

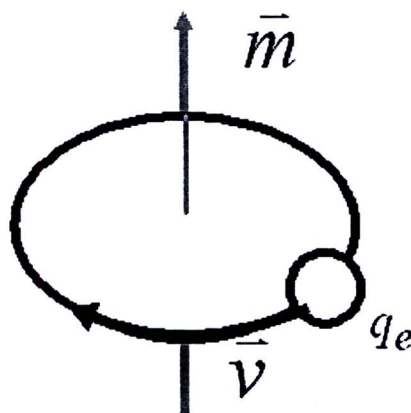
บทที่ 2

แนวคิด ทฤษฎี เอกสารและงานวิจัยที่เกี่ยวข้อง

การศึกษาเรื่อง การจำลองสถานการณ์มอนติคาร์โลของสปินไอซิงใน 3 มิติด้วยเทคนิคการเดินแบบสุ่มในศักย์ยูคาวาเสมือน มีงานวิจัยที่เกี่ยวข้อง และทฤษฎีที่ใช้ในงานวิจัยได้แก่ สมบัติทั่วไปทางแม่เหล็ก การเคลื่อนที่แบบสุ่ม แบบจำลองไอซิง ศักย์ยูคาวา และการจำลองสถานการณ์มอนติคาร์โล (Monte Carlo simulation)

2.1 สมบัติทั่วไปทางแม่เหล็ก

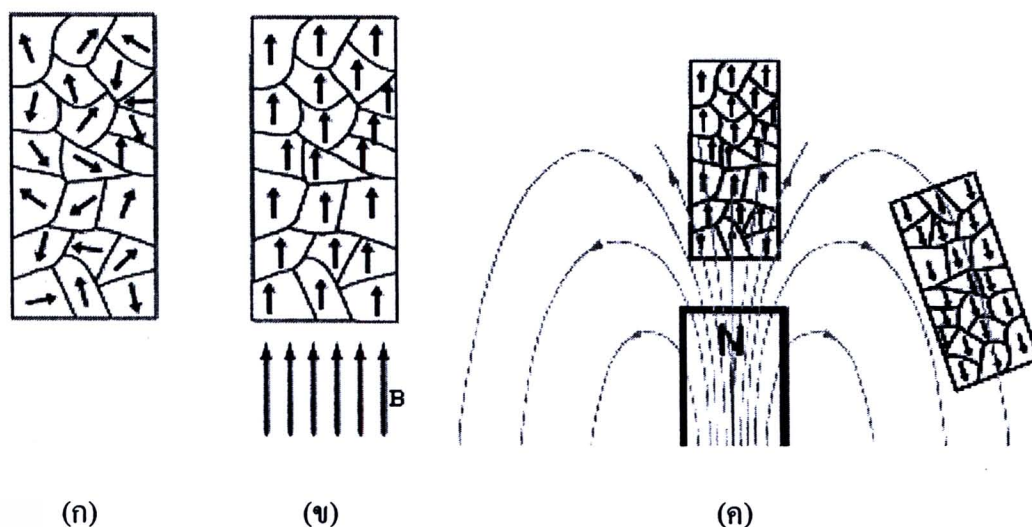
อำนาจแม่เหล็ก ที่ปรากฏอยู่ในสารแม่เหล็กชนิดต่างๆ เช่น แม่เหล็กถาวรทั่วไป หรือเฟอร์ไรต์ นั้น เป็นสมบัติมหภาคของสาร ซึ่งเกิดจากผลรวมสุทธิของไดโพล (Dipole) ภายในทั้งระบบ โดยไดโพลเหล่านี้ เปรียบเสมือนเกิดจากการหมุนวนของกระแสอันเกิดจากการเคลื่อนที่ของประจุ ซึ่งประจุที่มีความน่าจะเป็นสูงที่จะเคลื่อนที่ได้ภายในสารแม่เหล็ก คืออิเล็กตรอน ดังแสดงในรูป 2.1



รูป 2.1 แสดงการโคจรรอบนิวเคลียสของอิเล็กตรอนเมื่อ q_e คือขนาดประจุของอิเล็กตรอน และ $\vec{m}$ คือ เวกเตอร์แสดงโมเมนต์แม่เหล็กของอิเล็กตรอน

การเคลื่อนที่เป็นวงกลมของอิเล็กตรอนจะก่อให้เกิดโมเมนต์แม่เหล็ก (m) ขึ้น ตามกฎมือขวาในการศึกษาแม่เหล็กไฟฟ้า โดยโมเมนต์แม่เหล็กที่เกิดขึ้นดังกล่าวนี้ สามารถพิจารณาได้ด้วยไดโพล (Dipole) เมื่อปราศจากผลของสนามแม่เหล็กภายนอก ไดโพลในเนื้อสารจะมีการจัดเรียงตัวกันอย่างกระจัดกระจาย ส่งผลให้ผลรวมของโมเมนต์แม่เหล็กหักล้างเป็นศูนย์ หรือไม่แสดงอำนาจแม่เหล็ก อย่างไรก็ตามในกรณีที่ผลของสนามแม่เหล็กภายนอก ไดโพลทั้งหมดในระบบจะถูกเหนี่ยวนำให้เกิดการจัดเรียงตัวใหม่ โดยมีแนวโน้มนานกับทิศของสนามแม่เหล็กภายนอก จึงส่งผลให้สารนั้นๆ สามารถแสดงอำนาจแม่เหล็กได้ หากสนามแม่เหล็กภายนอกที่นำมาเหนี่ยวนำนั้น มีขนาดมากพอ

ในการพิจารณาการเปลี่ยนแปลงของไดโพลนี้ สามารถแบ่งพิจารณาเป็นส่วนๆ ได้ โดยบริเวณที่มีการจัดเรียงตัวของไดโพลในทิศเดียวกันเรียกว่า โดเมน (Domain) ดังแสดงในรูป 2.2



รูป 2.2 แสดงการจัดเรียงตัวของโดเมนที่ปราศจาก อิทธิพลของสนามแม่เหล็กภายนอก(ก) และการจัดเรียงตัวของโดเมนที่ได้รับอิทธิพลของสนามแม่เหล็กภายนอก(ข),(ค) ⁽¹⁵⁾

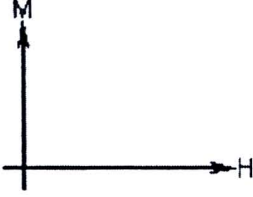
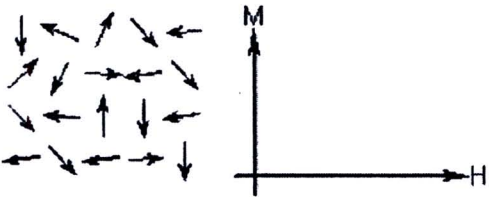
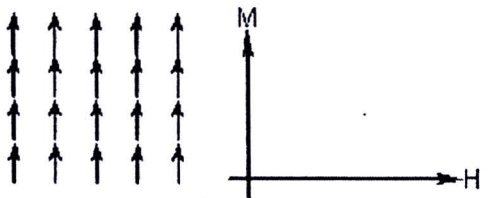
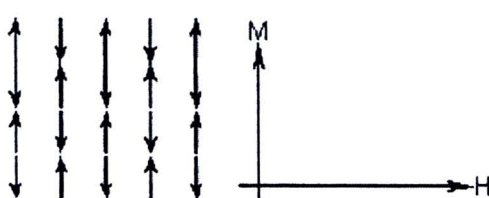
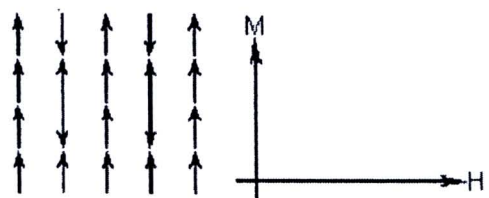
ในรูป 2.2(ก) แสดงถึงการจัดเรียงตัวของโดเมนที่ไม่มีอิทธิพลของสนามแม่เหล็กภายนอก ซึ่งมีการจัดเรียงตัวอย่างกระจัดกระจายของโดเมน จึงไม่แสดงอำนาจทางแม่เหล็กที่ชัดเจน ในทางตรงกันข้าม เมื่อโดเมนได้รับอิทธิพลจากสนามแม่เหล็กภายนอกที่มีขนาดเหมาะสม โดเมนดังกล่าวจะมีการจัดเรียงตัวใหม่ ตอบสนองต่อทิศทางของสนามแม่เหล็กดังแสดงในรูป 2.2(ข) และ 2.2(ค) อย่างไรก็ตามการตอบสนองของโดเมนในระบบต่อสนามแม่เหล็กภายนอกนั้นจะแตกต่างกันตามประเภทของสาร ดังตาราง 2.1 ที่แสดงการแจกแจงสารตามสภาพแม่เหล็กที่อุณหภูมิห้อง ได้ 5 ชนิด

