

UNIVERZA V LJUBLJANI  
FAKULTETA ZA MATEMATIKO IN FIZIKO  
ODDELEK ZA FIZIKO

MODELSKA ANALIZA I

**13. naloga: Isingov in Pottsov model na heksagonalni mreži**

Žiga Šinigoj, 28222025

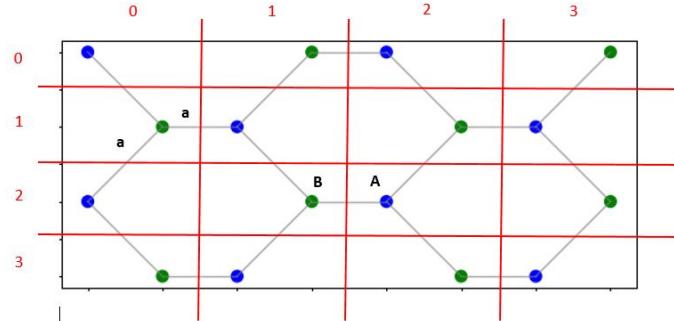
Ljubljana, julij 2023

# 1 Uvod

V nalogi nas bo bodo zanimale opazljivke (energija, magnetizacija, susceptibilnost in specifična toplopa) sistema v odvisnosti od temperature oz. inverzne temperature  $\beta$  Isingovega in Pottsovega modela na heksagonalni mreži. Za iskanje ravnovesnih stanj in pričakovanih vrednosti opazljivk uporabimo Metropolisov algoritem, s katerim smo se spoznali pri nalogi 8. in zato ga ne bom še enkrat opisoval.

Tokrat imamo spine na heksagonalni mreži in kažejo v smeri pravokotno na mrežo. Na prvi pogled se zdi, da bo največja težava shranjevanje položajev spinov na mreži in knjigovodstvo najbližjih sosedov. Izkaže se, da se da relativno enostavno beležiti sosede. Problema sem se lotil tako, da sem razdelil mrežo na dve podmreži A in B (slika 1), nato sem zložil spine v kvadratno matriko, kjer ima vsak spin svoj par indeksov  $(i,j)$  (slika 1). Edina stvar na katero je potrebno biti sedaj pazljiv je to, da imajo spini na podmreži A vedno najbližja sosedja zgoraj in spodaj (v istem stolpcu v matriki) in najbližjega sosedja na levo (ista vrstica, prejšnji stolpec), in spini na podmreži B dva najbližja sosedja zgoraj in spodaj (v istem stolpcu v matriki) in najbližjega sosedja na desno. V sodih vrsticah matrike, v katero sem shranil mrežo, so v sodih stolpcih spini iz podmreže A in v lihih vrsticah so v sodih stolpcih spini iz podmreže B. Za izračun lokalne interakcijske energije moram pogledati za dani spin  $s(i,j)$  konfiguracije najbližjih sosedov, ki so za dani položaj spina  $(i,j)$  naslednje:

- če sta  $i,j$  soda, potem so najbližji sosedji  $s(i \pm 1, j)$ ,  $s(i, j - 1)$
- če je  $i$  sod,  $j$  lih, potem so najbližji sosedji  $s(i \pm 1, j)$ ,  $s(i, j + 1)$
- če je  $i$  lih,  $j$  sod, potem so najbližji sosedji  $s(i \pm 1, j)$ ,  $s(i, j + 1)$
- če sta  $i, j$  liha, potem so najbližji sosedji  $s(i \pm 1, j)$ ,  $s(i, j - 1)$



Slika 1: Heksagonalna mreža s stranico  $a$ , razdeljena na dve podmreži A in B. Mreža je mogoče shraniti v kvadratno matriko (rdeče), kjer številke označujejo i-to vrstico in j-ti stolpec po običajni konvenciji.

Razlika od Isingovega modela na kvadratni mreži je ta, da imamo 3 najbližje sosedje, zgoraj, spodaj in enega, ki je na levi ali na desni strani, odvisno na kateri podmreži se nahajamo. Uporabil sem periodične robne pogoje, ki veljajo samo če je število vrstic in stolpcev matrike, v katero sem shranil informacijo o spinih, sodo (npr.  $4 \times 4$  matrika (rdeče) in pripadajoča heksagonalna mreža na sliki (1)).

Izračune sem naredil v C++ in grafe v Pythonu. Pri risanju konfiguracij heksagonalne mreže sem preslikal konfiguracijo, shranjeno v polni kvadratni matriki, na kvadratno matriko, kjer sem dodal ničle na mestih kjer ni spina tako, da so elementi matrike tvorili elemente heksagonalne mreže.

