

ФИЗИКА КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ *)

Дж. Э. Хирш, Д. Дж. Скалапино

Экспериментаторы используют компьютеры для управления экспериментами, а также для накопления и обработки данных; теоретики применяют их для предсказаний результатов эксперимента, а также для исследования систем, которые не могут быть получены на практике.

ЭВМ играют важнейшую роль в решении как теоретических, так и практических задач физики конденсированного состояния. В лабораториях с их помощью управляют экспериментами, накапливают и обрабатывают данные; в теоретических исследованиях они позволяют предсказывать результаты экспериментов, основываясь на реалистических моделях, а также изучать системы, которые невозможно получить в лаборатории, например, четырехмерные системы, претерпевающие фазовые переходы, или вещества при экстремальных давлениях и температурах. Компьютеры помогают решать и сложные аналитические задачи. Очень часто ЭВМ осуществляют связь теории с экспериментом, позволяя экспериментатору проверить ту или иную теоретическую модель, а теоретика — предсказать результаты для вполне реалистических моделей.

Поскольку компьютеры дают в руки как теоретика, так и экспериментатору такие возможности, о которых они раньше и мечтать не могли, возрастает потребность в ясном понимании физики явлений для того, чтобы из всей

*) Hirsch J. E., Scalapino D. J. Condensed-matter Physics. — Phys. Today, 1983, v. 36, No. 5, pp. 44–50, 52. — Перевод С. Н. Рашкеева.

Джордж Хирш — ассистент профессора физики Калифорнийского университета (Сан-Диего), Дуглас Скалапино — профессор физики и ведущий исследователь Института теоретической физики Калифорнийского университета, Санта-Барбара, США.

массы информации, генерируемой ЭВМ, выделить только то существенное, что относится к делу. В этой сортировке поступающей информации могут помочь и сами компьютеры. Экспериментатор может различными способами проанализировать и представить свои данные, чтобы лучше прочувствовать проблему. Теоретик же может смоделировать те или иные системы и посмотреть, не проявляют ли они характерных особенностей реальных веществ. Он может также проверить пределы допустимости различных аналитических приближений. Порою для этой цели используются специальные процессоры (рис. 1).

Кроме того, ЭВМ продолжает рабочий день экспериментатора, снимая вместо него данные за определенный период времени. Изменяя управляющий

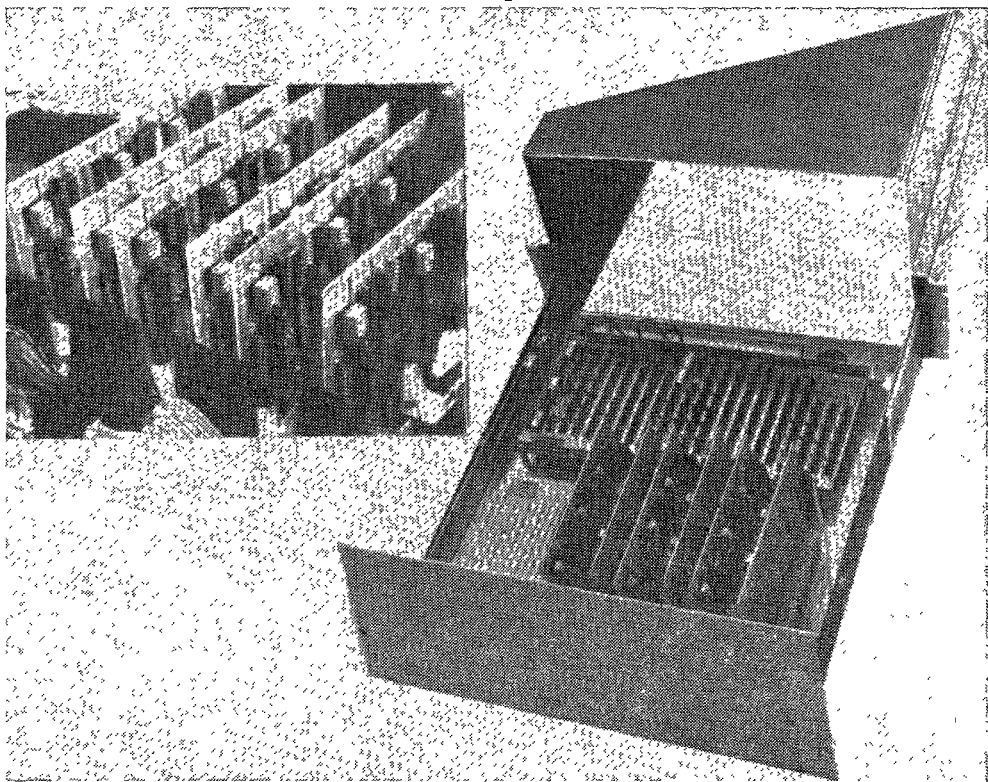


Рис. 1. Процессор модели Изинга, построенный в Санта-Барбаре (Калифорнийский университет), осуществляет имитацию трехмерной модели Изинга.

В памяти могут содержаться данные по решетке, состоящей из $(64)^3$ спинов, а специальный алгоритм, использующий метод Монте-Карло, последовательно поворачивает спины с учетом температуры системы и направлений спинов ближайших соседей.

модуль программы, контролирующей эксперимент, можно быстро переменить условия и режим работы установки, быстро проверить возникшую в процессе опыта идею. Теоретик может осуществить расчет моделей, имитирующих реальные системы, и сравнивать его результаты с экспериментом, а также исследовать системы, находящиеся при экстремальных плотностях, давлениях и температурах, например таких, которые нельзя получить в лаборатории. Возможно рассмотрение систем с нефизической размерностью и нефизическим значением константы взаимодействия с целью изучения их структуры и фазового состояния.

Ниже мы проиллюстрируем некоторые из возможных применений ЭВМ к задачам физики конденсированного состояния и обсудим будущие перспективы.

ЭКСПЕРИМЕНТ

Экспериментаторы, работающие в области физики конденсированного состояния, используют компьютеры во многих целях: для управления экспериментами, для сбора и обработки данных.

У п р а в л е н и е э к с п е р и м е н т о м

В настоящее время ЭВМ используются, например, для осуществления операций сложной хронометризации, установления углов и других подгонок, необходимых для приведения в действие накопительных колец синхротрона для получения ультрафиолетовых и рентгеновских лучей. Они управляют работой линейных ускорителей, используемых для создания импульсных нейтронных пучков в результате реакций расщепления. Они контролируют работу лазеров на свободных электронах. В экспериментах по дифракции рентгеновских лучей шаговые двигатели, управляемые ЭВМ, подготавливают положение трехосевых спектрометров под соответствующую конфигурацию рассеяния. Затем компьютер снимает данные и автоматически устанавливает двигатели в следующее положение запрограммированного угла рассеяния. Если некоторое время тому назад подобный контроль производился только на больших экспериментальных установках, то в последние 5 лет он стал распространяться на экспериментальные работы самого различного масштаба и степени сложности. Например, в одной из лабораторий за одну ночь при каждой из 50 заранее выбранных температур было произведено стократное измерение электросопротивления и термо-э.д.с. органического проводника. Одновременно с помощью спектрофотометра, управляемого ЭВМ, были произведены измерения относительных изменений оптических спектров полимеров, которые были заранее электрохимически легированы примесями в различной степени. Результаты записывались, выводились на диск и представлялись на терминале. Оба эксперимента выполнялись одним компьютером, но разными аналого-цифровыми преобразователями, которые были смонтированы в портативных стойках и могли перемещаться от одной экспериментальной системы к другой; в процессе опыта передвигалось лишь управляющее устройство и некоторые связующие звенья.

