

Primena *Monte Carlo* i *Bethe ansatz* metoda u ispitivanju osobina 1D Hajzenbergovog modela magnetika

Koristeći Bethe ansatz metod rešavali smo svojstveni problem hamiltonijana Hajzenbergovog modela magnetika. Zbog velike dimenzije problema nismo bili u mogućnosti da odredimo ceo energetska spektar. Umesto toga, koristeći Monte Carlo metod, izračunali smo samo pojedine svojstvene vrednosti, a zatim su tako dobijeni rezultati iskorišćeni za ispitivanje ponašanja susceptibilnosti i specifične toplote pomenutog sistema. Dobijeni rezultati slažu se sa postojećim podacima iz literature koji su nastali primenom drugačijih pristupa istom problemu.

Uvod

Model kvantnog spinskog lanca u prirodi odgovara kvazi-jednodimenzionalnim magnetnim izolatorima (Karbach *et al.* 1997). U takvim materijalima magnetni joni (npr. Cu^{++} i Co^{++} sa efektivnim spinom $s = 1/2$, Ni^{++} sa $s = 1$ i Mn^{++} sa $s = 5/2$) obrazuju linearne nizove međusobno razdvojene velikim nenamagnetisanim molekulima. Posledica Hajzenbergove kvantno mehaničke formulacije modela magnetika preko postojanja efektivne interakcije među spinovima elektrona susednih čvorova u lancu, zasnovane na Kulonovoj odbojnoj sili i Paulijevom principu isključenja, jeste nastanak mikroskopske teorije magnetizma, a samim tim i objašnjenje mnogih fenomena na koje utiču spinovi elektrona. Interesovanje za kvazi-jednodimenzionalne magnetne materijale stimulisalo je intenzivna teorijska proučavanja spinskih lanaca, a posebno Hajzenbergovog modela istih, od početka šezdesetih godina prošlog veka do danas.

Hans Bete je 1931. godine predstavio metod za dobijanje egzaktnih svojstvenih vrednosti i svojstvenih vektora 1D Hajzenbergovog modela (Karbach *et al.* 1997) sa spinom $1/2$, tj. linearnog niza čestica sa jednakim energijama interakcije među česticama koje su najbliži susedi. Parametrizacija svojstvenih vektora koju je tada uveo, poznata pod imenom *Bethe ansatz* (Karbach *et al.* 1997), vremenom je stekla širu primenu tako da se

Marina Marinković (1984), Šid, Naselje Istok C2, učenica 4. razreda Matematičke gimnazije u Beogradu

mnogi kvantni višestručni sistemi danas rešavaju pomoću neke varijante ovog metoda.

Akcentat ovog rada je na ilustraciji primene *Bethe ansatz* i *Monte Carlo* metoda u kompjuterskom dobijanju nekih termodinamičkih veličina kvantnih fizičkih sistema. Energetski spektar kvantnog sistema, kao rešenje sistema jednačina *Bethe ansatz*-a, moguće je dobiti isključivo numerički, konverzijom pogodno modifikovanih jednačina *Bethe ansatz*-a u iterativni proces (Korbach *et al.* 1998), no za ovakav poduhvat potrebno je prethodno složeno teorijsko razmatranje prirode tzv. *Bethe*-ovih kvantnih brojeva kojima je određeno osnovno stanje sistema, kao i veliki kompjuterski resursi, jer u tom slučaju program prolazi kroz sve kandidate za svojstvena stanja sistema čiji broj sa povećanjem N eksponencijalno raste. Umesto toga, odlučili smo da za dobijanje informacija o pomenutom energetskom spektru primenimo kombinaciju klasičnog *Monte Carlo* metoda i iterativnog postupka zasnovanog na *Bethe ansatz* jednačinama. Na ovaj način moguće je dobiti rezultate vrlo bliske egzaktnim teorijskim rešenjima. Metod je ilustrovan na 1D izotropnom Hajzenbergovom modelu magnetnih materijala (feromagnetika i antiferomagnetika), pri čemu proučavanje karakteristika ovog modela omogućava da predvidimo neke osobine različitih vrsta kvazi-jednodimenzionalnih materijala.

