

Ising Model

陈洪良 物理科学与技术学院 2015301020067

Ising model 是以一个用于描述物质铁磁性的数学模型。该模型中包含了可以用来描述单个原子磁矩的参数 s_i ，其值只能为+1 或-1，分别代表自旋向上或向下，这些磁矩通常会按照某种规则排列，形成晶格，并且在模型中会引入特定交互作用的参数 J ，使得相邻的自旋互相影响。虽然该模型相对于物理现实是一个相当简化的模型，但他却和铁磁性物质一样会产生相变。事实上，一个二维的方晶格 Ising model 是已知最简单却会产生相变的物理系统。

对于两个相邻的晶格点 i, j ，我们可以引入一个交互作用参数 J （假设 J 为正，且所有相邻晶格点的交互作用是相等的）。此外，我们可以假设每个自旋 s_i 都和外加的磁场 H 作用。则整个系统的能量可写成：

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

该系统在热平衡下处于某个自旋组态 α 的概率为玻尔兹曼分布：

$$P_\alpha \sim e^{-\frac{E_\alpha}{k_b T}}$$

数值模拟

为了简化，我假设没有外加磁场 H ，则系统能量可以写成： $E = -J \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j$

(1) 平均场论

假设 4 个相邻晶格点对 s_i 的作用等效于一个磁场 H_{eff} 对 s_i 的作用，即：

$$E = - \left(J \sum_{\langle ij \rangle} s_j \right) s_i = -\mu H_{eff} s_i$$

在一个无限大的二维晶格点阵内，假设 s_j 可用热力学平均值 $\langle s \rangle$ 代替，则：

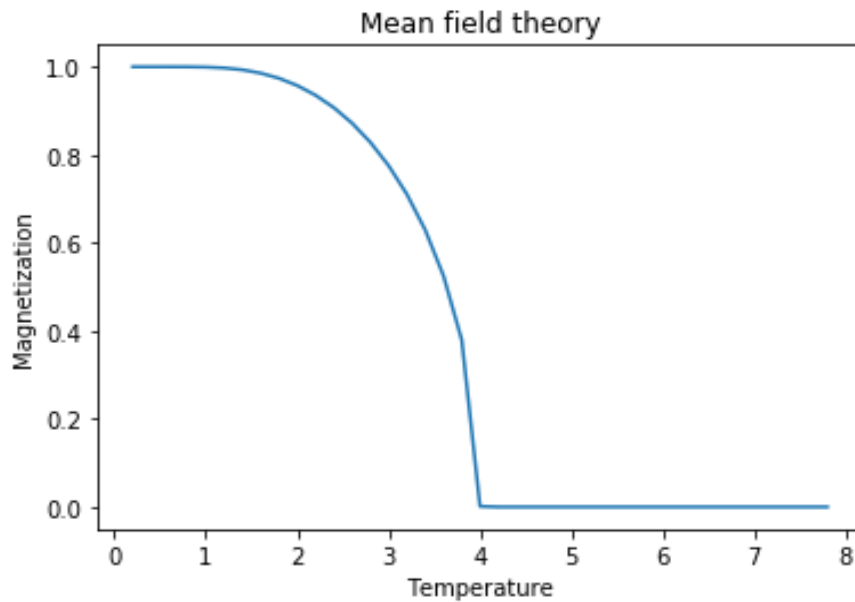
$$H_{\text{eff}} = j \sum \langle s \rangle / \mu = zj \langle s \rangle / \mu$$

$$\text{又} \because \langle s \rangle = \tanh\left(\frac{\mu H_{\text{eff}}}{k_b T}\right) = \tanh\left(\frac{zj \langle s \rangle}{k_b T}\right)$$

其中 z 为 s_i 的相邻原子数，对于二维方晶格， $z = 4$ ，取 T 的单位为 J/k_b 。上式为关于 $\langle s \rangle$ 的隐式关系，为了求解上式，可构造方程

$$f(\langle s \rangle) = \langle s \rangle - \tanh\left(\frac{4\langle s \rangle}{T}\right) = 0$$

