二维 Ising 模型数值模拟

2015301110096 苗泰民 大三彭桓武班

说明:本文所有程序可于 2018 年 1 月 5 日在本人 GitHub 中 Final 文件夹找到

摘要:本文简要的介绍了解决铁磁现象的一种简单又重要的模型——Ising 模型给出其二维形式的精确解。并利用 Monte Carlo 模拟的方法,数值模拟了二维 Ising 模型的各种宏观和微观物理量与温度的关系,重点分析了居里点附近发生的二阶相变和涨落的关系。最后简要的介绍了 Ising 模型与外场之间的关系和磁滞回线。

关键词: Ising 模型 Monte Carlo 模拟 居里点 相变

Abstract: This paper briefly introduces a simple and important model to solve ferromagnetic phenomena, the Ising model gives the exact solution of its two-dimensional form. The relationship between the macroscopic and microscopic physical quantities of two-dimensional Ising model and temperature is numerically simulated by using the method of Monte Carlo simulation. The relationship between the two order phase transitions and fluctuations near the Curie point is mainly analyzed. In the end, the relationship between the Ising model and the field and the hysteresis loop are briefly introduced.

Key words: Ising model Monte Carlo method Curie point phase transition

目录

摘要	1
关键词	1
0 引言	2
1 Ising 模型	2
- 1-1 Ising 模型简述	
1-2 Ising 模型意义	
2 二维 Ising 模型的精确解	
3-1 Ising 模型的简化	4
3-2 平均场方法	5
3-3Monte Carlo 算法	6
4 Ising 模型与温度的关系——二级相变	
5 Ising 模型与外场的关系——一阶相变	
6 结论	
参考文献	13

0 引言

磁是一个生活中必不可少的元素。没有它,我们就无法看电视、听收音机、打电话;没有它,连夜晚甚至都是一片漆黑。人类虽然很早就认识到磁现象,但直到了现代,人们对磁现象的认识才逐渐系统化,发明了不计其数的电磁仪器,像电话、无线电、发电机、电动机等。如今,磁技术已经渗透到了我们的日常生活和工农业技术的各个方面,我们已经越来越离不开磁性材料的广泛应用。

实际上由于电动力学的发展, 我们现在知道磁现象实际上是由于电的相对论修正效应^[1], 同时随着量子力学的发展, 我们知道了磁现象是一个内在的量子现象^[2], 我们似乎已经完美的掌握了磁现象的本质和原理。但实际上, 我们仍有很多含糊不清, 琢磨不透的地方。铁磁相变就是其中之一。

铁磁体是人类最早接触并了解的磁现象,但长久以来,铁磁性又是一个有序同时又混乱的现象,长久以来一直困扰人类。所谓的铁磁相变是指在铁和镍这类金属中,当温度低于居里温度(见铁磁性)时,原子的自旋自发地倾向某个方向,而产生宏观磁矩。温度高于居里温度时,自旋的取向非常紊乱,因而不产生净磁矩。当温度从大于或小于两边趋于居里温度时,金属的比热容趋于无限大。^[3]这是物质在铁磁性状态和非铁磁性状态之间的相变,它并不包含在 P.厄任费斯脱所分类的相变中。Ising 模型就是模拟铁磁性物质的结构,解释这类相变现象的一种粗略的模型。它的优点在于,用统计物理方法,对二维情形求得了数学上严格的解。这就使得铁磁性物质相变的大致特征,获得了理论上的描述。

