, 3/4)$;
 О $(x, y, z), (y, -x, z), (-x, -y, z), (-y, x, -z),$
 $(x, y+1/2, 1/4-z), (y, 1/2-x, z+1/4), (-x, 1/2-y, 1/4-z),$
 $(-y, x+1/2, z+1/4), (x+1/2, y+1/2, z+1/2), (y+1/2, 1/2-x, 1/2-z),$
 $(1/2-x, 1/2-y, z+1/2), (1/2-y, x+1/2, 1/2-z), (x+1/2, y, 3/4-z),$
 $(y+1/2, -x, z+3/4), (1/2-x, -y, 3/4-z), (1/2-y, x, z+3/4).$

Параметры решетки (a и c) задаются следующей таблицей (все значения приведены в Ангстремах для $T=298\text{K}$)

Кристалл	a	c
LiDyF ₄	5.185	10.840
LiErF ₄ c	5.150	10.680
LiYbF ₄	5.130	10.680

x/a	y/a	z/c
0.2834	0.1661	0.0814

9.2 Расчет параметров кристаллического поля

Взаимодействие f -электрона с кристаллическим полем удобно записать с использованием эквивалентных операторов Стивенса. Гамильтониан в этом случае будет иметь вид:

$$H_{cryst} = \sum_{p,k} B_p^k O_p^k,$$

где параметры кристаллического поля B_p^k могут быть представлены в виде суммы отдельных вкладов в зависимости от природы взаимодействия [8]:

$$B_p^k = B_{pq}^k + B_{pd}^k + B_{ps}^k,$$

первое слагаемое – вклад поля точечных зарядов,

второе – вклад поля диполей,

третье слагаемое – обменный вклад, обусловленный перекрытием электронных облаков и неортогональностью волновых функций.

Раскладывая оператор кулоновского взаимодействия по сферическим функциям, несложно показать, что параметры кулоновского взаимодействия B_p^k записываются через суммы по узлам решетки (решеточные суммы):

$$B_{pq}^k = -K_p^k (1 - \sigma_p) e^2 \langle r^p \rangle \sum_{L,s} \frac{q_s}{r \binom{L}{s}^{p+1}} V_p^k,$$

где V однородный полином типа:

$$V_2^0 = \frac{3z^2}{r^2} - 1,$$

$$V_2^1 = \frac{xz}{r^2}, \quad V_2^{-1} = \frac{yz}{r^2},$$

$$V_2^2 = \frac{x^2 - y^2}{r^2}, \quad V_2^{-2} = \frac{2xy}{r^2} \dots,$$

K – числовой множитель, радиус вектор \mathbf{r} , определяется через индекс ячейки L и индекс подрешетки s , σ – параметр экранирования,

Задание: Рассчитать параметр B_{2q}^0 [см⁻¹] для соединений LiDyF₄, LiErF₄, LiYbF₄, используя параметры кристаллической решетки из задачи 9.1.

	σ_2	K_2^0	$\langle r^2 \rangle$ [R _B]
LiDyF ₄	0.600	0.25	0.726
LiErF ₄	0.558	0.25	0.666
LiYbF ₄	0.532	0.25	0.613

Примечание: а) R_B – радиус Бора. б) Расчет дипольных сумм по методу Эвальда описан в задании 9.3 или в книге [9].

9.3 Дипольно-волновые решеточные суммы

При решении задач по динамическим явлениям в кристаллической решетке часто необходимо рассчитать решеточные суммы типа:

$$f(\mathbf{q}) = \sum_r \frac{1}{r^3} \left(\frac{3\alpha\beta}{r^2} - \delta_{\alpha\beta} \right) e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}}, \quad (6)$$

где α и β - компоненты радиус-вектора \mathbf{r} атома.

Например, для расчета колебательного спектра кристалла мы должны решить уравнение

$$m(k)u_\alpha \begin{pmatrix} L \\ s \end{pmatrix} = - \sum_{\beta, L', k'} \Phi''_{\alpha\beta} \begin{pmatrix} L & L' \\ s & s' \end{pmatrix} u_\beta \begin{pmatrix} L' \\ s' \end{pmatrix}, \quad (7)$$

где u_α - α -компонента динамического смещения атома, находящегося в подрешетке s ячейки L , из положения равновесия.