Поскольку с пульта управления экспериментатор может легко изменить условия эксперимента, стали возможны опыты, которые просто не могли бы быть удовлетворительно выполнены вручную, без контроля ЭВМ. Примером является изучение потока жидкости, в которой при некоторых числах Рейнольдса состояние системы не определено однозначно, а зависит от того каким конкретным способом данная скорость потока была достигнута. При компьютерном контроле системы можно заставить ее пройти последовательно по времени через состояния с заданными числами Рейнольдса, что позволит повторно воспроизвести то или иное конечное состояние.

С б о р д а н н ы х

Обширная память ЭВМ, которую можно использовать как накопитель и анализатор данных, позволила существенно изменить саму методику проведения измерений. Измерение, скажем, кинетических свойств при заданной температуре может иногда повторяться 100 или 1000 раз для получения хорошей статистики. В принципе можно провести вручную 100 измерений при каждой температуре, но немало труда потребует на то, чтобы убедить

экспериментатора поддержать этот проект. Вообще говоря, а priori ниоткуда не следует, что только за счет автоматизации эксперимента получится что-либо стоящее. Но если, к примеру, грубые измерения или теоретические предположения дают основание подозревать, что в некоторой определенной температурной области система претерпевает фазовый переход, экспериментатор может легко запрограммировать последовательное тщательное прохождение этой области, чтобы решить, что же там происходит на самом деле.

В инфракрасной фурье-спектроскопии интерферограммы, содержащие по $5 \cdot 10^5$ точек, снимаются за несколько секунд. Включая многократно источник между исследуемым образцом и детектором, получают разностный спектр, который позволяет устранить сдвиги источника и детектора. Для

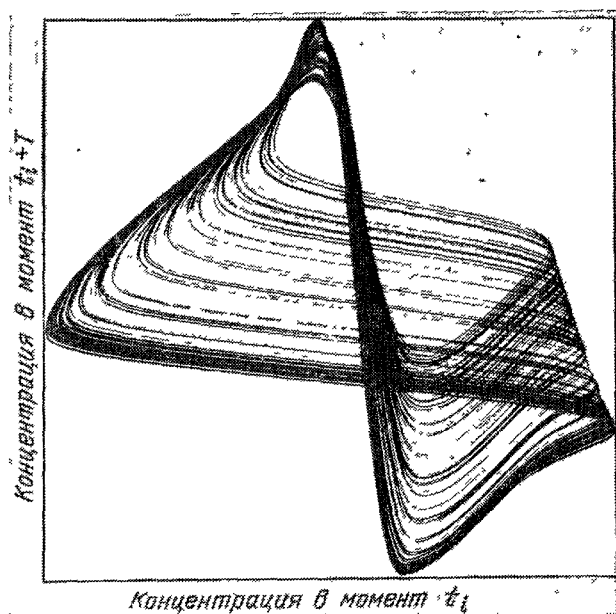


Рис. 2. Фазовый портрет концентраций ионов брома в реакции Белоусова — Жаботинского соответствует паре измерений, разделенных во времени интервалом $T = 53$ с. Он имеет вид «страничного аттрактора», изображенного здесь

этого строят сотни спектров, которые затем усредняют. Естественно, компьютер позволяет также хранить данные для калибровки выходных, переданного и отраженного сигналов.

Примером, когда компьютер позволяет элегантно представить данные, является исследование временных корреляций плотности ионов брома в процессе сложной химической реакции, именуемой реакцией Белоусова — Жаботинского¹ (рис. 2). Она происходит в движущемся сосуде, в который с одной стороны втекают реагирующие вещества, а с другой — вытекают продукты реакции и непрореагировавшие вещества с той же скоростью. Процесс может идти по-разному из-за нелинейности реакций соединения. Концентрации могут выходить на стационарный режим, могут регулярно осциллировать, а могут и хаотически меняться. В проведенном эксперименте компьютер записывал данные для 16384 временных точек и вычислял спектральную функцию концентрации ионов брома, а также строил фазовый портрет, изображенный на рис. 2, где по осям откладываются концентрации ионов брома в моменты t_i и $t_i + T$, где T — фиксированный положительный сдвиг во времени. Анализ фазового портрета показывает, что непериодические режимы поведения концентрации соответствуют динамическому хаосу, а не стохастическому шуму, возникающему из-за флуктуаций окружения. В настоящее время проводится работа с использованием 32000 временных

точек для определения того, насколько быстро расходятся точки, которые первоначально были соседними, и, таким образом, описания чувствительности характеристик хаотического режима к изменению начальных условий.

А н а л и з д а н н ы х

На примере вычисления спектральной функции и фазового портрета для реакции Белоусова — Жаботинского мы показали, как используется компьютер для анализа данных. Часто обработка выполняется той же самой ЭВМ, которая управляла экспериментом, при условии ее приспособленности для этого. Это очень полезно при определении дальнейшей тактики постановки экспериментов, а кроме того, это помогает выработать интуитивное понимание опыта. В других случаях данные посылаются на большую машину для обработки. Например, анализ данных в рентгеновской кристаллографии может включать в себя нелинейную обработку нескольких тысяч рефлексов методом наименьших квадратов с сотнями подгоночных параметров. В экспериментах по неупругому рассеянию нейтронов количественная интерпретация данных требует в общем случае проведения операции свертки пробных сечений рассеяния с известной функцией разрешения прибора для того, чтобы получить наблюдаемый динамический структурный фактор $S(q, \omega)$. Эта операция четырехмерного численного интегрирования требует относительно большого количества машинного времени. Именно поэтому при изучении неупругого рассеяния нейтронов требуется достаточно большой объем работы с ЭВМ.

Нелинейная процедура подгонки методом наименьших квадратов, упомянутая в связи с рентгеновской кристаллографией, может применяться во многих случаях, где требуется детальное сравнение данных с теорией и обнаружение каких-либо существенных расхождений. Такое сравнение является одним из примеров, когда помощь ЭВМ при анализе данных оказывается определяющей.

РАСЧЕТ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ

Важнейшее применение компьютеров — расчет электронной структуры реальных веществ. Обычно при таких вычислениях первоначально предполагается, что ядра локализованы в заданных положениях, после чего развивается эффективное одночастичное описание электронов. В последнее время большое внимание обращается на поиски самосогласованных решений, т. е. таких, в которых потенциал, используемый в эффективном одноэлектронном гамильтониане, согласуется с энергией основного состояния, которая вычисляется посредством диагонализации этого гамильтониана. Взаимодействие между электронами и ионами может рассматриваться различными способами. В одном подходе вычисляются собственные состояния как валентных, так и остовных электронов, в другом же — взаимодействие между валентными электронами и ионными остовами моделируется псевдопотенциалом, причем вычисляются только состояния валентных электронов (см. статью М. Коэна «Псевдопотенциальная панацея» в «Physics Today», July 1979, p. 40). Первоначально псевдопотенциалы строились путем подгонки их фурье-компонент под известные оптические и фотоэмиссионные данные, но недавно теоретики нашли способы извлекать псевдопотенциалы из микроскопических атомных вычислений. Эффекты электрон-электронного взаимодействия учитываются методом функционала электронной плотности. Хотя точное выражение для функционала плотности неизвестно, различные локальные приближения привели к великолепным результатам при расчетах многих свойств основного состояния.

