

REPORT 16

潘硕 PB24020526

2025 年 11 月 23 日

1 Question

模拟计算二维 Ising 模型的磁化率曲线和比热曲线

2 Methods

2.1 Ising 模型

磁性介质在外磁场 \mathbf{H} 中的磁化强度 $\mathbf{M} = \chi \mathbf{H}$, χ 为磁化率.

考虑铁磁体的 Ising 模型. 为简化起见, 设每个自旋位于格点上, 自旋取向向上或者向下, 即取 $\sigma = \pm 1$.

Ising 模型中, 每一临近自旋对之间有相互作用, 系统的 Hamilton 量为:

$$E = - \sum_{\langle i,j \rangle=1}^N J_{ij} \sigma_i \sigma_j - \mu_B H \sum_{i=1}^N \sigma_i \quad (1)$$

其中求和的下标 $\langle i,j \rangle$ 表示近邻自旋对, J 是交换积分常数. μ_B 是 Bohr 磁矩.

体系的每种自旋状态视为状态 α . 用正则系综进行描述该系统. 即有:

$$p_a = \frac{e^{-E_\alpha/k_B T}}{Z(T)}, Z(T) = \sum_\alpha e^{-E_\alpha/k_B T} \quad (2)$$

其中 \sum_α 对所有自旋构型求和. 将磁化强度 M , 比热 C_V , 磁化率 χ 通过配分函数重写如下:

$$M = k_B T \frac{\partial}{\partial H} \ln Z, C_V = \frac{\partial U}{\partial T}, \chi = \lim_{H \rightarrow 0} \frac{\partial M}{\partial H} \quad (3)$$

另一方面, 以上物理量也可以通过 Boltzmann 统计分布表示出来,

$$U = \langle E \rangle = \sum_\alpha p_a E_a, M = N \mu_B \langle \sigma \rangle = \mu_B \sum_\alpha p_\alpha (\sum_{i=1}^N \sigma_i)_\alpha \quad (4)$$

$$\langle E^2 \rangle = \sum_\alpha p_a E_a^2, \langle M^2 \rangle = \mu_B^2 \sum_\alpha p_\alpha (\sum_{i=1}^N \sigma_i)_\alpha^2 \quad (5)$$

同时, 比热可用总能的统计涨落表示, 磁化率可用零磁场下磁化强度的统计涨落表示.

$$C = (\Delta E)^2 / k_B T^2, \chi = (\Delta M)^2 / k_B T \quad (6)$$

$$(\Delta E)^2 = \langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2, (\Delta M)^2 = \langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2 \quad (7)$$

(6)(7) 式将用于数值模拟求解.

2.2 二维 Ising 模拟

二维格子点阵中, 设第 (i, j) 个格点发生反转, 则能量变化为:

$$\Delta E = 2\sigma_{i,j}(J(\sigma_{i-1,j} + \sigma_{i+1,j} + \sigma_{i,j-1} + \sigma_{i,j+1}) + \mu_B H) \quad (8)$$

对于点阵的边界, 设置周期性边界条件, 例如取第 $N + 1$ 列为第 1 列.

使用 Metropolis 算法进行模拟. 具体步骤如下:

1. 设置初始位形, 全部自旋向上 (或者向下), $\sigma = +1$ ($\sigma = -1$)
2. 随机选定一个格子 (i, j) , 反转自旋方向. 计算反转前后系统能量差 ΔE
3. 另外产生一个随机数 ξ . 若 $\xi < \max(1, -\Delta E/kT)$, 接受此次反转; 反之, 放弃反转.
4. 系统总抽样数达到 N 时, 停止抽样.

舍去前 m 个抽样结果 (热化长度), 将剩余样本代入计算.

3 Experiment

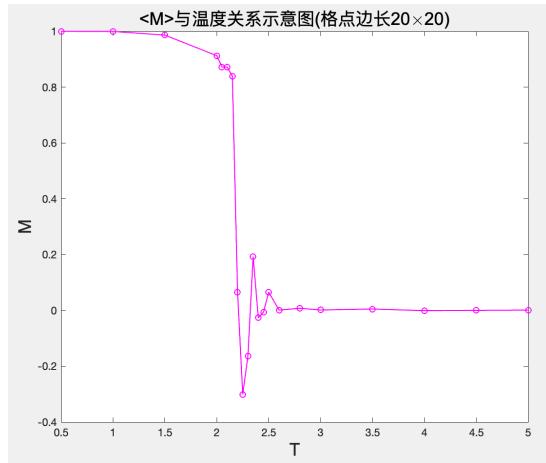
以下已对各参量做归一化处理.

