תרגיל נומרי 6 – מודל איזינג דו-מימדי

1. רקע

מודל איזינג (Ising) הוא אחד הנושאים היסודיים ביותר בפיסיקה סטטיסטית, ומהווה תשתית לחקר מעברי פאזה במערכות עם אינטראקציות בין החלקיקים. התמונה הפיסיקלית המקורית של המודל, בה נדון כאן, היא של חומר פרו-מגנטי, כלומר כזה שישנו צימוד מגנטי בין חלקיקים שכנים. בפרט, יש עדיפות אנרגתית לכך ששני חלקיקים שכנים יהיו בעלי ספינים מקבילים לעומת ספינים אנטי-מקבילים. בהרצאות בקורס נבחן את הגירסה החד-מימדית של המודל, וכאן נבחן באופן נומרי בשיטות מונטה-קרלו את הגירסה הדו-מימדית.

2. ההמילטוניאן במודל Ising

ההנחות של מודל Ising הן מינימאליסטית למדי.

- ישנו שריג ממימד D שבכל אתר שלו i יש חלקיק שיכול להיות בעל שני ערכי ספין – $s_i=\pm1$. בין כל שני ספינים שכנים בשריג, i ו-j, יש אינטראקציה דו-גופית שהאנרגיה הנובעת ממנה היא $-Js_is_j$, כאשר J חיובי, ומכונה ״קבוע הצימוד הפרמגנטי״. היותו של J חיובי היא שנותנת עדיפות לכך ששני ספינים שכנים יהיו מקבילים זה לזה[1].
- בנוסף, לכל ספין יש צימוד לשדה מגנטי חיצוני, אם שדה כזה קיים. כאן הדבר דומה לפאראמגנט שכבר ראינו, שלגביו יש עדיפות אנרגתית שהספין היה מקביל לכיוון השדה. האנרגיה של ספין בודד s_i בשדה מגנטי B היא $-\mu Bs_i$, כאשר μ הוא המומנט המגנטי (ואנו מניחים כי לשדה רק שני כיוונים אפשריים).

מכאן, שההמילטוניאן של המערכת נותן ביטוי כללי לאנרגיה של השריג:

$$U=-\frac{1}{2}J\sum_{\{i,j\}}s_is_j-\mu B\sum_i s_i \quad (1)$$

הסכום הראשון הוא על כל הזוגות השכנים $\{i,j\}$ (והפקטור ½ כדי להחשיב באנרגיה הכוללת כל זוג רק פעם אחת), והסכום השני על כל האתרים בשריג.

3. פיסיקה סטטיסטית של שריג איזינג: חזרה לצבר קאנוני

במשוואה (1) ל-J ול-μB יחידות של אנרגיה, וכך מתקבל אוסף של ערכים אפשריים של האנרגיה הכוללת E. אם המערכת מצומדת לאמבט חום בעל טמפרטורה T, אנחנו מקבלים את המצב המוכר של צבר קאנוני, שבו אפשר לחשב בשיטות מונטה קרלו את גדלים אופייניים של המערכת ובפרט את

- המגנטיזציה הכוללת הממוצעת של המערכת $\langle M\rangle=\langle\Sigma s_i\rangle$;
- האנרגיה הממוצעת של המערכת $\langle U\rangle$;
- ואת קיבול החום של המערכת, C_V, בנגזרת ישירה או לפי הפלוקטואציות של האנרגיה.

נתמקד בשריג דו-מימדי, שבו לכל חלקיק יש ארבעה שכנים צמודים שעליהם יש לסכם את האינטראקציה. כדי להימנע מהשפעה לא הומוגנית של חלקיקים בקצוות השריג, נגדיר **תנאי השפה מחזוריים**: חלקיקים בשורה (בטור) ה-N צמודים למעשה לחלקיקים בשורה (בטור) ה-1.

4. הדרכה לחישובים בשיטת אמבט החום

בכל החישובים יוצרים מצב התחלתי שבו כל אחד מהחלקיקים הוא בעל ספין שרירותי $s_i=+1$ או $s_i=-1$. ממצב זה נאפשר למערכת לבצע אבולוציה, כלומר פלוקטואציות סביב ערכים אופייניים של האנרגיה והמגנטיזציה הכלליים.