М. Ин и М. Коэн² использовали *ab initio* псевдопотенциальный подход для вычисления энергии связи, постоянной решетки и упругих

модулей Si, Ge и C; сравнение их результатов с экспериментальными данными приведено в таблице. В этих расчетах первоначально задавались

Т а б л и ц а

Структурные свойства кристаллов

	Постоянная решетки, Å	Энергия связи, эВ	Объемный модуль, Мбар
Кремний: вычисленный	5,45	4,84	0,98
экспериментальный	5,43	4,63	0,99
Германий вычисленный	5,66	4,26	0,73
экспериментальный	5,65	3,85	0,77
Углерод: вычисленный	3,60	8,10	4,33
экспериментальный	3,57	7,35	4,43

только структура кристалла и атомный номер элемента; затем по этим данным вычислялись псевдопотенциалы. Аналогичные результаты были получены для большинства полупроводников III—V групп. Задаваясь определенным типом решетки, можно также изучить кристаллическую структуру как функцию объема (см. статью М. Шлютера и Л. Дж. Шама в «Physics Today», February 1982, p. 36).

Для кремния такие вычисления были проведены Ином и Коэном, которые нашли, что структура типа алмаза энергетически выгодна только при малом давлении (большом объеме, приходящемся на атом), в то время как структура типа белого олова имеет более низкую энергию, чем любая из шести других исследованных структур при высоком давлении (меньшем удельном объеме). Эти результаты хорошо согласуются с экспериментом. Некоторые группы теоретиков использовали этот же подход для вычисления фононного спектра и упругих констант высших порядков. Они сравнивали полные энергии искаженной и неискаженной кристаллических структур. Их расчеты также хорошо коррелируют с экспериментом. В своих многочисленных расчетах В. Морунци, Дж. Джанэк и А. Вильямс из «IBM Watson Laboratory» использовали локальное приближение для функционала плотности в сочетании со схемой расчета зонной структуры, именуемой методом Корринги — Кона — Ростокера для вычисления свойств основного состояния 50 чистых металлов. Ими были вычислены энергии связи, постоянные решетки в состоянии равновесия и объемный модуль упругости. Отклонение от эксперимента составляло не более 10%. Подобные расчеты магнитных свойств металлов из первых принципов, также проведенные данными авторами, показывают, что только Co, Ni и Fe могут обладать магнитным моментом в основном состоянии, что согласуется с опытом.

При вычислении объемных свойств кристаллических твердых тел используют условие периодичности решетки, сводя тем самым проблему к описанию поведения электрона в одной элементарной ячейке. Затем, используя набор подходящих базисных функций, таких как плоские волны, локализованные гауссовы орбитали или, как в некоторых случаях, совокупность найденных численно решений радиального уравнения Шрёдингера и плоских волн, строится матрица гамильтониана в одной элементарной ячейке. После этого гамильтониан диагонализуются, а из полученной в результате функции основного состояния можно определить плотность заряда. Решая уравнения Пуассона при известной плотности заряда, находят экранировку потенциала и добавляют ее к первоначальному потенциалу иона и обменно-корреляционному потенциалу в локальном функционале плотности. В результате

получается новый эффективный одноэлектронный потенциал. Описанная процедура итерируется до сходимости результата.

В расчетах для Si использовались 100 плоских волн в качестве базисных функций атома в одной элементарной ячейке. Таким образом, для решетки типа алмаза, содержащей два атома кремния в одной элементарной ячейке, вышеописанный метод приводит к необходимости построения и диагонализации матрицы с размерностью 200×200 . Гексагональная решетка алмаза с четырьмя атомами в ячейке приводит к рассмотрению еще большей матрицы. Вычисление плотности экранированного заряда проводилось в k -пространстве с помощью программы быстрого преобразования Фурье. При итерировании плотности заряда в основном состоянии и потенциала до их согласования друг с другом необходимо позаботиться также об обеспечении затухания нестабильностей в счете, возникающих из-за наличия дальнедействующих кулоновских сил. Например, для получения результатов, приведенных в таблице для Si, In и Coen использовали 5 итераций для достижения самосогласования; эти расчеты потребовали всего нескольких минут на ЭВМ CDC-7600. Вычисления же зонной структуры кремния потребовали значительно больше машинного времени — порядка трех часов.

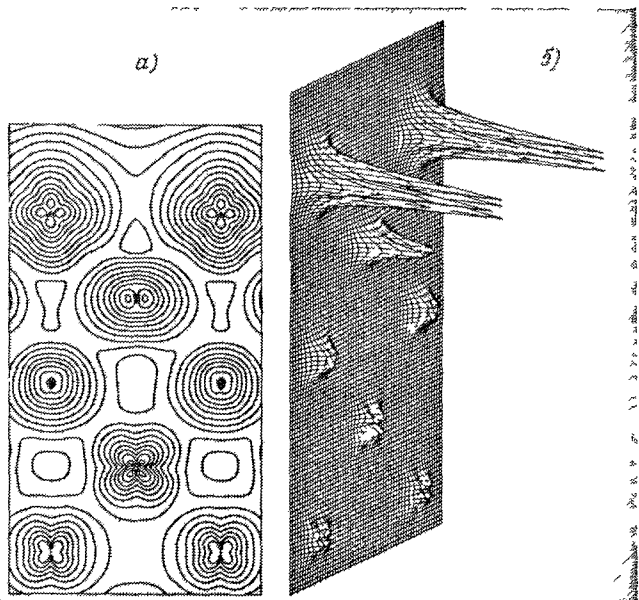


Рис. 3. Зарядовая плотность поверхностных состояний медной «плиты» из 9 слоев, ориентируемой в направлении (100) ⁴.

а) Линии равной плотности, соседние контуры соответствуют плотностям, различающимся в два раза, б) соответствующие амплитуды. Поверхность «плиты» пересекается с верхней кромкой рисунка. Рассматриваются только состояния с энергиями выше, чем $-6,5$ эВ.

В настоящее время большое внимание уделяется изучению свойств катализа, характеристик поверхностей d -металлов и границ раздела двух сред. Для вычисления химических свойств систем локализованных частиц теории использовали в качестве приближенных атомных функций линейные комбинации гауссовых орбиталей с соответствующими варьируемыми параметрами. Таким способом рассматривались состояния как валентных, так и остоных электронов, причем количество базисных функций, которое бралось для одного атома, совпадало с количеством электронов в атоме. Для того чтобы использовать упрощения, возникающие из-за наличия периодичности структуры, рассматривается большая «плита», состоящая из идентичных элементарных ячеек, поэтому размерность рассматриваемой гамильтоновой матрицы равна произведению числа атомов в ячейке на число базисных функций, приходящихся на один атом. Дж. Р. Смит, Дж. Дж. Гей и Ф. Дж. Арлингхаус из «General Motors» недавно опубликовали результаты ⁴, полученные ими для 9-слойной «плиты», состоящей из атомов меди, ориен-

тированной в направлении (100). Выполненные ими расчеты произведены в базе, содержащем несколько сотен линейно независимых функций, для достижения же самосогласования потребовалось примерно 60 итераций, что заняло около часа на ЭВМ IBM-3033 («разбавление» поверхностного слоя, которое возникает при каждой итерации, должно тщательно контролироваться для достижения самосогласования). Вычисление показало, что в поверхностном слое свыше трети электронов находятся в поверхностных состояниях и имеют в основном симметрию d-типа. На рис. 3 показано поверхностное распределение заряда для высоколежащих поверхностных состояний. Сравнение фотоэмиссионных спектров чистой (100)-Си-поверхности и поверхностей с монослоями N, O и S подтверждает наличие поверхностных состояний. Это сравнение может быть использовано для количественного определения геометрии атомной структуры поверхностей. Подобные рассуждения были проведены для многих других металлических и полупроводниковых поверхностей.

