Symulacja fluktuacji magnetyzacji idealnego paramagnetyka w zewnętrznym polu magnetycznym

Mateusz Gałażyn

18 stycznia 2012

1 Model Isinga

Energia jednowymiarowego łańcucha spinów w modelu Isinga jest określona zależnością [1]:

$$E = -\sum_{i=1}^{N-1} J s_i s_{i+1} - HM$$

Magnetyzacja paramagnetyka wynosi:

$$M = \gamma \sum_{i=1}^{N} s_i = \gamma N \langle s \rangle$$

gdzie J - oddziaływanie między węzłami, s_i - spin i-tej cząstki w łańcuchu $s_i \in \{-1, 1\}$, γ - współczynnik proporcjonalności oddziaływania jednego elementu łańcucha z polem magnetycznym H, N - ilość cząstek w łańcuchu, $\langle s \rangle$ - wartość średnia spinu w łańcuchu. W przypadku idealnego paramagnetyka mamy do czynienia z brakiem oddziaływania pomiędzy poszczególnymi spinami, więc współczynnik $J = 0$. Dla paramagnetyka energia oddziaływania pojedynczej cząstki wynosi $E_i = -\gamma H s_i$, a dla substancji wyraża się wzorem:

$$E = \sum_{i=1}^{N} E_i = -\gamma H \sum_{i=1}^{N} s_i = -\gamma H N \langle s \rangle$$

Rozkład prawdopodobieństwa wystąpienia danego spinu dla cząstki jest rozkładem kanonicznym. Jednocząstkowa suma statystyczna wynosi[1]:

$$z_i = e^{-\beta\gamma H} + e^{\beta\gamma H} = 2\cosh(\beta\gamma H); \qquad \beta = \frac{1}{k_B T}$$

Prawdopodobieństwo wystąpienia spinu w łańcuchu:

$$p(s_i) = \begin{cases} \alpha & = e^{\beta\gamma H}/z_i, \quad \text{gdy } s_i = 1 \\ 1-\alpha & = e^{-\beta\gamma H}/z_i, \quad \text{gdy } s_i = -1 \end{cases}$$

Wartość średnia spinu:

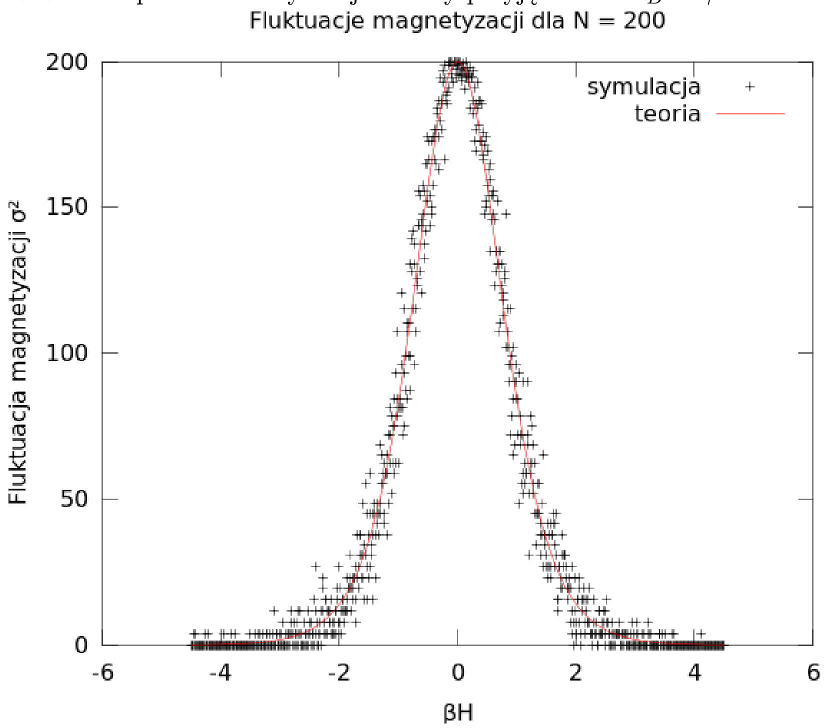
$$\langle s \rangle = p(s_i = 1) - p(s_i = -1) = 2\alpha - 1 = \mathrm{tgh}(\beta\gamma H)$$