[1] - התאור כאן עם ערך יחיד של J מכונה המקרה האיזוטרופי. עקרונית ניתן להכליל את המודל למקרה ש-J תלוי בכיוון בשריג.

בשיטת אמבט החום השתמשנו כבר בתרגיל 5. אבל הפעם נשנה את הגישה לבחירת החלקיק שאותו מנסים להפוך. במקום להגריל בכל צעד חישובי את אחד מ-N החלקיקים, פשוט נסרוק את כל השריג, מהחלקיק הראשון ועד החלקיק ה-N, בזה אחר זה. לכל חלקיק בתורו, מחליטים בעזרת אם להפוך אותו או להשאיר אותו ללא שינוי. ההגרלה נעשית באופן הבא:

א. עבור החלקיק שנבחר, i, מוצאים את האנרגיה של המערכת במצב הנוכחי, $E_{i\text{-}now}$, ואת האנרגיה שלה אם החלקיק יתהפך, $E_{i\text{-}flip}$ (בשני המקרים יש צורך לחשב רק את האנרגיה של החלקיק הספציפי עם שכניו הקרובים ועם השדה המגנטי החיצוני אם הוא קיים; ראו הדרכה בנספח).

ב. מחשבים את הסיכוי להיפוך הספין i, $p_{i\text{-}flip}$:

$$p_{i-flip} = \frac{\exp\left(-\beta E_{i-flip}\right)}{\exp\left(-\beta E_{i-now}\right)+\exp\left(-\beta E_{i-flip}\right)} . \qquad (2)$$

ג. מגרילים מספר אקראי p בתחום $[0,1)$. אם $p \le p_{flip}$ הופכים את הספין, ואם לא - משאירים את המצב כפי שהוא.

5. **הדרכה לתיעוד המערכת**

מטרתנו בכל חישוב היא למצוא את המגנטיזציה הממוצעת $\langle M\rangle$, האנרגיה הממוצעת במערכת, U ואת קיבול החום הסגולי, $c_V=C_V/N$. הפרמטרים המאלצים את החישובים הם הטמפרטורה, T, הקבוע הפרומגנטי, J, והמכפלה μB. לשלושת הגדלים הללו יחידות של אנרגיה, ולהלן נסמן אותם במספרים חסרי יחידות, כך שההשוואה ביניהם היא יחסית. מכאן, שהפרמטרים לחישוב הם $\eta=J/k_BT$ ו-$h=\mu B/k_BT$.

כמו בתרגיל 5, החישוב כולל הרצה של המערכת מספר רב של צעדים עד אשר יאבד ה״זיכרון״ של המצב ההתחלתי השרירותי, ואחר-כך נמשיך במטרה לקבל התכנסות טובה מבחינת הפלוקטואציות הנומריות.

הפעם נפעיל שיקול נוסף, והוא **יצירת ״מרחק סטאטיסטי״ בין דגימות**. בשריג גדול, היפוך של ספין אחד כמעט איננו משנה דבר, ולכן כדי לקבל אוסף של דגימות שהן בלתי-תלויות זו בזו, כדאי לתעד את מצב המערכת בתדירות הרבה יותר נמוכה מאשר אחת לניסיון היפוך של חלקיק. נגדיר מספר שלם nsweep>1, שהוא מספר הסריקות המלאות של השריג שיש לבצע בין דגימה אחת לבאה לצורך תיעוד המגנטיזציה והאנרגיה. נסו לעבוד עם nsweep=5 (הקטינו במידת הצורך אם זמן הריצה ארוך מדי). מספר הדגימות בפועל של המגנטיזציה והאנרגיה יהיה אז 1/nsweep ממספר הפעמים שעברתם על השריג.

לצורך קביעות מספר הסריקות הנדרש על השריג, נפעיל **קריטריון התכנסות** על המגנטזציה הממוצעת, כדלקמן. עקבו אחרי המספר המצטבר של **ההיפוכים ממש** שהתרחשו בחישוב.

א. מחליטים באופן שרירותי ניחוש ראשון למספר **ההיפוכים** הרצוי, K. מריצים את המערכת עד שהיא משלימה לפחות $K/2$ היפוכים ללא רישום של התוצאות (זו המחיקה של תנאי ההתחלה); שימו לב כי אם עובדים בסריקות של שריג מלא, מן הסתם לא תסיימו סריקה עם בדיוק $K/2$ היפוכים אלא קצת יותר. על-פני $K/2$ הצעדים הבאים מייצרים באופן מצטבר את הערך הממוצע $\langle M\rangle_{K/2}$, על-פי מספר דגימות nsample שהוא תוצאתי – כמה פעמים סרקתם את השריג, מחולק במספר הסריקות בין דגימה לדגימה, nsweep.