1 Ising 模型

1-1 Ising 模型简述

在利用 Ising 模型解决相变理论之前,先对 Ising 模型进行一个定性的讨论。首先由原子物理的知识,我们了解到,所谓的铁磁性(ferromagnetic)来源于大量的同方向自旋所贡献磁矩的共同作用,进而在宏观尺度上表现出一个非零的磁矩,也就是铁磁所显示出的自发磁性。由于自旋是量子效应,因此我们所建立的模型也应该是一个量子模型,但着手建立一个真实的固体模型是在过于复杂,因此,我们不得不考虑一些简化的手法,例如令全部的原子自旋设定为 $S_i=1/2$,并将他们固定在规则的方格点上,自旋仅可以取两种方向,up 和 down。这显然是一种过分理想的简化,但实际上,这种模型可以解释或模拟很多有趣的现象,并与实验现象很好的吻合。由此,单个自旋可能的取值只有+1/2,-1/2,为了方便计算,将 1/2 提取到系数中去,于是,自旋可能的取值 $S_i=\pm 1$.下面考虑物理过程,真实的物理场景中,任意两个自旋之间都可以有相互作用,其中最紧邻的两个自旋之间的相互作用是最强烈的,相互作用的大小随着距离的增大而迅速下降。Ising 模型据此进一步简化相互作用,即只考虑最近邻相作用。于是得到 Ising 模型的表达

$$E = -J \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j \tag{1}$$

其中求和号下方<ij>表示只考虑最近邻相互作用, J 就是熟知的交换常数, 我们假设 J 是恒为正值的, 即 J>0, 于是, 当最近邻两个自旋平行, 则其系数即为-J, 当最近邻自旋反平行, 其系数即为 J.

1-2 Ising 模型意义

可以毫不夸张地说,Ising 模型是统计物理中迄今为止唯一的一个同时具备:表述简单、内涵丰富、应用广泛这三种优点的模型。Ising 模型的提出是为了解释铁磁物质的相变,即磁铁在加热到一定临界温度以上会出现磁性消失的现象,而降温到临界温度以下又会表现出磁性。这种有磁性、无磁性两相之间的转变,是一种连续相变(也叫二级相变)。Ising 模型假设铁磁物质是由一堆规则排列的小磁针构成,每个磁针只有上下两个方向(自旋)。相邻的小磁针之间通过能量约束发生相互作用,同时又会由于环境热噪声的干扰而发生磁性的随机转变(上变为下或反之)。涨落的大小由关键的温度参数决定,温度越高,随机涨落干扰越强,小磁针越容易发生无序而剧烈地状态转变,从而让上下两个方向的磁性相互抵消,整个系统消失磁性,如果温度很低,则小磁针相对宁静,系统处于能量约束高的状态,大量的小磁针方向一致,铁磁系统展现出磁性。而当系统处于临界温度 Tc 的时候,Ising 模型表现出一系列幂律行为和自相似现象。

由于 Ising 模型的高度抽象,人们可以很容易地将它应用到其他领域之中。例如,人们将每个小磁针比喻为某个村落中的村民,而将小磁针上、下的两种状态比喻成个体所具备的两种政治观点(例如对 A,B 两个不同候选人的选举),相邻小磁针之间的相互作用比喻成村民之间观点的影响。环境的温度比喻成每个村民对自己意见不坚持的程度。这样,整个 Ising 模型就可以建模该村落中不同政治见解的动态演化(即观点动力学 opinion dynamics)。在社会科学中,人们已经将 Ising 模型应用于股票市场、种族隔离、政治选择等不同的问题。另一方面,如果将小磁针比喻成神经元细胞,向上向下的状态比喻成神经元的激活与抑制,小磁针的相互作用比喻成神经元之间的信号传导,那么,Ising 模型的变种还可以用来建模神经网络系统,从而搭建可适应环境、不断学习的机器(Hopfield 网络或 Boltzmann 机)。[4]

Ising 模型之所以具有如此广泛的应用并不仅仅在于它的模型机制的简单性,更重要的是它可以模拟出广泛存在于自然、社会、人工系统中的临界现象。所谓的临界现象,是指系统在相变临界点附近的时候表现出的一系列的标度现象 (Scaling phenomena),以及系统在不同尺度之间的相似性。临界系统之中不同组成部分之间还会发生长程的关联,这种通过局部相互作用而导致长程联系的现象恰恰是真实复杂系统,如社会、经济、认知神经系统的复杂性所在。因此,Ising 模型不仅仅是一个统计物理模型,它更是一个建模各种复杂系统模型的典范。