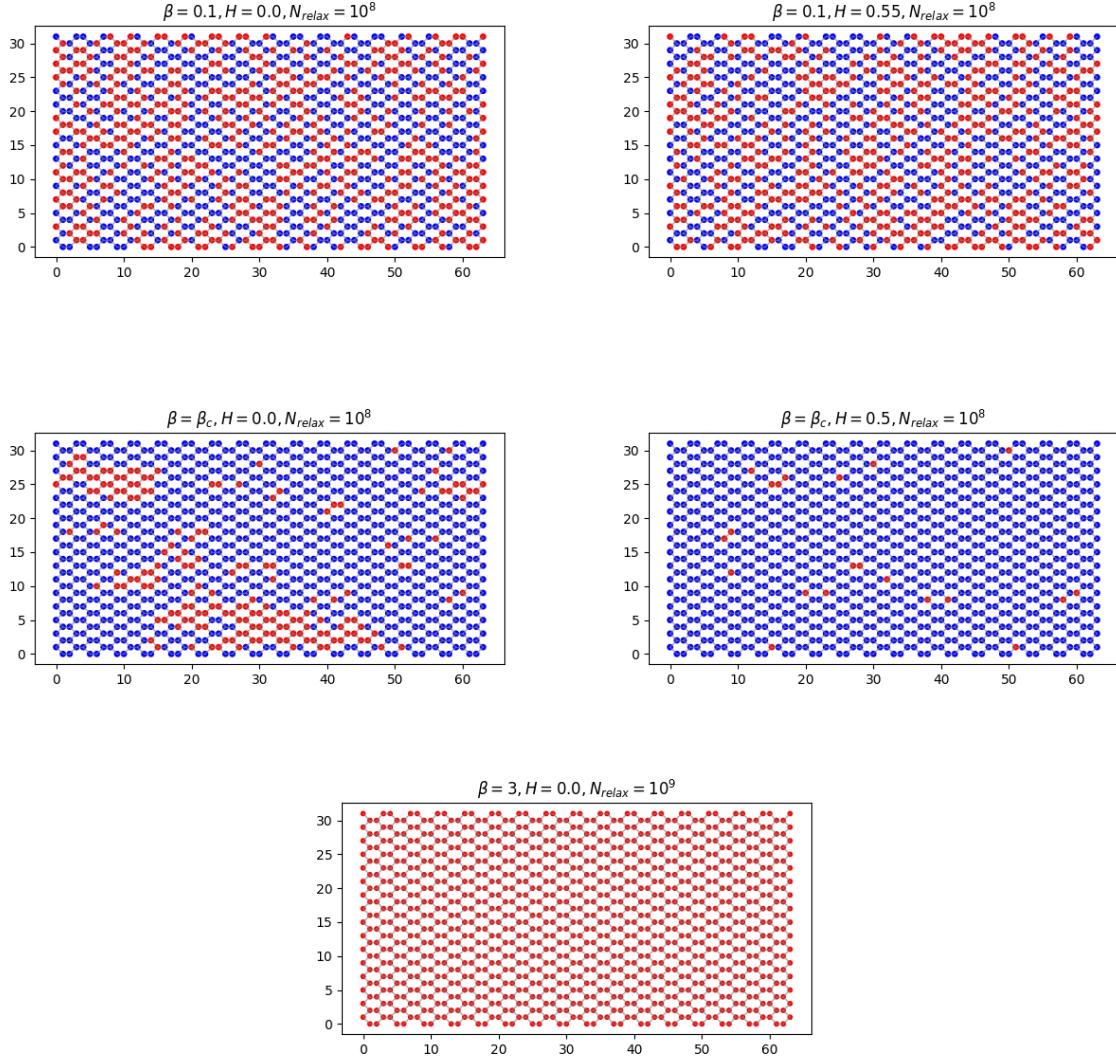
## 2 Isingov model

Hamiltonov operator za ta model je

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j - H \sum_i s_i , \quad (1)$$

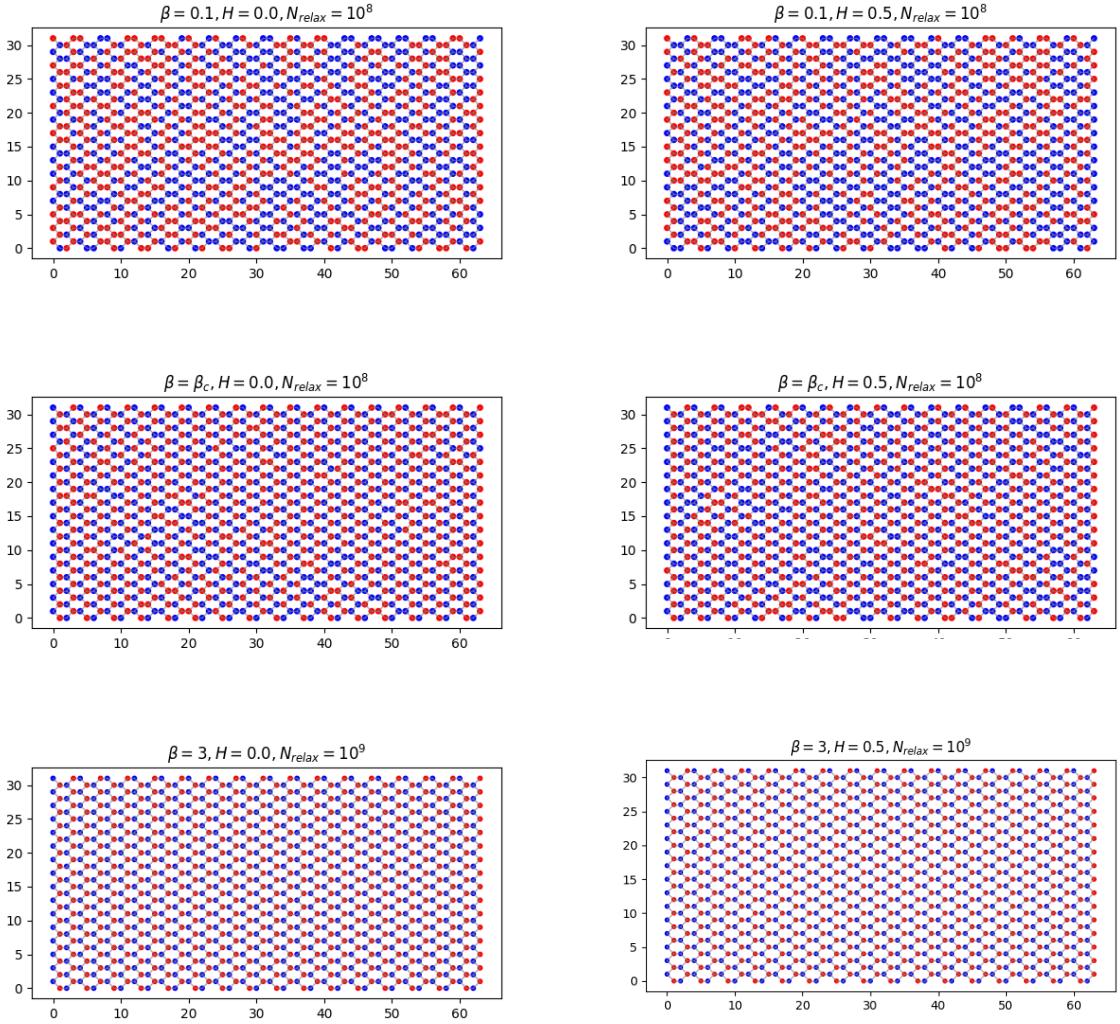
, kjer je  $J = 1$  za feromagnetne snovi in  $J = -1$  za antiferomagnetne,  $s_i = \pm 1$ , prva vsota teče po najbližjih sosedih.  $H$  označuje zunanje magnetno polje. Začetno stanje mreže sem izžrebal naključno. Kritična inverzna

