Footprint over Teaching Mathematica Quantum Mechanics: Script

Lee Myeongwon*
Depeartment of Physics,
Korea University.

This is a talking in Research Training Workshop 2016, Session II promoted by Quantum Control Lab(qclab.korea.ac.kr). We talk about Heisenberg spin chain and teaching Mathematica@ to solve it effectively. First, we talk about magnetism, spin interaction, and a result of statistical mechanics. Ferromagnet is focused, and it is interested topic in magnetism. Spin interaction is origin from coulomb force. But, we have remember that electron is fermions. Second, we describe how to solve this problem using mathematica technically. We can understand Wigner-Eckart Theorem for construct hamiltonian. And, we use Clebsch-Gordan coefficient to simplify it. Finally, we introduce some manual for beginner.

keywords: Heisenberg spin chain, Ferromagnet, Spin interaction, Free energy, Mathematica

I. INTRODUCTION

Mathematica@(매스매티카)를 이용해 양자역학문제들을 다뤄보았습니다. 그 문제 중 하나를 발표하겠습니다. Heisenberg spin chain(하이젠버그 스핀 체인)을 이용하여 Ferromagnet(강자성)을 기술 할 수 있는데, 이 스핀 체인의 Hamiltonian(해밀토니안)과 Basis(베이시스)를 어떻게 구성하고 계산할 지 알아보겠습니다. 그 전에, 기본적인 통계역학적 문제들을 소개하고, 왜 해밀토니안을 구성하는 것과 가능한 베이시스들을 찾는게 왜 중요한지 간단히 알아보겠습니다. 마지막으로, 매스매티카 매뉴얼을 작성중인데 매뉴얼 구성을 간단히 설명드리겠습니다.

소개 부분 아래에 적힌 내용은 물리 교과서 저자로 유명한 그리피스 전자기학에 나와있는 내용입니다. [1] 강자성 물질은 일반적인 경우 물질이 자성을 띄는 것과는 다른 방식으로 자성을 나타냄을 의미합니다.

여기서 다뤄볼 물리들은 다음과 같습니다. 강자성, 스핀 상호작용, 위그너 에카르트 이론, 클랩시 고든 계수 입니다.

A. Heisenberg spin chain and Ferromagnet

일반적으로 물질은 아래와 같은 세가지 자성을 띄고 있습니다. 상자성, 강자성, 반강자성입니다. [1] 상자성은 자기장 안에서 자기장 방향으로 자화를 합니다. 자기장이 없어지는 경우, 자화를 잃고 무작위로 스핀이 다시 배열되는 것을 알 수 있습니다. 강자성은 자기장 안에서 모두 같은방향으로 정렬합니다. 가장 재미있는 점은 자기장이 없어져도 자화를 그대로 유지한다는 점입니다. 반강자성은 자기장이 있는 경우 자화를 없애는 방향으로 스핀들이 모양을 가지게 되는 것입니다. 강자성을 기술하는 해밀토니안은 아래와 같습니다. 학부 과정에서는 이를 실제로 푸는것은 어려워서 조금 더 간단히 만든 Ising model, XY model 등을 이용해서 강자성과 상전이를 이해하고 있습니다.

$$\hat{H} = -J \sum_{<ij>} \hat{S}_i \cdot \hat{S}_j - B \sum_i \hat{S}_i \tag{1}$$

해밀토니안 안에서 스핀 두개가 결합한 에너지는 어디에서 오는지 논의하겠습니다. 그림에 나온 문제는 연습문제 중 하나입니다. [1] 이 문제의 정답은 Magnetic dipole(자기 쌍극자)이 서로 상호작용을 하여 서로 방향이 같으면 안정한 상태가 될것이라는 점입니다. 하지만, 실제 고체 내부에서는 자기 쌍극자에 의한 효과는 보통 거리 세제곱의 반비례해서 감소하며 매우 약합니다. 그럼 그 근원을 알아보겠습니다.

