



universität  
wien

# BACHELORARBEIT

## Ising-Modell und Spin-Glas-Modell

Untersuchung mit Hilfe von Monte-Carlo Simulationen

verfasst von  
Nikola Filipovic

angestrebter akademischer Grad:  
Bachelor of Science (B.Sc.)

betreut von  
Univ.-Prof. Dr. Christoph Dellago

Studienkennzahl lt. Studienblatt

UA 033 676

Studienrichtung lt. Studienblatt

Bachelorstudium Physik (UG2002)



# Danksagung

Ich möchte mich besonders bei meinem Betreuer Univ.-Prof. Dr. Christoph Dellago bedanken, der mich während des Praktikums und meiner daraus resultierenden Bachelorarbeit mit seiner Expertise beraten und umfangreich unterstützt hat und mit seinen Anregungen eine mehr als hilfreiche Begleitung war.

Weiters möchte ich mich bei meiner Familie und meinen Freunden bedanken, die mich durch mein Studium begleitet und die in schwierigen als auch stressigen Situationen eine geistige Stütze waren.

Als Flüchtlingskind ist es mir ein besonderes Anliegen meinen größten Dank an meine Eltern zu richten, die weder Mühe noch Kosten gescheut haben, mich und meine Geschwister, neben dem Studenten-Dasein, in allen Lebenslagen zu unterstützen.



# Kurzfassung

Ziel dieser Arbeit ist es, ein allgemeines Verständnis für ungeordnete Spin-Systeme wie den Spin-Gläsern aufzubauen und Methoden zu finden, diese mithilfe des zweidimensionalen Ising-Modells effektiv zu simulieren, sowie den Einfluss von Magnetfeldern als auch einige weitere systemspezifische Eigenschaften zu analysieren. Durch die komplexe Dynamik der Spin-Systeme von Spin-Gläsern hat dieses Gebiet nicht nur in der Physik noch ein sehr großes Forschungspotential. Als Computer-Simulationsverfahren wurde eine sogenannte Monte-Carlo Simulation zu Hilfe genommen, mit der Systeme, welche auf Stochastik basieren, simuliert werden können.

# Abstract

The aim of this thesis is to develop a general understanding of disordered spin-systems like the spin-glasses and to find methods to effectively simulate them using the two-dimensional Ising model as well as to analyze the influence of magnetic fields and some other system-specific properties. Due to the complex dynamics of the spin-systems of spin-glasses, this area still has great research potential, and not only in physics. A so-called Monte-Carlo simulation was used as a computer simulation method, with which systems based on stochastics can be simulated.



# Inhaltsverzeichnis

Danksagung	I
Kurzfassung	II
Abbildungsverzeichnis	III
<b>1 Einleitung</b>	<b>1</b>
1.1 Anwendungsgebiete . . . . .	1
1.2 Fragestellungen . . . . .	1
1.3 Implementation . . . . .	1
<b>2 Theoretische Grundlagen</b>	<b>3</b>
2.1 Das Ising-Modell . . . . .	3
2.2 Spin-Gläser . . . . .	4
2.2.1 Spin-Glas-Phase . . . . .	4
2.2.2 Edwards-Anderson (Ordnungs-)Parameter . . . . .	5
2.3 Veranschaulichung: Ising- und Spin-Glas-Modell . . . . .	6
2.4 Monte-Carlo Simulation . . . . .	7
2.4.1 Metropolis Algorithmus . . . . .	7
2.4.2 Parallel tempering / Replica exchange . . . . .	8
<b>3 Ergebnisse und Diskussion</b>	<b>10</b>
3.1 Energie und Magnetisierung . . . . .	10
3.1.1 Ising . . . . .	10
3.1.2 Spin-Glas . . . . .	12
3.2 Wärmekapazität und Edwards-Anderson Parameter . . . . .	13
3.2.1 Ising . . . . .	13
3.2.2 Spin-Glas . . . . .	14
3.2.3 Vergleich: Mittlere Spins und Quadrat der mittleren Spins . . . . .	15
3.3 Hysterese und magnetische Suszeptibilität . . . . .	16
3.3.1 Ising . . . . .	16
3.3.2 Spin-Glas . . . . .	17
3.4 Kritische Temperatur . . . . .	18
3.4.1 Methode 1 . . . . .	19
3.4.2 Methode 2 . . . . .	20
3.5 Fehlerquellen und Optimierungen . . . . .	22
<b>4 Conclusio</b>	<b>23</b>
<b>Literatur</b>	<b>24</b>
<b>Code</b>	<b>25</b>





# Abbildungsverzeichnis

Abb. 1	Das 2d Ising-Modell mit Spin $\sigma_i$ am Gitterplatz $i$ und NN-Wechselwirkung (links) mit periodischen Randbedingungen (rechts) . . . . .	4
Abb. 2	Geordnete anti-ferromagnetische Spin-Struktur (links) verglichen mit der ungeordnet frustrierten Struktur von Spin-Gläsern (rechts). Hierbei stehen AF und FM für eine (anti-)ferromagnetische Kopplung. . . . .	5
Abb. 3	Links der 2D-Array colorplot mit mittleren Spins $\langle \sigma_i \rangle = \frac{1}{t} \sum_{j=0}^t \sigma_i$ und rechts mit dem Quadrat der mittleren Spins $\langle \sigma_i \rangle^2$ eines 100x100 Spin-Glas Systems bei $T = 0.3$ in der Spin-Glas-Phase . . . . .	6
Abb. 4	100x100 Standard Ising System bei $T = 0.9$ (links, ferromagnetisch), $T = 2.27$ (Mitte; kritische Temperatur nach Onsager) und $T = 4$ (rechts; paramagnetisch) . . . . .	6
Abb. 5	100x100 Spin-Glas System bei $T = 0.3$ (links, Spin-Glas-Phase), $T = 1.2$ (Mitte; beim Phasenübergang) und $T = 3$ (rechts; paramagnetisch) . . . .	7
Abb. 6	Parallel tempering / Replica exchange Methode . . . . .	9
Abb. 7	mittlere Energie pro Spin (links) und mittlere Magnetisierung pro Spin (rechts) für das Standard Ising-Modell mit Kopplung $J = 1$ und $L^2 = 15 \times 15$	11
Abb. 8	Entwicklung der Magnetisierung für verschiedene Temperaturen mit externem Magnetfeld $B = 0$ (links) und $B = 2.0$ (rechts) für das Standard Ising-Modell mit Kopplung $J = 1$ und $L^2 = 20 \times 20$ . . . . .	11
Abb. 9	mittlere Energie pro Spin (links) und mittlere Magnetisierung pro Spin (rechts) für das Spin-Glas-Modell mit Gauß-Kopplung und $L^2 = 15 \times 15$ . .	12
Abb. 10	Entwicklung der Magnetisierung für verschiedene Temperaturen mit externem Magnetfeld $B = 0$ (links) und $B = 2.0$ (rechts) für das Spin-Glas-Modell mit Gauß-Kopplung und $L^2 = 20 \times 20$ . . . . .	13
Abb. 11	Wärmekapazität pro Spin (links) und Edwards-Anderson Parameter $q$ (rechts) für das Standard-Ising-Modell mit Kopplung $J = 1$ und $L^2 = 15 \times 15$ . . . . .	14
Abb. 12	Wärmekapazität pro Spin (links) und Edwards-Anderson Parameter $q$ (rechts) für das Spin-Glas-Modell mit Gauß-Kopplung und $L^2 = 15 \times 15$ . . . . .	14
Abb. 13	2D-Array colorplots (wie in Abb. 3) der mittleren Spins des Ising-Modell mit Kopplung $J = 1$ (links) und des Spin-Glas-Modells mit Gauß-Kopplung (rechts) . . . . .	15
Abb. 14	Hysteresis(-kurve) des Standard Ising-Modells mit Kopplung $J = 1$ und $L^2 = 25 \times 25$ . . . . .	17
Abb. 15	Suszeptibilität des Standard Ising-Modells mit Kopplung $J = 1$ und $L^2 = 10 \times 10$ (durchgehend) und $L^2 = 20 \times 20$ (strichliert) . . . . .	17
Abb. 16	Hysteresis(-kurve) des Spin-Glas-Modells mit Gauß-Kopplung und $L^2 = 25 \times 25$ . . . . .	18
Abb. 17	Suszeptibilität des Spin-Glas-Modells mit Gauß-Kopplung und $L^2 = 10 \times 10$ (durchgehend) und $L^2 = 20 \times 20$ (strichliert) . . . . .	18

Abb. 18	Suszeptibilität des Ising-Modells mit Kopplung $J = 1$ für verschiedenen Systemgrößen. (links) und lineare Regression der berechneten Maximalwerte. (rechts)	19
Abb. 19	Suszeptibilität des Spin-Glas-Modells mit Gauß-Kopplung für verschiedenen Systemgrößen (links) und lineare Regression der berechneten Maximalwerte. (rechts)	19
Abb. 20	Suszeptibilität des Ising-Modells (links) und Spin-Glas-Modells (rechts) mit Systemgröße $L^2 = 32 \times 32$ und $B = 0$ .	20
Abb. 21	Suszeptibilität des Ising-Modells (links) und der entsprechende Edwards-Anderson Parameter (rechts) mit Systemgröße $L^2 = 32 \times 32$ und $B = 0$ .	20
Abb. 22	Suszeptibilität des Spin-Glas-Modells (links) und der entsprechende Edwards-Anderson Parameter (rechts) mit Systemgröße $L^2 = 32 \times 32$ und $B = 0$ .	21
Abb. 23	Wärmekapazität des Ising-Modells (links) und Spin-Glas-Modells (rechts) mit Systemgröße $L^2 = 32 \times 32$ und $B = 0$ .	21
Abb. 24	Edwards-Anderson Parameter gemittelt über 6 unterschiedliche Realisationen der Gauß-Kopplung für $L^2 = 15 \times 15$ und $B = 0$	23

# 1 Einleitung

## 1.1 Anwendungsgebiete

Das zweidimensionale Ising-Modell bzw. -Gitter und speziell das Spin-Glas-Modell werden heutzutage in verschiedenen Disziplinen zu Forschungs- und Analysezwecken verwendet. Durch die vereinfachte Form wird es ermöglicht komplexe Systeme und Prozesse in kleine Subsysteme zu unterteilen und zu simulieren. Neben der Analyse ferromagnetischer und thermodynamischer Eigenschaften, ist das Ising-Modell mittlerweile auch u. a. für vereinfachte Berechnungen in der Quantenchromodynamik [17], (sozioökonomische) Netzwerkdyamik [5], (statistische) Genetik [13] sowie für komplexe Flüssigkeits- und Polymersimulationen [10, Kapitel 12.3] nützlich. Das Spin-Glas-Modell mit seiner komplexen Natur hat neben der Materialforschung, in Form von idealisierten Simulationen realer Glasstrukturen [9, S. 177–225] und Spin-Gläser [9, S. 31–56], auch Anwendung bei neuronalen Netzwerken [3], wie der Hirnforschung sowie in der wirtschaftswissenschaftlichen Optimierungstheorie [6, S. 153–158] gefunden.

Eine prominente Figur in diesem Bereich ist der italienische Physiker Giorgio Parisi. Er beschäftigt sich in seinen Forschungsarbeiten u. a. mit komplexen Systemen wie den Spin-Gläsern und erhielt „für die Entdeckung des Zusammenspiels von Unordnung und Fluktuationen in physikalischen Systemen vom atomaren bis zu planetarischen Maßstäben“ 2021 den Nobelpreis in Physik [19]. Er hat allgemein gesprochen eine statistisch-mathematische Lösung gefunden, eine Ordnung in der Unordnung (non-equilibrium Dynamik) dieser komplexen Systeme zu bestimmen.

## 1.2 Fragestellungen

Die folgende Arbeit fokussiert sich auf die Untersuchung und den Vergleich magnetischer Eigenschaften des simulierten zweidimensionalen Ising-Modells und Spin-Glases. Unter den Zielgrößen gehören die (mittlere) Energie sowie Magnetisierung, die Wärmekapazität, zeitliche Korrelationen, Phasenübergänge samt kritischer Temperaturen, die Suszeptibilität<sup>1</sup> sowie die Hysterese<sup>2</sup>.

Aus den damit gewonnen Daten werden Gemeinsamkeiten sowie Unterschiede zwischen den Modellen hervorgehoben, welche u. a. einen Einblick auf die jeweiligen Simulationsgrenzen und Genauigkeitsverluste geben sollen.

