



저작자표시-비영리-변경금지 2.0 대한민국

이용자는 아래의 조건을 따르는 경우에 한하여 자유롭게

- 이 저작물을 복제, 배포, 전송, 전시, 공연 및 방송할 수 있습니다.

다음과 같은 조건을 따라야 합니다:



저작자표시. 귀하는 원저작자를 표시하여야 합니다.



비영리. 귀하는 이 저작물을 영리 목적으로 이용할 수 없습니다.



변경금지. 귀하는 이 저작물을 개작, 변형 또는 가공할 수 없습니다.

- 귀하는, 이 저작물의 재이용이나 배포의 경우, 이 저작물에 적용된 이용허락조건을 명확하게 나타내어야 합니다.
- 저작권자로부터 별도의 허가를 받으면 이러한 조건들은 적용되지 않습니다.

저작권법에 따른 이용자의 권리는 위의 내용에 의하여 영향을 받지 않습니다.

이것은 [이용허락규약\(Legal Code\)](#)을 이해하기 쉽게 요약한 것입니다.

[Disclaimer](#)

2018년 8월
석사학위 논문

몬테카를로 시뮬레이션을 이용한
스핀 모형의 임계 현상 연구

조선대학교 대학원

물리학과

박소정

몬테카를로 시뮬레이션을 이용한
스핀 모형의 임계 현상 연구

Monte Carlo Simulation Studies of Critical Behavior
of Spin Models

2018년 8월 24일

조선대학교 대학원

물리학과

박소정

몬테카를로 시뮬레이션을 이용한 스핀 모형의 임계 현상 연구

지도 교수 곽우섭
공동 지도 교수 최은서

이 논문을 이학 석사학위신청 논문으로 제출함

2018년 4월

조선대학교 대학원

물리학과

박소정

박소정의 석사학위논문을 인준함

위원장	조선대학교 교수	<u>하 미 순</u> (인)
위 원	조선대학교 교수	<u>곽 우 섭</u> (인)
위 원	조선대학교 교수	<u>최 은 서</u> (인)

2018년 5월

조선대학교 대학원

목 차

ABSTRACT

제 1 장 서 론	1
제 2 장 이론적 배경	4
제 1 절 모형 시스템	4
1. $S=1/2$ 이징 모형	4
2. $S=1$ 블룸-카펠 모형	7
제 2 절 열역학적 이론	9
1. 에너지 및 자기 요동과 열역학적 변수	9
2. 스핀 모형의 1차 및 2차 상전이 현상	13
제 3 장 계산 및 분석 방법	15
제 1 절 캐노니컬 몬테카를로 시뮬레이션	15
1. 메트로폴리스 알고리즘을 이용한 역 온도에 따른 전이확률	15
2. 히스토그램-리웨이팅 알고리즘을 이용한 확률 분포 추정	19
3. 알고리즘에 따른 히스토그램 결과 비교	21
4. 저온에서 캐노니컬 시뮬레이션의 한계	26
제 2 절 엔트로픽 몬테카를로 시뮬레이션	30
1. 결합 상태 밀도를 이용한 왕-란다우 알고리즘	30
2. 온도의 함수로서의 히스토그램 리웨이팅 방법과 비교	34

제 4 장 전산 시능 결과	38
제 1 절 격자 구조에 따른 반강자성 스핀 모형의 특성	38
1. 찢찢멤 시스템을 가진 삼각 격자 위의 스핀 배열	40
2. 찢찢멤 시스템을 가진 카고메 격자 위의 스핀 배열	42
제 2 절 사각 격자 위의 스핀 모형의 상전이 현상	43
1. 사각 격자 위의 스핀 모형의 WL 표본잡기 전산시능	43
2. 상전이 도표 및 임계 선 분석	46
제 3 절 삼각 격자 위의 스핀 모형의 상전이 현상	48
1. 삼각 격자 위의 스핀 모형의 WL 표본잡기 전산시능	48
2. 상전이 도표 및 임계 선 분석	51
제 4 절 카고메 격자 위의 스핀 모형의 상전이 현상	53
1. 카고메 격자 위의 스핀 모형의 WL 표본잡기 전산시능	53
2. 상전이 도표 및 임계 선 분석	56
 제 5 장 결 론	 58

참고문헌

List of Figures

그림 1. 1차원 강자성 이징 모형의 기저상태의 스핀배열	4
그림 2. 2차원 강자성 이징 모형의 기저상태의 스핀배열	5
그림 3. 3차원 강자성 이징 모형의 기저상태의 스핀배열	6
그림 4. 강자성 블룸-카펠 모형의 상전이 그림	7
그림 5. 강자성 블룸-카펠 모형의 상전이 그림	8
그림 6. 2차원 이징 모형의 상태 전이할 때 역 온도에서 에너지 차이에 대한 전이 확률	17
그림 7. 강자성 이차원 이징 모형에 대한 $L=12$ 에서의 히스토그램	21
그림 8. 강자성 이차원 이징 모형에 대한 $L=24$ 에서의 히스토그램	22
그림 9. $T_0 = 2.269$ 에서 생성된 히스토그램을 사용하여 계산한 리웨이팅 된 히스토그램	24
그림 10. $T=1.8, 2.0, 2.35, 2.4$ 에 계산된 히스토그램과 리웨이팅 된 히스토그램와의 비교	25
그림 11. $L=12$ 이고 $T=1$ 에서 강자성 이징 모형의 규격화된 에너지와 자기화의 함수로서의 히스토그램	26
그림 12. $L=12$ 이고 $T=2$ 에서 강자성 이징 모형의 규격화된 에너지와 자기화의 함수로서의 히스토그램	27
그림 13. $L=12$ 이고 $T=T_c$ 에서 강자성 이징 모형의 규격화된 에너지와 자기화의 함수로서의 히스토그램	28
그림 14. $L=12$ 이고 $T=2.5$ 에서 강자성 이징 모형의 규격화된 에너지와 자기화의 함수로서의 히스토그램	28
그림 15. $L=12$ 이고 $T=\infty$ 에서 강자성 이징 모형의 규격화된 에너지와 자기화의 함수로서의 히스토그램	29
그림 16. $L=12$ 에서 강자성 이징 모형의 에너지와 자기화의 함수로서의 로그 결합 상태 밀도	33
그림 17. $L=12$ 이고 $T=1$ 에서 강자성 이징 모형의 결합 상태 밀도로 계산한 규격화된 에너지와 자기화의 함수로서의 히스토그램	34

그림 18. $L=12$ 이고 $T=2$ 에서 강자성 이징 모형의 결합 상태 밀도로 계산한 규격화된 에너지와 자기화의 함수로서의 히스토그램35

그림 19. $L=12$ 이고 $T=T_c$ 에서 강자성 이징 모형의 결합 상태 밀도로 계산한 규격화된 에너지와 자기화의 함수로서의 히스토그램36

그림 20. $L=12$ 이고 $T=2.5$ 에서 강자성 이징 모형의 결합 상태 밀도로 계산한 규격화된 에너지와 자기화의 함수로서의 히스토그램36

그림 21. $L=12$ 이고 $T=\infty$ 에서 강자성 이징 모형의 결합 상태 밀도로 계산한 규격화된 에너지와 자기화의 함수로서의 히스토그램37

그림 22. 반강자성 이징 모형의 임계 선 유형38

그림 23. $L=9$ 인 $L \times L$ 격자 구조 (a) 삼각 격자 (b) 카고메 격자39

그림 24. 이웃하는 3개의 스핀이 반강자성 상호작용을 하며, 정렬될 수 없는 찢찢뿔 시스템을 가진 삼각 격자 위의 스핀배열 및 부분 격자 구조 그림40

그림 25. 이웃하는 스핀이 반강자성 상호작용을 하며, 정렬될 수 없는 찢찢뿔 시스템을 가진 카고메 격자 위의 스핀배열 및 부분 격자 구조 그림42

그림 26. 사각 격자 위에서 에너지, 온도 그리고 외부 자기장의 함수로서의 $L=12$ 에서 반강자성 이징 모형의 자기화 44

그림 27. 사각 격자 위에서 에너지, 온도 그리고 외부 자기장의 함수로서의 $L=6$ 에서 반강자성 블룸-카펠 모형의 자기화 44

그림 28. 사각 격자 위에서 에너지와 자기화의 함수로서의 $L=12$ 에서 반강자성 이징 모형의 소정준 엔트로피 45

그림 29. 사각 격자 위에서 에너지와 자기화의 함수로서의 $L=6$ 에서 반강자성 블룸-카펠 모형의 소정준 엔트로피 45

그림 30. 사각 격자 위에서 $L=12$ 에서 반강자성 이징 모형과 $L=6$ 에서 반강자성 블룸-카펠 모형의 임계 선의 도표 47

그림 31. 삼각 격자 위에서 에너지, 온도 그리고 외부 자기장의 함수로서의 $L=12$ 에서 반강자성 이징 모형의 자기화 49

그림 32. 삼각 격자 위에서 에너지, 온도 그리고 외부 자기장의 함수로서의 $L=6$ 에서 반

강자성 블룸-카펠 모형의 자기화 49

그림 33. 삼각 격자 위에서 에너지와 자기화의 함수로서의 $L=12$ 에서 반강자성 이징 모형의 소정준 엔트로피 50

그림 34. 삼각 격자 위에서 에너지와 자기화의 함수로서의 $L=6$ 에서 반강자성 블룸-카펠 모형의 소정준 엔트로피 50

그림 35. 삼각 격자 위에서 $L=12$ 에서 반강자성 이징 모형과 $L=6$ 에서 반강자성 블룸-카펠 모형의 임계 선의 도표 52

그림 36. 카고메 격자 위의 에너지, 온도 그리고 외부 자기장의 함수로서의 $L=12$ 에서 반강자성 이징 모형의 자기화 54

그림 37. 카고메 격자 위의 에너지, 온도 그리고 외부 자기장의 함수로서의 $L=6$ 에서 반강자성 블룸-카펠 모형의 자기화 54

그림 38. 카고메 격자 위의 에너지 그리고 자기화의 함수로서의 $L=12$ 에서 반강자성 이징 모형의 소정준 엔트로피 55

그림 39. 카고메 격자 위의 에너지 그리고 자기화의 함수로서의 $L=6$ 에서 반강자성 블룸-카펠 모형의 소정준 엔트로피 55

그림 40. 카고메 격자 위에서 $L=12$ 에서 반강자성 이징 모형 그리고 $L=6$ 에서 반강자성 블룸-카펠 모형의 임계 선의 도표 57

ABSTRACT

Monte Carlo Simulation Studies of Critical Behavior of Spin Models

Sojeong Park

Advisor: Prof. Wooseop Kwak, Ph.D.

Co-Advisor: Prof. Eunseo Choi, Ph.D.

Department of Physics,

Graduate School of Chosun University

Monte Carlo simulation plays a major role in studying phase transitions and critical phenomena in statistical physics. In this study, we try to understand the phase transition phenomena and physical properties at the critical point of the ferromagnetic and anti-ferromagnetic Ising model and the Blume-Capel model in the lattice through computer simulation. Ising model on a two-dimensional square lattice can easily simulate the phase transition phenomena using Monte Carlo methods and study the physical properties of the spin systems. We acquire the histogram using the

metropolis algorithm which is the canonical simulation method, and then learn the computer simulation technique while performing the simulation of spin model using the histogram re-weighting method. We study the critical phenomena of spin models in various lattice structures such as square, triangle, and kagomé by measuring the density of states using the Wang-Landau algorithm, which is fully simulated even in the presence of low temperature and high external fields. Using Wang-Landau algorithm, we obtain the exact critical magnetic fields at zero temperature and show the patterns of critical lines for the spin models.

제 1 장 서 론

과거로부터 자성을 띄고 있는 물질들(magnetic materials)에 대한 연구는 활발하게 진행되어 왔다. 자석(magnet)이라는 어원은 고대 서부 터키지방에 살던 원시 부족의 원어인 마그네시아(magnesia)로부터 유래 된다. 이 자석은 이미 2000년 전 서아시아에서 길을 가리켜주는 나침반으로 사용되고 있다. 자성 물질들은 보통 강자성(ferromagnetic) 상태에 있다. 강자성에서, 미시적(microscopic)인 자성 스핀들이 서로 강하게 상호작용하고 대부분의 스핀들은 거시적(macrosopic)인 강한 자기장(magnetic field)을 초래하며 실온에서 같은 방향으로 정렬된다. 퀴리 온도(curie temperature) 위에서, 미시적인 자성 스핀들은 큰 열적 요동(thermal fluctuation)때문에 무작위로 정렬되기 때문에 강자성체(ferromagnetism)는 상자성체(paramagnetism)가 된다.

상자성체와 강자성체 이외에, 반강자성체(antiferromagnetism)는 또한 중요한 자성 물질로, 1970년 물리학상 수상자인 네엘(Neel)로부터 처음 소개되었다[1]. 반강자성체에서, 인접한 자성 스핀들은 거시적인 자기장을 초래하지 않으면서, 서로 정반대 방향으로 정렬된다. 따라서 반강자성(antiferromagnetic) 물질을 발견하고 상자성 물질로부터 반강자성 물질을 구별하는 것은 어렵다. 네엘 온도(Neel temperature) 위에서, 반강자성체는 상(phase)이 상자성체로 바뀌게 된다. 반강자성체는 거대 자기 저항(giant magnetoresistance)[2]와 높은 온도의 초전도성(superconductivity)[3]에서 중요한 역할을 한다. 반강자성 물질은 하드디스크 장치를 포함한 다양한 산업 응용에서 중요하다.

자성 물질, 상전이(phase transition) 그리고 임계 현상(critical phenomena)의 근대 이론은 상자성-강자성(Paramagnetic-ferromagnetic) 상전이를 이해하기 위해서 아주 단순한 자기 시스템(magnetic system)인 스핀-1/2 이징(Ising) 시스템에서 시작되었다[4]. 스핀-1/2 이징 자기 시스템에서, 미시적인 자성 스핀은 +1 (upward) 또는 -1 (downward)을 가질 수 있다. 스핀-1/2 이징 시스템을 이해하기

위한 단순하고 쉬운 이론은 자성 물질 또는 상전이에 관한 텍스트에서 잘 설명된 바이스 분자장(weiss molecular field) 이론이다. 바이스 분자 장이론의 결과는 타당하지만 정확하지는 않다. 사각 격자(square lattice)에서의 스핀 1/2 이징 시스템에 대한 정확한 해법은 전달 행렬 방법(transfer-matrix method)과 함께 온사거(Onsager)로부터 처음 성립되었고 상전이와 임계 현상의 근대 이론의 근거가 되었다[5].

보다 복잡한 자성 시스템은 스핀-1 이징 시스템이며 단순한 사각 격자에서 정확한 해법은 알려져 있지 않았다. 스핀-1 이징 자성 시스템에서, 미시적 자성 스핀은 1(upward), 0(vacancy), 그리고 -1(downward)을 가질 수 있다. 블룸-카펠(Blume-Capel) 자성 시스템[6,7]은 스핀-1 이징 시스템의 확장이며 메타 자석(metamagnets), 분자 기반 체인 자석(molecule-based chain magnets)과 같은 다양한 시스템을 이해하는데 연구되어졌다. 사각 격자에서 블룸-카펠 시스템은 이차 상전이, 일차 상전이 그리고 삼중 임계점(tri-critical point)을 보여준다[8].

컴퓨터 시뮬레이션(computer simulation)은 상전이와 임계 특성을 연구하는데 통계 물리학(statistical physics)에서 중요한 역할을 한다[9,10]. 특히 몬테카를로 시뮬레이션(monte carlo simulation)으로 알려진 확률적 기법(stochastic techniques)은 매우 효과적임을 증명하였다. 통계 물리학에서 가장 중요한 양(quantities) 중 하나는 시스템의 에너지 준위(energy level)의 모든 가능한 상태 수인 상태 밀도(density of state) $g(E)$ 이다. 시뮬레이션의 목적은 이러한 양의 직접적인 측정이 아닌 메트로폴리스 중요 표본 잡기(metropolis importance sampling)[11], 스벤센-왕 클러스터 뒤집힘(Swendsen-Wang cluster flipping)[12,13], 히스토그램 리웨이팅[14] 등과 같은 종래의 몬테카를로 알고리즘으로 주어진 온도에서 정준 분포(canonical distribution) $g(E)e^{-E/k_B T}$ 을 만들어 내는 것이다. 통계 물리학에서 주어진 모형에 대하여 상태 밀도를 알면, 분배 함수(partition function) $Z = \sum_E g(E)e^{-\beta E}$ 을 계산할 수 있고 대부분의 열역학량(thermodynamic quantities)은 이를 통하여 계산될 수 있다. 왕-란다우 알고리즘

(Wang-Landau algorithm)[15]은 정확한 상태 밀도를 계산하는 효과적인 몬테카를로 표본 추출 방법들 중 하나로, 고정된 온도에서 확률 분포(probability distribution)를 표본 추출하는 것 대신에 왕-란다우 표본 잡기(Wang-Landau sampling)를 이용하여 무작위 걸기(random walk)의 각 단계에서 상태 밀도에 대한 추정을 제어된 보정 계수(modification factor)를 이용하여 향상시킬 수 있다. 적절한 볼츠만 인자(boltzmann factor)로부터 상태 밀도에 가중치를 줌으로써 어떠한 온도에서도 그 확률을 계산할 수 있다.

통계 물리학에서 가장 간단하며 연구되고 있는 이징 모형(Ising model)[16]은 자성체 모형으로 격자의 각 점에 놓인 스핀들이 최 인접들에서만 상호작용한다. 사각 격자에서 2차원 이징 시스템은 상자성-강자성 상전이 현상을 이해하기 위한 단순하고 쉬운 이론을 제공한다. 하지만 삼각격자(triangular lattice)[17,18]나 카고메 격자(kagomé lattice)[19,20]과 같은 찢찢맴 시스템(frustrated system)에서는 다양한 물리적 현상들을 이해하는데 어려움이 있다. 메타 자석, 분자 기반 체인 자석과 같은 다양한 시스템을 이해하는데 또 다른 스핀 모형인 블룸-카펠 모형이 소개하고자 한다. 본 연구에서는 전산 시뮬레이션을 통해서 격자 위에서 강자성 및 반강자성 이징 모형과 블룸-카펠 모형의 임계점에서의 상전이 현상[21]과 물리적 특성들을 이해하고자 한다.

제 2 장 이론적 배경

제 1 절 모형 시스템

1. $S=1/2$ 이징 모형

이징 모형은 1920년에 빌헬름 렌츠(Wilhelm Lenz)가 제자 에른스트 이징(Ernst Ising)에게 박사 학위 논문의 주제로 제안하면서 처음 시작되었다. 이징 모형은 간단한 격자 모형으로, 몬테카를로 방법이 실제로 통계 물리학의 문제를 연구에 어떻게 응용시킬지 설명을 위해 이용된다. 강자성 이징 모형에서, $+1$ 또는 -1 의 값을 가질 수 있는 스핀이라고 불리는 N 개의 불연속 변수(discrete variables)의 격자를 가진다. 인접한 스핀들은 교환 에너지(exchange coupling)를 통해 상호작용한다.

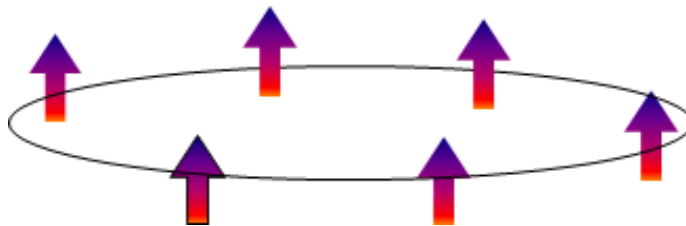


그림 1 1차원 강자성 이징 모형의 기저상태의 스핀배열

그림 2를 보면, 2차원 격자 위에서 각 스핀은 4개의 인접들이 서로 상호작용한다. 이징 모형은 상전이와 협동 현상(cooperative phenomenon)을 연구하는데 사용된다. $L \times L$ 사각 격자 위의 이징 모형을 고려하면, 그 모형은 격자의 상태에서 스핀 S_i 로 구성되고, 결합 상수(coupling constant) J 를 가지고 격자 위에 최 인접(nearest neighbor)들에서만 상호작용한다. 이러한 모형의 해밀토니언 H 은 다음과 같이 주어진다.

$$H = -JE - hM \quad (2-1)$$

식 2-1에서, $E = \sum_{i,j} S_i S_j$ 이며 합은 모든 별개의 최 인접 쌍을 받는 것을 나타내
고, $M = \sum_i S_i$ 이며 합은 모든 스핀에 대한 것을 나타낸다. 강자성 이징 모형은
 $J < 0$ 이고 반자성 이징 모형은 $J > 0$ 이다. 여기서 h 은 외부 자기장(external
magnetic field)이다.