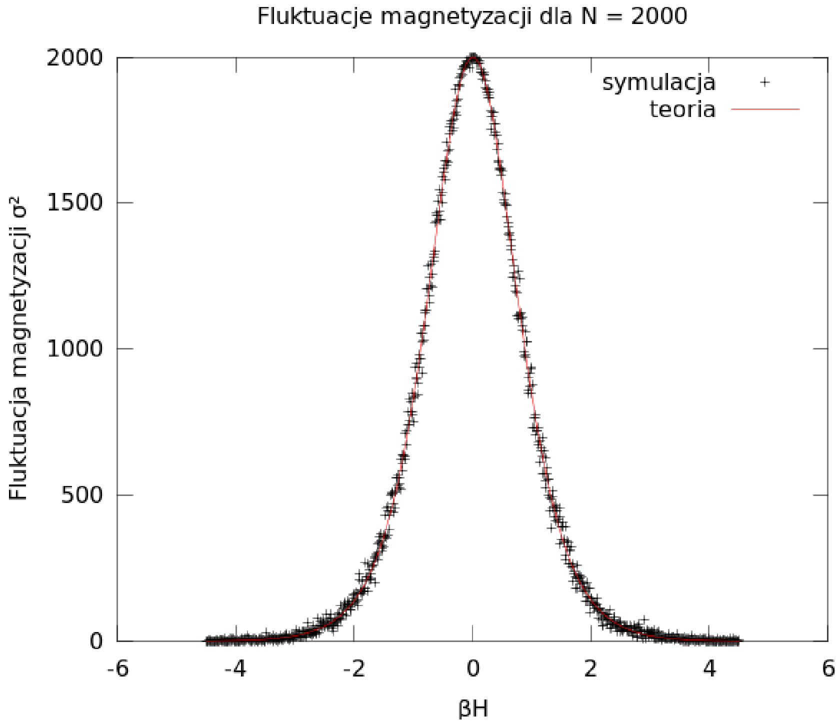
Fluktuacja magnetyzacji jest wyrażona następującą zależnością[2]:

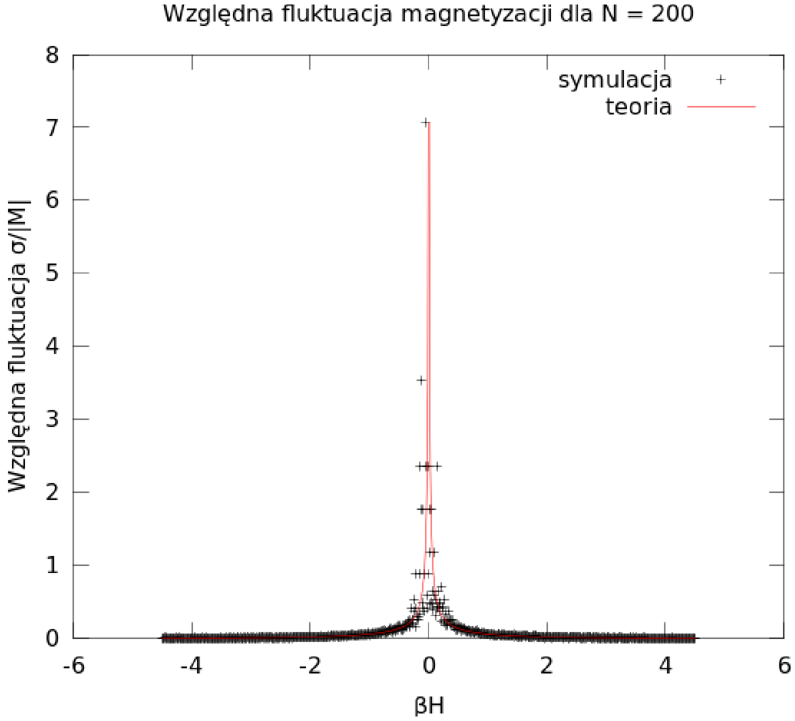
$$\sigma_M^2 = \langle (M - \langle M \rangle)^2 \rangle = \gamma^2 \sum_{i=1}^{N} \langle (1 - \langle s \rangle)^2 \rangle = \gamma^2 N \left(1 - \langle s \rangle^2\right) = \gamma^2 N (1 - \mathrm{tgh}^2(\beta \gamma H))$$

