

Project 4 - Computational physics - FYS3150

Studering av faseoverganger ved bruk av Ising modellen

Department of Physics, University of Oslo, Norway.
Philip Niane og Rohullah Akbari

Link til githubmappen:
<https://github.com/philipkarim/Philip-and-Rohullah-ComFys>

Abstrakt

I denne artikkelen er det studert faseoverganger i todimensjonale gittere hvor størrelsen varierer fra 2×2 , 20×20 og helt opp til 100×100 ved dimensjonsløse temperaturer. Metoden som er brukt er Ising modellen, ved bruk av Monte Carlo metoden og Metropolis algoritmen. Det ble funnet ut at magnetiseringen minker etter et system oppnår den kritiske temperaturen. Dette skyldes at susceptibiliteten til systemet minker og systemet mister sin evne til å magnetisere seg selv. Som fører til en faseovergang fra ferromagnetisme til paramagnetisme. Energien øker som funksjon av temperatur ettersom systemet får halvparten av spinnene vendt opp og halvparten av spinnene vendt ned. Dette fører til større energi per spinn og større energi for hele gitteret. Den numeriske kritiske temperaturen ble funnet til å være 2.250 med en relativ feil på $8.373 \cdot 10^{-3}$.

Innholdsfortegnelse

1	Introduksjon	2
2	Teori	3
2.1	Ising modellen	3
2.2	Generelle og statistiske uttrykk	3
2.3	2×2 gitter	4
2.4	Monte Carlo: Metropolis algoritmen	7
2.5	Faseoverganger	7
2.6	Termodynamisk likevekt	8

3	Metode	8
3.1	Grensebetingelser	8
3.2	Energien i et systemet ved spinn endring	9
3.3	Metropolis	9
4	Resultater	11
4.1	2x2 gitter for $T=1$	11
4.2	Gitterstørrelse: 20x20	12
4.3	sannsynlighetsfordeling for 20x20 gitter	17
4.4	Faseoverganger for ulike gitter størrelser	17
5	Diskusjon	20
5.1	2x2 gitter for $T=1 \frac{kT}{J}$	20
5.2	Utrekninger ved gitterstørrelse 20x20	20
5.3	sannsynlighetsfordeling for 20x20 gitter	21
5.4	Faseovergang for ulike gitterstørrelser	21
6	Konklusjon	22
7	Appendiks	22
7.1	Utleddning for analytiske verdier for 2x2 gitter	22
7.2	Forventningsmagnetisering og susceptibilitet	24
7.3	Approximasjon av kritisk temperatur	25
8	Bibliografi	26

1 Introduksjon

Målet for dette prosjektet er å studere hvordan det er mulig å simulere faseoverganger ved bruk av en modell som kalles Ising modellen. Ising modellen går ut på at det tas utgangspunkt i magnetiske dipolmomenter. Hver magnetiske dipol kan ha to verdier for spinn tilstandene sine, spinn opp og spinn ned. Hvert spinn påvirker nabospinn som videre påvirker neste nabospinn rundt om i gitteret som blir brukt. De magnetiske dipolene brukes videre i de såkalte faseovergangene hvor det ved en viss temperatur foregår en faseovergang fra en fase med magnetiske dipoler til en fase uten magnetiske dipoler. [2]

I prosjektet skal det studeres på både små gittere med størrelse 2x2 spinn og større gittere opptil størrelse 100x100 spinn. I hver situasjon skal denne modellen som består av Metropolisalgoritmen som er en kjent form for Monte Carlo metoden, brukes til å finne blant annet forventningsenergi $\langle E \rangle$, varmekapasiteter C_V , magnetisering $\langle M \rangle$ og susceptibilitet χ .

2 Teori

2.1 Ising modellen

Som sagt i introduksjonen er Ising modellen en matematisk modell. Ising modellen blir brukt til å beskrive ferromagnetisme i fagfeltet statistisk mekanikk. Siden ferromagnetisme avhenger av spinntilstanden til de magnetiske dipolene som kun kan ha 1 av 2 verdier er det naturlig å bruke spinnretningene opp eller ned.[3]

Spinnretningen til nabospinnene er med å påvirke energien. Energien kan utregnes ved å summere nabospinn med følgende formel dersom et magnetisk felt ikke er til stede[2]:

$$E = -J \sum_{\langle kl \rangle}^N s_k s_l \quad (1)$$

Hvor s_k og s_l enten er +1 eller -1 som henholdsvis indikerer spinn opp eller spinn ned. J er en energikonstant og N tilsvarer antall totalspinn. Systemet vil ha høyere energi om nabospinnene har ulik spinnretning iforhold til hverandre, og systemet vil ha lavere energi ved det motsatte tilfellet. Ved bruk av periodiske grensebetingelser vil spinnretningen i grensene bli bestemt ut ifra spinnretningen på motsatt side av gitteret. Ved å behandle grensene av gitteret på denne måten vil gitteret oppføre seg som et uendelig langt gitter.