temperatura za heksagonalno mrežo je  $\beta_c = 0.6585$  [2]. Najprej si oglejmo nekaj konfiguracij feromagneta pri različnih temperaturah (slika 2). Pri velikih temperaturah ( $\beta = 0.1$ ) ni ureditve in tudi ob dodatku (premajhnega) zunanjega polja ( $H=0.55$ ) ne pride do ureditve. Pri kritični temperaturi se večji del spinov poravnava. Ko dodamo zunanje polje se skoraj vsi spini poravnajo in dobimo feromagnetno osnovno stanje. Pri nizkih temperaturah pa so vsi spini poravnani v eno smer. Zelo me je presenetilo, da v feromagnetnem stanju pri nizki temperaturi nisem zaznal tvorb domen, tako kot na kvadratni mreži. Pogledal sem tudi konfiguracijo na večji mreži 128x128 in tudi tam jih nisem zaznal.



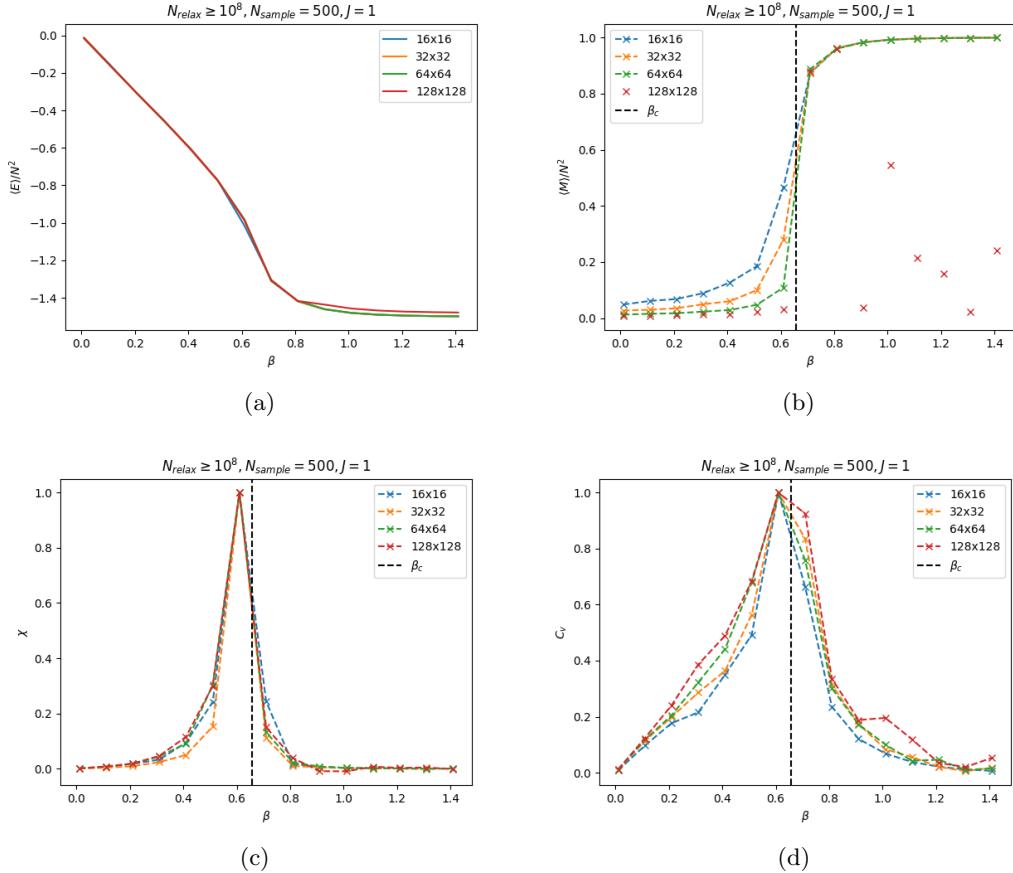
Slika 2: Konfiguracije feromagnetnega Isingovega modela pri različnih temperaturah in v različnem zunanjem magnetnem polju.

Konfiguracije antiferomagnetnega Isingovega modela prikazuje slika (3). Pri visokih temperaturah imamo neurejeno fazo, ko se temperatura niža pa se vedno bolj približujemo osnovnemu stanju - Neelovemu stanju. Vsak spin ima tri sosednje spine, ki so nasprotno obrnjeni. Osnovno stanje je do določene mere stabilno, saj zunanje magnetno polje  $H = 0.5$  ne spremeni konfiguracije. V osnovnem stanju prav tako nisem zaznal tvorbe domen tako kot na kvadratni mreži.

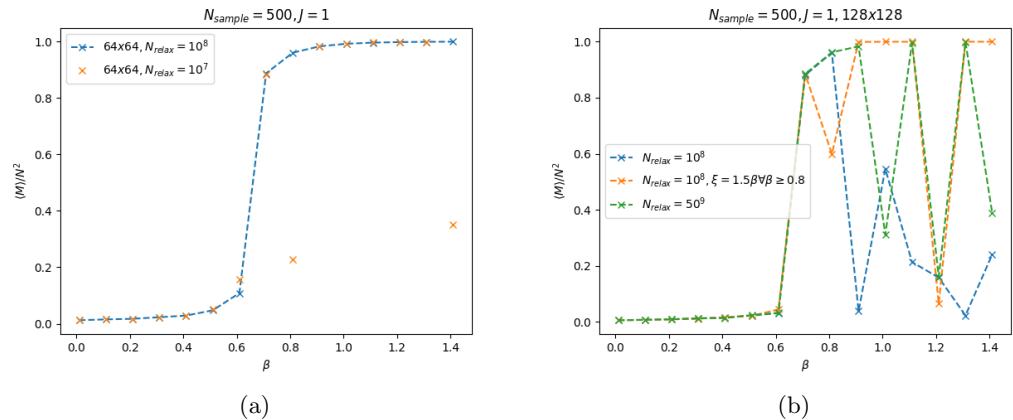


Slika 3: Konfiguracije antiferomagnetskega Isingovega modela pri različnih temperaturah in v različnem zunanjem magnetnem polju.

