

姓名	学号	班级	选题	论述	结论	总分

二维 Ising 模型的 Monte Carlo 模拟

物基一班 刘文杰 2013301020041

摘要：

本文通过 Monte Carlo 方法拟了二维 Ising 模型的铁磁相变现象。通过对模型物理意义的分析，揭示了铁磁相变的物理本质，展示了相变临界点附近许多有趣的物理现象，本文是计算物理的期末作业，相关代码请浏览我的 github 账号：crazygarfield。

关键词：Ising module 铁磁相变 Monte Carlo 方法

正文：

一、铁磁相变现象

一个系统如处在热力学的平衡态，且是一个各处物理和化学性质都相似的均匀体系，那么就称该体系构成物质的一个相。同一个物质体系的不同相间的转化成为相变。铁磁性是指某些材料在外磁场的作用下被磁化后（在本文中可以认为是给定了一个初始的磁场分布状态后），即使外磁场消失，依旧能够保持其磁化的状态，具有磁性。物质的磁性现象存在临界温度（居里温度），在该温度之上，铁磁性消失，变为顺磁性，该现象称为铁磁相变。

二、Ising 模型

为了较好的解释铁磁现象，引入本文的重点——Ising 模型，考虑晶格的每个格点 i 上有一自旋磁矩 s_i ，它只可以取向上（ $s_i = +1$ ）或向下（ $s_i = -1$ ）两种状态。每一个自旋都与其他自旋之间存在相互作用，对某两个自旋态而言，其相互作用的 Hamiltonian 为：

$$H_0 = -Js_i \cdot s_j$$

其中， J 是一个相互作用强度的参数。在这里特别强调，此处的自旋相互作用并不是自旋磁矩间的电磁相互作用，而属于一种量子力学效应。根据 pauli 不相容原理，两个电子不能处于完全相同的状态，如果两个电子的自旋平行，自选波函数近似相等，空间波函数的交叠很小，等效于一种排斥。同时 J 随距离的衰减很快，为方便起见，本文讨论的 Ising 模型只考虑最近邻的相互作用，在没有外磁场的情况下，系统的总能量为：

$$E = -J \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j$$

如果加进外磁场，系统的能量变为：

$$E = -J \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j - \mu H \sum_i s_i$$

以上就是简单的 Ising 模型，下面只需要对该模型进行严格求解，就可以得出比较准确的磁场，能量分布情况，然而 Ising 模型的求解并不是一件容易的事，只有一位 Ising 模型具有精确解，要求更高维度的解，就需要借助计算机等工具，通过一些算法来进行模拟，这其中蒙特卡洛算法可以说是既简单有精确地一种算法。

三、Monte Carlo 算法思路及细致平衡条件

Monte Carlo 模拟实质上属于一种随机模拟，将每个点概率的概率问题通过统计方法来求解。为方便起见，不妨假设一 $L \times L$ 的二维正方格子上的 Ising 模型，该体系与温度 T 的恒温热源良好接触，这是可以通过统计物理里的正则系宗来处理。为了达到系统处于平衡态时的状态量，需要对系统进行一定时间的观测。取其在时间上的平均值。下面对蒙特卡罗算法的具体过程做一说明：

1. 模拟开始，设定温度 T ，外磁场 H ，设定初始时刻每个自旋磁矩的方向（可以随意设定，观察时间足够长对结果影响不大，本次实验中设定所有自选向上）。

2. 反转其中一个自旋，计算发生反转所需能量 E_{flip} ，

如果： $E_{flip} \leq 0$ （保持自旋的反转状态，即该点发生反转所需能量为负值，一定能发生翻转）。

如果： $E_{flip} > 0$ 则其有一定概率翻转，此时我们生成一个 $[0, 1]$ 之间的随机数 r ，

如果： $r \leq e^{-E_{flip}/k_B T}$ 则保持该反转的状态。

反之：保持原状态不变。

3. 逐个反转所有的自旋（具体是逐行扫描还是随机扫描，在本次实验的预试验中，发现对结果影响不大，简便起见，后续实验程序都使用逐行扫描的方式。）

完成以上步骤，即完成了一个 Monte Carlo 步。

可以证明，上述过程满足所谓细致平衡条件，即： $P_1 W(1 \rightarrow 2) = P_2 W(2 \rightarrow 1)$ ， P_1, P_2

