

Kanonski ansambl, Isingov 2D model

Pojednostavljeni model koji dobro opisuje bit fizike magnetizma:

- svaki spin može biti usmjeren samo u +z ili u -z smjeru (gore ili dolje)
- radi jednostavnosti definiramo $s_i = \pm 1$
- spinovi su posloženi po pravilnoj rešetki a svaki interagira sa svojim najbližim susjedima

Energija rešetke spinova:

$$E = -J \sum_{i,j=ns(i)}^L s_i s_j - B \sum_{i=1}^L s_i$$

- interagiraju samo prvi susjedi, pa prva suma ide samo po parovima najbližih susjeda (ns)
- konstanta izmjene J mjeri jačinu interakcije prvih susjeda
 - ✓ $J > 0 \Rightarrow$ stanja $\uparrow\uparrow$ i $\downarrow\downarrow$ energijski su povoljnija u usporedbi sa stanjima $\uparrow\downarrow$ i $\downarrow\uparrow$
 - ✓ $J > 0 \Rightarrow$ stanje najniže ukupne energije je feromagnetsko (svi spinovi u istom smjeru)
 - ✓ $J < 0 \Rightarrow$ stanja $\uparrow\downarrow$ i $\downarrow\uparrow$ energijski su povoljnija i stanje najniže energije bi trebalo biti antiferomagnetsko (susjedni spinovi imaju suprotan smjer)
- druga suma predstavlja energiju interakcije između magnetskih momenata spinova i vanjskog magnetskog polja (B je konstanta proporcionalnosti)
 - ✓ spinovi \uparrow i \downarrow dobivaju dodatnu energiju $-B$ i $+B$
- ne govori o promjeni konfiguracije sustava iz jedne u drugu pa dinamiku moramo uvesti odvojeno

Promatramo:

- osobine beskonačnog 2D sustava za koji je $B = 0$
- aproksimiramo ga malim dijelom koji se periodično ponavlja ($L \times L$ spinova)
- Promatramo kako veličina periodičnog dijela utječe na rezultate (različite veličine rešetki)
 - ✓ Računamo srednje vrijednosti promatranih veličina po spinu kako bismo lakše usporedili rezultate dobivene s rešetkama različitih dimenzija

Rubni uvjeti u 2D:

1. najjednostavniji: spinovi na rubnim mjestima imaju manje najbližih susjeda
2. periodični (bolji): spinovi na mjestima $(1,j)$ i (L,j) interagiraju jedni s drugim i slično za ostale rubove
 - ✓ dvodimenzionalna (2D) rešetka postaje torus
 - ✓ rubni spinovi imaju isti broj interakcija kao i središnji, znači svi imaju 4 najbliža susjeda

Fizikalne veličine:

- magnetizacija

$$M = \sum_{i=1}^N s_i$$

✓ zanima nas prosječna vrijednost $\langle M \rangle$ i fluktuacija $\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2$

- magnetizacija po spinu

$$m = \frac{M}{L \cdot L}$$

- srednja energija

$$\langle E \rangle = \sum_s E_s P_s = \frac{1}{Z} \sum_s E_s e^{-\beta E_s} = -\frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \beta} = -\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta}; \quad \beta = \frac{1}{kT}$$

- toplinski kapacitet

$$C = \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial T} = -\frac{1}{kT^2} \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial \beta} = -\frac{1}{kT^2} \left[-\frac{1}{Z^2} \frac{\partial Z}{\partial \beta} \sum_s E_s e^{-\beta E_s} - \frac{1}{Z} \sum_s E_s^2 e^{-\beta E_s} \right] = \frac{1}{kT^2} (\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2)$$

- energija = energija spinske interakcije u odsutnosti polja $E_{0,s}$ + potencijalna energija uzorka magnetizacije M_s u vanjskom polju H

$$E_s = E_{0,s} - HM_s \Rightarrow \frac{\partial E_s}{\partial H} = -M_s \Rightarrow \frac{\partial Z}{\partial H} = \beta \sum_s M_s e^{-\beta E_s}$$

- prosječna magnetizacija

$$\langle M \rangle = \frac{1}{Z} \sum_s M_s e^{-\beta E_s} = \frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial H} = \frac{1}{\beta} \frac{\partial \ln Z}{\partial H}$$