Sistem je potrebno pri vsakem odčitavanju opazljivk in konfiguracij najprej relaksirati, v ta namen sem vzel  $10^8 \leq N_{relax} \leq 10^{10}$  potez. Pri odčitavanju sem, če ni označeno drugače, povprečil 500 točk, ki so, da se izognemo korelacijam, razmaknjene za  $N^2$  točk, kjer je  $N$  število vrstic ali stolpcev mreže. Vse opazljivke sem normiral in izračunal na spin. Odvisnost opazljivk od temperature prikazuje slika (4). Kot kaže je na konfiguracijo sistema najbolj občutljiva magnetizacija. Pri velikosti mreže 128x128 lahko opazimo velika odstopanja, ki so najverjetneje posledica tega, da sistem ni v osnovnem stanju in bi potreboval še več relaksacije. Fazni prehod se zgodi okrog  $\beta_c$ , kar je dober pokazatelj da je simulacija pravilna. Da dobimo pravilne rezultate je potrebno dovolj relaksirati sistem (slika 5a) vendar če nimamo te možnosti lahko tudi s spremenjanjem faktorja  $\xi$  nekoliko izboljšamo rezultate (slika 5b). Vsaka poteza metropolisovega algoritma je lahko sprejeta ali zavrnjena, če je poteza energijsko neugodna je lahko še vedno sprejeta z verjetnostjo  $e^{-\xi}$ , kjer je  $\xi = \beta \Delta E$ . V mojem primeru je množenje faktorja  $\xi$  pri nižjih temperaturah nekoliko izboljšalo simulacijo (slika 5b). Mogoče je lahko v določenih primerih odvisnost tudi nelinearna ali kaj podobnega, vendar je odvisno od primera do primera, koliko spremenjanje  $\xi(\beta)$  dejansko izboljša simulacijo.

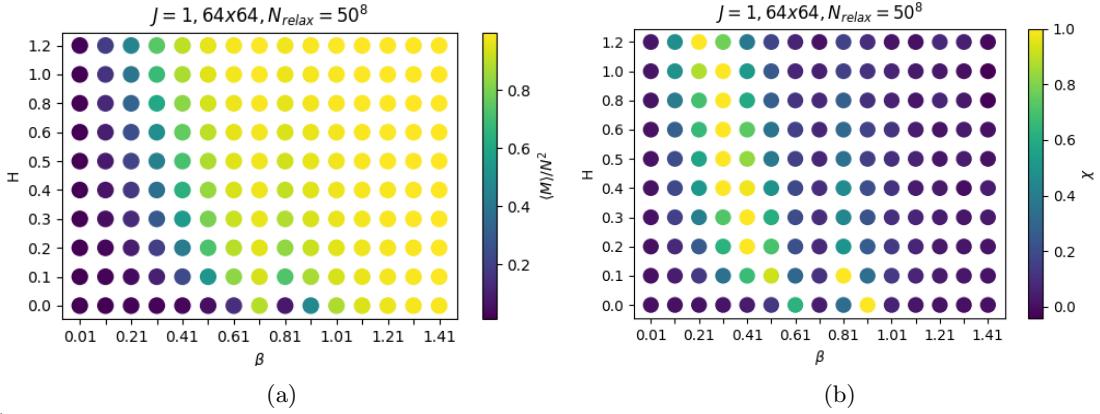


Slika 4: a) Energija na spin v odvisnosti od inverzne temperature. b) Magnetizacija na spin v odvisnosti od inverzne temperature. c) Susceptibilnost v odvisnosti od inverzne temperature. d) Specifična toplota v odvisnosti od inverzne temperature.

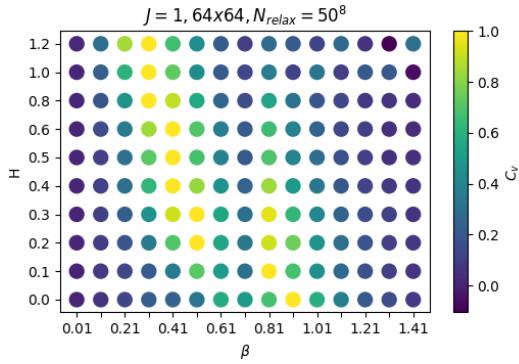


Slika 5: a) Vpliv relaksacije sistema na temperaturni profil magnetizacije. b) Vpliv relaksacije sistema in parametra  $\xi$  na temperaturni profil magnetizacije.

Ob vklopu zunanjega magnetnega polja  $H$  se temperaturni profili opazljivk nekoliko spremenijo (slika 6, 7). Fazni prehod se z večanjem polja premika proti večjim temperaturam (nižje  $\beta$ ). Kar se zdi nenavadno, je premikanje kritične temperature z večanjem magnetnega polja. Vsaj za majhna polja bi pričakoval linearno odvisnost  $\beta_c(H)$ , vendar kar lahko opazim je precej velik skok kritične temperature pri  $H = 0.1 \rightarrow 0.2$ . Mogoče pa to ni majhno magnetno polje in je res linearna v območju  $H \leq 0.1$ , potem pa gre potenčno.



Slika 6: a) Magnetizacija na spin v odvisnosti od temperature in zunanjega magnetnega polja  $H$ . b) Suscepibilnost v odvisnosti od temperature in zunanjega magnetnega polja  $H$ .



Slika 7: Specifična toplota v odvisnosti od temperature in zunanjega magnetnega polja  $H$ .