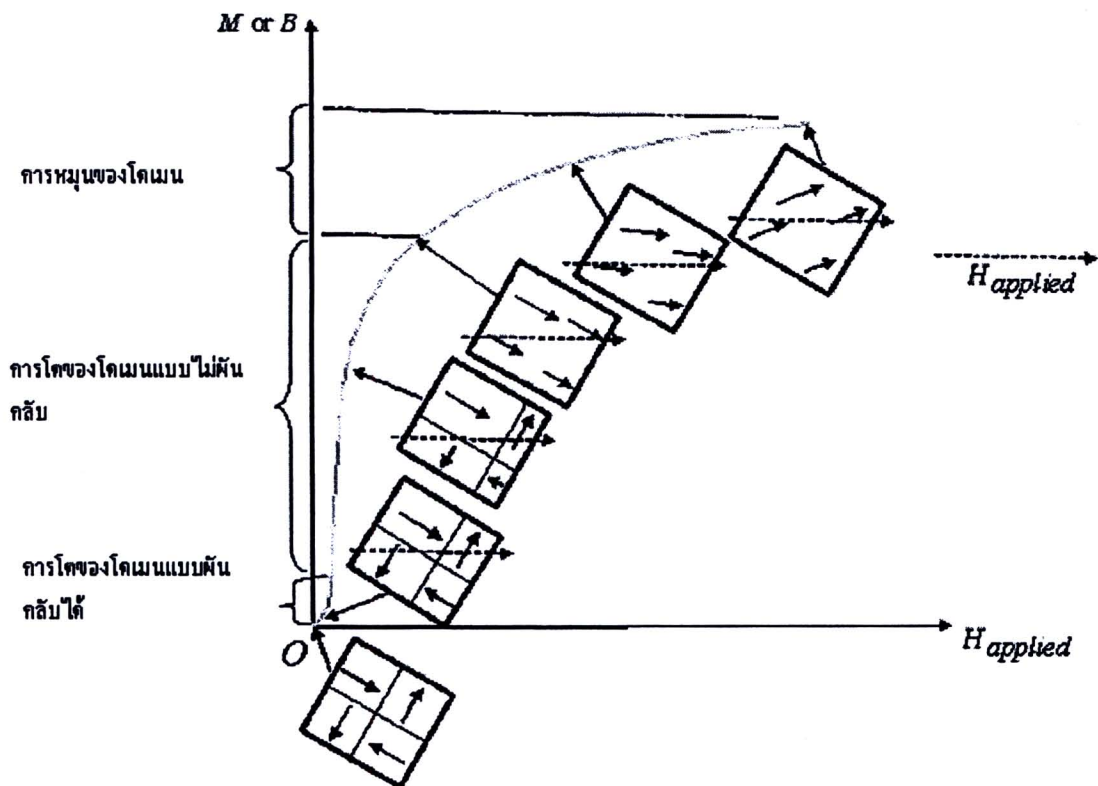
โดยสภาพแม่เหล็กที่มีความแตกต่างกันนั้น แสดงถึงความต่างของการจัดเรียงตัวของสปินในเนื้อสาร และการตอบสนองต่อสนามแม่เหล็กภายนอก ซึ่งสามารถสังเกตได้จากความสัมพันธ์ระหว่าง m คือ ค่าแม่เหล็กไทเซชัน (Magnetization) และ h คือขนาดของสนามแม่เหล็กภายนอก โดยการศึกษาครั้งนี้ ให้ความสนใจสารแม่เหล็กที่มีสภาพแม่เหล็กแบบเฟอร์โร (Ferromagnetic magnet)

อย่างไรก็ตาม สารแม่เหล็กชนิดพาราสามารถแสดงสภาพแม่เหล็กแบบเฟอร์โรได้ ณ อุณหภูมิ น้อยกว่าค่าอุณหภูมิวิกฤติหรืออาจกล่าวได้ว่าสารแม่เหล็กชนิดเฟอร์โรนั้นสามารถแสดงสภาพแม่เหล็กแบบพารา (Paramagnetic magnet) ได้ ณ อุณหภูมิที่มากกว่าค่าอุณหภูมิวิกฤติ ซึ่งความแตกต่างของการแสดงออกทางสมบัติแม่เหล็กดังกล่าวนี้ สามารถสังเกตได้จากการตอบสนองของสารแม่เหล็กต่อสนามแม่เหล็กภายนอก ที่เรียกว่า สมบัติฮิสเทอรีซิส ซึ่งสังเกตได้จากการเปลี่ยนแปลงของวงรอบฮิสเทอรีซิส (Hysteresis loop) ดังจะกล่าวในรายละเอียดต่อไป

สารแม่เหล็กเฟอร์โรที่ยังไม่ได้ถูกเหนี่ยวนำให้แสดงสภาพแม่เหล็กจากสนามแม่เหล็กภายนอก จะถูกเรียกว่า สารแม่เหล็กที่ยังไม่ได้ถูกแม่เหล็กไทซ์ ในทางตรงกันข้าม สารแม่เหล็กเฟอร์โรที่ถูกเหนี่ยวนำให้เกิดสภาพแม่เหล็กแล้วจะถูกเรียกว่า สารแม่เหล็กที่ถูกแม่เหล็กไทซ์แล้ว กล่าวคือ ด้วยอิทธิพลของสนามแม่เหล็กภายนอก โดเมนส่วนใหญ่ของสารแม่เหล็กเฟอร์โรที่ยังไม่ถูกแม่เหล็กไทซ์ จะถูกเหนี่ยวนำให้เบนไปในทิศทางเดียวกับสนามแม่เหล็กภายนอก ซึ่งการเปลี่ยนแปลงทิศทางของโดเมน หรือกลุ่มไดโพลนี้ จะส่งผลให้เกิดการขยายอาณาบริเวณของโดเมนที่มีทิศทางในแนวโน้มเดียวกับทิศทางของสนามแม่เหล็กภายนอก ดังแสดงในรูป 2.3

ตาราง 2.1 การจำแนกชนิดวัสดุตามสถานะแม่เหล็ก (Magnetism)⁽¹⁵⁾

ชนิดของสถานะแม่เหล็ก	การจัดเรียงตัวของสปิน และการเปลี่ยนแปลงของค่าแมกเนไทเซชันภายใต้สนามแม่เหล็กภายนอก	ตัวอย่าง
Diamagnetism		Au Cu
Paramagnetism		β -Sn Pt Mn
Ferromagnetism		Fe
Antiferromagnetism		Cr
Ferrimagnetism		Ba ferrite

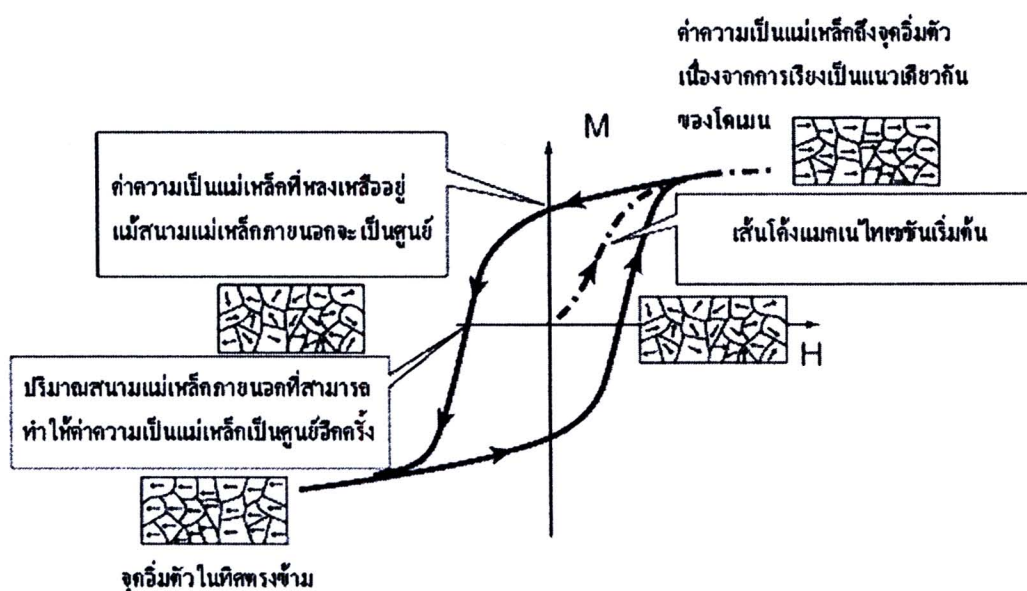


รูป 2.3 แสดงการจัดเรียงตัวของโดเมนภายในสารแม่เหล็กขณะอยู่ภายในสนามแม่เหล็กภายนอก⁽¹⁵⁾

จากรูป 2.3 สนามแม่เหล็ก H ที่ให้แก่วัสดุ จะเหนี่ยวนำให้เกิดสนามแม่เหล็ก B ขึ้น เมื่อเพิ่มขนาดของสนามแม่เหล็กภายนอก H มากขึ้น ฟลักซ์แม่เหล็ก B จะถูกเหนี่ยวนำให้เกิดเพิ่มมากขึ้น โดยเป็นผลจากการจัดเรียงตัวไปในทิศทางเดียวกันของโดเมนส่วนใหญ่ เมื่อเพิ่มขนาดของสนาม H ขึ้นอย่างต่อเนื่อง ขนาดของสนามแม่เหล็ก B จะคงที่ แม้ว่าเพิ่มค่าสนาม H ก็ตาม กล่าวโดยสรุปได้ว่า ค่าสนาม B จะเพิ่มขึ้นเพียงเล็กน้อยในช่วงแรก กระทั่งช่วงหนึ่ง ค่าสนาม B จะมีการเพิ่มขึ้นอย่างรวดเร็ว และ จะเริ่มมีการเปลี่ยนแปลงน้อยลง จนเสมือนคงที่ ดังแสดงในรูป 2.3

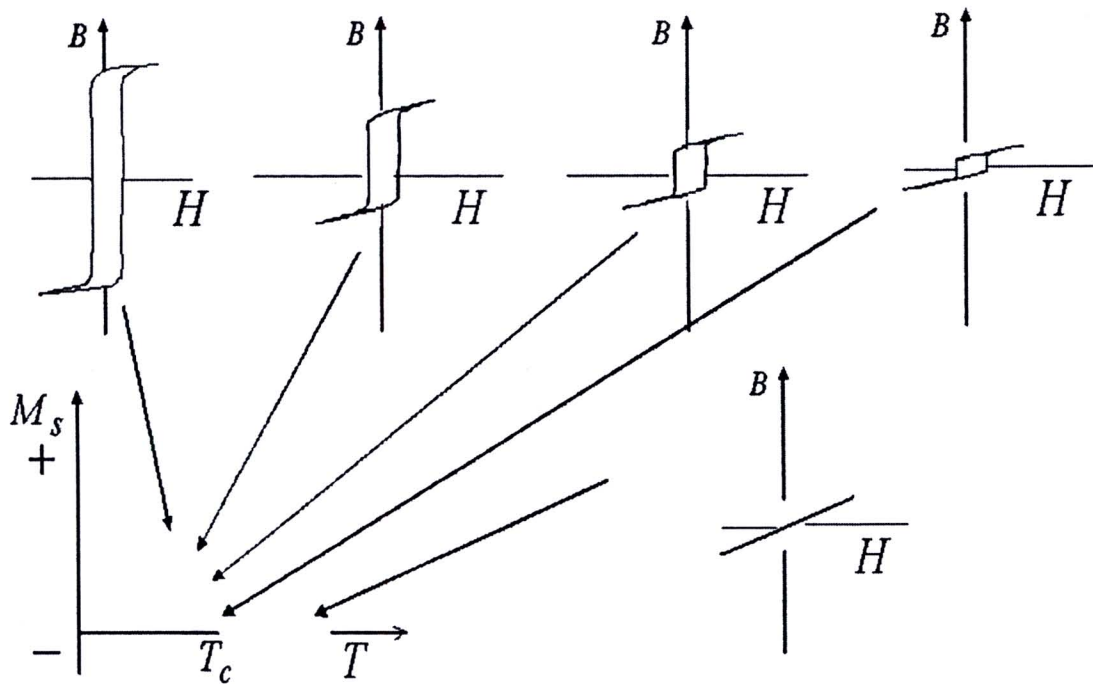
หลังจากการเปลี่ยนแปลงในช่วงเริ่มต้นในรูป 2.3 เมื่อลดค่าสนาม H ลงอย่างต่อเนื่อง จนกระทั่งมีค่าเท่ากับศูนย์ ค่าสนาม B จะลดลงในรูปแบบที่แตกต่างกับรูปแบบตอนเพิ่มค่า H ดังแสดงในรูป 2.4 ที่แม้สนามแม่เหล็กภายนอกจะมีค่าเท่ากับศูนย์ แต่ยังคงมีฟลักซ์แม่เหล็กในสารแม่เหล็กคงค้างอยู่ เรียกว่า สภาพแม่เหล็กคงค้าง (Remanence) และ เรียกสภาวะทางแม่เหล็กนี้ว่า แม่เหล็กถูกแมกเนไทซ์ (Magnetized state) ที่มีการแสดงอำนาจแม่เหล็กเสมือนแม่เหล็กถาวร แม้จะปราศจากอิทธิพลของสนามแม่เหล็กภายนอก โดยเป็นผลมาจากการที่ยังคงมีโดเมนบางกลุ่มที่ยังคงอยู่ในแนวทิศทางเดิมก่อนลดค่าสนามแม่เหล็ก หลังจากนั้น หากกลับทิศของสนามแม่เหล็ก