$\langle s \rangle$ 即为上式方程的根。我采用 Newton-Raphson 方法求出了不同温度 T 下的数值解。



可以看到，在低温下 $\langle s \rangle$ 接近 1，系统有一个自发的总磁矩，即系统呈现铁磁性；在高温下， $\langle s \rangle$ 接近于 0，系统总磁矩为零，呈现顺磁性。因此存在相变，平均场论的模拟结果为在临界温度 $T_c = 4$ 时存在相变。当 T 趋近 T_c 时， dM/dt 很大。

在 $\langle s \rangle$ 很小的情况下，解析解由隐式方程可得：

$$\langle s \rangle = \sqrt{\frac{3}{T} \left(\frac{k_b T}{zJ} \right)^3} \left(\frac{zJ}{k_b} - T \right)^{\frac{1}{2}} \sim (T_c - T)^{\beta} \quad .$$

其中 $T_c = 4 \frac{J}{k_b}$ ，和数值模拟的结果 $T_c = 4$ （单位 $\frac{J}{k_b}$ ）相符。 β 是临界系数，平均场论模拟为 $\frac{1}{2}$

(2) 蒙特卡洛方法

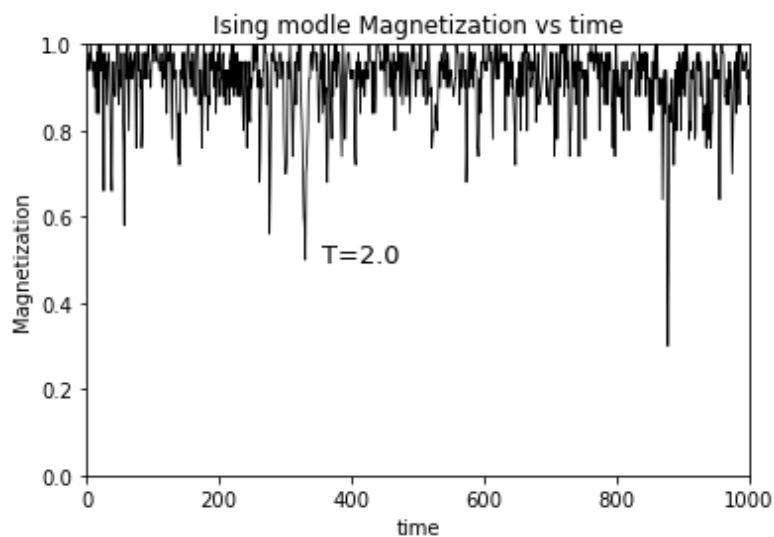
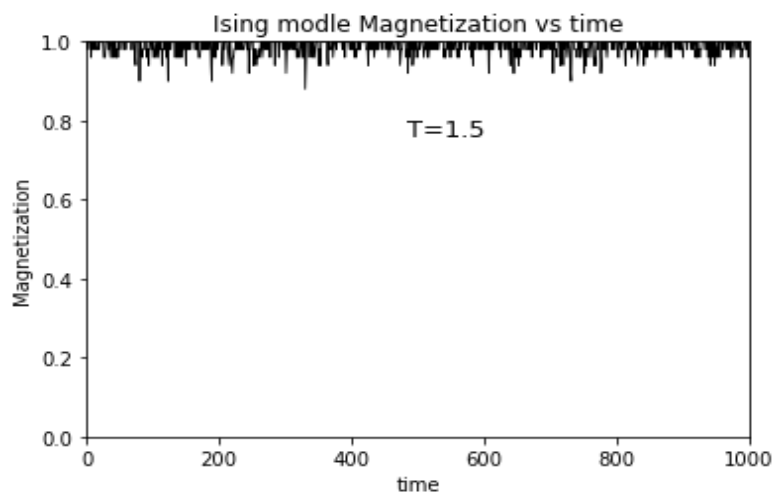
算法：选取一个磁矩，对它作反转，计算反转导致的系统能量变化值 E_{flip} 。