Magnetici

Da bismo mogli da procenimo da li rezultati dobijeni u simulaciji zaista odlikavaju realno stanje fizičkog sistema koji proučavamo, potrebno je poznavanje osnova teorije magnetizma i nekih karakterističnih osobina magnetika.

Magnetna susceptibilnost magnetika χ_B u magnetnom polju jačine B određena je sledećim izrazom:

$$\chi_B = \mu_0 \frac{dM}{dB} \quad (1)$$

gde je μ_0 magnetna propustljivost vakuuma, a M magnetizacija sistema.

U praksi se često koriste susceptibilnost po jediničnoj zapremini date supstance χ_m kao i molarna susceptibilnost $\chi_{m,mol}$, pri čemu važi $\chi_{m,mol} = \chi_m V_{mol}$, gde je V_{mol} zapremina jednog mola posmatrane supstance. U zavisnosti od znaka i intenziteta susceptibilnosti, magnetici su svrstani u tri grupe:

- dijamagnetici, čija je χ_m negativna i mala po apsolutnoj vrednosti ($|\chi_{m,mol}|$ iznosi približno 10^{-11} do 10^{-10} m³/mol);
- paramagnetici, čija χ_m takođe nije velika po apsolutnoj vrednosti, ali je pozitivna ($\chi_{m,mol}$ iznosi približno 10^{-10} do 10^{-9} m³/mol);

- feromagnetici, čija je χ_m pozitivna i dostiže velike vrednosti ($\chi_{m,mol}$ iznosi približno $1 \text{ m}^3/\text{mol}$). Za razliku od paramagnetika, susceptibilnost feromagnetika zavisi od jačine magnetnog polja u kome se magnetik nalazi.

Osnove teorije feromagnetizma postavili su ruski fizičar Jakov Frenkel i nemački fizičar Verner Hajzenberg 1928. godine. Oni su proučavanjem giro-magnetnog fenomena došli do zaključka da je objašnjenje feromagnetnih osobina supstanci u direktnoj vezi sa magnetnim momentom, koji se javlja kao posledica spina elektrona. U određenim uslovima, u kristalima se javljaju sile koje dovode magnetne momente elektrona u međusobno paralelne položaje. Objašnjenje ovih sila dala je kvantna mehanika, a posledica njihovog delovanja je tzv. spontana magnetizacija, pri kojoj se po pojedinačnim oblastima (domenima) feromagnetik spontano namagnetise dok ne dostigne određenu konačnu vrednost magnetnog momenta. Za svaki feromagnetik (gvožđe, nikel itd.) postoji konačna kritična temperatura T_c na kojoj se regioni spontane magnetizacije (domeni) raspadaju i na toj temperaturi supstanca gubi postojeće feromagnetne osobine. Pri hlađenju feromagnetika ispod odgovarajuće kritične temperature ponovo se javljaju domeni i spontana magnetizacija.

Postojanje antiferomagnetika predvideo je ruski fizičar Ljev Landau 1933. godine na osnovu zakona kvantne mehanike. U antiferomagneticima (hrom, magnetijum itd.), spinovi elektrona spontano se orijentišu međusobno antiparalelno. Posledica toga je da antiferomagnetici imaju veoma nisku magnetnu susceptibilnost (kao i namagnetisanje) i ponašaju se kao veoma slabi paramagnetici. Kod antiferomagnetika takođe postoji kritična temperatura T_n na kojoj se, ovog puta antiparalelna, orijentacija spinova gubi. Ova temperatura je poznata kao Nelova tačka. Neki antiferomagnetici imaju dve granične tačke (gornju i donju Nelovu tačku), pri čemu se antiferomagnetne osobine uočavaju samo u intervalu između ove dve kritične temperature. Iznad gornje tačke supstanca se ponaša kao paramagnetik, a na temperaturama ispod donje kritične tačke supstanca poprima feromagnetne osobine (Savelyev 1980).