ב. מריצים את המערכת לעוד K צעדים שעל-פניהם מקבלים ממוצע חדש, $\langle M\rangle_K$. התכנסות לתוצאה היא כאשר ההפרש היחסי בין שני הממוצעים קטן מסף נדרש, כלומר

$$\frac{\left|\langle M\rangle_K-\langle M\rangle_{K/2}\right|}{\left|\langle M\rangle_K\right|}\le\Delta . \qquad (3)$$

נסו את הערך $\Delta=10^{-3}$, אך הגבילו את עצמכם ל-$K=10^8$ היפוכים (קבלו את התוצאות כסופיות אם הגעתם למספר זה של היפוכים גם אם קריטריון ההתכנסות לא הושג).

ג. אם אחרי K הצעדים הראשונים קיבלתם התכנסות לפי הקריטריון של משוואה (3), מה טוב. אם לא, הכפילו את מספר הצעדים ל-$2K$. כלומר, K הופך ל-$2K$, $\langle M\rangle_K$ שחישבתם הופך להיות $\langle M\rangle_{K/2}$ והמשך ריצה מייצר $\langle M\rangle_K$. ושוב: הצלחתכם לקבל התכנסות? מצויין. אם לאו, שוב עליכם להכפיל את מספר הצעדים – ל-$4K$ (כלומר, לבצע עוד $2K$ צעדים). בשאיפה, אם בחרתם K סביר כניחוש ראשון, הפעולה הזו תתכנס די מהר.

ד. במקביל למעקב אחרי $\langle M\rangle$ ו-$\langle M^2\rangle$, עקבו באופן מצטבר אחרי $\langle U_{tot}\rangle$ ו-$\langle U_{tot}^2\rangle$. כזכור, מסטיית התקן של הפלוקטואציות באנרגיה ניתן למצוא את קיבול החום הסגולי (פר חלקיק) של המערכת, לפי הקשר

$$c_V=\frac{C_V}{N}=\frac{k_B}{N}\left(\frac{\langle U_{tot}^2\rangle}{(k_BT)^2}-\frac{\langle U_{tot}\rangle^2}{(k_BT)^2}\right). \tag{4}$$

6. חישובים לביצוע

בתרגיל נבחן שריג של 32×32 חלקיקים (אם אתם מסתבכים עם זמני ריצה ארוכים, נסו שריג של 16×16).

א. בצעו סדרות של חישובים כדלקמן:

עבור $B=0$ הציבו ערכים של $\eta\equiv J/k_BT$ בתחום של 0.1-0.8 ובצעדים של 0.05. כמו-כן, בצעו חישובים ברזולוציה גבוהה של 0.005 בתחום הערכים $0.42\le\eta\le0.46$ כדי לחקור את התחום שסביב הערך הקריטי $\eta_C=0.4406868$ שהוא הנקודה הקריטית, בה מתקיים מעבר הפאזה הפרומגנטי.

הערה: כרגיל, קשה לכנס את התוצאות סביב הנקודה הקריטית.

ב. חזרו על החישובים של הערכים של η בתחום של 0.1-0.8 ובצעדים של 0.05, עם ערכים שונים של השדה המגנטי, ובפרט $h\equiv\mu B/k_BT=0.1,0.5,1.0$.

7. הצגת התוצאות

א. עבור המקרה של $B=0$ הציגו גרפים של המגנטיזציה הסגולית $|\langle M\rangle|/N$ שקיבלתם כפונקציה של η. הערה: בהנתן $B=0$, מגנטיזציה חיובית ומגנטיזציה שלילית שקולות; לכן יש להציג במקרה זה את הערך המוחלט של המגנטיזציה.

משיקולים פיסיקליים: הסבירו את התוצאה בערכי η נמוכים.

