

# Phasenübergänge des Ising Modells

Monte Carlo Simulation

- Theorie und Grundlagen
- Das Programm
- Ergebnisse und Auswertung
- Cluster-Update-Verfahren
- Fazit

- Ising-Modell:
  - Spin  $s = -1$  oder  $s = 1$
  - Nearest-Neighbor-Approximation
  - >Hamiltonian:

$$\hat{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j - B \sum_{i=1}^N S_i$$

# Theorie und Grundlagen

- Simulation auf 2D oder 3D Gitter
- Monte Carlo:
  - Zufällige Startkonfiguration des Systems
  - Mittelwertbildung über die betrachteten Konfigurationen
  - Auswahl der Konfigurationen nach Importance Sampling

- Importance Sampling: Markov Kette
- Erreicht durch Metropolis-Algorithmus:
  - Akzeptiere neue Konfiguration  $j$  mit Wahrscheinlichkeit  $\min(1, p_j/p_i)$
  - $p_i$ : Wahrscheinlichkeit, in Konfiguration  $i$  zu sein

- Die Wahrscheinlichkeitsverteilung der Zustände ist die Boltzmann-Verteilung

$$P_i = \frac{1}{Z_k} e^{-\beta E_i}$$

- → Übergangswahrscheinlichkeit:

$$\min\{1, e^{-\beta \Delta E}\}$$

- Simulation von 2D- oder 3D-Gitter mit Kantenlänge  $N$
- Pro MC-Schritt werden  $N^{\text{dim}}$  zufällige Gitterpunkte betrachtet

Ablauf (betrachtung Gitterpunkt):

1. wähle zufälligen Gitterpunkt
2. berechne Energiedifferenz, die ein Flip zur Folge hätte
3. führe Flip aus mit Wahrscheinlichkeit

$$\min\{1, e^{-\beta\Delta E}\}$$

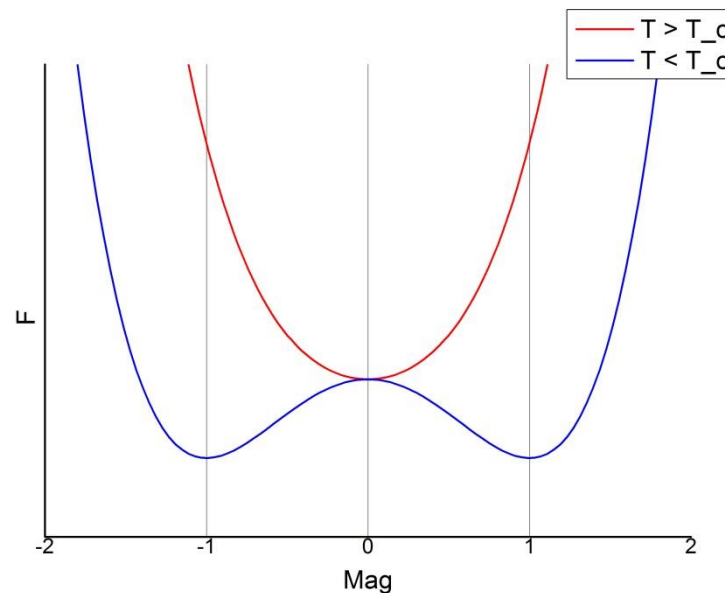
4. gehe zu 1.

- Nach zB 1000 MC-Schritten kann zB die Temperatur verändert und neu gestartet werden.

