Počítačová fyzika IX

2D Isingov model - Glauberova dynamika

Peter Papp, Ján Ďurian

(Peter Markoš)

Katedra experimentálnej fyziky F2-81

Obsah

- Isingov model magnetizmu
- Prechod z paramagnetickej do feromagnetickej fázy: magnetizácia, kritický bod, kritický exponent
- Glauberov algoritmus
- Numerická simulácia relaxácie spinového systému
- Úloha

Isingov model - definíci

- d-rozmerná mriežka.
- v každom uzle mriežky spin (magnetický model) s dvoma hodnotami:

  $$s_i = \pm 1$$

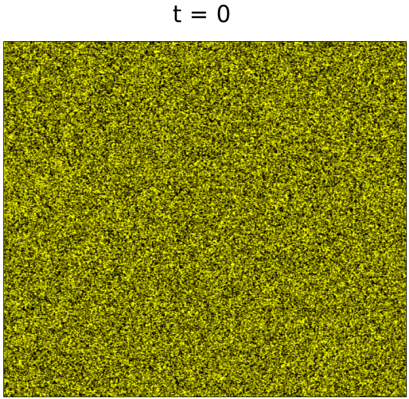
- väzba medzi susednými spinmi

  $$E_i = -\sum_j J s_i s_j - h s_i$$

  J ... výmenný integrál h ... magnetické pole
- Celková energia

  $$H = \sum_i E_i$$

Isingov model - po£iato£ný stav



Jedna z možných konfigurácií (spiny sú orientované náhodne).

Na mriežke $N \times N$ nájdeme

$$N_p = 2^{N \times N}$$

možných konfigurácií.

Pre $N = 512$ je $N_p = 2^{262144}$. Daná konfigurácia má energiou

$$E = -\sum_{ij} J s_i s_j$$

sumujeme cez najbližších susedov!

Isingov model - teplota

Pravdepodobnosť realizácie danej konfigurácie závisí od teploty:

$$P(E) = Z \exp - \frac{E}{k_B T}$$

T ... teplota.
Z ... štatistická suma
Fázový prechod:

- Pre niektoré teploty rozloženie spinov zostane náhodné
- znižovaním teploty prejdeme do usporiadaného stavu

Znamienko J:

- $J > 0$ Model prechodu paramagnet - feromagnet
- $J < 0$ Model prechodu paramagnet - antiferomagnet

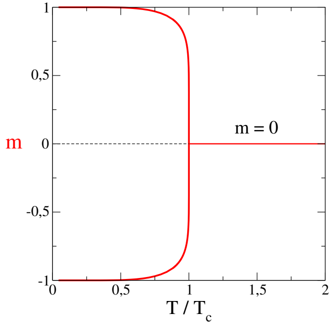
Magnetizácia

$$m = \sum_i s_i$$

Paramagnet: spiny sú orientovane náhodne, preto $m = 0$

Feromagnet: spiny sa orientujú, preto $m \neq 0$

Spon



Dvojrozmerný Isingov model:

$$m(T) = \pm \left[1 - \sinh^{-4} \frac{J}{k_B T} \right]^{\beta}$$

$$\beta = \frac{1}{8}$$

Pod kritickým bodom sa symetria modelu naruší - spinov orientovaných jedným smerom je viac.

$$m = \sum_{i}^{N} s_i$$

- kritický bod: $T = T_c$
- kritické exponenty: β

Kritický bod, kritické exponenty závisia od dimenzie problému.

Teoretické výsledky

Položme

$$J/k_B = 1$$

- V 1D neexistuje usporiadaný stav (kritická teplota $T_c = 0$).
- 2D model je presne riešiteľný (Onsager)
- V 2D

$$T_c = \frac{2}{\ln(1+\sqrt{2})} \qquad \sinh\frac{2J}{k_B T_c} = 1$$

- kritický exponent

$$\beta = \frac{1}{8}$$

- 3D model riešime len približnými metódami
- 4D - teória stredného poľa, $\beta = 1/2$

Renormalizačná grupa (K. Wilson), univerzalita fázových prechodov ...