### 3 Pottsov model

Obravnavamo Pottsov model na heksagonalni mreži, pripadajoči Hamiltonian je

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \delta_{s_i, s_j} - H \sum_i s_i , \quad (2)$$

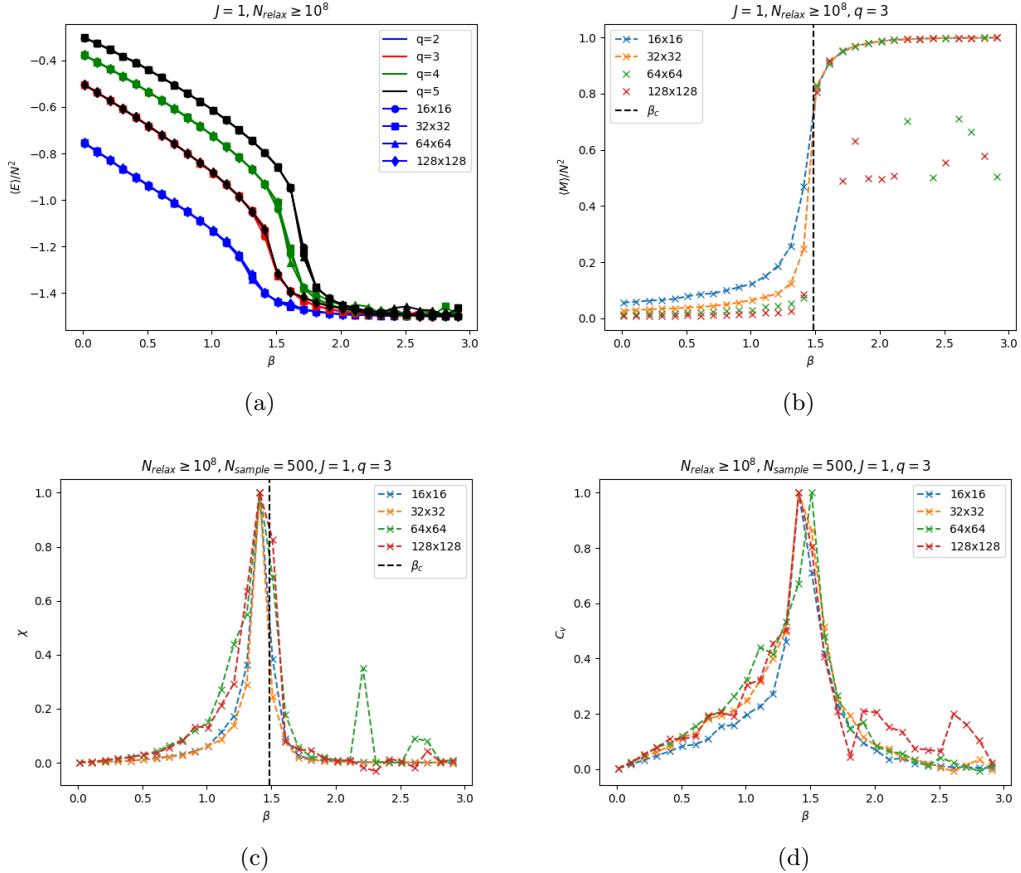
kjer  $s_i \in 1, \dots, q$ , Pottsov model je pospolitev Isingovega modela iz 2 na  $q$  prostostnih stopenj. Tako definiran Pottsov model ima kritične temperature [1]

| $q$ | $\beta_c$          |
|-----|--------------------|
| 2   | $2\beta_{c,ising}$ |
| 3   | 1.4842             |
| 4   | 1.6094             |
| 5   | 1.7102             |

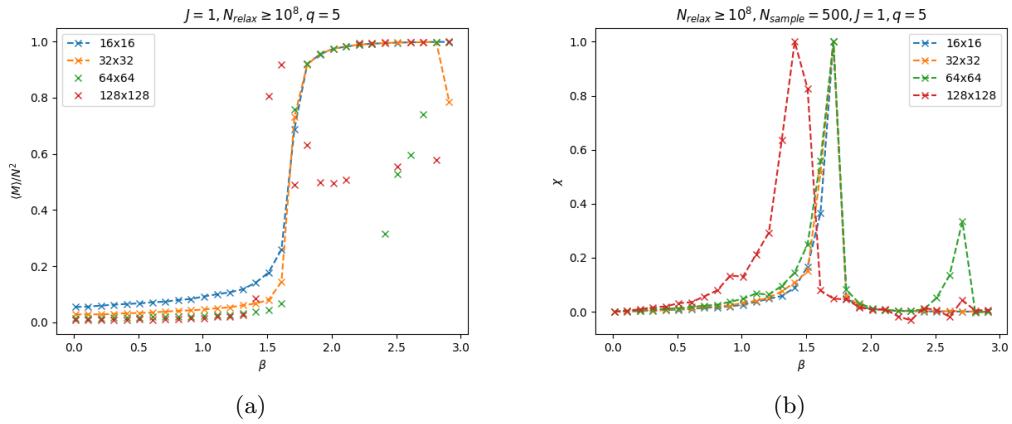
Tako kot na kvadratni mreži velja, da je prehod prvega reda za  $q \geq 4$ . Magnetizacija je definirana kot  $M = \sum_r e^{2\pi i(\sigma_r - 1)/q}$ . Za  $q = 2$  dobim Isningov model, zato bom pogledal odvisnost opazljivk samo za  $q = 3, 4, 5$ .

Povprečno energijo na spin prikazuje slika (8). Vse odvisnosti konvergirajo k isti povprečni energiji na spin. Zanimivo je, da ima povprečna energija pri  $q = 5, 128 \times 128$  velikosti mreže enako odvisnost kot pri  $q = 3$ . Prav tako kot pri Isingovem modelu se soočamo z podobnimi težavami relaksacije sistema. Tukaj je stvar še bolj problematična, saj imamo več prostostnih stopenj. Odvisnosti pri večjih mrežah niso več tako zvezne (slika 8). Temepratura faznega prehoda sistema se približno ujema z analitično temperaturo  $\beta_c$ , kar je dober pokazatelj, da simulacija deluje.

Pri  $q = 5$  je pri velikosti mreže  $128 \times 128$  narejenih premalo relaksacijskih potez  $N_{relax}$ . Odvisnost opazljivk precej odstopa od odvisnosti, ki jo podajo manjši sistemi. Ob tako veliki mreži in petimi prostostnimi stopnjami, ne dosežemo osnovnega stanja sistema. Posledično dobim napačno temperaturo faznega prehoda, susceptibilnost in specifična toplota imata zamaknjeni vrh.