## 1.3 Implementation

Für die hier verwendeten Modelle wurde das Python-Simulationsprogramm mithilfe einer Monte-Carlo (kurz MC) Methode erstellt. Auf diese Methode und deren Simulationseigenschaften sowie -grenzen wird in späterer Folge näher eingegangen.

---

<sup>1</sup>magn. Durchlässigkeit bzw. Magnetisierbarkeit

<sup>2</sup>in diesem Fall die mittlere Magnetisierung in Abhängigkeit eines (externen) Magnetfeldes

Es sei im Vorfeld erwähnt, dass sämtliche Resultate und Ergebnisse je nach Zielgröße, selbst nach algorithmischen und rechenintensiven Optimierungsversuchen, schwach bis relativ stark fehlerbehaftet sind und keine qualitative Fehleranalyse vorhanden ist. Grund dafür sind neben den Optimierungsgrenzen des implementierten Algorithmus auch die gegebene Rechenleistung des Computers, da sich bei steigenden Systemgrößen der Rechenaufwand im Falle von zweidimensionalen Systemen entsprechend vergrößert.

## 2 Theoretische Grundlagen

### 2.1 Das Ising-Modell

Das (Lenz-)Ising-Modell, welches bei den folgenden Simulationen u. a. als Fundament für die Spin-Glas Simulation verwendet wird, ist ein mathematisch modelliertes Spin-System bzw. Gittermodell, bei welchem  $N$  Spins auf einem  $d$ -dimensionalen Gitter angeordnet sind und die Werte  $\sigma_i = \pm 1$ <sup>3</sup> einnehmen können. Diese wiederum bestimmen den (magnetischen) Zustand des Systems. Das Ising-Modell wird hauptsächlich zur Berechnung von ferromagnetischen Eigenschaften herangezogen, wobei mit den Jahren weitere Anwendungen hinzukamen. Dieser Ansatz wurde durch Anregung von Wilhelm Lenz an seinen damaligen Studenten Ernst Ising übergeben, welcher im Zuge seiner Doktorarbeit 1924 an der Universität Hamburg die Zustandssumme des eindimensionalen Modells mathematisch exakt berechnet hat. [7] In diesem Fall ist das Gitter lediglich eine einfache lineare Kette, wobei ein einzelner Spin nur mit dem benachbarten Spin wechselwirken kann. 1944 hat der norwegische Physiker Lars Onsager die exakte Lösung der kanonischen Zustandssumme für das zweidimensionale Gittermodell und mithilfe dieser die kritische Temperatur  $T_c$  von etwa 2.269<sup>4</sup> berechnet. [16]

Die allgemeine mathematische Form zur Berechnung der Hamiltonfunktion bzw. der Energie des Systems lautet wie folgt:

$$H = -J \sum_{i,j} \sigma_i \sigma_j - B\mu \sum_i \sigma_i \quad (1)$$

(J... Kopplungskonstante, B... (ext.) Magnetfeld,  $\mu$ ... magn. (Dipol-)Moment,  $\sigma_i$ ... Spins am Gitterplatz  $i$ , wobei der Index  $j$  auf die Nächste-Nachbarn-Spins verweist.)

Die erste Summe der obigen Gleichung erstreckt sich über die nächsten Nachbarn des ausgewählten Spins  $\sigma_i$ , wobei die Kopplungskonstante  $J$  die Kopplung zwischen den benachbarten Spins angibt. Bei  $J > 0$  ist es der obigen Gleichung zufolge energetisch vorteilhafter, wenn die Spins parallel zueinander ausgerichtet sind und die Wechselwirkung damit ferromagnetisch ist. Wenn allerdings  $J < 0$  richten sich die Spins bevorzugt anti-parallel zueinander aus und es besteht demnach eine anti-ferromagnetische Wechselwirkung. Bei nicht existenter Kopplung ( $J = 0$ ) repräsentiert das Ising-Modell lediglich ein Modell für Paramagneten, wobei sich die Spins bevorzugt zur Magnetfeldrichtung ausrichten. Falls kein externes Magnetfeld  $B$  eingeführt wird ( $B = 0$ ), dann fällt der zweite Term von der Gleichung 1 weg und somit auch der Beitrag des magnetischen Dipolmoments  $\mu$  der einzelnen Spins. Bei einer genügend tiefen Temperatur entsteht eine langreichweitige Korrelation, die eine entsprechende kollektive Orientierung der Spins ermöglicht. Diese kollektive Ausrichtung verursacht wiederum, dass das System in Abwesenheit eines äußeren Magnetfeldes eine spontane Magnetisierung erfährt. In der folgenden Arbeit wird das Ising-Modell mit  $J = 1$  verwendet und somit kann die Kopplung in Gleichung 1 ignoriert werden.

Trotz hoher Rechenleistung der heutigen Computer, stoßen auch diese an ihre Grenzen bei der Simulation von größeren Spin-Systemen. Periodische Randbedingungen, wie in Abb.1 illustriert, werden eingeführt, um Nächste-Nachbarn Wechselwirkungen auch am

<sup>3</sup>Ausrichtung nach oben + oder nach unten -

<sup>4</sup>genau genommen mithilfe der von Onsager aufgestellten Formel:  $k_B T_c = \frac{2J}{\ln(1+\sqrt{2})}$

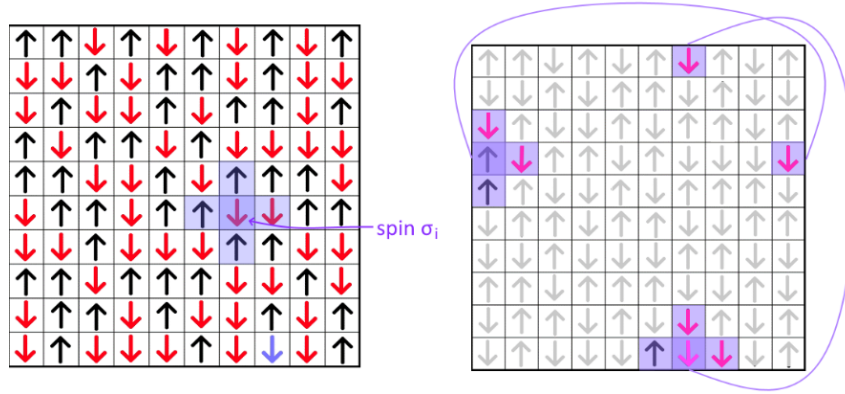


Abbildung 1: Das 2d Ising-Modell mit Spin  $\sigma_i$  am Gitterplatz  $i$  und NN-Wechselwirkung (links) mit periodischen Randbedingungen (rechts)

Rand zu ermöglichen. Dies wiederum ermöglicht eine sonst vorhandene Oberfläche zu eliminieren sowie (unendlich) große Systeme annähernd zu simulieren, indem man kleinere Teilsysteme betrachtet. Selbst die bereits erwähnte Transfermatrixmethode wäre ohne diese Bedingungen nicht ausführbar.

## 2.2 Spin-Gläser

Spin-Gläser sind (bzgl. den Spins) ungeordnete magnetische Systeme mit einer intrinsisch magnetischen Unordnung unterhalb einer bestimmten kritischen Temperatur.[8, S. 3-42] Diese Unordnung wird durch die Wechselwirkung konkurrierender Spins mit unterschiedlichen Vorzeichen ( $J>0$  ferromagnetische/  $J<0$  anti-ferromagnetische Wechselwirkung) verursacht. (siehe Abb. 2)

Die entsprechende Hamiltonfunktion unterscheidet sich nur durch eine Gauß-verteilte Kopplung  $J_{ij}$  über die Nächsten-Nachbarn, welche dem Edwards-Anderson-Modell [2] entstammt.

$$H = - \sum_{i,j} J_{ij} \sigma_i \sigma_j - B\mu \sum_i \sigma_i \quad (2)$$

$$\text{wobei } P(J_{ij}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-\frac{(J_{ij}-\mu)^2}{2\sigma^2}} \quad (3)$$

Die Gauß-Verteilung aus Gleichung 3 [11, S. 115] hat für die folgenden Simulationen eine Standardabweichung  $\sigma = 1$  und einen Erwartungswert  $\mu = 0$ .

### 2.2.1 Spin-Glas-Phase

Wird die kritische *spin freezing*<sup>5</sup> Temperatur unterschritten, erreicht man die Spin-Glas-Phase.[14, S. 11] Aufgrund der oben beschriebenen Eigenschaft kann ein Spin-Glas in dieser Phase keinen einfachen Grundzustand niedrigster Energie erreichen. Stattdessen besitzen Spin Gläser eine Vielzahl an Grundzuständen, welche aus statistischer Sicht

<sup>5</sup>Viele Spins „frieren“ aufgrund der magnetischen Frustration bei der Übergangstemperatur ein.

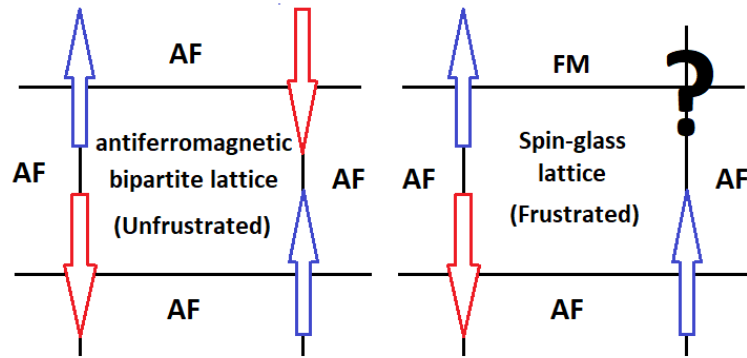


Abbildung 2: Geordnete anti-ferromagnetische Spin-Struktur (links) verglichen mit der ungeordnet frustrierten Struktur von Spin-Gläsern (rechts). Hierbei stehen AF und FM für eine (anti-)ferromagnetische Kopplung.

selbst bei einfacheren Systemen nicht komplett durchlaufen werden können. Dies bedeutet wiederum, dass selbst lange Rechenzeiten nicht genügen, um aus diesen komplexen Energielandschaften<sup>6</sup> auszubrechen und dies führt zu einer Brechung der Ergodizität<sup>7</sup>.

Eine weitere Eigenschaft ist das Verhalten bei der sog. *field-cooled magnetization*, kurz FCM. Aufgrund des spin freezing bei der Übergangstemperatur zur Spin-Glas-Phase fällt nach Abschalten eines äußeren Magnetfeldes die Magnetisierung zwar schnell auf eine Remanenz ab, sinkt aber im Gegensatz zu Ferromagneten folglich langsam gegen null bzw. auf einen Bruchteil der ursprünglichen Magnetisierung ab.

### 2.2.2 Edwards-Anderson (Ordnungs-)Parameter

Durch die komplexe Form der Spin-Glas-Phase und deren Vielzahl an Grundzuständen ist die sog. (spontane) Magnetisierung (siehe Gl. 8), welche im Zuge der Ergebnisanalyse diskutiert wird, kein qualitativ aussagekräftiger Ordnungsparameter mehr. Stattdessen wird der neue Edwards-Anderson Parameter  $q$  [2] eingeführt:

$$C(t) = \frac{1}{L^2} \sum_{i=1}^{L^2} \langle \sigma_i(t_n) \sigma_i(t_m) \rangle \xrightarrow{(t \rightarrow \infty)} q = \frac{1}{L^2} \sum_{i=1}^{L^2} \langle \sigma_i \rangle^2 \quad (4)$$

n, m... Spins im Zustand zum Zeitpunkt n und m,  $L^2$ ... Anzahl der Spins,  
 $\langle \dots \rangle$  bezieht sich hierbei auf eine zeitliche Mittlung über N Zeiten.

Diese Gleichung nennt man auch eine (temporale) Autokorrelationsfunktion und diese korreliert denselben Spin in unterschiedlichen Zuständen zeitlich (periodisch) zueinander. In Abb. 3 kann man anhand der linken Gitterdarstellung die spin freeze Situation erkennen, welche durch die nahezu stationäre und gleichmäßige Verteilung der zeitlich gemittelten Spins hervorgerufen wird. Wobei die stationäre Eigenschaft den hell gefärbten bzw. weißen und damit frustrierten Spins verschuldet wird. Anhand des mittleren Farbbalkens kann

<sup>6</sup>System ist in „Tälern“ niedriger Energie gefangen und kann, aufgrund hoher Energiebarrieren, nur schwer ausbrechen.