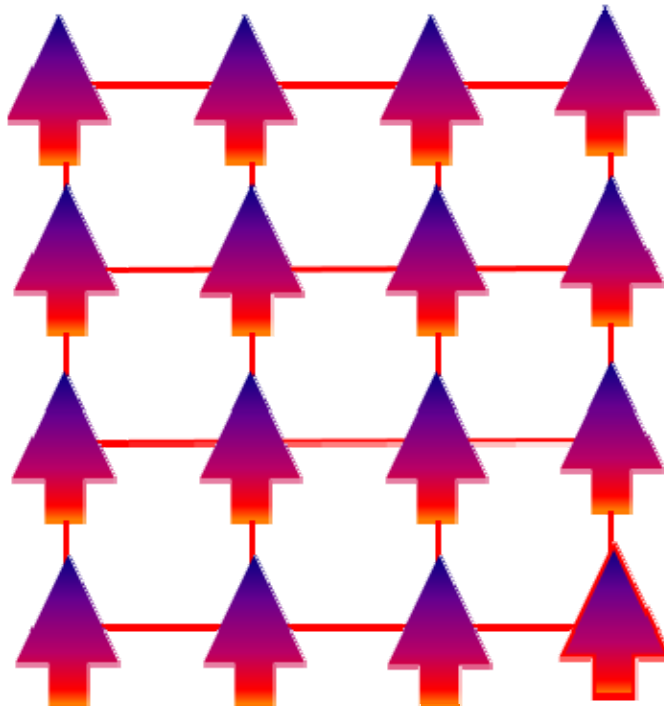


그림 2 2차원 강자성 이징 모형의 기저상태의 스핀배열

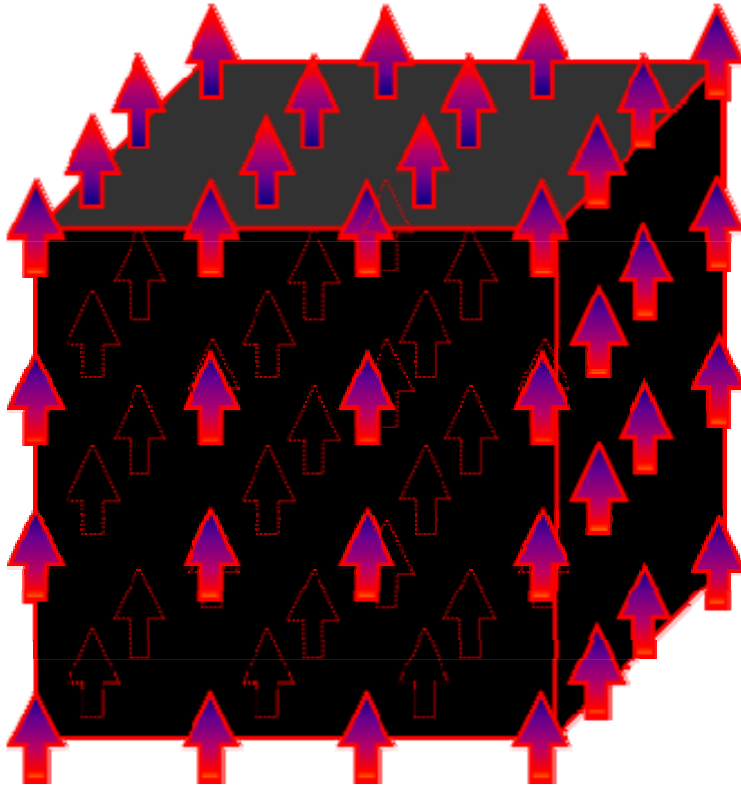


그림 3 3차원 강자성 이징 모형의 기저상태의 스핀배열

2. $S=1$ 블룸-카펠 모형

블룸-카펠 모형은 스핀 시스템에서 1차 상전이를 연구하기 위하여 고안된 것이다. 스핀-1 블룸-카펠 모형의 해밀토니언 H 은 다음과 같이 주어진다.

$$H = -JE - hM + DM^2 \quad (2-2)$$

식 2-2에서, $E = \sum_{i,j} S_i S_j$ 이며 합은 반상자성 결합 상수 $J = -1$ 을 가지고 모든 별개의 최 인접 쌍을 받는 것을 나타내고, $M = \sum_i S_i$ 그리고 $M^2 = \sum_i S_i^2$ 이며, 각 합들은 2차원 사각 격자에서 모든 스핀에 대한 것을 나타낸다.

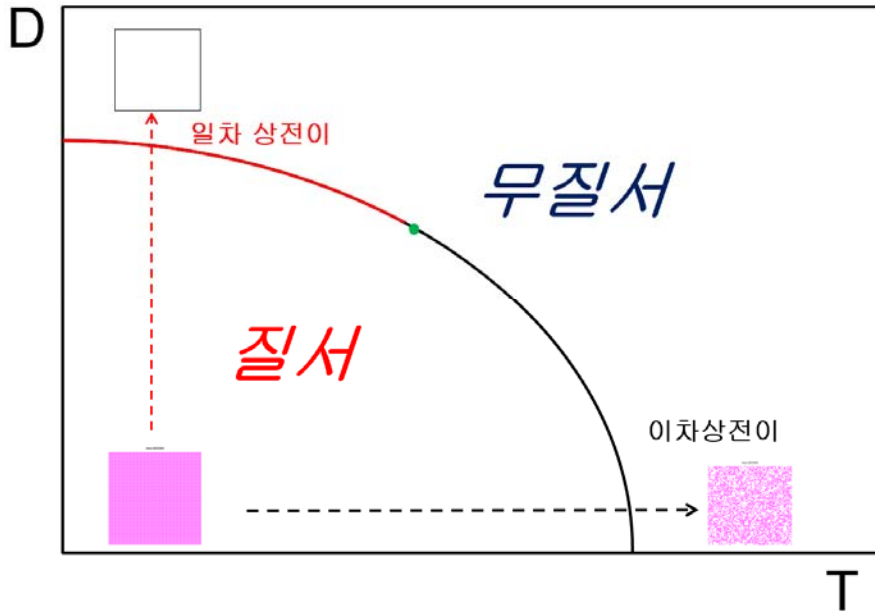


그림 4 강자성 블룸-카펠 모형의 상전이 그림

그리고 $S_i = -1, 0$, 또는 $+1$ 을 나타낸다. h 은 외부 자기장이고 D 은 결정마당

(crystal field)이다. 결정마당의 물리적인 기원은 결정 내에 리간드(ligands)로 배워된 금속 원자에 대한 비 중심 전위로부터 발생한다. 저온에서 D 가 크면 스핀 빈자리 $S_i = 0$ 을 선호하고 질서-질서 일차 상전이를 보여준다. D 가 작고 고온에서는 질서-무질서 이차 상전이를 보여주며 그림 4를 보면 일차상전이와 이차상전이가 만나는 점인 삼중점을 정확히 찾기 위한 연구가 활발히 진행되고 있다.

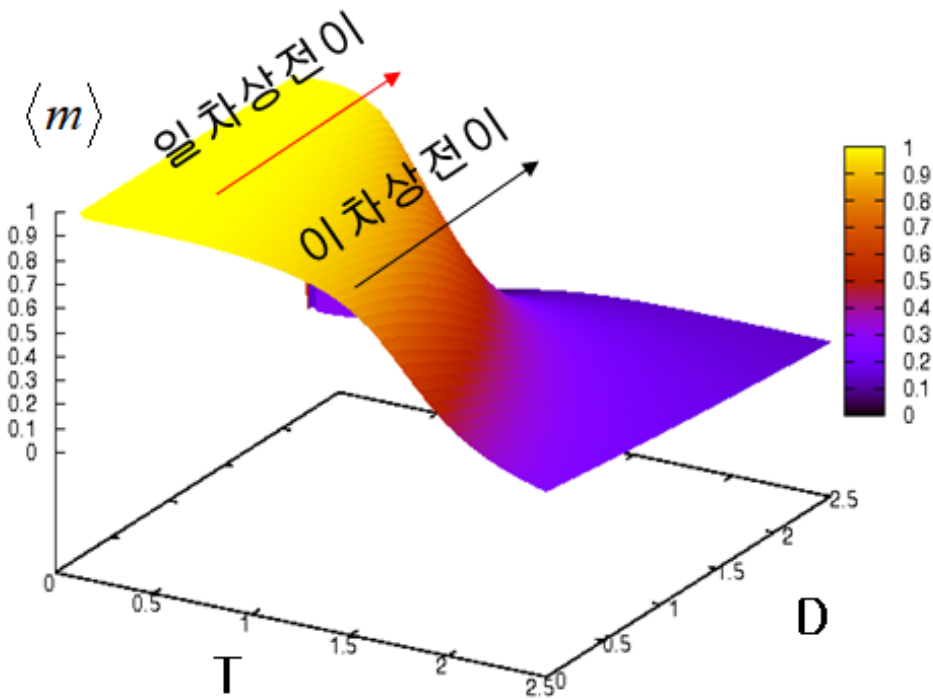


그림 5 강자성 블룸-카펠 모형의 상전이 그림

외부변수 온도와 결정마당의 함수로서 질서맞음을 그린 상전이 그림 5에서 온도가 저온일 경우 결정마당 D 가 증가하면 질서맞음 $\langle m \rangle = 1$ 에서 0으로 변하는 불연속 상전이인 일차상전이가 나타나고, 온도가 고온일 때 결정마당 D 가 증가하면 질서맞음 $\langle m \rangle$ 이 연속적으로 변하는 연속 상전이인 이차 상전이가 나타난다.

제 2 절 열역학적 이론

1. 에너지 및 자기 요동과 열역학적 변수

물리적 시뮬레이션을 이용하여 열평형(thermal equilibrium) 상태에서 열역학적 변수를 구하고자 한다. 평형 점유 확률(equilibrium occupation probabilities)은 다음과 같다.

$$P_i = \frac{1}{Z} e^{-E_i/kT} \quad (2-3)$$

여기서 E_i 은 i 상태의 에너지이고, k 은 볼츠만 상수이다. 사용되는 온도 T 은 환산 온도(reduced temperature)로 kT/J 이고 J 은 결합상수이다. 확률 분포인 식 2-3은 볼츠만 분포(boltzmann distribution)로 알려져 있다.

$$Z = \sum_i e^{-E_i/kT} = \sum_i e^{-\beta E_i} \quad (2-4)$$

식 2-4를 보면, Z 은 규격화 상수이고 분배 함수라고 알려져 있으며 온도에 따라 Z 의 변화와 시스템에 영향을 주는 다른 변수는 거시적 성질에 대하여 알 수 있는 모든 것을 설명할 수 있다. 여기서 기호 β 은 $1/(kT)$ 로 나타낸다.

평형 상태에서 시스템의 양 Q 의 기댓값은 다음과 같이 나타낼 수 있다.

$$\langle Q \rangle = \sum_i Q_i P_i = \frac{1}{Z} \sum_i Q_i e^{-\beta E_i} \quad (2-5)$$

내부 에너지 U 인 열역학으로부터 알 수 있는 양인 에너지의 기댓값 $\langle E \rangle$ 은 식 2-4로부터 분배 함수의 도함수 형태로 다시 쓸 수 있다.

$$U = \frac{1}{Z} \sum_i E_i e^{-\beta E_i} = -\frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \beta} = -\frac{\partial \log Z}{\partial \beta} \quad (2-6)$$

비열은 내부 에너지의 도함수로부터 주어진다.

$$C = \frac{\partial U}{\partial T} = -k\beta^2 \frac{\partial U}{\partial \beta} = -k\beta^2 \frac{\partial^2 \log Z}{\partial \beta^2} \quad (2-7)$$

하지만, 열역학에서는 비열은 또한 엔트로피(entropy)와 관련이 있다.

$$C = \frac{\partial U}{\partial T} = T \frac{\partial S}{\partial T} = -\beta \frac{\partial S}{\partial \beta} \quad (2-8)$$

식 2-8에서, C 에 대한 두 식은 같으며 β 에 대하여 적분하면 엔트로피에 대한 다음 식을 알 수 있다.

$$S = -k\beta \frac{\partial \log Z}{\partial \beta} + k \log Z \quad (2-9)$$

식 2-6과 식 2-9를 이용하여, 시스템의 자유 에너지(free energy) F 에 대한 식은 다음과 같다.

$$F = U - TS = -kT \log Z \quad (2-10)$$

따라서 U, F, C 그리고 S 은 분배 함수 Z 로 계산할 수 있고, 식 2-10을 통해서 시스템에 영향을 주는 다른 변수를 어떻게 다루는지 설명할 수 있다. 고전 열역학에서, 시스템에서 상호작용하는 변수, 제약(constraints), 그리고 장(fields)은 공액 변수(conjugate variables)를 가지고 있으며 열역학은 자유 에너지의 도함수로

부터 공액 변수의 값을 계산할 수 있다.

$$p = -\frac{\partial F}{\partial V} \quad (2-11)$$

$$M = \frac{\partial F}{\partial h} \quad (2-12)$$

평형 시스템의 특성에 대한 몬테카를로 계산을 수행해서, 분배 함수를 계산하고 다른 양들을 구할 수 있으며 시스템의 열역학적인 특성은 분배 함수로부터 추론된다.

이러한 측정들의 평균값을 계산한 이외에도 양에 대한 변화의 측정을 주는 표준 편차(standard deviation)를 계산한다. 내부에너지에 대하여 생각해보면, 평균값 $U = \langle E \rangle$ 에서 멀어지는 에너지의 순간 측정인 평균 제곱 편차(mean square deviation)는 다음과 같다.

$$\langle (E - \langle E \rangle)^2 \rangle = \langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2 \quad (2-13)$$

$\langle E \rangle$ 의 계산과 비슷한 방법으로 분배 함수의 도함수로부터 $\langle E^2 \rangle$ 을 계산할 수 있다.

$$\langle E^2 \rangle = \frac{1}{Z} \sum_i E_i^2 e^{-\beta E_i} = \frac{1}{Z} \frac{\partial^2 Z}{\partial \beta^2} \quad (2-14)$$

E 의 표준 편차는 다음과 같이 표현된다.

$$\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2 = \frac{\partial^2 \log Z}{\partial \beta^2} = \frac{C}{k\beta^2} \quad (2-15)$$

이 결과는 가능한 모든 열역학량으로부터 전체적으로 요동의 크기를 계산할 수 있다. 더 구체적으로 보면 이러한 개념을 시험할 수 있는 특별한 모형은 통계물리에서 완전히 연구된 이징 모형이다. 분배함수로부터 모형의 스핀 당 자기화 (magnetization)의 평균 $\langle m \rangle$, 분배함수의 도함수로부터 요동의 계산을 통해 스핀 당 자기 감수율(magnetic susceptibility) χ 을 계산할 수 있다. 유사하게 에너지 요동으로부터 스핀 당 비열 c 을 계산할 수 있다.

$$\langle m \rangle = \frac{1}{N} \langle \sum_i s_i \rangle$$

$$\chi = \frac{\beta}{N} (\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2) = \beta N (\langle m^2 \rangle - \langle m \rangle^2) \quad (2-16)$$

$$c = \frac{k\beta^2}{N} (\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2)$$

2. 스핀 모형의 1차 및 2차 상전이 현상

시뮬레이션에서 연구되는 가장 일반적인 물리적 문제 중 하나는 강자성, 이징 모형 등 다양한 형태의 상전이이다. 상전이는 질서(ordering)와 관련이 있으며 시스템의 거시적 변수(canonical variables)가 변하면서 성질은 급격하게 변한다. 물에 대한 압력과 온도의 상 다이어그램(phase diagram)을 생각해보면 액체, 고체, 그리고 기체상이 존재한다. 고체상에서 분자는 결정을 형성하고 반복되는 규칙적인 패턴으로 배열되며 매우 낮은 에너지 상태를 만든다. 분자는 거의 완전히 움직이지 않아서 아무것도 할 수 없지만 고정된 위치에서 진동하며 매우 낮은 엔트로피 상태이다. 액체상에서, 분자는 더 이상 반복 패턴을 형성하지 않으며 밀집되어 많은 수소 결합을 형성한다. 분자들은 계속 움직이며 결합을 끊고 새로 형성되면서 끊임없이 움직인다. 결과적으로, 액체상은 고체상보다 높은 에너지를 가지지만 높은 엔트로피도 갖는다. 기체상에서, 분자는 수소 결합이 거의 없고 에너지는 훨씬 높지만 분자마다 운동이 자유롭기 때문에 엔트로피도 훨씬 높다. 온도가 증가함으로써, 엔트로피는 더 중요해져서 액체에서 기체상으로 갑자기 전이를 발생시킨다며 이것을 1차 상전이라고 한다. 1차 상전이는 임계점 사이에서 불연속적인 잠열 (latent heat)이 나타난다.

대부분 상전이는 질서 변수(order parameter)로 설명되며 수학적으로 무질서 상에서는 0이고 질서 상에서는 0이 아니다. 일반적으로, 전이는 1차 또는 2차이며 자유 에너지 $F = -k_B T \log Z$ 의 도함수로 설명할 수 있다. 1차 상전이에서 질서 변수가 불연속이고, 자유 에너지의 2차 도함수인 자기 감수율 χ 이 불연속이며 2차 상전이에서 자기 감수율은 발산한다. 구체적인 예로, 외부 자기장 h 그리고 역온도 $\beta = 1/k_B T$ 을 가진 이징 모형의 자기화 M 그리고 자기 감수율 χ 은 다음과 같다.

$$M = \left(\frac{\partial F}{\partial h} \right)_T \quad (2-18)$$

$$\chi = \left(\frac{\partial^2 F}{\partial h^2} \right)_T$$

온도 T 가 임계점 T_c 에 접근함에 따라 나타나는 2차 상전이의 임계점에서 다양한 임계 현상을 관측할 수 있다.