- magnetska susceptibilnost

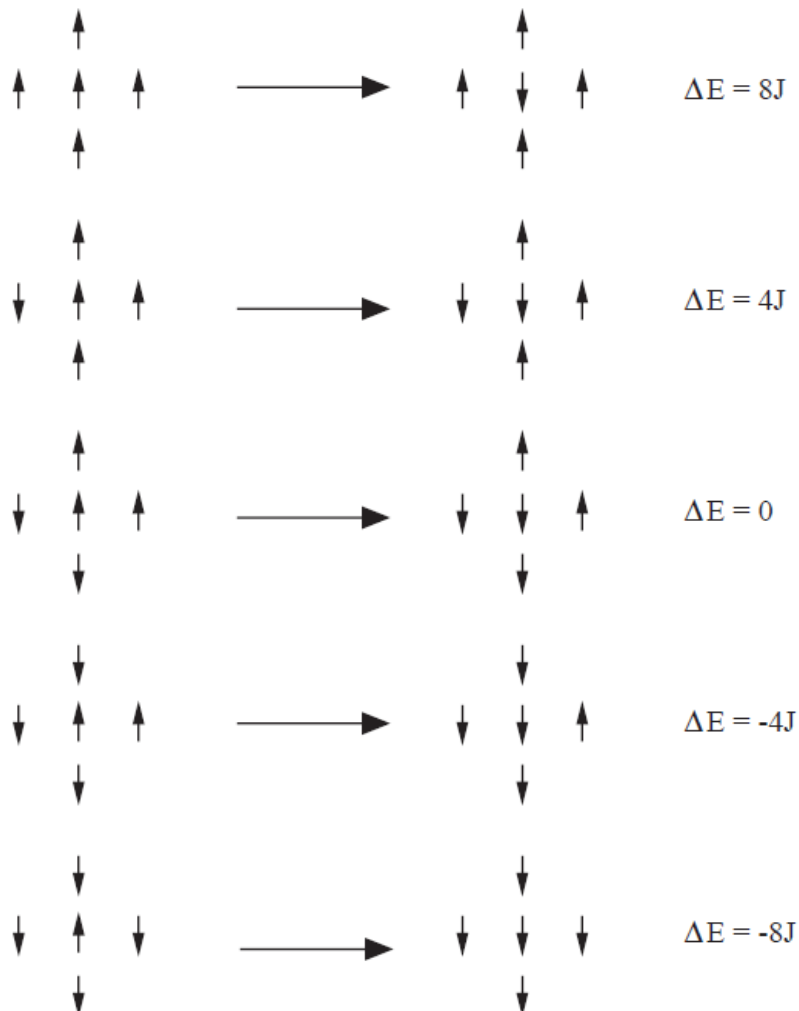
$$X = \frac{\partial \langle M \rangle}{\partial H} = -\frac{1}{Z^2} \frac{\partial Z}{\partial H} \sum_s M_s e^{-\beta E_s} + \beta \frac{1}{Z} \sum_s M_s^2 e^{-\beta E_s} = \frac{1}{kT} (\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2)$$

- toplinski kapacitet i magnetska susceptibilnost po spinu

$$c = \frac{C}{L \cdot L} \quad ; \quad \chi = \frac{X}{L \cdot L}$$

Metropolis algoritam

- koristimo ga za uzimanje uzoraka konfiguracija u Isingovom modelu
- nasumično odaberemo element i promijenimo mu spin
`i = (int)(1.+ran1(&idum)*max); // izaberi element od 1 do max`
`j = (int)(1.+ran1(&idum)*max);`
`s[i][j] *= -1; // promjena spina`
 - izračunamo promjenu energije dE prilikom mijenjanja spina
 ✓ razlikuje se za (-2) puta u odnosu na doprinos energiji od promijenjenog spina i njegova 4 najbližih susjeda



```
dE=-2.*Jv*s[i][j]*(s[i+1][j]+s[i-1][j]+s[i][j+1]+s[i][j-1]);
```

- Metropolis algoritmom bismo hoćemo li prihvatiti promjenu ili zadržati staru konfiguraciju

```

if ( (dE>0) && (exp((-dE)/kT) <= ran1(&idum)) ) {
    s[i][j] = s[i][j]*(-1); // odbaci promjenu
    dm=0.;
    reject= reject +1./ns/nb; // udio odbacenih koraka
    dE=0;
}