Hajzenbergov model

Kvantna mehanika predviđa postojanje efektivne interakcije oblika $J_{ij}S_iS_j$ među spinovima elektrona susednih atoma, gde je $S_n = (S_n^x, S_n^y, S_n^z)$ operator koji daje vrednost spina elektrona u lancu. Model magnetnog sistema u kome se interakcija među susednim dipolima objašnjava međusobnim interakcijama susednih spin operatora S_i pridruženih svakoj ćeliji modela naziva se Hajzenbergov model:

$$H = -J \sum_n S_n S_{n+1} \quad (2)$$

feromagnetnog (H_F , $J = 1$) ili antiferomagnetnog sistema (H_A , $J = -1$). Hamiltonijan koji odgovara datom modelu od N čvorova, ukoliko se sistem ne nalazi u spoljašnjem magnetnom polju, je:

$$H = -J \sum_n (S_n^x S_{n+1}^x + S_n^y S_{n+1}^y + S_n^z S_{n+1}^z) \quad (3)$$

tj.

$$H = -J \sum_n \left[\frac{1}{2} (S_n^+ S_{n+1}^- + S_n^- S_{n+1}^+) + S_n^z S_{n+1}^z \right] \quad (4)$$

gde su S_n^x , S_n^y , S_n^z , $S_n^\pm = S_n^x \pm iS_n^y$ spin operatori i $J = 1$ u feromagnetnom, a $J = -1$ u antiferomagnetnom slučaju. Delovanje operatora S_n , S_n^z (Karbach *et al.* 1997) na vektor $|\sigma_1 \dots \sigma_N\rangle$, gde $\sigma_n = \uparrow$ predstavlja *up* spin, a $\sigma_n = \downarrow$ *down* spin na n -toj ćeliji u lancu, prikazano je u tabeli 1.

Tabela 1. Pravila po kojima spin operatori S_n , S_n^z deluju na bazisni vektor $|\sigma_1 \dots \sigma_n\rangle$

	$ \dots \sigma_k = \uparrow \dots\rangle$	$ \dots \sigma_k = \downarrow \dots\rangle$
S_k^+	0	$ \dots \sigma_k = \uparrow \dots\rangle$
S_k^-	$ \dots \sigma_k = \downarrow \dots\rangle$	0
S_k^z	$\frac{1}{2} \dots \sigma_k = \uparrow \dots\rangle$	$\frac{1}{2} \dots \sigma_k = \uparrow \dots\rangle$

Generalno, krajnja svrha upotrebe numeričkih proračuna u ispitivanju različitih fizičkih veličina jeste njihovo poređenje sa eksperimentalnim rezultatima uočenim na makroskopskim sistemima. Broj čestica koje učestvuju u takvim sistemima drastično je veći od broja čestica čije je ponašanje moguće ispitati kompjuterskim simulacijama u praksi. Jedan od načina da se donekle prevaziđu ograničenja uzrokovana malim brojem čestica u sistemu jeste okruživanje posmatranog sistema kopijama istih takvih sistema. To je tzv. metod periodičnih graničnih uslova. U našem slučaju jednodimenzionalnog sistema ova pretpostavka izražava se u obliku $S_{N+n} = S_n$.

Bethe ansatz metod

Bethe ansatz predstavlja egzaktno metod za izračunavanje svojstvenih vrednosti i svojstvenih vektora jedne klase kvantnih višestručestih sistema. Iako je ove veličine moguće dobiti, uz manji trud, numerički primenom grube sile, prednost *Bethe ansatz*-a ogleda se u tome što je u ovom slučaju svako svojstveno stanje određeno skupom kvantnih brojeva pomoću kojih

je moguće razlikovati ova stanja prema njihovim specifičnim fizičkim osobinama, kao i u činjenici da je pomoću ovako dobijenih svojstvenih vrednosti u mnogim slučajevima moguće proceniti fizičke veličine sistema u termodinamičkom limitu (Gu *et al.* 2002).

