



## 1. FPU problém s kubickou nelinearitou v pohybové rovnici

(modifikace programu fpu2.m)

Ve cvičení jsme studovali vliv nelinearity na numerické řešení pohybových rovnic. Konkrétně jsme se zabývali Fermi-Pasta-Ulamovým (FPU) problémem s kvadratickou nelinearitou, tj. kdy pohybová rovnice pro výchylky 1D oscilátoru má tento tvar:

$$\ddot{u} = (u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}) + \alpha [(u_{i+1} - u_i)^2 - (u_i - u_{i-1})^2], \quad (1)$$

kde  $\alpha$  byl jediným parametrem. Cílem tohoto zadání je modifikovat shora uvedený program pro studium FPU problému s *kubickým* nelineárním členem, tj. kdy pohybová rovnice má tento tvar:

$$\ddot{u} = (u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}) + \beta [(u_{i+1} - u_i)^3 - (u_i - u_{i-1})^3]. \quad (2)$$

Řešte tuto rovnici numericky pro  $\beta > 0$  (vaše volba) a sledujte, které módy vibrace jsou vybudzeny. Jaké jsou jednotky koeficientů  $\alpha$  a  $\beta$ ? Jak se mění řešení rovnice s kvadratickou a kubickou nelinearitou pro numericky stejné hodnoty  $\alpha$  a  $\beta$ ?



## 2. Fázový diagram 2D Isingova modelu na čtvercové mřížce s vlivem pole (modifikace programu ising2pd.m)

Ve cvičení jsme si ukázali, jak lze získat závislost magnetizace 2D Isingova modelu na teplotě. Cílem tohoto zadání je zmapovat fázový diagram 2D Isingova modelu v závislosti nejen na teplotě, ale také na síle magnetického pole. Pro zopakování, celková energie (Hamiltonián) feromagnetického Isingova modelu je

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j - h \sum_i s_i, \quad (1)$$

kde  $J > 0$  a druhý člen představuje část, kterou je třeba do programu dodělat. Zde  $h > 0$  představuje energii vnějšího magnetického pole. Proved'te sérii simulací pro různé hodnoty  $h$  a pomocí modifikovaného programu nahoře zjistěte odpovídající  $T_c$  (uvažujte, že  $T_c$  odpovídá průměrné magnetizaci spinu  $m = (1/N) \sum_{i=1}^N s_i = 0.5$ ). Jeden bod už máte (pro  $h = 0$ ). Nakreslete graf  $h$  vs.  $T_c$ , zakreslete kritickou čáru a pojmenujte fáze ve dvou získaných oblastech.



Akademický rok 2017/2018

Jméno a příjmení: .....

Datum: .....

---

### 3. Numerická integrace funkce jedné proměnné generováním náhodných čísel (modifikace programu `rndpi.m`)

Modifikujte tento program tak, aby byl schopen numericky integrovat jakoukoliv funkci jedné proměnné  $f(x)$  mezi předem známými hodnotami  $x_1$  a  $x_2$  a za předpokladu, že mezi těmito body nepřesáhnou funkční hodnoty předem dané meze  $f_{min}$  a  $f_{max}$  (vaše volba). Abyste ukázali, že tento program funguje, určete hodnotu integrálu

$$I = \int_{0.5}^3 \ln x \, dx \quad (1)$$

a srovnajte ji s analytickým řešením. Načrtněte závislost hodnoty  $I$  na počtu generovaných náhodných čísel (stačí pár bodů). Kolik náhodných čísel je třeba k určení  $I$  na čtyři desetinná místa?



#### 4. Algoritmus pro minimalizaci funkce $N$ proměnných metodou FIRE (modifikace rychlostního Verletova algoritmu)

V roce 2006 publikovali E. Bitzek et al. ve Physical Review Letters zajímavou metodu minimalizace funkce  $N$  proměnných, která je pro některé úlohy podstatně lepší než např. metoda konjugovaných gradientů. Vaším úkolem je přečíst si tento článek (dodám v PDF, jen 4 strany) a napsat funkci v Matlabu, která implementuje tuto metodu.