对应于系统处于平衡状态时两个微观结构的概率，即： $\frac{P_1}{P_2} = e^{\frac{E_2 - E_1}{k_B T}}$ 而细致平衡条件是系统

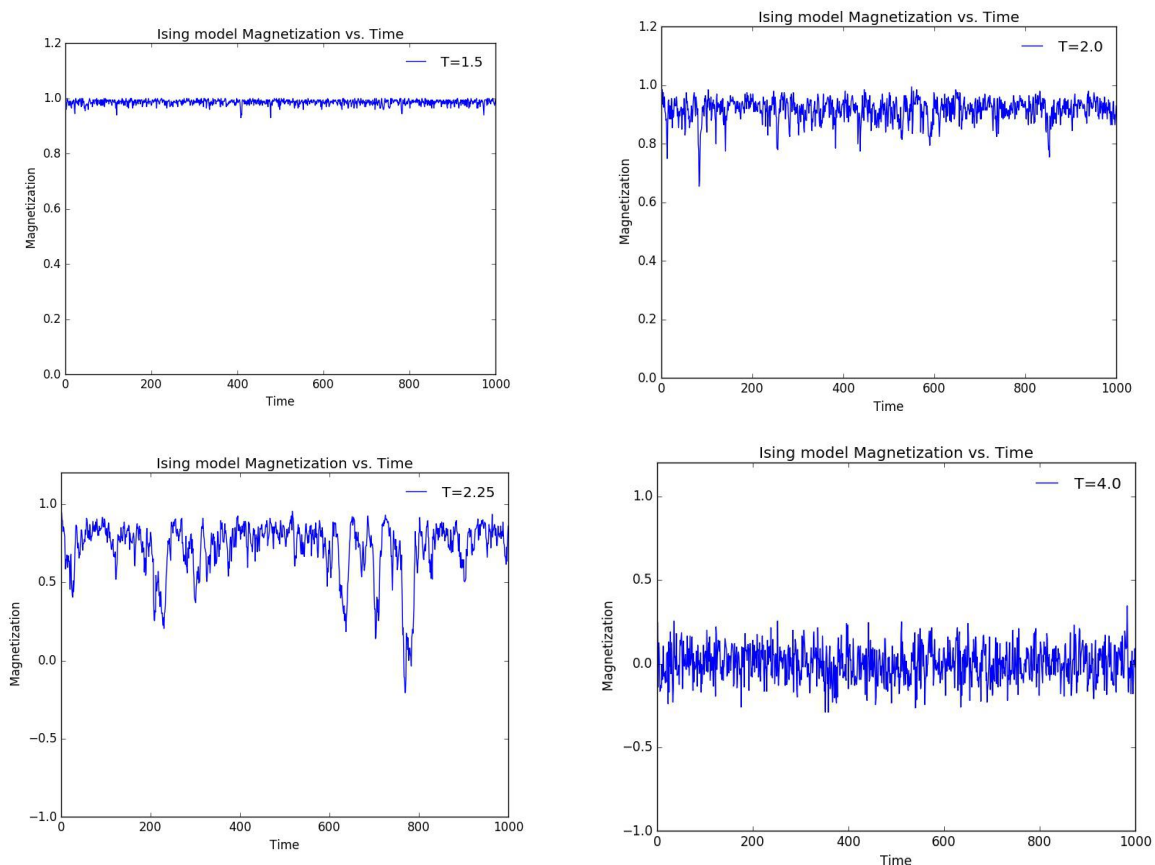
达到热力学平衡态的充分条件，所以我们可以认为当进行多次 Monte Carlo 步之后，系统会达到热力学平衡态。这说明虽然简单，但 Monte Carlo 算法具有合理性。

四、铁磁相变的 Monte Carlo 模拟

下面就通过 Monte Carlo 方法来对二维正方格子上的 Ising 模型进行模拟。理论上需要一无穷大体系，但这无法通过计算手段实行，受制于机器性能和编程水平，本次实验中作者取 $L=20$ 的正方格子体系，对于系统的边界，采用周期性边界条件。虽然这是一个极简模型，但依旧有很多有趣的物理性质体现了出来。