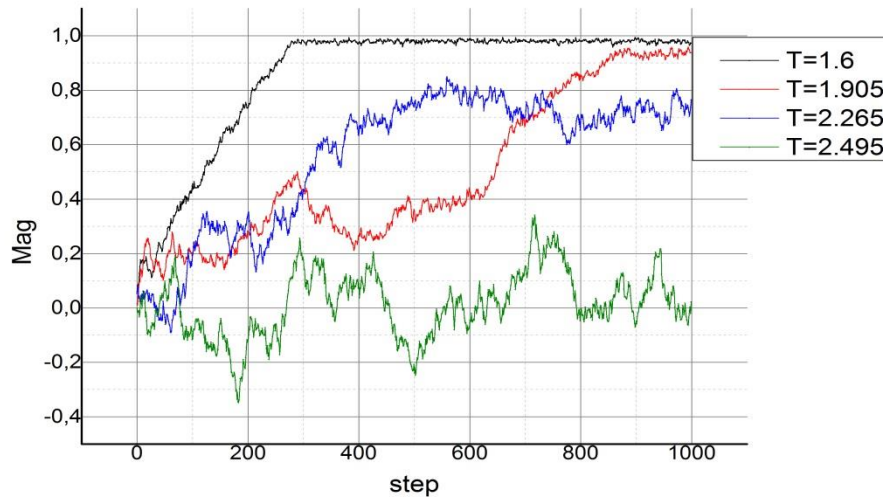


# Konvergenz des Metropolis-Verfahren

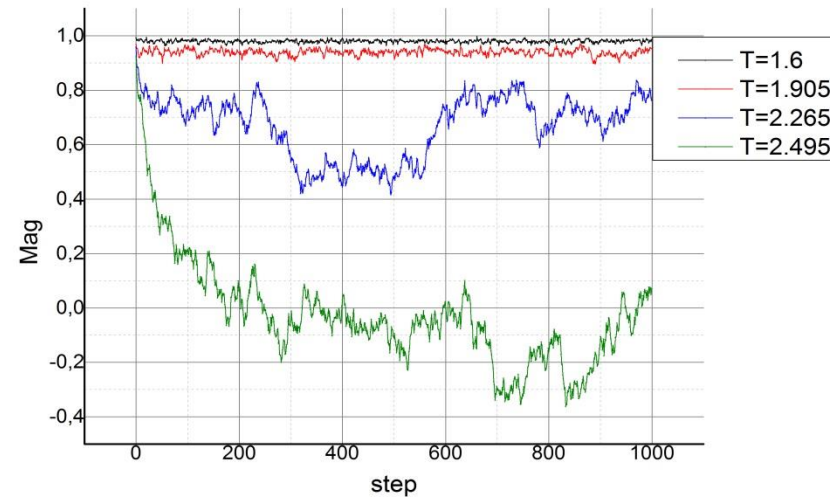
- Gitterkonfiguration konvergiert zu einer bestimmten inneren Energie  $E$
- Für diese Energie  $E$  besitzt die freie Energie  $F$  ein Minimum
- Gitterkonfiguration bestimmt auch Magnetisierung  $m$  des Systems.
- Folgerung: Magnetisierung  $m$  konvergiert.



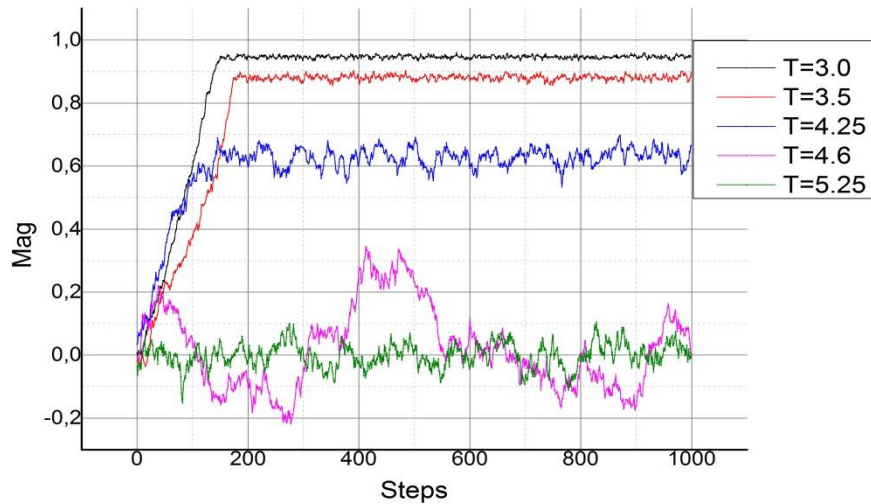
Schematischer Verlauf der freien Energie in Abhängigkeit der Magnetisierung bei verschiedenen Temperaturen