Дальнейшее уменьшение симметрии усложняет вычисления. Так, изучение индивидуальных абсорбированных молекул и атомов, а также различных объемных дефектов требует значительно больших вычислительных усилий (обычно раз в 10), чем проблема поверхности. Здесь потребуются новые, более быстродействующие машины, а также дальнейшее совершенствование алгоритмов расчета. Необходимо, конечно, добиваться большей ясности и в понимании физики явлений. Достижение такой ясности приводит к дальнейшему прогрессу науки, как уже неоднократно бывало в прошлом.

СТАТИСТИЧЕСКАЯ МЕХАНИКА

Можно с уверенностью сказать, что в статистико-механических расчетах наибольшее количество машинного времени было потрачено на численное моделирование систем такими методами, как метод молекулярной динамики или метод Монте-Карло.

При моделировании по методу молекулярной динамики временная эволюция системы прослеживается с помощью численного интегрирования классических уравнений движения, управляющих поведением частиц. Среднее по времени той или иной величины, характеризующей систему в состоянии равновесия, приблизительно полагается равным среднему от этой же величины по термодинамическому ансамблю. При расчете, скажем, жидкого аргона шаг по времени берется порядка 10^{-14} с, а интегрирование производится по нескольким тысячам таких шагов. В макроскопических масштабах такой период времени мал, но для вычисления термодинамических свойств и корреляционных функций он достаточно велик, поскольку за это время происходит много столкновений. Этот метод позволяет изучать как динамические свойства систем, так и неравновесное поведение.

Метод Монте-Карло используется в статистической механике для вычисления многомерных интегралов, возникающих при вычислении средних по ансамблю. Конечно, прямое численное интегрирование по всем конфигурациям не представляется возможным. Однако для получения приличной численной оценки достаточно суммировать по ограниченному числу конфигураций, при условии, что их распределение является таким же, как и распределение ансамбля в целом. Этот подход, известный как метод значимой выборки *), делает возможным применение метода Монте-Карло для моделирования многочастичных систем. Впервые алгоритм для такого рода вычислений был предложен Н. Метрополисом, А. Розенблютом, М. Розенблютом, А. Х. Теллером и Э. Теллером⁵. В их расчетах генерировалась последова-

*) Importance sampling approach — метод значимой выборки — метод Монте-Карло, упрощенный путем разумного использования предварительной информации о возможном результате. (Прим. перев.)

тельность конфигураций, распределение которых постепенно приближалось к распределению равновесного ансамбля следующим образом. Из данной конфигурации строилась новая случайным образом за счет изменения одной или нескольких степеней свободы и оценивалась разность энергий ΔE конфигураций. Из этих двух конфигураций предпочтение отдавалось новой, если величина $e^{-\Delta E/kT}$ оказывалась больше, чем случайно выбранное число r , равномерно распределенное между нулем и единицей.

Важность численного моделирования в статистической механике определяется тем, что оно дает способ решения модельных задач без использования теории возмущений. В применении к сложным системам моделирование может перебросить полезный мост между аналитическими теориями и экспериментом на реальных системах. При сравнении результатов теории и эксперимента часто бывает трудно определить, связано ли их расхождение с используемыми в теории приближениями, или оно обусловлено первоначальной неадекватностью изучаемого модельного гамильтониана. Моделирование как раз и дает возможность проверить, содержит ли та или иная конкретная модель существенные качественные особенности реальной системы. Более того, сравнивая результаты численного моделирования и эксперимента, можно проверить справедливость различных приближений, сделанных в теории. Конечно, методы численного моделирования ограничены — в первую очередь, возможностью рассматривать лишь системы с довольно малым числом степеней свободы. Из-за ограниченности как объема памяти ЭВМ, так и допустимого машинного времени, это число обычно не превышает 10^3 — 10^6 , что, разумеется, весьма далеко от размеров реальных термодинамических систем. Это ограничение может служить серьезным препятствием при моделировании систем, претерпевающих фазовые переходы. [Но, к счастью, развиты различные усложненные процедуры, позволяющие экстраполировать результаты, получаемые для конечных систем, на бесконечные. Вторым ограничением служит медленная сходимость результатов в системах, которые имеют долгоживущие метастабильные состояния. Однако, несмотря на эти ограничения, методы численного моделирования на быстродействующих компьютерах имеют очень большое значение для углубления нашего понимания физических явлений в классических проблемах статистической механики.

Существует обширная литература ⁷ по применению методов молекулярной динамики и Монте-Карло в классической статистической механике. Мы выбрали лишь некоторые примеры для иллюстрации положений, упомянутых выше. Одним из примеров, когда метод молекулярной динамики, не требующий применения теории возмущений, предоставляет существенную информацию для развития теоретических концепций, может служить изучение классической жидкости. Здесь рассмотрение простой модели типа «твердых сфер» или «бильiardных шаров» сделало очевидной тесную аналогию между этой моделью и жидкостью Леннарда — Джонса (рис. 4). Это, в свою очередь, приводит к развитию успешных количественных теорий, в которых силы притяжения между молекулами рассматриваются как возмущение в модели «твердых сфер» ⁶. До этого численного рассмотрения не было ни одной удовлетворительной опорной точки для развития теории возмущений в жидкости, поскольку такие упрощения, как низкая плотность в случае газов или регулярная периодическая структура твердых тел, отсутствуют в этом случае.

В сложных системах моделирование позволяет установить контакт между теоретическими моделями и экспериментальными измерениями. На рис. 5 показаны результаты вычисления температуры магнитного упорядочения в $\text{Eu}_x\text{Sr}_{1-x}\text{S}$ методом Монте-Карло ⁸. Для моделирования этой системы К. Биндер и его коллеги рассмотрели классическую гейзенберговскую модель спинов, в которой пары ближайших соседей были связаны ферромагнитными обменными силами. Соседи же, следующие за ближайшими, взаимо-

действовали антиферромагнитным образом, причем константа этого обмена была равна половине константы ферромагнитного взаимодействия ближайших соседей. Немагнитные атомы Sr были представлены пустыми местами. Основной вопрос заключался в том, может ли эта модель объяснить исчезновение ферромагнитного упорядочения при концентрации x европия, меньшей 0,5, поскольку протекание по ферромагнитным связям начинается с $x \sim 0,2$. Результаты моделирования показывают, что модель в самом деле дает наблюдаемую границу ферромагнитной фазы, которую нельзя вычислить никаким приемлемым аналитическим методом.