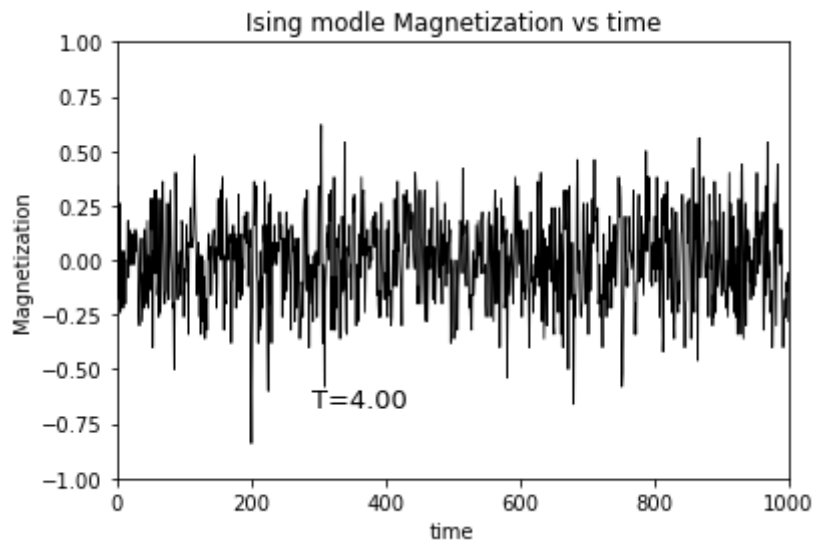
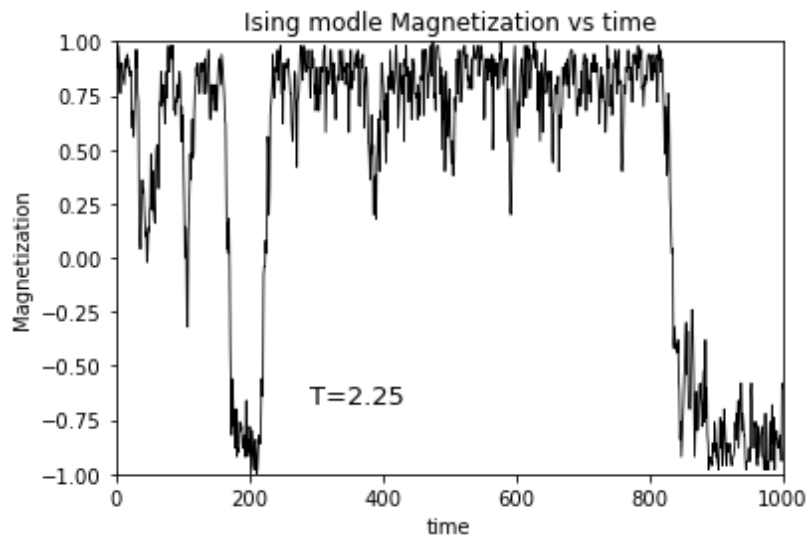
如果 $E_{\text{flip}} < 0$ ，则对这个磁矩反转

如果 $E_{\text{flip}} > 0$ ，则生成一个随机数 r 。若 $r \leq \exp\left(-\frac{E_{\text{flip}}}{k_b T}\right)$ ，则对磁矩反转；反之，则不改变磁矩。