Если межатомные взаимодействия можно описать с помощью кулоновского и некулоновского потенциалов, то силовые константы второго порядка равны

$$\Phi'' = \Phi''_c + \Phi''_n,$$

где

$$\Phi''_c = \frac{1}{r^3} \left(\frac{3\alpha\beta}{r^2} - \delta_{\alpha\beta} \right),$$

$$r = r \begin{pmatrix} L' \\ s' \end{pmatrix} - r \begin{pmatrix} 0 \\ s \end{pmatrix}.$$

В \mathbf{q} -представлении уравнение (7) приводится к матричному уравнению на собственные вектора и собственные частоты колебаний решетки

$$\mathbf{D}\mathbf{e} = \omega^2 \mathbf{e},$$

где динамическая матрица системы

$$D_{\alpha\beta}(ss', \mathbf{q}) = \frac{1}{\sqrt{m(s)m(s')}} \sum_{L'} \Phi'' \begin{pmatrix} 0 & L' \\ s & s' \end{pmatrix} e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}}.$$

Рассчитать вклады в динамическую матрицу, обусловленные кулоновским взаимодействием, можно согласно следующей схеме [10].

Пусть нам необходимо вычислить суммы типа:

$$а) \quad S_n(ss', \mathbf{q}) = \frac{1}{\rho} \sum_{L'} |r|^{-n} e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}},$$

$$б) \quad S_n^{\alpha\beta}(ss', \mathbf{q}) = \frac{1}{\rho} \sum_{L'} \frac{\alpha\beta}{r^n} e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}},$$

где ρ - количество узлов решетки на единичный объем.

Чтобы обеспечить быструю сходимость сумм при любых n и \mathbf{q} , используется метод Эвальда – суммирование по прямой и обратной решетке:

$$S_n(ss', \mathbf{q}) = \frac{1}{\rho} \frac{(\pi\tau)^{n/2}}{\Gamma(n/2)} \left(S_a + S_b - \frac{2}{n} \right).$$

Сумма по прямой решетке:

$$S_a = \sum_{L'} \varphi_{n/2-1} \left(r^2 \tau \pi \right) e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}}.$$

Сумма по обратной решетке:

$$S_b = \frac{\rho}{\tau^{3/2}} \sum_{L'} \varphi_{1/2-n/2} \left(\frac{(2\pi\mathbf{b} - \mathbf{q})^2}{4\pi\tau} \right),$$

\mathbf{b} – вектор обратной решетки, $\Gamma(x)$ – гамма функция.

Параметр τ выбирается так, что S_a и S_b сходятся с одинаковой скоростью.

Функции Мизры:

$$\varphi_m(x) = \int_1^{\infty} \beta^m e^{-\beta x} d\beta$$

удовлетворяют следующим рекуррентным формулам:

$$\varphi_m(x) = \varphi_0(x) + \frac{m}{x} \varphi_{m-1}(x),$$

$$\frac{\partial}{\partial x} \varphi_m(x) = -\varphi_{m+1}(x),$$

$$\varphi_0(x) = \frac{e^{-x}}{x},$$

$$\varphi_{-1/2}(x) = \sqrt{\frac{\pi}{x}} (1 - \operatorname{erf}(\sqrt{x})),$$

$\operatorname{erf}(x)$ – интеграл ошибок.

Суммы типа б) могут быть получены дифференцированием $S_n(\mathbf{q})$:

$$S_n^{\alpha\beta}(ss', \mathbf{q}) = \frac{\partial}{\partial q_\alpha} \frac{\partial}{\partial q_\beta} S_n(ss', \mathbf{q}).$$

Задание: Составить программу расчета дипольно волновых сумм (6) для кристаллов со структурой перовскита и шеелита (см. предыдущее задание).