2 二维 Ising 模型的精确解

由(1)式,我们可以知道,当最近邻的两个自旋平行的时候此时最近邻的能量最低,因此近邻的自旋总是趋向于同向平行,经过时间的演化,最终整个系统的所有自旋均同向平行,此时对外显示出磁矩就是铁磁性物质的自发磁化过程。但是,系统的温度势必会对系统的能量产生扰动,温度是统计物理必须要考虑的物理量,实际上,所谓铁磁相变就是温度的扰乱作用和自旋相互作用趋于同向排列的有序相互竞争的产物。

Ising 模型最早的提出者是 Wilhelm Lenz (1920)。他让他的学生 Ernst Ising 对一维的 Ising 模型进行求解, 但是并没有发现相变现象, 因此也没有得到更多物理学家的关注。随后, 著名的统计物理学家 Lars Onsager 于 1944 年对二维的 ISING 模型进行了解析求解, 并同时发现了二维 ISING 模型中的相变现象, 从而引起了更多学者的注意。

之后,随着物理学家 Landau、Ginzburg 等人的努力,人们发现了 Ising 模型与量子场 论之间的联系,并创立了平行的"统计场论".

Onsager 的工作是及其漂亮和优雅的,在此之前,没有人从统计物理中直接推导出相变结果。其数学过程相当繁复,在此,我们简要的概述并给出解的结论^[5]:

临界温度(居里温度)可以表述为如下形式

$$sinh \frac{2J}{kT_c} = 1$$
(2)

或

$$\frac{kT_c}{J} = \frac{2}{\ln(1+\sqrt{2})} \approx 2.269\tag{3}$$

为方便起见, 不妨设一个无量纲的参数κ

$$\kappa = 2 \frac{\sinh 2\beta J}{(\cosh 2\beta I)^2} \tag{4}$$

由表达可知,在零温和高温下,κ的值均为 0,在 T=Tc 时,其值为最大值 1.于是我们就可以得到能量的精确解

$$E = -2NJ \tanh 2\beta J - NJ \frac{\sinh^2 2\beta J - 1}{\sinh 2\beta J \cosh 2\beta J} \left[\frac{2}{\pi} K_1(\kappa) - 1 \right]$$
 (5)

其中

$$K(\kappa) = \int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{d\phi}{\sqrt{1 - \kappa^2 \sin^2 \phi}}$$
 (6)

为第一类椭球积分,热容可以由 E(T)对温度求导得到,即

$$C(T) = Nk \frac{4}{\pi} (\beta J coth 2\beta J)^{2} \left[K_{1}(\kappa) - E_{1}(\kappa) - (1 - \tanh^{2} 2\beta J) \left(\frac{\pi}{2} + (2 \tanh^{2} 2\beta J - 1) K_{1}(\kappa) \right) \right] (7)$$
 其中,

$$E_1(\kappa) = \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\phi \sqrt{1 - \kappa^2 \sin^2 \phi}$$
 (8)

为第二类椭球积分, 于是可以解出

$$C \approx -Nk \frac{2}{\pi} \left(\frac{2J}{kT_c}\right)^2 \ln\left|1 - \frac{T}{T_c}\right| + constant \quad (T \ near \ T_c)$$
 (9)

干是单个自自旋的磁化可以解得

$$m(T) = \begin{cases} (1 - [\sinh 2\beta J]^{-4})^{\frac{1}{8}} & (T < T_c) \\ 0 & (T > T_c) \end{cases}$$
 (10)

3 平均场方法和 Monte Carlo 算法

3-1 Ising 模型的简化

实际上二维 Ising 模型的精确解并不具有普适的形式, 他只适用于没有外加磁场的情形, 即 H=0, 在绝大多数情况下, Ising 模型的精确解的形式并不好得出甚至精确得出, 因此一种方便的近似方法就纳入了我们的视野, 其中一种比较普遍的用于解决 Ising 模型方法的计算理论就是平均场理论