Jedná se o následující kroky:

##### START:

Máme dány počáteční pozice ( $\mathbf{x}$ ), rychlosti ( $\mathbf{v}$ ) a funkci  $E(\mathbf{x})$ , kterou chceme minimalizovat. Toto může být kterákoliv z funkcí, o kterých jsme se bavili (Rosenbrock, Himmelblau) nebo energie soustavy interagujících částic (viz. molekulární statika/dynamika). Uvažujme tyto doporučené parametry metody FIRE:

$$(N_{min}, f_{inc}, f_{dec}, \alpha_{start}, f_{\alpha}) = (5, 1.1, 0.5, 0.1, 0.99) . \quad (1)$$

Začneme v čase  $t = 0$  s vámi zvoleným časovým krokem  $\Delta t$ . Uvažujme  $\alpha = \alpha_{start}$ ,  $F_{tol} = 0.0001$  a zvolte si maximální krok  $\Delta t_{max}$ .

##### ALGORITMUS:

F0: Určete  $\mathbf{F} = -\nabla E(\mathbf{x})$ , což bude vektor se stejným počtem prvků jako  $\mathbf{x}$ . Pokud je  $|\mathbf{F}| < F_{tol}$ , našli jsme lokální minimum a algoritmus ukončíme. Pokud ne, pokračujeme dál...

F1: Určete projekci  $P = \mathbf{F} \cdot \mathbf{v}$

F2: Nastavte rychlosti  $\mathbf{v} := (1 - \alpha\mathbf{v}) + \alpha\hat{\mathbf{F}}|\mathbf{v}|$ , kde  $\hat{\mathbf{F}}$  je jednotkový vektor

F3: Pokud  $P > 0$  a počet kroků od iterace, kdy  $P$  bylo naposledy záporné, je větší než  $N_{min}$ , zvětšete časový krok na  $\Delta t := \min(\Delta t f_{inc}, \Delta t_{max})$  a nastavte  $\alpha := \alpha f_{\alpha}$

F4: Pokud  $P \leq 0$ , zmenšete časový krok na  $\Delta t := \Delta t f_{dec}$ , vynulujte rychlosti ( $\mathbf{v} = \mathbf{0}$ ) a nastavte  $\alpha = \alpha_{start}$

F5: Upravte pozice  $\mathbf{x} := \mathbf{x} + \mathbf{v}\Delta t + \mathbf{F}/(2m)(\Delta t)^2$

F6: Skok zpět na F0



Ústav materiálových věd a inženýrství  
Fakulta strojního inženýrství VUT v Brně  
**MODELOVÁNÍ MATERIÁLŮ II**

Akademický rok 2017/2018

Jméno a příjmení: .....

Datum: .....

---

## **5. Konstrukce simulačního bloku Heuslerovské slitiny $\text{Ni}_2\text{MnGa}$**

(modifikace programu `mkxtal.m`)

Heuslerovská slitina  $\text{Ni}_2\text{MnGa}$  je feromagnetický materiál s tvarovou pamětí, tzn., že vykazuje jak magnetickou tak strukturní fázovou přeměnu. Definujte primitivní translační a báze vektory tohoto materiálu (strukturu najdete na internetu). Implementujte tyto parametry do programu `mkxtal.m`. Zobrazte tuto strukturu v Matlabu, AtomEye nebo JMol. Ukažte několik charakteristických pohledů, popište směry a typy atomů.



## 6. Simulace heteroepitaxe argonu na substrátu s trojúhelníkovou symetrií (molekulární statika v programu LAMMPS)

Ze studia Lennard-Jonesova potenciálu víte, že základní stav argonu ve 2D odpovídá trojúhelníkové mřížce, v níž každý atom má 6 nejbližších sousedů. Vaším úkolem je studovat rozhraní mezi filmem Ar a substrátem (jiným materiálem trojúhelníkové struktury), který má ale menší mřížkový parametr. Zkonstruuje blok atomů trojúhelníkové mřížky tak, aby nejbližší vzdálenost mezi atomy byla  $0.8r_{eq}$  ( $r_{eq}$  je rovnovážná vzdálenost nejbližších sousedů ve skutečném Ar – znáte z přednášek). Velikost bloku v horizontálním směru bude min. 50 jednotkových buněk. V dolní části bloku bude vertikálně cca 5 jednotkových buněk, které budou představovat substrát a tyto atomy se tedy nebudou během relaxace pohybovat (příkaz `fix` s parametrem `setforce`). Ostatní atomy v horní části bloku (cca  $M$  jednotkových buněk) představují film a tyto se budou během relaxace pohybovat. Proveďte relaxaci této konfigurace pomocí molekulární statiky pro  $M = \{5, 20\}$ . Uvažujte periodické okrajové podmínky v rovině rozhraní a volné povrchy v kolmém směru. Zobrazte zrelaxovanou strukturu, kde barvy na atomech odpovídají jejich energiím. Pozorujete nějaký rozdíl ve struktuře rozhraní mezi filmem a substrátem pro malá a velká  $M$ ?