9.4 Магنونный спектр в диполь-дипольном ферромагнетике

Диполь-дипольное магнитное взаимодействие в кристалле описывается гамильтонианом:

$$H_{dip} = \frac{1}{2} g^2 \mu_b^2 \sum_{i,j} \left\{ \frac{\mathbf{s}_i \mathbf{s}_j}{r^3} - \frac{3(\mathbf{s}_i \mathbf{r})(\mathbf{s}_j \mathbf{r})}{r^5} \right\}.$$

В спин-волновом приближении он может быть представлен в виде:

$$H_{dip} = E_0 + \sum_{\mathbf{q}} A_{\mathbf{q}} a_{\mathbf{q}}^+ a_{\mathbf{q}} + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q}} \left(B_{\mathbf{q}} a_{\mathbf{q}} a_{-\mathbf{q}} + B_{\mathbf{q}}^* a_{\mathbf{q}}^+ a_{-\mathbf{q}}^+ \right),$$

$$E_0 = -\frac{1}{2} M_0^2 D^{zz}(0),$$

$$A_{\mathbf{q}} = \frac{1}{2} \frac{M_0^2}{\rho S} \left(2D^{zz}(0) + D^{zz}(\mathbf{q}) \right),$$

$$B_{\mathbf{q}} = -\frac{1}{2} \frac{M_0^2}{\rho S} \left(D^{xx}(\mathbf{q}) - D^{yy}(\mathbf{q}) - 2iD^{xy}(\mathbf{q}) \right),$$

$$D^{\alpha\beta}(\mathbf{q}) = \sum_{i,j} \left(\frac{3\alpha\beta}{r^2} - \delta_{\alpha\beta} \right) e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}},$$

$M_0 = g\mu_B \rho S$ – z-компонента вектора намагниченности.

Диагональная форма диполь-дипольного гамильтониана:

$$H_{dip} = E_0 - \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q}} A_{\mathbf{q}} + \sum_{\mathbf{q}} E_{\mathbf{q}} \left(c_{\mathbf{q}}^+ c_{\mathbf{q}} + \frac{1}{2} \right),$$

$$E_{\mathbf{q}} = E_{-\mathbf{q}} = \pm \left(|A_{\mathbf{q}}|^2 - |B_{\mathbf{q}}|^2 \right)^{1/2}.$$

Задание: Составить программу расчета энергии основного состояния для простой кубической решетки $S=1/2$, $g=1$, постоянная решетки $a=1$. Рассчитать магنونный спектр простой кубической решетки в направлениях \mathbf{q} : $[1,0,0]$, $[1,1,0]$, $[1,1,1]$.

10. Нахождение фазового спектра электронов проводимости в условиях когерентного магнитного пробоя (МП)

Рассмотрим движение электронов проводимости в пространстве квазимульсов по поверхности Ферми в достаточно сильном магнитном поле $\mathbf{H}(0,0,H)$ и учтем возможность квантового туннелирования электрона проводимости из зоны в зону (магнитный пробой), происходящего в областях аномального сближения траекторий. В \mathbf{p} -пространстве эти малые магнитопробойные области или МП-узлы связывают обычные квазиклассические траектории электронов проводимости в МП-конфигурации. Несколько примеров возможных МП-конфигураций приведено на рис. 5.

Спектр электронов проводимости определяется равенством нулю дисперсионной функции $D(\gamma)$. Для нахождения МП-спектра при произвольной вероятности МП w необходимо численно найти множество решений образующихся трансцендентных уравнений, представляющих собой конечные тригонометрические полиномы относительно квазиклассических фаз γ_i , набираемых электронами на различных участках МП-конфигурации. Тем самым при разных значениях вероятности МП w из множества решений γ_i строится фазовый спектр [14].

