

Метод Монте-Карло для моделирования ферромагнетиков

Никита Балаганский, Артем Ямалутдинов

22 января 2020 г.

1 | 1. Введение

1.1. Ферромагнетизм

Ферромагнетиками называются твердые тела, которые могут обладать *спонтанной намагниченностью*, т. е. намагничены уже в отсутствие магнитного поля. Типичными представителями ферромагнетиков являются железо, кобальт, никель и многие их сплавы. Ферромагнетизмом обладают многие редкоземельные элементы при пониженной температуре.

Намагниченность ферромагнетиков объясняется тем, что атомы ферромагнетика обладают магнитными моментами и взаимодействуют между собой с силами, зависящими от угла между этими моментами. Эти силы стремятся установить магнитные моменты соседних атомов параллельно друг другу.

1.2. Модель Изинга

Модель Изинга — одна из основных моделей, описывающая поведение магнитных моментов в атомах ферромагнетика выше точки Кюри T_C . В данной модели каждой вершине кристаллической решетки ставится в соответствие число $+1$ или -1 , отвечающее за противоположные направления магнитного момента. Это число называется *спином*. Тогда в отсутствие внешнего магнитного поля гамильтониан получившейся системы можно записать в виде

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j, \quad (1.1)$$

где $\langle i,j \rangle$ означает суммирование по соседним элементам, $J > 0$ — энергия взаимодействия соседних спинов (считаем ее одинаковой для всех пар), s_i, s_j — спины.

При температуре T_C система испытывает *фазовый переход второго рода*.

Покажем, что если кристаллическая решетка одномерная, то фазовый переход в ней невозможен, т.е. при любых температурах упорядоченное состояние энергетически невыгодно. Для этого запишем *свободную энергию системы*

$$F = E - TS. \quad (1.2)$$

Здесь E — энергия, S — энтропия системы. Упорядоченное состояние будет устойчиво тогда и только тогда, когда при переходе в него $\Delta F > 0$.

Изменим спины таким образом, чтобы в системе появился упорядоченный домен. Тогда энергия увеличится на величину $4J$, а изменение энтропии $\Delta S = k_B \ln N$, где N — число атомов в решетке. Тогда изменение свободной энергии

$$\Delta F = 4J - k_B T \ln N < 0 \text{ при } N \rightarrow \infty, \quad (1.3)$$

то есть для системы неупорядоченное состояние более выгодно.

Теперь рассмотрим двумерный случай. При введении домена в кристаллическую решетку изменение энергии системы пропорционально периметру домена и может быть записано как $\Delta E = 4J \cdot \varepsilon N^2$, $0 < \varepsilon < 1$. Возможное число доменов можно оценить как $3^{\varepsilon N^2}$. Тогда изменение энергии

$$\Delta F = 4J \cdot \varepsilon N^2 - k_B T \ln(N^2 3^{\varepsilon N^2}). \quad (1.4)$$

Отсюда можно получить оценку на точку Кюри T_C :

$$T_C \sim \frac{J}{k_B}. \quad (1.5)$$

2 | 2. Метод Монте-Карло

2.1. Описание метода

Для системы из N спинов число возможных состояний равно 2^N , поэтому для моделирования систем с достаточно большим N необходимо использовать статистические методы.

В методе Монте-Карло система рассматривается в состоянии термодинамического равновесия при определенной температуре T . В ходе обмена энергией с окружающей средой, энергия будет флуктуировать около равновесного состояния, а средняя энергия одной частицы пропорциональна T . Тогда для подсчета термодинамических характеристик системы можно будет посчитать ее характеристики для реализованных состояний, а далее усреднить получившиеся значения.

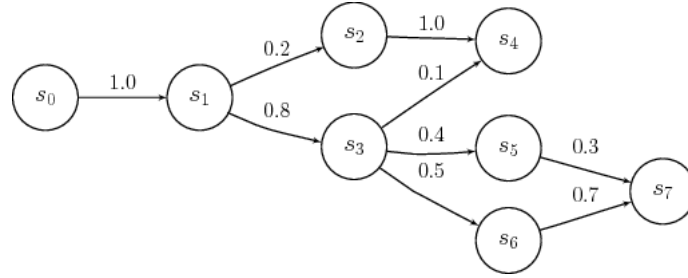
2.2. Алгоритм Метрополиса

Описание алгоритма, используемого для моделирования кристаллической решетки ферромагнетика: *Алгоритм 1*

1. Случайным образом выбирается начальная конфигурация из N спинов α_0 ;
2. На k -ом шаге меняем направление одного случайно выбранного спина и считаем изменение энергии dE ;
3. Если $dE < 0$, то новое состояние α_k принимается с вероятностью 1. Если $dE > 0$, то принимаем новое состояние с вероятностью $P = e^{\frac{-dE}{k_B T}}$;
4. Повторяем шаги 2 – 4, принимая α_k в качестве нового исходного состояния.

2.3. Марковские цепи

Модель Изинга можно рассматривать как марковскую цепь, так как непосредственная вероятность $P_\beta(a \rightarrow b)$ перехода в следующее состояние b зависит только от текущего состояния a . Алгоритм Метрополиса на самом деле является версией моделирования Марковской цепи Монте-Карло, и поскольку мы используем динамику с одним спином в алгоритме Метрополиса, каждое состояние можно рассматривать как точку перехода ровно на N других состояний, где каждый переход соответствует изменению одного спинового момента на противоположное значение.



Для того, чтобы алгоритм можно было использовать необходимо найти такое распределение π , что:

- $\pi(a)p(a \rightarrow b) = \pi(b)p(b \rightarrow a)$

Давайте докажем, что при выборе $\pi(a) = \frac{1}{Z} \exp\left(-\frac{E_a}{k_b T}\right)$. Итак пусть

$$\begin{cases} p_{a \rightarrow b} = \exp\left(-\frac{E_b - E_a}{k_b T}\right) \\ p_{b \rightarrow a} = 1 \end{cases}$$

тогда $\pi(a) = \pi(b) \cdot \exp\left(-\frac{E_b - E_a}{k_b T}\right)$. Подставив $\pi(a) = \frac{1}{Z} \exp\left(-\frac{E_a}{k_b T}\right)$ и $\pi(b) = \frac{1}{Z} \exp\left(-\frac{E_b}{k_b T}\right)$ получим верное тождество. В случае $p(a \rightarrow b) = 0$, мгновенно получим $p(b \rightarrow a) = 0$.

Также необходимо учитывать что для достижения некоррелированности от предыдущего состояния приходится совершать внушительное число итераций алгоритма (нужно достаточно глубоко зайти в граф марковской цепи).