2.2 Generelle og statistiske uttrykk

Det magnetiske momentet kan uttrykkes ved bruk av følgende formel:

$$M = \sum_k^N s_k \quad (2)$$

Itillegg kan sannsynlighetsfordelingen P og partisjonsfunksjonen Z skrives som følgende formler[1]:

$$Z = \sum_{i=1}^N e^{-\beta E_i} \quad (3)$$

og

$$P(\beta) = \frac{e^{-\beta E_i}}{Z} \quad (4)$$

Hvor β tilsvarer $\frac{1}{k_b T}$, der k_b er Boltzmannkonstanten og T er temperaturen. Partisjonsfunksjonen og sannsynlighetsfordelingen er generelle formler som kan

brukes til å finne forventningsmagnetisering, magnetisering, forventningsenergi, varmekapasitet og susceptibilitet.

For å finne forventningsverdier til blant annet energi og magnetisering må summen av energien eller magnetiseringen multipliseres med sannsynlighetsfordelingen:

$$\langle X \rangle = \sum_i^N X_i P(\beta) \quad (5)$$

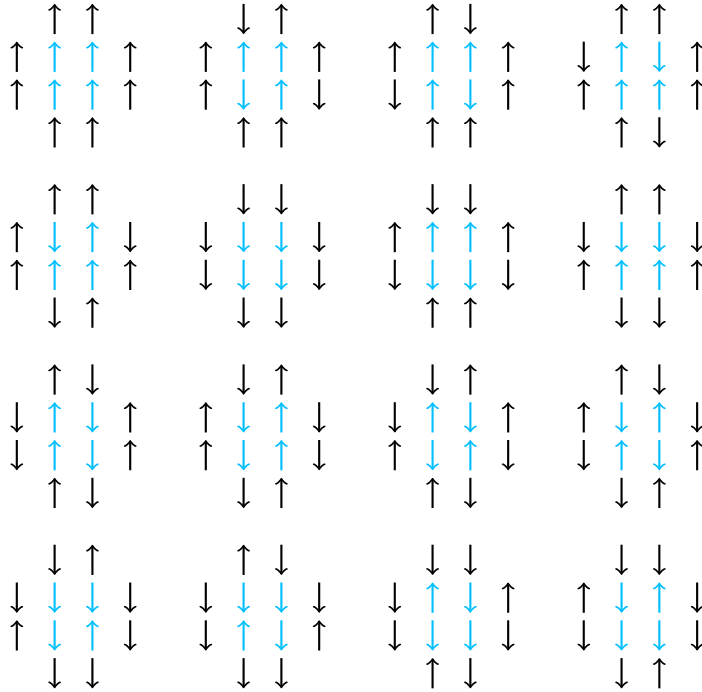
Forventningsverdiene kan brukes til å finne både varmekapasitet og susceptibilitet ved følgende formler:

$$C_V = \frac{\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2}{kT^2} \quad (6)$$

$$\chi = \frac{\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2}{kT} \quad (7)$$

2.3 2x2 gitter

I et system der det opereres med et 2x2 gitter vil det være fire spinn-tilstander. Siden hvert spinn har mulighet til å ha verdien spinn opp eller spinn ned vil det være mulig å lage 16 forskjellige kombinasjoner. De følgende kombinasjonene kan ses i figur 1, hvorav verdiene kan ses i tabell 1. [1]



Figur 1: Oversikt over de 16 forskjellige spinnkombinasjonene som er mulig i et 2x2 gitter. De blå pilene er spinnene, mens de svarte er de tilsvarende nabospinnene ved bruk av periodiske grensebetingelser.

Antall spinn-opp	Degenerasjon	Energi	Magnetisering
4	1	-8J	4
3	4	0	2
2	4	0	0
2	2	8J	0
1	4	0	-2
0	1	-8J	-4

Tabell 1: Ved bruk av periodiske gitterbetingelser blir følgende verdier mulige. Altså vil halvdelen med spinn opp og halvdelen med spinn ned gi høyest energi.

2.3.1 Analytiske verdier i 2x2

Partisjonsfunksjonen blir som følger:

$$Z = \sum_{i=1}^{16} e^{-\beta E_i} = 4 \cosh(8\beta J) + 12 \quad (8)$$

Mens sannsynlighetsfordelingen i en tilstand i kan uttrykkes som følgende:

$$P(\beta) = \frac{e^{-\beta E_i}}{Z} = \frac{e^{-\beta E_i}}{4 \cosh(8\beta J) + 12} \quad (9)$$

Sannsynlighetsfordelingen og partisjonsfunksjonen brukes videre til å regne ut resten av de analytiske verdiene. Utledningene kan ses i appendiks.

Forventningsenergiene for $\langle E \rangle$ og $\langle E^2 \rangle$ blir som følger:

$$\langle E \rangle = \sum_i^{16} E_i P(\beta) = -\frac{8J \sinh(8\beta J)}{\cosh(8\beta J) + 3} \quad (10)$$

$$\langle E^2 \rangle = \sum_i^{16} E_i^2 P(E_i) = \frac{64J^2 \cosh(8\beta J)}{\cosh(8\beta J) + 3} \quad (11)$$

Disse blir videre brukt til å regne ut varmekapasiteten:

$$C_V = \frac{\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2}{kT^2} = \frac{1}{kT^2} \left(\frac{64J^2 \cosh(8\beta J)}{\cosh(8\beta J) + 3} - \left(\frac{-8J \sinh(8\beta J)}{\cosh(8\beta J) + 3} \right)^2 \right) \quad (12)$$