ภายนอก H แล้วเพิ่มขนาดของสนาม H ขึ้นอย่างต่อเนื่อง ค่าสนาม B จะมีค่าลดลง จนกระทั่งขนาดของสนาม B เท่ากับศูนย์ ซึ่งเรียกค่าสนาม H ที่ทำให้ สนาม B มีค่าเป็นศูนย์นี้ว่า ค่าสภาพลบถ้างแม่เหล็ก (Coercivity) และหากเพิ่มค่าสนาม H จนกระทั่งค่าสนามแม่เหล็ก B คงที่ จากนั้นจึงลดค่าสนาม H จนมีค่าเท่ากับศูนย์ และกลับทิศสนามแม่เหล็ก H แล้วจึงเพิ่มค่าสนาม H ต่อไป จะได้ลักษณะความสัมพันธ์เป็นวงรอบฮิสเทอรีซิส (Hysteresis loop) ดังแสดงในรูป 2.4



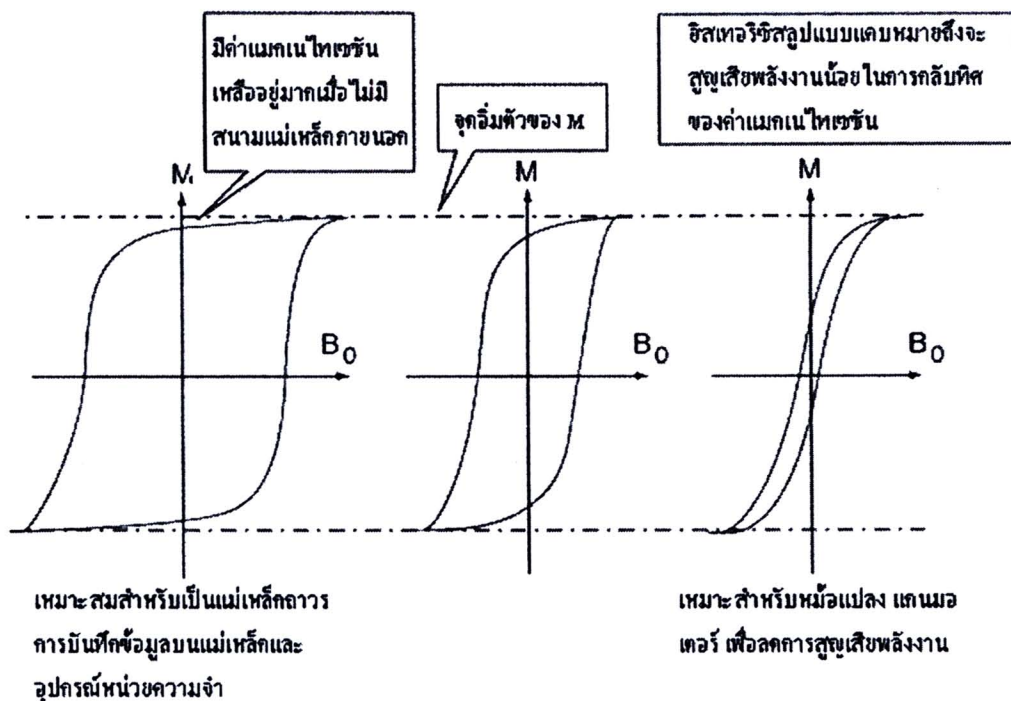
รูป 2.4 แสดงการจัดเรียงตัวของโดเมนภายในสารแม่เหล็กขณะอยู่ภายในสนามแม่เหล็กภายนอก และการเปลี่ยนแปลงของวงรอบฮิสเทอรีซิส ⁽¹⁵⁾

นอกจากสภาพแม่เหล็กคงค้างและค่าสภาพลบถ้างแม่เหล็กแล้ว พื้นที่ภายใต้กราฟวงรอบฮิสเทอรีซิสเป็นอีกสมบัตินึงที่ได้รับความสนใจในการศึกษาการเปลี่ยนแปลงของวงรอบฮิสเทอรีซิส นอกจากผลของการเหนี่ยวนำของสนามแม่เหล็กภายนอกแล้ว อุณหภูมิขณะวัดวงรอบฮิสเทอรีซิสยังส่งผลอย่างมาก ทั้งต่อการเปลี่ยนแปลงของวงรอบฮิสเทอรีซิส และพื้นที่ภายใต้กราฟวงรอบฮิสเทอรีซิส โดยพื้นที่ภายใต้กราฟวงรอบฮิสเทอรีซิสจะลดลงเมื่ออุณหภูมิเพิ่มขึ้น เมื่อถึงอุณหภูมิค่าหนึ่ง สภาพแม่เหล็กเฟอร์โรจะเปลี่ยนเป็นสภาพแม่เหล็กพารา โดยเรียกอุณหภูมินี้ว่า อุณหภูมิคูรี (Curie temperature) หรือ อุณหภูมิวิกฤติ (Critical temperature) ดังแสดงในรูป 2.5 โดยอธิบายได้ว่าการเพิ่มขึ้นของอุณหภูมิ เสมือนเป็นการเพิ่มค่าพลังงานความร้อนให้แก่ระบบ หากพิจารณาในระดับจุลภาค พลังงานที่เพิ่มมากขึ้นของระบบ ส่งผลให้เกิดการสั่นของอะตอมหรือไดโพล จนกระทั่งถึงอุณหภูมิหนึ่งที่ไดโพลมีการเรียงตัวแบบสุ่ม ทำให้สูญเสียสภาพแม่เหล็กโดยรวม เกิดการเปลี่ยนแปลงจากสภาพแม่เหล็กแบบเฟอร์โร เป็นสภาพแม่เหล็กแบบพารา ดังแสดงในรูป 2.5



รูป 2.5 แสดงผลของอุณหภูมิต่อวงรอบฮิสเทอรีซิสของแม่เหล็กเฟอร์โร

เนื่องจากวงรอบฮิสเทอรีซิสแสดงถึงการตอบสนองต่อสนามแม่เหล็กภายนอก โดยพื้นที่ภายใต้กราฟวงรอบฮิสเทอรีซิสแสดงถึงปริมาณพลังงานที่ต้องใช้ในการเปลี่ยนแปลงของวงรอบฮิสเทอรีซิส รวมทั้งสภาพแม่เหล็กคงค้าง และสภาพลบค้างแม่เหล็ก เป็นสมบัติที่สำคัญของสารแม่เหล็ก วงรอบฮิสเทอรีซิสจึงเป็นสมบัติสำคัญที่ใช้ในการบ่งบอกความเหมาะสมของสารแม่เหล็กชนิดนั้นๆ กับการประยุกต์ใช้กับงานด้านต่างๆ เช่น สารแม่เหล็กที่มีพื้นที่ใต้วงรอบฮิสเทอรีซิสขนาดใหญ่ และสภาพแม่เหล็กคงค้าง และสภาพลบค้างแม่เหล็กสูง เหมาะกับการใช้ทำอุปกรณ์สำหรับเก็บข้อมูลในคอมพิวเตอร์ (Hard disk drive) เป็นต้น ดังแสดงในรูป 2.6



รูป 2.6 แสดงรูปแบบวงรอบฮิสเทอรีซิสที่เหมาะสมกับการใช้งานในอุปกรณ์ชนิดต่างๆ⁽¹⁵⁾

2.2 แบบจำลองไอซิง (Ising model)

แบบจำลองไอซิง (Ising Model) เป็นแบบจำลองทางแม่เหล็กที่สามารถอธิบายการเปลี่ยนแปลงของไดโพลแม่เหล็กในเนื้อสาร โดยพิจารณาทิศทางแม่เหล็กของไดโพลเพียงสองทิศทาง คือทิศขึ้น และทิศลง ดังแสดงในรูป 2.7(ก) โดยแต่ละสปินมีอันตรกิริยาต่อสปินที่อยู่รอบข้าง และสปินที่อยู่รอบข้างสามารถเหนี่ยวนำให้สปินข้างเคียงชี้ไปในทิศทางเดียวกัน โดยหากไดโพลที่อยู่ใกล้กันมีทิศทางเดียวกัน สามารถพิจารณาเป็นโดเมนได้ ดังได้กล่าวมาแล้วในหัวข้อก่อนหน้า ด้วยแบบจำลองไอซิงนี้ ไดโพลที่มีทิศการวางตัวแตกต่างกัน สามารถแทนด้วยเลข +1 และ -1 ดังแสดงในรูป 2.7(ข) ทั้งนี้การชี้ไปในทิศทางเดียวกันของสปินจะส่งผลให้พลังงานภายในของระบบลดลง พฤติกรรมของสปินดังกล่าวส่งผลให้สนามแม่เหล็กรวมของสารแม่เหล็กทั้งหมดไม่เท่ากับศูนย์ และ เกิดอำนาจแม่เหล็กขึ้น



↑	↓		↑	↑	↓
↓	↓	↑		↑	↑
	↑	↓	↓	↓	↑
↓	↓	↓	↑	↑	
↓		↓	↑	↓	↑
↑		↓	↓		↑

(ก)