Естественно, что для топологически разных открытых и закрытых МП-конфигураций возникнут разные типы спектра: открытые МП-конфигурации будут характеризоваться спектром типа магнитных зон, что зна-

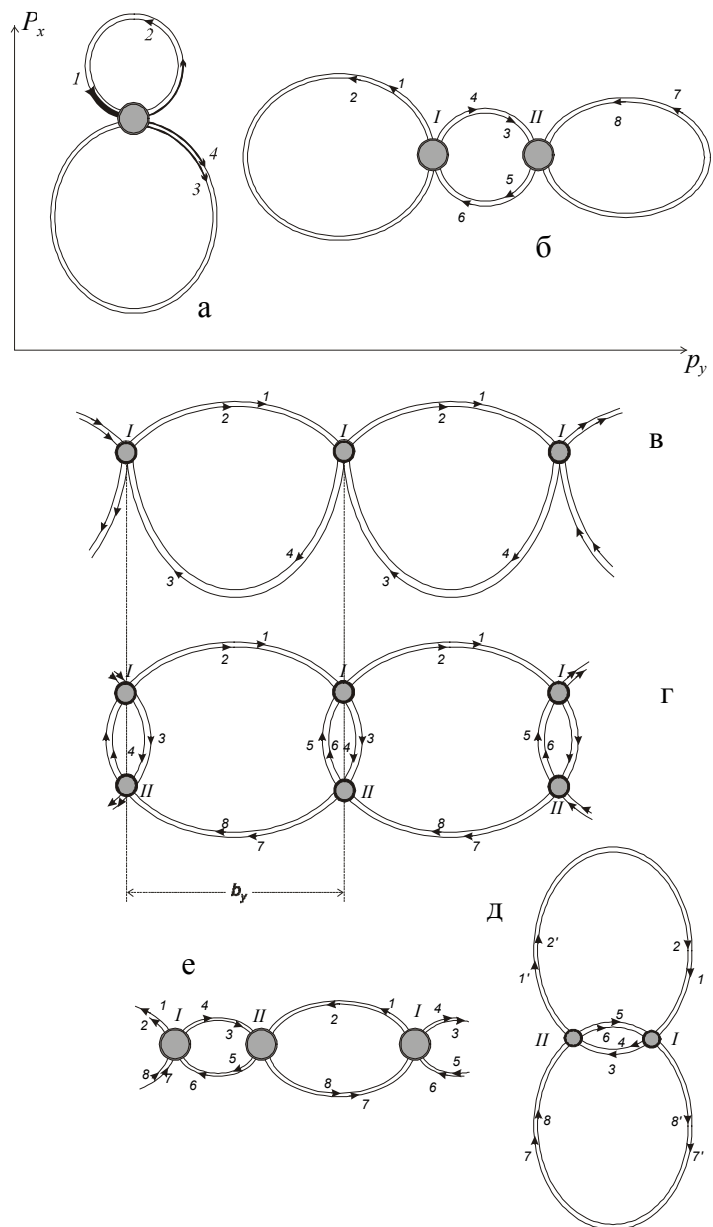


Рис. 5. Магнитопробойные (МП) - конфигурации.

чительно увеличивает объем вычислений. Получающиеся при этом спиновые расщепления и должны давать g -фактор электронов в условиях МП. Естественно, что g -фактор будет являться функцией от вероятностей МП, параметра СОВ α . В общем случае, не задаваясь конкретным законом дисперсии электронов в отсутствие МП, мы можем построить фазовый спектр электронов проводимости в условиях МП.

Для наиболее простой замкнутой МП-конфигурации с одним МП-узлом (рис. 5а), которую с учетом спинового расщепления можно назвать "двойной восьмеркой", соответствующее тригонометрическое уравнение $D(\gamma)=0$ выглядит так

$$D(\{\gamma_i\}) = \cos\Omega - \sqrt{1-w} \sum_{i=1}^4 \cos\Omega_i + (1-w) \sum_{i=1}^3 \cos\Omega_{i,4} + \frac{w}{1+\alpha^2} (\cos\Omega_{2,4} + \alpha^2 \cos\Omega_{2,3}) = 0 \quad (8)$$

где

$$\Omega = (\gamma_1 + \gamma_2 + \gamma_3 + \gamma_4)/2, \quad \Omega_i = \Omega - \gamma_i, \quad \Omega_{i,j} = \Omega_i - \gamma_j. \quad (8a)$$

Здесь w - вероятность магнитного пробоя в отсутствие спин-орбитального взаимодействия (СОВ), α - параметр СОВ ($0 \leq \alpha \leq 1$), $\gamma_i = \phi_i + \gamma_i^s + \pi$ - полная фаза, набираемая электроном проводимости на i - участке МП-конфигурации (см. рис.5) (ϕ_i - бесспиновая и γ_i^s - спиновая части, соответственно). Нечетные номера соответствуют участкам с направлением спина электрона вверх, четные - вниз. Конечно, все это рассматривается для фиксированного значения p_z .