<sup>7</sup>Ein stochastischer Prozess, bei dem der Ensemblemittelwert bei ausreichend langer (Simulations-) Zeit dem Zeitmittelwert entspricht und somit unabhängig von dessen Anfangszustand ist.

man den Wert des jeweiligen mittleren bzw. zeitlich gemittelten Spins ablesen. Von positiv (blau) zu neutral (weiß) bis negativ (rot) gemittelten Werten. Durch Vergleich mit der rechten Darstellung kann der Unterschied zwischen dem Berechnungsterm aus der Gleichung 8 für die Magnetisierung und dem des Edwards-Anderson Parameters erkannt werden. Durch Quadrieren des Mittelwerts haben folglich sämtliche Spins einen positiven Wert und damit dominiert ein positiver Anteil. Dies ist wiederum der Grund dafür, dass durch den Edwards-Anderson Parameter eine sinnvolle Korrelation bei Systemen wie den Spin-Gläsern aufgewiesen werden kann. Im späteren Kapitel wird näher darauf eingegangen.

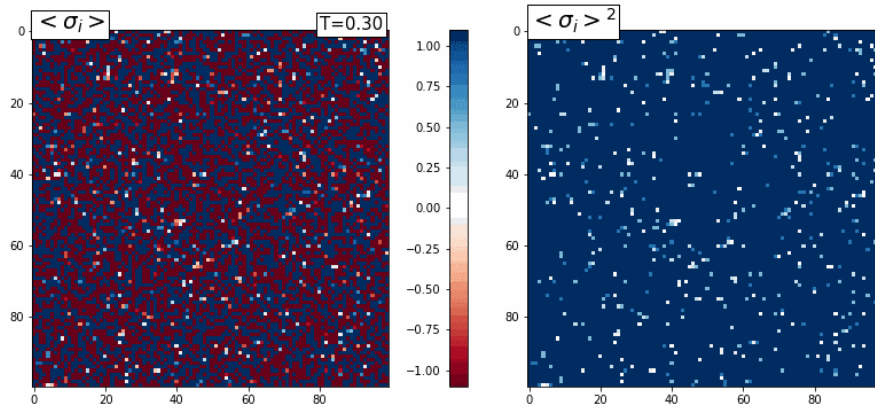


Abbildung 3: Links der 2D-Array colorplot mit mittleren Spins  $\langle \sigma_i \rangle = \frac{1}{t} \sum_{j=0}^t \sigma_i$  und rechts mit dem Quadrat der mittleren Spins  $\langle \sigma_i \rangle^2$  eines 100x100 Spin-Glas Systems bei  $T = 0.3$  in der Spin-Glas-Phase

## 2.3 Veranschaulichung: Ising- und Spin-Glas-Modell

Folgende Abbildungen dienen zur Veranschaulichung des grundlegenden Unterschieds zwischen dem Ising-Modell samt dessen ferromagnetischer Phase und spontaner Magnetisierung sowie dem Spin-Glas-Modell samt dessen komplexer, aber auch ungeordneter Spin-Glas-Phase. Es werden jeweils Zustände bei 3 verschiedenen Temperaturen illustriert. Schwarz resp. weiß stehen hier für die Spin-Werte  $S = \pm 1$ .

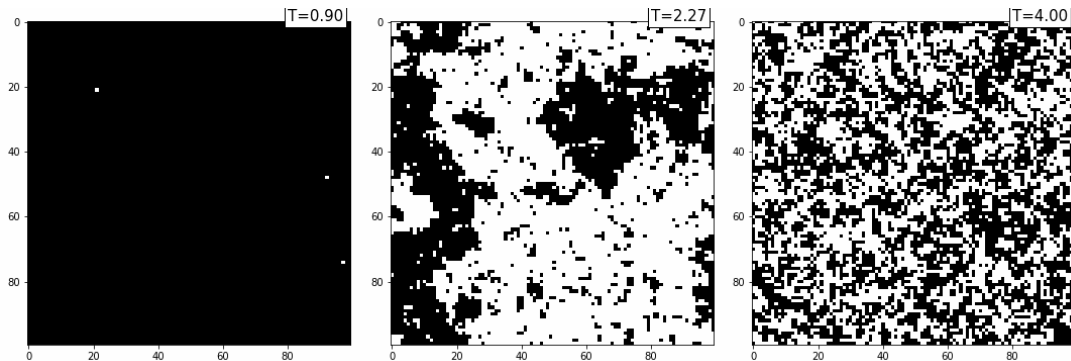


Abbildung 4: 100x100 Standard Ising System bei  $T = 0.9$  (links, ferromagnetisch),  $T = 2.27$  (Mitte; kritische Temperatur nach Onsager) und  $T = 4$  (rechts; paramagnetisch)



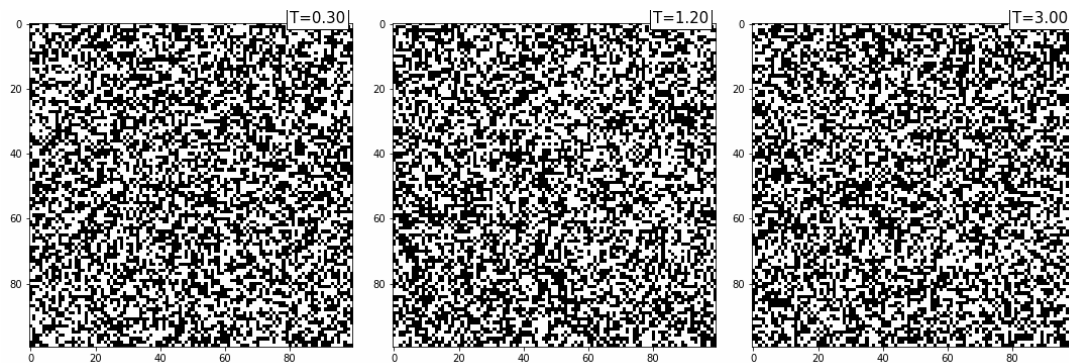


Abbildung 5: 100x100 Spin-Glas System bei  $T = 0.3$  (links, Spin-Glas-Phase),  $T = 1.2$  (Mitte; beim Phasenübergang) und  $T = 3$  (rechts; paramagnetisch)

## 2.4 Monte-Carlo Simulation

Monte-Carlo Simulationen/Algorithmen sind stochastische Methoden, in denen zufällig ausgewählte Proben bzw. Parameter dazu verwendet werden, bestimmte zeitabhängige und wahrscheinlichkeitsverteilte Zielgrößen numerisch zu ermitteln.[11, S. 1] Durch das Gesetz der großen Zahlen<sup>8</sup> können verschiedene komplexe physikalische und im allgemeinen zufallsbedingte, diskretisierbare Prozesse analysiert und (mehrdimensionale) Integrale bestimmt werden, welche sonst nicht oder nur durch einen entsprechenden Mehraufwand analytisch gelöst werden können. Unter den analysierbaren Prozessen gehören neben den ferromagnetischen u. a. auch Prozesse, die in Bezug zu Wetter- und Klimasimulationen [1], Nuklearmedizin [12], unternehmensspezifische Risikoanalysen [15, Kapitel 5 & 6], etc. stehen.

Alle MC-Algorithmen haben ihre Vor- und Nachteile, so ist es umso wichtiger die passende Simulationsmethode für das jeweilige Experiment zu wählen. Die Genauigkeit dieser MC-Methoden hängt von der Komplexität und den verschiedenen Faktoren, Eigenschaften der spezifischen Anwendung ab. Auf die Genauigkeit bzgl. der in dieser Arbeit ausgeführten Simulationen wird im späteren Verlauf näher eingegangen.

### 2.4.1 Metropolis Algorithmus

Die in dieser Arbeit verwendete MC-Methode ist die sogenannte Metropolis (importance sampling) Methode bzw. Algorithmus und wird hauptsächlich zur Simulation von Systemen verwendet, die der Boltzmann-Statistik unterliegen. Es ist ein Markov-Ketten MC-Verfahren 1. Ordnung<sup>9</sup>. In diesem Fall wird der aktuelle Zustand durch den vorherigen Zustand mithilfe einer Übergangswahrscheinlichkeit bestimmt, welche wiederum von der Energiedifferenz  $\Delta E = E_n - E_m$  dieser beiden Zustände abhängt.

Diese Energiedifferenz wird durch einen spin-flip des zufällig gewählten Spins produziert.

<sup>8</sup>Grenzwertsatz aus der Wahrscheinlichkeitstheorie, welcher besagt, dass sich die relative Häufigkeit eines Zufallsergebnisses an die theoretische Wahrscheinlichkeit des entsprechenden Ergebnisses annähert.

<sup>9</sup>Die Wahrscheinlichkeitsverteilung des aktuellen Zustands ist nur durch den vorangegangenen Zustand beeinflusst.

Durch die klassisch Boltzmann-verteilte Besetzungswahrscheinlichkeit  $P_n = e^{-E_n/k_B T}/Z$ , für das Auftreten des  $n$ -ten Zustands mit der kanonischen Zustandssumme  $Z$  und der Boltzmann-Konstante  $k_B$ , ist folgende spin-flip Bedingung [11, Kapitel 2] gegeben:

$$r < e^{-\Delta E/k_B T} \quad \text{oder} \quad \Delta E < 0 \quad (5)$$

(r... zufällig gewählte Zahl zwischen 0 und 1)

Wie die zufällig gewählte Zahl generiert bzw. welcher Algorithmus dafür verwendet wird trägt zur Ergodizität der Simulation bei. Für die folgenden Simulationen wurden  $k_B$  und das Dipolmoment  $\mu$  aus den Gleichungen 1 und 2 gleich eins gesetzt.

Es werden üblicherweise mehrere zufällig gewählte Spins in einem Durchlauf in sog. *sweeps* bzw. *MC-steps* geprüft und entsprechende spin-flips (nicht) durchgeführt. Wichtig ist, dass das System zuerst in ein (thermisches) Gleichgewicht gebracht werden muss, sodass fast keine bis keine zeitlichen Änderungen der Gesamtenergie des Systems mehr zu beobachten sind und die oben beschriebene Besetzungswahrscheinlichkeit konstant bleibt. Erst dann sollten die nach den sweeps übergebenen Systeme zeitlich gemittelt und für weitere statistische Analysen verwendet werden. Um das Equilibrieren rechentechnisch zu ermöglichen bzw. in einem (bzgl. der Simulation) zeitlich annehmbaren Rahmen zu halten, werden entsprechend kleine Systeme empfohlen.

### 2.4.2 Parallel tempering / Replica exchange

Aufgrund der komplexen Energielandschaft und dem damit verbundenen ungeordneten einfrieren der Spins in der Spin-Glas-Phase ist es kaum bis nur schwer möglich mit einer konventionellen Equilibrierungs-Methode die Zustände auf einen ihrer niedrigsten Grundzustände zu bringen. Neben einer Methode in der man nach dem Equilibrieren von höheren Temperaturen ( $> T_C$ , paramagnetische Phase) zu der nächstkleineren wechselt und dabei den vorangegangenen Zustand mitnimmt, gibt es auch die sog. parallel tempering Methode auch Replica exchange Methode genannt. [4]

Dabei werden  $N$  Kopien, sog. *Replicas* eines zufällig initialisierten Systems erstellt und bei unterschiedlichen Temperaturen parallel simuliert. (siehe Abb. 6) Nach einigen MC-steps werden jeweils zwei (bzgl. der Temperatur) benachbarte Systeme vertauscht.

Diese Vertauschung unterliegt folgenden zwei Bedingungen:

$$r < e^{(\Delta\beta)(\Delta E)} \quad \text{oder} \quad (\Delta\beta)(\Delta E) > 0 \quad (6)$$

r... zufällig gewählte Zahl zwischen 0 und 1,

$\Delta\beta/\Delta E$ ... Differenz der inversen Temperatur/Energie der benachbarten Replicas

Um diesen Replica exchange Prozess stochastisch zu halten werden die zu vertauschenden Replicas zufällig gewählt. Das Ziel ist es Systeme höherer Energien den Systemen niedrigerer Energie zugänglich zu machen und damit die eingefrorenen Zustände der Spin-Glas-Phase zu durchbrechen und die für die statistisch qualitative Auswertung relevante Ergodizität wiederherzustellen. Nach einigen Vertauschungen verbleiben die Replicas so, dass sich relativ gleichmäßig verteilte Energie/Temperatur-Verhältnisse einstellen.