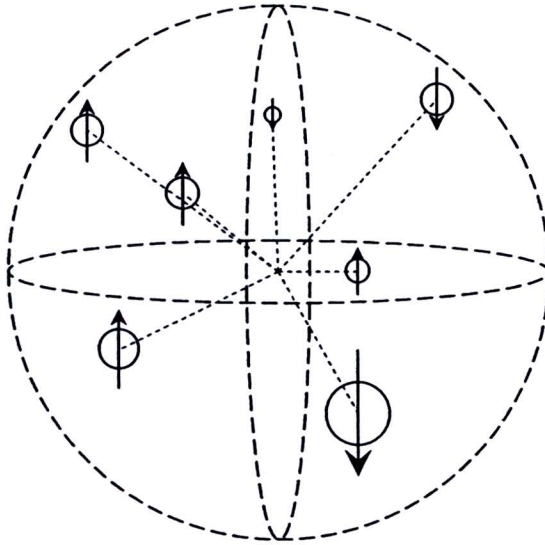
-1	-1		+1	+1	-1
-1	-1	+1		+1	-1
	+1	-1	-1	-1	-1
-1	-1	-1	+1	+1	
-1		-1	+1	-1	+1
-1		-1	-1		+1

(ข)

รูป 2.7 แสดงการจัดเรียงตัวของสปินตามแบบจำลองไอซิง ในสองมิติ (ก) โดยลูกศรชี้ขึ้นแทนสปินที่มีทิศชี้ขึ้น ส่วนลูกศรที่ชี้ลงนั้นแทนสปินที่มีทิศชี้ลงและ(ข)การแทนค่าของสปินด้วยตัวเลข +1 และ -1 โดยพื้นที่ว่างเป็นบริเวณที่สปินสามารถเคลื่อนที่ได้

การวิจัยนี้ศึกษาสมบัติแม่เหล็กของอนุภาคที่มีการแพร่ การจำลองสถานการณ์และการวิเคราะห์จะใช้แบบจำลองไอซิงเป็นพื้นฐานซึ่งเป็นแบบจำลองทางคอมพิวเตอร์ ใช้ทำนายปรากฏการณ์ทางแม่เหล็กไฟฟ้า โดยอนุญาตให้อนุภาคในระบบมีค่าสปินเป็น 1 และ -1 เท่านั้น (สปินขึ้นหรือสปินลง: Spin up or Spin down) เรียกอนุภาคในระบบว่าแก๊สสปินไอซิง (Ising spin gas) เนื่องจากแบบจำลองไอซิงเป็นแบบจำลองที่มีพลังงานของสองสถานะที่สูงแต่อยู่คนละทิศทาง ดังนั้น จึงต้องใช้พลังงานสูงมากในการเปลี่ยนสถานะไปในทิศทางตรงกันข้าม หากพลังงานในการเปลี่ยนแปลงไม่สูงพอ ก็จะไม่สามารถเปลี่ยนแปลงทิศของสปินได้





รูป 2.8 แสดงแบบจำลองไอซิงในปริภูมิต่อเนื่อง

จากรูป 2.8 ระบบในรูปแบบแสดงโครงสร้างแบบปริภูมิต่อเนื่อง 3 มิติที่มีทิศทางของสปินเพียงสองแบบคือขึ้นและลง ในทางคอมพิวเตอร์ทิศทางเหล่านี้จะถูกแทนที่ด้วยตัวเลข -1 กับ +1 โดยหน่วยของค่าสปินจะถูกยุบรวมกับตัวแปรของพลังงาน ดังนั้นตัวเลขที่ใช้กำกับทิศสปินจะไม่มีคิหน่วย (หน่วยของสปินมีค่าเท่ากับ ค่าคงที่ของพลังค์ (Planck) หารด้วยสองพายคือ $h/2\pi$ หรือประมาณ $105.45727 \times 10^{-36}$ Joule.second) อันตรกิริยาระหว่างอนุภาคจะคำนวณได้จากการกระจายระหว่างอนุภาคในระบบ การวิเคราะห์สมบัติของแก๊สสปินไอซิงจะพิจารณาจากค่าดังต่อไปนี้

1. สภาพแม่เหล็ก (Magnetization: m) เป็นผลรวมของค่าสปินของอนุภาคทั้งหมดต่อจำนวนอนุภาคทั้งหมดในระบบ เมื่อใช้แบบจำลองไอซิง สภาพแม่เหล็กจะถูกทำบรรทัดฐานให้มีค่าอยู่ระหว่าง -1 ถึง +1 ดังสมการ

$$m = \frac{\sum_{i=1}^N S_i}{N} \quad (1)$$

เมื่อ N คือจำนวนอนุภาคทั้งระบบ, S_i คือค่าสปินตัวที่ i , m คือค่าสภาพแม่เหล็ก

2. สภาพรับไว้ได้ทางแม่เหล็ก(Magnetic susceptibility: χ) คือค่าความไวของสภาพแม่เหล็กที่เปลี่ยนแปลงเพื่อตอบสนองต่อสนามแม่เหล็กของระบบซึ่งแสดงได้ดังสมการ

$$\chi = \frac{N}{k_B T} (\langle m^2 \rangle - \langle m \rangle^2) \quad (2)$$

เมื่อ $\langle \dots \rangle$ คือค่าคาดหวัง (Expectation value), k_B คือค่าคงที่ของ Boltzmann, T คืออุณหภูมิ และ χ คือสภาพรับไว้ได้ทางแม่เหล็ก

การสร้างกราฟความสัมพันธ์ของสภาพรับไว้ได้ทางแม่เหล็กกับอุณหภูมินั้น เมื่ออุณหภูมิเพิ่มขึ้น ณ อุณหภูมิที่มีค่าสภาพรับไว้ได้ทางแม่เหล็กเป็นอนันต์ อุณหภูมินั้นคืออุณหภูมิวิกฤต (T_c) ซึ่งเป็นอุณหภูมิที่ระบบเปลี่ยนจาก สภาพแม่เหล็กแบบเฟอร์โรเป็นสภาพแม่เหล็กแบบพารา ซึ่งเป็นจุดเดียวกับจุดที่กราฟความสัมพันธ์ของสภาพแม่เหล็กกับอุณหภูมิมิมีความชันสูงสุด

2.3 การจำลองสถานการณ์ (Simulation)

การจำลองสถานการณ์เป็นการรวบรวมวิธีการต่างๆ ที่ใช้จำลองสถานการณ์จริงหรือพฤติกรรมของระบบต่างๆ มาไว้บนคอมพิวเตอร์โดยใช้โปรแกรมคอมพิวเตอร์เข้ามาช่วย เพื่อที่จะศึกษาการไหลของกิจกรรมในรูปแบบต่างๆ โดยมีการเก็บข้อมูล และทำการวิเคราะห์หารูปแบบที่ถูกต้องจากโปรแกรมคอมพิวเตอร์เพื่อใช้ในการปรับปรุงในอนาคต

การศึกษานี้ได้ใช้การจำลองสถานการณ์มอนติคาร์โลมาช่วยในการพิจารณาสมบัติแม่เหล็กของแบบจำลองไอซิง โดยอาศัยระเบียบขั้นตอนวิธีเมโทรโพลิสในการพิจารณาการกลับทิศสปินและการเดินแบบสุ่มของอนุภาคแม่เหล็ก

2.3.1 การจำลองสถานการณ์มอนติคาร์โล (Monte Carlo simulation)

แนวคิดของการจำลองสถานการณ์มอนติคาร์โลนั้นได้กำเนิดมาจากนักฟิสิกส์ในห้องปฏิบัติการที่ลอสอัลามอสในปี ค.ศ. 1946 ซึ่งทดลองการป้องกันรังสีและระยะมากที่สุดที่นิวตรอนจะเดินทางผ่านตัวกลางแต่ปัญหาดังกล่าวไม่สามารถวิเคราะห์ได้โดยการคำนวณ ซึ่งต่อมาปัญหานี้ถูกชี้ให้เห็นว่าสามารถแก้ไขได้โดยการสร้างแบบจำลองการทดลองบนคอมพิวเตอร์เดิมโดยวิธีการสุ่มการคำนวณและการทดลอง วิธีดังกล่าวถูกตั้งชื่อว่า มอนติคาร์โล โดยตั้งจาก มอนติคาร์โลคาสิโนซึ่งตั้งอยู่ที่ในโมนาโกซึ่งเป็นแหล่งการพนัน

แนวคิดพื้นฐานของวิธีมอนติคาร์โลคือการจำลองการเปลี่ยนแปลงแบบสุ่มเนื่องจากผลของความร้อน(อุณหภูมิ)ของระบบจากสถานะหนึ่งไปยังอีกสถานะ จากนั้นจะทำการคำนวณหาค่าเฉลี่ยของปริมาณที่ต้องการศึกษาตลอดระยะเวลาที่ทำการจำลองสถานการณ์ ประโยชน์ของ

วิธีนี้ก็คือใช้การสุ่มตัวอย่างเพียงจำนวนน้อยเมื่อเทียบกับจำนวนสถานะที่เป็นไปได้ทั้งหมดของระบบ แต่จะได้ค่าโดยเฉลี่ยที่ใกล้เคียงกับค่าคาดหวัง (Expectation value) ของปริมาณที่ต้องการหา อย่างไรก็ตามจุดด้อยของวิธีนี้ก็คือในการหาฟังก์ชันการแบ่งส่วนจะมีความคลาดเคลื่อนทางสถิติเกิดขึ้นอันเนื่องมาจากการที่พิจารณาแค่ส่วนเดียวของสถานะทั้งหมด ทั้งนี้ค่าคลาดเคลื่อนนี้จะลดลงเมื่อจำนวนตัวอย่างที่สุ่มมีจำนวนมากขึ้น ทำให้การหาค่าคาดหวังที่สนใจสามารถทำได้โดยตรงโดยไม่ต้องคำนวณหาฟังก์ชันการแบ่งส่วนเสียก่อน

2.3.2 การสุ่มตัวอย่างสำคัญ (Importance sampling)