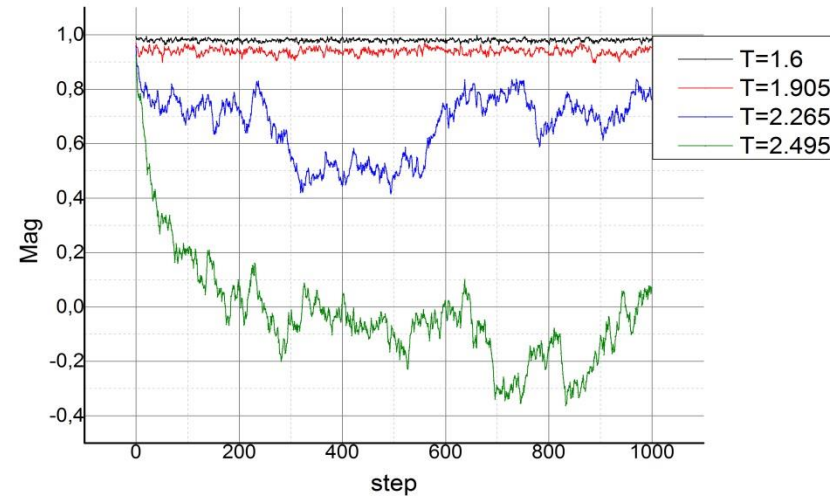
2D: zufällige Startkonfiguration



2D: positiv parallele Startkonfiguration

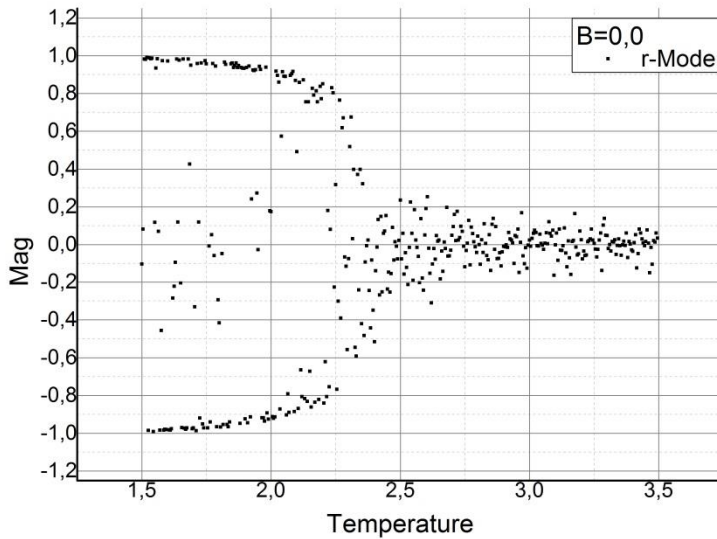


3D: zufällige Startkonfiguration

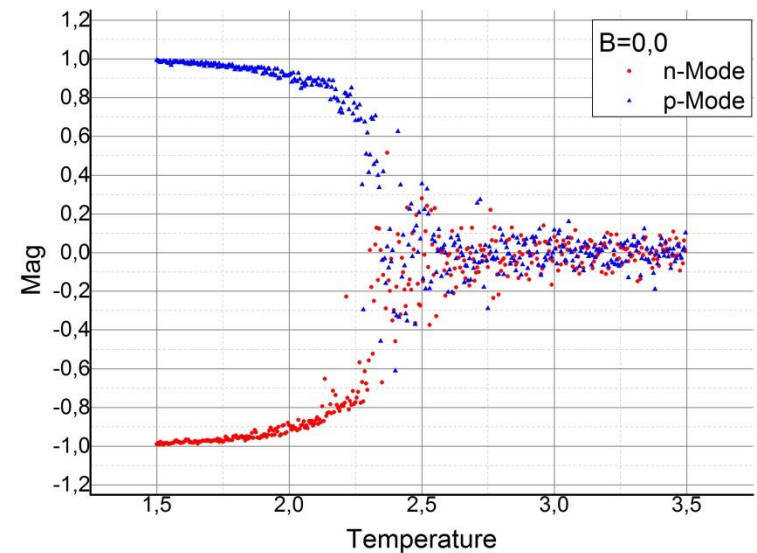


3D: positiv parallele Startkonfiguration

## Temperaturabhängigkeit der Magnetisierung des 2D-Gitters: Auswirkung der Startkonfiguration



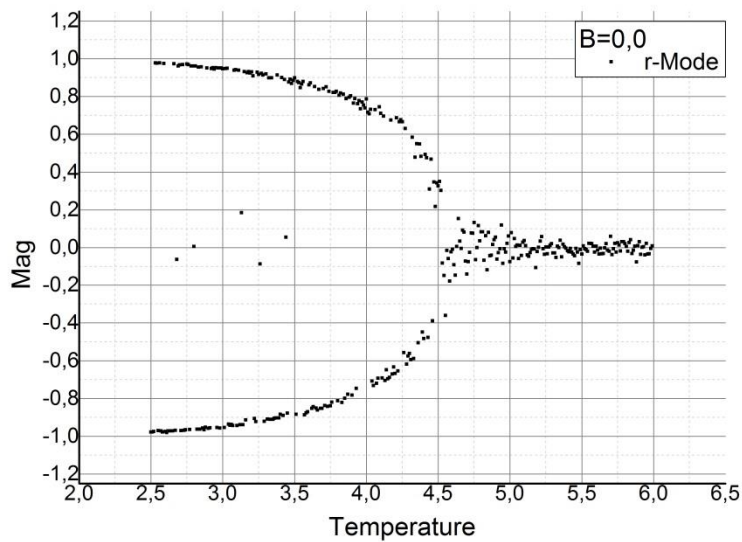
Start aus zufälliger Konfiguration



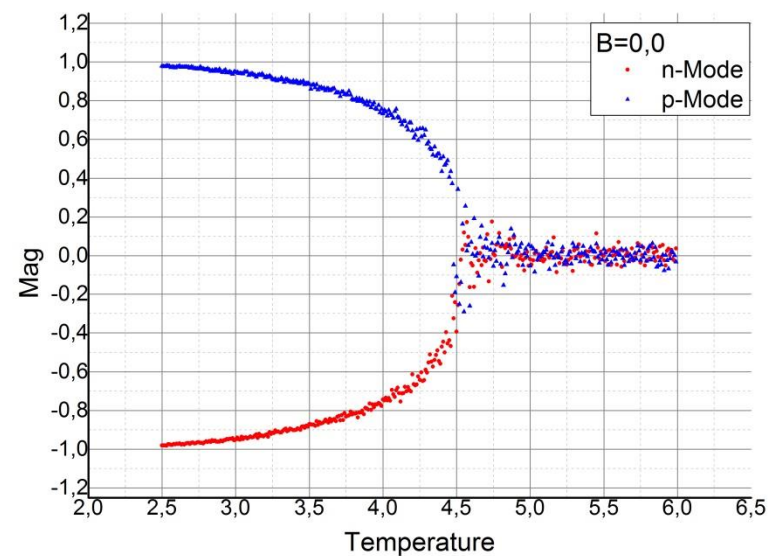
Start aus vollständig paralleler  
Konfiguration