...asovývývoj

Spiny sa môžu v priebehu času preorientovať. Pravdepodobnosť zmeny orientácie - princíp detailnej rovnováhy:

$$P_i P_{i\to j} \equiv P_j P_{j\to i}$$

- P_i pravdepodobnosť nájsť systém v stave i
- $P_{i\to j}$ pravdepodobnosť prechodu zo stavu i do stavu j

$$\frac{P_{i\to j}}{P_{j\to i}} = \frac{P_j}{P_i} = e^{-\frac{E_j - E_i}{k_B T}}$$

Pravdepodobnosť prejsť do stavu s vyššou energiou je teda malá, ale nenulová.
Ak si zvolím spin i, môžem ho alebo

- otočiť s pravdepodobnosťou $P_{i\to j} = C \times e^{-\frac{E_j - E_i}{k_B T}}$
- nechať v pôvodnom stave s pravdepodobnosťou $P_{i\to i} = C$

Jedna z možností musí nastať, preto

$$P_{i\to i} + P_{i\to j} = C + Ce^{-\frac{E_j - E_i}{k_B T}} = 1$$

…asovývývoj

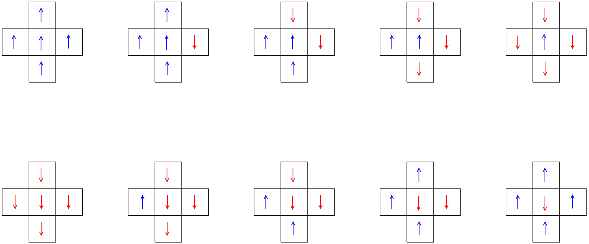
Pravdepodobnosť prechodu zo stavu i do stavu j:

$$P_{i \to j} = \frac{e^{-E_j/k_B T}}{e^{-E_j/k_B T} + e^{-E_i/k_B T}} = \frac{1}{1 + e^{(E_j - E_i)/k_B T}}$$

Umožňuje navrhnúť numerický algoritmus:

1. Začnem z náhodne zvoleného stavu
2. zvolím si náhodne niektorý spin a nájdem pravdepodobnosť $P_{i \to j}$ zmeny jeho orientácie:
3. s touto pravdepodobnosťou ho otočím
4. krok 2 opakujem, kým nedosiahnem rovnovážny stav

Výpo£et pravdepodobnosti prechodu

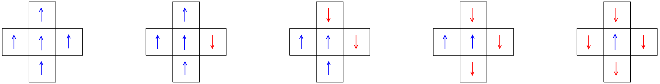


Potrebujeme len 5 pravdepodobností:

$$\frac{\Delta E}{k_B T} = 2\frac{J}{k_B T} \times s_i \times [s_H + s_D + s_L + s_P]$$

lebo ΔE závisí len od spinu samotného a od štyroch susedov (Horný, Dolný, Ľavý, Pravý).

Výpo£et pravdepodobnosti prechodu



s_i . . . spin ktorého orientáciu chcem otočiť
s_L, s_P, s_H, s_D . . . susedné spiny (Ľavý, Pravý, Horný, Dolný).

Ku každej konfigurácii definujem index $1 \leq I \leq 5$:

$$I = \frac{1}{2} s(i) \left[s_H + s_D + s_L + s_P \right] + 3$$

a jemu zodpovedajúcu pravdepodobnosť preklopenia spinu s_i:

$$P(I) = \frac{1}{1 + \exp\left[\frac{2(2I-6)}{T}\right]}$$

Ak teda náhodne zvolíme spin s_i, vypočítame I a s pravdepodobnosťou $P(I)$ ho otočíme. Pravdepodobnosti $P(I)$ vypočítame na začiatku programu, aby sme šetrili CPU.