Ovde ćemo se osvrnuti na krajnji oblik i opšte rešenje *Bethe ansatz* jednačina za 1D Hajzenbergov model, dok je detaljan analitički postupak njihovog dobijanja i rešavanja moguće pronaći u radu M. Karbacha (Karbach *et al.* 1997).

Neka r označava broj *down* (\downarrow) spinova od N ćelija lanca ($r = N/2$). Klasa $r = 0$, sastoji se od jednog vektora koji ujedno predstavlja i osnovno stanje feromagnetika $|\mathbb{F}\rangle = |\uparrow\uparrow\dots\uparrow\rangle$. Svojstveni vektor, za proizvoljno r , predstavlja superpoziciju bazisnih vektora:

$$|\Psi\rangle = \sum_{1 \leq n_1 \leq n_2 \leq \dots \leq n_r \leq N} a(n_1, n_2, \dots, n_r) |n\rangle \quad (5)$$

gde je $|n\rangle = |n_1, n_2, \dots, n_r\rangle = S_{n_1}^- S_{n_2}^- \dots S_{n_r}^- |n\rangle$. *Bethe ansatz* pretpostavlja oblik koeficijenata $a(n_1, n_2, \dots, n_r)$:

$$a(n_1, n_2, \dots, n_r) = \sum_{P \in S_r} \exp\left(i \sum_{i=1}^r k_{p_i} n_j + \frac{i}{2} \sum_{i < l} \theta_{p_i, p_l}\right) \quad (6)$$

pri čemu se sumiranje vrši po svih $r!$ ($P \in S_r$) permutacija skupa $\{1, 2, \dots, r\}$.

Iz svojstvene jednačine $H|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle$ i formula (5) i (6) izvode se:

– formula za energiju sistema:

$$E - E_0 = \sum_{j=1}^r J(1 - \cos k_j) \quad (7)$$

– jednačine *Bethe ansatz*-a:

$$2 \operatorname{ctg} \frac{\theta_{ij}}{2} = \operatorname{ctg} \frac{k_i}{2} - \operatorname{ctg} \frac{k_j}{2} \quad (8)$$

$$N k_i = 2\pi \lambda_i + \sum_{j \neq i} \theta_{ij}, \quad i, j = 1 \dots r \quad (9)$$

gde λ_i predstavlja skup takozvanih *Bethe*-ovih kvantnih brojeva ($\lambda_i \in \{0, 1, \dots, n-1\}$), a k_i su koeficijenti uvedeni *Bethe ansatz* pretpostavkom oblika koeficijenata $a(n_1, \dots, n_r)$ iz formule (6), pri čemu je $\theta_{ij} = -\theta_{ji}$ fazni ugao za svaki par koeficijenata (k_i, k_j) i $E_0 = JN/4$.

Izložena fomulacija *Bethe ansatz*-a pogodna je za razumevanje principa na kome metod radi, no kod pokušaja implementacije algoritma za rešavanje jednačina (8) i (9) javili su se različiti problemi. Naime, za

svako r od mogućih C_r^{N+r-1} kombinacija za set λ_i samo njih C_r^N određuju svojstveno stanje sistema. Problem pronalaženja kompletnog skupa svojstvenih vektora sistema je veoma složen. Sledeća prepreka je nemogućnost izračunavanja koeficijenata k_i za neke kombinacije kvantnih brojeva λ_i , ili velike greške u slučajevima kada su traženi kvantni brojevi k_i dobijeni. Osnovni razlog za to je činjenica da koeficijenti k_i mogu uzimati kako realne, tako i kompleksne vrednosti. Dok je realni deo broja k_i ograničen ($k_i \in [0, 2\pi]$), imaginarni deo uzima proizvoljne vrednosti, koje, zbog ograničenih kompjuterskih resursa, nismo u mogućnosti da odredimo sa dovoljnom tačnošću.