4.1 不同温度下平均自旋磁矩随 Monte Carlo 时间变的变化

首先研究不同温度下平均自旋磁矩随 Monte Carlo 时间的变化。结果如下图：



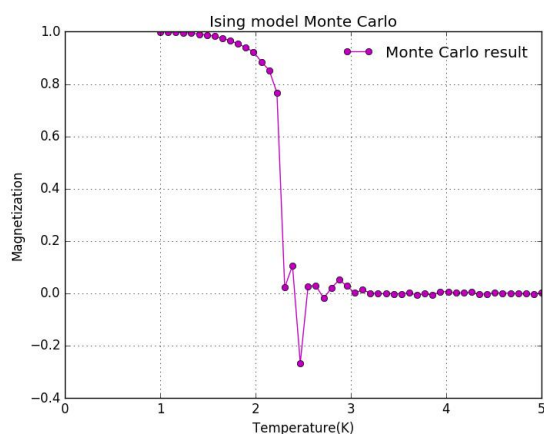
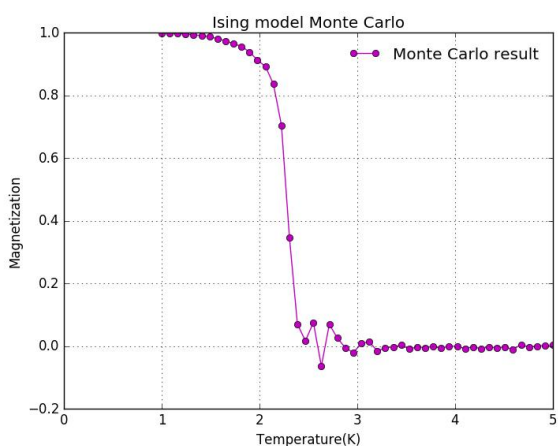
申明：为方便编程，这里及以下实验程序的温度统一以（J/kb）为单位。

从上面结果可以看到， $T=1.5$ 时，平均自旋磁矩接近于 1，并且涨落很小，这就对应于一个铁磁相，即外场为零时的自发磁化。当温度升高到 $T=2.0$ 时，平均自旋磁矩有所下降，磁矩的涨落有所增加。但自发磁化的现象依旧存在。当温度升到 $T=2.25$ 时，磁矩涨落变大。根据理论预测，二维正方晶格的临界温度为：

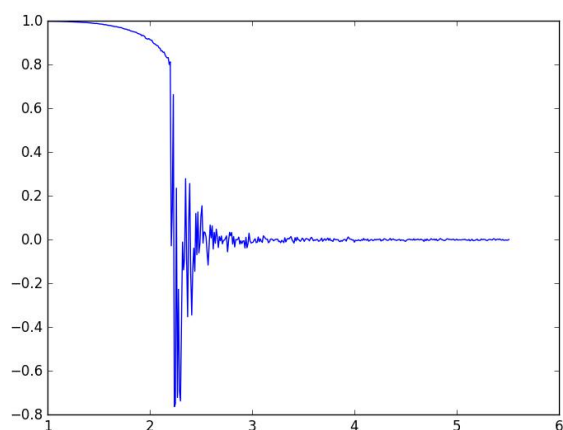
$$T_c = \frac{2}{\ln(1+\sqrt{2})} \approx 2.27$$

当 $T=2.25$ 时已经非常接近临界温度了。在临界温度附近，任何小的扰动都可能系统发生剧烈变化，这一点读者可以从下一节的例子中有更深的体会。当温度继续升高，到 $T=4.0$ 时，我们发现自旋磁矩基本为零，并且涨落也有所减小，这已经对用顺磁效应，证明系统确实发生了相变。

4.2 平均自旋磁矩随温度的变化



上一节中我们提到了在临界温度附近伴随着敏感的反应,这里有着很多有趣的物理现象。作者在这里编写实验程序模拟随着温度变化,体系的平均自旋磁矩随温度的变化,该图清晰地反映了随着温度的不断升高,系统从铁磁性逐渐表现为顺磁性,在临界温度附近,系统变得十分敏感,上图是两次模拟得到的结果,



