Prosjekt 4: Faseoverganger i magnetiske systemer

Live Wang Jensen

November 12, 2016

Abstract

Målet med dette prosjektet er å implementere Ising modellen for et 2-dimensjonal kvadratisk gitter. Denne modellen beskriver et magnetisk materiale, og vi har forenklet modellen ved å bruke et system som består av partikler, som vi antar er festet i et gitter. Disse partiklene kan enten ha spinn opp eller spinn ned, og kan vekselvirke med hverandre ved å endre spinntilstand. Vi har brukt Metropolis algoritmen for å beregne sannsynlighetstettheten til de ulike tilstandene (?) under en Monte Carlo simulering. Vi har sett på de termodynamiske parameterene, som energi E, gjennomsnittsmagnetisering $\mathcal{M}$, spesifikk varmekapasitet C_V og susceptibiliteten χ som funksjon av temperatur T ved den kritiske temperaturen T_C. KONKRETE TALL

Contents

1 Introduksjon

HVA HAR VI GJORT Målet med dette prosjektet er å studere faseoverganger i to dimensjoner ved hjelp av den populære Ising modellen. Ved en gitt kritisk temperatur vil denne modellen vise at vi får en faseovergang fra en magnetisk fase til en fase med null magnetisering. bla bla

2 Teori

Ising modellen gjør oss i stand til å beskrive oppførselen til et magnetisk materiale som funksjon av termisk energi og ytre magnetfelt. Vi antar her at gitteret vårt er kvadratisk og består av et rutenett av atomer, som enten kan ha spinn opp (+1) eller ned (-1). Energien i Ising modellen kan i sin enkleste form beskrives ved

$$E = -J \sum_{<kl>}^{N} s_k s_l - \mathcal{B} \sum_{k}^{N} s_k \tag{1}$$

hvor $s_k = \pm 1$. Størrelsen N representerer det totale antlall spinn vi kan ha, mens J er koblingskonstanten som forteller oss noe om styrken på vekselvirkningen mellom to nabospinn. Symbolet $< kl >$ indikerer at vi kun skal summere over de nærmeste naboene. I vårt tilfelle har vi ikke noe ytre magnetfelt $\mathcal{B}$, slik at det siste leddet forsvinner. Vi antar at vi har en ferromagnetisk struktur, slik at $J \;\; 0$. Vi kommer til å bruke periodiske grensebetingelser og **Metropolisalgoritmen** til å modellere vårt system.

For et kanonisk system er **partisjonsfunksjonen** gitt ved

$$Z = \sum_{i=1}^{M} e^{-\beta E_i} \tag{2}$$

hvor $\beta = 1/kT$, k er Boltzmanns konstant og E_i er energien til tilstand nummer i. Her summerer vi over alle mulige mikrotilstander M.
I tillegg har vi at **magnetiseringen** er gitt ved

$$\mathcal{M} = \sum_{j=1}^{N} s_j \tag{3}$$

mens den **spesifikke varmekapasiteten** er

$$C_V = \frac{1}{kT^2}\sigma_E^2 = \frac{1}{kT^2}(\langle E^2\rangle - \langle E\rangle^2) \tag{4}$$

Susceptibiliteten er gitt ved

$$\chi = \frac{1}{kT}\sigma_{|\mathcal{M}|}^2 = \frac{1}{kT}(\langle|\mathcal{M}|^2\rangle - \langle|\mathcal{M}|\rangle^2) \tag{5}$$

hvor $|\mathcal{M}|$ er absoluttverdien av magnetiseringen $|\mathcal{M}|$.

2.1 Ising modellen

kap 13

2.2 Metropolis algoritmen

kap 12

3 Resultater

3.1 2x2-gitter

Vi starter med å se på et enkelt todimensjonalt system, nemlig et $2\times$ 2 gitter. I tabell 1 ser vi resultatene fra en kjøring av programmet `IsingModel_4a.cpp`. Her er temperaturen $T = 1.0$, og antall Monte Carlo sykluser 10^7. Med disse verdiene oppnådde vi en presisjon på ett desimal.

Table 1: Numerisk vs analytiske verdier for ulike termodynamiske størrelser.

	Numerisk	Analytisk
$< E >$	-7.9842	-7.9839
$< \|M\| >$	3.9948	3.9946
C_V	0.1258	0.1283
χ	0.0157	0.0160

4 Diskusjon

5 Konklusjon

6 Vedlegg

Alle koder og resultater som er brukt i rapporten finnes på Github-adressen:
https://github.com/livewj/PROJ3

References

[1] Kursets offisielle Github-side *FYS3150 - Computational Physics* https://github.com/CompPhysics/ComputationalPhysics, 29.10.2016

[2] M. Hjort-Jensen: Computational physics, lecture notes 2015. Fysisk institutt, UiO, 2016.

[3] Oppgavetekst: Project 4, Fysisk institutt, UiO, 29.10.16

[4] Slides fra kursets offisielle nettside "Ordinary differential equations": http://compphysics.github.io/ComputationalPhysics/doc/pub/ode/pdf/ode-beamer.pdf, 21.10.16