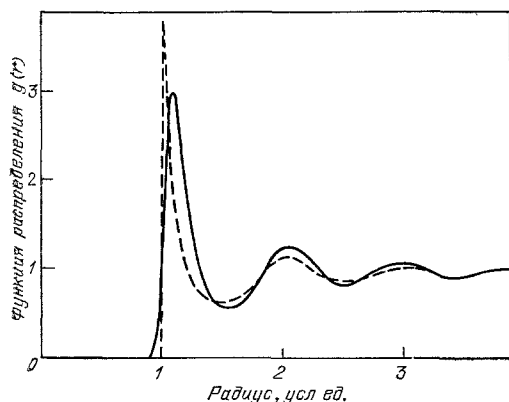


Рис. 4. Радиальная функция распределения $g(r)$ в модели твердых сфер (штриховая линия) в сравнении с функцией теории жидкости Леннарда - Джонса (сплошная линия).

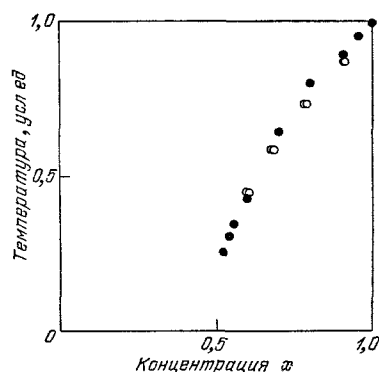


Рис. 5. Температура магнитного упорядочения как функция относительной концентрации x европия в $\text{Eu}_x\text{Sr}_{1-x}\text{S}$.

Изображены теоретические (светлые кружки) и экспериментальные значения T_c . Вычисления по методу Монте-Карло показывают, что модель Гейзенберга может объяснить исчезновение магнитного упорядочения при всех температурах для $x \lesssim 0,5$ (см⁸).

Как отмечалось выше, при расчете критического поведения вблизи точки фазового перехода приходится все же ограничиваться конечной решеткой. Одним из полезных подходов при этом является масштабное преобразование конечных размеров, которое заключается в следующем: из моделирования решеток различных размеров определяются критические экспоненты по зависимости различных величин от размера системы. Другим мощным подходом является ренормгрупповой метод Монте-Карло, недавно развитый Р. Сведенсеном⁷. Он группировал степени свободы конечной системы в блоки и вычислял по методу Монте-Карло корреляции между эффективными степенями свободы, представляющими каждый блок. Сравнивая эти корреляции с корреляциями «голых» степеней свободы, можно получить аккуратные результаты для критических экспонент бесконечной системы. Эта работа показывает, как сочетание теоретических и численных методов приводит к появлению новых мощных средств исследования.

В настоящее время в Эдинбурге проводится детальное изучение трехмерной модели Изинга ренормгрупповым методом Монте-Карло с использованием распределенного матричного процессора DAP^{*}), состоящего из 2¹² микропроцессоров.

^{*}) Agtau processor (матричный процессор) — процессор, содержащий набор одинаковых однородных устройств, выполняющих одновременно одну и ту же последовательность действий над различными операндами. DAP — distributed array processor — процессор, в котором отдельные функции обработки выполняются независимыми устройствами. (Прим. перев.)

Помимо численного моделирования, в статистической механике есть много иных областей, в которых применение компьютеров играет существенную роль. Один из примеров, в котором прямое вычисление и полученные численные графики должны играть очень важную роль, — различные приложения методов перенормировок в реальном пространстве к проблеме абсорбированных монослоев. Большое количество прекрасных работ¹⁰ было выполнено с целью вычисления фазовых свойств для реалистических моделей таких монослоев. Другая интересная современная область — поведение математических отображений $x \rightarrow x'$, где x — дискретно, а отображение нелинейно. Эти отображения проявляют богатейшее множество таких свойств, как бифуркации и хаотическое поведение, во многом описывая физику переходов из упорядоченного в хаотическое состояние реальных систем (см. статью Дж. Форда в «Physics Today», April, 1983, p. 40).

Продельвая многократно такие отображения на компьютере, можно получить качественное и количественное представление об этих свойствах как важное дополнение к теоретическому анализу.

КВАНТОВЫЕ СИСТЕМЫ МНОГИХ ЧАСТИЦ

Существует несколько путей использования компьютера в качестве эффективного инструмента теоретического изучения квантовых систем многих частиц. Один подход состоит в точной численной диагонализации гамильтониана системы с несколькими степенями свободы. Изучая малые системы различного размера и используя метод масштабного преобразования для конечных систем, можно попробовать экстраполировать результаты в пределе бесконечного объема. Например, численные результаты, полученные Дж. Боннер и М. Фишером¹² для конечных цепочек Гейзенберга — Изинга, часто используются для интерпретации экспериментальных результатов при изучении магнитных свойств квазиодномерных структур. В самом деле, цепочка из 16 спинов $1/2$ может быть легко диагонализирована на современных компьютерах. Однако из-за экспоненциального возрастания машинного времени, необходимого для такой диагонализации с ростом числа степеней свободы, в этом подходе приходится ограничиться системами, состоящими из малого количества частиц и с малым числом степеней свободы на каждую из них.

Второй очень плодотворный подход заключается в численной реализации идей группы перенормировок, т. е. в последовательном включении степеней свободы в диагонализацию гамильтониана и отбрасывании несущественных состояний на каждом шаге, что позволяет удерживать размер производимых вычислений в разумных пределах. Расчет К. Вильсоном¹³ проблемы Кондо, в котором этот метод применялся впервые, включал 1000 базисных состояний. Для модели Кондо, которая описывает поведение магнитной примеси в немагнитном металле, в течение многих лет не существовало точного решения. Решение же Вильсона, хотя и приближенное, было очень точным, что и было подтверждено прекрасным согласием между ним и точным решением проблемы, найденным недавно *) Н. Андреем и Дж. Ловенстейном¹⁴. После этого метод Вильсона был использован для изучения более общей модели примеси в металле — модели Андерсона — и для изучения неупорядоченных магнитных и электронных систем.

Наконец, для изучения взаимодействующих квантовых систем многих тел были использованы различные стохастические методы. В методе, предложенном В. Мак-Милланом¹⁵ в 1965 г., использовалась пробная волновая функция простого вида (обычно она содержала только двухчастичные корреляции) для получения вариационной оценки энергии основного состояния, многомерные же интегралы, возникающие при этом, оценивались по методу

*) Впервые проблема Кондо была точно решена П. Б. Вигманом (Письма ЖЭТФ, 1980, т. 31, с. 392) и Н. Андреем (Phys. Rev. Lett., 1980, v. 45, p. 379). (Прим. перев.)

Монте-Карло. Позднее Р. М. Панофф и его коллеги из Вашингтонского, Нью-Йорского и Корнеллского университетов ¹⁵, используя этот метод, предсказали, что упорядоченный по спинам дейтерий образует самосвязанную жидкость при нулевых температуре и давлении.

Предпринимались попытки численного интегрирования уравнения Шрёдингера с помощью более усовершенствованных методов Монте-Карло.