Jedan od načina za prevazilaženje ovog problema jeste primena tzv. string hipoteze (Savelyev 1980) u *Bethe ansatz*-u na osnovu koje su, analogno kvantnim brojevima λ_i i koeficijentima k_i , svakom nizu međusobno susednih čvorova sa *down* (\downarrow) spinom (stringu) dužine n dodeljeni kvantni broj I_γ^n i koeficijent x_γ^n , pri čemu α_n označava broj stringova dužine n , a γ redni broj n -stringa u Hajzenbergovom lancu, $\gamma = 1 \dots \alpha_n$. Uz ove pretpostavke, jednačine *Bethe ansatz*-a dobijaju formu:

$$N \vartheta(x_\gamma^n/n) = 2\pi I_\gamma^n + \sum_{m, \beta \neq n, \gamma} \theta_{n,m}(x_\gamma^n - x_\beta^m) \quad (10)$$

pri čemu je N dužina lanca, $\vartheta(x) = \arctg x$, i:

$$\begin{aligned} \theta_{n,m}(x) &= \theta\left(\frac{x}{|n-m|}\right) + 2\theta\left(\frac{x}{|n-m|+2b}\right) + \dots \\ &\dots + 2\theta\left(\frac{x}{n+m-2}\right) + \theta\left(\frac{x}{n+m}\right), \quad n \neq m \\ \theta_{n,m}(x) &= \theta\left(\frac{x}{2}\right) + 2\theta\left(\frac{x}{4}\right) + \dots + 2\theta\left(\frac{x}{n-2}\right) + \theta\left(\frac{x}{2n}\right), \quad n = m \end{aligned} \quad (11)$$

x_γ^n predstavlja realni deo koeficijenta $x_\gamma^{n,j}$ pridruženog svakom čvoru u posmatranom stringu:

$$x_\gamma^{n,j} = x_\gamma^n + i(n+1-2j), \quad j = 1, \dots, n \quad (12)$$

Ovakvim odabirom sistema za zapisivanje koeficijenata rešavanje jednačina *Bethe ansatz*-a svodi se na rad isključivo sa realnim brojevima.

Primitimo da brojevi n -stringova u lancu α_n zadovoljavaju relaciju:

$$\alpha_1 + 2\alpha_2 + \dots + (r-1)\alpha_{r-1} + r\alpha_r = r \quad (13)$$

gde r označava ukupan broj čvorova sa *down* spinom.

Kvantni broj n -stringa I_γ^n je ceo (polu-ceo) broj, ukoliko je $N - \alpha_n$ neparno (parno) i važi ograničenje:

$$\left| I_\gamma^n \right| \leq (N - 1 - \sum_{m=1} t_{n,m} \alpha_m) / 2 \quad (14)$$

gde je $t_{n,m} \equiv 2\min(n, m) - \delta_{n,m}$.

U novoj notaciji, formula za energiju sistema okarakterisanog skupom kvantnih brojeva $\{I_\gamma^n\}$ glasi:

$$E \{I_\gamma^n\} = -\frac{NJ}{4} + \sum_{n,\gamma} \frac{2J_n}{(x_\gamma^n)^2 + n^2} \quad (15)$$

Algoritam

Da bismo iz formule (15) dobili svojstvenu vrednost energije sistema, potrebno je numerički rešiti jednačine *Bethe ansatz*-a (10) i (11) po x_γ^n . Sledi pregled koraka u postupku njihovog rešavanja, za zadat broj *down* spinova r i skup kvantnih brojeva $\{I_\gamma^n\}$:

1. Generiše se skup slučajnih vrednosti za x_γ^n ($x_\gamma^n \in [0, 2\pi n)$, $1 \leq n \leq r$, $\gamma = 1 \dots n$;
2. Po formuli (11) računa se skup $\theta_{n,m}$ za odabrani skup x_γ^n ;
3. Pomoću dobijenih vrednosti za θ_{ij} , po formuli

$$x_\gamma^{n*} = n \operatorname{tg} \frac{2\pi I_\gamma^n + \sum \theta_{n,m} (x_\gamma^n - x_\beta^m)}{N} \quad (16)$$

izvedenoj iz jednačine (10) računamo novi set koeficijenata x_γ^{n*} ;

4. Ako je $\left| x_\gamma^n - x_\gamma^{n*} \right| < e$, gde je e neki prethodno definisani kriterijum tačnosti, nađeno je rešenje. U suprotnom vrednosti x_γ^n zamenimo prethodno izračunatima x_γ^{n*} i vratimo se na prethodni (treći) korak;

5. Ukoliko se u unapred zadatih i_{\max} koraka utvrdi da procedura divergira, vraćamo se na korak 1 i sa novim generisanim vrednostima za x_γ^n ponavljamo ceo postupak.

Numerički Bethe ansatz radi tako što za svaku moguću konfiguraciju $\{\alpha_n\}$ i I_γ^n računa svojstvene vrednosti po navedenom algoritmu, pri čemu

broj svih mogućih konfiguracija kvantnih brojeva $C_{N/2}^N$ eksponencijalno raste. Primena *Monte Carlo* metoda na ovom mestu omogućava nam da umesto celog energijskog spektra posmatramo samo neke, na slučajan način odabrane svojstvene vrednosti, vodeći računa o tome da sve svojstvene vrednosti budu odabrane sa istom verovatnoćom. Odabir tih svojstvenih vrednosti vršimo ponavljanjem sledećih koraka:

1. Pošto energija sistema zavisi prvenstveno od broja čvorova sa *down* spinom, na slučajan način biramo \mathbf{r}_μ uzimajući u obzir da je broj stanja sa \mathbf{r}_μ *down* spinova $C_{r_\mu}^N - C_{r_\mu-1}^N$, te verovatnoća odabira r_μ iznosi $(C_{r_\mu}^N - C_{r_\mu-1}^N) / C_{N/2}^N$:

2. Za odabrano \mathbf{r}_μ sve moguće konfiguracije stringova $\{\alpha_n\}$ moguće je odrediti iz uslova (12) i očigledno je

$$\sum_{\alpha_1 + \dots + r\alpha_r} D(\{\alpha_n\}) = (C_{r_\mu-1}^N - C_{r_\mu-1}^N) \quad (17)$$

$D(\{\alpha_n\})$ označava broj stanja okarakterisanih kvantnim brojevima $\{r_j\}$ pridruženih konfiguraciji stringova $\{\alpha_n\}$ i važi:

$$D(\{\alpha_n\}) = \prod_{i=1}^r C_{\alpha_i}^{N_i}, \quad N_i = N - \sum_{j=1}^r t_{i,j} \alpha_j \quad (18)$$

Stoga string konfiguraciju $\{\alpha_n\}$ biramo sa verovatnoćom $D(\{\alpha_n\}) / (C_{r_\mu-1}^N - C_{r_\mu-1}^N)$:

3. Za određeno $\{\alpha_n\}$ na slučajan način biramo konfiguraciju kvantnih brojeva $\{r_j\}$ i za tako odabrane parametre stanja primenom prethodno izloženog algoritma rešavamo BA jednačine, a zatim iz formule (15) dobijamo vrednost energije datog stanja.

Termodinamičke osobine modela

Statistička mehanika pruža mogućnost ispitivanja termodinamičkih osobina modela, ukoliko su poznate informacije o energetskom spektru sistema.