首先考虑将系统置于一个恒温大热源中,热源温度恒定为 T,且系统已处于平衡态。于是有统计物理的知识,可以知道,此时系统的统计行为符合正则系综,系统可能处于各个微观态的概率满足 Boltzmann 分布:

$$P_{\alpha} \sim e^{-E_{\alpha}/k_BT}$$

这是由统计物理得到的结论,其中 E_{α} 是对于微观态 α 的能量,与单个自旋的态无关, k_B 为 Boltzmann 常数, P_{α} 为找到某个微观态 α 的概率。所谓微观态是指每一个特殊自旋排布的系统的状态,对于 N 维方格点,总的围观态的数目为 2^N 。当某一个自旋改变其朝向,改为朝上或朝下,即说明该自旋从环境吸收或释放能量,因此系统从一个微观态转换到另一个微观态。而在实际的物理量测量中,所用到的微观态是指在测量时间内众多微观态的有效平均值,因而可以得到对于实际测量的磁矩表达式为

$$M = \sum_{\alpha} M_{\alpha} P_{\alpha} \tag{11}$$

其中, $\mathbf{M}_{\alpha} = \sum s_i$ 为微观态 α 对应的自旋方向的和。因而现在统计物理学的问题转换为对 \mathbf{N} 的一个求和问题,然而,实际问题中通常关心的是 $\mathbf{N} \rightarrow \infty$ 的问题,这是非常难以解决的,然而对于我们所考虑的 \mathbf{N} 维格点的 Ising 模型,对模型取无穷循环边界条件,也就是说,每个自旋在系统中的地位相同,也就是说全部自旋是全同的,于是可以得到

$$M = \sum_{i} \langle s_i \rangle = N \langle s_i \rangle \tag{12}$$

其中<s>,表示对于单个自旋的平均值,这是一种温度平均值,但在考虑热平衡体系下,也就是对时间平均值,由上式可得,问题的关键就是求得这个值。

3-2 平均场方法

我们先要介绍一下一个即为重要的求解方法——平均场理论。现考虑一个存在外场的体系,于是 Ising 模型能量表达式就变为。

$$E = -J \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j - \mu H \sum_i s_i$$
 (13)

其中, H 为对于每个自旋的外场磁矩。由于外场的作用, 最终每一个自旋均会趋于与外场磁矩同向, 因为此时能量最低, 对于每一个自旋, 可能的微观态存在两种, 即上和下, 由正则系综, 其相应的概率为

$$P_{+} = Ce^{+\mu H/k_{B}T}$$

$$P_{-} = Ce^{-\mu H/k_{B}T}$$

其中 C 为配分函数, 其值为

$$C = \frac{1}{Ce^{+\mu H/k_BT} + Ce^{-\mu H/k_BT}}$$

于是,得到单个自旋的态平均值的值为

$$< s_i \ge \sum_{s_i = +1} s_i P_{\pm} = P_+ - P_- = \tanh\left(\frac{\mu H}{k_B T}\right)$$
 (14)

这是在外场存在下,对单个自旋的精确解,而所谓平均场理论就是基于此,假设与自旋发生相互作用的只有最近邻的自旋,即()式的等号右边第一项,将最近邻相互作用等效成一个外场对该自旋的作用,于是有

$$E = -\left(j\sum_{\langle ij\rangle} s_j\right) s_i - \mu H s_i \tag{15}$$

我们看到其中包含 J 的项,将其表达为 $\mu H_{eff} = J \sum s_j$,假设其中 s_j 可以由其平均值代替,于是可以得到

$$H_{\text{eff}} = \frac{J}{\mu} \sum \langle s \rangle = \frac{zJ}{\mu} \langle s \rangle \tag{16}$$

其中 z 表示近邻的自旋数目, 于是可以解得

$$\langle s \ge \tanh(zJ \langle s \rangle/k_BT)$$
 (17)

这是一个隐式方程,并不好求其解析解,但可以数值分析出一些有趣的结论,当考虑x为小值时,可以做如下展开 $tanh(x) \approx x - x^3/3$ 于是可以得到

$$\langle s \rangle \approx \frac{zJ \langle s \rangle}{k_B T} - \frac{1}{3} \left(\frac{zJ \langle s \rangle}{k_B T} \right)^3$$
 (18)