В отсутствие СОВ, т.е. при $\alpha=0$, уравнение (8) факторизуется:

$$D^0(\{\gamma_i\}) = 2 \left(\cos \frac{\gamma_1 + \gamma_3}{2} - \sqrt{1-w} \cos \frac{\gamma_1 - \gamma_3}{2} \right) \left(\cos \frac{\gamma_2 + \gamma_4}{2} - \sqrt{1-w} \cos \frac{\gamma_2 - \gamma_4}{2} \right) = 0. \quad (9)$$

Если во всех γ_i положить здесь $\gamma_i^s = 0$, что эквивалентно полному пренебрежению спиновым расщеплением, то каждый сомножитель в (9) совпадает с функцией $D(\{\gamma_i\})$ для бесспиновой "восьмерки".

При $w=0$ (слабые поля, $H \ll H_0$ - отсутствие пробоя; H_0 - поле пробоя) спектр становится квазиклассическим. При этом $D(\{\gamma_i\})$ (8) разбивается на сомножители:

$$D_{w=0}(\{\gamma_i\}) = 8 \sin\left(\frac{\gamma_1}{2}\right) \sin\left(\frac{\gamma_2}{2}\right) \sin\left(\frac{\gamma_3}{2}\right) \sin\left(\frac{\gamma_4}{2}\right).$$

Равенство нулю каждого из них приводит к соотношению типа условия Лифшица-Онзагера

$$S_i(p_z) - (-1)^i \pi g_i \mu_B m_i H = \text{Ошибка!}(n + \text{Ошибка!})$$

и определяет эквидистантный спектр, возникающий при движении ЭП по квазиклассическим траекториям ($n=0,1,2,\dots$). Здесь $S_1=S_2$ и $S_1=S_2$ – бесспиновые площади верхней и нижней петли, соответственно; m_i и g_i – эффективные электронные массы и g -факторы на i участке.

Роль фазовой переменной выполняет в данном случае

$$x = \phi_1 / \pi = c S_1 / \pi e \hbar H, \quad \text{и} \quad S_3 = 11 S_1 / 3. \quad (10)$$

Указанное соотношение между площадями участков выбрано для удобства сравнения с известными результатами. Параметры спинового расщепления выбирались следующими

$$\gamma_{s,1} = \pi g_1 m_1 / 2m = \sqrt{2} \pi / 3, \quad \gamma_{s,3} = \pi g_1 m_1 / 2m = \sqrt{3} \pi / 2.$$

Значения переменной x , при которых $D(\gamma) = D(x) = 0$, и дают нам фазовый спектр.

На рис. 6 представлены графики зависимости "фазы" x от полной вероятности МП при различных значениях α . $w=1$ соответствует полному пробую, $w=0$ - его отсутствию.

Рис. 6а - спектр полностью "бесспиновой" ситуации, когда не учитывается спиновое расщепление ($\gamma_{s,1} = \gamma_{s,3} = 0$) и СОВ ($\alpha=0$). Этот фазовый спектр порождается любым из сомножителей дисперсионной функции (9). Его физический смысл легко понять, рассмотрев периодичность в простых предельных случаях.