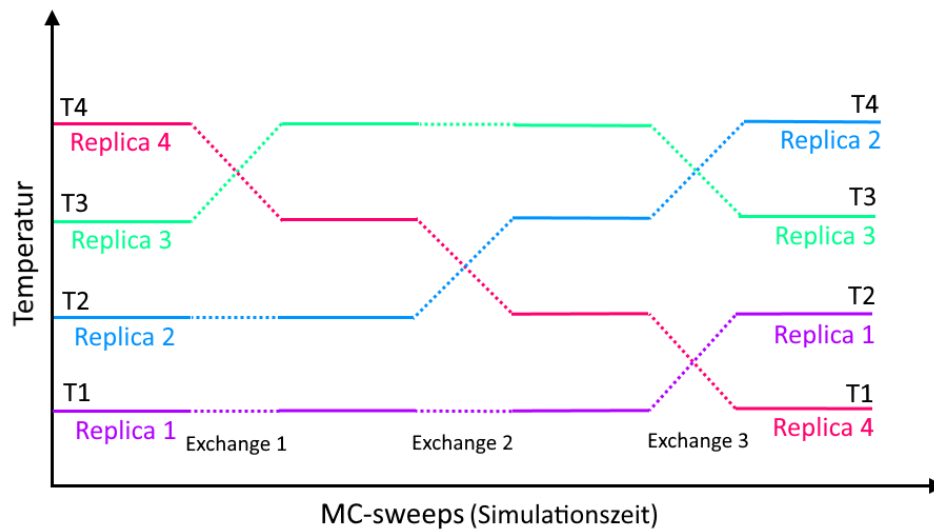


Abbildung 6: Parallel tempering / Replica exchange Methode

## 3 Ergebnisse und Diskussion

### 3.1 Energie und Magnetisierung

Für die mittlere Energie <sup>10</sup> $\langle H \rangle$  wurden, mithilfe der Gl. 1 resp. Gl. 2, die Differenzen der Energien vor und nach dem spin-flip berechnet, auf die berechnete Anfangsenergie akkumuliert und folglich über die Laufzeit  $N$  sowie Systemgröße  $L^2$  gemittelt.

$$H_t = H_{t-1} + \sum_i^{ss} 2\sigma_i \underbrace{\left( \sum_j J_{ij} \sigma_j + B \right)}_{(\Delta H)_i}$$

$$\langle H \rangle = \frac{1}{NL^2} \sum_{t=1}^N H_t \quad (\text{ss} \dots \text{MC-step/sweep-size}) \quad (7)$$

Für die mittlere (absolute) Magnetisierung pro Spin <sup>11</sup> $\langle M \rangle$  wurden die Spins des Systems zuerst im jeweiligen Zustand aufsummiert, dann wurde der Absolutwert davon genommen und über die Laufzeit  $N$  (hier in  $\langle . \rangle$  gemittelt) sowie Systemgröße  $L^2$  gemittelt:

$$\langle M \rangle = \frac{1}{L^2} \sum_{i=1}^{L^2} \langle \sigma_i \rangle \quad (8)$$

Um sich ein Bild von der Magnetisierung und dessen Abhängigkeit vom Magnetfeld mit der Laufzeit zu machen, werden zusätzlich beide Modelle bei  $B = 0$  und  $B = 2$  simuliert. Die entsprechenden Plots sind in den Abb. 8 und 10 dargestellt.

#### 3.1.1 Ising

Für die folgende Abbildung 7 wurden  $\langle H \rangle$  und  $\langle M \rangle$  bei verschiedenen Magnetfeldern simuliert. Man kann der mittleren Energie bei  $B = 0$  den Anfangswert  $H_0 = -2$  entnehmen, da die absolute Magnetisierung im Gleichgewicht in der ferromagnetischen Phase bzw. bei niedrigen Temperaturen maximal (gleichgerichtet) und konstant 1 ist. Wird ein externes Magnetfeld hinzugefügt, dann verringert sich der Wert um die jeweilige Feldstärke. Dies ist mithilfe der Gleichungen 1 und 7 nachvollziehbar.

Der Energieanstieg des Systems als typischer Verlauf zu den höheren Temperaturen ist ebenso klar gegeben wie der reziproke Verlauf der Magnetisierung zur Temperatur, abgeleitet vom Curie Gesetz<sup>12</sup> für höhere Temperaturen und kleine Magnetfelder. Dementsprechend verläuft die Kurve flacher bei stärkeren Magnetfeldern.

Ab einer kritischen Temperatur  $T_c$  geht das System von einem ferromagnetischen in einen paramagnetischen Zustand über, da folglich kaum bis keine spontane Magnetisierung mehr möglich ist. Dieser Übergang ist anhand der maximalen Steigung zu verzeichnen und verschiebt und verflacht sich mit den entsprechend eingeführten Magnetfeldern.

<sup>10</sup>In dieser Arbeit steht  $H$  für die Hamilton-Funktion und damit für die Energie  $E$  des Systems

<sup>11</sup>häufig auch mit  $\langle m \rangle$  bezeichnet

<sup>12</sup>Genau genommen geht es um die Abhängigkeit der magn. Suszeptibilität von der absoluten Temperatur  $\chi_m = \partial M / \partial B = C/T$ , wobei  $C$  die sog. Curie-Konstante ist.

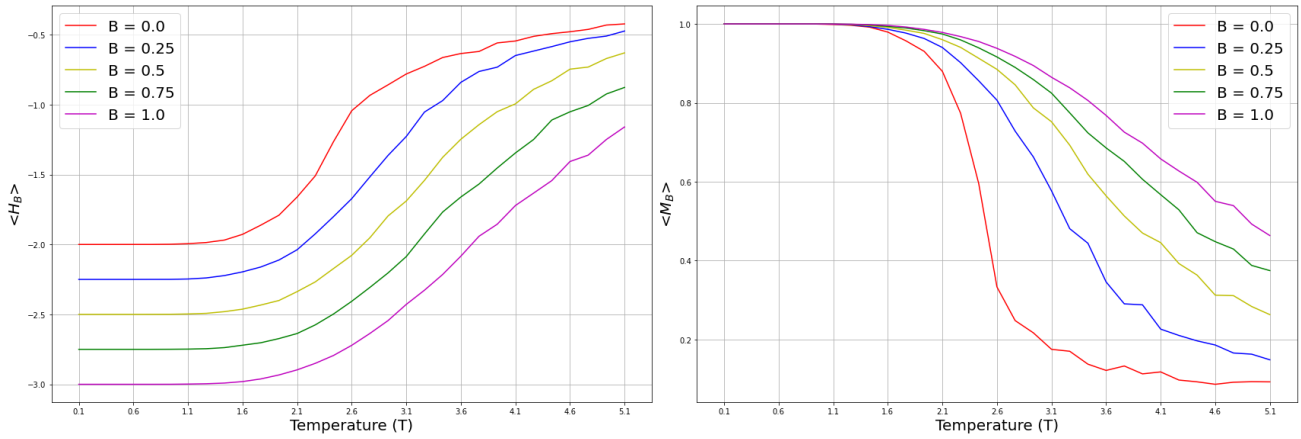


Abbildung 7: mittlere Energie pro Spin (links) und mittlere Magnetisierung pro Spin (rechts) für das Standard Ising-Modell mit Kopplung  $J = 1$  und  $L^2 = 15 \times 15$

In Abb. 8 bei  $B = 0$  ist die spontane Magnetisierung für Temperaturen in der ferromagnetischen Phase zu erkennen. Mit höheren Temperaturen sinkt die Amplitude der Fluktuationen und damit steigt auch der paramagnetische Effekt. Wenn ein Magnetfeld eingeführt wird, gibt es eine klare Verschiebung in Richtung des Feldes. Höhere Temperaturen werden allerdings weniger betroffen als niedrige, da die eingeführte hoch-energetische<sup>13</sup> Unordnung die magnetische Orientierung der Spins beeinflusst.

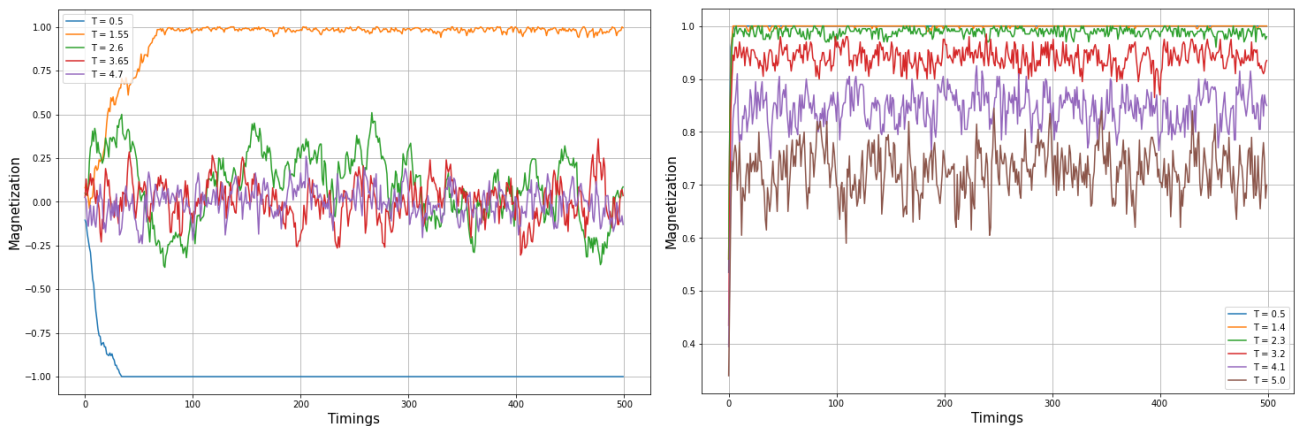


Abbildung 8: Entwicklung der Magnetisierung für verschiedene Temperaturen mit externem Magnetfeld  $B = 0$  (links) und  $B = 2.0$  (rechts) für das Standard Ising-Modell mit Kopplung  $J = 1$  und  $L^2 = 20 \times 20$

<sup>13</sup>hoch-energetisch im Bereich der Simulation

### 3.1.2 Spin-Glas

Das Spin-Glas System hat bei der mittleren Energie einen ähnlichen Verlauf mit entsprechendem Energieanstieg. Wobei für niedrige Temperaturen  $\leq T_c$  der parallel tempering Algorithmus verwendet wurde, da die Simulation in diesem Temperaturabschnitt sonst in qualitativ schlecht verwertbaren Ergebnissen<sup>14</sup> resultieren würde.

Betrachtet man die mittlere Magnetisierung bei tiefen Temperaturen, so zeichnet sich ein eher unstetiger Verlauf ab, welcher der Spin-Frustration bzw. dem spin freezing in der Spin-Glas-Phase verschuldet ist. Bei nicht existentem Magnetfeld ist die mittlere Magnetisierung im Spin-Glas typischerweise relativ konstant. Dieses Verhalten deutet darauf hin, dass die mittlere Magnetisierung kein qualitativer Ordnungsparameter für das Spin-Glas Modell ist.

Allerdings ist auch hier ein entsprechender (wenn auch flacherer) Verlauf bei eingeführten Magnetfeldern ab höheren Temperaturen zu beobachten, was darauf hinweisen kann, dass es sich um den Übergang von der Spin-Glas-Phase in die paramagnetische Phase handelt.<sup>15</sup> Allerdings wird in einer späteren Diskussion ersichtlich, dass sich diese kaum durch ein zugeführtes Magnetfeld verschiebt.