也就是说, 可以得到

$$~~(19)~~$$

其中β时临界指数,这说明在居里点附近,会有一个有趣的物理现象,因为这时很多斜率非常的陡峭,事实上,下文会说明此时的确有很奇特的物理现象。

3-3Monte Carlo 算法

蒙特·卡罗方法(Monte Carlo method),也称统计模拟方法,是二十世纪四十年代中期由于科学技术的发展和电子计算机的发明,而被提出的一种以概率统计理论为指导的一类非常重要的数值计算方法。是指使用随机数(或更常见的伪随机数)来解决很多计算问题的方法。与它对应的是确定性算法。蒙特·卡罗方法在金融工程学,宏观经济学,计算物理学(如粒子输运计算、量子热力学计算、空气动力学计算)等领域应用广泛。^[6] 其具体测操作可以由如下流程表述:

- ▶ 设置环境的温度值 T 和外场值 H
- \triangleright 初始化所有自旋 s_i 的取向(例如可以取对于所有i,设置 $s_i = 1$)
- > 对格点执行希望数量的 Monte Carlo 扫描
 - ◇ 对于给定的扫描通过对格点的 L 列/行循环, 对于每一行/列考虑每一个自旋的情况, 更新其状态
 - 计算 E_{flip} ,所选自旋需要翻转的能量。对于最近邻相互作用, E_{flip} 仅依赖于最近邻的自旋,对于边缘的自旋,应用循环边界条件,定义近邻自旋。
 - 如果 $E_{flip} \leq 0$,翻转自旋
 - 如果 $E_{flip} > 0$,生成一个随机数取值区间为[0,1]的随机数 \mathbf{r} ,并计算 $\mathbf{e}^{-E_{flip}/k_BT}$
 - ◆ 如果 $r \le e^{-E_{flip}/k_BT}$, 翻转自旋
 - ◆ 如果 $r > e^{-E_{flip}/k_BT}$. 维持原自旋不变
 - ◆ 当每一个扫描结束后,记录新的能量,总磁矩以及任意其他的相关量,重复步骤
- ▶ 储存动力学量数据并作图

我们之后的模拟均建立在 Monte Carlo 的基础上,下面我们来具体的模拟 Ising 模型的一些关系

4 Ising 模型与温度的关系——二级相变

由上面内容的分析

为了简便计算考虑选取 $J/k_B = 1$ 即温度以 J/k_B 作为温度的单位, z = 4对应于二维方格点的近邻自旋数目, 我们首先研究系统的总磁矩与时间的关系, 结论如图 1 所示,

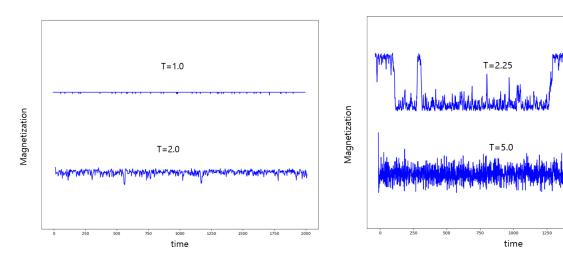


图 1 Ising 模型总磁矩与时间的关系

图 1 中模拟了10×10格点的 Monte Carlo 计算, 计算次数为每个时间点计算次数为200次, 温度分别设置为1.0, 2.0, 2.25, 5.0, 运行时间为2000次。由图片可以看出, 随着时间的增加, 温度对系统的印象也越明显, 其具体表现为系统的涨落现象更剧烈, 并且随着温度的增强越发的剧烈, 同时定量研究可以看出, 当温度较低的时候, 涨落非常不明显, 并且系统稳定在1左右, 当温度升高系统的总磁矩比1略低, 但仅仅低一点, 涨落逐渐明显, 当温度升高到2.25度时, 也就是接近居里温度的时候, 总磁矩不再稳定, 而是在+1和-1之间来回跳跃, 且其值具有一定的随机性, 这是系统的涨落取到了极大值。而当温度继续升高时, 总磁矩基本在0值附近抖动, 且其涨落仍然剧烈, 但已回归到正常水平, 也就是说此时温度的无序性占了主导地位, 磁铁演化为顺磁性, 且不会发生像局里点附近的跳跃情况。而我们非常好奇局里点附近的物理, 为此我们特别演化了T=2.25时的图像, 结果如图2所示。