השוו את התוצאות שלכם בתחום $\eta>\eta_C$ לתוצאה העיונית של Onsager עבור שריג אינסופי,

$$\frac{M}{N}=\pm\frac{\left(1+z^2\right)^{1/4}\left(1-6z^2+z^4\right)^{1/8}}{\left(1-z^2\right)^{1/2}}\;;\quad z\equiv\exp(-2\eta)\qquad\text{for }\eta>\eta_C. \tag{5}$$

ב. הוסיפו עבור $B=0$ גרפים של האנרגיה הסגולית $\langle U\rangle/N$ ושל קיבול החום הסגולי c_V כפונקציה של η.

(1) מומלץ להשוות את התוצאות לקיבול החום לנגזרת הנומרית, כלומר: כל שני ערכים צמודים של η מייצגים שני ערכים צמודים של טמפרטורה, T_1 ו-T_2. נוכל להעריך באופן גס את קיבול החום פשוט על-ידי חישוב לינארי של הנגזרת של האנרגיה הפנימית לפי הטמפרטורה בטמפרטורת ביניים $T_{mid}=(T_1+T_2)/2$,

$$c_v(T_{mid})\approx\frac{1}{N}\frac{\langle U(T_2)\rangle-\langle U(T_1)\rangle}{T_2-T_1}$$

(2) **הסבירו את המגמות האיכותיות שקיבלתם עבור קיבול החום.**

ג. ציירו שני גרפים נוספים של M/N ושל U/N כפונקציה של η עבור B=0 יחד עם ערכי B האחרים.
האם עבור $B\neq 0$ מתקבל מעבר פאזה? מדוע?
לאילו ערכים שואפים $\langle M\rangle/N$ ו-$\langle U\rangle/N$ ב-η גבוהים? מדוע?

ד. שוב עבור B=0, שרטטו גרף נוסף של היחס בין מספר היפוכי הספין למספר הניסיונות שאתם מוצאים בחישוב כפונקציה של η. **מה היא המגמה המתקבלת?** נסו לשם כך גם את הערך $\eta=2$.

<u>נספח (1) – חישוב הסתברויות להיפוך ספין ועדכון הסתברויות אחרי ההיפוך</u>

עבור כל חלקיק i שנבחר ניתן לפרק את האנרגיה של השריג כולו לאנרגיה של החלקיקים שאיננה קשורה לחלקיק ה-i, שנסמנה ב-E_0, ואת האנרגיה התלויה בתכונותיו של החלקיק ה-i, אותה נסמן ב ε_{i-now}. נקבל להבין כי

$$. E_0 = -\frac{J}{2}\sum_{j,k\neq i} s_j s_k - \sum_{j\neq i}\mu B s_j \quad ; \quad \varepsilon_{i-now} = -Js_i\sum_{j=1}^{4} s_j - \mu B s_i \tag{6}$$

(בסכום הכפול ב-E_0, גם j וגם k שונים מ-i). אם החלקיק ה-i הופך את כיוון הספין, הערך של s_i מחליף סימן, ולכן האנרגיה שהוא משפיע עליה תקבל אחרי ההיפוך את הערך ε_{i-flip} , שבמונחים של הערכים לפני ההיפוך של s_i ו-ε_{i-now}:

$$. \varepsilon_{i-flip} = -J(-s_i)\sum_{j=1}^{4} s_j - \mu B(-s_i) = -\varepsilon_{i-now} \tag{7}$$

כך נוכל לקבל ביטוי פשוט לסיכוי ההיפוך של החלקיק ה-i לפי משוואה (2):

$$\begin{aligned} p_{i-flip} &= \frac{\exp(-\beta E_{i-flip})}{\exp(-\beta E_{i-now}) + \exp(-\beta E_{i-flip})} = \frac{\exp(-\beta(E_0+\varepsilon_{i-flip}))}{\exp(-\beta(E_0+\varepsilon_{i-now})) + \exp(-\beta(E_0+\varepsilon_{i-flip}))} \\ &= \frac{\exp(\beta\varepsilon_{i-now})}{\exp(-\beta\varepsilon_{i-now}) + \exp(\beta\varepsilon_{i-now})} = \frac{1}{\exp(-2\beta\varepsilon_{i-now})+1} \end{aligned} \tag{8}$$

התוצאה במשוואה (8) מבטאת את העובדה שאם החלקיק ה-i הופך את כיוון הספין, האנרגיה של כל המערכת משתנה בדיוק ב-$-2\varepsilon_{i-now}$.