제 3 장 계산 및 분석 방법

제 1 절 캐노니컬 몬테카를로 시뮬레이션

1. 메트로폴리스 알고리즘을 이용한 역 온도에 따른 전이확률

메트로폴리스 알고리즘은 평형 상태, 기댓값의 측정, 오차 계산과 관련된 몬테카를로 계산을 통해 일괄적인 개념을 설명하는데 사용된다. 메트로폴리스 방법은 초기와 나중 상태 사이의 에너지 차에 달려있는 전이 확률(transition rate)을 이용하여 이전 상태에서부터 만들어진다. 시간에 의존하는 형태는 으뜸 방정식(master equation)으로부터 다음과 같이 주어진다.

$$\frac{\partial P_i(t)}{\partial t} = - \sum_{i \neq j} [P_i(t) W_{i \rightarrow j} - P_j(t) W_{j \rightarrow i}] \quad (2-17)$$

여기서, $P_i(t)$ 은 t 에서 상태 i 에 있는 시스템의 확률이고, $W_{i \rightarrow j}$ 은 $i \rightarrow j$ 에 대한 전이 확률이다. 평형 상태에서 $\partial P_i(t)/\partial t = 0$ 과 식 2-17의 우변은 같아야 한다. 전이 확률 $W_{i \rightarrow j}$ 을 이용하여 세부 균형(detailed balance)을 만족하는 마르코프 과정(Markov process)은 다음과 같다.

$$W_{i \rightarrow j} P_i(t) = W_{j \rightarrow i} P_j(t) \quad (2-18)$$

식 2-18에 대한 해법인 전이행렬(transition matrix)을 구하기 위해서 배열 i 에서 이전의 확률 $\alpha(i \rightarrow j)$ 을 가지고 새로운 배열 j 을 무작위로 선택한다. 새로운 배열은 확률 $\Pi(i \rightarrow j)$ 을 받아들인다.

$$W_{i \rightarrow j} = \alpha(i \rightarrow j) \Pi(i \rightarrow j) \quad (2-19)$$

메트로폴리스에 의해 만들어진 기존의 알고리즘에서 $\alpha(i \rightarrow j) = \alpha(j \rightarrow i)$ 로 정하고 다음과 같이 표현된다.

$$\frac{W_{i \rightarrow j}}{W_{j \rightarrow i}} = \frac{\Pi(i \rightarrow j)}{\Pi(j \rightarrow i)} = \exp(-\beta(E(j) - E(i))) \quad (2-20)$$

몬테카를로 알고리즘이 평형으로 수렴하는 것을 증명하기 어렵기 때문에 몇몇의 알고리즘은 세부 균형을 이용한다. 식 2-20은 $W_{i \rightarrow j}$ 는 분배함수가 아닌 볼츠만 인자에 의해서만 결정된다는 것을 보여준다. 수용 확률(acceptance probability)은 0에서 1로 제한되어있고, $\Pi_{i \rightarrow j}$ 또는 $\Pi_{j \rightarrow i}$ 이 1이면 빨리 시뮬레이션 할 수 있다. 다음의 식 2-21을 메트로폴리스 알고리즘이라고 한다.

$$\Pi(i \rightarrow j) = \text{Min}[1, \exp(-\beta(E(j) - E(i)))] \quad (2-21)$$

수용 비(acceptance ratios)를 최대화하는 방법은 두 비 중 보다 큰 것이 가장 큰 값인 주로 1을 주는 것이다. 그리고 나서 제약을 만족시키는 다른 것을 조정한다. 이 경우에 어떻게 계산하는지 보면, i 와 j 의 두 상태 중 i 은 보다 낮은 에너지를 가지고 있고 j 은 보다 높은 에너지를 가지고 있다고 하자, $E(i) < E(j)$. 그리고 나서 두 수용 비 중 보다 큰 에너지는 $\Pi(j \rightarrow i)$ 이고, 식 2-20의 조건을 만족시키기 위해서, $\Pi(i \rightarrow j)$ 은 그러고 나서 값 $\exp(-\beta(E(j) - E(i)))$ 을 받아야 한다. 그러므로 최적화 알고리즘은 다음과 같다.

$$\Pi(i \rightarrow j) = \begin{cases} \exp(-\beta(E(j) - E(i))) & \text{if } E(j) > E(i) \\ 1 & \text{if } E(j) \leq E(i) \end{cases} \quad (2-22)$$

현 상태와 같거나 보다 낮은 에너지를 가지고 있는 새로운 상태를 선택하면 그 상

태에서 전이를 항상 받아들인다. 보다 높은 에너지를 가지게 되면, 위 식 2-22에 주어진 확률을 가진 것을 받아들일 것이다. 이것은 단순한 스핀 모형인 이징 모형에 대한 메트로폴리스 알고리즘이다. 메트로폴리스 알고리즘은 세부 균형을 만족시키고 가장 효과적이며, 단순한 통계 역학 모형의 몬테카를로 연구에 주된 알고리즘이 되었다.

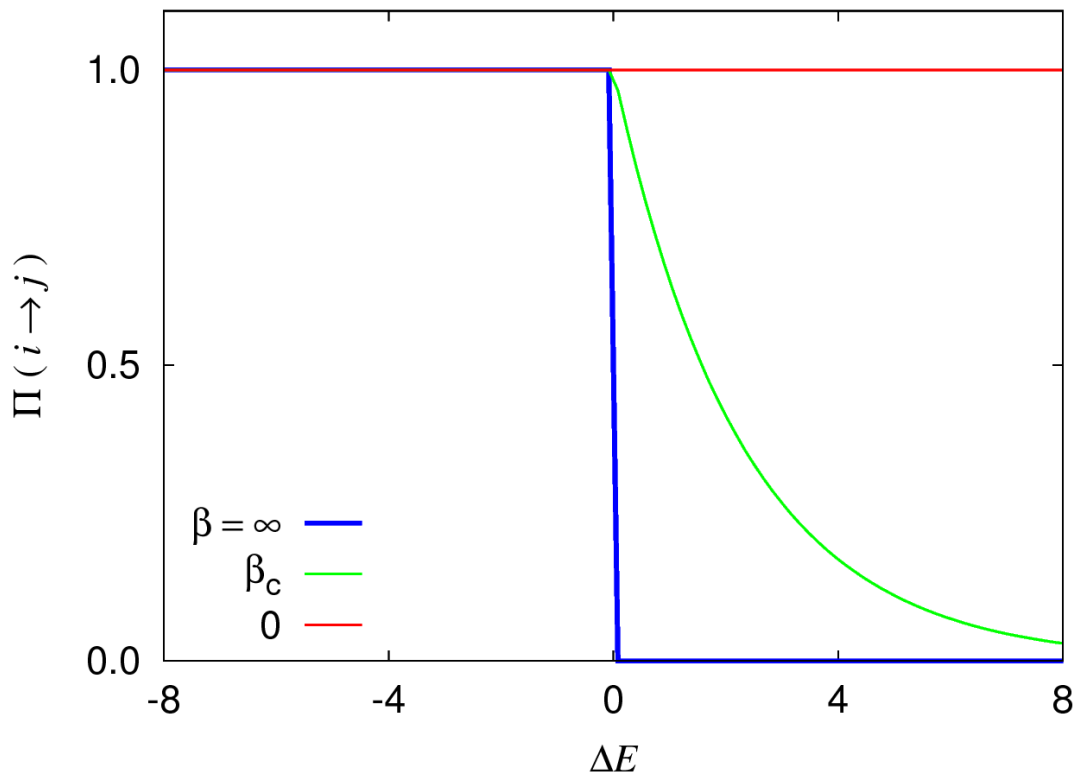


그림 6 2차원 이징 모형의 상태 전이할 때 역 온도에서 에너지 차이에 대한 전이 확률

그림 6에서는 2차원 이징 모형의 상태 i 에서 상태 j 로 전이할 때, 역 온도 $\beta = \infty, \beta_c$ 와 0 에서 에너지 차 ΔE 의 함수로 그린 전이 확률 $\Pi(i \rightarrow j)$ 을 나타낸다. 메트로폴리스 전이확률은 에너지 차이가 감소하는 방향으로는 항상 전이하고 에너지 차이가 커지는 방향으로는 $\min(e^{-\beta \Delta E}, 1)$ 의 확률로 전이한다. 온도가 0일 때,

즉 $\beta = \infty$ 일 때는, 에너지 차이가 커지는 방향으로 전이가 없음을 알 수 있고, 온도가 무한대 일 때, 즉 $\beta = 0$ 일 때, 전이확률이 에너지 차이와 상관없이 1이 되는 것을 알 수 있다. 임계점에서 $\beta = \beta_c$ 에서는 에너지 차이가 증가하면 할수록 전이확률이 낮아지는 것을 그림으로부터 확인할 수 있다.

2. 히스토그램-리웨이팅 알고리즘을 이용한 확률 분포 추정

히스토그램 리웨이팅 방법은 다양한 스핀 모형의 임계 현상을 연구하는데 적용된다. $T = T_0$ 에서 실행된 몬테카를로 시뮬레이션은 볼츠만 가중치(Boltzmann weight) $\exp[-H/k_B T_0]$ 에 비례하는 빈도(frequency)를 가진 시스템의 배열을 만들어 낸다. 에너지 E 와 자기화 M 을 가진 시스템을 동시에 관측할 확률은 다음과 같다.

$$P_{\beta_0}(E, M) = \frac{g(E, M)}{Z(\beta_0)} \exp[-\beta_0 E] \quad (2-23)$$

여기서, $g(E, M)$ 은 에너지 E 와 자기화 M 을 가진 배열의 수이고, $Z(\beta_0)$ 은 분배 함수이다 (여기서 역 온도 $\beta_0 = 1/k_B T_0$). 배열은 평형 확률 분포에 따라 만들어지기 때문에 시뮬레이션동안 출력된 E 와 M 의 히스토그램 $H(E, M)$ 은 평형 확률 분포에 대한 추정을 구한다. β_0 에서 구한 히스토그램과 임의의 β 에 대한 확률 분포 사이의 관계는 $\Delta\beta = (\beta - \beta_0)$ 을 가지고 다음과 같다.

$$P_{\beta}(E, M) = \frac{H(E, M)e^{-\Delta\beta E}}{\sum H(E, M)e^{-\Delta\beta E}} \quad (2-24)$$

$P_{\beta}(E, M)$ 으로부터, E, M 그리고 임의의 $f(E, M)$ 의 함수의 평균값은 β 의 연속 함수로 계산될 수 있다.

$$\langle f(E, M) \rangle_{\beta} = \sum f(E, M) P_{\beta}(E, M) \quad (2-25)$$

식 2-25를 통해서, β 에 대한 양의 어떠한 1차 도함수뿐만 아니라 열역학량의 평균

값을 계산할 수 있다.

몬테카를로 계산이 유한하기 때문에, 이러한 방법은 β_0 근처의 β 의 비교적 좁은 범위에 대한 결과를 보여준다. β 가 변하면서, 가중된 분포에서 정점은 통계 불확실성이 높아서 믿을 수 없는 결과들을 초래하는 것으로 측정된 히스토그램의 정점에서 멀어진다. β 값의 믿을 수 있는 범위는 또한 시스템의 크기가 증가함으로써 감소한다. $\Delta\beta$ 가 너무 크면, 시뮬레이션이 유한하기 때문에 조직적 오차(systematic errors)가 있을 것이다. 하지만, 어떤 β 값에서 측정된 히스토그램은 두 번째 β 값에서 시스템의 행동을 예측하는데 사용될 수 있다. 이러한 예측은 조직적 오차에 대하여 확인하기 위해서 두 번째 결합에서 수행된 시뮬레이션으로부터 직접적으로 얻은 결과와 비교할 수 있다.

3. 알고리즘에 따른 히스토그램 결과 비교

캐노니컬 몬테카를로 시뮬레이션을 위하여 기존의 메트로폴리스와 히스토그램 리웨이트팅 방법을 이용하여 강자성 이징 모형에 대한 히스토그램 분포를 통해 결과를 비교해보고자 한다.

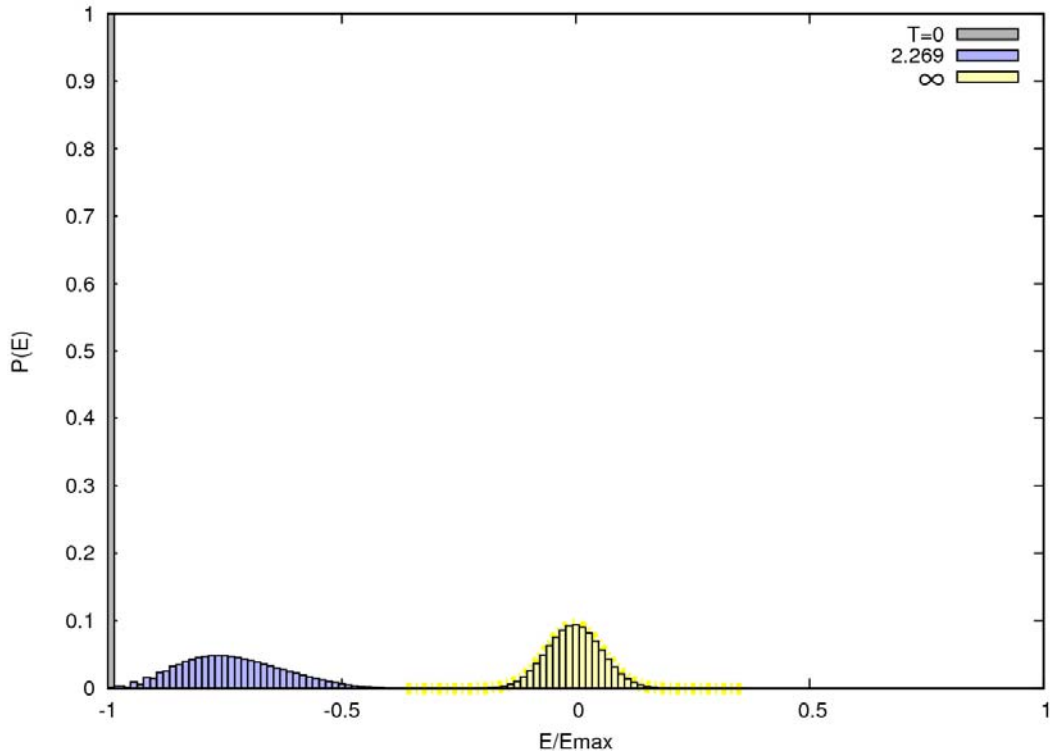


그림 7 강자성 이차원 이징 모형에 대한 $L=12$ 에서의 히스토그램

그림 7에서는 강자성 이차원 이징 모형인 $L=12$ 에서 규격화된 에너지 E/E_{\max} 의 함수로서의 에너지 확률 $P(E)$ 히스토그램을 보여준다. 온도 $T_0=0$ 에서 히스토그램 $P(E)$ 의 가장 낮은 에너지에 있을 확률이 1이 되고 다른 에너지를 가질 확

률은 0이 된다. 메트로폴리스 전이확률을 이용하여 히스토그램을 계산하게 되면 $T_0 = 0$ 에서 $\Delta E > 0$ 면 메트로폴리스 전이확률은 $\min(e^{-\beta_0 \Delta E}, 1) = \min(e^{-\infty}, 1) = 0$ 이 되고, $\Delta E < 0$ 면 메트로폴리스 전이확률은 $\min(e^{+\beta_0 \Delta E}, 1) = \min(e^{+\infty}, 1) = 1$ 이 되기 때문에 에너지가 작아지는 전이확률만 허용되고, 에너지가 커지는 전이 확률은 허용되지 않기 때문에 가장 낮은 에너지 상태만 나오게 된다. $T_0 = \infty$ 가 되면 메트로폴리스 전이 확률은 $\min(e^{-\beta_0 \Delta E}, 1) = \min(e^0, 1) = 1$ 이므로 어떠한 에너지 상태도 허용되므로, 히스토그램의 분포는 0을 평균값으로 가장 낮은 에너지부터 가장 높은 에너지를 가지는 분포가 된다.

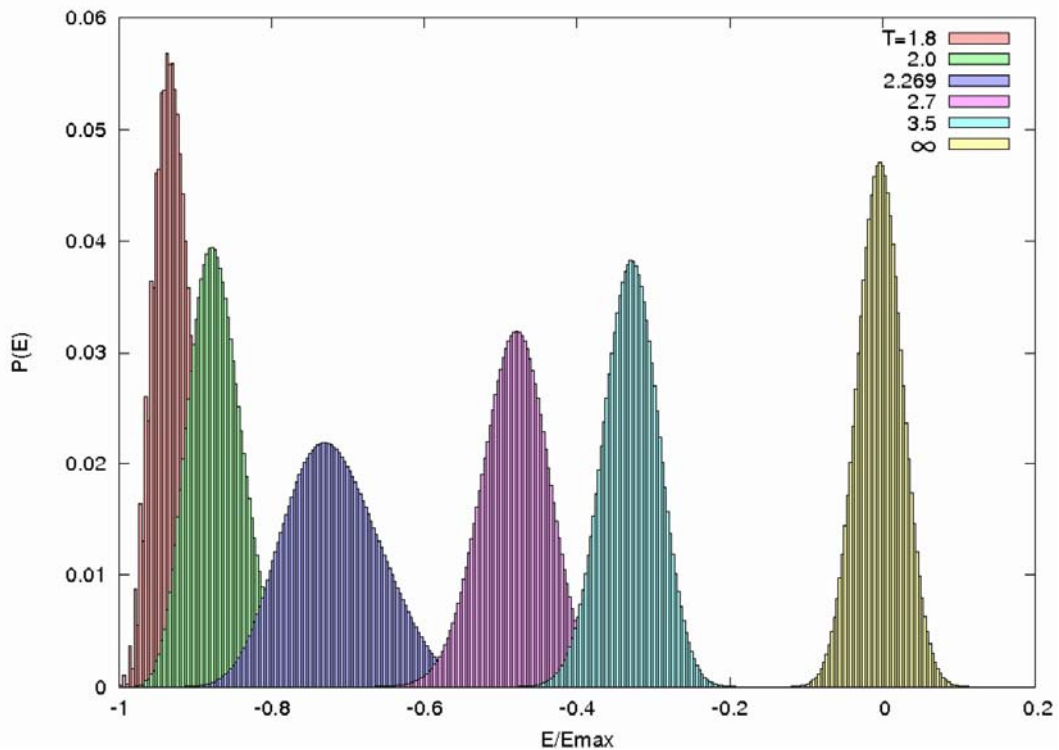


그림 8 강자성 이차원 이징 모형에 대한 $L=24$ 에서의 히스토그램

그림 8에서는 강자성 이차원 이징 모형인 $L=24$ 에서 규격화된 에너지 E/E_{\max} 의 함수로서의 에너지 확률 $P(E)$ 히스토그램을 보여준다. 임계점 온도 $T_0 = 2/\ln(1 + \sqrt{2}) \approx 2.269$ 에서 히스토그램의 분포의 분산 σ_E 가 가장 크고, 온도가 높거나 낮아지면 σ_E 가 작아지는 것을 직접 히스토그램으로부터 관측할 수 있다. 따라서 비열 $C(T_0) = 1/k_B T_0^2 (\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2)$ 이 임계점에서 가장 크게 나오는 것을 확인할 수 있다. 낮은 온도에서 히스토그램 $P(E)$ 가 매끄럽지 않게 나오는 이유는 메트로폴리스 전이확률을 이용하여 히스토그램을 계산하게 되면 낮은 온도에서의 전이 확률은 $\min(e^{-\beta_0 E}, 1)$ 인데 역 온도가 $\beta_0 \rightarrow \infty$ 가 되므로 전이확률은 0이 되어 정확한 분포를 모으기 위한 계산 속도가 무한히 증가하기 때문에 유한한 시간을 계산한 히스토그램은 매끄럽게 되지 않기 때문이다.