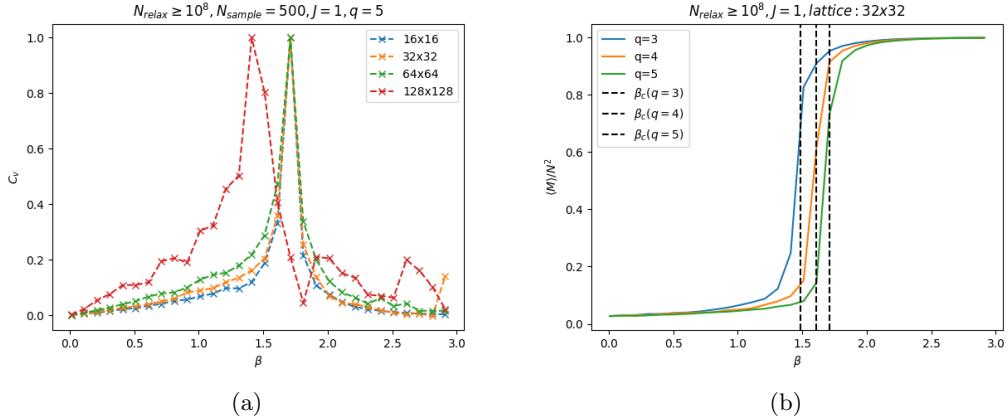


Slika 8: a) Energija na spin v odvisnosti od inverzne temperature. b) Magnetizacija na spin v odvisnosti od inverzne temperature. c) Susceptibilnost v odvisnosti od inverzne temperature. d) Specifična toplota v odvisnosti od inverzne temperature.

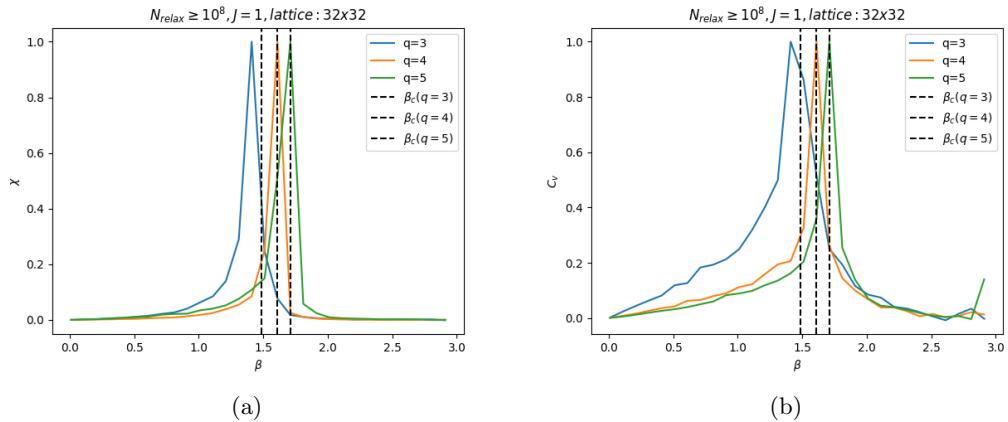


Slika 9: a) Magnetizacija na spin v odvisnosti od inverzne temperature. b) Susceptibilnost v odvisnosti od inverzne temperature.

Odvisnost opazljivk pri različnih  $q$  sem pogledal na mreži velikosti  $32 \times 32$ , saj na tej velikosti mreže vedno dosežem osnovno stanje pri danih temperaturah in prostostnih stopnjah. Odvisnost opazljivk prikazuje slika (10, 11). Zelo dobro je ujemanje kritične temperature pri  $q = 4, 5$  in nekoliko slabše pri  $q = 3$ . Zanimivo je tudi, da strmina prehoda ne veliko narašča z  $q$ . Pri Pottsovem modelu na kvadratni mreži (naloge iz višjih računskih metod) je jasno videti naraščanje strmine z  $q$ . Tukaj pa se ne vidi neveznost prehoda pri  $q = 5$ . Mogoče bi moral simulirati še večje vrednosti  $q$ .

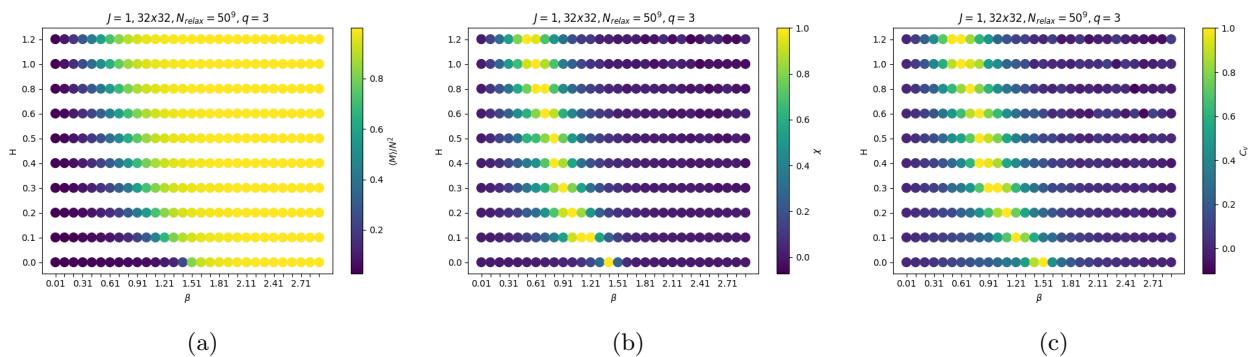


Slika 10: a) Specifična topota v odvisnosti od inverzne temperature. b) Profil magnetizacije pri različnih  $q$ .  $\beta_c$  predstavlja analitično vrednost kritične temperature.