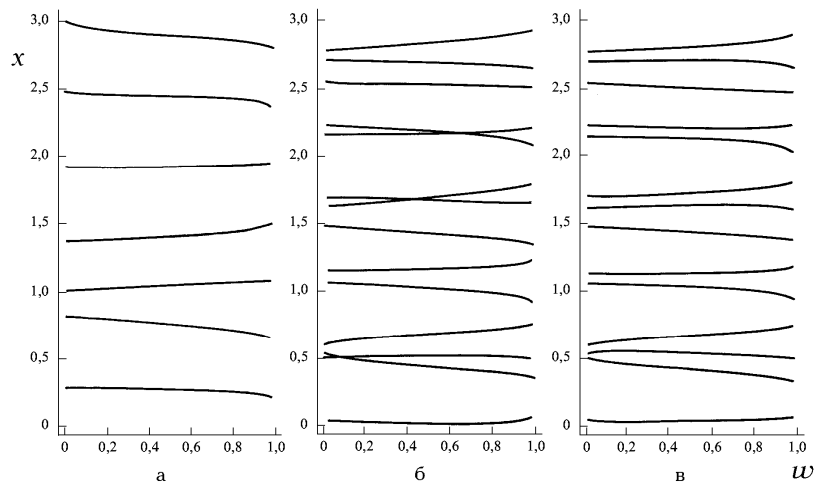


Рис. 6 Фазовый спектр двойной восьмерки (рис.7а).

(а) Бесспиновый случай ($\gamma_{s,1}=\gamma_{s,3}=0$, $\alpha=0$).

(б) $\alpha=0$, $\gamma_{s,1}=\pi\sqrt{2/3}$, $\gamma_{s,3}=\pi\sqrt{3/2}$ - каждый "бесспиновый" уровень расщепился на два; появились три точки "случайного" пересечения уровней.

(в) $\alpha=0,8$, $\gamma_{s,1}=\pi\sqrt{2/3}$, $\gamma_{s,3}=\pi\sqrt{3/2}$ - спиновые свойства учтены полностью; "случайное" вырождение снимается СОВ.

(а) $w=0$ - существует два набора эквидистантных уровней:

$$x_{a,1} n(w=0)=(6/11)(n+1/2), \quad x_{a,2} n(w=0)=2(n+1/2), \quad n=0,1,2, \dots \quad (11)$$

Первый набор соответствует движению электрона по нижней "бесспиновой" петле, второй - по верхней (рис. 5а). В соответствии с (11) в интервале $0 \leq x \leq 3$ укладывается $6+1=7$ ветвей.

При полном пробое образуется эквидистантный спектр, соответствующий полной площади восьмерки,

$$x_{a,n}(w=1)=(3/7)(n+1/2), \quad n=0,1,2, \dots$$

(б) Естественно, что учет спинового расщепления удваивает число корней дисперсионного уравнения $D(x)=0$ и ветвей спектра. Это хорошо видно из рис.6б,в.

В случае, когда СОВ не учитывается и спин ЭП при прохождении МП узлов не переворачивается ($\alpha=0$), в спектре при определенных значениях w (или H) могут возникнуть точки "случайного" вырождения. На рис. 6б хорошо видны три области такого вырождения. В предельных случаях наборы уровней определяются следующими выражениями

$$x_{1,n}^b(w=0) = \frac{6}{11}(n + \frac{1}{2}) \mp \frac{3}{11}g_3^s, \quad x_{2,n}^b(w=0) = 2(n + 1/2) \mp g_1^s,$$

$$x_n^b(w=1) = \frac{3}{7}(n + \frac{1}{2}) \mp \frac{3}{14}(g_1^s + g_3^s).$$

Верхние знаки соответствуют эффективному спину, направленному вверх. Последнее слагаемое определяет параметр спинового расщепления в случае $w=1$ и соответствует среднему g -фактору такой конфигурации $w=1$ и соответствует среднему g -фактору такой конфигурации.

Задание: Выполнить вычисления для простой восьмерки и построить фазовый спектр. Для нахождения множества решений удобно воспользоваться построением контурного сечения поверхности $z=D(w,x)$ плоскостью $z=0$. Сравнить с рис. 6. При необходимости использовать пакеты *Maple*, *Mathematica*.

11. Метод Монте-Карло в статистической физике

Разобрать главу 11-12 из книги Гулда и Тобочника [12] и составить программы по приведенным задачам. Разобрать книгу Биндера и Хеермана [11] (особенно подробно - часть 3 для модели Изинга с выполнением упражнений 3.34-3.39) (см. также главу 16 из книги [12]).