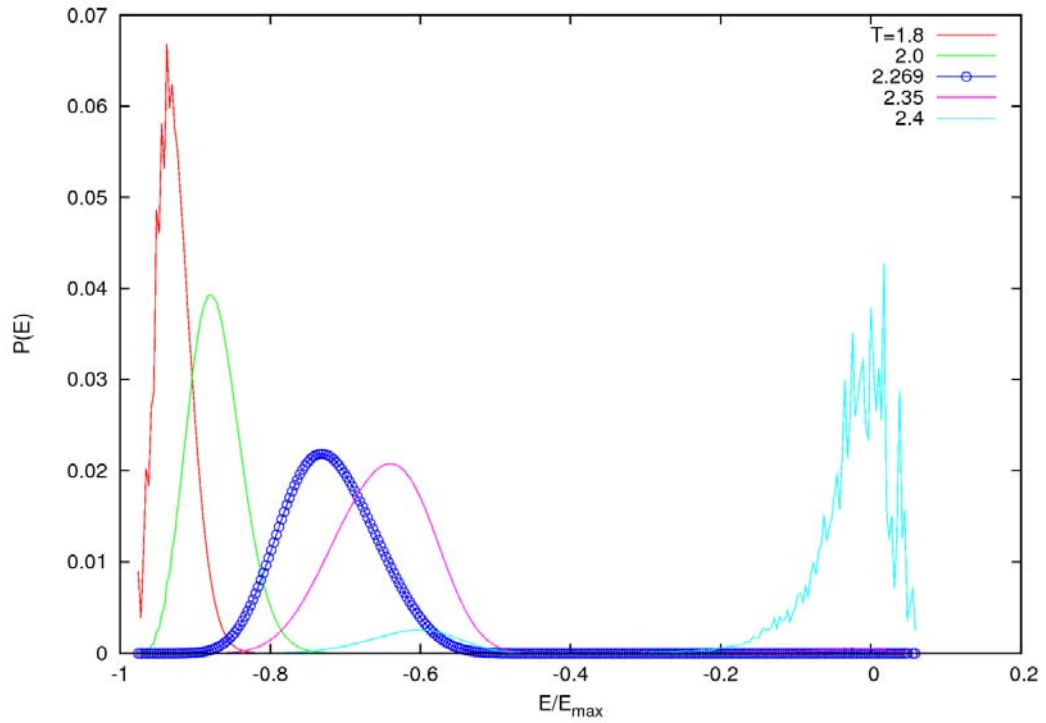


그림 9 $T_0 = 2.269$ 에서 생성된 히스토그램을 사용하여 계산한 리웨이트된 히스토그램

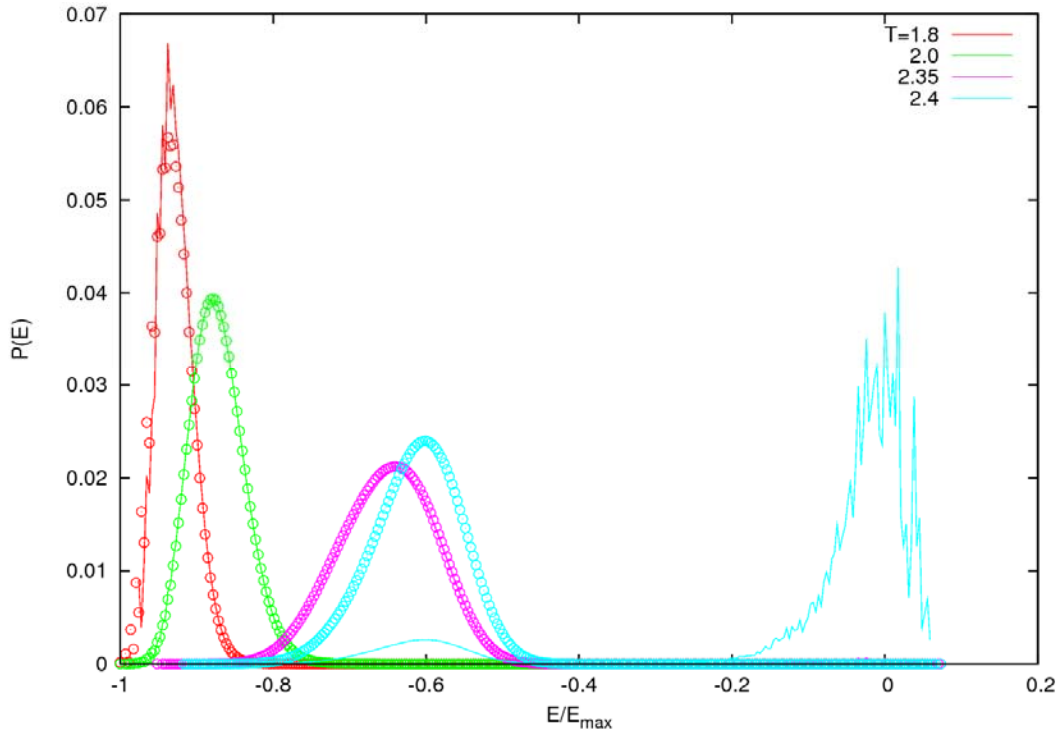


그림 10 $T=1.8, 2.0, 2.35, 2.4$ 에 계산된 히스토그램과 리웨이팅 된 히스토그램과의 비교

그림 9에서는 $T_0 = 2.269$ 에서 $L=24$ 인 앙상블 480개를 $MCS=80,000$ 까지 계산하여 히스토그램을 만든 후, 생성된 히스토그램 $P(E)_{T_0}$ 을 사용하여 $T=1.8, 2.0, 2.35, 2.4$ 에 히스토그램 리웨이팅 알고리즘을 이용하여 계산한 리웨이팅 된 히스토그램 $P(E)_T$ 을 만들었다. 그림 10에서는 리웨이팅 히스토그램과 $T=1.8, 2.0, 2.35, 2.4$ 에서 직접 계산된 결과와 비교하였다. 여기서 $\Delta T = T - T_0$ 이 커짐에 따라 히스토그램 리웨이팅 결과의 오차가 커지는 것을 관찰할 수 있다.

4. 저온에서 캐노니컬 시뮬레이션의 한계

온도를 사용한 캐노니컬 시뮬레이션을 위해서 히스토그램 리웨이트팅 방법을 이용하여 저온, 임계점 온도, 그리고 고온에 따라 강자성 이징 모형의 에너지와 자기화에서 구한 히스토그램을 이해하고 저온에서는 샘플링이 완벽하게 이루어지지 않는다는 것을 알 수 있다.

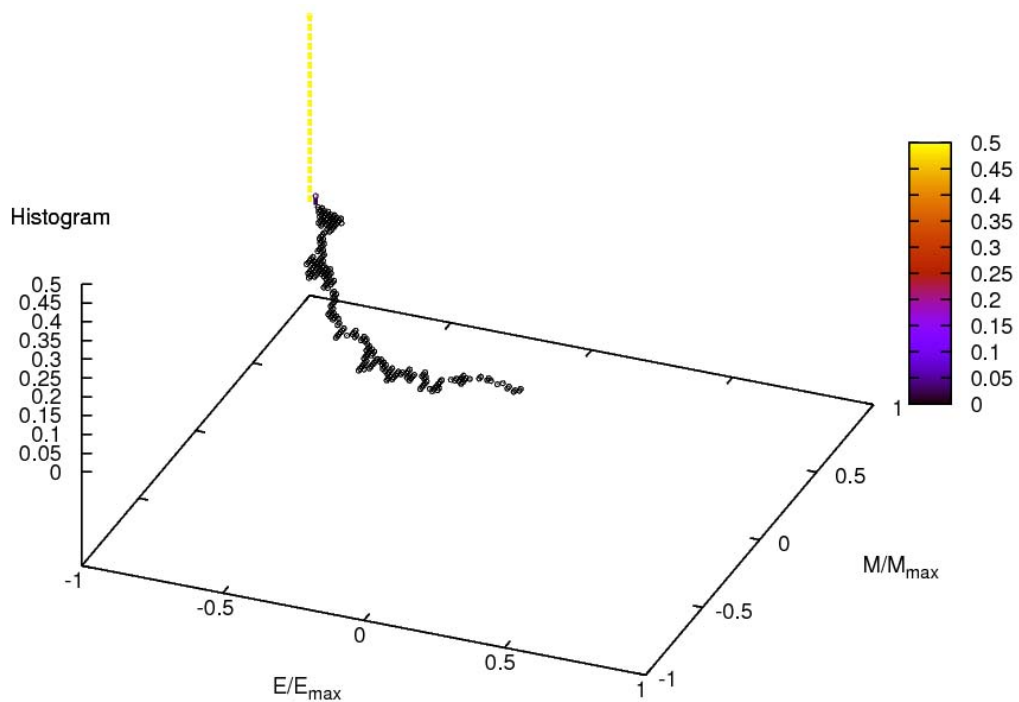


그림 11 $L=12$ 이고 $T=1$ 에서 강자성 이징 모형의 규격화된 에너지와 자기화의 함수로서의 히스토그램

그림 11에서 히스토그램 $P(E, M)_{T=1}$ 는 규격화된 자기화(magnetization per spin) $m = M/M_{\max}$ 가 +1에서 -1로 가지 못하는 이유는 캐노니컬 앙상블 시뮬

레이션 방법으로 사용된 메트로폴리스 전이확률이 저온 $T=1$ 에서 0에 가까워서 로컬 최솟값을 벗어나지 못하기 때문이다.

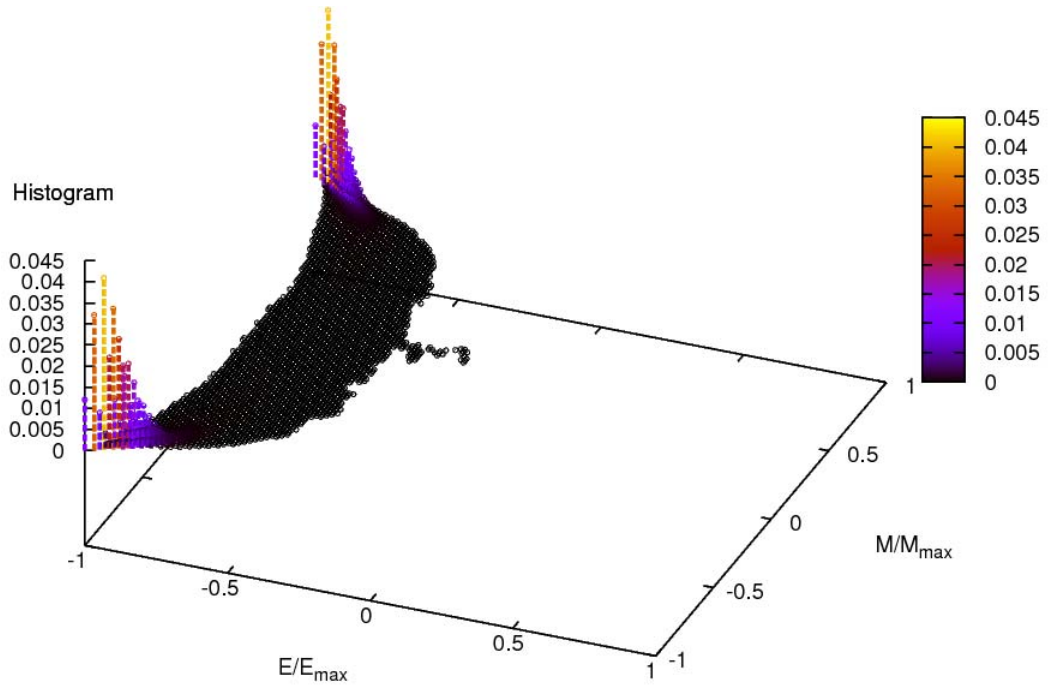


그림 12 $L=12$ 이고 $T=2$ 에서 강자성 이징 모형의 규격화된 에너지와 자기화의 함수로서의 히스토그램

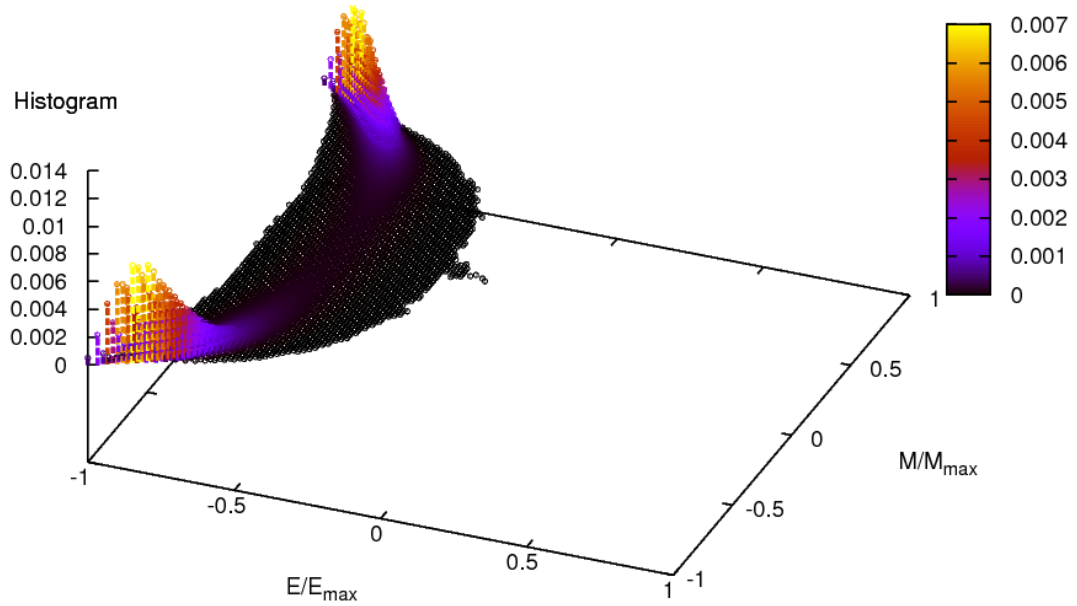


그림 13 $L=12$ 이고 $T=T_c$ 에서 강자성 이징 모형의 규격화된 에너지와 자기화의 함수로서의 히스토그램

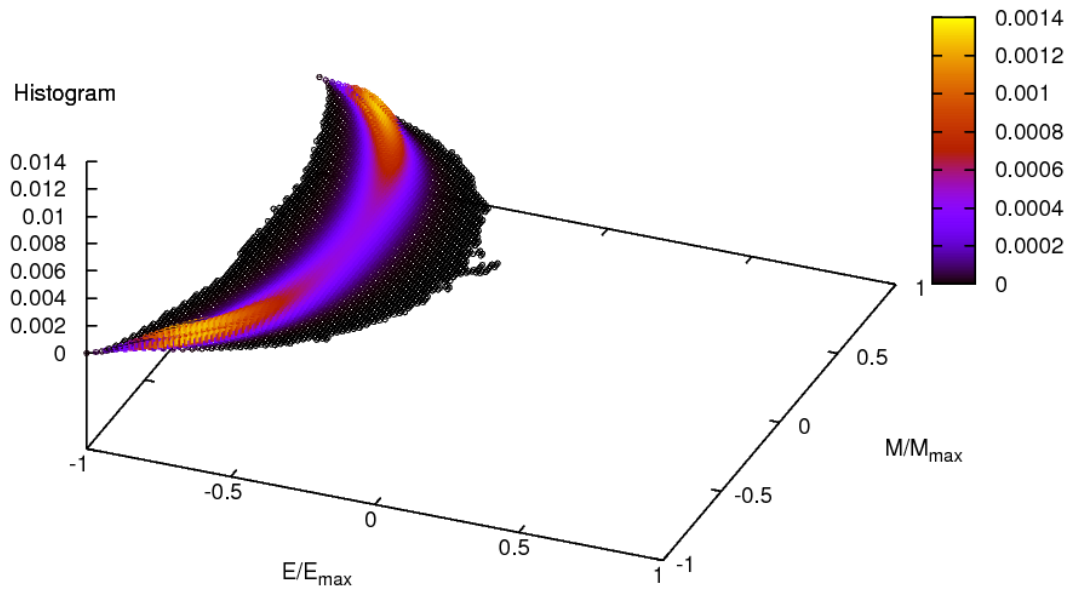


그림 14 $L=12$ 이고 $T=2.5$ 에서 강자성 이징 모형의 규격화된 에너지와 자기화의 함수로서의 히스토그램

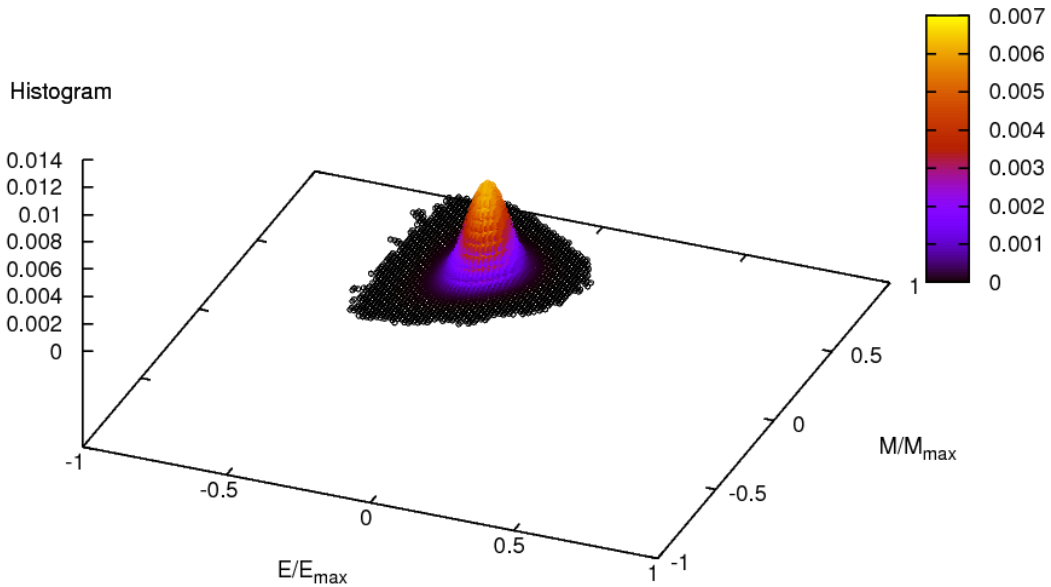


그림 15 $L=12$ 이고 $T=\infty$ 에서 강자성 이징 모형의 규격화된 에너지와 자기화의 함수로서의 히스토그램

그림 12에서는 온도가 올라감에 따라 히스토그램 $P(E, M)_{T=2}$ 의 최댓값들이 낮아지고 있는 것을 볼 수 있고, 그림 13에서와 같이 임계점 $T=T_c$ 에서 $P(E, M)_{T=T_c}$ 의 최댓값은 더 낮아지고 최빈값 $P(E, M)_{T=T_c}$ 은 점점 $m=0$ 쪽으로 이동하다가 그림 15에서 $T=\infty$ 에서는 최빈값 $P(E, M)_{T=\infty} = 0$ 이 되는 것을 볼 수 있다.

제 2 절 엔트로픽 몬테카를로 시뮬레이션

1. 결합 상태 밀도를 이용한 왕-란다우 알고리즘

왕-란다우 표본 잡기 방법은 무작위로 스핀의 상태를 바꾸어 에너지 공간에 무작위 걸기를 수행한다. 그러나 각 스핀의 배열과 관련된 에너지 E 와 자기화 M 은 상호간의 결합 상태 밀도 $g(E, M)$ 에 비례하는 확률만을 받아들여진다. 무작위 걸기동안 결합 공간 $A = (E, M)$ 에서 히스토그램 $H(A)$ 을 모으며 각 결합 상태를 방문할 때마다 $H(A)$ 의 해당 요소는 1만큼 증가한다. 알고리즘은 곱 계수 (multiplicative factor) f 로 상태 밀도의 추정을 조정하고 결합 공간에서 추가의 무작위 걸기를 수행하여 업데이트된 상태 밀도를 사용한다. 수용 확률의 이러한 선택으로 각 무작위 걸기는 에너지 분포(energy distribution)에 대한 평평한 히스토그램(flat histogram)을 만들어 낸다. 보정 계수 f 은 면밀하게 조절되고, 시뮬레이션이 끝나면, 참 상태 밀도를 가진 무작위 걸기의 가장 이상적인 경우인 1에 가까워지게 된다. 시뮬레이션이 시작되면, $g(A)$ 는 알지 못하고 초기의 추측을 한다. 단순한 접근은 모든 가능한 결합 상태 A 에 대하여 $g(A) = 1$ 로 놓는다. 전체 격자에 대한 초기 스핀 배열은 마음대로 선택될 수 있다. 그리고 나서, 결합 공간에서 무작위 걸기는 시행 상태를 형성하면서 시작된다. 각 시행 상태는 무작위로 스핀을 선택하여 그것의 상태를 바꿈으로써 생기게 된다. 일반적으로, A_1 과 A_2 은 결합상태의 전과 후라고 하면, 스핀 값은 바뀌게 되고, 결합상태 A_1 에서 A_2 로 전이 확률(transition probability)은 다음과 같다.

$$P(A_1 \rightarrow A_2) = \min\left(\frac{g(A_1)}{g(A_2)}, 1\right) \quad (2-26)$$

$g(A_2) \leq g(A_1)$ 이면 결합상태 A_2 은 받아들여지고 그렇지 않으면 확률 $g(A_1)/g(A_2)$

로 받아들여진다. 즉, 0과 1 사이의 고르게 선택된 무작위수(random number)가 비 $g(A_1)/g(A_2)$ 와 같거나 보다 작으면 결합상태 A_2 을 가진 상태는 받아들여진다. 만약 결합상태 A_2 을 가진 시행 상태가 받아들여지면, 보정 계수 $f > 1$ 로부터 $g(A_2)$ 의 기존의 값을 곱한다, $g(A_2) \rightarrow f \times g(A_2)$. 그리고 결합 상태 A 에 대한 히스토그램에서 $H(A_2)$ 에 기존의 요소를 업데이트한다, $H(A_2) \rightarrow H(A_2) + 1$. 만약 무작위 걸기가 시행 움직임을 거부하고 결합상태 A_1 로 남게 되면, 같은 보정 계수로부터 기존의 상태 밀도 $g(A_1)$ 을 바꾼다, $g(A_1) \rightarrow f \times g(A_1)$. 그리고 결합 상태 A 에 대한 히스토그램에 $H(A_1)$ 에 기존의 값을 업데이트한다, $H(A_1) \rightarrow H(A_1) + 1$. $g(A)$ 가 매우 크기 때문에, 실제로 상태 함수의 로그를 연구 대상으로 하는 것이 보다 더 좋다. 그래서 모든 가능한 $\ln[g(A)]$ 은 2배 정도의 수로 맞춘다.