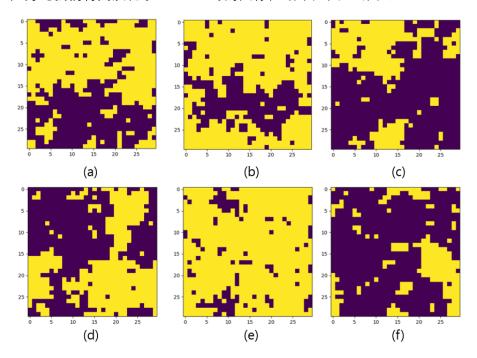


图 2 是根据30×30格点的 Monte Carlo 模拟,每次演化时间间隔随机选择,图中字母顺序为时间演化顺序,图中黄色的格点是自旋向下的自旋,紫色的格点是自旋向上的自旋。我们可以看到在这个温度附近的时间演化存在非常的的随机性,我们无法准确的判断下一时刻自旋的状态,可能全部翻转,也可能变化不大,特别是(d)(e)两幅图可以看的非常明显,这样剧烈的变化可以说是无穷大的涨落导致。

这是因为在居里点附近, Ising 模型存在二阶相变, 在相变点附近模型的状态极其不稳定, 甚至发生翻转的可能, 实际上, 2.25 这个值与之前提到的二维 Ising 模型的理论值 2.67 非常接近, 是在居里点附近, 因而才会由如此奇特的现象。

于是由时间演化,我们看出不温度的确是影响 Ising 系统的一个重要因素,下面我们就来探究下系统的物理参量与时间的具体关系

即以时间为自变量, 研究总磁矩, 单个自旋平均磁矩和比热, 平均磁化系数之间的关系, 如图 3 和图 4 所示, 图 3 演示了30×30格点的温度变化关系, 图 (a) 为温度 T=1 时的自旋方向分布, 这是, 由于自发磁化, 自旋绝大多数沿负向分布。图 (b) 为温度为 T=2.26 时的自旋方向分布, 这是接近距离温度, 发生二阶相变, 此时不好控制其状态, 图 (c) 为 T=5 时的自旋分布, 此时自旋基本接近, 上下相等, 不存在对外的总磁矩。图 3 演示了相似的现象, 只是此时采用更高的格点数目100×100格点来进行模拟, 按字母顺序依次是 T=0.25, T=0.7, T=2.25, T=2.26, T=5 时的自旋分布情况, 可以看出