* lmwxxxx@gmail.com

II. EXCHANGE INTERACTION

A. Electron Interaction

답부터 말하자면 이는 쿨롱힘에서 근원을 찾을 수 있습니다. [2] 쿨롱 힘에 의한 에너지는 모두 잘 알고 있기를 기대하며 설명하지 않습니다. 전자는 페르미온이라는 입자인데, 이는 페르미의 이름을 따서 지었습니다. 가장 큰 특징은 구분 불가능 하다는 점과, Antisymmetric 한 상태를 가진다는 점입니다. 이로 인해 나오는 상호작용은 "양자역학적" 인 현상입니다.

두개의 원자핵이 있고, 전자가 하나씩 있는 간단한 경우를 생각해 봅니다. 공간적인 파동함수가 서로 대칭적인 경우가 있고, 비대칭적인 경우가 있습니다. 대칭적인 경우 모여있는 확률이 크므로, 에너지가 높습니다. 반대로 공간적인 파동함수가 서로 비대칭적인 경우는 에너지가 낮습니다. 파동함수는 스핀과 Tensor product(텐서 곱)로 결합합니다. 전체 파동함수는 비대칭적이여야하므로 공간 대칭적인 파동함수와 스핀 비대칭적인 파동함수가 결합하고, 공간 비대칭적인 파동함수와 스핀 대칭적인 파동함수가 결합합니다. 그래서 이를 근사적으로 나타내면, 스핀이 대칭적인 경우 에너지가 낮고, 스핀이 비대칭적인 경우 에너지가 높음을 알 수 있습니다.

B. Statistical Machanics Result

해밀토니안과 베이시스를 잘 구성하는 것은 중요합니다. 왜냐하면 통계물리적인 계산을 위해 필요하기 때문입니다. 통계물리적인 결과를 간단히 소개합니다. 통계물리에서는 Partition function(분배함수)으로 알고싶은 열역학적 결과를 찾을 수 있습니다. [4] 이 분배함수를 이용해서 Free energy(프리 에너지)를 찾을 수 있는데, 여기서 평형을 찾을 수 있고, 스핀(즉 자화) 등 의 기대값을 찾기 수월합니다.

일반적으로 모든 자연현상은 에너지가 낮은 상태를 좋아한다고 알고 있습니다. 스카이 다이빙을 하는 사람은 위치에너지가 높은 하늘에서 에너지가 낮은 지상까지 떨어지며 스릴감을 즐깁니다. 그리고, 모든 자연현상은 열역학 2법칙에 따라 Entropy(엔트로피)가 증가한다고 알고 있습니다. 이를 이용해 물 속의 물질의 확산 등을 설명할 수 있습니다.

프리에너지는 다음과 같이 정의됩니다.

$$F = E - TS|_{S=S(T)} \tag{2}$$

이는 에너지를 Legendre(르장드르) 트랜스폼을 한 것입니다. 에너지가 낮아지면, 혹은 엔트로피가 커지면 프리에너지는 낮아지는 것을 알 수 있습니다. 그래서 우리는 프리에너지를 찾을 것입니다.

두가지 예를 들어 간단히 설명해보겠습니다. 첫번째로, 물의 경우 매우 낮은 온도에서는 $-TS$ 를 무시하면, 에너지가 가장 낮은 얼음이 되는 것을 알 수 있습니다. 매우 온도가 높으면 E 를 무시하게 되며, 엔트로피가 아주 큰 기체 즉 수증기가 되어버림을 알 수 있습니다. 특수한 경우 헬륨같은 경우는 고체가 되지 않습니다. 이는 낮은온도에서 에너지가 매우 작기 때문입니다.

세포 혹은 혈관에서 어떤 소금 혹은 단백질이 이온 채널 등 과 결합하는 모델입니다. [3] 결합하면 에너지가 낮아서 좋습니다. 하지만 엔트로피는 줄어들어서 싫습니다. 이를 프리에너지를 이용해서 붙어있을 확률 등을 계산 할 수 있습니다.

III. HEISENBERG SPIN CHAIN

A. Construct Basis

베이시스 들을 만들 수 있는데, 무턱대고 만들면 경우의 수가 너무 많습니다. 또한, 베이시스를 만드는데만 한세월 걸립니다. 왜냐하면 베이시스들을 모아서 행렬로 만들어 두면, 그 크기가 $2^N \times 2^N$ 으로 너무 큽니다. 2^N 길이의 벡터가 2^N 개 있기 때문입니다. 그래서 우리가 클랩시 고든 표를 이용해서 가능한 경우의 수들만 계산하겠습니다.