Til å regne ut susceptibilitet er verdiene for magnetiseringen brukt. Først ble forventningsverdiene funnet for M , $|M|$ og M^2 . Utledningene her kan også finnes i appendiks.

$$\langle M \rangle = \sum_i^{16} M_i P(E_i) = 0 \quad (13)$$

$$\langle M^2 \rangle = \sum_i^{16} M_i^2 P(E_i) = \frac{8e^{8\beta J} + 8}{\cosh(8\beta J) + 3} \quad (14)$$

$$\langle |M| \rangle = \sum_i^{16} |M|_i P(E_i) = \frac{2e^{8\beta J} + 4}{\cosh(8\beta J) + 3} \quad (15)$$

Deretter brukes forventningsverdiene til å finne susceptibiliteten:

$$\chi = \frac{\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2}{kT} = \frac{1}{kT} \frac{8e^{8\beta J} + 8}{\cosh(8\beta J) + 3} \quad (16)$$

2.4 Monte Carlo: Metropolis algoritmen

For å se hvordan Metropolis algoritmen forandrer seg metoden utvikler seg med hensyn på tid.

I forsøket brukes den såkalte Monte Carlo: Metropolis metoden. Denne metoden går ut på å studere hvordan spinnkonfigurasjoner utvikler seg med hensyn på tiden og brukes til å estimeres sannsynlighetsfordelingen etter å ha oppnådd en stabil tilstand. For å kunne klare dette brukes Metropolis algoritmen. Denne algoritmen er en form for Monte Carlo metoden, der det blir tatt tilfeldige verdier fra sannsynlighetsfordelingen.

I dette tilfellet er sannsynligheten for å finne et system ved en tilstanden i gitt ved (4) der normaliseringskonstanten er gitt ved (3).

Normaliseringskonstanten blir et veldig stort tall og gjør det dermed vanskelig å beregne siden da må alle tilstandene i systemet være kjent. Monte Carlo metoden tar kun for seg forholdet mellom sannsynligheter, derfor trengs det ikke ta hensyn til normaliseringskonstanten. Altså er dannelsen av nye spinnkonfigurasjoner avhengig av de forrige konfigurasjonene ved bruk av en overgangssannsynlighet. Denne sannsynligheten avhenger av energidifferansen mellom intial- og slutttilstandene.[1]

$$A_{i \rightarrow s} = e^{-\beta \Delta E} \quad (17)$$

Der i og s indikerer intial- og slutttilstandene, ved et gitter bestående av spinn i gitte tilstander. Spinntilstandene forandrer seg ved at tilfeldige spinn flipper og dermed endrer verdi.

2.5 Faseoverganger

En faseovergang er når et stoff endrer sine makroskopiske egenskaper og som navnet sier går over til en annen fase. Det finnes blant annet første- og andre ordens faseoverganger. I dette prosjektet er alle faseoverganger av andre orden siden det opereres med et to dimensjonalt gitter. I Ising modellen som dreier seg om ferromagnetiske strukturer, gitt at et magnetfelt ikke er til stede, vil den magnetiske selv polariseringen være ulik 0 under en kritisk temperatur T_c , også kalt Curie temperaturen. Når temperaturer er over T_c vil gjennomsnittsmagnetiseringen i modellen være lik 0, som betyr at det ikke vil være spinn som selv polariserer og strukturen blir dermed paramagnetisk.[4]

Når Temperaturen nærmer seg Curietemperaturen er det mulige å uttrykke $\langle M(T) \rangle$, C_V og χ ved Curie temperaturen ved følgende formler:

$$\langle M(T) \rangle \sim (T_C - T)^\beta \quad (18)$$

$$C_V \sim |T - T_C|^\alpha \quad (19)$$

$$\chi \sim |T - T_C|^\gamma \quad (20)$$

Hvor $\beta = \frac{1}{8}$, $\alpha=0$ og $\gamma = \frac{7}{4}$

Når $T_c \ll T$ vil korrelasjonslengden ξ , være omtrent lik lengden mellom dipolene i gitteret. Korrelasjonslengden øker når temperaturen nærmer seg Curietemperaturen. Korrelasjonslengden kan uttrykkes ved Curietemperaturen ved følgende formel:

$$\xi \sim |T_c - T|^{-\nu} \quad (21)$$

Med utgangspunkt i at ξ øker med gitteret, kan Curietemperaturen uttrykkes videre avhengig av konstanten ν fra 21;

$$T_C(L) - T_C(L = \infty) = aL^{-\frac{1}{\nu}} \quad (22)$$

Hvor a er en konstant. Videre settes $T=T_c$ som gir følgende uttrykk for $\langle M(T) \rangle$, $C_V(T)$ og $\chi(T)$, utledning kan leses i [1]:

$$\langle M(T) \rangle \sim (T - T_C)^\beta \rightarrow L^{\frac{-\beta}{\nu}} \quad (23)$$

$$C_V(T) \sim |T - T_C|^\gamma \rightarrow L^{\frac{\alpha}{\nu}} \quad (24)$$

og

$$\chi(T) \sim |T - T_C|^\alpha \rightarrow L^{\frac{\gamma}{\nu}} \quad (25)$$

2.6 Termodynamisk likevekt

Ved plotting av verdiene fra bruk av Metropolis algoritmen vil det totale antall Monte Carlo sykluser avgjøre om verdien stabiliserer seg eller ikke. Dersom det blir brukt nok Monte Carlo sykluser vil systemet nå likevekt og gi klare og tydelige verdier.