## 7. Celulární automat simulující skluz v granulárních materiálech

(modifikace programu `glife.m`)

Vaším cílem je modifikovat tento program tak, aby simuloval skluz zrn v granulárních materiálech anebo také skluz zeminy, pohyb laviny, apod. Tento celulární automat je postaven na následujícím jednoduchém algoritmu.

### START:

Definujme 2D pole  $f(x, y)$  tak, že  $f$  je všude nula, pouze  $f(N/2, N/2) = \infty$ , kde  $N$  je sudý počet buněk ve směru  $x$  a  $y$ . Místo nekonečna samozřejmě použijeme nějaké velké pozitivní celé číslo.

### ALGORITMUS:

V každé iteraci procházíme postupně všechny buňky. Pokud  $f(x, y) \geq 4$  tak:

$$\begin{aligned} f(x, y) &:= f(x, y) - 4 \\ f(x \pm 1, y) &:= f(x \pm 1, y) + 1 \\ f(x, y \pm 1) &:= f(x, y \pm 1) + 1 \end{aligned} \tag{1}$$

To znamená, že čtyři zrnka z pozice  $(x, y)$  sklouzla stejnoměrně na všechny sousední pozice ve směrech  $x$  a  $y$ .

Simulujte tento automat na mřížce  $64 \times 64$  po dobu nejméně 1000 iterací. Po vykreslení příkazem `pcolor` použijte také `caxis([0 5])` a `colorbar`, aby byla vidět struktura kopečku písku. Jak by se algoritmus nahoře změnil, když bychom chtěli simulovat neizotropní skluz zeminy? Realizujte jednu simulaci s těmito modifikovanými pravidly a ukažte rozdíly oproti chování modelu nahoře.



## 8. Morseův interakční potenciál

(viz. přednáška o Lennard-Jonesově potenciálu)

Morseův interakční potenciál je jedním z párových potenciálů, kde energie interakce mezi dvěma sousedícími atomy závisí pouze na jejich vzdálenosti. Je definován takto:

$$V(r) = D \left[ 1 - e^{-\beta(r-r_0)} \right]^2, \quad (1)$$

kde  $D$ ,  $\beta$  a  $r_0$  umožňují parametrizovat tento potenciál pro konkrétní materiál. Morseův potenciál pro molekulu  $H_2$  je popsán těmito parametry:  $D = 4.75$  eV,  $\beta = 1.93 \text{ \AA}^{-1}$ ,  $r_0 = 7.41$  pm. Uvažujte stejnou cut-off funkci jako jsme použili v případě Lennard-Jonesova potenciálu. Určete hodnoty parametrů  $A$  a  $B$  v této cut-off funkci za předpokladu, že tato nahradí Morseův potenciál pro vzdálenosti atomů  $r$  mezi  $2.5r_0$  a  $3r_0$  (pro  $r \geq 3r_0$  budeme atomární interakce ignorovat). Vykreslete tento potenciál vč. cut-off funkce v Matlabu.



## 9. Vliv vlastního přetvoření na mikrostrukturu feroelastického materiálu (modifikace programu `twinning.m`)

Při studiu metod fázového pole jsme si ukázali, že v případě Fe-30at.%Pd dochází ke strukturnímu fázovému přechodu 1. druhu z vysokoteplotní kubické fáze do nízkoteplotní tetragonální fáze. K tomuto fázovému přechodu dochází okolo 270 K. Cílem tohoto zadání je studovat vliv tzv. vlastního přetvoření na charakter mikrostruktury u tohoto materiálu (veškeré parametry máte). Předpokládejte, že volná energie tohoto materiálu je popsána funkcí

$$F = \int d\mathbf{x} [f_{nop} + f_{op} + f_{grad}] , \quad (1)$$

kde jednotlivé komponenty tohoto integrandu jsou definovány vztahy:

$$\begin{aligned} f_{nop} &= \frac{A_1}{2} e_1^2 + \frac{A_3}{2} e_3^2 \\ f_{op} &= \frac{A_2^0(T - T_c)}{2} (e_2 - e_2^0)^2 + \frac{B}{4} (e_2 - e_2^0)^4 + \frac{C}{6} (e_2 - e_2^0)^6 \\ f_{grad} &= \frac{K_2}{2} |\nabla e_2|^2 \end{aligned} \quad (2)$$