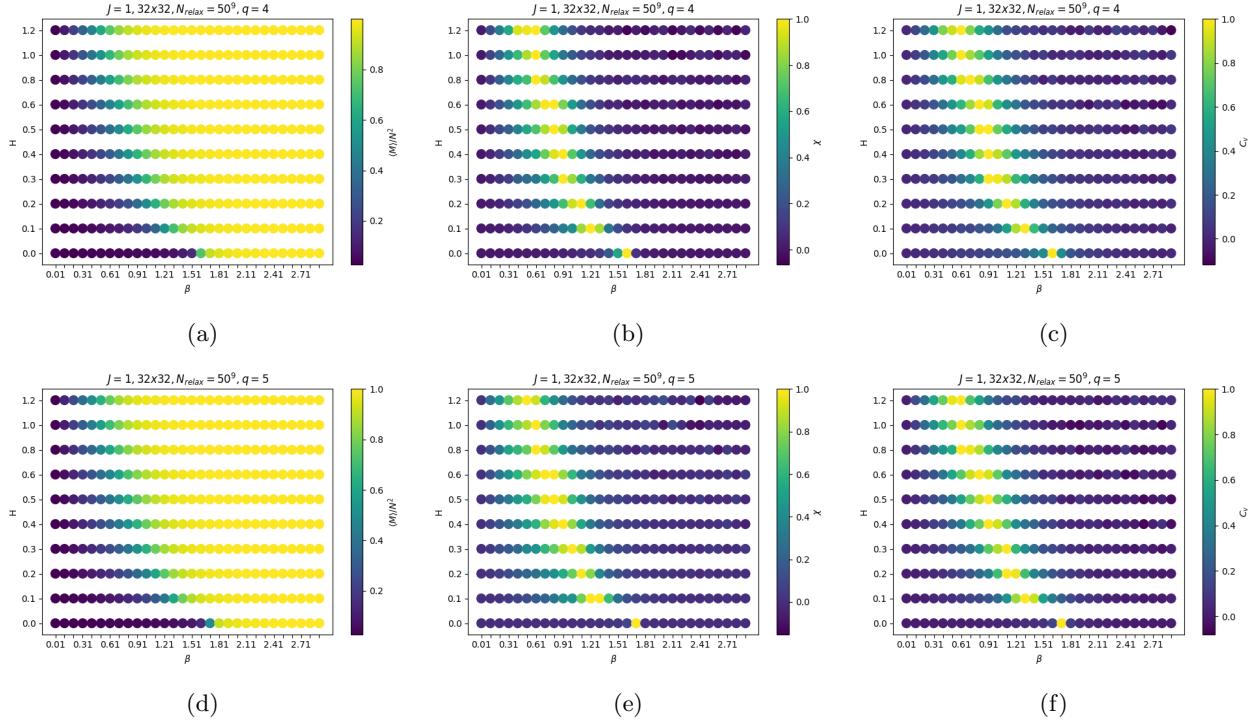


Slika 11: a) Susceptibilnost v odvisnosti od inverzne temperature pri različnih  $q$ . b) Specifična topota v odvisnosti od inverzne temperature pri različnih  $q$ .  $\beta_c$  predstavlja analitično vrednost kritične temperature.

Ob vklopu zunanjega magnetnega polja  $H$  se temperaturni profili opazljivk nekoliko spremenijo (slika 12). Fazni prehod se z večanjem polja premika proti večjim temperaturam (niže  $\beta$ ). Pri  $q \geq 2$  ni več nenadnega skoka pri susceptibilnosti in specifični topoti ob vklopu polja, kot pri Isingovem modelu. Fazni diagrami nakazujejo na potenčno odvisnost opazljivk od zunanjega polja. Zanimivo je tudi to, da se z večanjem  $H$  širijo vrhovi pri susceptibilnosti in specifični topoti, kar ni bilo mogoče opaziti pri Isingovem modelu.

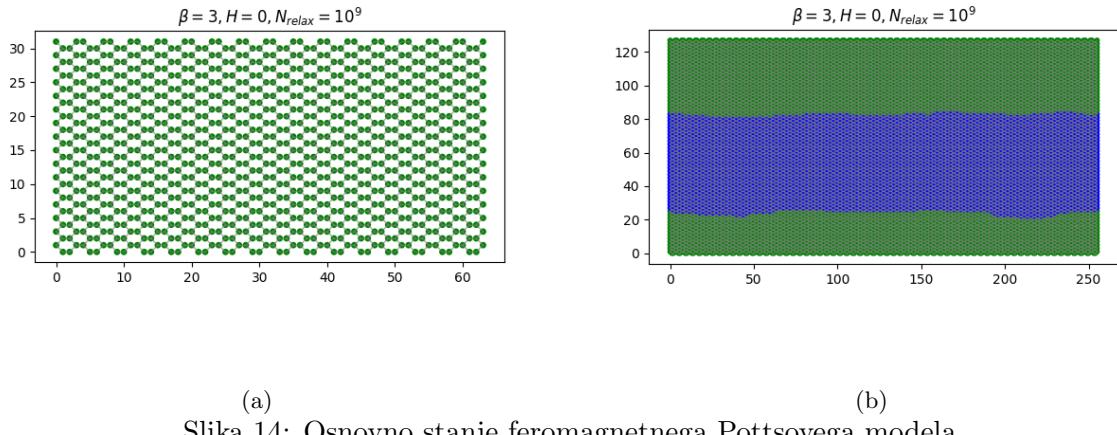


Slika 12: Fazni diagrami pri  $q = 3$ .

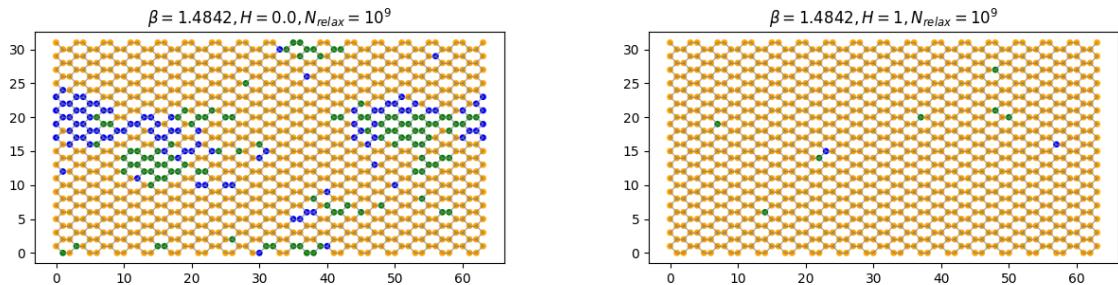


Slika 13: Fazni diagrami pri  $q = 4, 5$ .