Statistička težina za stanje date energije E sistema u statističkom ansamblu, poznata kao particiona funkcija, za dati model definisana je sa:

$$Z = \sum_{\mu} (N - 2r_\mu + 1) e^{-\beta \epsilon_\mu} \quad (19)$$

gde je β inverzna temperatura, \sum_μ predstavlja sumu po svim mogućim svojstvenim stanjima Hamiltonijana, N broj čestica, a \mathbf{r}_μ broj *down* (\downarrow)

spinova u posmatranom μ stanju sistema. Poznavanje promene particione funkcije u zavisnosti od temperature ili nekog drugog spoljašnjeg faktora koji utiče na sistem omogućava nam da saznamo sve što želimo o makroskopskom ponašanju sistema. Na primer, srednja vrednost unutrašnje energije i magnetizacije sistema mogu se izračunati po obrascima:

$$\langle E \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\mu} (N - 2r_{\mu} + 1) E_{\mu} e^{\beta E_{\mu}} \quad (20)$$

$$\langle M \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\mu} \sum_{r_{\mu}=-N/2+r_{\mu}} 2 r_{\mu}^z e^{-\beta E_{\mu}} \quad (21)$$

Na isti način računamo vrednost $\langle E^2 \rangle$, a iz toga i varijansu $\sigma_E^2 = \langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2$. Faktor $(N - 2r_{\mu} + 1)$ u formulama (19) i (20) javlja se kao posledica degeneracije pojedinih energetskih nivoa. Kako je $dZ/d\beta = -ZE$, vrednost specifične toplote po ćeliji Hajzenbergovog lanca $C(T) \equiv dE/dT$ moguće je dobiti diferenciranjem jednačine (11):

$$C = \frac{\beta^2}{N} (\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2) \quad (22)$$

Fluktuacije u magnetizaciji sistema i susceptibilnost povezane su sličnom relacijom:

$$\chi = \frac{\beta^2}{N} (\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2) \quad (23)$$

Primena na fizički sistem

Na osnovu navedenog algoritma iz prethodnih paragrafa, u programskom jeziku C implementiran je program čija je svrha primena opisanih metoda u ispitivanju termodinamičkih osobina magnetika. Program je testiran na sistemu koji predstavlja Hajzenbergov lanac od $N = 24$ ćelije. Jednačine *Bethe ansatz*-a rešavane su numerički sa tačnošću 0.1% za x_{γ}^n . Uz prolazak kroz $n_{\max} = 1500$ različitih μ stanja sistema čije su determinante birane na opisan način, pomoću obrazaca (21), (22), (23) i (24) računata je zavisnost specifične toplote i susceptibilnosti feromagnetika i antiferomagnetika od temperature.

Preciznost metoda ocenjena je računanjem standardne greške za rezultate dobijene u 10 ponovljenih simulacija. Srednja vrednost i standardna greška prikazane su na graficima zavisnosti specifične toplote (slika 1) i

susceptibilnosti (slike 2 i 3) od temperature (u jedinicama $T/|J|$, $J = 1$ za feromagnetik, a $J = -1$ za antiferomagnetik).

Tačke na grafiku za feromagnetik označene crvenom bojom predstavljaju teorijske vrednosti posmatranih veličina dobijene metodom koja je poznata kao *termodinamički Bethe ansatz* (Gu *et al.* 2002).

Dobijeni grafici zavisnosti specifične toplote i susceptibilnosti su u saglasnosti sa teorijskim predviđanjima ponašanja antiferomagnetika kada nije prisutno spoljašnje magnetno polje: kod antiferomagnetika postepen rast susceptibilnosti sa povećanjem temperature do određene kritične tačke, a zatim njen pad pri faznom prelazu u paramagnetik, a kod antiferomagnetika nagli pad susceptibilnosti na kritičnoj temperaturi i prelazak feromagnetika u paramagnetik. Sa grafika uočavamo da kritična temperatura faznog prelaza za feromagnetik iznosi $T_{C,F} = 0.5 K/|J|$, a za antiferomagnetik $T_{C,F} = 0.7 K/|J|$.