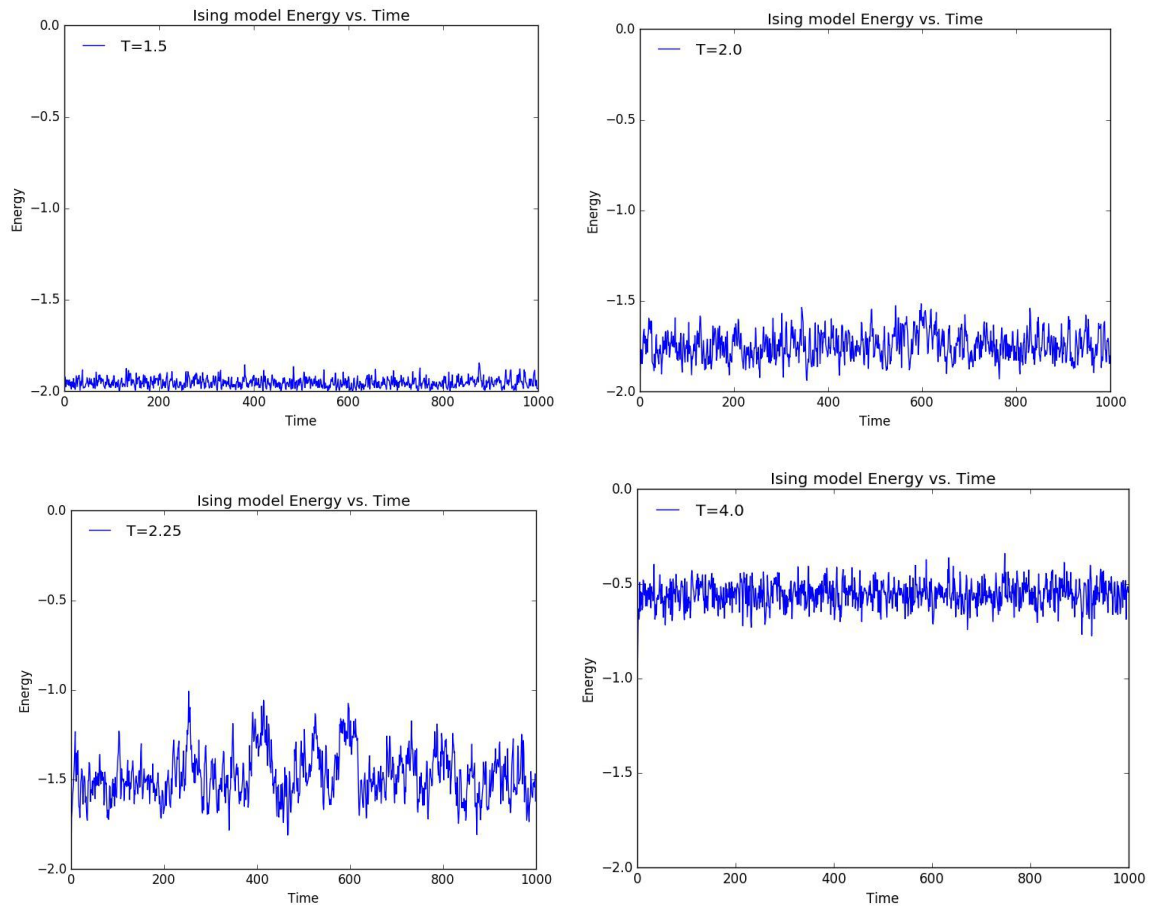
可以看到:在临界温度附近,涨落变得非常巨大,为什么本次实验的涨落如次巨大,可能是没有考虑弛豫时间的缘故,一般情况下,系统达到平衡所需的弛豫时间很短,但在临界点附近,需要的时间相对更长,这时将最开始一段的也算入了均值使得计算误差增加。

由理论结果,在临界温度附近,磁矩与温度满足关系:

$$M \sim (T_c - T)^\beta$$

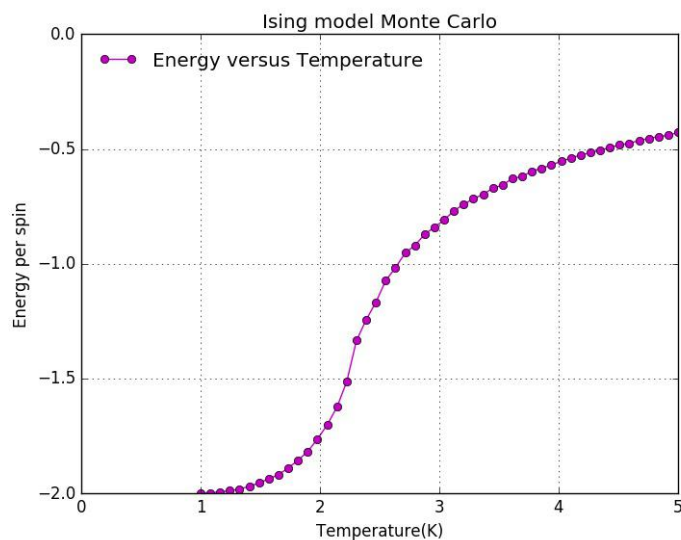
可以看到实验结果与理论的大体变化趋势基本一致,但幂次系数可能有所区别。

4.3 不同温度下每个磁矩的能量随 Monte Carlo 时间变的变化



接下来，进一步讨论能量关系，从上面结果可以看到， $T=1.5$ 时，单个磁矩的能量接近于 -2，并且涨落很小。当温度升高到 $T=2.0$ 时，能量减小，并且涨落有所增加。当温度升到 $T=2.25$ 时，能量涨落变大。说明此时磁矩在不断发生翻转。当温度进一步升高，能量继续减小，但此时，涨落已经非常小，系统达到新的稳定状态。

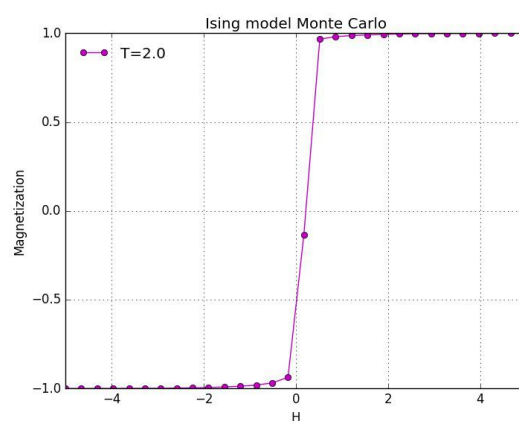
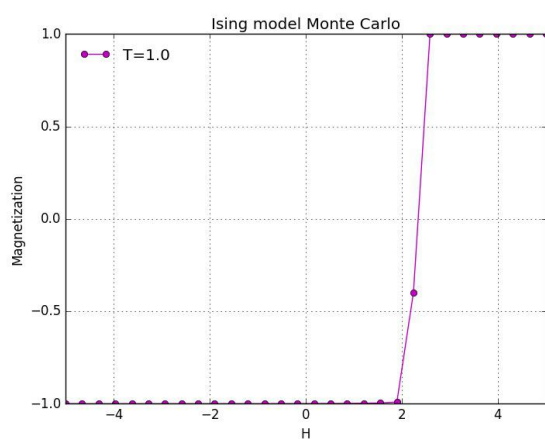
4.4 每个磁矩平均能量随温度的变化

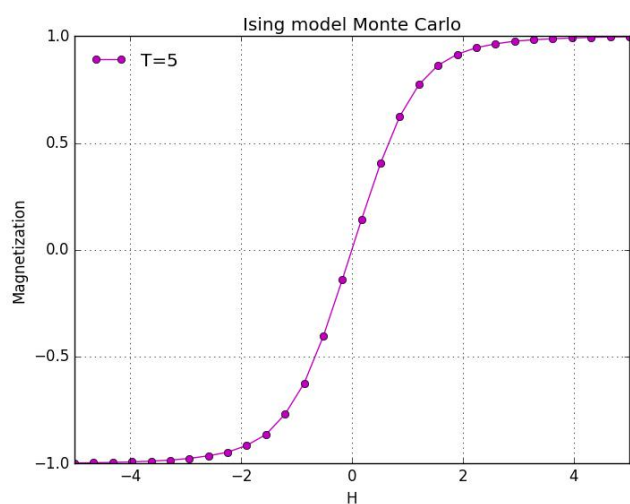
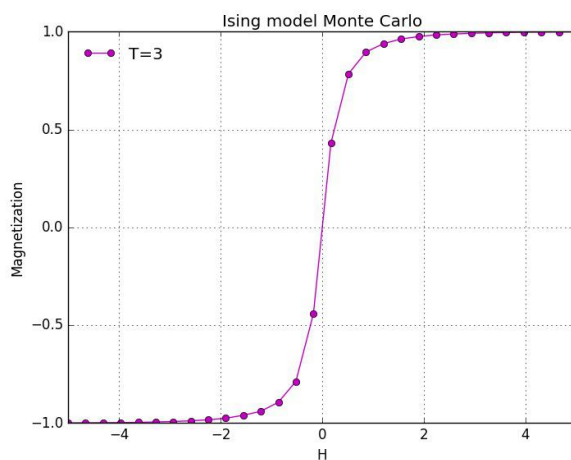
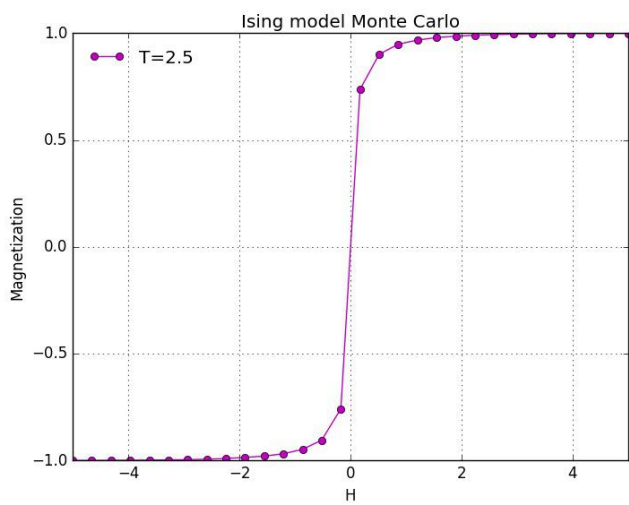