Phasenübergang an  $T_c \approx 2,26$

## Temperaturabhängigkeit der Magnetisierung des 3D-Gitters: Auswirkung der Startkonfiguration



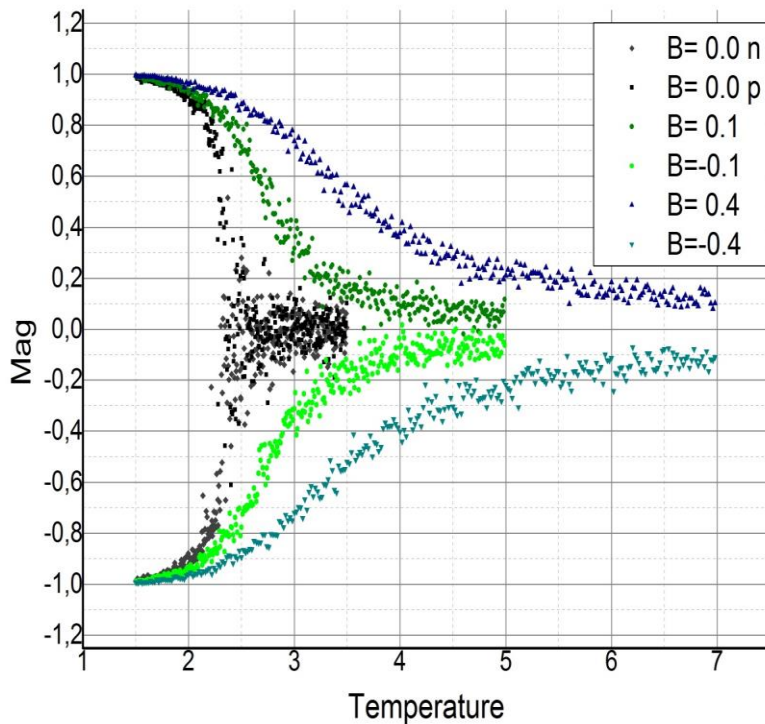
Start aus zufälliger Konfiguration



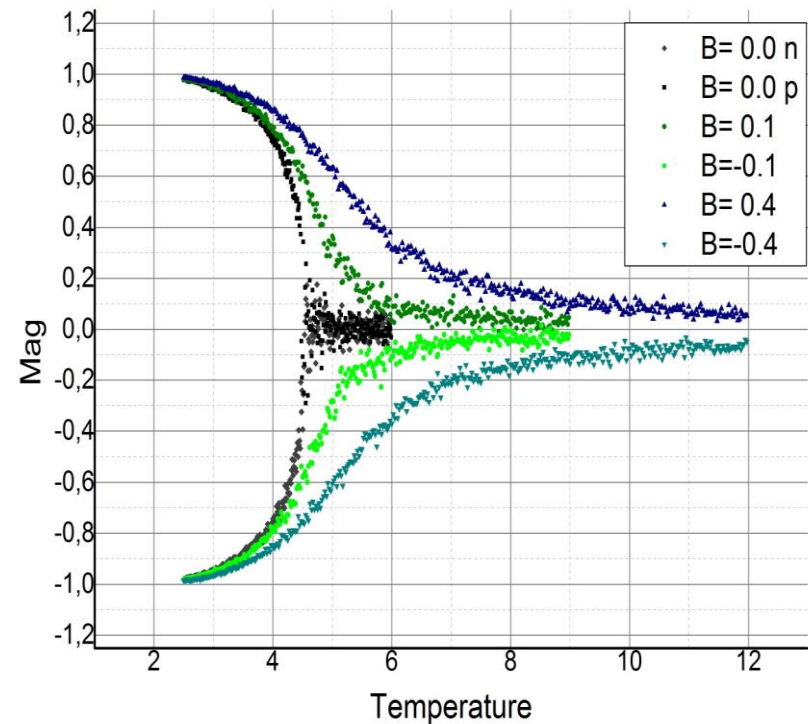
Start aus vollständig paralleler  
Konfiguration