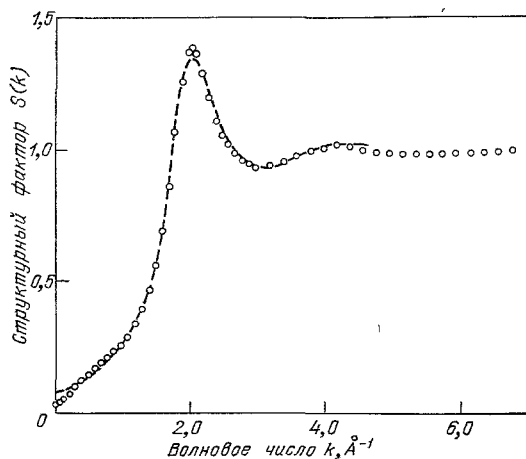


Рис. 6. Структурный фактор $S(k)$ жидкого He^4 ¹⁶.

Сплошная кривая — результат моделирования по методу Монте-Карло системы 64 атомов He^4 при равновесной плотности. Кругами показаны сглаженные значения $S(k)$, измеренные в опытах по нейтронной дифракции при 1 К и давлении насыщенных паров. Эксперимент выполнен В. Ф. Сирсом, Е. К. Свенсоном, А. Д. Б. Вудсом и П. Мартемом из «Atomic Energy of Canada, Ltd», (отчет No. AECL-6779).

М. Калош ¹⁶ применил процедуру, в которой многократная свертка начального состояния и гриновской функции приводит в результате к волновой функции основного состояния и его энергии. Вычисления выполнялись

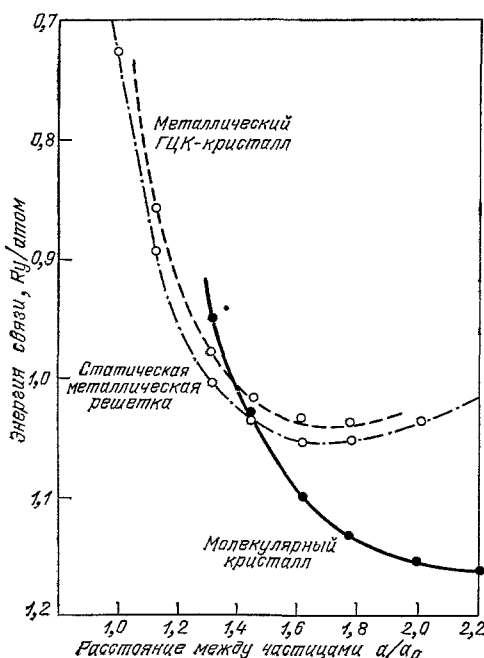


Рис. 7. Энергия основного состояния атомов водорода в зависимости от расстояния между частицами a , измеренного в боровских радиусах a_0 ¹⁷.

Черные кружки — результат моделирования методом Монте-Карло с фиксированной узловой поверхностью молекулярного кристалла; кривая согласуется с экспериментом при давлениях $p < 500$ кбар ($a/a_0 > 1.75$). Штриховая и штрих-пунктирная кривые — результаты вычислений для атомарного ГЦК-кристалла, а сплошная — расчет для статической атомарной решетки. Из рисунка видно, что переход от металла к молекулярному кристаллу происходит при плотностях, соответствующих значению $a/a_0 \sim 1.35$.

методом алгоритма случайной выборки (random-sample algorithm) с приемлемой вариационной волновой функцией. Существенно то, что в методе делается стохастическая оценка отклонения точного решения от пробной функции. Калош и его коллеги применили этот метод ¹⁶ для расчета системы из 64 ато-

мов He^4 , взаимодействующих посредством реалистического потенциала. Их результаты для жидкого структурного фактора такой жидкости сравниваются с данными по рассеянию нейтронов на рис. 6. Соответствующие расчеты уравнения состояния как для твердого, так и для жидкого He^4 дают великолепное согласие с экспериментальными данными.

Применение этого метода к системе фермионов осложняется из-за того, что техника проектирования имеет тенденцию «столкнуть» систему в основное бозе-состояние. Можно обойти эту трудность, зафиксировав узловую поверхность многочастичной волновой функции так, чтобы она совпадала с узловой поверхностью пробной функции. Используя это «приближение фиксированных узлов» (fixed-node approximation), Д. Цеперли и Б. Алдер¹⁷ вычислили уравнение состояния водорода, показанное на рис. 7. Исходным пунктом рассмотрения была система электронов и протонов, которые взаимодействовали по кулоновскому закону. Обобщение этой схемы на случаи, когда нет фиксации узловой поверхности, дает различные «мгновенные» оценки свойств фермионной системы. Например, вычисление этим методом энергии связи, приходящейся на атом в жидком гелии-3, приводит к 2,2 К, экспериментальное же значение есть 2,5 К¹⁸.

В последнее время теоретики, работающие в областях физики высоких энергий и физики конденсированного состояния, используют различные методы интегрирования по путям. При этом d -мерные квантово-механические задачи на решетке преобразуются в $(d + 1)$ -мерные классические проблемы. Эти формулировки методов можно непосредственно использовать и при конечных температурах. Для одномерного случая нами развит способ, позволяющий моделировать системы с фермионными и бозонными полями с помощью рассмотрения мировых линий фермионов¹⁹. Получающийся при этом алгоритм Монте-Карло работает с той же быстротой, как соответствующий алгоритм в двумерной классической системе.

Для случая более чем одного измерения все формулировки интегралов по путям для фермионных систем содержат операцию «взятие следа» по конфигурациям быстропеременных величин. Это приводит к сокращению слагаемых и делает прямое вычисление следа по методу Монте-Карло невозможным. Чтобы обойти эту проблему, теоретики предложили различные способы аналитического интегрирования по фермионным степеням свободы. Все эти методы потребляют намного больше времени, чем соответствующие вычисления Монте-Карло для классических систем, поскольку на каждом этапе процедуры необходимо вычислять детерминант большой матрицы или обрабатывать ее. Ю. Кути²⁰ недавно предложил многообещающий подход к этой проблеме, основанный на применении алгоритма случайных блужданий для обращения матриц стохастическим методом.

Активные исследования в области квантованных полей иллюстрируют тот факт, что методы численного моделирования скорее, чем какой-либо набор общих правил, помогают решать все большие и большие проблемы по мере развития вычислительной техники; эти методы постоянно совершенствуются и развиваются.

Мы заканчиваем этот раздел обсуждением недавней работы по квазиодномерным квантовым системам, относящейся к изучению различных квазиодномерных материалов, таких как органические проводящие соли или сопряженные полимерные цепи. Недавно мы исследовали неустойчивости одномерного электронного газа как функцию кулоновского взаимодействия и заполнения зоны²¹. На рис. 8 показана поляризуемость, зависящая от волнового вектора, в заполненной на четверть «модели Хаббарда», в которой электроны, находящиеся на одном узле, отталкиваются. Эти расчеты были проделаны на цепочках из 20 узлов, и типичный расчет, содержащий 30 000 шагов по времени, занимает около часа на VAX II-780. В случае невзаимодействующих электронов поляризуемость имеет пик на удвоенном импульсе Ферми, p_F . В квазиодномерных веществах это может привести к пайерлсов-

ской неустойчивости, когда решетка испытывает искажение с периодичностью удвоенного фермиевского волнового вектора $2p_F$ при температуре ниже критической. Как показывает рис. 8, при включении кулоновских сил отталкивания неустойчивость на $2p_F$ подавляется, а появляется неустойчивость с периодом $4p_F$. Последовательное изучение этих неустойчивостей как функции величины взаимодействия, температуры и заполнения зоны дает информацию об основных типах взаимодействий в квазиодномерных соединениях с переносом заряда. Эти вещества обнаруживают диффузионные пики при