จุดมุ่งหมายโดยทั่วไปของการใช้การจำลองสถานการณ์มอนติคาร์โลก็คือการคำนวณหาค่าคาดหวังซึ่งในการคำนวณหาค่าคาดหวังนั้น มีความน่าจะเป็นที่จะเกิดขึ้นตามค่าของพลังงาน ดังนั้นการแจกแจงความน่าจะเป็นที่นิยมเลือกใช้ คือ การแจกแจงความน่าจะเป็นของโบลทซ์มานน์ (Boltzmann probability distribution) นั่นคือ

$$p = \frac{1}{Z} \exp\left(\frac{-E}{k_B T}\right) \quad (3)$$

โดยที่ E คือ พลังงาน k_B คือ ค่าคงที่ของโบลทซ์มานน์ และ T คือ อุณหภูมิในหน่วยเคลวิน และการคำนวณหาค่าคาดหวัง $\langle Q \rangle$ ของปริมาณที่ต้องการวัดค่า Q นั้น สามารถหาได้จากค่าเฉลี่ยของปริมาณ Q ที่ถ่วงน้ำหนักด้วยความน่าจะเป็นของโบลทซ์มานน์ คือ

$$\langle Q \rangle = \frac{\sum_{\mu} Q_{\mu} \exp(-\beta E_{\mu})}{\sum_{\mu} \exp(-\beta E_{\mu})} \quad (4)$$

$$\text{โดยที่ } \beta = \frac{1}{k_B T}$$

อย่างไรก็ตาม ในกรณีที่สถานะที่เป็นไปได้ของระบบมีจำนวนมากจะใช้เวลามากในการคำนวณหาค่าเฉลี่ยจากสถานะทั้งหมด ดังนั้นในการคำนวณจริงจะสุ่มเลือกตัวอย่างสถานะมาจำนวน M สถานะ(ในจำนวนมากพอ) แล้วละสถานะอื่นๆที่ไม่สำคัญออกไปได้ แล้วหาค่าเฉลี่ยจาก M สถานะเหล่านั้นในการประมาณค่าของ $\langle Q \rangle$ ดังนั้นค่าเฉลี่ยของปริมาณ Q จากจำนวน M สถานะจะเปลี่ยนเป็น

$$Q_M = \frac{\sum_{\mu} Q_{\mu} P_{\mu}^{-1} \exp(-\beta E_{\mu})}{\sum_{\mu} P_{\mu}^{-1} \exp(-\beta E_{\mu})} \quad (5)$$

และเมื่อเลือกใช้การแจกแจงความน่าจะเป็นของโบลทซ์มานน์ (3) จะได้ว่า

$$Q_M = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M Q_{\mu_i} \quad (6)$$

โดยเมื่อจำนวนการสุ่มตัวอย่าง M มีค่าเข้าสู่นันต์จะได้ว่า Q_M เข้าสู่อันดับ $\langle Q \rangle$

2.3.3 วิธีเมโทรโพลิส (Metropolis)

โดยแนวคิดของขั้นตอนนี้คือการจำลองสถานการณ์ของระบบซึ่งกำหนดให้มีจำนวน N อนุภาค จะพบว่าวิธีที่จะเปลี่ยนสถานะจากสถานะ μ ไปยังสถานะ ν จะมีได้ทั้งหมด N วิธี ดังนั้นความน่าจะเป็นในการเลือกของแต่ละตัวจะเป็นไปตามสมการ

$$g(\mu \rightarrow \nu) = \frac{1}{N} \quad (7)$$

ด้วยเหตุนี้จากสมการ (8) จะเขียนได้ว่า

$$\frac{P(\mu \rightarrow \nu)}{P(\nu \rightarrow \mu)} = \frac{g(\mu \rightarrow \nu) A(\mu \rightarrow \nu)}{g(\nu \rightarrow \mu) A(\nu \rightarrow \mu)} = \frac{A(\mu \rightarrow \nu)}{A(\nu \rightarrow \mu)} = \exp(-\beta(E_\nu - E_\mu)) \quad (8)$$

สถานะใหม่ที่เกิดขึ้นนั้นถ้ามีพลังงานลดลงหรือเท่าเดิมจะยอมรับการเปลี่ยนสถานะนั้นทันที และเพื่อให้ขั้นตอนมีประสิทธิภาพมากที่สุด จะกำหนดให้อัตราการยอมรับมีค่าสูงสุด นั่นคือมีค่าเท่ากับ 1 ซึ่งจะเขียนได้ว่า

$$A(\mu \rightarrow \nu) = \begin{cases} e^{-\beta(E_\nu - E_\mu)} & \text{if } E_\nu - E_\mu > 0 \\ 1 & \text{otherwise} \end{cases} \quad (9)$$

สำหรับการพิจารณาถึงความน่าจะเป็นที่อะตอมจะมีการเปลี่ยนตำแหน่งนั้น จะพิจารณาจากความน่าจะเป็นของคาวาซากิ (Kawasaki probability)^(7,14,15) ที่มีรากฐานมาจากวิธีเมโทรโพลิส ในการอธิบายการเลื่อนตำแหน่งของอะตอม โดยมีรูปแบบคือ

$$\text{probability}(p) = \exp\left(-\frac{\Delta H}{k_B T}\right) \quad (10)$$

โดยที่ T คืออุณหภูมิในหน่วย J/k_B และ ΔH คือผลต่างของพลังงานจากการเปลี่ยนสถานะ

2.4 เลขสุ่ม

เลขสุ่มเป็นกลุ่มตัวเลขที่มีจำนวนของตัวเลขแต่ละตัวใกล้เคียงกัน โอกาสที่ตัวเลขแต่ละตัวจะถูกสุ่มขึ้นมาได้มีค่าเท่ากัน และเมื่อนำตัวเลขที่ถูกสุ่มมาเรียงกันตามลำดับ ตัวเลขตัวใดก็ตามในการเรียงนั้นจะไม่มีความสัมพันธ์เชิงคณิตศาสตร์กับตัวเลขตัวก่อนหน้าหรือตัวถัดไป เลขสุ่มแบ่งได้เป็นสองประเภทคือเลขสุ่มแท้และเลขสุ่มเทียม

เลขสุ่มแท้ คือเลขสุ่มที่มีในกลุ่มตัวเลขมีจำนวนของตัวเลขแต่ละตัวเท่ากัน เมื่อนำมาเรียงกันแบบสุ่มจะไม่เกิดรูปแบบที่ซ้ำกัน และโอกาสในการที่ตัวเลขถูกสุ่มมีค่าเท่ากัน เลขสุ่มแท้เกิดขึ้นได้ตามธรรมชาติ เช่น การลูกเต๋า, การสลายตัวของธาตุกัมมันตรังสี เป็นต้น

เลขสุ่มเทียม คือเลขสุ่มที่เกิดจากกระบวนการทางคณิตศาสตร์ โดยการใช้สมการเพื่อสร้างเลขสุ่มขึ้น การใช้สมการในการสร้างเลขสุ่มทำให้เกิดรูปแบบของเลขสุ่มที่แน่นอนตามสมการการสร้างเลขสุ่ม ทำให้สามารถคาดคะเนเลขตัวถัดไปจากเลขตัวก่อนหน้าได้ และทำให้เกิดชุดตัวเลขที่ซ้ำกันขึ้นในการเรียงเลขสุ่ม เลขสุ่มเทียมจึงต้องมีการทดสอบ และปรับปรุงเพื่อให้ชุดตัวเลขที่มีการซ้ำกันยาวมากขึ้นให้คล้ายกับว่าเลขสุ่มที่ได้จะไม่มีการซ้ำกันเลย

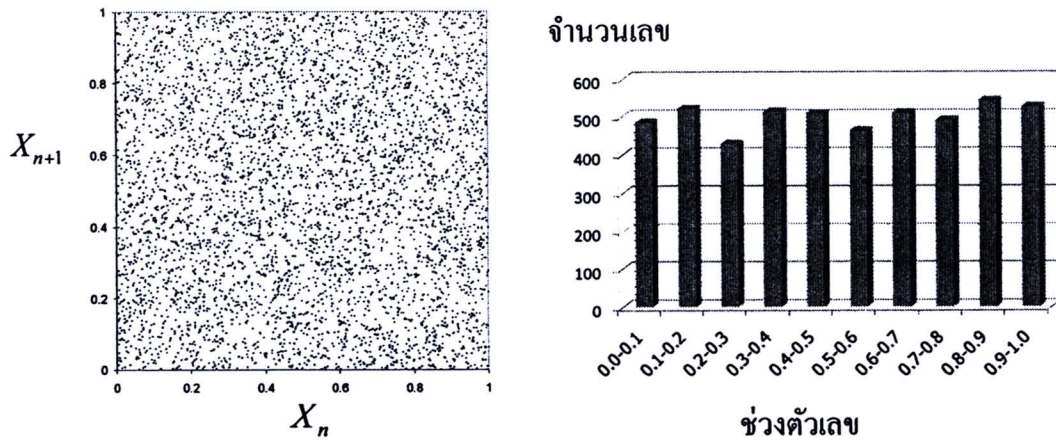
ในการวิจัยนี้จะใช้เลขสุ่มเทียม X_n ที่สร้างโดยโปรแกรม Visual Basic 6.0 ซึ่งสร้างเลขสุ่มในช่วง $[0,1)$ โดยตัวโปรแกรมเองจะมีตารางของชุดเลขสุ่มที่มีค่าตายตัวหลายๆตาราง แต่ละตารางเลขสุ่มจะถูกสร้างจากสมการในการสร้างเลขสุ่มเทียมคือ

$$X_{n+1} = (aX_n + c) \text{ Mod } 2^{24} \quad (11)$$

โดย $a = 1,140,671,485$ และ $c = 12,820,163$ เมื่อนำค่า X_{n+1} ไปหารด้วย 224 จะได้เลขสุ่มที่มีค่าในช่วง $[0, 1)$ โดยแต่ละตารางจะใช้ค่า X_0 ไม่เท่ากัน

ตัวเลขสุ่มที่ได้จากโปรแกรม ได้จากการดึงตัวเลขมาจากตารางนั้นๆ ผ่านชุดคำสั่งที่ใช้ในการดึงเลขสุ่มออกมาจากหลายๆตารางแบบสุ่ม ซึ่งเป็นเลขสุ่มที่ใช้ในงานวิจัยนี้ได้และทดสอบแล้วว่ามีความถูกต้อง ผ่านการวิเคราะห์คุณภาพของเลขสุ่มจาก 2 วิธีดังต่อไปนี้ (ดังแสดงในรูป 2.9)