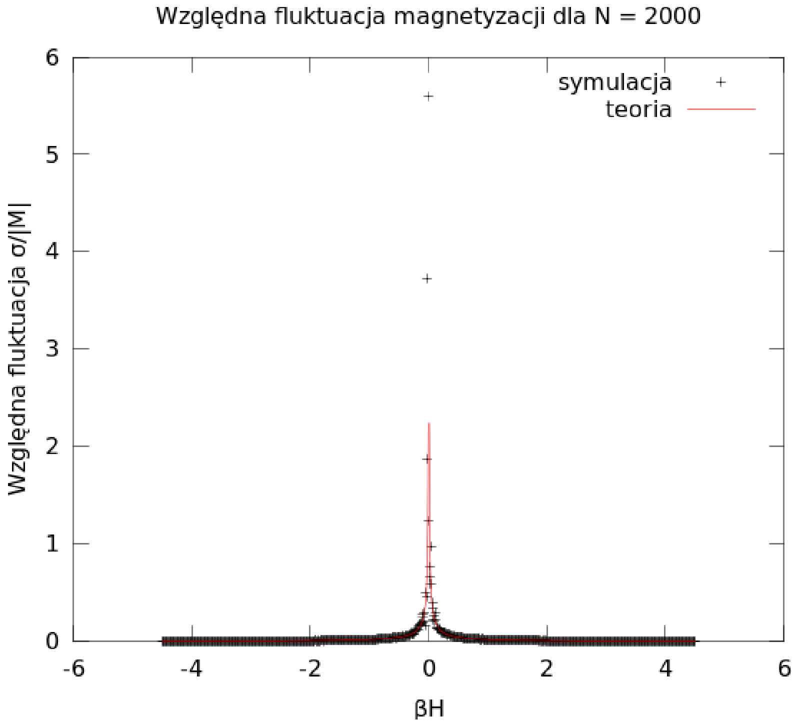
2 Wyniki symulacji

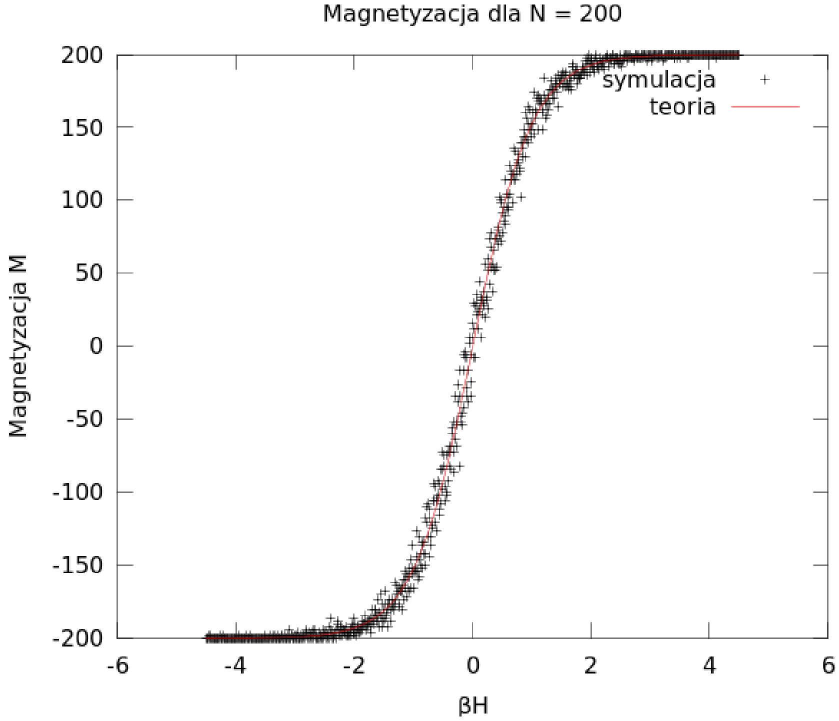
Za pomocą skryptu **simulation.m** zostały wygenerowane wykresy fluktuacji oraz magnetyzacji dla paramagnetyka o ilości spinów $N = 200$ oraz $N = 2000$. Dla uproszczenia sytuacji zostały przyjęte stałe $k_B = \gamma = 1$.