3.1 二维 Ising 的相变

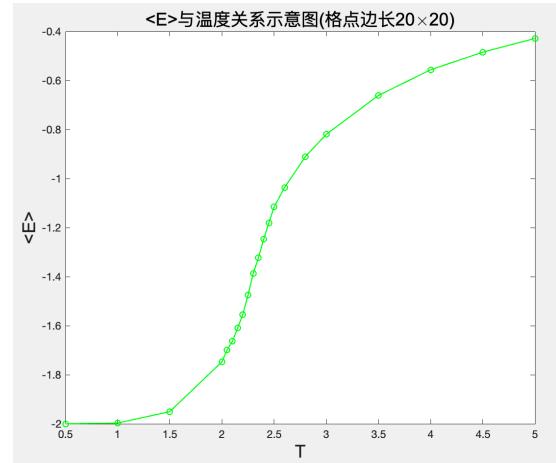
取外加磁场强度 $H = 0$, 改变温度 T , 计算 $\langle M \rangle, \langle E \rangle, C_V, \chi$ 随温度的变化. 抽样数 $N = 5000000$, 热化长度 $m = 5000$.

在低温下, 所有自旋以相同的方向排列, 能量取最低值, 磁场强度 $M \approx 1$. 随着温度上升, M 缓慢下降; 温度达到 2.2 左右时, M 发生突变, 迅速衰减. 温度进一步增大, M 接近于 0, 相变过程结束.

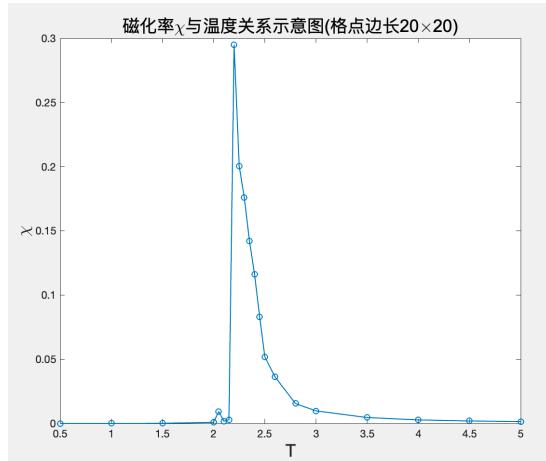
再关注磁化率 χ 和热容 C_V 的变化. 在温度达到 $2.2T_0$ 左右时, χ 和 C_V 迅速增大达到峰值. 接近理论上相变发生的温度 $2.259T_0$. 可以通过增加采样数减少误差.