将以上过程遍历全部晶格点。对于边界上的点，采用周期性边界条件处理。

作 $\langle s \rangle$ 随时间 t 变化的函数， t 为遍历次数：





在低温时($T = 1.5, 2.0$), 系统的单个原子磁矩 $\langle s \rangle$ 在 1 附近作微小波动

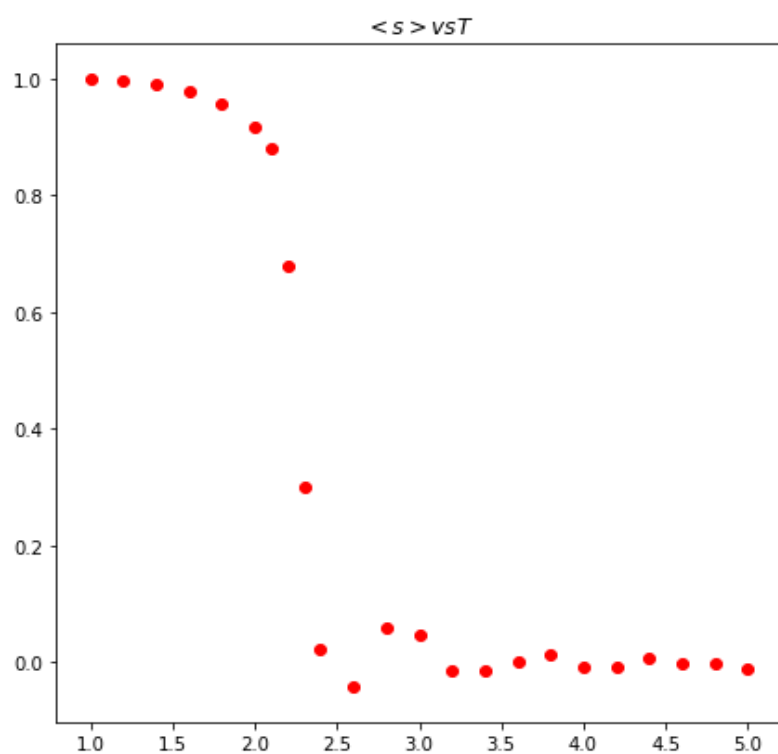
在 $T = 2.25$ 时, $\langle s \rangle$ 有很大的波动。 $\langle s \rangle \sim \pm 0.8$

理论计算的临界温度 $T_c = 2/\ln(1 + \sqrt{2}) \approx 2.27$, 即 $T = 2.25$ 时, 系统在临界温度附近, 由于存在相变, $\langle s \rangle$ 波动幅度很大

在 $T = 4$ 时, $\langle s \rangle$ 波动幅度减小, 并且以 $\langle s \rangle \sim 0$ 为中心分布

系统的总磁矩

作 $\langle s \rangle$ 随温度 T 变化的函数：



可见临界温度在 2.25 附近，此时系统磁矩快速减小

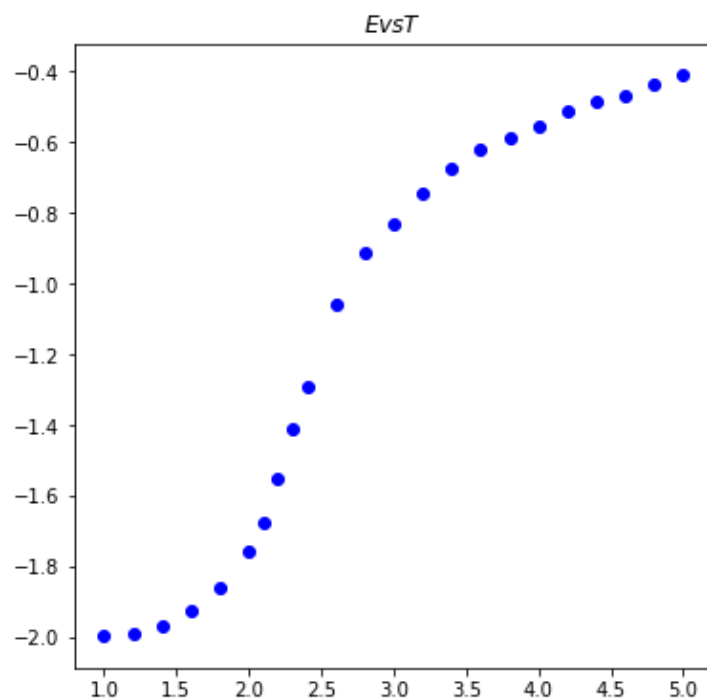
系统的总能量:

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

在 $T = 0$ 时， $\langle s \rangle = 1$ ，故 $E = -4NJ/2 = -2NJ$ ，单个原子能量 $E = -2J$ ，取 E 的单位为 J ，故 $E = -2$

在高温时， $\langle s \rangle = 0$ ，原子磁矩取向随机，故 $E = 0$

作单个原子能量 E 随温度 T 变化的函数图像：



$T \rightarrow 0$ 时, $E \rightarrow -2$; $T \rightarrow \infty$ 时, $E \rightarrow 0$; 在临界温度 $T = 2.25$ 附近, 能量迅速增大 ;

热容 :

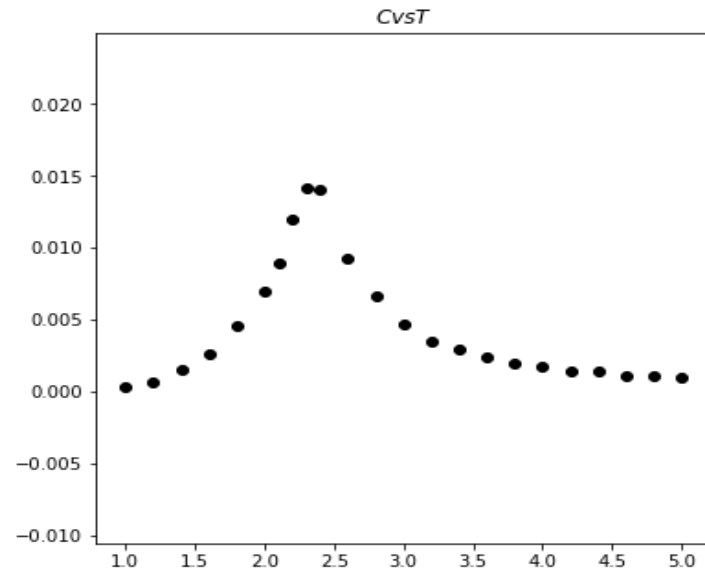
根据 fluctuation-dissipation theorem ,

$$C = \frac{(\Delta E)^2}{k_b T^2}$$

其中 : $(\Delta E)^2 \equiv \langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2$, 即能量的方差

同时 $C = \frac{dE}{dT}$, 由上图可知 E 在 T_c 附近斜率最大, 故 C 在临界温度 T_c 处会有峰值 ;

作C 随温度T 变化的函数图像 :