Pogledal sem si še nekaj konfiguracij osnovnih stanj Pottsovega modela. Zanimiva so osnovna stanja pri nizki temperaturi, pri visokih temperaturah imamo neurejen sistem, ne glede na število prostostnih stopenj (slika 15c). Osnovno stanje feromagnetnega Pottsovega modela je, ko vsi spini kažejo v isto smer. Zanimivo je, da se pri  $q \geq 3$  pojavijo domene na večjih skalah (slika 14b), česar nisem zaznal pri Isingovem modelu. Pri kritični temperaturi imamo območja, kjer del spinov ne kaže v smer, kamor kaže večina. Ob vklopu magnetnega polja se večina spinov poravnava (slika 15a,b).

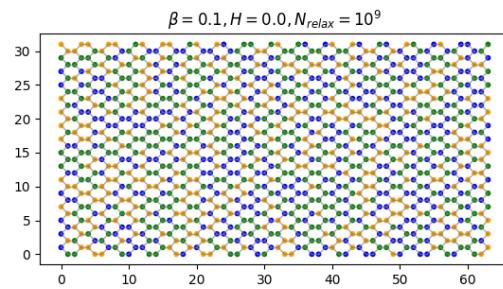


Slika 14: Osnovno stanje feromagnetnega Pottsovega modela.



(a)

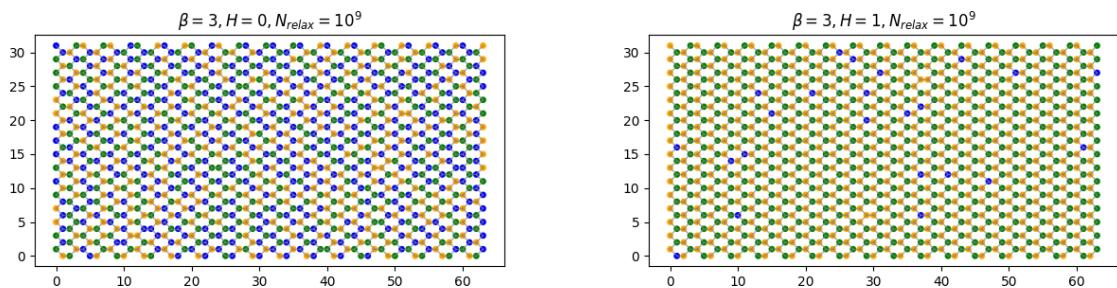
(b)



(c)

Slika 15: Osnovno stanje feromagnetnega Pottsovega modela.

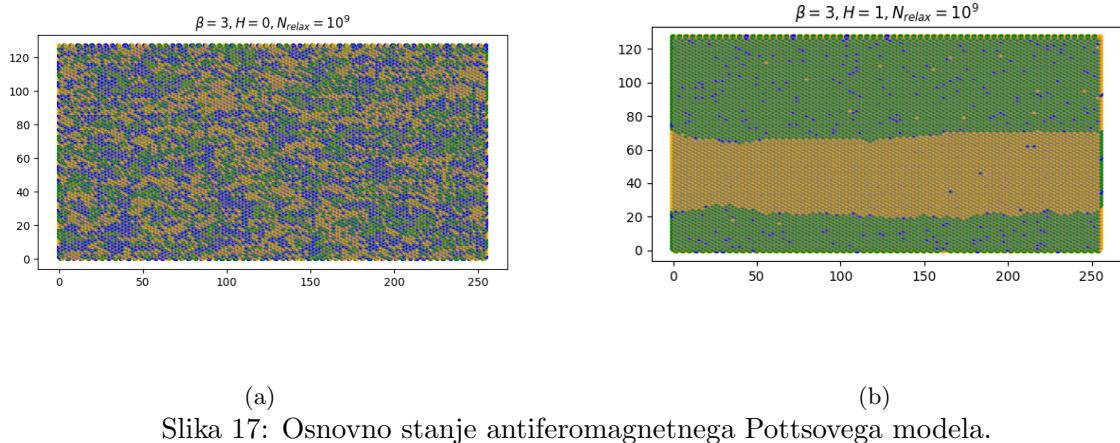
Pri antiferomagnetskem Pottsovem modelu je osnovno stanje tako, da ima vsak spin sosedne, ki mu niso enaki (slika 16a). Ko vključim magnetno polje pa dobim Neelovo stanje z dvema prostostnima stopnjama. Na večji skali (slika 17b) se pojavijo "domene", oz. del, kjer sta sosednja spina enako obrnjena, sosednji spini na eno stran so obratno obrnjeni kot sosednji spini na drugi strani "domene".



(a)

(b)

Slika 16: Osnovno stanje antiferomagnetnega Pottsovega modela.



Slika 17: Osnovno stanje antiferomagnetskega Pottsovega modela.

## 4 Zaključek

V poročilu sem predstavil rezultate simulacij Isingovega in Pottsovega modela na heksagonalni mreži. S pomočjo simulacij z Metropolisovim algoritmom sem preučeval temperaturno odvisnost magnetizacije, energije, specifične toplotne in susceptibilnosti. Prav tako sem preučeval feromagnetne in antiferomagnetne konfiguracije v odsotnosti in prisotnosti zunanjega magnetnega polja. Simulacije so pokazale, da Isingov model na heksagonalni mreži ne tvori domen v osnovnem stanju. Tvorba domen se pokaže, če dodamo vsaj še eno prostostno stopnjo.

## Literatura

- [1] F. Y. Wu, *The Potts model*, Rev. Mod. Phys. **54**, 235 (1982).
- [2] M. Ghaemi, G. A. Parsafar, and M. Ashrafihaadeh, *Calculation of the Critical Temperature for 2- and 3-Dimensional Ising Models and for 2-Dimensional Potts Models Using the Transfer Matrix Method*, arXiv:physics/0406135 [physics.chem-ph] (2004).