3 Metode

3.1 Grensebetingelser

Som nevnt ovenfor, i seksjon (2.1), blir det sett på et uendelig plan. I virkeligheten stemmer ikke dette. Derfor må det brukes grensebetingelser som gjør at når spinnposisjonene når grensene brukes spinnverdiene til spinnenen på andre siden av gitteret.

Starter fra en tilfeldig posisjon (x_i, y_i) i gitteret. Spinnet i denne posisjonen vil påvirke naboene i posisjonene (x_{i+1}, y_{i+1}) og (x_{i-1}, y_{i-1}) . Men dersom posisjonen til spinnet nærmer seg grensen så vil den påvirke spinnet på motsatt side, uavhengig av høyre, venstre, opp eller ned. Ved å bruke denne informasjonen så utledes det til følgende uttrykk:

$$i = (i + L + \xi) \bmod L \quad (26)$$

Her er i posisjonen til spinnet, L er antall spinn, ξ velger retningen spinnet blir sett i og $\text{mod}L$ er modulus til L . Dette uttrykket passer perfekt til metoden, fordi hvis $i = N$ så gir ligning 26 $i = 0$. Altså spinnet i posisjonen N påvirker spinnet i posisjonen 0. På denne måten blir det tatt vare på grensebetingelsen og får et uendelig gitter.

3.2 Energien i et systemet ved spinn endring

Med utgangspunkt i 2x2 gitteret fra seksjon (2.3). Dersom det utføres et tilfeldig spinn flip vil endringen i energien alltid være begrenset av resten av nabospinn. De mulige energiene et spinn kan ha før og etter et spinnflip kan ses i tabell 2.

Energi før	Energi etter	ΔE
-4J	4J	-8J
-2J	2J	-4J
0J	0J	0J
2J	-2J	4J
4J	-4J	8J

Tabell 2: Viser energiene til spinn før og etter flippet, og energiendringen.

Verdiene i tabell 2 kan brukes til å kalkulere overgangssannsynligheten (se seksjon 2.4):

$$A_{i \rightarrow s} = e^{-\beta \Delta E}$$

Overgangssannsynligheten kan kun ha fem verdier, disse regnes ut på forhånd før Monte Carlo metoden utføres. I Metropolis algoritmen så velges det et tilfeldig spinn og finner energiendringen for det nye spinnet. Så blir denne energiendringen ført videre til overgangssannsynligheten.

3.3 Metropolis

3.3.1 Formler i algoritmen

For hver gang et spinn blir flippet må den aktuelle endringen i energi ΔE utregnes. Dette er viktig for da fås den riktige verdien til overgangssannsynlighet $A_{i \rightarrow s}$. Dette gjøres ved antagelse om at det kun er et spinn som blir flippet per Monte Carlo syklus, mens resten av spinnene beholder deres verdi. Da blir energienedringen mellom en initial- og en slutttilstand følgende:

$$\Delta E = E_s - E_i = J \sum_k s_k s_s - J \sum_k s_k s_i \quad (27)$$

der det blir tatt summen over alle nærmeste naboer k . Spinnflip har bare to verdier $s_s, s_i = \pm 1$. Altså hvis $s_s = \pm 1$ så blir $s_i = \mp 1$. De andre spinnene

beholder verdien sin. Ved å ha disse resultatene i bakhodet så kan energiendringen tilnærmes til:

$$\Delta E = J \sum_k^4 s_k (s_s - s_i) \quad (28)$$

Siden $s_s - s_i$ har enten -2 eller 2 som verdi:

$$\Delta E = 2s_s J \sum_k^4 s_k \quad (29)$$

Her har det også blitt lagt inn s_s for å få riktig fortegn. Et annet interessant tema i dette prosjektet er å studere magnetisme. For å finne endringen i magnetisme ved spinn flipp så antas det igjen at det kun er et spinn som blir flippet per Monte Carlo syklus. Da fås følgende uttrykk:

$$M_s = M_i + 2s_s \quad (30)$$

der M_s og M_i er slutt- og initial magnetisme, og s_s er slutt spinn.

3.3.2 Algoritmen

Ved bruk av ligningene 29 og 30 ble følgende algoritme (hentet fra [1]) brukt:

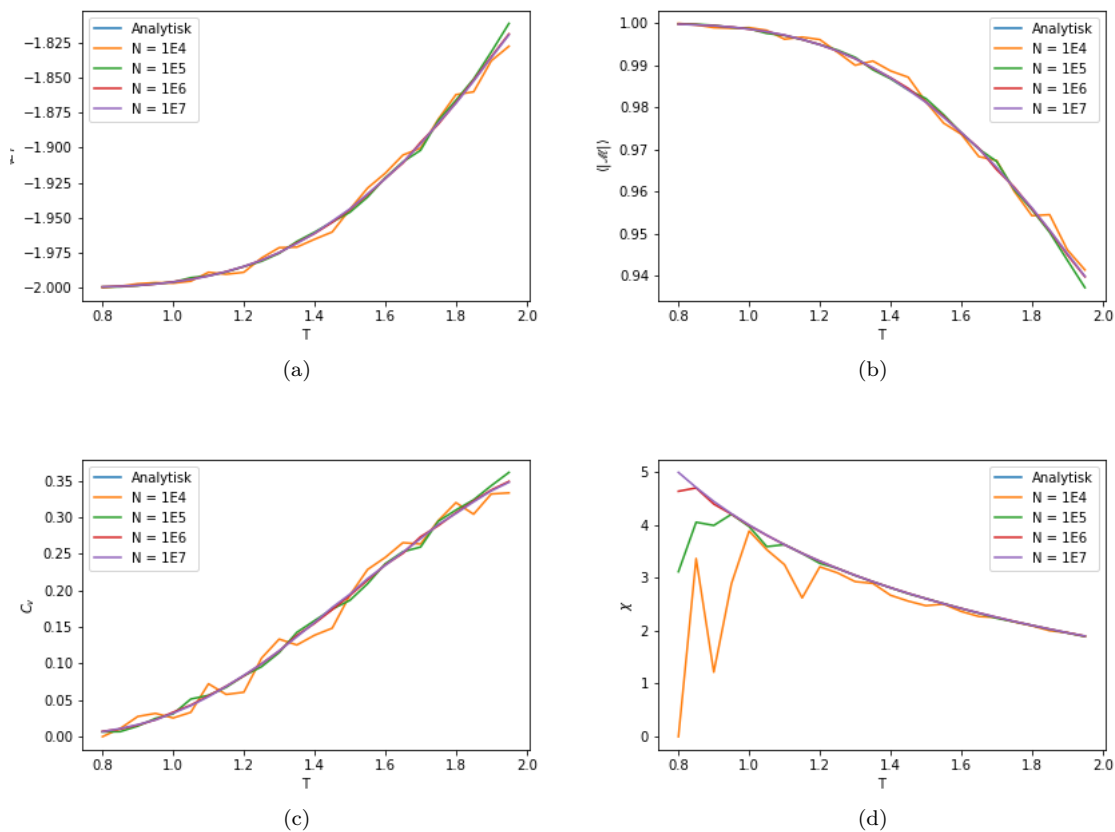
- Velg random tilfeldig spinn konfigurasjon og beregn initial energien E_i i $L \times L$ gitter
- Velg tilfeldig fra initialposisjon til sluttposisjon. Beregn E_s .
- Regn ut $\Delta E = E_s - E_i$.
- Hvis:
 - $\Delta E \leq 0$:
Beholder den nye konfigurasjonen og systemet går mot minste energien.
 - $\Delta E > 0$:
Regn ut $e^{-\beta \Delta E}$.
Sammenlign $e^{-\beta \Delta E}$ med et tilfeldig tall r .
 - * Hvis $r \leq e^{-\beta \Delta E}$:
Behold den nye konfigurasjon.
 - * Ellers:
Behold den gamle konfigurasjonen.
- Oppdater verdiene for de ulike termodynamiske verdiene.
- Repeter alle punktene ovenfor for gitte Monte Carlo sykluser.
- Beregn de ulike termodynamiske verdiene ved å dividere på total Monte Carlo sykluser (og eventuelt divider på gitterlengden for å oppnå energi per spin).

3.3.3 Monte Carlo sykluser

For å finne ut hvor mange Monte Carlo sykluser som trengs, plottes resultatene som funksjon av Monte Carlo sykluser. Der plottet jevner seg ut og får en stabil og fin tilnærmet rett linje mot resultatverdien.

4 Resultater

4.1 2x2 gitter for $T=1$

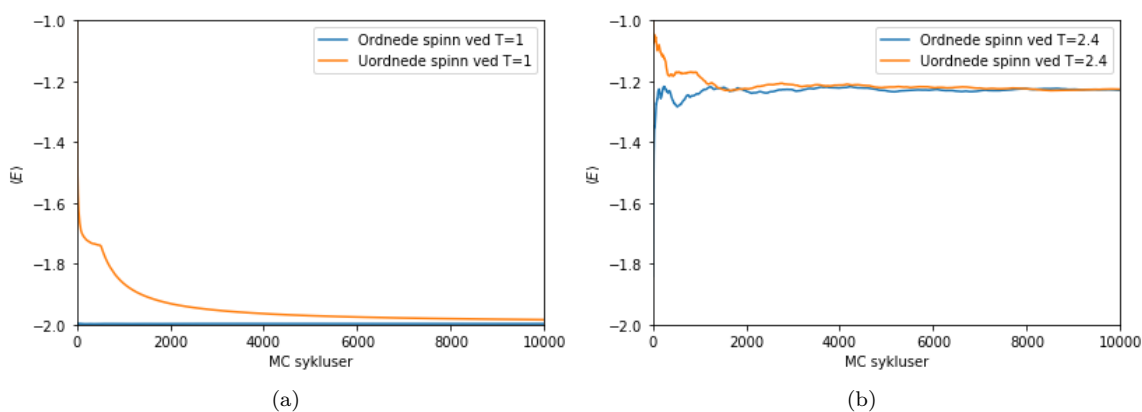


Figur 2: Plotts som funksjon av temperatur fra $T=0.8 \frac{kT}{J}$ til $T=2.0 \frac{kT}{J}$ ved forskjellige Monte Carlo sykluser N sammen med den analytiske løsningen. $\langle E \rangle$ som funksjon av temperatur i (a), $\langle |M| \rangle$ som funksjon av temperatur i (b), C_V som funksjon av temperatur i (c) og χ som funksjon av temperatur i (d)