a  $e_2^0$  je vlastní přetvoření. Toto pole se využívá např. pokud chceme do simulace vložit deformaci způsobenou defekty, kde by ale  $e_2^0$  bylo proměnné (dá se určit z pole napětí okolo této dislokace). Nicméně, v tomto zadání je  $e_2^0$  pro jedoduchost uvažováno jako homogenní. Vaším úkolem je implementovat  $e_2^0$  do programu nahoře a realizovat tři simulace na bloku  $128 \times 128$  – pro  $e_2^0 = \{0, \pm 0.02\}$ . Všechny simulace ukončete po stejném počtu iterací. Zajímá mě hlavně prostorové rozložení parametru uspořádání  $e_2$ . Co by mohlo fyzikálně způsobit toto homogenní pole  $e_2^0$  v našem případě?



Ústav materiálových věd a inženýrství  
Fakulta strojního inženýrství VUT v Brně  
**MODELOVÁNÍ MATERIÁLŮ II**

Akademický rok 2017/2018

Jméno a příjmení: .....

Datum: .....

---

## 10. Fázový diagram Swift-Hohenbergova modelu

(modifikace programu `sh.m`)

Cílem této práce je určit fázový diagram Swift-Hohenbergova modelu pro různé hodnoty parametrů  $q_0$  a  $\alpha$  za předpokladu, že  $\epsilon = 0.1$ . Konkrétně, realizujte sérii simulací pomocí programu nahoře pro různé hodnoty  $q_0$  a  $\alpha$  a pro každou kombinaci určete numericky rovnovážné pole  $\psi(\mathbf{x})$ . Identifikujte pozice kritických čar (křivek?) které oddělují domény odlišných fází. Pro každou doménu zobrazte a pojmenujte charakteristickou fázi.



## 11. Dráha minimální energie pomocí metody Nudged Elastic Band

(modifikace programu `neb.m`)

Předpokládejte, že energie dvou hypotetických částic je popsána Styblinski-Tangovou funkcí

$$E(x_1, x_2) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^2 (x_i^4 - 16x_i^2 + 5x_i) , \quad (1)$$

kde  $x_1$  a  $x_2$  jsou pozice těchto dvou částic. Vaším úkolem je modifikovat program `neb.m` tak, aby ho bylo možné použít s funkcí nahoře. Otestujte, že funguje správně tím, že určíte dráhu minimální energie mezi body  $(-3, -3)$  a  $(3, 3)$ . Nejprve si tuto funkci ale vykreslete v Matlabu nebo v jakémkoliv jiném programu (stačí pro  $x_1$  a  $x_2$  mezi  $\pm 5$ ).



Ústav materiálových věd a inženýrství  
Fakulta strojního inženýrství VUT v Brně  
**MODELOVÁNÍ MATERIÁLŮ II**

Akademický rok 2017/2018

Jméno a příjmení: .....

Datum: .....

---

## **12. Zatěžování izotropního materiálu s trhlinou v módu I**

(modifikace programu `fem.m`)

Uvažujte 2D izotropní materiál (podmínka rovinné deformace) s trhlinou vycházející z povrchu kolmo na směr vnějšího normálového zatížení. Proveďte diskretizaci studované oblasti pomocí čtyřúhelníkových izoparametrických prvků (QUAD4). Na spodní stěně bude materiál vetknut bez možnosti posuvu v jakémkoliv směru. Na horní stěně aplikujte tahové vnější zatížení v několika krocích a sledujte, jak se materiál deformuje. Pro konfigurace získané pro dvě rozdílná vnější napětí určete rozložení von Misesova napětí a identifikujte nebezpečné místo.



### 13. Extrémy a stabilita parametrů uspořádání pro fázový přechod 1. druhu (viz. přednáška o metodách fázového pole)

Fázové přechody lze velmi dobře studovat metodami fázového pole. Hlavními kroky jsou: (i) identifikace parametru uspořádání, a (ii) formulace volné energie jako funkcionálu tohoto parametru uspořádání, přičemž volná energie musí být invariantní vzhledem ke všem operacím symetrie fáze s vyšší symetrií. Označme tento parametr uspořádání jako  $\eta(\mathbf{x})$ , což je skalární funkce, která závisí na pozici  $\mathbf{x}$  na mříži diskretizující studovaný prostor. V případě fázového přechodu 1. druhu má lokální část funkcionálu volné energie tvar

$$F[\eta] = \int d\mathbf{x} \left( \frac{\alpha}{2} \eta^2 + \frac{\beta}{4} \eta^4 + \frac{\gamma}{6} \eta^6 \right), \quad (1)$$

kde  $\alpha = \alpha_0(T - T_c)$  a  $\alpha_0 > 0$ ,  $\beta < 0$ ,  $\gamma > 0$ . Odvoďte vztahy pro extrémy volné energie, tj. extrémy jejího integrandu  $f(\eta)$ , a určete pro jaké  $\Delta T$  se jedná o minimum a maximum. Vysvětlete tvar závislosti  $f(\eta)$ , kterou jsme si ukázali pro fázový přechod 1. druhu v přednášce. V čem se tato závislost liší od té pro fázový přechod 2. druhu (tj. když  $\beta > 0$  a  $\gamma = 0$ )?