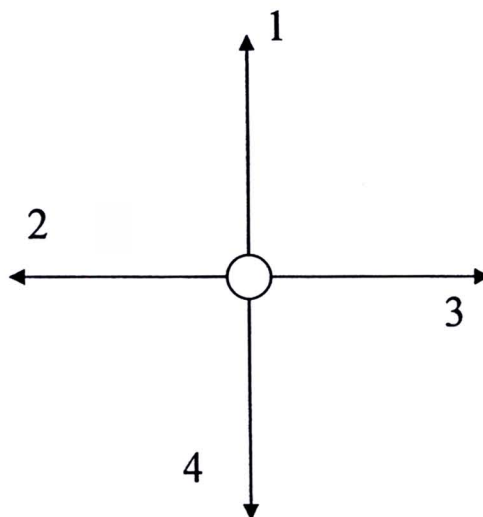
- 1) จากกราฟความสัมพันธ์ระหว่างค่าตัวเลขสุ่มตัวถัดไปกับค่าตัวเลขสุ่มตัวปัจจุบัน จะพบรูปแบบของจุดที่กระจายกระจายไร้ระเบียบ แสดงให้เห็นว่าเลขสุ่มตัวถัดไปไม่มีความสัมพันธ์ต่อเลขสุ่มตัวปัจจุบัน นั่นคือโอกาสที่จะเกิดชุดของเลขสุ่มที่ซ้ำมีน้อย
- 2) จากจำนวนเลขสุ่มในแต่ละช่วง พบว่าจากการสุ่มตัวเลขจากโปรแกรม 5000 ตัว และนับจำนวนของช่วงตัวเลข 10 ช่วง เมื่อนำไปเขียนกราฟจำนวนเลขสุ่มในแต่ละช่วง จะพบว่า มีเลขสุ่มในแต่ละช่วงเป็นจำนวนใกล้เคียงกัน แสดงว่าโอกาสที่จะเกิดเลขสุ่มแต่ละตัวมีค่าค่อนข้างใกล้เคียงกัน



รูป 2.9 (ซ้าย) กราฟความสัมพันธ์ระหว่างค่าตัวเลขสุ่มตัวถัดไป (X_{n+1}) กับค่าตัวเลขสุ่มตัวปัจจุบัน (X_n) และ (ขวา) กราฟแสดงจำนวนเลขสุ่มในแต่ละช่วงตัวเลข แสดงโอกาสเกิดเลขสุ่มที่มีค่าใกล้เคียงกัน

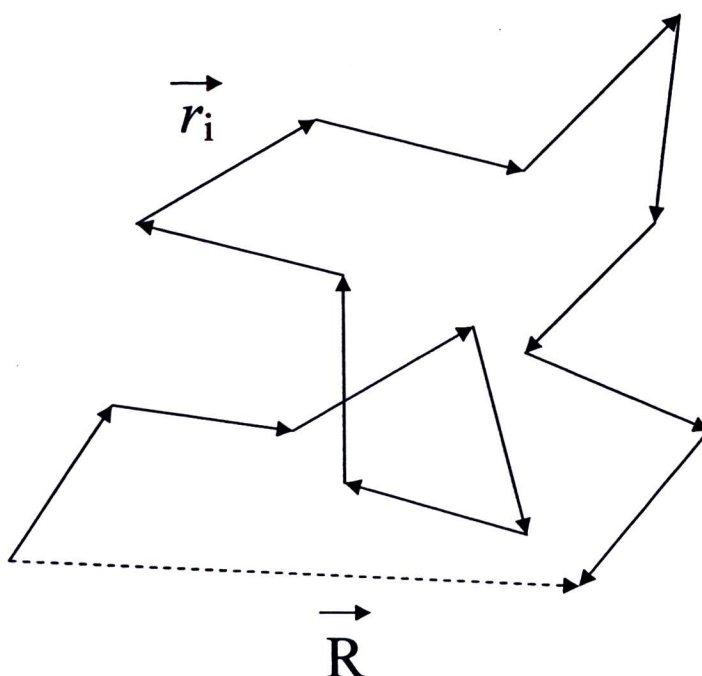
2.5 การเดินแบบสุ่ม

การเดินแบบสุ่ม เป็นลักษณะการเปลี่ยนตำแหน่งของจุดสังเกตหรืออนุภาคเป็นระยะทางแบบสุ่มและในทิศทางแบบสุ่มเมื่อเทียบกับตำแหน่งเดิม เช่นการเดินแบบสุ่มในโครงสร้างแลตทิซ 2 มิติที่มีทิศทางการเดินได้ 4 ทิศทางคือซ้าย ขวา หน้า และ หลัง ในกรณีที่มีการเดินแบบสุ่มมีโอกาสที่จะเดินไปแต่ละทิศทางเท่าๆกัน คือ $1/4$ ซึ่งสามารถสมมติตัวเลขในแต่ละเส้นทางเป็น 1 ถึง 4 ดังแสดงในรูป 2.10



รูป 2.10 แสดงทิศทางที่เป็นไปได้ในการเดินแบบสุ่ม

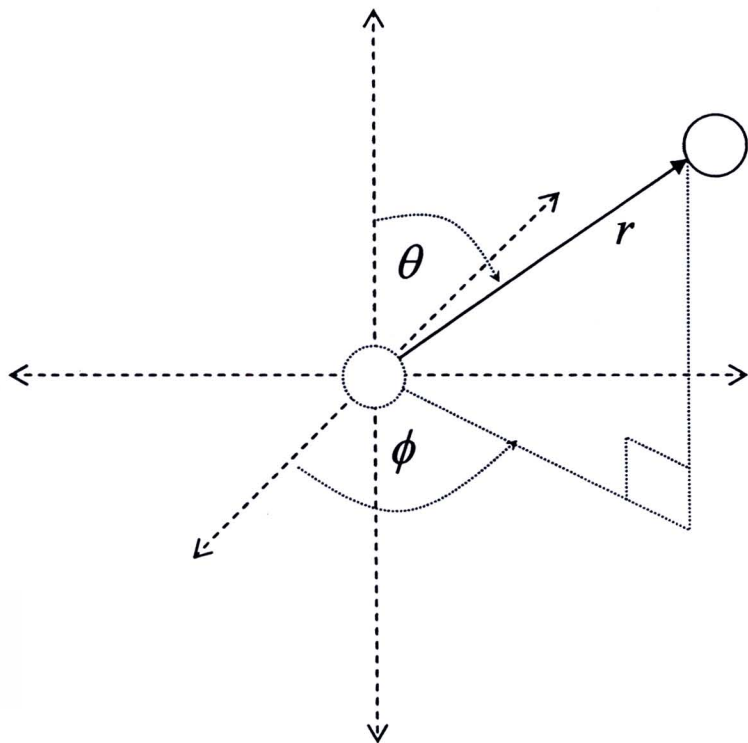
เพื่อให้เกิดการเดินแบบสุ่ม ทั้งนี้ในการเดินแต่ละครั้งจึงสุ่มตัวเลขจำนวนเต็มระหว่าง 1 ถึง 4 มาใช้ในการตัดสินใจเส้นทางที่ต้องการเดินไป การเดินสุ่มยังสามารถประยุกต์ใช้ในงานทางด้านอื่นๆ ด้วยอาทิเช่น ทางเศรษฐศาสตร์ จะใช้การเดินสุ่มเพื่อการจำลองทิศทางของอัตราแลกเปลี่ยนมูลค่าสินค้าซึ่งมีทฤษฎีทั้งแบบ ระยะยาวและระยะสั้น ทางด้านพันธุศาสตร์ประชากรจะใช้ในการจำลองเพื่อศึกษาความเป็นไปได้ทางสถิติที่ยีนจะมีการกลายพันธุ์ ทางด้านงานวิจัยเกี่ยวกับสมองจะใช้ในการสร้างแบบจำลองระบบประสาทของสมอง เป็นต้น



รูป 2.11 แสดงการเดินแบบสุ่มใน 2 มิติ

จากรูป 2.11 แสดงการเดินแบบสุ่ม ที่แต่ละครั้งการเดิน จุดสังเกตหรืออนุภาคจะเปลี่ยนตำแหน่งไปในทิศทางแบบสุ่ม โดยระยะห่างจากตำแหน่งเดิมมีค่าคงที่ ในการวิจัยนี้ระยะห่างจะถูกสุ่มจากระยะห่างสูงสุด(r) ที่กำหนดไว้และการสุ่มทิศทางใช้การสุ่มมุมที่กระทำกับแกนตั้ง (θ) ซึ่งอยู่ในช่วง 0 ถึง π และ แกนนอน(ϕ)ซึ่งอยู่ในช่วง 0 ถึง 2π จึงเป็นการเดินแบบสุ่มในปริภูมิต่อเนื่อง 3 มิติที่อนุภาคจะไม่ถูกจำกัดอยู่บนตำแหน่งที่แน่นอนเหมือนโครงสร้างแลตทิซที่นิยมใช้ในการสร้างเป็นแบบจำลองในการศึกษาสมบัติทางแม่เหล็ก แต่อนุภาคสามารถอยู่ในตำแหน่งใดๆก็ได้ การกำหนดตำแหน่งจะใช้พิกัดทรงกลม (r, θ, ϕ) ซึ่งเมื่ออนุภาคมีการเปลี่ยนแปลงตำแหน่ง ขนาดและทิศทางที่เปลี่ยนไปสามารถบอกได้จากพิกัดทรงกลมเช่นกัน(ดังแสดงในรูป 2.12)โดยการจำกัดขอบเขตของแก๊สให้อยู่ในทรงกลมรัศมี R ซึ่งการพิจารณาค่าตำแหน่งในสามมิติ ดังกล่าวข้างต้น เป็น

การพิจารณาในพิกัดทรงกลม โดยในการจำลองสถานการณ์นั้น สามารถพิจารณาได้ง่ายขึ้นด้วยการใช้พิกัดทรงกระบอกด้วยความสัมพันธ์ $x = r \sin \phi \cos \theta$, $y = r \sin \phi \sin \theta$ และ $z = r \cos \phi$



รูป 2.12 แสดงการกำหนดขนาดและทิศทางการเคลื่อนที่ใน 3 มิติตามพิกัดทรงกลม

จากการเดินแบบสุ่มนี้สามารถหาปริมาตรของระบบ ซึ่งคิดจากส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐาน (Standard deviation: *S.D.*) ของระยะทาง ดังสมการ (12)

$$S.D. = \sqrt{\frac{\sum (r_i - \bar{r})^2}{N}} \approx \sqrt{\overline{r^2} - \bar{r}^2} \tag{12}$$

โดย r คือระยะห่างระหว่างอนุภาคและคำนวณปริมาตรได้จาก

$$V = \frac{4}{3} \pi \sum (S.D.)^3 \tag{13}$$



2.6 ศักย์ยูคาวา (Yukawa potential)

ศักย์ยูคาวา (Yukawa potential) หรือศักย์สกรีนคูลอมป์ (Screened coulomb potential) แสดงได้ดังสมการ (14)

$$\varphi(r) = -K \left(\frac{\sigma}{r} \right) \exp \left(-\frac{r - \sigma}{\sigma} \right) \quad (14)$$