4.2 Gitterstørrelse: 20x20

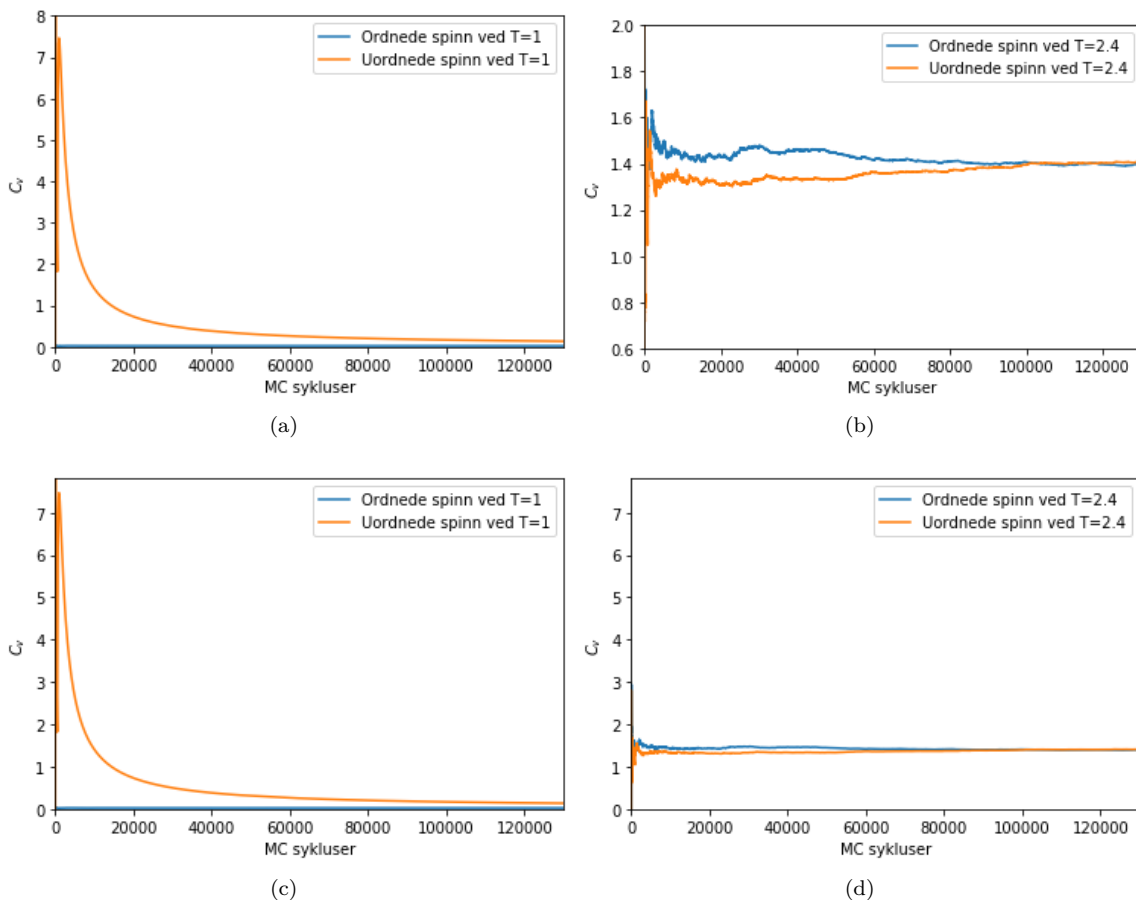
Resultatene fra bruk av algoritmene for et 20x20 gitter kan observeres i figurene under, hvor de beregnede verdiene for $\langle E \rangle$ kan observeres i figur 3, $\langle |M| \rangle$ kan observeres i figur 5, C_V kan observeres i figur 4 og χ kan observeres i figur 6. Metodene er kjørt for temperaturer lik 1 og 2.4. Enhetene i plottene er oppgitt i $\frac{kT}{J}$.

4.2.1 Forventningsenergi



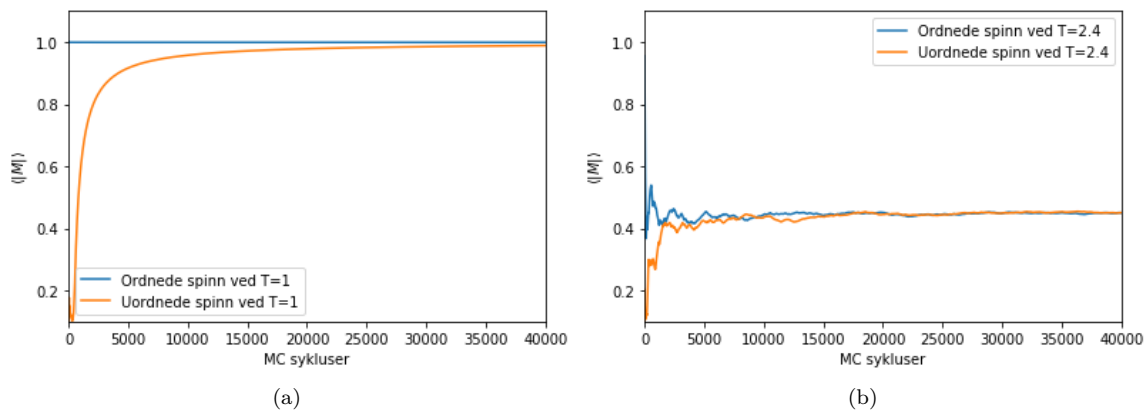
Figur 3: Plott for $\langle E \rangle$ for både ordnede og uordnede spinntilstander som funksjon over Monte Carlo sykluser ved temperaturer $\frac{T}{J}$ lik 1 i delfigur (a) og 2.4 i delfigur (b). Begge grafene stabiliseres omtrent ved 8000 Monte Carlo sykluser. For $T=1$ konvergerer grafen mot -2.0, mens for $T=2.4$ konvergerer grafen mot omtrent -1.2.