#### **14. Mapování fázového diagramu PFC modelu**

(použití programu `pfc.m`)

Ve fázovém modelu krystalu (PFC = phase field crystal) je zachován integrál parametru uspořádání ( $\psi$ ) přes studovaný prostor, kde  $\psi$  lze jednoduše převést na hustotu hmoty ( $\rho$ ). Tento model závisí na parametrech  $\epsilon$ ,  $q_0$  a  $\psi_0$ , jejichž význam jsme si vysvětlili v přednášce. Vaším úkolem je zmapovat fázový diagram tohoto modelu změnou parametrů  $\epsilon$  a  $\psi_0$ , přičemž  $q_0$  a všechny ostatní parametry nechte nastavené na hodnoty, které jsme použili ve cvičení. Výsledkem vašeho snažení bude diagram  $\epsilon$  vs.  $\psi_0$ , ve kterém identifikujete (zhruba) pozice kritických křivek. Ke každé oblasti přidělíte obrázek a pojmenujete získanou mikrostrukturu.



## 15. Simulace struktury bivakance v mědi

(použití programu LAMMPS)

Cílem tohoto zadání je určit rozložení atomů v okolí bivakance v mědi pomocí simulace v programu LAMMPS za teploty 0 K s využitím EAM potenciálu uloženého v souboru `Cu_mishin1.eam.alloy`. Simulační buňka bude tvořena  $4 \times 4 \times 4$  jednotkovými FCC buňkami s periodickými okrajovými podmínkami ve všech směrech a počátečním mřížkovým parametrem  $a = 3.5 \text{ Å}$ . Nejdříve relaxujte tuto buňku za konstantního tlaku  $p = 0$ , tj. umožněte změnu tvaru a velikosti boxu (příkaz `fix` s parametrem `box/relax`). Jaká je velikost rovnovážného mřížkového parametru, celková energie bloku atomů a energie jednoho atomu? Poté odstraňte dva atomy pomocí příkazu `create_atoms` – uvažujte tři případy, kde tyto atomy tvoří:

- první nejbližší sousedy
- druhé nejbližší sousedy
- třetí nejbližší sousedy

Relaxujte takto modifikovanou simulační buňku za konstantního tlaku  $p = 0$  a poznamenejte si celkovou energii bloku atomů. Zobrazte takto získané struktury a komentujte jejich charakter. Pro všechny tři případy nahoře určete formační energie těchto bivakancí.



## 16. Simulace struktury intersticiálu v mědi

(použití programu LAMMPS)

Cílem tohoto zadání je určit rozložení atomů v okolí intersticiálního atomu v mědi pomocí simulace v programu LAMMPS za teploty 0 K s využitím EAM potenciálu uloženého v souboru `Cu_mishin1.eam.alloy`. Simulační buňka bude tvořena  $4 \times 4 \times 4$  jednotkovými FCC buňkami s periodickými okrajovými podmínkami ve všech směrech a počátečním mřížkovým parametrem  $a = 3.5 \text{ \AA}$ . Po vytvoření této simulační buňky vložte extra atom – uvažujte tři případy, kde tento extra atom je vložen:

- mezi první nejbližší sousedy
- mezi druhé nejbližší sousedy
- mezi třetí nejbližší sousedy

pomocí příkazu `create_atoms`. Relaxujte takto modifikovanou simulační buňku za konstantního tlaku  $p = 0$ , tj. umožněte změnu tvaru a velikosti boxu (příkaz `fix` s parametrem `box/relax`). Zobrazte takto získané struktury a komentujte rozložení atomů a energie na atomech v okolí intersticiálního atomu. Pro všechny tři případy nahoře určete formační energie těchto intersticiálů. Která je nejmenší? Odpovídá tato energie hodnotám určeným pomocí prvotních principů, které najdete v literatuře (na internetu)?