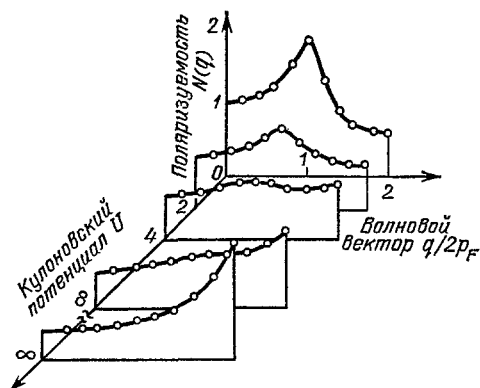


Рис. 8. Электронная поляризуемость одномерной цепочки из 20 узлов (модель Хаббарда с заполнением на одну четверть)²¹. Графики изображают поляризуемость в зависимости от волнового вектора q , измеряемого в единицах фермиевского импульса p_F , при различных значениях кулоновского взаимодействия u , измеряемого в единицах величины $u = 4$, соответствующей равенству взаимодействия ширине зоны. Температура T равна 0,034 в ед. ширины зоны.

рассеянии рентгеновских лучей на волновых векторах $2p_F$ и $4p_F$. Соответствующее изучение²² устойчивости основного состояния системы, претерпевшей переход Пайерлса, относительно квантовых флуктуаций фононного поля показало, что в системе с зоной, заполненной на четверть, и с сильным отталкивательным взаимодействием на узлах, квантовые флуктуации приводят к металлическому основному состоянию. Это противоречит результатам теории среднего поля, которая предсказывает, что основное состояние должно быть полупроводниковым и претерпевшим переход Пайерлса.

Существуют и другие стохастические методы, применявшиеся для изучения квантовых систем многих тел. Некоторые из них находятся сейчас на стадии разработки. С увеличением мощности имеющихся компьютеров многие из проблем, неразрешимых ранее, будут детально исследованы в недалеком будущем.

ПЕРСПЕКТИВЫ

Мы попытались проиллюстрировать в этой статье, каким образом произошло глубокое и широкое внедрение вычислительной техники в физику конденсированного состояния по мере того, как отдельные экспериментаторы и теоретики нашли способы эффективного использования ЭВМ для нахождения решений различных задач и более полного проникновения в сущность физических проблем.

Заглядывая в ближайшее будущее, полезно понять, что же нужно современным физикам, занимающимся вопросами конденсированного состояния. Из разговоров с нашими коллегами нам стало ясно, что многие экспериментаторы стали работать на имеющихся уже ЭВМ с целью облегчения своего труда. Только один из опрошенных нами экспериментаторов заявил, что необходимы несравненно более мощные компьютеры. (Он строил численную модель спинодального распада на фазы, чтобы сравнить ее со своими данными по рассеянию света.) Даже люди, занимающиеся рентгеновской кристаллографией, считают имеющуюся вычислительную технику вполне адекватной своим требованиям. Естественно, положение дел может измениться, когда новые синхротронные источники дадут лучшее временное разрешение

на менее симметричных структурах, таких, как те, которые используются в поверхностном катализе, или биологические материалы.

Экспериментаторы отмечали, что их работа стала оперативнее из-за увеличения точности и быстродействия работы электронных устройств, которые используются ими для связи между экспериментальными установками и компьютерами, таких, как аналого-цифровые преобразователи. Например, 12-разрядный аналого-цифровой преобразователь обеспечивает точность измерений $1/4096$, а на 16-разрядном преобразователе можно достичь точности $1/65\,000$. Экспериментаторы вовсе не возражали бы против дальнейшей стандартизации, такой, как требования стандарта IEEE *), поскольку это привело бы к совместимости между собой через компьютеры аппаратуры, производимой различными фирмами. Они хотели бы также, чтобы все системы имели общий язык или воспринимали бы программы, написанные для других систем. Как и теоретики, они хотели бы иметь возможность пользоваться ЭВМ среднего класса, настольными или размещенными в небольшой стойке, которые не требуют воздушного охлаждения и специального обслуживающего оператора. Они также заинтересованы в улучшении графопостроителей и печатающих устройств.

В связи с быстрыми изменениями технологии производства вычислительной техники встает вопрос о реальной необходимости в увеличении затрат на модернизацию лабораторного оборудования. Теоретики (некоторые впервые) также испытывают растущую потребность в выделении капитальных фондов на оборудование. Пять лет назад большинство из них использовало средства, выделяемые на вычислительные нужды, на приобретение машинного времени у крупных вычислительных центров с целью работы на больших машинах чаще, чем на приобретение собственной техники. Хотя для некоторых из них приобретение машинного времени остается наиболее удобным способом удовлетворения вычислительных нужд, в последние годы стали популярными ЭВМ меньших размеров, предназначенные на нескольких пользователей. Группы теоретиков порой объединяются для совместного приобретения собственных ЭВМ среднего класса и матричных процессоров. Для определенного числа задач простой доступ к машине и получение быстрых ответов от нее создает надлежащие условия для решений проблемы. Некоторые физики используют собственные ЭВМ, которые для задач среднего размера допускают режим непосредственного общения, но с которых при необходимости можно отправить более объемную задачу на обработку ЭВМ среднего класса или большой машины. Теоретики тоже заинтересованы в улучшении графопостроителей и печатающих устройств. Однако основным желанием большинства из них продолжает оставаться увеличение быстродействия и объема памяти.

Существует много путей увеличения быстродействия ЭВМ. Один из них состоит в продолжающейся миниатюризации элементов, что приводит к увеличению их скоростей переключения (gate switching speed). Это приведет к повышению быстродействия от сотен миллионов операций над действительными числами в секунду (100 мегафлоп **), соответствующего самым современным машинам, до гигафлопных ЭВМ недалекого будущего, таких, как «Cray-2». Но при существующей политической обстановке может случиться, что физики не скоро получат доступ к этим суперкомпьютерам.

Дальнейшим следствием миниатюризации будет снижение стоимости ЭВМ при повышении их действенности. Более того, мы надеемся, что требования, предъявленные к размеру мини-ЭВМ и их воздушному охлаждению, будут выполнены настолько, что настольные мегафлоповые компьютеры скоро появятся в индивидуальных лабораториях и учреждениях. Некоторые

*) Имеется в виду стандарт на сопряжение с периферийными устройствами. (Прим. перев.)

**) От англ. «floating point operations». (Прим. перев.)

матричные процессоры, соединенные с ЭВМ среднего класса, могут создать быстроедействие в десятки и даже сотни мегафлоп. Более того, такое устройство может при необходимости работать над решением одной задачи целую неделю.