4.2.2 Varmekapasitet



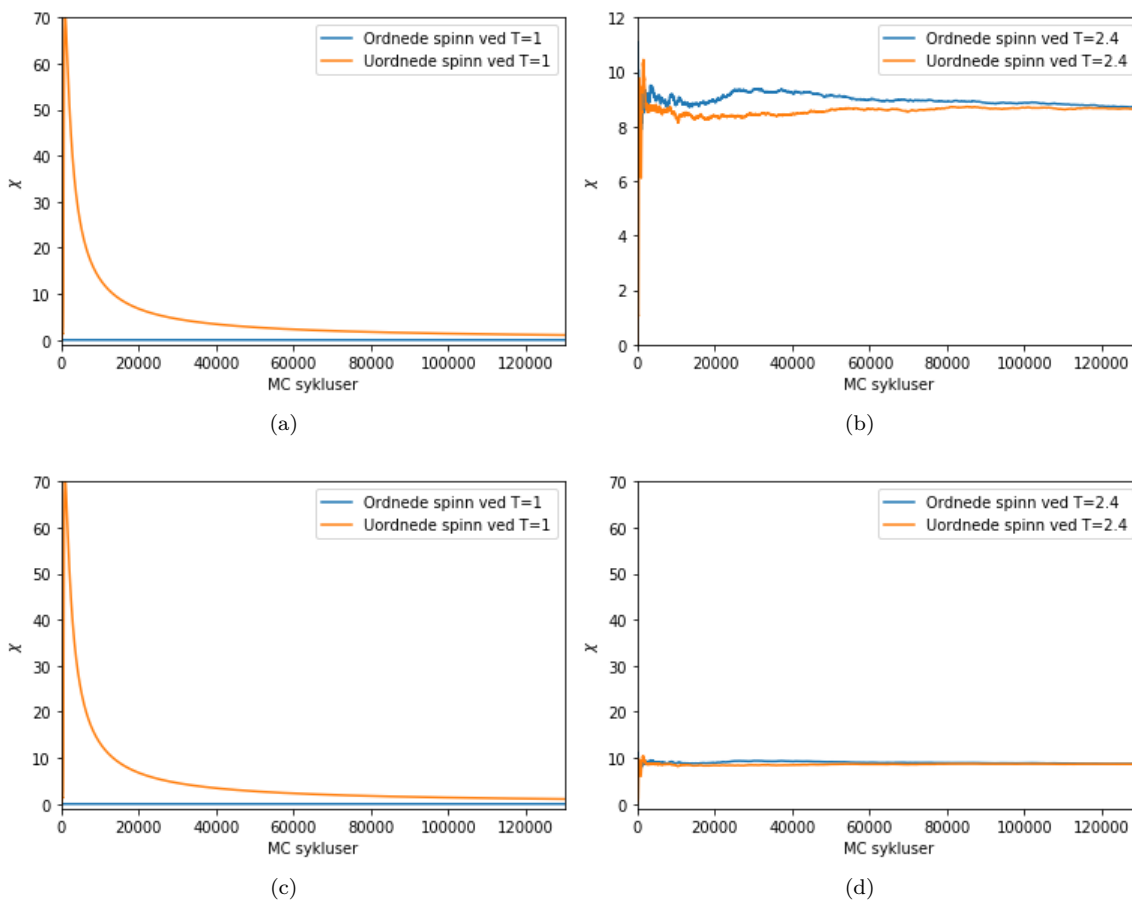
Figur 4: Plott for C_V for både ordnede og uordnede spinntilstander som funksjon over Monte Carlo sykluser ved temperaturer $\frac{Tk}{J}$ lik 1 i delfigur (a) og (c) og lik 2.4 i delfigur (b) og (d). Delfigurene (a) og (c) og delfigurene (b) og (d) viser samme verdier, hvor (c) og (d) er gitt ved lik skalering for en bedre oversikt over grafene i forhold til hverandre. Grafene for $T=1$ stabiliseres omtrent ved 120000 Monte Carlo sykluser, mens for $T=2.4$ stabiliseres grafene ved omtrent 100000 sykluser. For $T=1$ konvergerer C_V mot omtrent 0 (Ligger såvidt over 0), mens for $T=2.4$ konvergerer C_V mot omtrent 1.4.