Phasenübergang an  $T_c \approx 4,5$

## Temperaturabhängigkeit der Magnetisierung: Auswirkung des externen Feldes



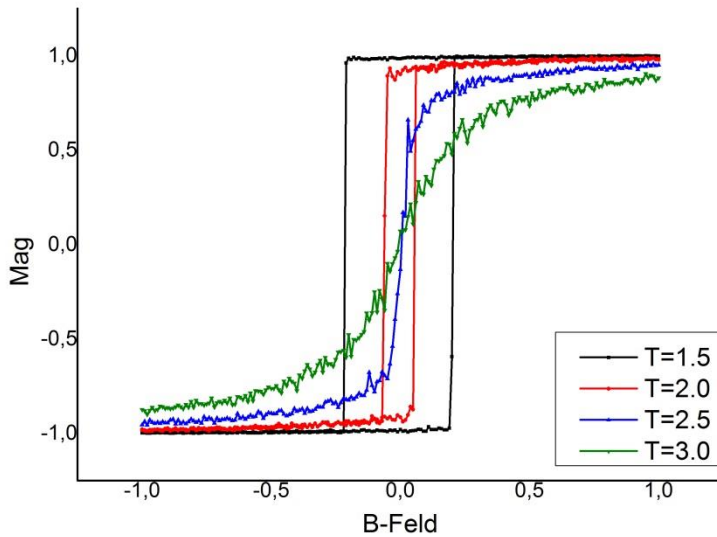
2D Gitter



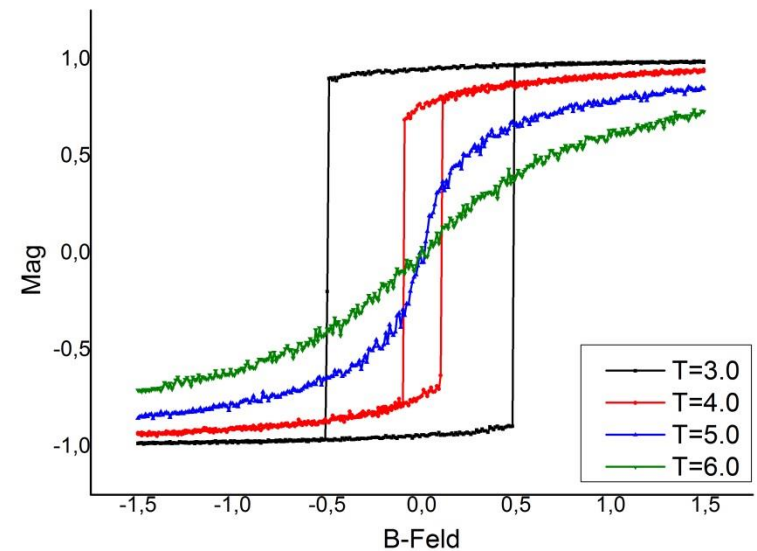
3D Gitter

# Auswertung

Abhängigkeit der Magnetisierung von externen Feldern  
bei verschiedenen Temperaturen:



2D Gitter

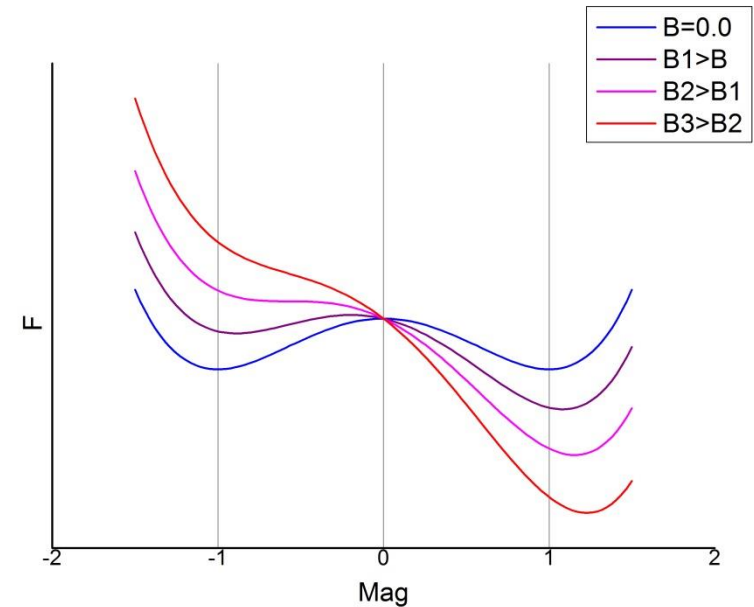


3D Gitter

Simulation via Metropolisalgorithmus auf dem immer selben Gitter

# Auswertung

- Schaltverhalten für Hysterese:
  - Es gilt:  $T < T_c \rightarrow 2$  Minima
  - Externes Feld sorgt für Verschiebung der Minima
  - Ab einem bestimmten  $|B| > 0$  wird ein Minimum zum Wendepunkt
  - Energieminimierung zum tieferen Minimum möglich
  - Magnetisierung schaltet um