11.1 Случайные блуждания. Метод Метрополиса

1. Проверить численно закон Эйнштейна

$$\langle R^2 \rangle \sim t,$$

для двух-, трех- и четырехмерных решеток.

2. Разработать и запрограммировать алгоритм моделирования случайного блуждания без возвратов на двумерной решетке.

3. Разработать и запрограммировать алгоритм случайных блужданий без самопересечений на простой двумерной решетке.

11.2 Перколяции

Разработать и запрограммировать алгоритм идентификации бесконечного кластера, соединяющие противоположные стороны двумерной решетки.

11.3 Двумерная модель Изинга

Рассмотрим двумерную квадратную решетку, в каждом из узлов которой расположен спин $s=1/2$. Гамильтониан обменного взаимодействия между спинами имеет вид:

$$H = -J \sum_{i,j} s_i s_j,$$

J – константа обменного взаимодействия. Для $J>0$ состояние с наименьшей энергией является ферромагнитным, а для $J<0$ – антиферромагнитным. В гамильтониане учитывается только взаимодействие с четырьмя ближайшими спинами.

Чтобы промоделировать поведение такой системы при постоянной температуре T , зададим вероятность опрокидывания спина функцией Метрополиса:

$$p(\uparrow\downarrow) = \min\left(1, e^{-\frac{\Delta E(\uparrow\downarrow)}{kT}}\right).$$

Т.к. мы будем рассматривать систему ограниченных размеров, необходимо ввести граничные условия. Наиболее простой вариант – периодические граничные условия

$$s_{m,N+1} = s_{m,1},$$

$$s_{N+1,m} = s_{1,m}.$$

В двумерной системе возможны пять различных конфигурационных переходов, в зависимости от окружения данного спина. Соответствующие изменения энергии системы равны:

$$\Delta E = \pm 8J, \pm 4J, 0.$$

Задание: В системе спинов $N \times N = 32 \times 32$ с хаотическим расположением в начальный момент времени

1. Проследить за динамикой упорядочения спинов при $J = \pm 1$ для температур $kT = 1.5, kT = 2.5, kT = 3.5, kT = 5$.
2. Рассчитайте средние значения на спин энергии E , намагниченности M и квадратов этих величин в зависимости от температуры.
3. Оцените время (число шагов) корреляции для флуктуаций энергии системы в зависимости от температуры. Функция корреляции энергии:

$$C_E(t) = \langle E(t)E(0) \rangle - \langle E \rangle^2.$$

4. Постройте температурную зависимость удельной теплоемкости системы

$$C = \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial T}$$

вблизи температуры фазового перехода.

Примечание: Спины в системе можно выбирать как произвольно, так и последовательно. Количество итераций Монте-Карло на один спин должно быть не менее 10.

12.Использование графических и текстовых редакторов в прикладных целях

12.1. Построение рисунков к статьям и отчетам

а) Используя метод Харриссона, построить поверхность Ферми в приближении почти свободных электронов в схеме повторяющихся зон (в схеме приведенных зон) для металлов с валентностью (1-5), имеющих кубическую зону Бриллюэна - квадрат.

б) Нарисовать различные магнитопробойные конфигурации - траектории, по которым двигаются электроны в обратном пространстве под влиянием магнитного пробоя (рис.6).

12.2. Построение графиков

Используя полученные ранее функции, построить графики с помощью программы *Origin*:

- а) функции одной переменной,
- б) функции двух переменных.

12.3. Текстовые редакторы

Написать краткий отчет по проделанной работе, используя любой текстовый редактор.

Авторам приятно воспользоваться своим правом и поблагодарить проф. Еремина М.В., проф. Тагирова Л.Р. и н.с. Рябова Я.Е., которые предоставили некоторые задачи в этот сборник.