โดย r คือระยะห่างระหว่างอนุภาค K คือค่าคงที่พลังงาน และ σ คือระยะห่างน้อยที่สุดเท่าที่อนุภาคจะอยู่ห่างกันได้ (Cut-off length)

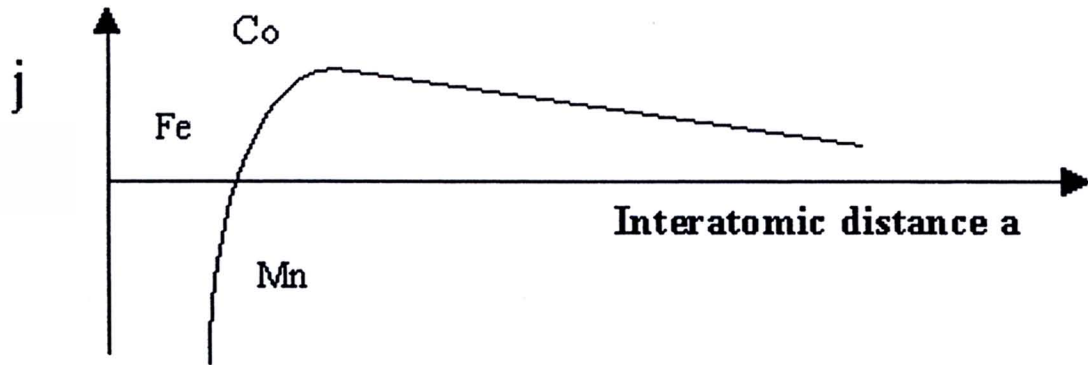
ศักย์รูปแบบนี้ได้ถูกคิดค้นขึ้นโดยนักฟิสิกส์ชาวญี่ปุ่น ชื่อฮิเดกิ ยูคาวา (Hideki Yukawa) ดังแสดงในรูป 2.13 ผู้ได้รับรางวัลโนเบลสาขาฟิสิกส์ในปี ค.ศ. 1949 ขณะสอนอยู่ที่มหาวิทยาลัยโคลัมเบีย (Columbia University) ประเทศสหรัฐอเมริกา และเป็นชาวญี่ปุ่นคนแรกที่ได้รับรางวัลโนเบล งานวิจัยที่ทำให้เกิดการพัฒนามากในวงการฟิสิกส์ของอนุภาคมูลฐาน (Elementary particle physics) คือ ทฤษฎีของเมซอน (Theory of mesons) ซึ่งถูกตีพิมพ์ในปี ค.ศ. 1935



รูป 2.13 ฮิเดกิ ยูคาวา นักฟิสิกส์ รางวัลโนเบลผู้เสนอแนวคิดศักย์ยูคาวา⁽¹⁹⁾

โดยทฤษฎีนี้อธิบายถึงอันตรกิริยาระหว่าง โปรตอน และนิวตรอน แม้การศึกษาครั้งนี้จะไม่เกี่ยวข้องกับความสัมพันธ์ในระดับอนุภาคมูลฐาน เนื่องจากศักย์ยูคาวามีการเปลี่ยนแปลงใกล้เคียงกับส่วนกลับของ Bethe-Staler Curve⁽¹⁸⁾ ซึ่งสามารถอธิบายอันตรกิริยาทางแม่เหล็กได้ดี ดังแสดง

ในรูป 2.14 ดังนั้นในการศึกษาครั้งนี้ ศักย์ยูควาจึงถูกใช้เพื่อศึกษาการเปลี่ยนแปลงของสารแม่เหล็ก

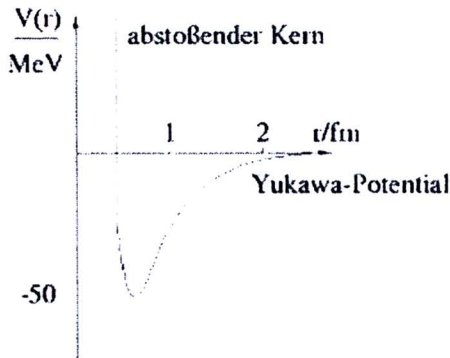


รูป 2.14 แสดง Bethe-Slater curve⁽²¹⁾

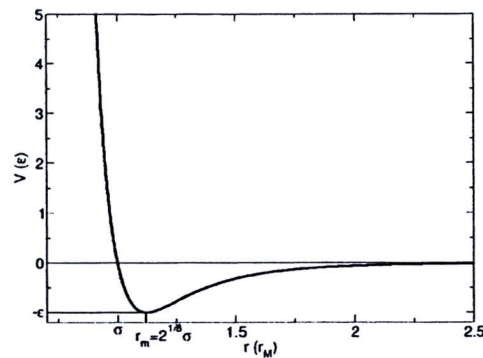
ศักย์ยูควาพิจารณาศักย์ที่เพิ่มขึ้นเนื่องจากผลของสนามสเกลลาร์ (Scalar field) ดังพิจารณาได้จากสมการ (14) ซึ่งแตกต่างจากศักย์คูลอมป์ (Coulomb potential) ที่เป็นที่รู้จักโดยทั่วไป เนื่องจากศักย์ยูควาพิจารณา อันตรกิริยาที่เกิดจากมวลของอนุภาค หากพิจารณาให้มวลเป็นศูนย์ในสมการศักย์ยูควา การพิจารณาก็จะถูกเปลี่ยนเป็นการพิจารณาศักย์คูลอมป์ โดยสมการคูลอมป์สามารถเขียนได้เป็น

$$\phi'(r) = K' \left(\frac{1}{r} \right) \quad (15)$$

โดย K' คือค่าคงที่ที่พลังงานหาอนุภาคเป็นประจุไฟฟ้าจะมีค่าเท่ากับ $q/4\pi\epsilon_0$ และ r คือระยะห่างระหว่างอนุภาคเมื่อเปรียบเทียบ ศักย์ยูควา และศักย์คูลอมป์ ดังแสดงใน รูป 2.15(ก)-(ข) ตามลำดับแล้ว จะสามารถสังเกตได้ชัดเจนว่า เมื่อระยะห่างระหว่างสองอนุภาคมีค่าลดลงถึงระดับหนึ่ง ศักย์ยูควาจะเพิ่มขึ้นอย่างฉับพลันเข้าสู่อนันต์ ในขณะที่ศักย์คูลอมป์เพิ่มขึ้นในอัตราที่น้อยกว่าการเพิ่มขึ้นของศักย์ยูควา



(ก)



(ข)

รูป 2.15 กราฟแสดง (ก) ศักย์ยูคาวาของศักย์ระหว่างนิวคลีออนสองตัว⁽²⁰⁾ และ (ข) ศักย์กลอมป์ของอะตอมที่เป็นกลางสองอะตอม⁽²²⁾

2.7 สมการฮามิลโทเนียน (Hamiltonian)

สมการฮามิลโทเนียนเป็นสมการทางพลังงานของระบบอนุภาคที่เคลื่อนที่อย่างอิสระ ในระบบจะมีอันตรกิริยาระหว่างกัน โดยอันตรกิริยาระหว่างกันนี้มีสมการการคำนวณหลายชนิดเช่น อันตรกิริยาระหว่างกันของไฮโดรเจนกับธาตุอื่นคือ H-Bond สมการพลังงานระหว่างอนุภาคของ Lennard-Jones เป็นต้นและที่นำมาใช้ในการวิจัยนี้คือ ศักย์ของยูคาวา (Yukawa Potential) สมการพลังงานที่ใช้ในการจำลองสถานการณ์เกี่ยวข้องกับ 2 กระบวนการคือ

2.7.1 พลังงานการย้ายตำแหน่งของอนุภาค

แต่ละตำแหน่งของอนุภาคจะมีอันตรกิริยาระหว่างอนุภาคตัวอื่นมากระทำซึ่งขึ้นอยู่กับระยะห่างอนุภาคซึ่งเมื่อรวมพลังงานเนื่องจากอันตรกิริยาระหว่างกันจะสามารถคำนวณพลังงานสมการฮามิลโทเนียนได้ดังสมการที่ (16)

$$H = \sum_{ij} \varphi(r_{ij}) \quad (16)$$

โดย $\varphi(r_{ij})$ คือศักย์ยูคาวาซึ่งเป็นอันตรกิริยาระหว่างอะตอมที่มีระยะห่างกัน r มีค่าดังนี้

$$\varphi(r) = \begin{cases} \infty & ; r < \sigma \\ -K \left(\frac{\sigma}{r} \right) \exp \left(-\frac{r-\sigma}{\sigma} \right) & ; r \geq \sigma \end{cases} \quad (17)$$

เมื่อ r_{ij} คือระยะห่างระหว่างอนุภาคที่สังเกต (i) กับอนุภาคตัวอื่น (j), K คือค่าคงที่พลังงาน และ σ คือระยะห่างน้อยที่สุดเท่าที่อนุภาคจะอยู่ห่างกันได้ (Cut-off length)

ศักย์ของ Lennard-Jones เป็นหนึ่งในศักย์ที่ใช้คำนวณอันตรกิริยาที่ขึ้นกับระยะห่างระหว่างอนุภาคได้เช่นกันมีค่าดังสมการ (18)

$$\varphi(r) = \varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] \quad (18)$$

เมื่อ ε คือตัวแปรพลังงานซึ่งเทียบได้กับความลึกของบ่อศักย์เมื่อระยะห่างระหว่างอนุภาคมีการเปลี่ยนแปลง

การย้ายตำแหน่งของอนุภาคหนึ่งๆ จะคิดจากผลต่างพลังงานของตำแหน่งก่อนย้ายที่กับหลังย้ายที่ โดยพลังงานของแต่ละตำแหน่งคำนวณได้จากอันตรกิริยาระหว่างอนุภาคนั้นกับอนุภาควัดอื่นๆ ทั้งระบบรวมกัน

2.7.2 พลังงานในการเปลี่ยนแปลงสมบัติของสปินแม่เหล็ก

พลังงานในการเปลี่ยนแปลงสมบัติทางแม่เหล็กคือพลังงานที่ทำให้สปินของแต่ละอนุภาคมีการเปลี่ยนแปลง โดยให้ขึ้นอยู่สนามแม่เหล็กภายนอก และศักย์ยูควาเสมือน จะได้สมการพลังงานดังสมการที่ (19)

$$H = \sum_{ij} \varphi(r_{ij}) S_i S_j - \sum_j h S_j \quad (19)$$

โดย h คือ สนามแม่เหล็กภายนอกซึ่งคำนวณตามสมการที่ (20)

$$h = h_0 \sin 2\pi f t \quad (20)$$

โดย h_0 คือแอมพลิจูดของสนามแม่เหล็กภายนอก f คือความถี่ของสนามแม่เหล็กภายนอกและ t คือเวลาในการจำลองสถานการณ์