초기 보정 계수의 최적 선택은 $f = f_0 = e^1 \approx 2.71828$ 이며, 이것은 큰 시스템에서 모든 가능한 에너지 E 와 자기화 M 에 대한 결합 상태에 빠르게 도달하도록 해준다. f_0 이 너무 작으면, 무작위 걸기는 모든 가능한 에너지 E 와 자기화 M 을 도달하는데 매우 오랜 시간이 걸린다. 하지만 너무 크면, 큰 통계 오차(statistical errors)를 일으킨다. 평평한 히스토그램 $H(A)$ 을 얻을 때까지 결합 공간에 무작위 걸기는 진행된다. 히스토그램이 평평할 때, 모든 가능한 에너지 E 와 자기화 M 은 거의 같은 횟수를 방문하고, 그리고 상태 밀도는 보정 계수 $\ln(f)$ 에 비례하는 정확성으로 참 값에 수렴한다. 그러고 나서 $f_1 = \sqrt{f_0}$ 과 같은 함수를 사용하여 보정 계수를 줄이고, 모든 에너지 E 와 자기화 M 값에 대하여 $H(A) = 0$ 으로 히스토그램을 다시 놓고, 각 단계에서 보다 작은 보정 계수 f_1 을 가지고 상태 밀도를 바꾸면서 다음 단계의 무작위 걸기를 시작한다. 스핀 배열과 상태 밀도는 시뮬레이션 동안 다시 놓으면 안 되며, 히스토그램 $H(A)$ 이 다시 평평해질 때까지 무작위 걸기를 계속 수행한다. 그러고 나서 보정 계수 $f_{i+1} = \sqrt{f_i}$ 을 줄이고, 모든 에너지 E 와 자기화 M 의 값에 대하여 $H(A) = 0$ 으로 히스토그램을 다시 놓고, 무작위

걸기를 다시 시작한다. 보정 계수가 미리 정의된 값 $f_{final} = \exp(10^{-8})$ 인 약 1.00000001보다 작을 때 시뮬레이션은 멈춘다. 보정 계수는 시뮬레이션동안 상태 밀도의 정확성에 대한 제어 변수(control parameter)로서의 역할을 하고, 얼마나 많은 몬테카를로 단계가 전체 시뮬레이션 하는 동안 필요한지를 결정한다.

완벽히 평평한 히스토그램을 얻는 것은 불가능하며 모든 가능한 결합상태 A 에 대한 히스토그램 $H(A)$ 은 평균 히스토그램 $\langle H(A) \rangle$ 의 $x\%$ 보다 적지 않아야 한다. 여기서 $x\%$ 은 시스템의 사이즈와 복잡성 그리고 상태 밀도의 바라던 정확성에 따라서 선택되어진다. 작은 격자에서 최 인접 결합만을 가진 2차원 이징 모형에서, 이 퍼센트는 95%에 달하도록 선택되어질 수 있지만, 큰 시스템에서는 평평도 (flatness)에 대한 기준을 만족할 수 없을지도 모른다.

왕-란다우 방법의 장점 중 하나는 상태 밀도가 온도에 의존하지 않는다는 것이다. 예를 들어서, 내부 에너지(internal energy) $U(T)$ 와 내부 에너지의 요동(fluctuation)으로부터 결정되는 비열 $C(T)$ 을 계산한다. 분배 함수로부터 직접적으로 계산할 수 있는 헬름홀츠 자유 에너지(Helmholtz free energy) $F(T)$ 와 엔트로피(entropy) $S(T)$ 같은 몇몇 양들 또한 접근할 수 있으며, 위에서 설명한 열역학량은 다음과 같다.

$$U(T) = \frac{\sum_A E g(A) e^{-E/k_B T}}{\sum_A g(A) e^{-E/k_B T}} = \langle E \rangle \quad (2-27)$$

$$C(T) = \frac{\partial U(T)}{\partial T} = \frac{\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2}{k_B T^2} \quad (2-28)$$

$$F(T) = -k_B T \ln(Z) = -k_B T \ln\left(\sum_A g(A) e^{-E/k_B T}\right) \quad (2-29)$$

$$S(T) = \frac{U(T) - F(T)}{T} \quad (2-30)$$

왕-란다우 알고리즘은 낮은 온도인 전이 온도에서 열역학적 정보를 얻는데 특히 유용하며 시뮬레이션의 출력은 온도에 의존하지 않는 상태 밀도이기 때문에, 시뮬레이션의 반복 없이 어떤 온도에서 대부분의 열역학량을 계산할 수 있다.

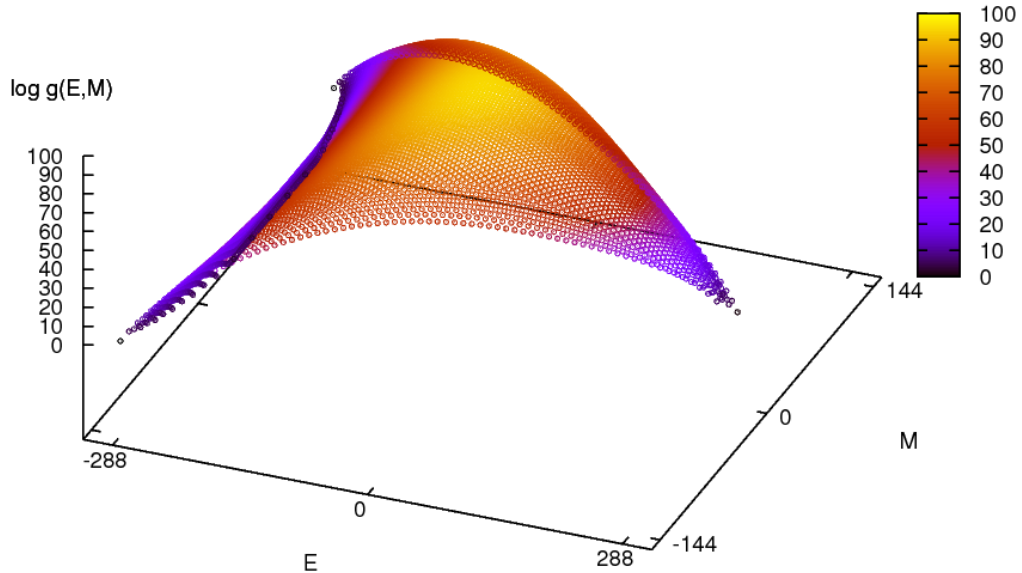


그림 16 $L=12$ 에서 강자성 이징 모형의 에너지와 자기화의 함수로서의 로그 결합 상태 밀도

그림 16에서는 $L=12$ 인 강자성 이징 모형의 결합 상태 밀도를 히스토그램의 평평도를 99%로 왕-란다우 표본잡기 방법을 이용하여 계산 한 후, 에너지와 자기화의 함수로서의 로그 결합 상태 밀도를 구하였다. 로그 결합 상태 밀도를 알면 온도의 함수로서의 히스토그램은 $P(E, M)_T = g(A)e^{-E/k_B T} / \sum_A g(A)e^{-E/k_B T}$ 이다.

2. 온도의 함수로서의 히스토그램 리웨이팅 방법과 비교

왕-란다우 알고리즘이 기존의 어떤 온도에서 직접 시뮬레이션을 했던 히스토그램 리웨이팅 방법과 무엇이 다른지에 대해서 생각해 보면 에너지와 자기화가 나올 확률을 앞에서 시뮬레이션을 했던 히스토그램 리웨이팅 방법과 비교해보았을 때 히스토그램 리웨이팅 방법은 샘플링이 완벽하게 이루어지지 않는다는 것을 알 수 있다.

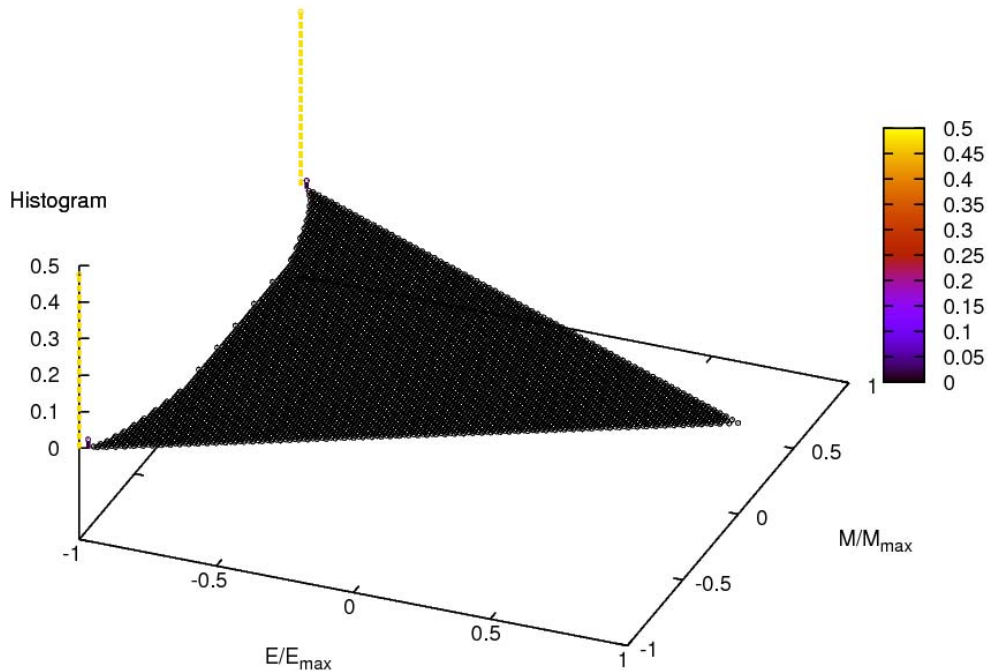


그림 17 $L=12$ 이고 $T=1$ 에서 강자성 이징 모형의 결합 상태 밀도로 계산한 규격화된 에너지와 자기화의 함수로서의 히스토그램

그림 17에서는 결합 상태 밀도를 이용하여 온도의 함수로서 히스토그램 $P(E, M)$ 을 $T=1$ 에서 구하였다. 이것을 그림 11에서 히스토그램 방법으로 구한 히스토그

램 리웨이팅 방법과 비교하여 보면 로컬 에너지 최소 점에 빠지지 않고 에너지 공간에서 자유롭게 무작위 걷기를 하는 것을 볼 수 있다. 이것은 전이확률 $\min(e^{-\Delta E/k_B T}, 1)$ 로 온도에 의존하는 히스토그램 리웨이팅 방법과는 달리 왕-란다우 표본잡기는 온도를 사용하지 않는 표본잡기 방법으로 저온에서 로컬 에너지 최소 점에 빠지지 않는 좋은 표본잡기임을 보여준다.

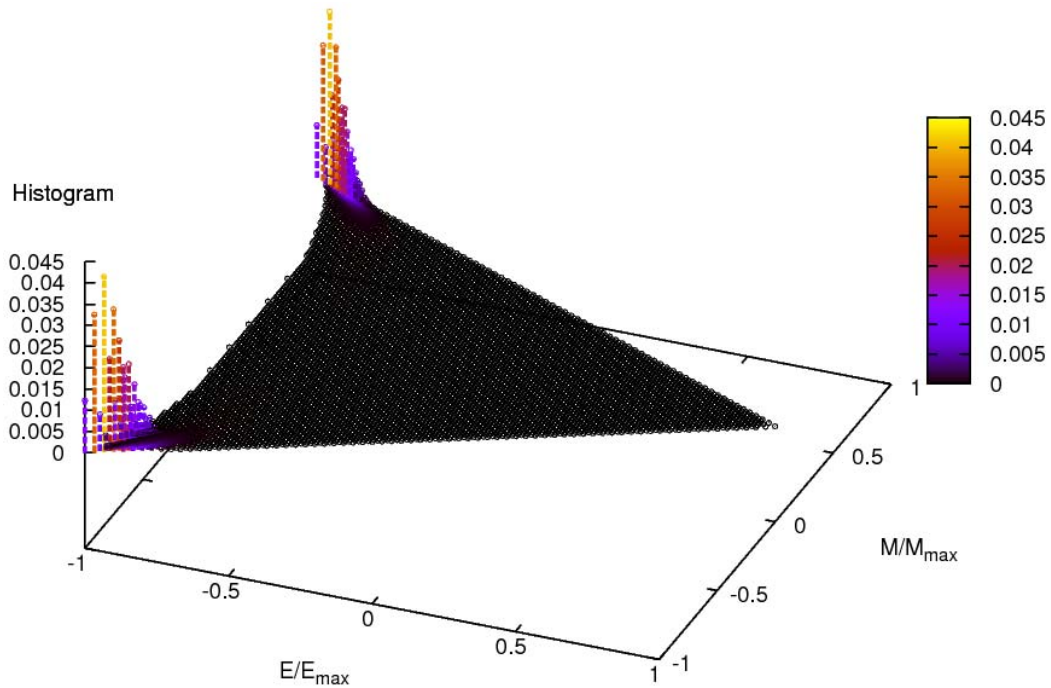


그림 18 $L=12$ 이고 $T=2$ 에서 강자성 이징 모형의 결합 상태 밀도로 계산한 규격화된 에너지와 자기화의 함수로서의 히스토그램

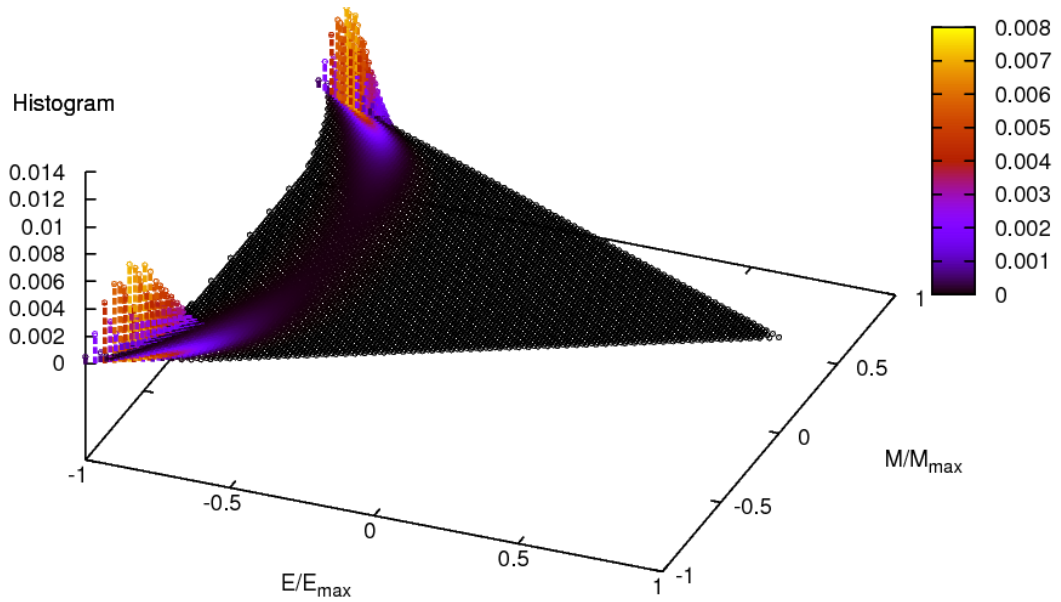


그림 19 $L=12$ 이고 $T=T_c$ 에서 강자성 이징 모형의 결합 상태 밀도로 계산한
규격화된 에너지와 자기화의 함수로서의 히스토그램

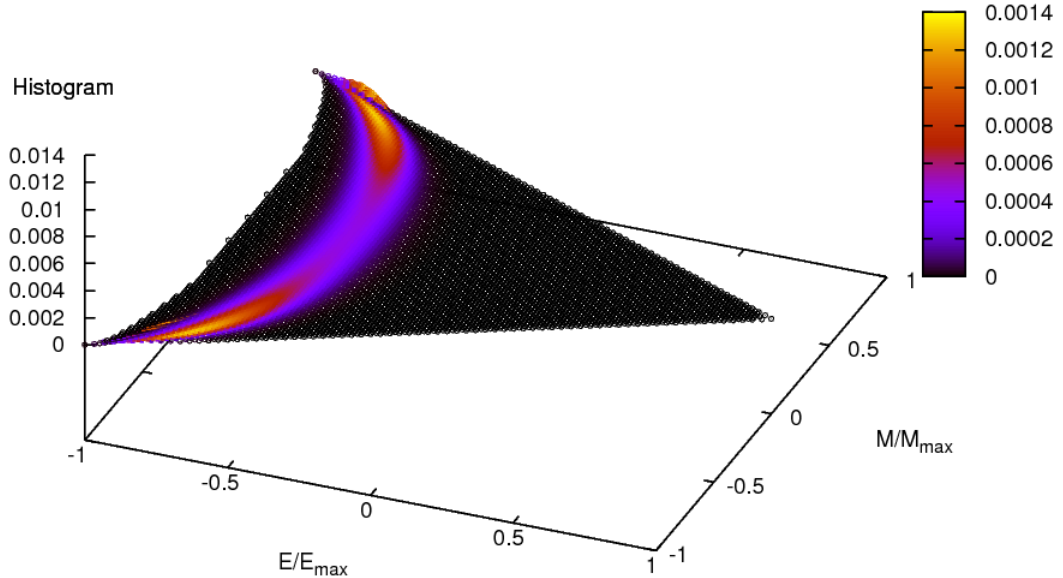


그림 20 $L=12$ 이고 $T=2.5$ 에서 강자성 이징 모형의 결합 상태 밀도로 계산한
규격화된 에너지와 자기화의 함수로서의 히스토그램

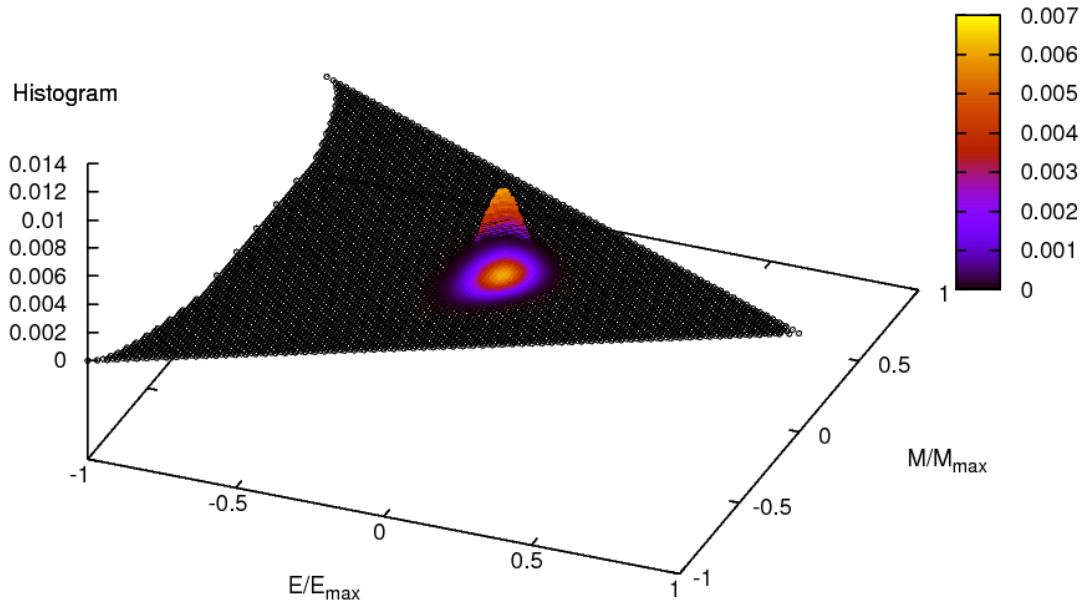


그림 21 $L=12$ 이고 $T=\infty$ 에서 강자성 이징 모형의 결합 상태 밀도로 계산한
규격화된 에너지와 자기화의 함수로서의 히스토그램

그림 18에서는 $T=2$, 그림 19에서는 $T=T_c$, 그림 20에서는 $T=2.5$, 그리고
그림 21에서는 $T=\infty$ 에서 왕-란다우 표본잡기로 구한 온도의 함수로서의 히스토
그램 $P(E, M)$ 을 보여주고 있으며, 모든 히스토그램이 히스토그램 리웨이팅 방법과
비교하여 좋은 결과를 보여주는 것을 알 수 있다. 캐노니컬 샘플링은 $T=T_c$ 이하
에서는 시뮬레이션이 안 되기 때문에 $T=T_c$ 이하를 연구하는 것은 적합하지 않다는
것을 알 수 있다.