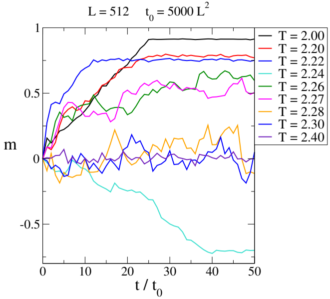
Algoritmus

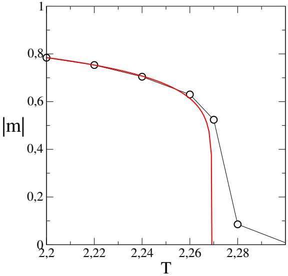
- zvolím teplotu T a nájdem 5 pravdepodobností $P_{i \to j}$ (pole dĺžky 5)
- zvolím veľkosť mriežky N
- vygenerujem náhodnú konfiguráciu spinov na mriežke $N \times N$
- simulujem relaxáciu do rovnovážneho stavu:
  Jeden časový krok:
  1. náhodne zvolím niektorý spin
  2. identifikujem spiny okolo neho
  3. nájdem, s akou pravdepodobnosťou P sa môže otočiť
  4. s takou pravdepodobnosťou ho otočím

  Body 1-4 opakujem $N \times N$-krát. Časových krokov potrebujem ~ 10000 keď som ďaleko od kritického bodu, a podstatne viac, keď som v okolí kritického bodu
- Zapisujem priebeh magnetizácie, ak chcem tak aj priestorové rozloženie spinov

Niektoré výsledky

Zvolím mriežku 512×512





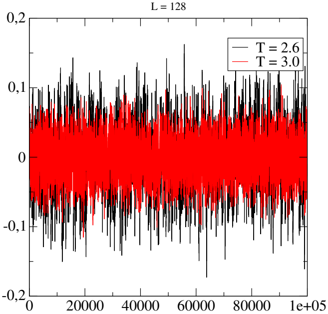
Presná kritická teplota

$$T_c = \frac{2}{\ln(1+\sqrt{2})} = 2.26912531$$

Numericky sme dostali o niečo vyššiu kritickú teplotu $T_c \approx 2.29$.

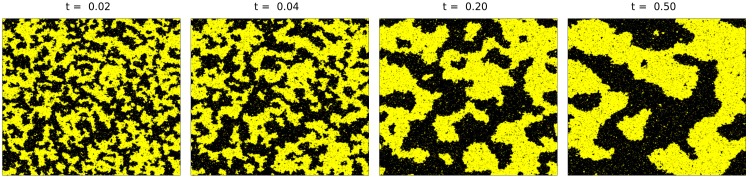
Niektoré výsledky

Nad kritickým bodom magnetizácia fluktuuje okolo strednej hodnoty $m = 0$.

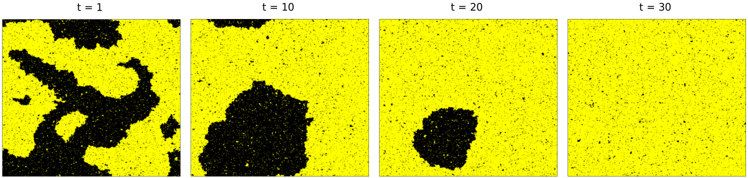


…asovývývoj teplota $T = 2$

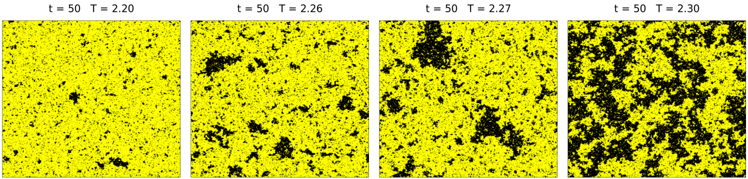
Jednotka času: $t_0 = 5000 \times 512^2$ náhodných krokov.
čas $t = 0.02, 0.04, 0.20, 0.50 \times t_0$ $(t_0 = 5000 \times 512^2)$



čas $t = 1, 10, 20, 30$:



…asovývývoj pre rôzne teploty



Sumár

Výsledky sú len kvalitatívne, lebo

- konečná veľkosť mriežky
  v blízkosti kritického bodu narastá korelačná dĺžka, preto je potrebné uvažovať veľké mriežky
- konečná doba simulácie
  v okolí kritického bodu narastajú fluktuácie a relaxačné procesy prebiehajú "nekonečne" pomaly

Napriek tomu sme dostali

- prijateľný odhad kritického bodu
- predstavu o priestorovom rozložení spinov vo vzorke
- obraz ako prebieha časová relaxácia

Úloha

- Napíšte program pre Glauberov algoritmus
- Simulujte "časový vývoj"
- Odhadnite kritickú teplotu a ukážte, ako magnetizácia závisí od teploty pre $T < T_c$