สปินของอนุภาคจะมีการเปลี่ยนแปลงได้หรือไม่ขึ้นกับผลต่างของพลังงานก่อนการเปลี่ยนแปลงกับพลังงานหลังเกิดการเปลี่ยนแปลง

2.8 การจำลองสถานการณ์

ในการวิจัยนี้ใช้การจำลองสถานการณ์มอนติคาร์โลในการปรับปรุงสมบัติของระบบแก๊สสปินไอซิงที่เปลี่ยนไปตามเวลา ซึ่งในสถานะที่มีการเปลี่ยนแปลงอุณหภูมิ และสนามแม่เหล็กภายนอกนั้น สิ่งที่จะวิเคราะห์จากการจำลองสถานการณ์ได้แก่ปริมาตรของแก๊สสปินไอซิง และสมบัติทางแม่เหล็กได้แก่ สภาพแม่เหล็ก และ สภาพรับไว้ได้ทางแม่เหล็ก

ในการจำลองสถานการณ์จะแบ่งออกเป็นสองส่วนคือ การปรับเปลี่ยนการเคลื่อนที่ของแก๊สสปิน และการปรับเปลี่ยนทิศสปินของแก๊สสปินภายใต้ศักย์คูวาเสมือน ซึ่งทั้งสองส่วนขึ้นกับอุณหภูมิและสนามแม่เหล็กภายนอก โดยการจำลองสถานการณ์มอนติคาร์โลจะใช้ระเบียบขั้นตอนการจำลองสถานการณ์แบบเมโทรโพลิติส ดังนี้

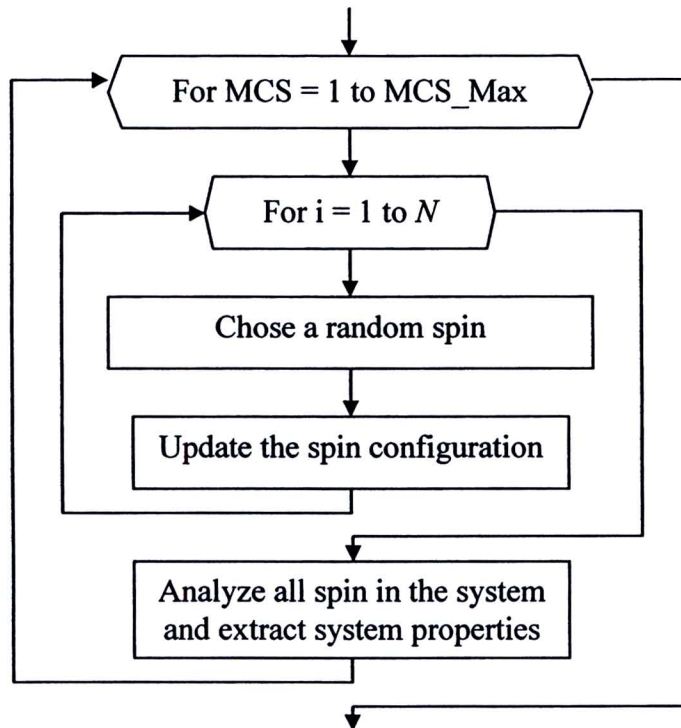
- 1) กำหนดสถานะเริ่มต้นของแก๊สสปินทั้งหมดในระบบได้แก่ ตำแหน่ง และ ค่าสปิน
- 2) สุ่มเลือกแก๊สสปินมา 1 ตัว แล้วคำนวณพลังงานของแก๊สสปินนั้น
- 3) ดำเนินการเปลี่ยนแปลงสถานะของแก๊สสปิน แล้วคำนวณพลังงานอีกครั้ง
- 4) คำนวณหาผลต่างของพลังงานจากการเปลี่ยนแปลงสถานะของแก๊สสปินเทียบกับพลังงานในขณะที่ยังไม่ได้เปลี่ยนสถานะ (ΔH)
 - 4.1) ถ้าผลต่างพลังงานเป็น ลบ จะยอมรับการเปลี่ยนสถานะในข้อ 3
 - 4.2) ถ้าผลต่างพลังงานเป็น บวก จะคำนวณความน่าจะเป็นของการยอมรับการเปลี่ยนสถานะจากสมการที่ (21)

$$P = \exp\left(\frac{-\Delta H}{k_B T}\right) \quad (21)$$

จากนั้นสุ่มตัวเลขในช่วง $[0,1]$ นำไปเปรียบเทียบกับความน่าจะเป็น(P) หากเลขสุ่มมีค่าน้อยกว่า P จะถือว่ายอมรับการเปลี่ยนสถานะในข้อ 3 แต่ถ้าเลขสุ่มมีค่ามากกว่าหรือเท่ากับ P จะถือว่าไม่ยอมรับการเปลี่ยนสถานะ

- 5) ทำซ้ำขั้นตอนที่ 2 ถึง ขั้นตอนที่ 4 เป็นจำนวนครั้งเท่ากับจำนวนอนุภาคในระบบ (N) คิดเป็น 1 รอบมอนติคาร์โล (Monte Carlo Step per Site : MCS)
- 6) ในแต่ละรอบมอนติคาร์โล จะสามารถทำการวัดและวิเคราะห์สมบัติทางแม่เหล็กตามเวลา(ในหน่วย MCS)ได้

สามารถเขียนพลังงานของลำดับการทำงานที่เปลี่ยนแปลงตามเวลาในหน่วย MCS ของระเบียบขั้นตอนการจำลองสถานการณ์แบบเมโทรโพลิติส ดังแสดงในรูป 2.16



รูป 2.16 แสดงผังงานของลำดับการทำงานของการทำงานจำลองสถานการณ์

2.9 งานวิจัยที่เกี่ยวข้อง

A. Ito, M. Shinkai, H. Honda และ T. Kobayashi⁽²⁾ ใช้ magnetic resonance imaging (MRI) ในการช่วยระบุตำแหน่งของสารแม่เหล็กที่แพร่ไปในร่างกายเพื่อให้สามารถระบุตำแหน่งที่ถูกต้องของบริเวณเนื้องอกที่ต้องการให้สารแม่เหล็กแพร่ไปได้ ทำให้การรักษาด้วยวิธีการ Hypothermia มีความแม่นยำมากขึ้นและส่งผลต่ออวัยวะอื่นน้อยลง ซึ่งวิธีการรักษาจะใช้ความร้อนที่เกิดขึ้นจากสารแม่เหล็กที่ถูกเหนี่ยวนำด้วยสนามแม่เหล็กภายนอก ซึ่ง A. Jordan, R. Scholz, K. Maier-Hau, M. Johannsen, P. Wust, J. Nadobny, H. Schirra, H. Schmidt, S. Deger, S. Loening, W. Lanksch และ R. Felix⁽³⁾ ได้มีศึกษาเกี่ยวกับสนามแม่เหล็กภายนอกที่ได้จากไฟฟ้ากระแสสลับ โดยมุ่งประเด็นการศึกษาผลลัพธ์ที่เกิดจากการใช้สนามแม่เหล็กไฟฟ้าเช่นพื้นที่ที่มีผลต่อความเข้มของสนามไฟฟ้า อุณหภูมิหรือพลังงานความร้อนที่เกิดขึ้น เป็นต้น เพื่อใช้ในการควบคุมในการทดลองจริง จากนั้น Sabine Müller⁽⁴⁾ ใช้การรักษาเนื้องอกในสมองโดยใช้ความร้อน hyperthermia นี้กับการทดลองรักษากับผู้ป่วยจริงแล้ว โดยในครั้งแรกได้ทำการรักษาผู้ป่วยเป็ผลสำเร็จจำนวน 14 คนและครั้งที่สองจำนวน 65 คน

ในการวิจัยครั้งนี้มีความสนใจที่จะศึกษาผลที่เกิดจากปรากฏการณ์ของการให้สนามแม่เหล็กภายนอกแก่อนุภาคที่มีการแพร่ ซึ่งงานวิจัยที่ผ่านมา A. L. Ferreira และ W. Korneta⁽¹⁰⁾ ได้

ใช้การจำลองสถานการณ์มอนติคาร์โล เพื่อศึกษาคุณสมบัติทางแม่เหล็กของของไหล ณ จุดวิกฤต โดยใช้แบบจำลองไอซิง 2 มิติ และใช้ศักย์คูวาเป็นพลังงานที่ขึ้นกับระยะห่างของอนุภาคเพียงรูปแบบเดียว การจำลองสถานการณ์ดังกล่าวถูกใช้เป็นพื้นฐานการศึกษาาระบบแม่เหล็กที่มีการแพร่ในงานวิจัยนี้ และได้เพิ่มเติมส่วนของการศึกษาทางแม่เหล็กโดยศึกษาจากงานวิจัยของ B. K. Chakrabarti และ M. Acharyya⁽¹¹⁾ ที่ศึกษาวิเคราะห์คุณสมบัติทางแม่เหล็กและการเปลี่ยนแปลงของวงรอบฮิสเทอรีซิสที่ขึ้นอยู่กับปัจจัยต่างๆ และงานวิจัยที่ใช้ศึกษาเป็นพื้นฐานของการแพร่ของอนุภาคเป็นของ C. Uebing และ R. Gomer⁽¹²⁾ ที่ศึกษาการแพร่ของแก๊สสปีนไอซิงในสองมิติบนโครงสร้างแลตทิส, E. Lomba, J. J. Weis, N. G. Almarza, F. Bresme และ G. Stell⁽¹³⁾ ที่ศึกษาอันตรกิริยาระหว่างอนุภาค ใช้ศักย์คูวาเพื่อแสดงถึงการเปลี่ยนแปลงเฟส ของระบบแม่เหล็กไฮเซนเบิร์ก ต่อเนื่องซึ่งเป็นระบบที่มีความซับซ้อนกว่าการใช้แบบจำลองไอซิงโดยใช้การจำลองสถานการณ์มอนติคาร์โลในการวิเคราะห์ผล แต่ศึกษาในระบบที่มีอุณหภูมิต่ำเท่านั้น และ J. R. Heringa, H. W. J. Blöte⁽¹⁴⁾ ที่ศึกษาการกระจายของกลุ่มอนุภาค เฉพาะบนพื้นที่สองมิติของระบบแม่เหล็กแบบไฮเซนเบิร์ก