제 4 장 전산 시뮬 결과

제 1 절 격자구조에 따른 반강자성 스핀 모형의 특성

이징 모형에서 인접한 스핀들간의 상호작용이 반강자성일 때 임계 특성들은 격자 구조에 따라 임계 선(critical lines)은 다양한 유형들을 가진다.

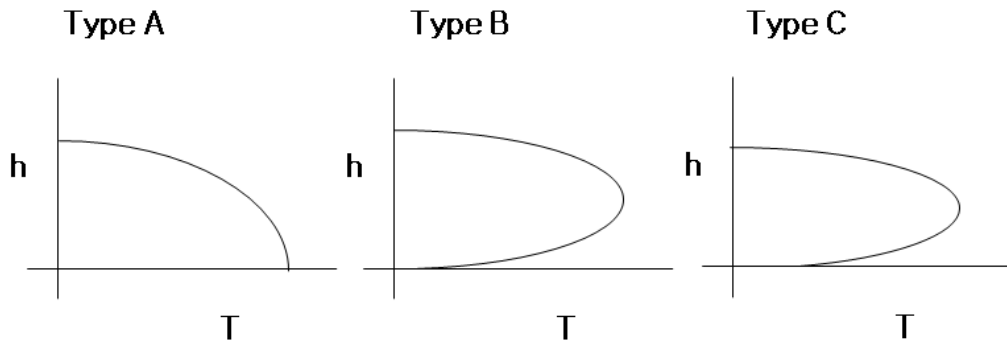


그림 22 반강자성 이징 모형의 임계 선 유형

사각 격자 위의 이징 모형은 온사거의 해법으로부터 잘 알려져 있으며 임계 현상을 이해하는데 주된 역할을 하고, 최 인접 사이에 반강자성 상호작용하는 격자를 가진 찰찰맨 시스템을 가진 이징 모형은 그림 22와 같이 외부변수 온도와 외부 자기장에 따라 격자 형태에 따른 Type A, Type B, 와 Type C 형태의 상전이 선을 보여주고 있다[22]. 격자형태가 사각 격자, 허니콤(Honeycomb) 격자일 경우는 Type A, 격자형태가 삼각격자일 경우는 Type B, 마지막으로 격자형태가 면심 입방(FCC - Face Centered Cubic)일 때는 Type C 형태의 상전이 선을 가진다고 연구되었다.

하지만 블룸-카펠 모형은 아직까지 격자구조에 따라 임계 선이 어떻게 변하는지는 잘 알려지지 있지 않고, 카코메 격자에서 이징 모형과 블룸-카펠 모형의 상전이 선은 반강자성은 물론 강자성 상호작용일 때조차도 잘 알려지지 있지 않다. 전산

시뮬레이션을 통해 격자 구조에 따른 강자성 및 반강자성 이징 모형과 블룸-카펠 모형의 다양한 임계 현상과 상전이 특징을 연구하고자, 다양한 격자 구조의 특성을 알아보하고자 한다.

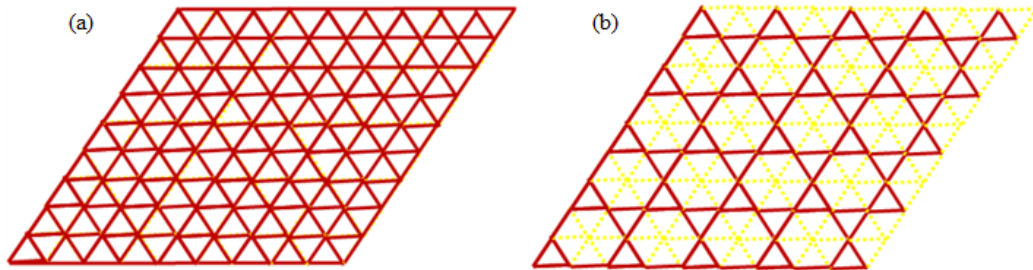


그림 23 $L=9$ 인 $L \times L$ 격자 구조 (a) 삼각 격자 (b) 카고메 격자

1. 찢찢매 시스템을 가진 삼각 격자 위의 스핀 배열

삼각 격자 위에서 스핀 $S=1/2$ 을 가진 반강자성 이징 모형은 wannier와 stephenson로부터 잘 알려져 있다. 삼각 격자 위의 이웃하는 세 개의 스핀으로 구조의 복잡하고 다양한 행동의 근원을 설명될 수 있다. 삼각 격자는 A, B 그리고 C 인 3개의 부분 격자(sub-lattice)로 구성되어 있고 A 부분 격자의 스핀은 $+S$, B 부분 격자의 스핀은 $-S$, 그리고 C 부분 격자의 스핀은 에너지를 최소화 하기 위하여 A 부분 격자의 스핀이나 B 부분 격자의 스핀을 따를 수 없어 찢찢매는 양상을 가지는 모습을 그림 24에서 보여주고 있다.

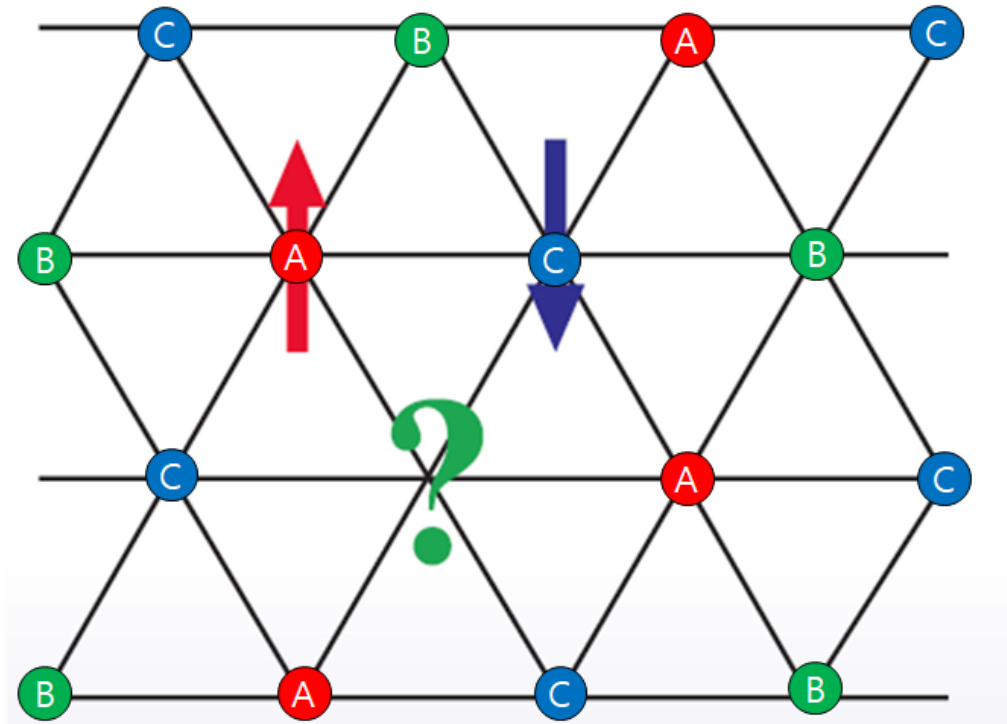


그림 24 이웃하는 3개의 스핀이 반강자성 상호작용을 하며, 정렬될 수 없는 찢찢매 시스템을 가진 삼각 격자 위의 스핀 배열 및 부분 격자 구조 그림

기본적인 삼각 격자 위에 두 개의 스핀이 반강자성 상호작용을 만족시키며 에너지를 최소화하기 위해 정렬될 수 있지만, 모든 상호 작용은 동시에 최소화될 수 없는 낮은 에너지 상태가 존재하며, 이러한 반강자성 이징 모형을 켈렐렐 시스템이라고 한다.

2. 찢찢맴 시스템을 가진 카고메 격자 위의 스핀 배열

동양에서 널리 쓰이고 있는 대나무 바구니인 카고메는 삼각형과 벌집모형의 결합으로 이루어져 있다. 좌표숫자(coordinate number)가 사각 격자와 같이 4인 카고메 격자구조를 물리학자 Syozi가 재료과학 및 물리 커뮤니티에 소개하여 널리 알려지게 되었다. 좌표의 숫자는 사각 격자와 같이 4이지만 카고메 격자에서의 물질의 특성은 사각 격자와 완전히 다르다. 물리학, 화학, 재료 과학 및 공학에서 다양한 물질의 자기 스핀 찢찢맴 연구를 수행하기 위하여 카고메 격자는 중요한 역할을 한다. 그림 25는 카고메 격자 위의 반강자성 스핀의 찢찢맴 시스템과 부분 격자의 모습을 보여주고 있다.

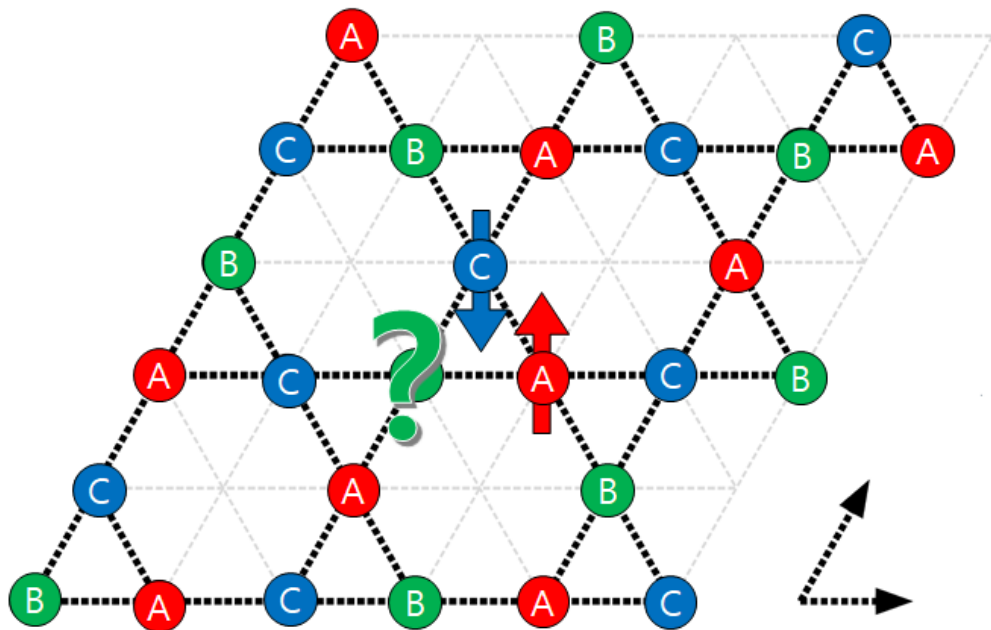


그림 25 이웃하는 스핀이 반강자성 상호작용을 하며, 정렬될 수 없는 찢찢맴 시스템을 가진 카고메 격자 위의 스핀 배열 및 부분 격자 구조 그림

제 2 절 사각 격자 위의 스핀 모형의 상전이 현상

1. 사각 격자 위의 스핀 모형의 WL 표본잡기 전산 시뮬

현재까지 스핀의 상태가 $s=1, -1$ 인 이징 모형은 사각 격자 위의 반강자성체에 대하여 많은 전산 수행이 되어 왔다. 하지만, 블룸-카펠 모형과 같이 스핀의 상태가 $s=1, 0, -1$ 인 경우에는 전산시뮬의 어려움과 블룸-카펠 모형의 복잡한 상전이 현상으로 인하여 아직도 연구가 활발히 진행 중이다. 잘 알려진 사각 격자 위의 반강자성 이징 모형의 상 다이어그램과 사각격자 위의 반강자성 블룸-카펠 모형의 상 다이어그램을 왕-란다우 샘플링 방법과 소정준(microcanonical) 분석을 이용하여 비교 분석함으로써 블룸-카펠 모형의 상전이가 어떻게 일어나는지를 연구하려고 한다.

왕-란다우 알고리즘을 통하여 제로 온도에서 두 모형의 정확한 자기장을 평가하기 위해서 우선 이를 이용하여 스핀의 결합 상태 공간 A 에서의 무작위 걷기를 수행한다. 사각 격자 위의 반강자성 이징 모형에 대해서는 결합 상태 공간 $A(E, M)$ 에서 무작위 걷기를 수행하고, 사각 격자 위의 반강자성 블룸-카펠 모형에 대해서는 결합 상태 공간 $A(E, M, M^2)$ 에서 무작위 걷기를 수행하였다. 여기서 질서 변수 M 은 $\sum_i S_i$ 이고 질서 변수의 제곱인 M^2 은 $\sum_i S_i^2$ 이지만, 각 스핀 배열과 관련된 결합 상태 A 은 결합 상태 밀도 수(joint density of states) $g(A)$ 의 역수에 비례하는 확률로만 받아들여진다. 또한 결합 상태 밀도를 사용하여 모형의 상 다이어그램과 임계 선을 보여준다. 이징 모형과 블룸-카펠 모형의 임계 선을 찾고 온도가 0일 때 임계 자기장(critical magnetic field)을 찾는다.