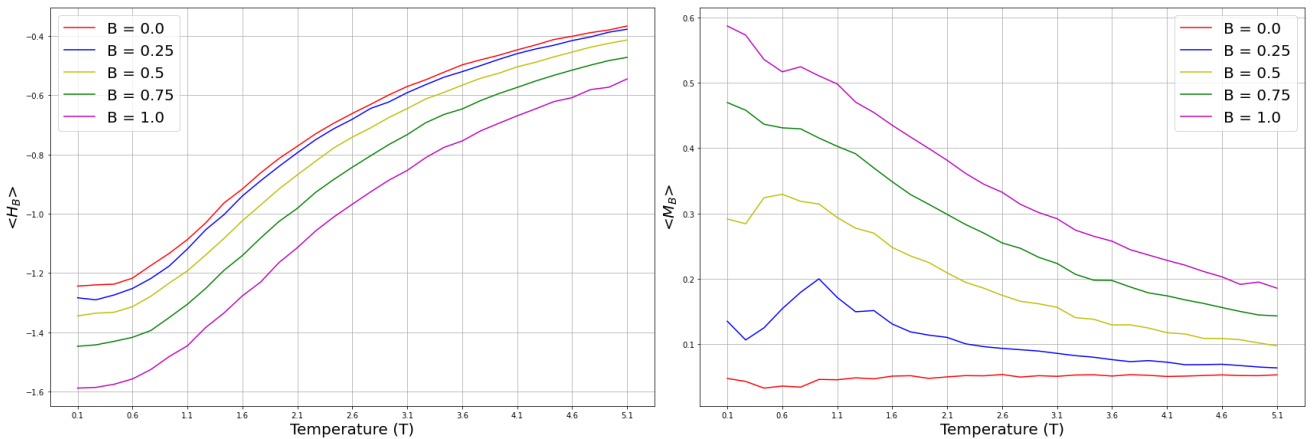


Abbildung 9: mittlere Energie pro Spin (links) und mittlere Magnetisierung pro Spin (rechts) für das Spin-Glas-Modell mit Gauß-Kopplung und  $L^2 = 15 \times 15$

Wenn kein Magnetfeld eingeführt wird, dann fluktuiert die Magnetisierung zuerst in der Spin-Glas-Phase wegen der Spin-Frustration und dann in der paramagnetischen Phase wegen der hoch-energetischen Spin-Dynamik um null herum. Dies stimmt mit den Ergebnissen in Abb. 9 mit der nicht existenten spontanen Magnetisierung überein. Nach Einschalten eines Magnetfeldes verschieben sich auch hier die Spins durchschnittlich in Richtung des Magnetfeldes, jedoch in geringerem Maße als beim Ising-Modell.

<sup>14</sup>Wie im Kapitel 2.3.2 auf S.5 beschrieben.

<sup>15</sup>Wobei es sich hierbei nicht um einen nach Paul Ehrenfest klassifizierten Phasenübergang handelt.

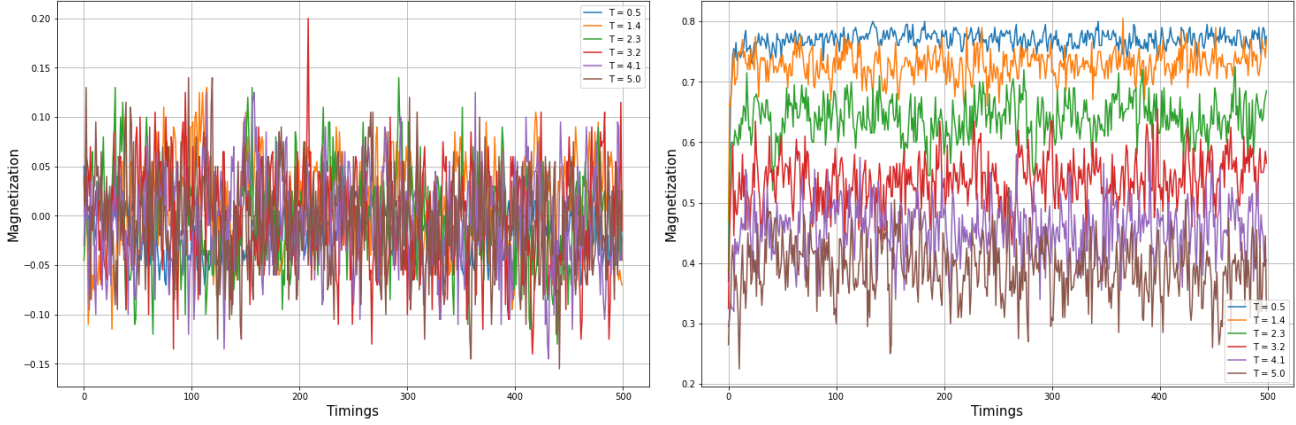


Abbildung 10: Entwicklung der Magnetisierung für verschiedene Temperaturen mit externem Magnetfeld  $B = 0$  (links) und  $B = 2.0$  (rechts) für das Spin-Glas-Modell mit Gauß-Kopplung und  $L^2 = 20 \times 20$

### 3.2 Wärmekapazität und Edwards-Anderson Parameter

Die Wärmekapazität pro Spin wurde auf zwei unterschiedliche Weisen berechnet. Einmal mit folgender Formel, wobei das Quadrat der akkumulierten Energien für  $\langle H^2 \rangle$  genommen wurde: (durchgehende Linie)

$$c = \frac{1}{L^2} \left( \frac{1}{k_B T^2} \sum_{i=1}^{L^2} \langle (\delta H)^2 \rangle \right) \quad {}^{16} \quad (9)$$

Und die zweite Methode ergibt sich aus der Ableitung<sup>17</sup> der mittleren Energie nach der Temperatur: (strichlierte Linie)

$$c = \frac{\partial \langle H \rangle}{\partial T} \quad (10)$$

Der Edwards-Anderson (Ordnungs-)Parameter wurde mithilfe der Gleichung 4 berechnet.

#### 3.2.1 Ising

Beide Berechnungsmethoden überlappen mit geringen Abweichungen, was die Richtigkeit der Berechnungsmethode unterstreicht. Die Wärmekapazität weist genauso wie die mittlere Energie und Magnetisierung eine direkte Abhängigkeit vom Magnetfeld auf. Neben dem Shift ist auch eine Senkung der Maximalwerte zu beobachten. Wobei der Maximalwert bei  $B = 0$  für die folgenden Diskussionen am wichtigsten ist. Dieser liegt bei etwa zwischen 2.3 und 2.4 und weicht deutlich von der theoretischen Temperatur von 2.269 ab. Grund dafür ist die relativ kleine Systemgröße. So dienen die folgenden Abbildungen zuerst einem allgemeinen Überblick.

Der Edwards-Anderson Parameter verhält sich sehr ähnlich zur Magnetisierung, weshalb dadurch nicht mehr Information in Bezug auf das Ising-Modell gewonnen werden kann.

<sup>16</sup> $\langle (\delta H)^2 \rangle = \langle H^2 \rangle - \langle H \rangle^2$

<sup>17</sup>Für die Ableitung wurde numpy.gradient mit angepasst äquidistanten Schrittweiten verwendet.



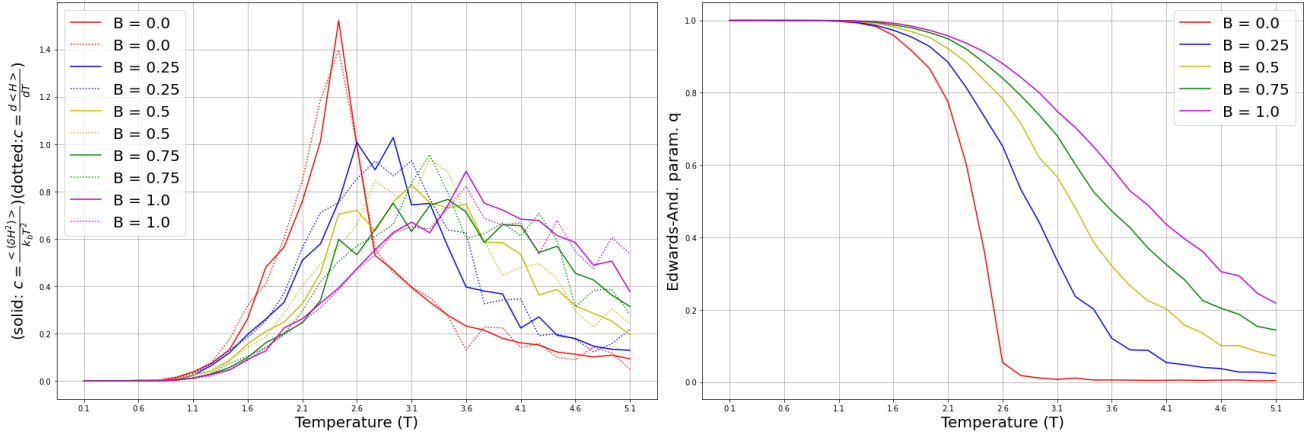


Abbildung 11: Wärmekapazität pro Spin (links) und Edwards-Anderson Parameter q (rechts) für das Standard-Ising-Modell mit Kopplung  $J = 1$  und  $L^2 = 15 \times 15$

### 3.2.2 Spin-Glas

Bei der Spin-Glas Wärmekapazität sieht man eine deutliche Überlappung bei unterschiedlichen Magnetfeldern bis hin zur Übergangstemperatur, die ungefähr zwischen 1.1 und 1.2 liegt. Bemerkenswert ist die deutlich niedrigere und abgeflachte Kurve im Vergleich zum Ising-Modell, was aus der anfänglichen Frustration in der Spin-Glas Phase und dem flachen Verlauf zur paramagnetischen Phase resultiert.

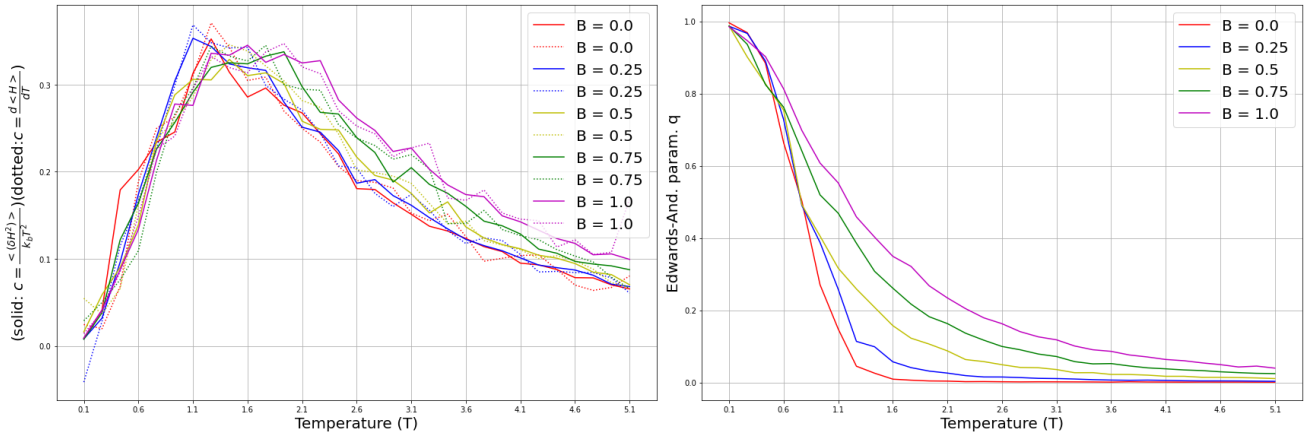


Abbildung 12: Wärmekapazität pro Spin (links) und Edwards-Anderson Parameter q (rechts) für das Spin-Glas-Modell mit Gauß-Kopplung und  $L^2 = 15 \times 15$

Der Edwards-Anderson Parameter, verglichen mit der mittleren Magnetisierung pro Spin aus Abb. 9, hat nun einen deutlich klareren Verlauf und kann dadurch für weitere Analysen verwendet werden. Man sieht, dass die Korrelation bei bereits sehr niedrigen Temperaturen von 0.1 anfängt steil zu sinken. Bei steigendem Magnetfeld flacht auch hier die Kurve ab, da folglich mehr Spins dazu neigen sich nach dem Magnetfeld zu richten und eine höhere bzw. längere Korrelation vorhanden ist.



### 3.2.3 Vergleich: Mittlere Spins und Quadrat der mittleren Spins

Anbei eine Abbildung, die den Unterschied zwischen den mittleren Spins (welche für die Berechnung der Magnetisierung relevant sind) und dem Quadrat der mittleren Spins (welche für den Edwards-Anderson Parameter relevant sind). Dies jeweils bei Temperaturen unterhalb des Phasenübergangs (oben), in der Umgebung (Mitte) und nach dem Phasenübergang (unten) bei  $B = 0$ . Beim Ising-Modell links als auch beim Spin-Glas rechts ist mit steigender Temperatur ein deutlicher Zuwachs an randomisierten spin-flips zu verzeichnen. Dies zeigt sich durch die weißlich markierten mittleren Spins, da durch alternierende flips der jeweilige Wert im Mittel gegen null geht. Aufgrund der (Cluster-)Bildung der Weiss'schen Bezirke und der spontanen Magnetisierung genügt die Magnetisierung als Ordnungsparameter für das Ising-Modell. Bei Spin-Glas Systemen, wie hier auf der rechten Seite der folgenden Abbildung dargestellt, zeigt sich kein deutlicher Verlauf wie bei dem Ising-Modell ab. Damit ist zumindest visuell kein deutlicher Phasenübergang sichtbar. Das wiederum deutet darauf hin, dass zumindest im Zweidimensionalen der Übergang von der Spin-Glas Phase in die paramagnetische Phase nur eine rein mathematische Bestimmbarkeit zulässt. Die bereits in Kapitel 2.2.1 erwähnte Spin Frustration bei niedrigen Temperaturen, welche in dem rechten oberen Plot dargestellt ist, führt eben zu dieser Uneindeutigkeit.