从结果可以看出，当温度趋于 0 时，每个自旋的平均能量趋于-2，这与理论分析一致，当温度很低时，自旋平均排列，相互作用的能量最低，每个自旋和最近邻的四个自旋相互作用，分配在每个自旋上的平均能量应该为-2，但温度升高，经过零界点，我们发现能量随温度的变化很快，这是比热系数发散的缘故。另一个有趣的现象是，当温度超过临界温度，虽然体系的平均自旋磁矩为 0，但平均能量不趋于 0。这是近邻自旋之间存在相互作用有关联的缘故。

4.5 有外场情况下的相变

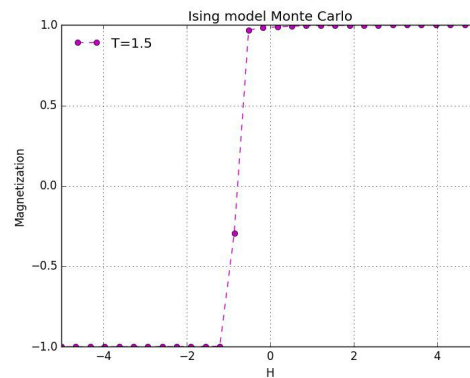
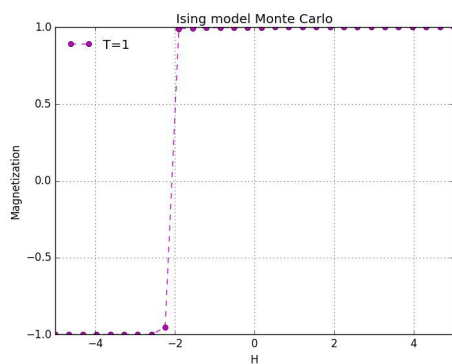
有外场情况下，总磁矩随外场的变化关系非常有趣：





上图是总磁矩在不同温度下随外场的变化，可以看出，在较低温度下，随着外磁场的反向，自旋总磁矩会立即反向，这是一级相变的特征，但随着温度的升高，自旋总磁矩随外场的变化渐趋平滑，一级相变特征消失。

4.6 有外场情况下的磁滞



磁滞现象同样也是一个有趣的现象，上图是外场从+5 逐渐变为-5 时的关系图，可以看到，磁滞的出现与外场的初始条件有关，发生磁滞的原因是，虽然磁场反相，但磁矩反向的概率依旧很低，产生磁滞。随着温度升高，磁滞现象会有所改善。

结论：

本次实验通过蒙特克隆方法求解了 Ising 模型下，有关铁磁相变与外场下的一级相变的相关物理问题，发现了很多有趣的物理现象。

致谢：

感谢徐少博同学这学期对我 python 基础语言的帮助，他总是耐心的给我一些建议，对我很有帮助。

引文：

《计算物理》

《热力学与统计物理》

以下网站：

<http://matplotlib.org/gallery.html>

<http://www.jb51.net/article/66441.htm>

<http://www.cnblogs.com/joyeecheung/p/4264990.html>

<http://blog.csdn.net/carson2005/article/details/40535225>

<http://csc.ucdavis.edu/~chaos/courses/nlp/Projects2007/JimMa/2DIsingReport.pdf>

https://en.wikipedia.org/wiki/Phase_transition