```
- za dobivenu konfiguraciju izračunamo fizikalnu veličinu koja nas zanima, pohranimo je i vraćamo se u 1. korak

```

pocetna energija      -512.000000
pocetna magnetizacija 256.000000
srednja energija:     -499.316627
srednja magnetizacija: 252.497589

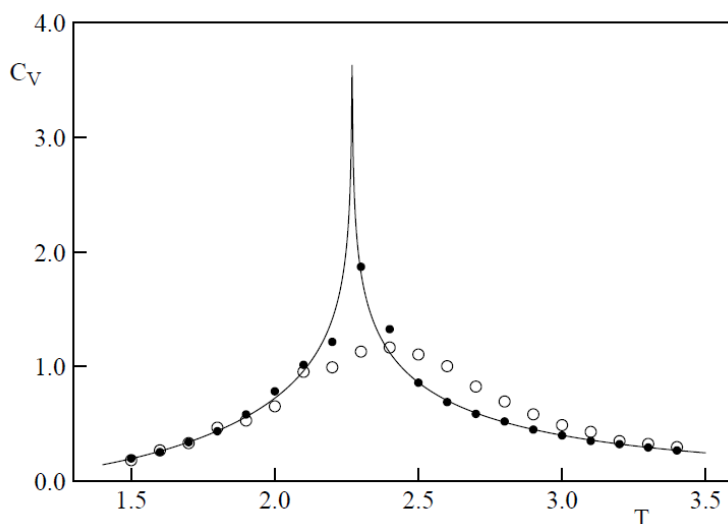
susceptibilnost po spinu: 0.026909
toplinski kapacitet po spinu: 0.197859

postotak prihvatanja: 0.013293

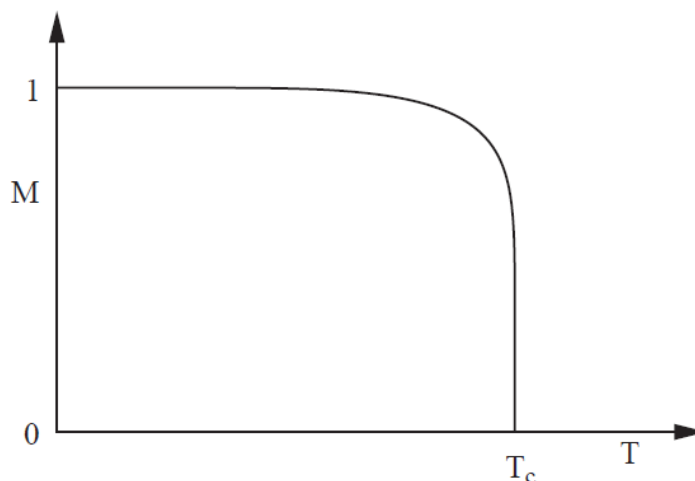
```

Određivanje faznog prijelaza

- Temperaturna ovisnost specifičnog toplinskog kapaciteta C_V po spinu za Isingov model periodične kvadratne mreže za $L = 8$ (puni krugovi) i $L = 16$ (prazni krugovi), $L \equiv \max$. Vrijednosti su usrednjene preko 1000 Monte Carlo koraka po spinu za svaku temperaturu. Puna linija predstavlja temperaturnu ovisnost za beskonačnu rešetku (C beskonačan u T_c).



- Magnetizacija po spinu



- Više je primjera izdvojeno u skripti u poglavlju 3.4.4 Fazni prijelaz drugog reda.

[Z9] Odredite kako se ponaša susceptibilnost po spinu, za beskonačan sustav modeliran korištenjem različitih periodičnih rešetki (4×4 , 16×16), u ovisnosti o temperaturi. Promotrite temperaturni raspon od **1** do **5 K** s koracima od **0.1 K**. Završna konfiguraciju rešetke na prethodnoj temperaturi neka bude trenutna početna. Sakupljajte podatke za računanje prosjeka tijekom **11 000 blokova** po **10^4 koraka** s tim da prije sakupljanja preskočite **1000 blokova** do stabilizacije.

Priložite **kod** i **graf** na kojem su prikazani zajedno rezultati svih simulacija $X(T)$. Na grafu **napišite** kolika je temperatura faznog prijelaza. Priložite neki **dodatni graf** koji potvrđuje ravnotežno uzorkovanje.

EN summary:

$L = 4 \times 4$ & 16×16 , 11 000 blocks (10 000 steps in each), skip 1000 blocks

$X(T = 1 + 0.1 \rightarrow 5K) = ?$ submit code & graph, write T_c on graph

Sttach additional graph to confirm stabilization