Poređenjem dobijenih brojevanih vrednosti za feromagnetik sa istim veličinama dobijenim primenom standardnog metoda *numeričkog Bethe ansatz*-a (Gu *et al.* 2002) utvrđeno je da se relativne greške kreću u intervalu 2-10%.

Zaključak

Postavka problema izračunavanja energije određenog stanja sistema pomoću *Bethe ansatz*-a uslovlila je brzu konvergenciju ka korenima jednačina, te se u nekoliko sekundi dobijaju rešenja velike preciznosti. Međutim, kako broj svojstvenih stanja sa povećanjem N eksponencijalno raste, postaje nemoguće sa raspoloživim kompjuterskim resursima ponoviti ovaj postupak za sva moguća stanja. Ovaj problem rešen je primenom *Monte Carlo* algoritma koji omogućava da informacije o energijskom spektru sistema dobijemo posmatranjem samo određenog skupa svojstvenih vektora sistema, tako da se izloženi pristup određivanja osobina magnetika može primeniti i kod drugih modela kvantnih višestaničnih sistema u kojima je teško pojedinačno ispitati osobine svakog od mogućih stanja tih sistema. Pretpostavka je da je jedan od uzroka velike devijacije rezultata u blizini apsolutne nule i kritične temperature faznog prelaza posledica nedovoljnog kvaliteta načina selekcije reprezentativnih stanja nad kojima se vrše proračuni. Pronalaženje načina da se prevaziđe ovo ograničenje predstavlja izazovnu i interesantnu temu za dalje istraživanje.

Literatura

Karbach M., Hu K., Muller G. 1997. Introduction to the Bethe ansatz I. *Computers in Physics*, 11: 36

Karbach M., Hu K., Muller G. 1998. Introduction to the Bethe ansatz II. *Computer in Physics*, 12: 565

Gu S. J., Peres N. M. R., Li Y. Q. 2002. Numerical and Monte Carlo Bethe ansatz metod: 1D Heisenberg model. dostupno na: <http://arxiv.org/abs/cond-mat/0210497>

Savelyev I. V. 1980. *Physics (A General Course) Elektriciv and magnetism, waves, optics* (Revised from the 1978 Russian edition). Moskow: Mir

Marina Marinković

Application of *Monte Carlo* and *Bethe ansatz* Methods in Study of Properties of 1D Heisenberg Model for Magnetism

A linear array of electrons with uniform exchange interactions between electron spins on nearest neighbors is known as 1D Heisenberg model and it is considered to be the key explanation of the microscopic theory of magnetism. *Bethe ansatz* is a method for calculating eigenvalues and eigenvectors of this and many other quantum many body systems. When used with computers, it is more convenient to work with the formulation of the *Bethe ansatz* for Heisenberg model using the string hypothesis.

In this paper a numerical approach to discuss the thermodynamic quantities of Heisenberg antiferromagnetic and ferromagnetic model is presented. The *Monte Carlo* method is used to select a random state of the system considering that all eigenvalues have the same probability. For each chosen quantum number configuration the energy of the present state of the system is found numerically, by converting *Bethe ansatz* equations into an iterative process.

The obtained information about the energy spectrum of the system is applied to the study of the specific heat and the magnetic susceptibility of the antiferromagnetic and ferromagnetic Heisenberg models. The magnetic susceptibility for the ferromagnetic case is plotted in Figure 1, and the antiferromagnetic case in Figure 2. The specific heat dependence on temperature for both cases is plotted in Figure 3.

The results show that the presented method in a satisfying way qualitatively describes the desired thermodynamic features of the magnetic system. The exact values compared with those obtained with different approaches at some point show higher deviations and a possible cause of these errors is the fact that the present selection method in the *Monte Carlo* calculation is not excellent and a better one is required. The conclusion is that the combination of *Bethe ansatz* results with the *Monte Carlo* method can be applied to different quantum many body systems to replace the brut force and other numerical methods which consider all possible quantum number configurations.