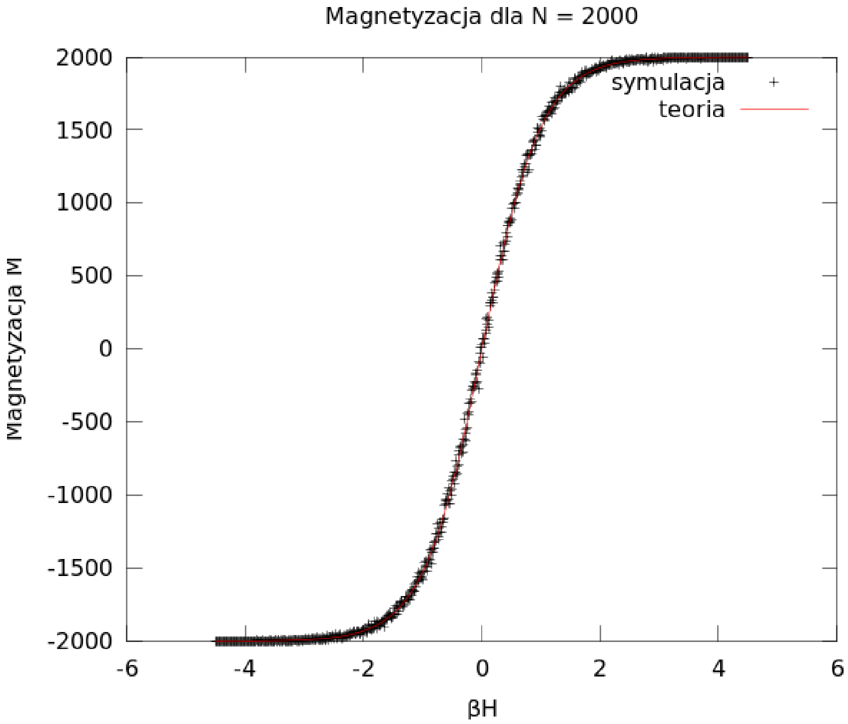



Fluktuacje magnetyzacji dla N = 2000
Fluktuacja magnetyzacji σ²
βH
symulacja
teoria
2000
1500
1000
500
0
-6
-4
-2
0
2
4
6


Względna fluktuacja magnetyzacji dla N = 200
Względna fluktuacja σ/|M|
βH
symulacja
teoria
8
7
6
5
4
3
2
1
0
-6
-4
-2
0
2
4
6


Względna fluktuacja magnetyzacji dla N = 2000
symulacja
teoria
Względna fluktuacja σ/|M|
βH
6
5
4
3
2
1
0
-6
-4
-2
0
2
4
6


Magnetyzacja dla N = 200
symulacja
teoria
Magnetyzacja M
βH
200
150
100
50
0
-50
-100
-150
-200
-6
-4
-2
0
2
4
6



3 Implementacja

Dołączona aplikacja napisana w Javie symuluje rozkład spinów w idealnym paramagnetyku. Białe kwadraty reprezentują cząstki o spinie równym $s_i = 1$, a czarne odpowiednio $s_i = -1$. Dodatnia wartość pola oraz spinu odpowiada zwrotowi wektora wychodzącego przed płaczszczyznę monitora. Dla uproszczenia badanego przypadku zostały przyjęte wartości stałych równe jedności: $k_B = \gamma = 1$.

Zawartość załączonych plików źródłowych:

Graph.java - Klasa rysujaca wykres.

GraphUpdater.java - Klasa odpowiedzialna za wyznaczenie rozkładu spinów.

ModificationListener.java - Klasa odpowiedzialna za przechwytywanie zdarzeń z interfejsu.

Window.java - Klasa tworząca interfejs.

prezentacja.odp - Prezentacja projektu.

simulation.m - Skrypt w Octave symulujący zachowanie się paramagnetyka i generujący wykresy fluktuacji.

Literatura

[1] A. Zagórski: *Fizyka Statystyczna*, OFPW, Warszawa 1994

[2] A. Fronczak: *Zadania i problemy z rozwiązaniami z termodynamiki i fizyki statystycznej*, OFPW, Warszawa 2006