Литература

1. Форсайт Дж., Малькольм М., Моулер К. Машинные методы математических вычислений. М., Мир, 1980, 280 с.
2. Дьяконов В.П. Справочник по алгоритмам и программам на языке Бейсик для персональных ЭВМ. М.: Наука, Гл.ред. физ.-мат. лит., 1987.- 240с.
3. Шустер Г. Детерминированный хаос. М., Мир, 1988, 422 с.
4. Сборник задач по математике Ч. 4. Под. ред.Ефимова А.В. М., Наука, 1990, 304 с.
5. Учебные задания по квантовой механике. Под ред. Кочелаева Б.И. КГУ, каф. теор. физики, Казань, 1990, 38 с.
6. Займан Дж. Принципы твердого тела. М., Наука, 1975, 417 с.
7. Справочник по специальным функциям. Под ред. Абрамовица М. и Стиган И. М., Наука, 1979, 832 с.
8. Malkin B.Z. Crystal field and electron-phonon interaction in rare-earth ionic paramagnets. In: Spectroscopy of solids containing rare-earth ions, ed. by Kaplyanskii A.A. and Macfarlane R.M., pp. 13-49, Elsevier Science Publishers, Amsterdam, 1987.
9. Борн М. Динамическая теория кристаллической решетки. М. ИЛ., 1959, 257с.
10. Cohen M.H., Keffer F. Phys. Rev., **99**, N 4, p.1128, (1955).
11. Биндер К., Хеерман Д.В. Моделирование методом Монте-Карло в статистической физике. М., Наука, 1995, 142 с.
12. Гулд Х., Тобочник Я. Компьютерное моделирование в физике. Т.1, 2. М., Мир, 1990.
13. Двайт Г.Б. Таблица интегралов и другие математические формулы. М., Наука, 1977, 224 с.
14. Прошин Ю.Н., Усеинов Н.Х. Магнитный пробой с переворотом спина. УФН, 165, №1; 41 (1995).

Оглавление.

1. Некоторые причины появления ошибок в численных решениях.....	3
2. Численные методы интегрирования	4
2.1 Метод трапеций и метод Симпсона	4
2.2 Интегрирование методом Монте-Карло	6
2.3. Интегрирование методом Монте-Карло с неравномерным распределением вероятности (выборка по значимости)	8
3. Численное решение систем дифференциальных уравнений	9
3.1. Маятник с затуханием и периодическим возбуждением (теоретическая механика, динамический хаос). Метод Эйлера.....	9
3.2. Исследование явления фоновой лавины - численное решение уравнений Фонзэна-Стрендберга (Метод Рунге - Кутта – Фельберга).....	11
3.4. Уравнения в частных производных гиперболического типа. Метод сеток.....	13
4. Компьютерное моделирование рождения хаоса в детерминированной системе. Последовательность бифуркаций Фейгенбаума для квадратичного отображения	14
5. Теория возмущений в квантовой механике (вариационный метод Ритца)	14
6. Нахождение зависимости средней величины компоненты спина S_z от температуры для простой кубической решетки (квантовая статистика)	15
7. Вычисление плотности одноэлектронных состояний (квантовая статистика)	16
8. Нахождение параметров теории из сравнения с экспериментальными данными. Метод наименьших квадратов	16
8.1. Ширина линии ПРЭП в магнии.....	17
8.2. Парамагнитный резонанс на парамагнитных примесях в сверхпроводнике	18
8.3. Нахождение параметров диэлектрической релаксации в пористых стеклах.....	18
9. Суммирование по решетке.....	19
9.1 Расчет постоянной Маделунга	19
9.2 Расчет параметров кристаллического поля.....	22
9.3 Дипольно-волновые решеточные суммы	23
9.4 Магنونный спектр в диполь-дипольном ферромагнетике	25
10. Нахождение фазового спектра электронов проводимости в условиях когерентного магнитного пробоя (МП).....	26
11. Метод Монте-Карло в статистической физике.....	30
11.1 Случайные блуждания. Метод Метрополиса.....	30
11.2 Перколяции	30
11.3 Двумерная модель Изинга	31
12. Использование графических и текстовых редакторов в прикладных целях	32
12.1. Построение рисунков к статьям и отчетам	32
12.2. Построение графиков	32
12.3. Текстовые редакторы.....	32
Оглавление	34