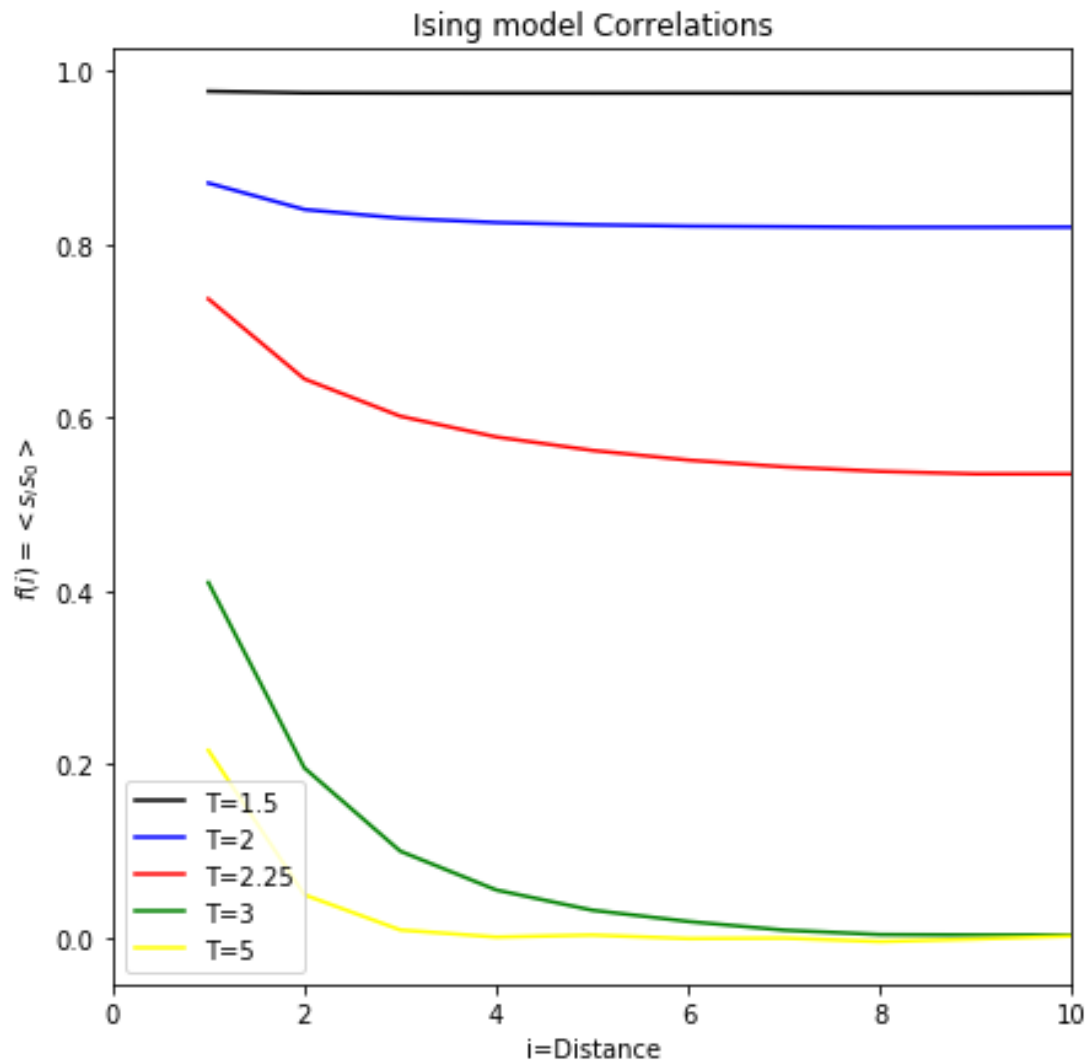
可见 C 的峰值在临界温度处

相关函数：

定义： $f(i) = \langle s_0 s_i \rangle$

其中 s_i 为离 s_0 i 个晶格点的磁矩， s_0 遍历全部晶格点，并对全部晶格点求平均值。

作不同温度下的 $f(i)$ 函数：



由图可知：

- 1、在低温时，即 $T = 1.5, 2.0$ 时，系统由于存在铁磁性，磁矩指向大部分为+1，故，相关性大小在+1 附近，且随着距离的减小，相关性增长较小
- 2、在临界温度附近 $T = 2.25$ 时，短距离的 i 的相关性远大于长距离 i 的相关性；显示出相关性的两格点距离较大
- 3、温度超过临界温度继续增长（ $T = 3, 5$ ）时，相关性继续减小，且相关距离较短。

结论

二维 Ising model 在低温下会自发磁化呈现铁磁性, 存在临界温度 T_c 发生相变。

在 T_c 附近, 系统极其敏感, 导致系统磁矩、热容、能量的奇异行为。

由于平均场论的模拟方法忽略了磁矩取向的局部涨落, 即认为相邻原子的相关取向等于整个系统的取向, 导致平均场论模拟得出错误的临界温度 $T_c = 4$ 。