여기서 Glue(글루)라는 명령어를 만들어서 사용했습니다. 이는 말 그대로 스핀을 하나 붙이는 명령어입니다. 코드만 잔뜩보면 어렵긴 하지만 여기서 우리가 매스매티카에게 패턴을 알려준다는 점을 확인 할 수 있습니다. 다른 패턴을 주면 다른 계산을 하도록 매스매티카를 가르쳐 주는 과정입니다. 위의 글루같은 경우는 가능한 베이시스를 찾아주는 것입니다. 그리고 아래의 글루같은 경우는 위에서 사용한 글루 명령어를 이용해서 베이시스에 붙여서 새로운 베이시스를 만드는 과정입니다.

글루를 이용한 예제입니다. 여기서는 아무런 입력이 없는 글루를 사용했습니다. 이는 알아서 하나를 붙여주는 것입니다. 그래서 그 결과로 베이시스들을 만들 수 있고, 파울리 패키지를 이용해서 보기 좋게 스핀 조합으로도 볼 수 있습니다.

B. Construct Hamiltonian

우리가 해밀토니안을 만들때 Wigner-Eckart Theorem(위그너-에카르트)을 사용할 것입니다. 이를 간략하 실펴보면 텐서 오퍼레이터의 Commutation이 마치 연산자와 고유함수, 고유값처럼 행동하는 것입니다. 이를 이용해서 스핀 체인에 들어가는 연산자들을 새로 만들고 이들 사이에서 나타나는 공통점을 확인했습니다.

여기서 베이시스에 오퍼레이터를 적용한 뒤 다른 베이시스에 곱하면 그 결과는 클랩시 고든 계수 와 어떤 상수로 나타납니다. 우리가 클랩시 고든 계수를 찾는 것은 간단하므로 이는 문제가 되지 않습니다. 그 앞에 공통적으로 나타나는 계수를 찾아야 하는데, 여기서는 실제로 계산이 필요합니다. 그리고 이를 이용해서 해밀토니안을 효과적으로 만들고, Block diagonal(블록 다이고날)하게 만들 수 있습니다.

실제로 그 결과를 찾은 것입니다. 다른 연사자를 썼지만, 표의 블록마다 어떤 숫자를 공유하는 것을 알 수 있습니다.

IV. INTRODUCE MATHEMATICA MANUAL

매뉴얼을 이용해서 공부하는 학생들이 조금 더 쉽게 배울 수 있도록 준비했습니다. 표지는 블록 타일들로 이루어진 호랑이 그림입니다. 이는 다른 교과서 표지에서 영감을 얻었습니다. 둘 다 사막 그림인데 하나는 점을 찍은 점묘 방식으로 그려져 있고, 다른 하나는 뿌옇게 나타나 있습니다. [5]

매뉴얼은 총 4 개의 파트로 이루어져있습니다. 매스매티카의 기본적인 사용, 패키지 설명, 어플리케이션, 그리고 참고자료 및 찾아보기 입니다. 매스매티카 기본적인 사용에서는 함수 사용법 및 간단한 조화진동자 및 스핀 연산자들을 다뤄봅니다. 패키지에서는 코시, 파울리, 그리고 포크 패키지를 이용하는 법과 패키지 개발하는 방법들을 알아봅니다. 어플리케이션에서는 다이아몬드 NV 와 초전도 회로 등을 패키지를 이용해서 다뤄봅니다.

매뉴얼은 기본적인 설명과 코드 그리고 예제 및 문제로 구성되어 있습니다. 문제는 계속 추가해 나갈 예정입니다.

[1] David J. Griffiths, Introduction to Electrodynamics, 2014, PEARSON, 4th Ed.
[2] Edouard Brezin, Introduction to Statistical Field Theory, 2010, CAMBRIDGE UNIV. PRESS.
[3] Phillips, Physical Biology of the Cell, 2012, Garland Science, 2nd Ed.
[4] Franz Schwabl, Statistical Mechanics, 2005, Springer, 2nd Ed.
[5] Mehran Kardar, Statistical Physics of Particles, 2007, CAMBRIDGE UNIV. PRESS.