## 17. Simulace struktury bivačnice v molybdenu

(použití programu LAMMPS)

Cílem tohoto zadání je určit rozložení atomů v okolí bivačnice v molybdenu pomocí simulace v programu LAMMPS za teploty 0 K s využitím Finnis-Sinclairova potenciálu dle Acklanda a Thetforda uloženého v souboru `Mo.AT1.fs`. Simulační buňka bude tvořena  $4 \times 4 \times 4$  jednotkovými BCC buňkami s periodickými okrajovými podmínkami ve všech směrech a počátečním mřížkovým parametrem  $a = 3.0 \text{ Å}$ . Nejdříve relaxujte tuto buňku za konstantního tlaku  $p = 0$ , tj. umožněte změnu tvaru a velikosti boxu (příkaz `fix` s parametrem `box/relax`). Jaká je velikost rovnovážného mřížkového parametru, celková energie bloku atomů a energie jednoho atomu? Poté odstraňte dva atomy pomocí příkazu `create_atoms` – uvažujte tři případy, kde tyto atomy tvoří:

- první nejbližší sousedy
- druhé nejbližší sousedy
- třetí nejbližší sousedy

Relaxujte takto modifikovanou simulační buňku za konstantního tlaku  $p = 0$  a poznamenejte si celkovou energii bloku atomů. Zobrazte takto získané struktury a komentujte jejich charakter. Pro všechny tři případy nahoře určete formační energie těchto bivačnic.



## 18. Simulace struktury intersticiálu v molybdenu

(použití programu LAMMPS)

Cílem tohoto zadání je určit rozložení atomů v okolí intersticiálního atomu v molybdenu pomocí simulace v programu LAMMPS za teploty 0 K s využitím Finnis-Sinclairova potenciálu dle Acklanda a Thetforda uloženého v souboru `Mo.AT1.fs`. Simulační buňka bude tvořena  $4 \times 4 \times 4$  jednotkovými BCC buňkami s periodickými okrajovými podmínkami ve všech směrech a počátečním mřížkovým parametrem  $a = 3.0 \text{ Å}$ . Po vytvoření této simulační buňky vložte extra atom – uvažujte tři případy, kde tento extra atom je vložen:

- mezi první nejbližší sousedy
- mezi druhé nejbližší sousedy
- mezi třetí nejbližší sousedy

pomocí příkazu `create_atoms`. Relaxujte takto modifikovanou simulační buňku za konstantního tlaku  $p = 0$ , tj. umožněte změnu tvaru a velikosti boxu (příkaz `fix` s parametrem `box/relax`). Zobraďte takto získané struktury a komentujte rozložení atomů a energie na atomech v okolí intersticiálního atomu. Pro všechny tři případy nahoře určete formační energie těchto intersticiálů. Která je nejmenší? Odpovídá tato energie hodnotám určeným pomocí prvotních principů, které najdete v literatuře (na internetu)?



## 19. Isingův model s interakcemi mezi axiálními druhými sousedy

(modifikace programu `ising2.m`)

Hamiltonián Isingova modelu s interakcemi mezi axiálními druhými sousedy (tzv. ANNNI *axial next nearest neighbor interactions* model) je definován jako

$$H = -J_1 \sum_{(i,j)} (s_{i,j}s_{i+1,j} + s_{i,j}s_{i,j+1}) - J_2 \sum_{(i,j)} s_{i,j}s_{i,j+2} , \quad (1)$$

kde  $s_{i,j}$  je hodnota spinu na pozici  $i, j$  čtvercové mřížky,  $J_1 > 0$  a  $J_2 < 0$ . Opět budeme předpokládat, že každý spin může nabývat pouze hodnot  $\pm 1$ . Za teploty 0 K bude potenciální energie minimální, pokud oba členy Hamiltoniánu budou současně záporné a maximální možné v absolutní hodnotě. K tomuto dojde, pokud spiny na sousedních atomech budou mít souhlasnou orientaci (první člen) a zároveň spiny na druhých sousedech “nad sebou” budou mít opačné orientace (druhý člen). Tyto podmínky se samozřejmě vylučují, což vede ke geometrické frustraci, která se promítne do rozložení spinů na studované mřížce. Vaším úkolem je studovat rozložení spinů v tomto modelu na mříži  $128 \times 128$  za teplot  $T = \{0, 0.5, 1\} J_1/k_B$  pro  $\kappa \equiv -J_2/J_1 = 0.6$  podobně, jako jsme to udělali ve cvičení pro standardní 2D feromagnetický Isingův model.