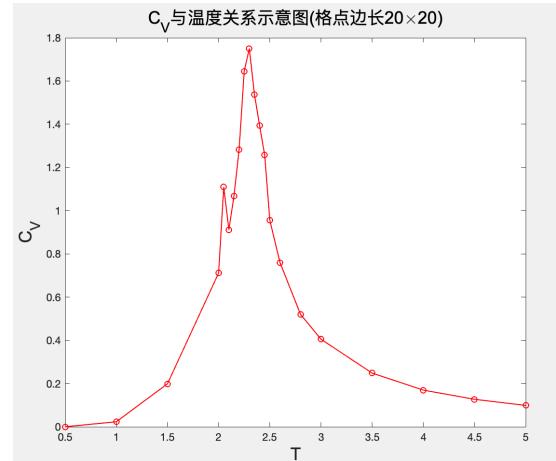
(a) 磁化强度 M 随温度变化关系图



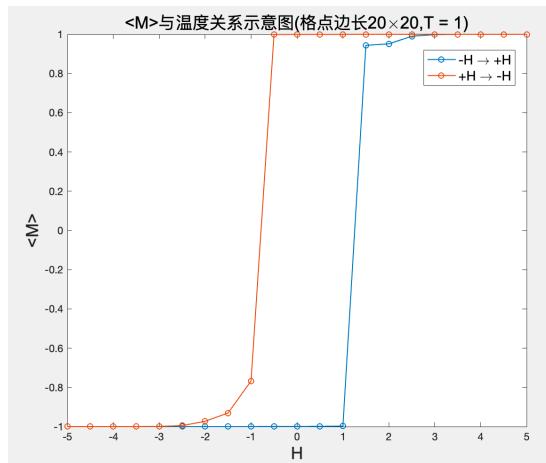
(b) 平均能量 E 随温度变化关系图



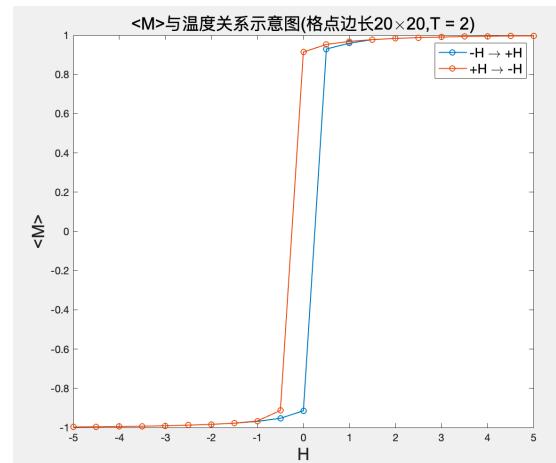
(a) 磁化率 χ 随温度变化关系图



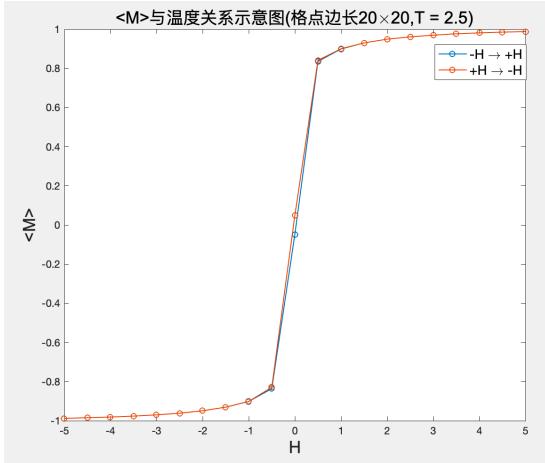
(b) 热容 C_V 随温度变化关系图



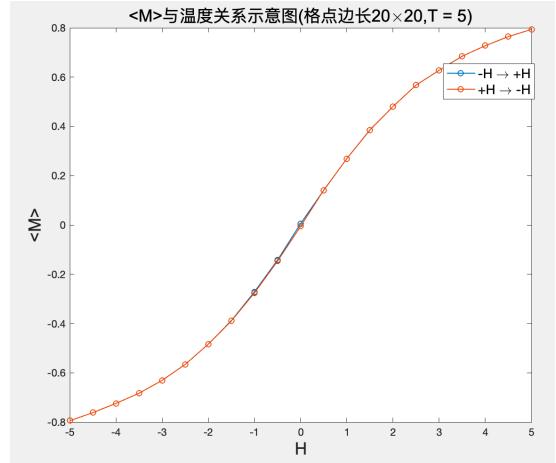
(a) 磁滞回线 ($T = 1$)



(b) 磁滞回线 ($T = 2$)



(a) 磁滞回线 ($T = 2.5$)



(b) 磁滞回线 ($T = 5$)

3.2 磁滞回线

给体系施加一个外磁场 H , 考虑在不同温度 $T = 1, 2, 2.5, 5$ 下的磁滞回线. 样本数 $N = 1000000, m = 5000$.

温度较低时, 体系有自发磁化. 到 H 反向达到一定数值时, M 突变, 突然转向. 反方向变化 H 时同理. 温度变高时, 磁滞回线所围的面积减小. 同时 M 突变转变为缓慢变化.

4 Summary

1. 本次实验实现了二维 Ising 模型的模拟, 计算了磁化率 χ 和热容 C_V 随温度的变化, 观察到相变点附近 χ 和 C_V 的突变. 同时随温度上升时, χ 下降, 与铁磁体的 $\chi(T) - T$ 曲线相吻合.
2. 绘制该模型在不同温度下的磁滞回线.