与小数目的情形基本相同只是,此时演示的更加清晰。

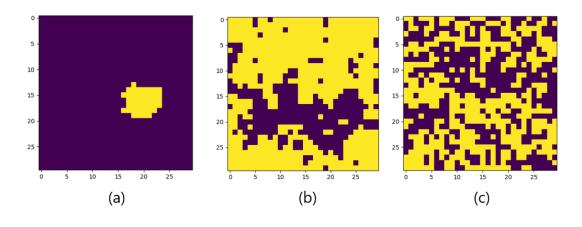


图 3 30×30格子的自旋取向

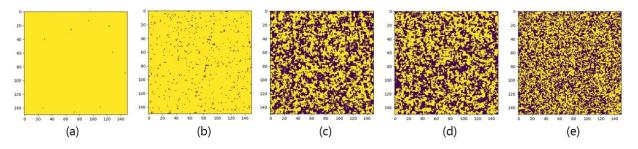


图 4 100×100格子的自旋取向

于是我们探究总磁矩这个物理量与温度 T 之间的关系, 结论如图 5 所示。

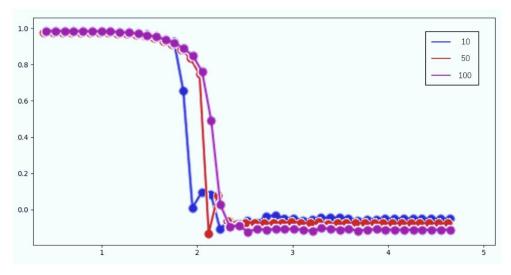


图 5 总磁矩随时间的关系图

图 5 分别展示了10×10,50×50,100×100格点数目的格点的模拟,可以看出随着格点数目的升高其在无穷温度下的收敛值更趋于0,这是由于,格点数目增高,单独一个自旋的涨落对系统整体的影响影响越小。由图可以看出,在 2.25 温度附近,有一段曲线斜率为无穷大,这个温度点接近居里温度,在这附近,系统发生了二级相变。而单个自旋平均能量随温度的变化就不随格点数的增加发生变化,由图 6 所示,分别展示了10×10,50×50,100×100格点数目的格点的模拟。可以看出这格点数目的增大并不影响单个自旋能量的曲线,我们可以看到,不同格点数在收敛值和斜率下,几乎都相同。分析这个图可以看出,在温度趋近于0时,自旋能量趋近于-2,温度逐渐升高,自旋平均能量又趋近于1/2 附近,这与理论计算相吻合的。值得一提的是,在居里点附近,其斜率取到最大值。

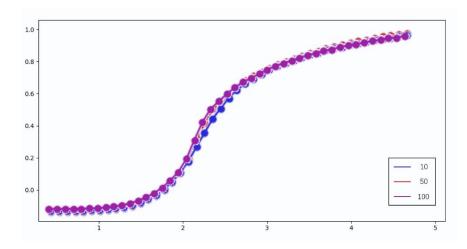


图 6 单个自旋平均能量随时间关系图

我们可以看到,在相变点处物理量都具有比较奇特的物理效应,他们的物理量不是连续变化的而是突然由一种宏观排列跳跃到另一种宏观排列,这种由一种相在某种情况下跳跃到另种相的现象叫做相变。

至此我们弄清楚了,系统总体的变化和单独元素的变化随时间的关系,但是系统的一些细节我们还没有研究,即涨落和相应。根据 Fluctuation dissipation 理论,我们可以定义系统的涨落和响应函数,即

$$C = \frac{(\Delta E)^2}{kT^2}$$
$$\chi = \frac{(\Delta M)^2}{kT^2}$$

这即是系统的热容和磁化率,由此我们可以得到图7和图8,

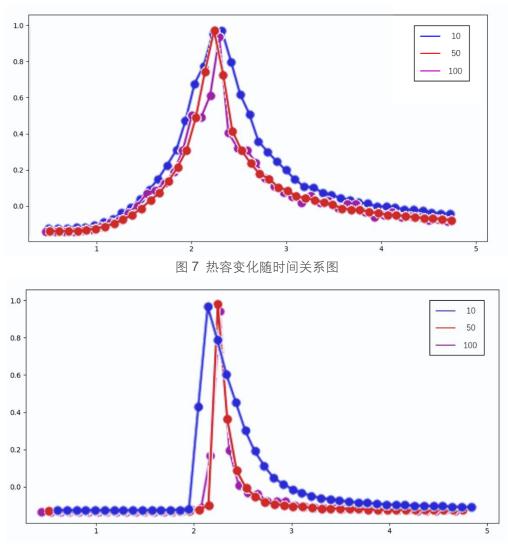


图 8 磁化率随时间关系图

即热容和磁化率随温度的变化曲线,两张图都分别展示了10×10,50×50,100×100格点数目的格点的模拟。由图 7 可以看出在居里点附近,随着热容得增高,在居里点附近的峰越高越尖锐,这其实说明在此存在一个奇点,但是曲线并没有那么陡峭,而是相对连续的平滑曲线,这可能和我所模拟的格点数目以及 Monte Carlo 步数有关,然而即便这样的曲线也可以看出在相变点处,系统的涨落处于一个极值,这时涨落最大,而在此之前涨落逐渐上升,之后涨落逐渐下降,低温下收敛于 0,高温下趋近于一个常值。由图 7 可以看出,磁化率,也就是每个自旋的平均磁化数,随着格点数目的提高,在居里点附近形成一个逐渐变窄,变尖锐的峰,这说明,系统对磁化的响应在局里点附近产生一个突变。

综上所述, Ising 模型系统与温度的关系是非常密切的, 温度确实影响着众多物理量的效应, 并且在居里点附近各种物理量均会有一个斜率极大突变, 这是由于此时磁化率即磁化响应, 和热容即涨落均有一个无穷值得变化, 因此, 在居里点处, 系统发生二阶相