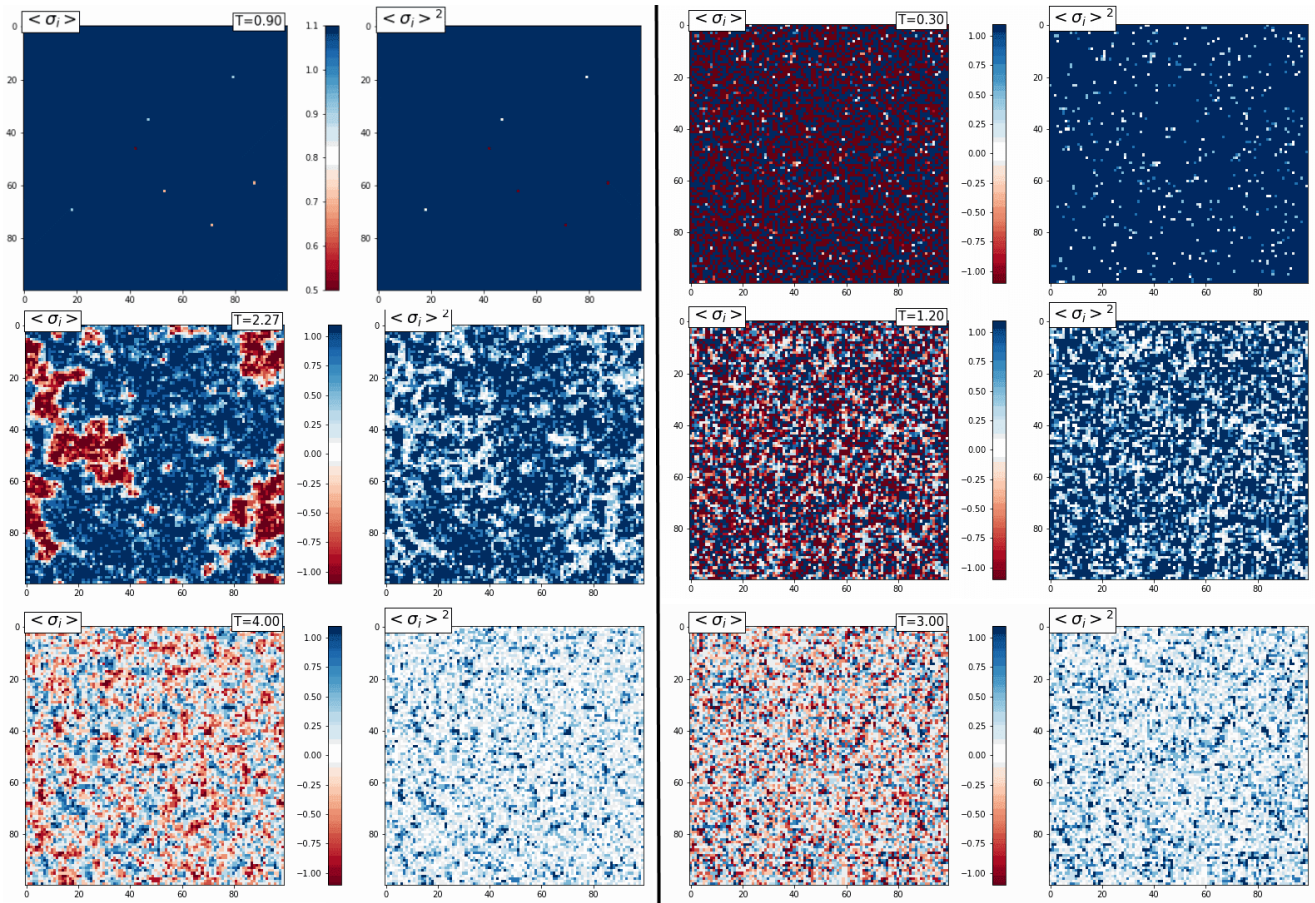


Abbildung 13: 2D-Array colorplots (wie in Abb. 3) der mittleren Spins des Ising-Modell mit Kopplung  $J = 1$  (links) und des Spin-Glas-Modells mit Gauß-Kopplung (rechts)

### 3.3 Hysterese und magnetische Suszeptibilität

Bei der Hysterese(-kurve) handelt es sich um eine ferromagnetische Eigenschaft. Es wird hierbei analysiert, wie sich das System bei einem sich verändernden externen Magnetfeld verhält.

Für die folgende Hysterese-Simulation wurde die mittlere Magnetisierung pro Spin (siehe Gl. 8) bei einem variablen Magnetfeld und konstanten Temperaturen betrachtet. Hierbei ist zu erwähnen, dass der Endzustand des Systems von jeder vorangegangenen Magnetfeldstärke für die aktuelle mitgeführt wurde. Dies ist wichtig, um schnelle, aber verzögerte Reaktionen und Änderungen des Systems auf ein sich veränderndes Magnetfeld zu betrachten, was u. a. ein Hinweis auf die Art des Phasenübergangs ist. Die Simulation startet bei  $B = -2$  und verläuft bis  $B = 2$  und wieder zurück, weshalb eine Neukurve nicht vorhanden ist.

Bei zunehmender Temperatur verhält sich die Kurve wie:

$$\langle M \rangle = \tanh(B/k_B T) \quad (11)$$

Die magnetische Suszeptibilität beschreibt die Magnetisierbarkeit eines System bzw. die Fähigkeit eines Systems sich einem externen Magnetfeld anzupassen. Je nachdem in welcher Abhängigkeit sie betrachtet wird, können verschiedene Zielgrößen und Eigenschaften des Systems analysiert werden. Im Folgenden wird die Temperatur- und Magnetfeldabhängigkeit veranschaulicht. Dadurch können u. a. die kritische Temperatur, Phasenübergänge und Sättigungseffekte unter einem Magnetfeld dargestellt werden.

#### 3.3.1 Ising

Die Hysterese beim Ising-Modell weist typisch idealisierte ferromagnetische Eigenschaften auf. Bei niedrigen Temperaturen verbleibt eine konstante Restmagnetisierung (sog. Remanenz) nach Abschalten des externen Magnetfeldes. Erst durch Einführen eines genügend starken Gegenfeldes (sog. Koerzitivfeldstärke) kann die Magnetisierung neutralisiert oder gar gegen gerichtet werden. Bei höheren Temperaturen schwindet die Hysterese was einen Phasenübergang andeutet. Im Fall des Ising-Modells bedeutet das den Übergang<sup>18</sup> von der ferromagnetischen in die paramagnetische Phase zwischen 1.5 und 2.5. Bei Temperaturen von  $T = 6$  und höher divergiert Gl.11 so stark, dass diese in der folgenden Abbildung 14 lokal fast linear erscheint.

Im Fall der Suszeptibilität des Ising-Modells zeigt sich eine deutlich hohe Divergenz bei  $B = 0$  um die kritische (Übergangs-)Temperatur (hier zw. 2.2 und 2.5) mit einer höheren Steigung von den niedrigeren Temperaturen. Wichtig hier ist, dass der kritische Punkt beim Punkt des höchsten Anstiegs ist und im Idealfall mit dem Maximalwert übereinstimmt. In folgender Abbildung 15 konzentriert sich die Analyse auf die Auswirkung von Magnetfeldern.

In der ferromagnetischen Phase gibt es spontane Magnetisierung, was Divergenzen bei niedrigeren Temperaturen zufolge hat. Mit wachsenden Magnetfeldern ist eine deutliche Abflachung der Kurven, aufgrund der Sättigung des Systems, sowie ein Maximums-shift zu beobachten. Bei hohen Temperaturen konvergieren die Kurven, was die paramagnetische

---

<sup>18</sup>Phasenübergang 2. Ordnung nach Ehrenfest

Eigenschaft der geringeren Magnetisierbarkeit und dessen Einfluss auf die Sättigung des Systems illustriert.

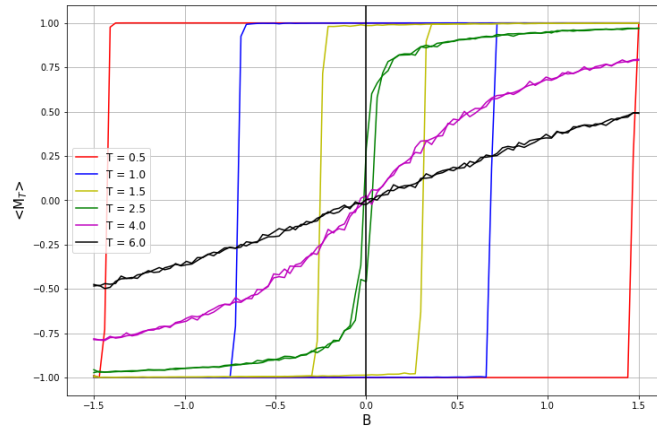


Abbildung 14: Hysteresis(-kurve) des Standard Ising-Modells mit Kopplung  $J = 1$  und  $L^2 = 25 \times 25$

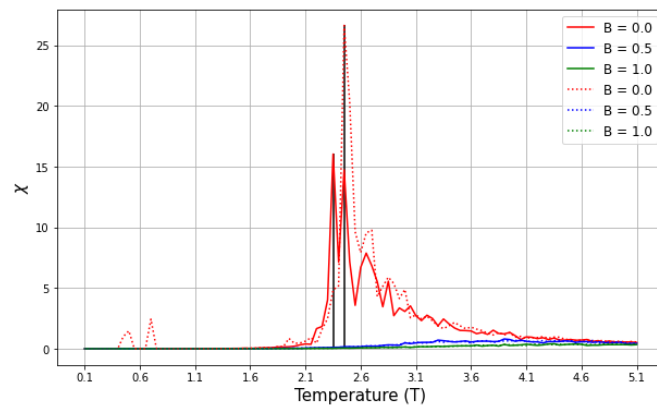


Abbildung 15: Suszeptibilität des Standard Ising-Modells mit Kopplung  $J = 1$  und  $L^2 = 10 \times 10$  (durchgehend) und  $L^2 = 20 \times 20$  (strichliert)

### 3.3.2 Spin-Glas

Durch die „eingefrorenen“ Spins und der entsprechenden Frustration hat das System selbst bei tiefen Temperaturen niedrigere Sättigungsgrenzen und kann nur langsamer bzw. schwerer magnetisiert werden. Wenn man dann vom stärkeren Magnetfeld ausgehend dieses reduziert, dann erfolgt im Gegensatz zu einem Ferromagneten ein relativ stetiger und langsamer Abstieg bis zu einer geringen Remanenz bei  $B = 0$ . Dadurch ist die Hysteresis schwach ausgeprägt, was u. a. Spin-Gläser charakterisiert. Hier ist ein sehr ähnliches paramagnetisches Verhalten bei hohen Temperaturen wie beim Ising-Modell zu verzeichnen. Die Übergangstemperatur wird hier zwischen 1.0 und 1.5 geschätzt.

Die Suszeptibilität beim Spin-Glas System zeichnet sich durch einen deutlich flacheren Verlauf als beim Ising-Modell aus. Kleinere Divergenzen in der Spin Glas-Phase resultieren aus unzureichender parallel tempering Equilibrierung und können daher ignoriert werden. Die Auswirkung von externen Magnetfeldern ist, aufgrund der bereits erwähnten

Sättigungsgrenzen in der Spin-Glas-Phase, hier nun viel geringer. Die kritische Temperatur kann hier nur sehr ungenau, zwischen 1.0 und 1.4, geschätzt werden.