Schematischer Verlauf der freien Energie

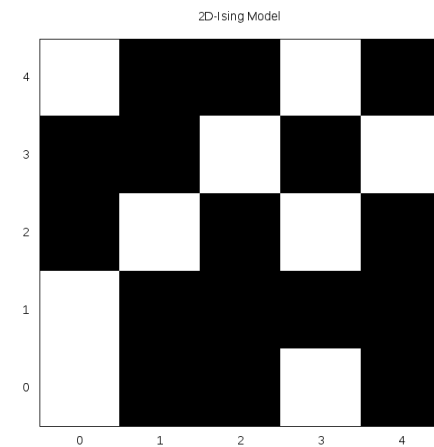
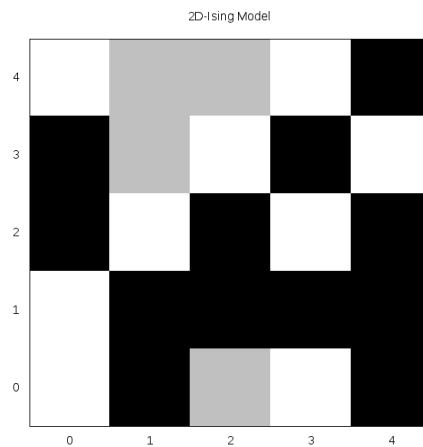
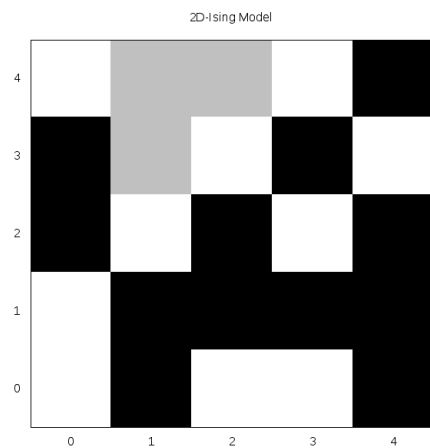
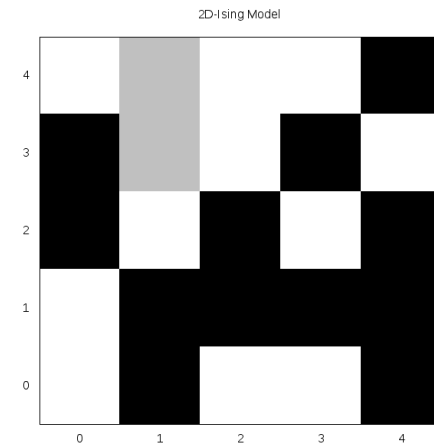
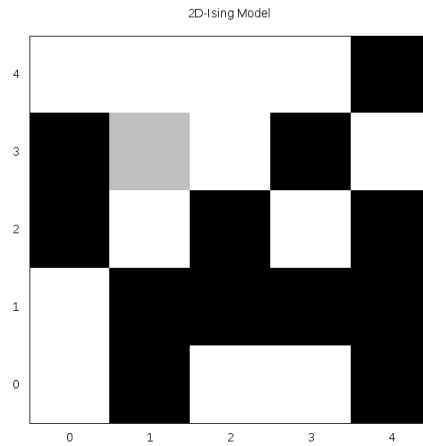
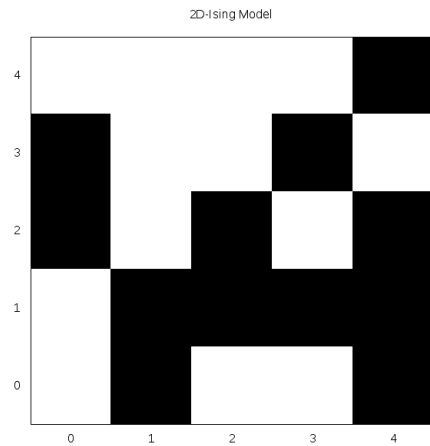
- Schaltverhalten einfacher Durchlauf:
  - Es gilt:  $T \geq T_c \rightarrow 1$  Minimum bei  $m=0$
  - Auschmierungseffekte sorgen für Magnetisierung des Systems.

# Cluster-Update-Verfahren

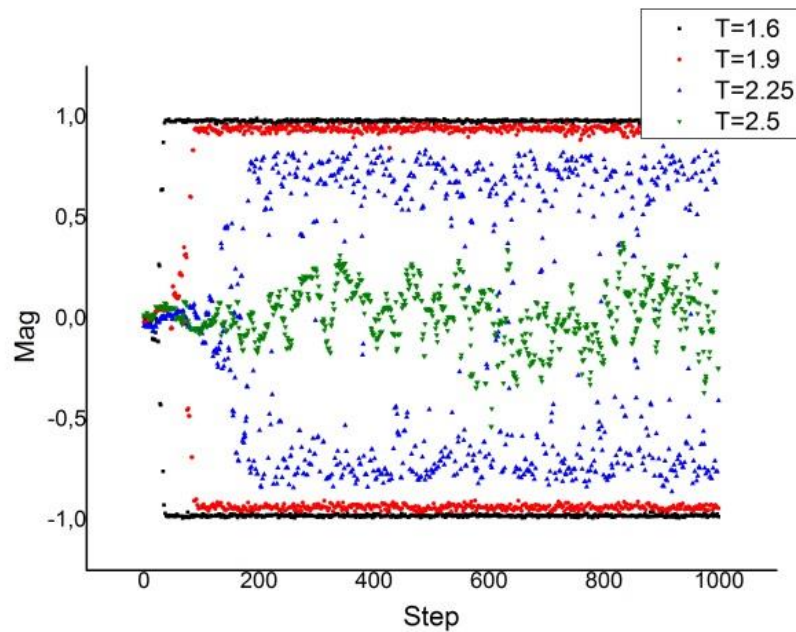
- Cluster bilden
- Konvergenz um  $T_c$
- Wolff-Algorithmus
- $W_{ij} = 1 - \exp(-2\beta J)$