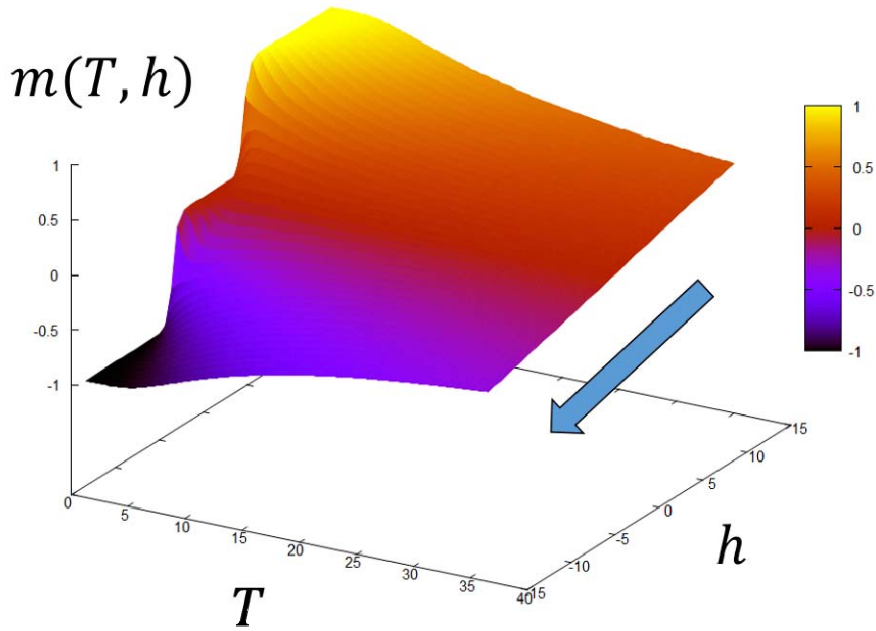


그림 26 사각 격자 위에서 에너지, 온도 그리고 외부 자기장의 함수로서의 $L=12$ 에서 반강자성 이징 모형의 자기화

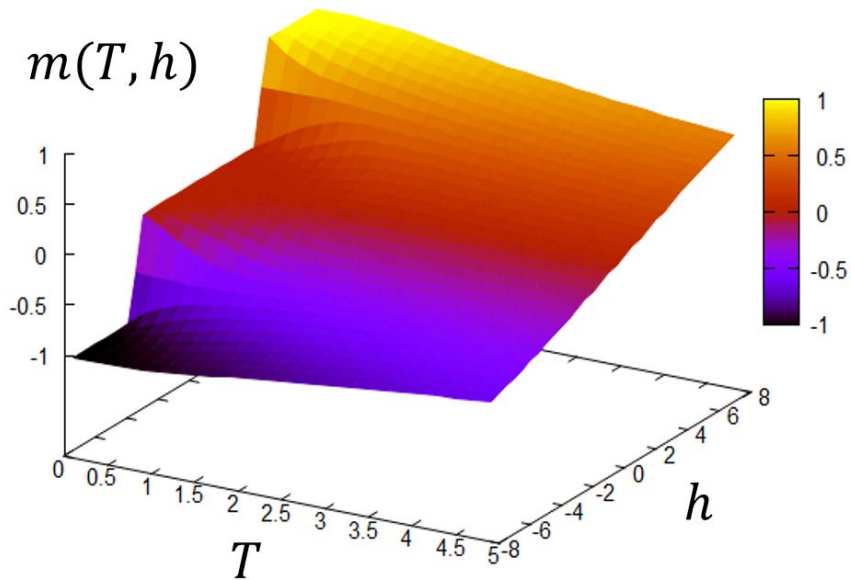


그림 27 사각 격자 위에서 에너지, 온도 그리고 외부 자기장의 함수로서의 $L=6$ 에서 반강자성 블룸-카펠 모형의 자기화

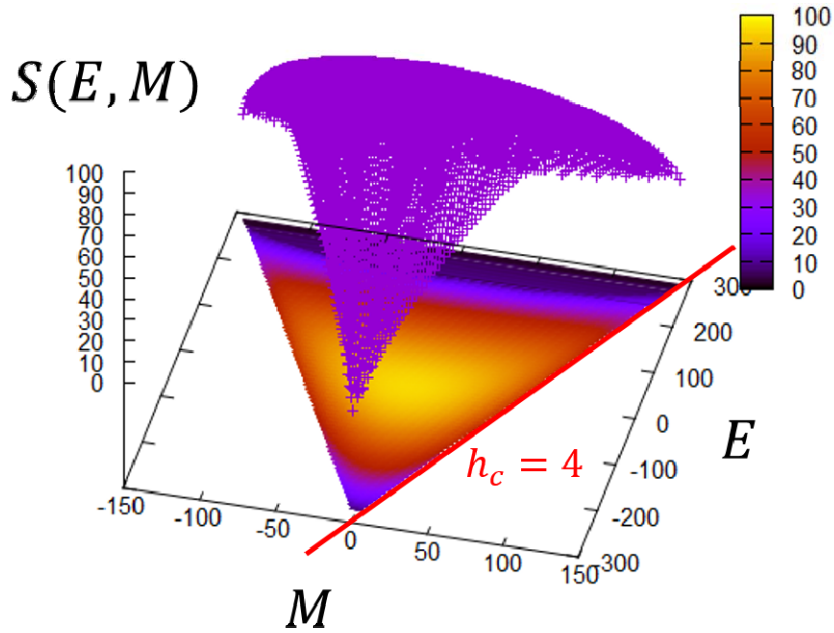


그림 28 사각 격자 위에서 에너지와 자기화의 함수로서의 $L = 12$ 에서 반강자성 이징 모형의 소정준 엔트로피

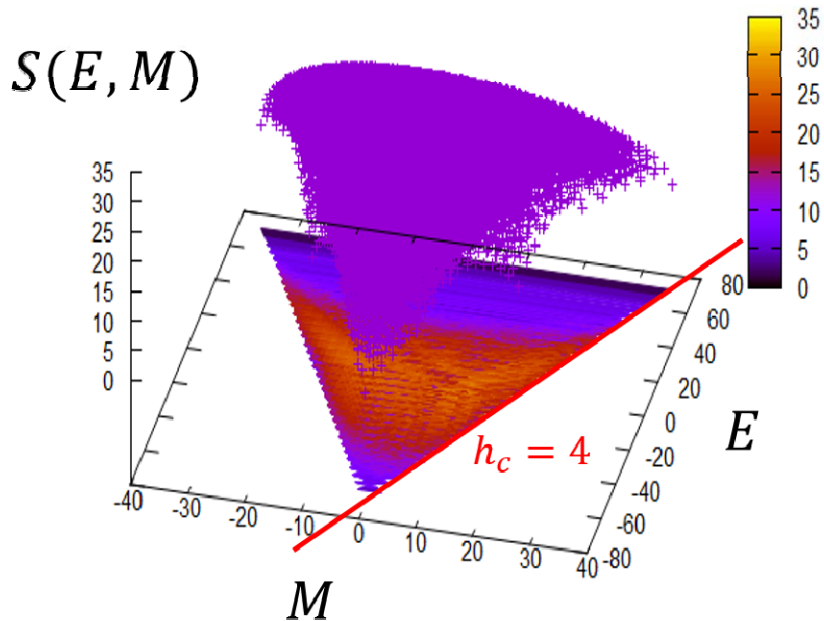


그림 29 사각 격자 위에서 에너지와 자기화의 함수로서의 $L = 6$ 에서 반강자성 블룸-카펠 모형의 소정준 엔트로피

2. 상전이 도표 및 임계 선 분석

사각 격자에 대한 $L=12$ 에서 반강자성 이징모형과 $L=6$ 에서 반강자성 블룸-카펠 모형에 대한 자기화의 정준 분표는 그림 26과 그림 27에서 보인다. $T \sim 0$ 의 근방에서의 h 의 함수로서의 m 의 라인은 반강자성 블룸-카펠 모형에 대하여 불연속을 나타내지만 반강자성 이징모형에서는 보이지 않는다. 사각 격자에서 에너지와 자기화의 함수로서의 그림 28은 $L=12$ 에서 반강자성 이징 모형 그리고 그림 29는 $L=6$ 에서 반강자성 블룸-카펠 모형의 소정준 엔트로피 $S(E, M)$ 을 보여준다. 그림 28과 그림 29에서, $M-E$ 다이어그램의 등고선 도표는 3개의 정점이 있고 맨 위의 왼쪽 정점은 모든 스핀이 다운인 상태 그리고 맨 위의 오른쪽 정점은 모든 스핀이 업인 상태에 해당한다. 맨 위의 오른쪽 정점의 위치는 다음과 같다. 반강자성 이징 모형에 대하여 $E=288$ 그리고 $M=144$ 이고, 반강자성 블룸-카펠 모형에 대하여 $E=102$ 그리고 $M=35$ 이다. 그림 28과 그림 29의 $M-E$ 다이어그램의 등고선 도표에서, 하단은 외부 자기장 h 이 없는 찢찢멤 반강자성 기저 상태에 해당한다. 아래 정점의 위치는 반강자성 이징 모형에 대하여 $E=-288$ 그리고 $M=0$ 이고, 반강자성 블룸-카펠 모형에 대하여 $E=-72$ 그리고 $M=0$ 이다.

온도가 0일 때 E_t 가 극소가 되는 항이 우세하다는 것을 관찰할 수 있고 여기서 $E_t = E - hM$ 은 총 에너지이다. 총 에너지 E_t 은 $M-E$ 다이어그램에서 직선 $E = hM + E_t$ 인 E 축 상의 교차점으로 해석될 수 있다. 맨 위의 오른쪽 정점과 아래 정점을 연결하는 선의 기울기로부터 사각 격자 위의 반강자성 이징 모형과 블룸-카펠 모형에 대한 임계 자기장 h_c 이 4임을 알 수 있다.

그림 30은 사각 격자 위의 반강자성 이징 모형과 블룸-카펠 모형의 측정된 임계 선을 보여준다. 두 모형에 대한 임계 선의 패턴은 동일하지만, $T \sim 0$ 부근의 전이는 서로 다르다. $T \sim 0$ 과 $h_c = 4$ 에서의 반강자성 블룸-카펠 모형의 임계 선은 1차

상전이를 나타내지만 $T \sim 0$ 과 $h_c = 4$ 에서의 반강자성 이징 모형은 2차 상전이를 나타낸다.

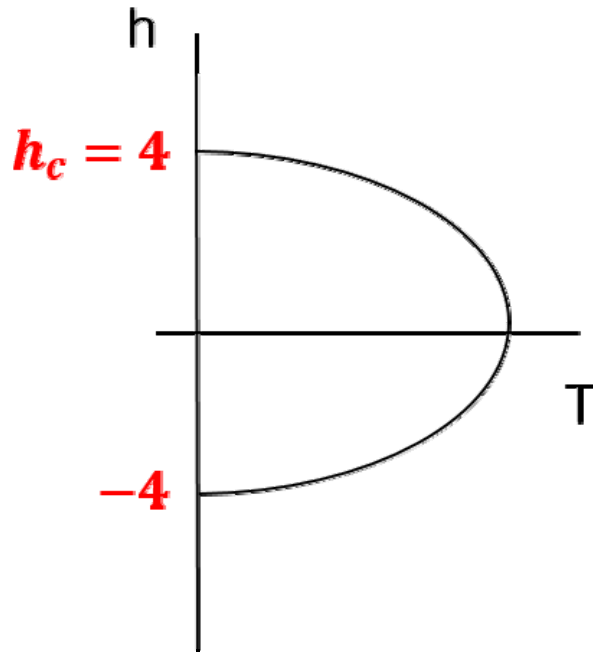


그림 30 사각 격자에서 $L = 12$ 에서 반강자성 이징 모형과 $L = 6$ 에서 반강자성 블룸-카펠 모형의 임계 선의 도표

제 3 절 삼각 격자 위의 스핀 모형의 상전이 현상

1. 삼각 격자 위의 스핀 모형의 WL 표본잡기 전산 시뮬

삼각격자 위의 반강자성 이징 모형의 상전이 현상은 아직도 활발히 연구가 진행되고 있지만 삼각격자 위의 반강자성 블룸-카펠 모형의 연구는 아직까지는 잘 알려져 있지 않다. 왕-란다우 샘플링 방법과 소정준 분석을 이용하여 삼각 격자 위에서 반강자성 이징 모형과 반강자성 블룸-카펠 모형을 연구하였다. 왕-란다우 알고리즘을 이용하여 삼각격자 위의 반강자성 이징 모형에 대한 스핀의 결합 상태 공간 $A(E, M)$ 에서의 무작위 걷기를 수행하고, 삼각격자 위의 반강자성 블룸-카펠 모형의 결합 상태 공간 $A(E, M, M^2)$ 에서 무작위 걷기를 수행하여 결합 상태 밀도 $g(A)$ 의 역수에 비례하는 확률로 전산시뮬을 수행하여 결합 상태 밀도 수를 구하였다.

여기서 구한 결합 상태 밀도 수를 이용하여 온도와 외부 자기장의 함수로서의 자기화를 구하여, 현재 연구가 진행되고 있는 삼각격자 위의 반강자성 이징 모형의 상 다이어그램을 예측하고, 현재까지 잘 알려져 있지 않은 삼각격자 위의 반강자성 블룸-카펠 모형의 상 다이어그램을 그려서 두 개를 비교 분석하여 상전이 현상에 대하여 연구하였다.

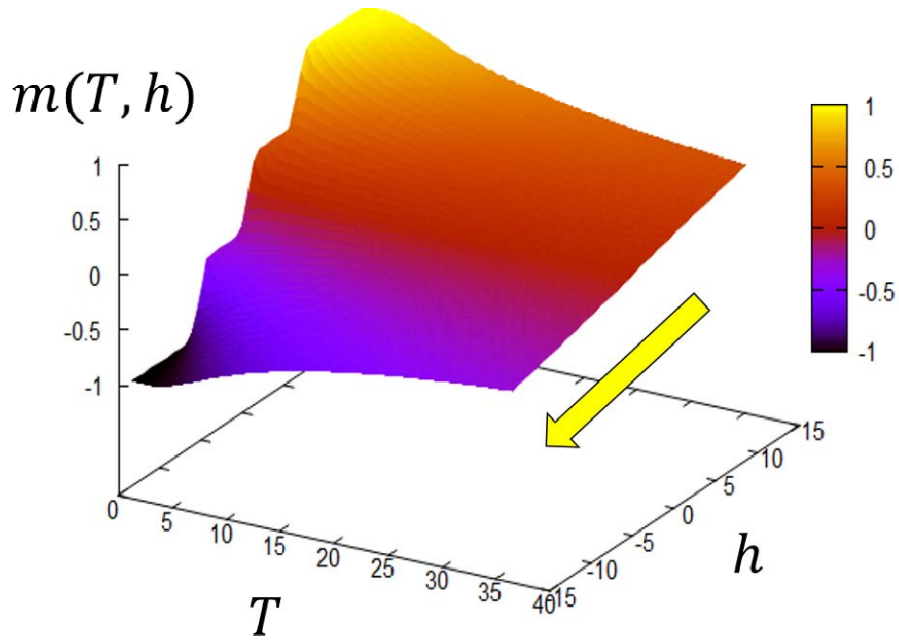


그림 31 삼각 격자에서 에너지, 온도 그리고 외부 자기장의 함수로서의 $L=12$ 에서 반강자성 이징 모형의 자기화

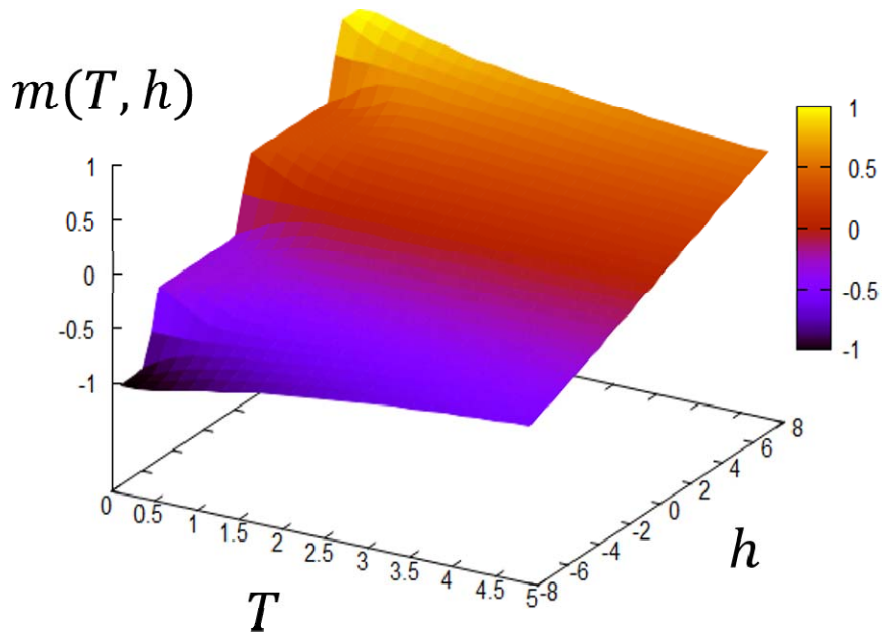


그림 32 삼각 격자에서 에너지, 온도 그리고 외부 자기장의 함수로서의 $L=6$ 에서 반강자성 블룸-카펠 모형의 자기화

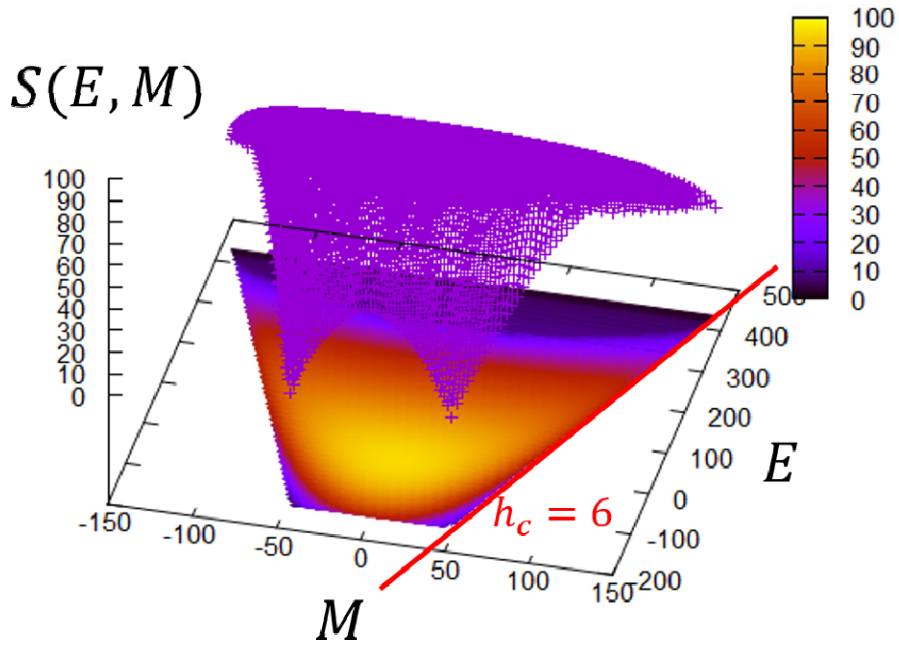


그림 33 삼각 격자에서 에너지와 자기화의 함수로서의 $L = 12$ 에서 반강자성 이징 모형의 소정준 엔트로피

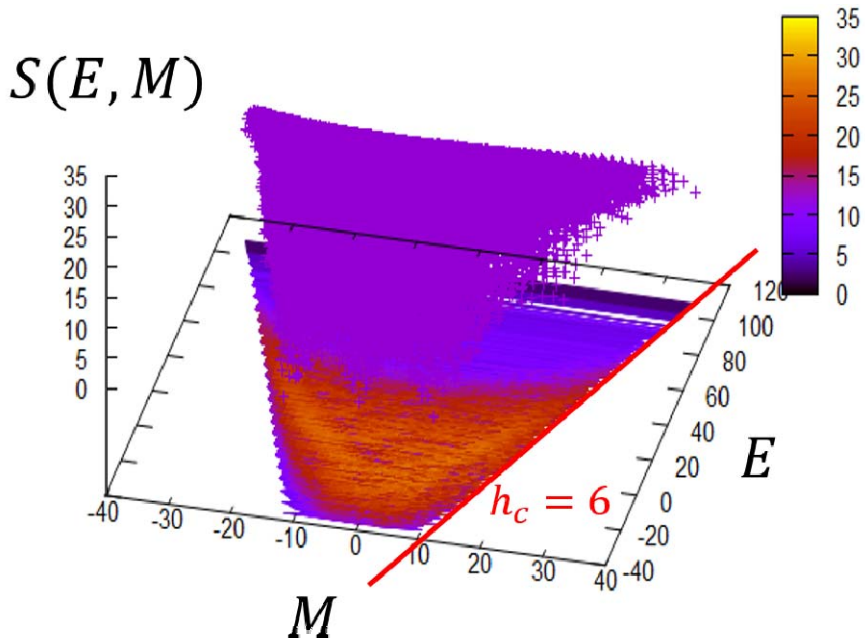


그림 34 삼각 격자에서 에너지와 자기화의 함수로서의 $L = 6$ 에서 반강자성 블룸-카펠 모형의 소정준 엔트로피

2. 상전이 도표 및 임계 선 분석

삼각 격자에 대한 $L=12$ 에서 반강자성 이징모형과 $L=6$ 에서 반강자성 블룸-카펠 모형에 대한 자기화의 정준 분표는 그림 31과 그림 32에서 보인다. $T \sim 0$ 의 근방에서의 h 의 함수로서의 m 의 라인은 반강자성 블룸-카펠 모형에 대하여 불연속을 나타내지만 반강자성 이징모형에서는 보이지 않는다. 삼각 격자에서 에너지와 자기화의 함수로서의 그림 33은 $L=12$ 에서 반강자성 이징 모형 그리고 그림 34는 $L=6$ 에서 반강자성 블룸-카펠 모형의 소정준 엔트로피 $S(E, M)$ 을 보여준다. 그림 33과 그림 34에서, $M-E$ 다이어그램의 등고선 도표는 4개의 정점이 있고 맨 위의 왼쪽 정점은 모든 스핀이 다운인 상태에 해당한다. 맨 위의 오른쪽 정점의 위치는 다음과 같다. 반강자성 이징 모형에 대하여 $E=432$ 그리고 $M=144$ 이고, 반강자성 블룸-카펠 모형에 대하여 $E=108$ 그리고 $M=36$ 이다. 그림 33과 그림 34의 $M-E$ 다이어그램의 등고선 도표에서, 하단은 외부 자기장 h 이 없는 찢찢땀 반강자성 기저 상태에 해당한다. 오른쪽 아래 정점의 위치는 반강자성 이징 모형에 대하여 $E=-144$ 그리고 $M=48$ 이고, 반강자성 블룸-카펠 모형에 대하여 $E=-36$ 그리고 $M=12$ 이다.

온도가 0일 때 E_t 가 극소가 되는 향이 우세하다는 것을 관찰할 수 있고 여기서 $E_t = E - hM$ 은 총 에너지이다. 총 에너지 E_t 은 $M-E$ 다이어그램에서 직선 $E = hM + E_t$ 인 E 축 상의 교차점으로 해석될 수 있다. 맨 위의 오른쪽 정점과 오른쪽 아래 정점을 연결하는 선의 기울기로부터 삼각 격자의 반강자성 이징 모형과 블룸-카펠 모형에 대한 임계 자기장 h_c 은 6임을 알 수 있다.

그림 35는 삼각 격자 위의 반강자성 이징 모형과 블룸-카펠 모형의 측정된 임계 선을 보여준다. 두 모형에 대한 임계 선의 패턴은 동일하지만, $T \sim 0$ 부근의 전이는 서로 다르다. $T \sim 0$ 과 $h_c = 6$ 에서의 반강자성 블룸-카펠 모형의 임계 선은 1차

상전이를 나타내지만 $T \sim 0$ 과 $h_c = 6$ 에서의 반강자성 이징 모형은 2차 상전이를 나타낸다.