变, 这时系统的随机性非常大, 难以准确预测。

5 Ising 模型与外场的关系——一阶相变

之前的讨论都是建立在外场的磁矩为 0 的前提下进行的,即 H=0,此时我们非常方便讨论温度的变化对系统的影响,但是实际上,影响 Ising 模型的因素还取决于外场,实际上外场的变化可以带来更加强烈的相变——一阶相变。如图 9 所示。

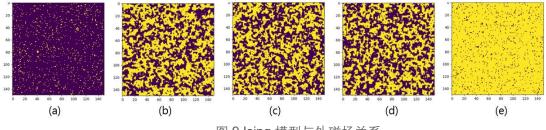


图 9 Ising 模型与外磁场关系

图 8 展示了当外场变化时,对于100×100格点,在 T=1.1 环境下,系统对外场的响应图 (a) 和 (e) 是当外场为 H=-2 和 H=+2 时的系统的状态,此时系统趋于与外场磁矩相同方向的排列,因而取向几乎全部为负或正。而图 (b) (c) (d) 分别模拟了当外场为 H=-0.01, H=0, H=0.01 时的系统取向,仔细观察可以看出,某些区域完全反向,某些区域不存在反向。由于所处温度较低,加上涨落现象的考虑,可以看出,即便是如此小的外场变化,系统某些区域也会发生强烈的自旋翻转现象,可以看出,外场对于体系的影响之深,使体系在相变点 H=0 处发生翻转的变化。

而值得一提的,我们都知道铁磁体存在磁滞回线,如图 10 所示,所谓的磁滞回线,就是指,当磁场正向变化再反向变化回去时对系统的总磁矩进行测量,发现,两者曲线并不重合而是由很大的间隙,着说明系统对于外场的变化存在一定的记忆性和延迟性。由图可以看出,在温度比较低的情形下,磁滞回线较为明显,但是当温度增大后磁滞回线逐渐变小最终消失,这说明,外场对系统的影响很大程度依赖于温度的变化,当温度较低时一级相变和磁滞回线较为明显,但是当温度升高后,一级相变和磁滞回线逐渐不显著最终消失。

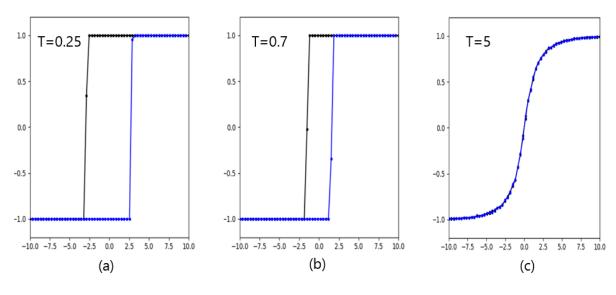


图 10 磁滞回线

6 结论

通过对二维 Ising 模型的深入 Monte Carlo 模拟,我们认识到了 Ising 模型对于分析铁磁体和物理学界的重大作用,认识到了 Monte Carlo 模拟是一种很可靠的分析 Ising 模型系统的数值方法,同时我们认识到,在居里点附近的系统会发生二阶相变,而导致其相变的原因时因为涨落的突变的无穷大点。而外场 H 将会使系统产生一个与能量有关的一阶相变,但这种相变非常依赖于温度,当温度升高,相变就消失。同时,我们得到 Ising 模型的确使一个非常简单同时又极为重要到物理模型,相信对 Ising 模型的深入研究,将对未来物理学,产生更为深远的影响。

参考文献

- [1] R.P.Feynman,新千年版:费恩曼物理学讲义(第2卷)[M].上海科学技术出版社,2013.
- [2] 赵凯华, 陈熙谋. 电磁学[M]. 高等教育出版社, 2011.
- [3]沈惠川, 统计力学[M], 科学技术出版社, 2011.
- [4] Wikipedia, Wikipedia Ising model[EB/OL], https://en.wikipedia.org/wiki/Ising_model, 2017/12/28
- [5] Harvey Gould and Lan Tobochnik, Statistical and Thermal Physics with Computer Application[M], Princeton University Press, 2009
- [6] Giordano N J, Nakanishi H. Computational physics[M]. Pearson Education India, 2006.