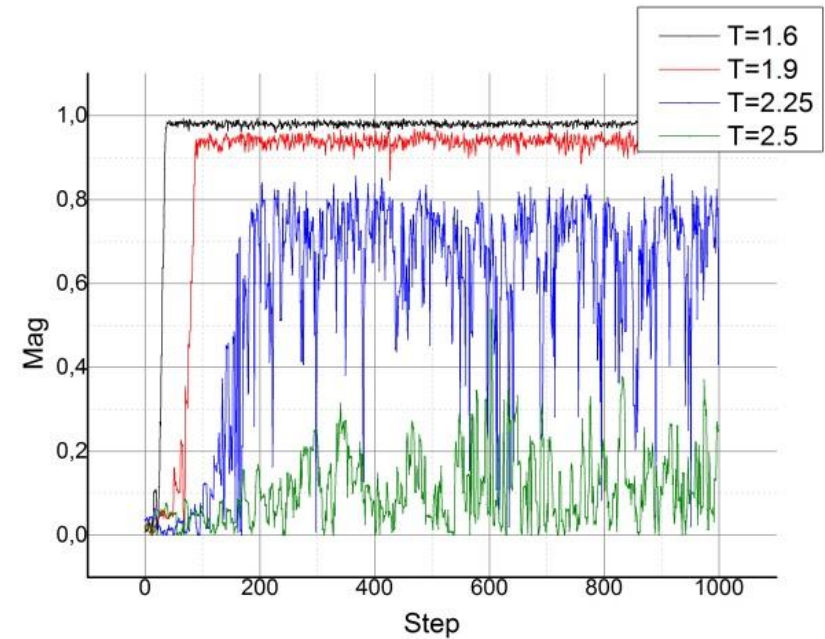
# Wolff-Algorithmus



# Absolutbetrag bei Cluster Auswertung

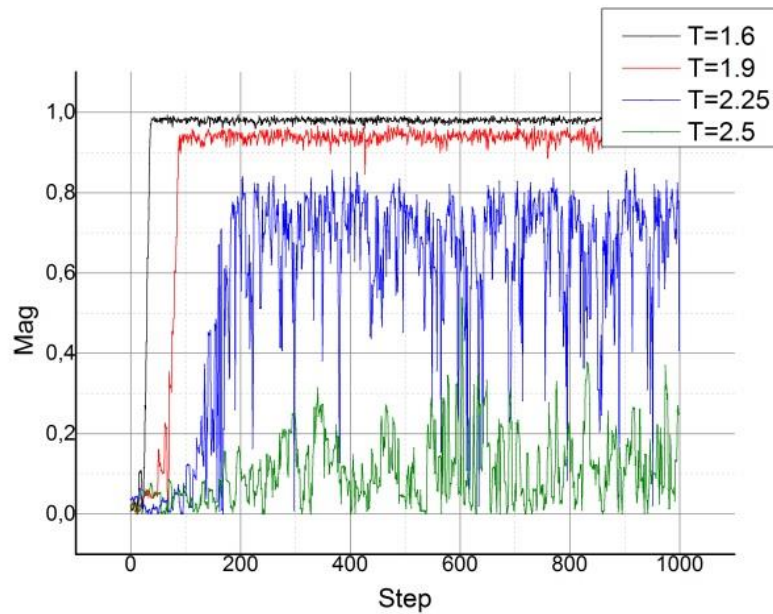


Ohne Absolutbetrag

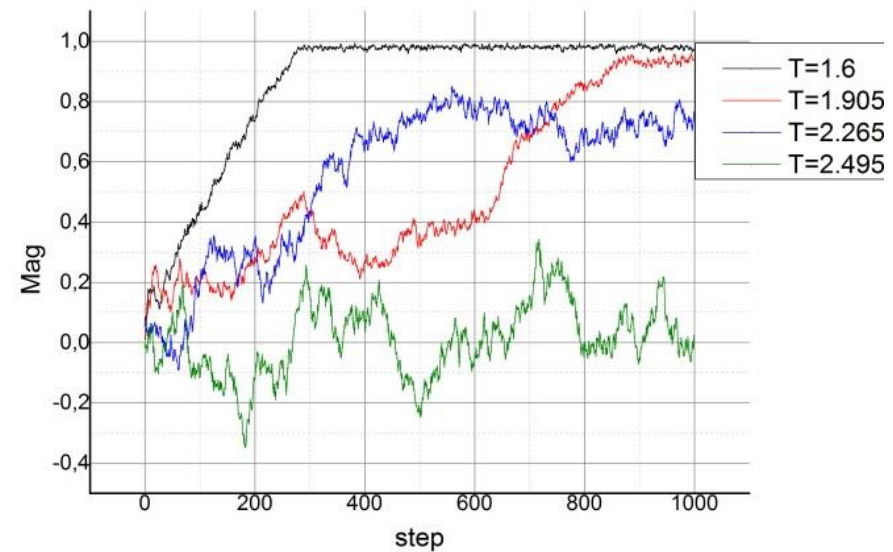


Mit Absolutbetrag

# Vergleich Cluster-Update und Metropolis

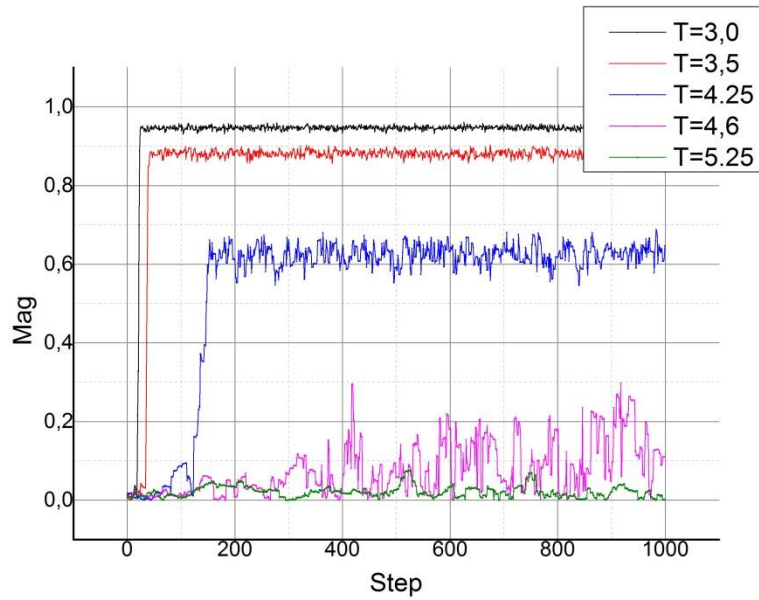


Cluster-Update

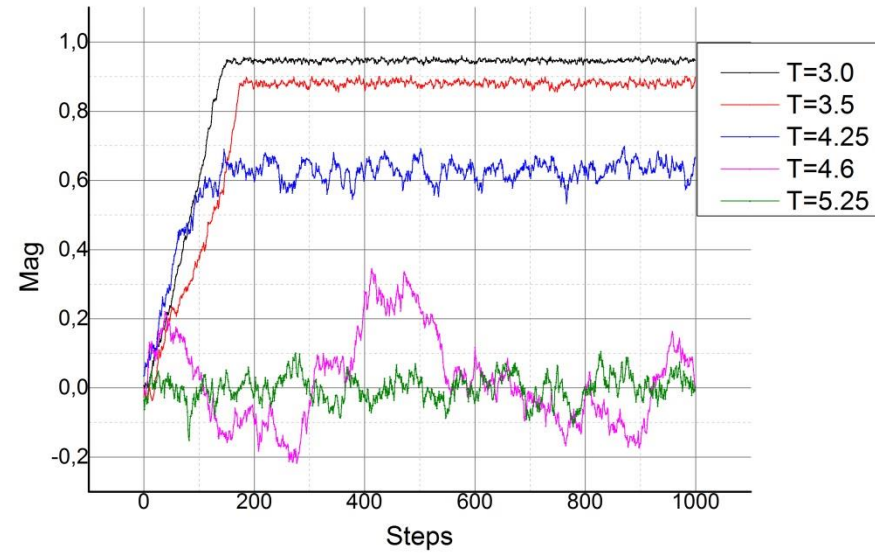


Metropolis

# Vergleich Cluster-Update und Metropolis

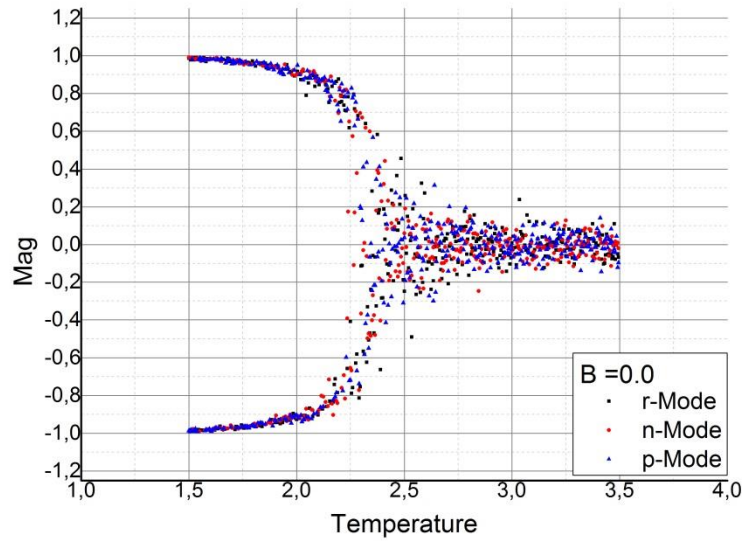


Cluster-Update

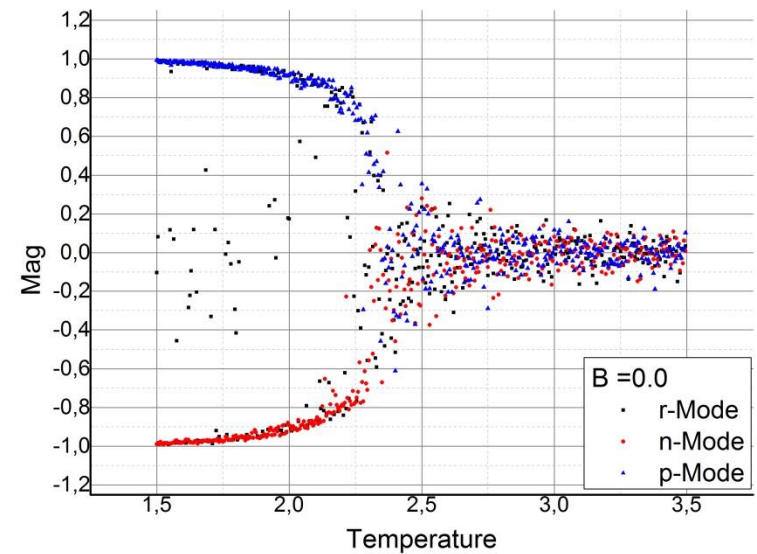


Metropolis

# Temperaturabhängigkeit der Magnetisierung



Cluster-Update



Metropolis

# Vor- und Nachteile vom Cluster-Update

- Vorteile
  - Schnelle Konvergenz bei  $T_c$
  - Sehr Effizient
  - Verhindern von Verklemmungen
- Nachteile
  - Nur Absolutbetrag der Magnetisierung
  - Schlecht, wenn von  $T_c$  entfernt
  - Kein äußeres Magnetfeld

- Beobachtung Phasenübergang & Abschätzung der Curie-Temperatur möglich
- Untersuchung von Schaltvorgängen in Ferromagneten prinzipiell möglich
- Cluster-Update muss abgewägt werden