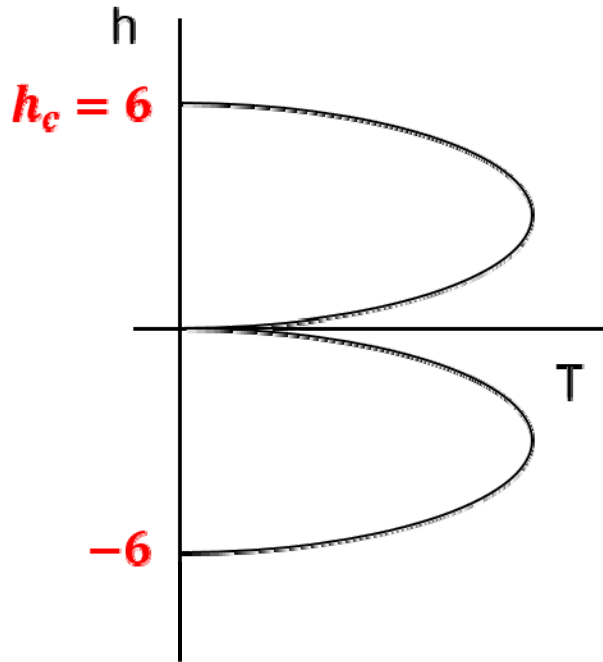


그림 35 삼각 격자에서 $L=12$ 에서 반강자성 이징 모형과 $L=6$ 에서 반강자성 블룸-가펠 모형의 임계 선의 도표

제 4 절 카고메 격자 위의 스핀 모형의 상전이 현상

1. 카고메 격자 위의 스핀 모형의 WL 표본잡기 전산 시뮬

삼각격자와 벌집격자의 결합으로 구성된 카고메 격자 위의 반강자성 이징 모형의 상전이 현상은 잘 알려져 있지 않다. 잘 알려져 있지 않은 카고메 격자 위의 반강자성 이징 모형과 블룸-카펠 모형의 상전이 현상을 연구하기 위하여 왕-란다우 샘플링 방법과 소정준 분석을 이용하여 카고메 격자 위에서 반강자성 이징 모형과 반강자성 블룸-카펠 모형을 연구하였다. 우리는 왕-란다우 샘플링 방법을 이용하여 카고메 격자에서 반강자성 이징 모형의 결합 상태 공간 $A(E, M)$ 에서의 무작위 걸기를 수행하고, 카고메 격자에서 반강자성 블룸-카펠 모형의 결합 상태 공간 $A(E, M, M^2)$ 에서 무작위 걸기를 수행하여 결합 상태 밀도 $g(A)$ 을 구하였다.

여기서 구한 결합 상태 밀도를 이용하여 온도와 외부장의 함수로서의 자화도를 구하여 상전이 현상을 연구하였다. 카고메 격자 위의 반강자성 이징 모형과 블룸-카펠 모형의 연구는 잘 알려져 있지 않아서 우리는 상전이 다이어그램을 보면서, 앞에서 수행한 사각격자와 삼각격자 위에서 반강자성 이징 모형과 반강자성 블룸-카펠 모형의 전산시뮬의 결과와 비교 분석하면서 잘 알려져 있지 않은 카고메 격자 위의 반강자성 스핀 모형의 상전이 현상을 이해하고 연구하였다.

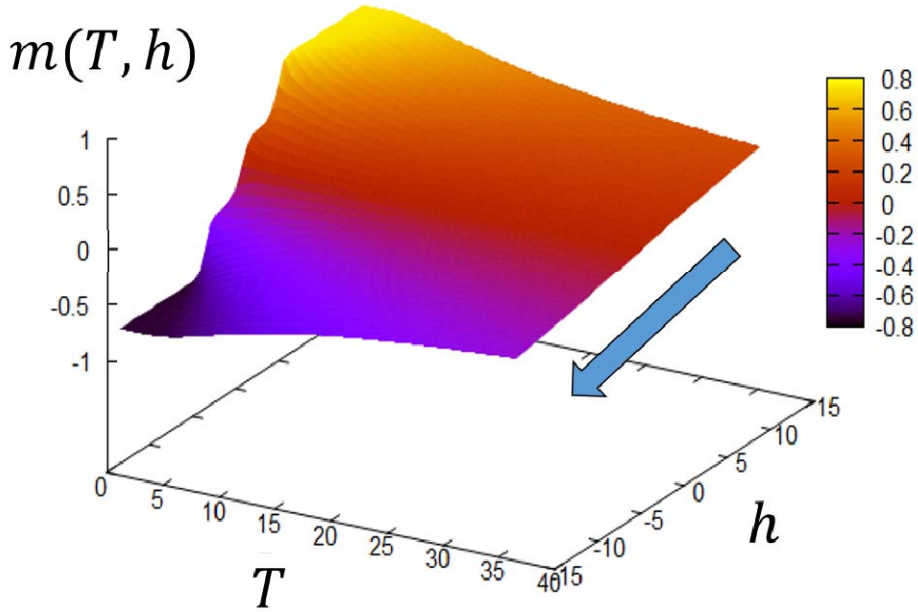


그림 36 카고메 격자 위의 에너지, 온도 그리고 외부 자기장의 함수로서의 $L=12$ 에서 반강자성 이징 모형의 자기화

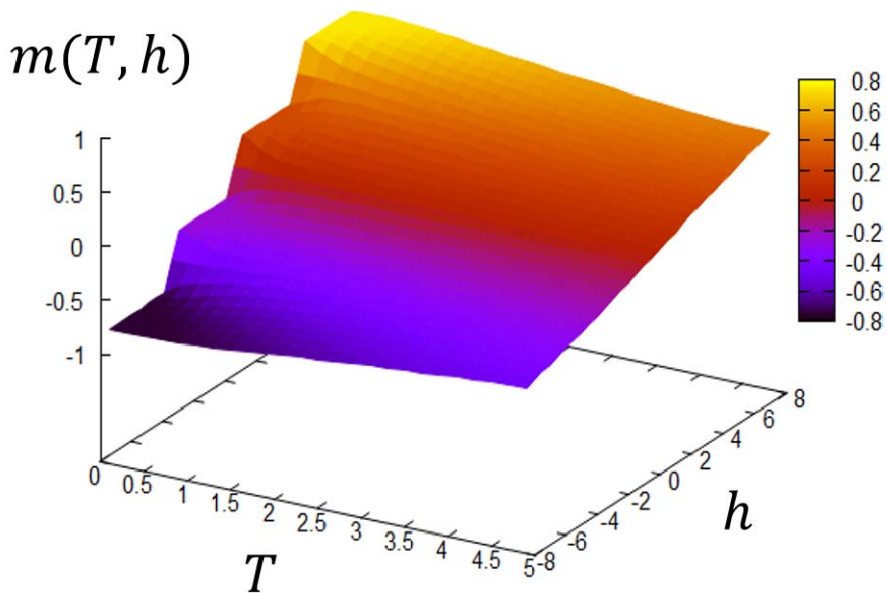


그림 37 카고메 격자 위의 에너지, 온도 그리고 외부 자기장의 함수로서의 $L=6$ 에서 반강자성 블룸-카펠 모형의 자기화

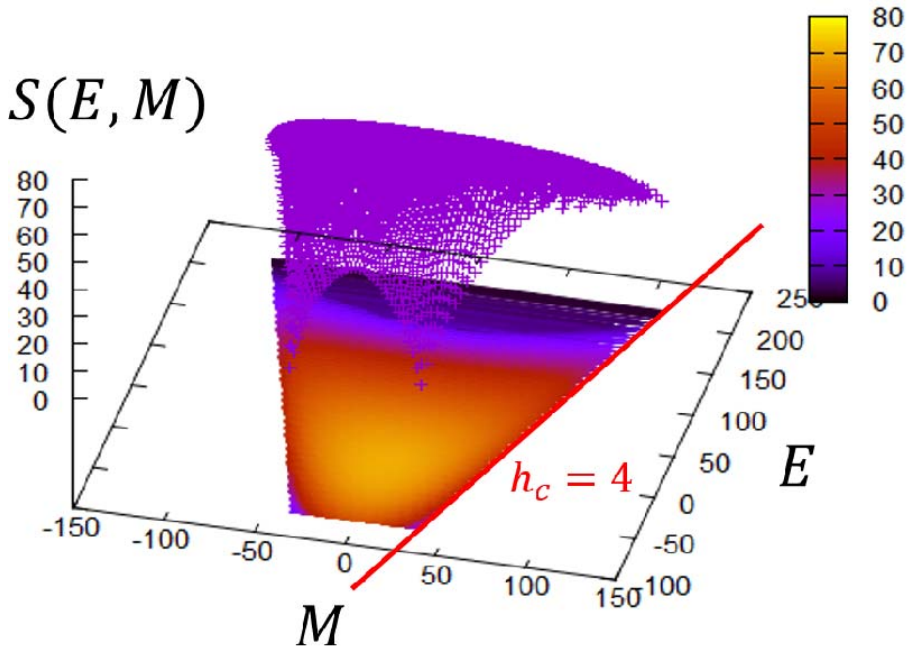


그림 38 카고메 격자 위의 에너지 그리고 자기화의 함수로서의 $L=12$ 에서 반강자성 이징 모형의 소정준 엔트로피

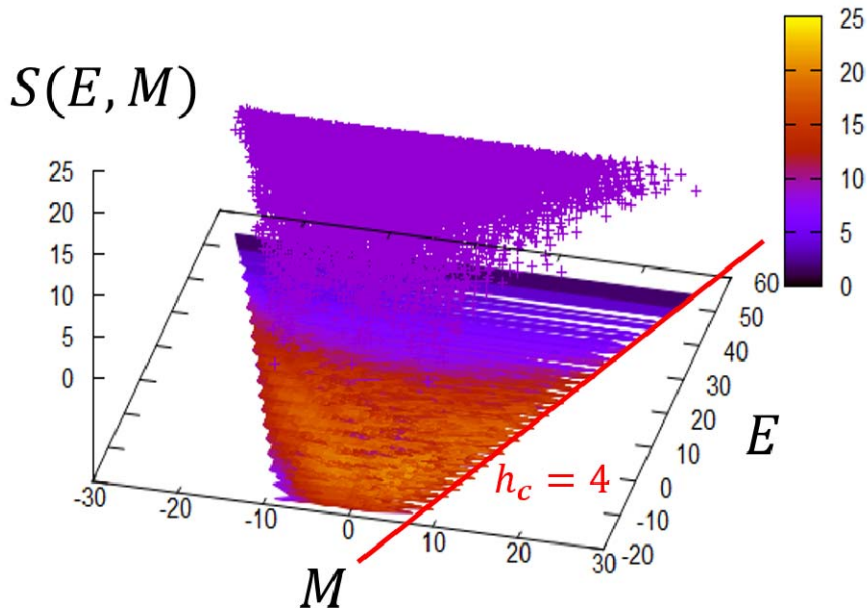


그림 39 카고메 격자 위의 에너지 그리고 자기화의 함수로서의 $L=6$ 에서 반강자성 블룸-카펠 모형의 소정준 엔트로피

2. 상전이 도표 및 임계 선 분석

카고메 격자에 대한 $L=12$ 에서 반강자성 이징모형과 $L=6$ 에서 반강자성 블룸-카펠 모형에 대한 자기화의 정준 분표는 그림 36과 그림 37에서 보인다. $T \sim 0$ 의 근방에서의 h 의 함수로서의 m 의 라인은 반강자성 블룸-카펠 모형에 대하여 불연속을 나타내지만 반강자성 이징모형에서는 보이지 않는다. 카고메 격자 위에서 에너지와 자기화의 함수로서의 그림 38은 $L=12$ 에서 반강자성 이징 모형 그리고 그림 39는 $L=6$ 에서 반강자성 블룸-카펠 모형의 소정준 엔트로피 $S(E, M)$ 을 보여준다. 그림 38과 그림 39에서, $M-E$ 다이어그램의 등고선 도표는 4개의 정점이 있고 맨 위의 왼쪽 정점은 모든 스핀이 다운인 상태에 해당한다. 맨 위의 오른쪽 정점의 위치는 다음과 같다. 반강자성 이징 모형에 대하여 $E=216$ 그리고 $M=108$ 이고, 반강자성 블룸-카펠 모형에 대하여 $E=54$ 그리고 $M=27$ 이다. 그림 38과 그림 39에서 $M-E$ 다이어그램의 등고선에서, 하단은 외부 자기장 h 이 없는 찢찢뿔 반강자성 기저 상태에 해당한다. 오른쪽 아래 정점의 위치는 반강자성 이징 모형에 대하여 $E=-72$ 그리고 $M=36$ 이고, 반강자성 블룸-카펠 모형에 대하여 $E=-18$ 그리고 $M=9$ 이다.

온도가 0일 때 E_t 가 극소가 되는 향이 우세하다는 것을 관찰할 수 있고 여기서 $E_t = E - hM$ 은 총 에너지이다. 총 에너지 E_t 은 $M-E$ 다이어그램에서 직선 $E = hM + E_t$ 인 E 축 상의 교차점으로 해석될 수 있다. 맨 위의 오른쪽 정점과 오른쪽 아래 정점을 연결하는 선의 기울기로부터 카고메 격자 위의 반강자성 이징 모형과 블룸-카펠 모형에 대한 임계 자기장 h_c 이 4임을 알 수 있다.

그림 40은 카고메 격자 위의 반강자성 이징 모형과 블룸-카펠 모형의 측정된 임계 선을 보여준다. 두 모형에 대한 임계 선의 패턴은 동일하지만, $T \sim 0$ 부근의 전이는 서로 다르다. 그림 40에서 보는 바와 같이 $T \sim 0$ 과 $h_c = 4$ 에서의 반강자성

블룸-카펠 모형의 임계 선은 1차 상전이를 나타내지만 $T \sim 0$ 과 $h_c = 4$ 에서의 반강자성 이징 모형은 2차 상전이를 나타낸다.

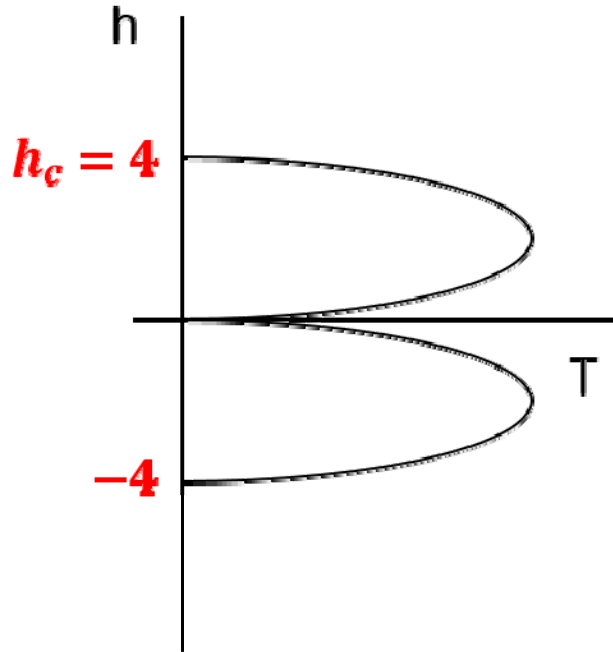


그림 40 카고메 격자에서 $L=12$ 에서 반강자성 이징 모형 그리고 $L=6$ 에서 반강자성 블룸-카펠 모형의 임계 선의 도표

제 5 장 결 론

본 연구에서는 몬테카를로 시뮬레이션을 이용하여 격자 위에서 스핀 모형의 상전이와 임계 현상을 주로 연구하였다. 캐노니컬 시뮬레이션 방법인 메트로폴리스 알고리즘을 이용하여 히스토그램을 수집한 후, 히스토그램 리웨이팅 방법을 이용하여 스핀 모형의 시뮬레이션을 수행하면서 컴퓨터 시뮬레이션 기법을 자세히 습득하였다. 저온에서 샘플링이 되지 않은 캐노니컬 시뮬레이션과 온도에 의존하지 않는 상태 밀도를 이용하여 시뮬레이션을 출력하는 왕-란다우 알고리즘을 비교하고 저온과 강한 외부장이 있는 경우에도 시뮬레이션이 완벽하게 수행되는 왕-란다우 알고리즘에서 좋은 결과를 얻었다. 또한, 왕-란다우 알고리즘을 이용하여 스핀 모형의 임계 현상을 사각 격자, 삼각 격자, 카코메 격자 등의 다양한 격자 구조에서 연구하였다.

몬테카를로 시뮬레이션이 이징 모형에서 많이 연구되고 있지만 복잡한 반강자성 블룸-카펠 모형에서 아직 연구가 되어 있지 않은 외부 자기장이 있을 때 임계 선에서 나타나는 상전이 현상을 왕-란다우 알고리즘과 소정준 분석을 이용하여 알아보았다. 격자 구조에 따른 이징 모형과 블룸-카펠 모형에서 $T=0$ 일 때의 상전이점의 임계 자기장을 구하기 위해서 소정준 엔트로피를 위에서 본 $M-E$ 다이어그램을 보면 에너지와 자기화에 대한 최댓값인 스핀이 모두 업이거나 다운일 때와 최솟값인 에너지가 낮은 스핀 상태의 정점 간의 기울기로부터 알 수 있다. 반강자성 블룸-카펠 모형의 임계 선의 유형은 알려진 반강자성 이징 모형의 상전이 다이어그램과 비교하여 각 격자 구조마다 같은 임계 선의 유형을 가지고 있다는 것을 유추한다. 사각 격자 위에서 강자성 블룸-카펠 모형일 때 일차 상전이와 이차 상전이가 만나서 삼중점이 생긴다고 알려져 있지만 알려져 있지 않은 반강자성 블룸-카펠 모형에서는 상전이 현상이 어떻게 되는지 유추해보았고 다른 격자 구조에서도 연구가 아직까지 안 되어있기 때문에 더 연구해야할 부분이다.

참고문헌

- [1] Aharoni A 2007 Introduction to the Theory of Ferromagnetism 2nd edition (Oxford: Clarendon Press)
- [2] Fert A 2008 Rev. Mod. Phys. 80 1517
- [3] Sheahen T 1994 Introduction to High-Temperature Superconductivity (New York: Plenum Press)
- [4] C. Domb 1996 The Critical Point: A Historical Introduction To The Modern Theory Of Critical Phenomena (Taylor and Francis, London)
- [5] L. Onsager 1944 Phys. Rev. 65 117-149
- [6] Blume M 1966 Phys. Rev. 141 517
- [7] Capel H W 1966 Physica 32 966
- [8] Kim S-Y and Kwak W 2014 J. Korean Phys. Soc. 65 436
- [9] D. P. Landau and K. Binder 2000 A Guide to Monte Carlo Methods in Statistical Physics (Cambridge: Cambridge U. Press)
- [10] D. P. Landau and R. Alben 1973 Am. J. Phys. 41 394-400
- [11] N. Metropolis, A.W. Rosenbluth, M.N. Rosenbluth, A.M.Teller, and E. Teller 1953 J. Chem. Phys. 21 1087
- [12] R.H. Swendsen and J.-S. Wang 1987 Phys. Rev. Lett. 58 86
- [13] U. Wolff 1989 Phys. Rev. Lett. 62 361
- [14] A. M. Ferrenberg and R. H. Swendsen 1988 Phys. Rev. Lett. 61 2635,

1989 63 1195

[15] F. Wang and D. P. Landau 2001 Phys. Rev. Lett. 86 2050-2053; 2001
Phys. Rev. E 64 056101

[16] Ising E 1925 Z. Phys. 31 253

[17] J.D. Noh, H. Rieger, M. Enderle, K. Knorr 2002 Phys. Rev. E 66
026111

[18] Henk W. J. Blote, M. Peter Nightingale 1993 Phys. Rev. B 47 15046

[19] V. Elser 1989 Phys. Rev. Lett. 62 2405

[20] I. Syozi 1972 Phase Transitions and Critical Phenomena edited by C.
Domb and M. S. Green (Academic Press, New York)

[21] A.M.Ferrenberg 1991 Computer Simulation Studies in Condensed Matter
Physics III edited by D. P. Landau, K.K. Mon and H.-B. Schttler
(Springer, Heidelberg)

[22] L.-H. Gwa 1990 Phys. Rev. B 41 7315

Publication

- 1) Wooseop Kwak, **Sojeong Park**, and Seung-Yoen Kim “Microcanonical entropy as a function of energies for the triangular-Lattice Blume-Capel magnetic system” 2016 IOP Conf. Ser.: Environ. Earth Sci. 40 012082
- 2) **Sojeong Park** and Wooseop Kwak “Phase Diagram of the Antiferromagnetic Blume-Capel Model on Triangular Lattice” 2016 J. Phys.: Conf. Ser. 738 012126
- 3) Wooseop Kwak, **Sojeong Park**, and Meesoon Ha “Generalized Conserved Lattice Gas on Random Networks” 2016 New Phys, 66 1210
- 4) Jin Min Kim, **Sojeong Park**, and Wooseop Kwak “Study of the RSOS Model on a Kagomé Lattice” 2018 New Phys, 68 548551