Наконец, возможно также повысить скорость счета при рассмотрении конкретной теоретической проблемы с помощью предназначенных специально для этой цели аппаратно-реализованных процессоров. Такое экспериментальное оборудование, предназначенное для специальной цели (например, коррелятор Мальверна, вычисляющий автокорреляционную функцию входного сигнала), уже довольно широко применяется. Одним из таких устройств является процессор, построенный 5 лет назад фирмой «CNI-Systems» для группы UCLA, занимающейся плазмой. Здесь модифицированный матричный процессор, соединенный с многоходовой памятью, следит за движениями 10^6 частиц, изменяющих свое положение и скорость под воздействием собственных полей и внешнего поля. Скорость работы процессора в такой задаче равна примерно быстроедействию ЭВМ CDC-7600, а стоимость — ниже. Совсем недавно был построен процессор в Дельфте для изучения ансамбля короткодействующих частиц методами молекулярной динамики. Он оказался столь же эффективным для этой цели, как «Cray-1». В Санта-Барбаре построили процессор, осуществляющий моделирование трехмерной модели Изинга методом Монте-Карло²³. Освоенная к настоящему времени память процессора вмещает в себя данные по решетке из 64×64 узлов, вводится дополнительная память для перехода к решетке $(128)^3$. Построение процессора, изображенного на рис. 1, обходится примерно в 20 000 долларов, что включает в себя и приобретение необходимых элементов, и затраты труда. В процессоре 3-мерная решетка спиновых переменных вводится в память как одномерный регистр сдвига; изменение направления в какой-либо точке за один временной шаг вычисляется по известным положениям спинов шести ближайших соседей и известной температуре с помощью алгоритма «тепловой ванны» («heat-bath» algorithm). После определенного временного цикла регистр смещается на один узел, и процесс вычисления повторяется на следующем узле. Процессор является процессором поточной обработки *) и скорость одного временного цикла (~ 40 мс) определяется временем обращения к маленькой табличке в памяти системы, содержащей сведения об одном узле и его ближайших соседях. За одну секунду происходит измерение направлений $25 \cdot 10^6$ спинов.

Для сравнения: хорошо запрограммированная на ФОРТРАНе программа за секунду меняет направление немногим более 10^6 спинов на ЭВМ CDC-7600, а на «Край-1» — приблизительно $2 \cdot 10^6$ спинов. Процессор трехмерной модели Изинга за 24 часа способен произвести вычисления, которые заняли бы несколько лет на ЭВМ VAX 11-780. Он уже работал в течение четырех месяцев, собирая данные, необходимые для вычисления T_c и критических экспонент. Было найдено значение $T_c = 0,22166 \pm 0,00001$, которое находится в хорошем согласии с результатами высокотемпературных разложений. Анализ данных по масштабному преобразованию свободной энергии дает критические индексы, находящиеся в согласии с полученными с помощью гиперскейлинга, который является простейшим способом, позволяющим изменять масштаб свободной энергии с изменением температуры.

Естественно, в будущем ожидается значительное совершенствование алгоритмов. Необходимо делать их более оптимальными, не довольствуясь одним только продолжающимся улучшением компьютеров. В настоящее время эта проблема представляет собой относительно неисследованную область,

*) Pipeline processor — процессор поточной обработки — вид процессорного устройства, в котором одновременно на различных этапах обработки выполняется несколько команд в режиме поточной обработки и таким образом обеспечивается достижение высокой производительности. (Прим. перев.)

в которой, по-видимому, могут произойти важные сдвиги вперед в будущем. Кроме того, вычислительная математика, как и любая другая область математики, легко преодолевает границы между различными отраслями физики. Так, например, интересы физики высоких энергий и физики конденсированного состояния совпадают, если речь идет о развитии алгоритмов Монте-Карло, Ланжевена и стохастического обращения больших матриц. Сочетание теоретических идей и численных методов, уже приведшее к прогрессу в области вычисления электронной структуры, в ренормгрупповых вычислениях методом Монте-Карло и в методе использования вариационной информации в монте-карловских расчетах, в будущем сулит дальнейшие обширные перспективы.

В настоящее время изменился сам стиль работы в области физики конденсированного состояния, и это изменение будет продолжаться дальше по мере развития компьютеров и нашего умения использовать их.

Мы хотели бы поблагодарить наших коллег из Научных центров Санта-Барбара и Сан-Диего Калифорнийского университета, из Института теоретической физики и всех, кто поделился с нами своими мыслями относительно возможностей применения ЭВМ в физике конденсированного состояния и предоставил нам некоторые из материалов, опубликованных здесь. Мы хотели бы также выразить благодарность Национальному научному фонду за поддержку (контракты DMR 82-17881 и DMR 80-01492).

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. Simoyi R. H., Wolf A., Swinney H. L.— Phys. Rev. Lett., 1982, v. 49, p. 245.
2. Yin M. T., Cohen M. L.— Phys. Rev. Ser. B, 1982, v. 26, p. 5668.
3. Moruzzi V. L., Janak J. F., Williams A. L. Calculated Electronic Properties of Metals.— N.Y.: Pergamon, 1978.
4. Smith J. R., Gay J. G., Arlinghaus F. J.— Phys. Rev. Ser. B, 1980, v. 21, p. 2201.
5. Metropolis N., Rosenbluth A., Rosenbluth M., Teller A. H., Teller F.— J. Chem. Phys., 1953, v. 21, p. 1087.
6. Barker J. A., Henderson J.— Rev. Mod. Phys., 1976, v. 48, p. 588.
7. Monte Carlo Methods in Statistical Physics/ Ed. K. Binder.— Berlin: Springer-Verlag, 1979.
8. Binder K., Kinzel W., Stauffer D.— Zs. Phys. Ser. B, 1979, Bd. 36, S. 161.— Экспериментальные данные по: Malta H., Felsch W.— Phys. Rev. Ser. B, 1979, v. 10, p. 1245.
9. Swendsen R.— Phys. Rev. Lett., 1979, v. 42, p. 859.
10. Berker A. N., Ostlund S., Putnam F. A.— Phys. Rev. Ser. B, 1978, v. 17, p. 3650.
11. Proc. of Conference on Nonlinear Dynamics. December 1980/ Ed. R. H. G. Helleman.— Ann. N.Y., Acad. Sci., 1982, v. 357.
12. Bonner J. C., Fisher M. E.— Phys. Rev. Ser. A, 1964, v. 135, p. 610.
13. Wilson K. G.— Rev. Mod. Phys., 1975, v. 47, p. 773.
14. Andrei N., Lowenstein J.— Phys. Rev. Lett., 1981, v. 46, p. 356.
15. McMillan W.— Phys. Rev. Ser. A, 1965, v. 138, p. 442.
16. Panoff R. M., Clark J. W., Let M. A., Schmidt K. E., Kalos M. H., Ghester G. V.— Phys. Rev. Lett., 1982, v. 48, p. 1675.
17. Kalos M.— Phys. Rev., 1962, v. 128, p. 1791; Ibid. Ser. A, 1970, v. 2, p. 250.
18. Kalos M., Lee P., Whitlock, Chester G.— Ibid., Ser. B, 1981, v. 24, p. 115.
19. Ceperley D. M., Alder B. J.— Physica. Ser. B, 1981, v. 108, p. 875.
20. Lee M., Schmidt K., Kalos M., Chester G.— Phys. Rev. Lett., 1981, v. 46, p. 728.
21. Hirsch J. E., Scalapino D. J., Sugar R. L., Blankenbecler R.— Ibid., v. 47, p. 1628; Phys. Rev. Ser. B, 1982, v. 26, p. 5033.
22. Kuti J.— Phys. Rev. Lett., 1982, v. 49, p. 183.
23. Hirsch J. F., Scalapino D. J.— Phys. Rev. (to be published).
24. Hirsch J. E., Fradkin E.— Phys. Rev. Lett., 1982, v. 49, p. 402.
25. Pearson R. B., Richardson J. L., Toussaint D.— CACM (to be published).