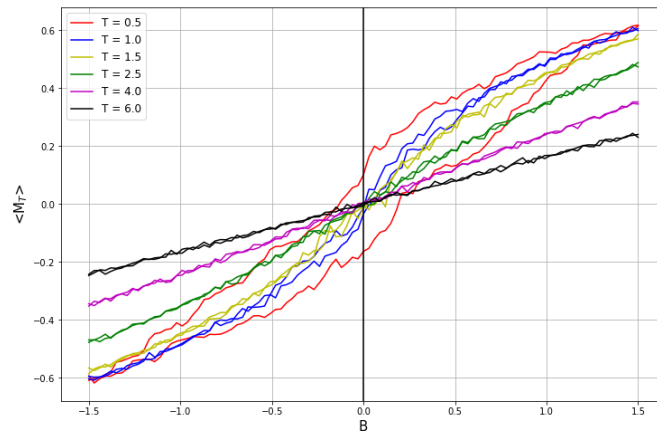


Abbildung 16: Hysteresis(-kurve) des Spin-Glas-Modells mit Gauß-Kopplung und  $L^2 = 25 \times 25$

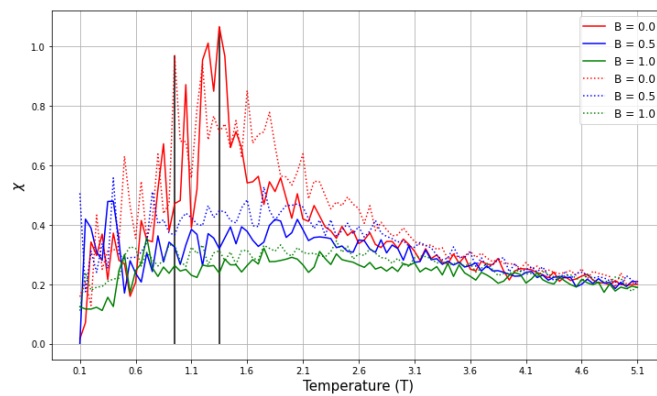


Abbildung 17: Suszeptibilität des Spin-Glas-Modells mit Gauß-Kopplung und  $L^2 = 10 \times 10$  (durchgehend) und  $L^2 = 20 \times 20$  (strichliert)

### 3.4 Kritische Temperatur

Durch die bisherigen Simulationen konnte die kritische (Übergangs-)Temperatur nur sehr ungenau bestimmt werden. Der Grund dafür sind die kleinen Systemgrößen bzw. die geringe Anzahl an verschiedenen Systemgrößen, welche aufgrund der bereits langen Rechenzeiten für die Analyse bei unterschiedlichen Magnetfeldern geopfert wurden. Im Folgenden sind ein Skaleneffekt (*eng.: finite-size scaling effect*) Ansatz und ein Ansatz mit verschiedenen Simulationen mit  $L = 32$  bei  $B = 0$  samt Analysemethoden gegeben. Einige der folgenden Simulationen wurden parallel <sup>19</sup> über verschieden initialisierte Systeme berechnet. Gegen Ende wurden die unterschiedlichen Ergebnisse gemittelt. Das Spin-Glas-System wurde jeweils zusätzlich über 5 verschiedene Realisationen der Kopplung gemittelt.

<sup>19</sup>Das integrierte Python Paket *Multiprocessing* wurde für die parallele Simulation über 12 threads verwendet.

### 3.4.1 Methode 1

Anhand der linken Abbildung kann man den finite-size Effekt durch die stärkere Divergenz und die Verschiebung der Maximalwerte in der Temperaturachse erkennen. Die Werte wurden dann für eine lineare Regression entlang der reziproken Größenachse verwendet, um evtl. eine Entwicklung in Richtung der kritischen Temperatur zu erhalten. Der hier erhaltene Wert von etwa 2.37 weicht deutlich vom theoretischen Wert von 2.27 ab.

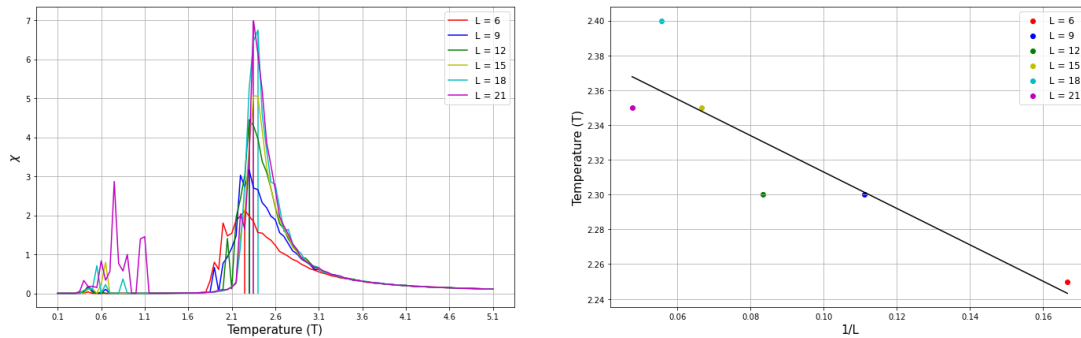


Abbildung 18: Suszeptibilität des Ising-Modells mit Kopplung  $J = 1$  für verschiedenen Systemgrößen. (links) und lineare Regression der berechneten Maximalwerte. (rechts)

Beim Spin-Glas-Modell ist der Skaleneffekt kaum zu erkennen, weshalb die lineare Regression auch relativ flach ist. Wobei die Abweichungen aufgrund der schwächeren Divergenz bzw. dem „Höcker“ in der Suszeptibilität nun größer sind. Der hier gewonnene Wert für die kritische Temperatur liegt bei etwa 1.15. Ein entsprechender Vergleich erwies sich als schwierig, da in der Literatur und weiteren Forschungsberichten häufig davon ausgegangen wird, dass es entweder keinen „wirklich kritischen“ Punkt<sup>20</sup> gibt oder er liegt, aufgrund der Komplexität der Grundzustände in der Spin-Glas-Phase, bei  $T_c = 0$ . [18, Sungthong et al., J. Phys. A: Math. Gen., Vol. 36(24)]

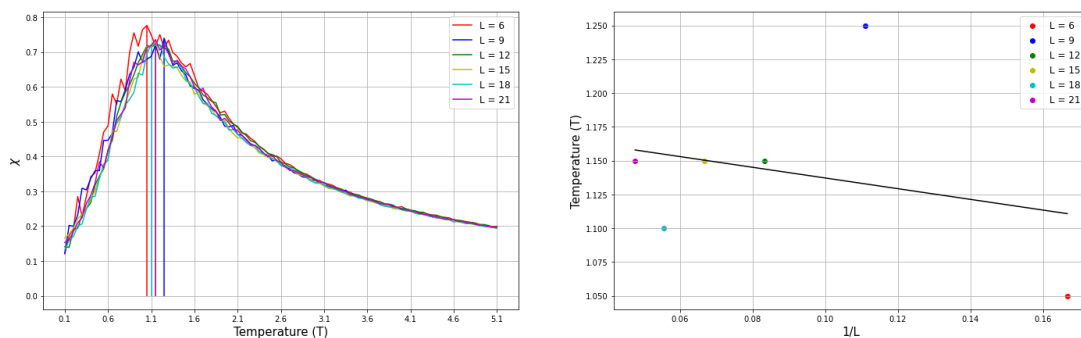


Abbildung 19: Suszeptibilität des Spin-Glas-Modells mit Gauß-Kopplung für verschiedenen Systemgrößen (links) und lineare Regression der berechneten Maximalwerte. (rechts)

<sup>20</sup>Da je nach Kopplungsmethode, Analyseverfahren und Algorithmus die Werte abweichen.

### 3.4.2 Methode 2

In der folgenden Methode wurde für alle Simulationen eine Systemgröße von  $L^2 = 32 \times 32$  gewählt, wobei kein externes Magnetfeld eingeführt wurde. Beim Ising-Modell kam ein Maximalwert bei  $T = 2.35$  und beim Spin-Glas-Modell bei  $T = 1.2$  raus. Wenn man davon ausgeht, dass die eigentlichen Werte für die kritische Temperatur sich am Punkt der maximalen Steigung (schwarze Linie) befinden, dann nähert sich dieser beim Ising-Modell  $T = 2.25$  und beim Spin-Glas  $T = 0.95$  an.

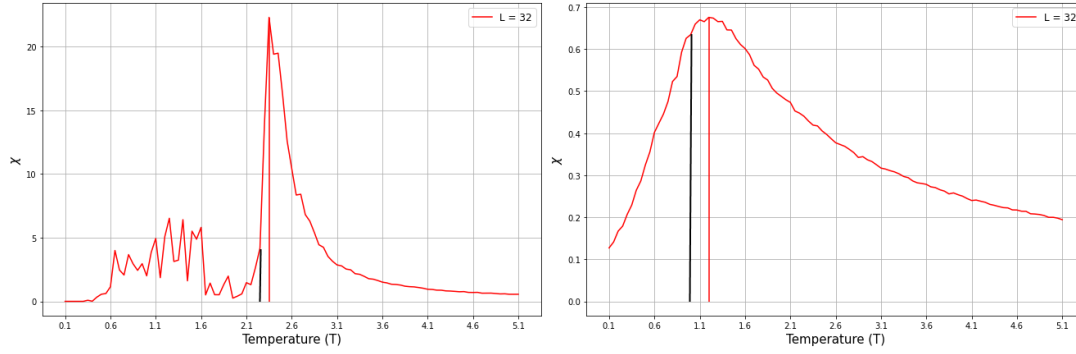


Abbildung 20: Suszeptibilität des Ising-Modells (links) und Spin-Glas-Modells (rechts) mit Systemgröße  $L^2 = 32 \times 32$  und  $B = 0$ .

In Abb. 21 wurde folgende (Edwards-Anderson Parameter)  $q$ -abhängige Formel [11, Landau et al., 2014, S. 174] für die Berechnung der Suszeptibilität verwendet:

$$\chi = \frac{1}{k_B T} (1 - q(T)) \quad (12)$$

Man erkennt an Abb. 21, dass diese Formel nicht für das Standard Ising-Modell gedacht ist. Nichtsdestotrotz gibt es hier Übereinstimmungen am Phasenübergang und man erkennt den Unterschied des Extremalverhaltens zwischen den beiden Modellen. Der Grund dafür ist, dass es sich nun um ein größeres System handelt und mehr (Rechen-)Zeit in die Equilibrierung und Mittlung investiert wurde. Die Kurven sind bei beiden Modellen nun viel glatter und divergiert im Fall des Spin-Glases nun etwas stärker, was positiv zur Genauigkeit des Ergebnisses beiträgt. Hier liegt der Wert für  $T_c$  beim Ising-Modell zwischen 2.2 und 2.3, beim Spin-Glas zwischen 0.9 und 1.0.

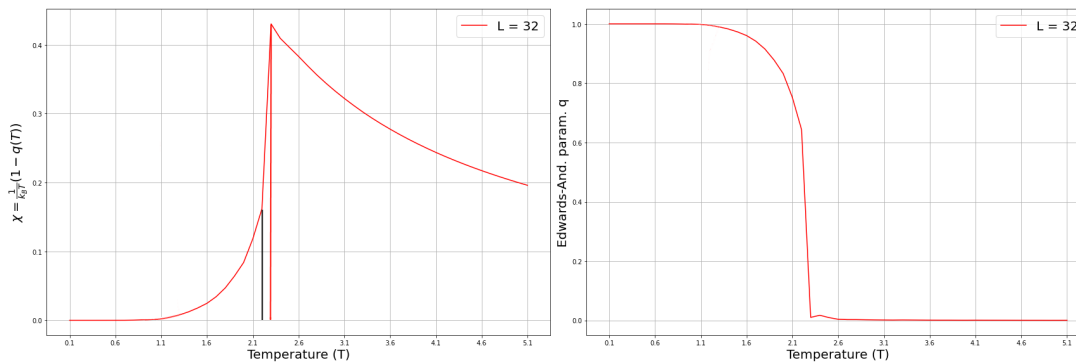


Abbildung 21: Suszeptibilität des Ising-Modells (links) und der entsprechende Edwards-Anderson Parameter (rechts) mit Systemgröße  $L^2 = 32 \times 32$  und  $B = 0$ .

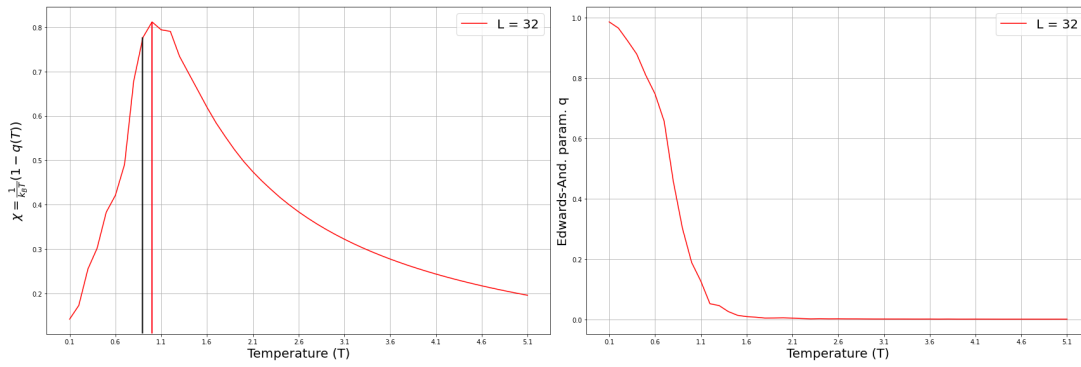


Abbildung 22: Suszeptibilität des Spin-Glas-Modells (links) und der entsprechende Edwards-Anderson Parameter (rechts) mit Systemgröße  $L^2 = 32 \times 32$  und  $B = 0$ .

Die Resultate bei der Wärmekapazität geben ähnliche Werte wieder.

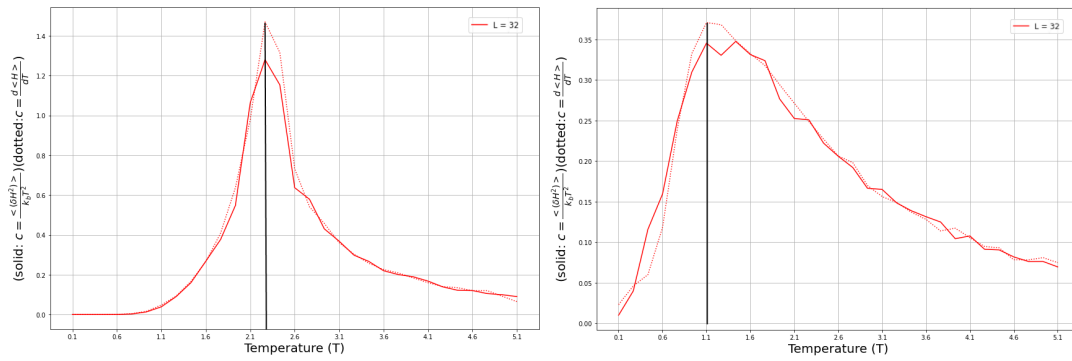


Abbildung 23: Wärmekapazität des Ising-Modells (links) und Spin-Glas-Modells (rechts) mit Systemgröße  $L^2 = 32 \times 32$  und  $B = 0$ .

Methode 2 hat sich als bessere Variante erwiesen und gibt eine bzgl. des Ising-Modells bessere Näherung zum analytischen Onsager Wert von  $T_c = 2.269$  wieder. Beim Spin-Glas Modell ist nun ein Wert von etwa 1.0 anzunehmen.



### 3.5 Fehlerquellen und Optimierungen

Da wie bereits erwähnt keine ausgiebige Fehleranalyse vorhanden ist, wird im folgenden lediglich auf die Fehlerquellen eingegangen. Neben gemeinsamen algorithmischen und skalierungsabhängigen Fehlern, unterscheiden sich die beiden Modelle größtenteils durch die unterschiedliche Implementation auf denselben Metropolis Algorithmus.

Da hier kaum mit sehr großen oder kleinen Zahlen gerechnet wurde, können Rundungsfehler ignoriert werden. Auch wenn Auslöschungsfehler präsent sein können, so tragen sie, aufgrund der größeren Differenzen, nicht bedeutend zu den Ergebnissen bei. Als Beispiel die Subtraktion in der Berechnung der Wärmekapazität und der Suszeptibilität. Allerdings hat die Systemgröße einen starken Einfluss auf die Genauigkeit, da die Dynamik von endlich großen Systemen durch die Größe begrenzt ist und sich dadurch umso weniger einem idealisierten makroskopischen System annähern kann. Dies ist vor allem bei Simulationen wie der Suszeptibilität, Wärmekapazität und der Hysterese bemerkbar. Wird das System vergrößert, so verlängert sich die notwendige Rechenzeit, da die Laufzeit auch aufgrund der längeren Equilibrierung entsprechend vergrößert werden muss, um qualitativ verwertbare Ergebnisse und Diagramme zu erhalten.

#### Ising-Modell Fehlerquellen:

Beim Ising-Modell ist der Skalierungsfehler bzw. der finite-size effect ausgeprägter, wodurch hier eine Abwägung zwischen Systemgröße und z. B.: Anzahl der Temperaturpunkte oder der Magnetfeldstärken umso wichtiger scheint. Zudem scheinen Magnetfelder einen stärkeren Einfluss auf das Ergebnis zu haben.

#### Spin-Glas-Modell Fehlerquellen:

Das Spin-Glas-Modell ist von Natur aus komplex und dadurch ist auch die Beschreibung der Fehlerquellen komplexer als beim Ising-Modell. Der größte Unterschied liegt in der Spin-Glas-Phase. Hierbei wurde der replica exchange Algorithmus verwendet, um das Einfrieren in den komplexen Energielandschaften zu durchbrechen und die Ergodizität wiederaufzubauen. Hier sei erwähnt, dass es auch andere Methoden gibt dieses Problem zu lösen. Allerdings kommt diese Methode nicht ohne ihre Fehler. Dies beinhaltet u. a. die Anzahl der Replica-Exchange-Prüfungen (siehe Gl. 6), die Wahl des Temperaturintervalls (vorzugsweise knapp oberhalb der Übergangstemperatur) und die entsprechende Schrittweite. Da der Phasenübergang des Spin-Glas-Modells, aufgrund der Spin-Frustration und damit der Unordnung, undeutlicher ist als im Fall des Ising-Modells, leidet die Aussagekraft mancher Ergebnisse darunter. Angefangen von der Magnetisierung bis hin zur Suszeptibilität und der kritischen Temperatur.



## 4 Conclusio

Die in dieser Arbeit dargestellten Resultate und Diagramme zeigen ein relativ gutes Bild von der komplexen Natur gekoppelter Spin-Systeme. Mit wachsenden Systemgrößen steigt der Rechenaufwand der Simulationen um ein Vielfaches, was es umso schwieriger macht gewisse Zielgrößen und Eigenschaften genauer zu bestimmen bzw. zu analysieren. Dieser *Trade-off* zwischen Systemgröße, Equilibrierungszeit und Anzahl der zusätzlichen Parameter wie z. B.: der Einfluss verschiedener Magnetfelder, großes Temperaturintervall etc. gestaltete diese Arbeit zu einer größeren Herausforderung als ursprünglich antizipiert. Neben dem komplexen Verhalten von Spin-Gläsern haben auch die Optimierungsversuche den Anreiz gegeben sich eingehender mit dem Thema zu beschäftigen. Als Beispiel einer Optimierung sei hier die Mittelung des Edwards-Anderson Parameters  $q$  über 6 verschiedenen Realisationen der Gauß-Kopplung angeführt:

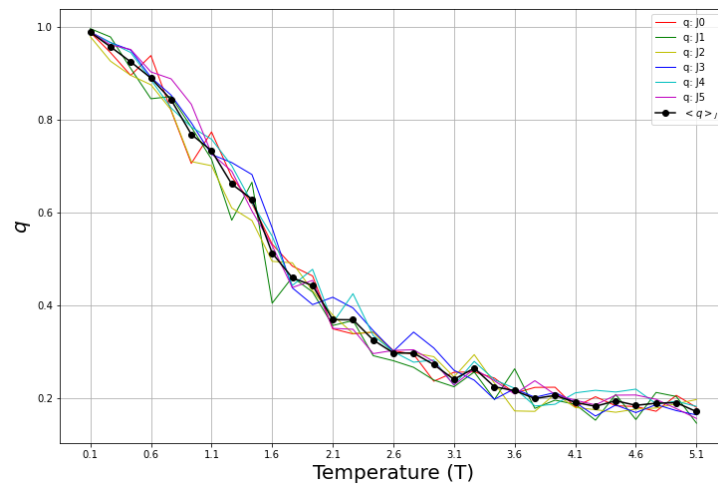


Abbildung 24: Edwards-Anderson Parameter gemittelt über 6 unterschiedliche Realisationen der Gauß-Kopplung für  $L^2 = 15 \times 15$  und  $B = 0$

Eine eingehendere Beschäftigung mit dem kritischen Verhalten der Spin-Systeme wurde, aufgrund des begrenzten Zeit- und Aufwandsrahmens des Praktikums, nicht durchgeführt. Der Vollständigkeit halber soll erwähnt sein, dass bei solch einer Diskussion die sogenannten kritischen Exponenten [11, S. 80-84] unabdingbar sind. Diese dienen zur Beschreibung des Verhaltens physikalischer Systeme, u. a. Spin-Systeme beim Phasenübergang bzw. kritischen Punkt. Sie können aus experimentellen als auch teilweise aus analytischen Berechnungen gewonnen werden.

Da es eine Vielzahl an Modellen gibt und mit ihnen die unterschiedlichen Anwendungsmöglichkeiten, wurden mit der Zeit unterschiedliche Monte-Carlo Methoden und spezielle Algorithmen entwickelt, welche für die Bestimmung entsprechender Eigenschaften und Zielgrößen genutzt werden. Im Fall der in dieser Arbeit behandelten Gittersysteme wie dem Spin-Glas werden entsprechende Monte-Carlo Methoden verwendet, die ihren jeweiligen Vor- und Nachteilen haben. [11, Kapitel 5]

## Literatur

- [1] J. C. Baez and D. Tweed. Monte Carlo Methods in Climate Science. *Math Horizons*, 21(2):5–8, 2013.
- [2] S. F. Edwards and P. W. Anderson. Theory of spin glasses. *Journal of Physics F*, 5(5):965–973, 1975.
- [3] G. Hartnett, E. Parker, and E. Geist. Replica Symmetry Breaking in Bipartite Spin Glasses and Neural Networks. *Physical Review E*, 98, 2018.
- [4] K. Hukushima and K. Nemoto. Exchange monte carlo method and application to spin glass simulations. *The Physical Society of Japan*, 65(6), 1996.
- [5] V. A. Hurtado-Marín, J. D. Agudelo-Giraldoa, S. Robledo, and E. Restrepo-Parra. Analysis of dynamic networks based on the Ising model for the case of study of co-authorship of scientific articles. *Scientific Reports*, 11:5721, 2021.
- [6] J. ichi Maskawa et al. *Empirical Science of Financial Fluctuations*. Springer, 2002.
- [7] E. Ising. Beitrag zur Theorie des Ferromagnetismus. *Zeitschrift für Physik*, 31:253–258, 1925.
- [8] M. B. Jesi. *Spin Glasses: Criticality and Energy Landscapes*. Springer, 2016.
- [9] T. Kakeshita, E. Vincenta, and V. D. et al. *Disorder and strain-induced complexity in functional materials*. Springer, 2012.
- [10] M. Kröger. *Models for Polymeric and Anisotropic Liquids*. Springer-Verlag, 2005.
- [11] D. P. Landau and K. Binder. *A Guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics: 4th edition*. Cambridge University Press, 2014.
- [12] M. Ljungberga, S.-E. Strand, and M. A. King. *Monte Carlo calculations in nuclear medicine: Applications in Diagnostic Imaging*. CRC Press, 2019.
- [13] J. Majewski, H. Li, and J. Ott. The Ising Model in Physics and Statistical Genetics. *American journal of human genetics*, 69:853–862, 2001.
- [14] H. Nishimori. *Statistical Physics of Spin Glasses and Information Processing: An Introduction*. Oxford: Oxford University Press, 2001.
- [15] D. L. Olson. *Supply Chain Risk Management: Tools for Analysis, Second Edition*. Business Expert Press, 2015.
- [16] L. Onsager. Crystal statistics. 1. a two-dimensional model with an order-disorder transition. *Physical Review*, 65(3-4):117–149, 1944.
- [17] M. S. Pradeep and M. Stephanov. Universality of the critical point mapping between Ising model and QCD at small quark mass. *Physical Review D*, 100:1, 2019.
- [18] R. Sungthong and J. Poulter. The critical temperature of the two-dimensional  $\pm J$  Ising spin glass. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, 36(24):6675–6681, 2003.
- [19] The Nobel Foundation. The Nobel Prize in Physics 2021. *Press release: The Nobel Prize in Physics 2021.*, 5.Okt 2021.