4.2.3 Forventningsmagnetisering



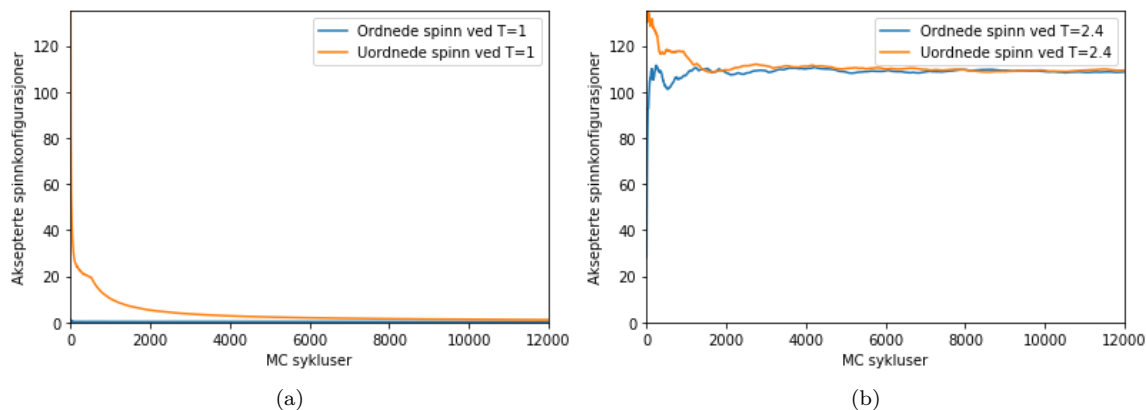
Figur 5: Plott for $\langle M \rangle$ for både ordnede og uordnede spinntilstander som funksjon over Monte Carlo sykluser ved temperaturer $\frac{T}{J}$ lik 1 i delfigur (a) og 2.4 i delfigur (b). Begge grafene stabiliseres omtrent ved 22000 Monte Carlo sykluser. For $T=1$ konvergerer grafen mot 1.0, mens for $T=2.4$ konvergerer grafen mot omtrent 0.45.

4.2.4 Susceptibilitet



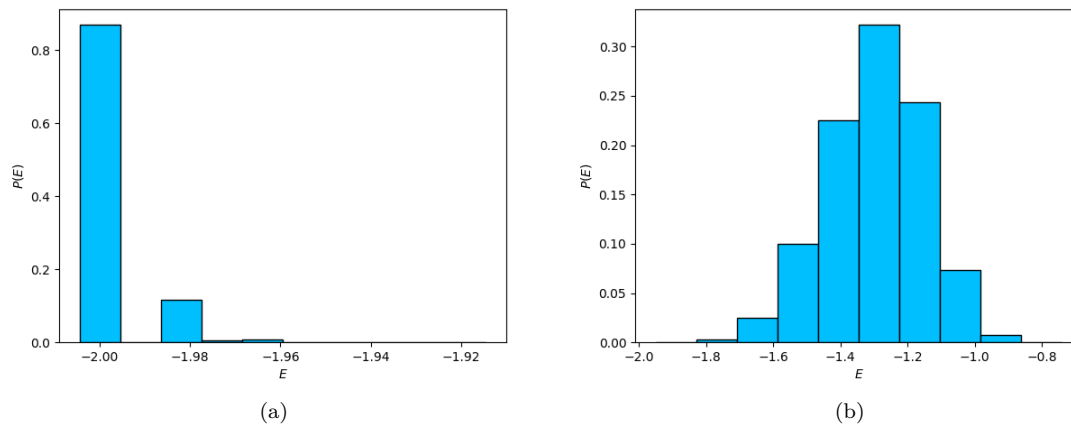
Figur 6: Plott for χ for både ordnede og uordnede spinntilstander som funksjon over Monte Carlo sykluser ved temperaturer $\frac{T_k}{J}$ lik 1 i delfigur (a) og (c) og lik 2.4 i delfigur (b) og (d). Delfigurene (a) og (c) og delfigurene (b) og (d) viser samme verdier, hvor (c) og (d) er gitt ved lik skalering for en bedre oversikt over grafene i forhold til hverandre. Grafene for $T=1$ stabiliseres omtrent ved 105000 Monte Carlo sykluser, mens for $T=2.4$ stabiliseres grafene ved omtrent 120000 sykluser. For $T=1$ konvergerer χ mot omtrent 0, mens for $T=2.4$ konvergerer χ mot omtrent 9.0.

4.2.5 Aksepterte spinnkonfigurasjoner



Figur 7: Plott for aksepterte spinntilstander, for både ordnede og uordnede spinntilstander som funksjon over Monte Carlo sykluser ved temperaturer $\frac{T_k}{J}$ lik 1 i delfigur (a) og 2.4 i delfigur (b). Graf (a) hvor $T=1$ stabiliseres først når antall Monte Carlo sykluser såvidt ligger over 6000. Graf (b) hvor $T=2.4$ ligger veldig nærme likevekt, men stabiliseres helt når Monte Carlo sykluser ligger mellom 8000 og 10000. For $T=1$ i delfigur (a) konvergerer grafen mot 0 aksepterte spinnkonfigurasjoner, mens for $T=2.4$ i delfigur (b) konvergerer grafen mot omtrent 110 aksepterte spinn.

4.3 sannsynlighetsfordeling for 20x20 gitter

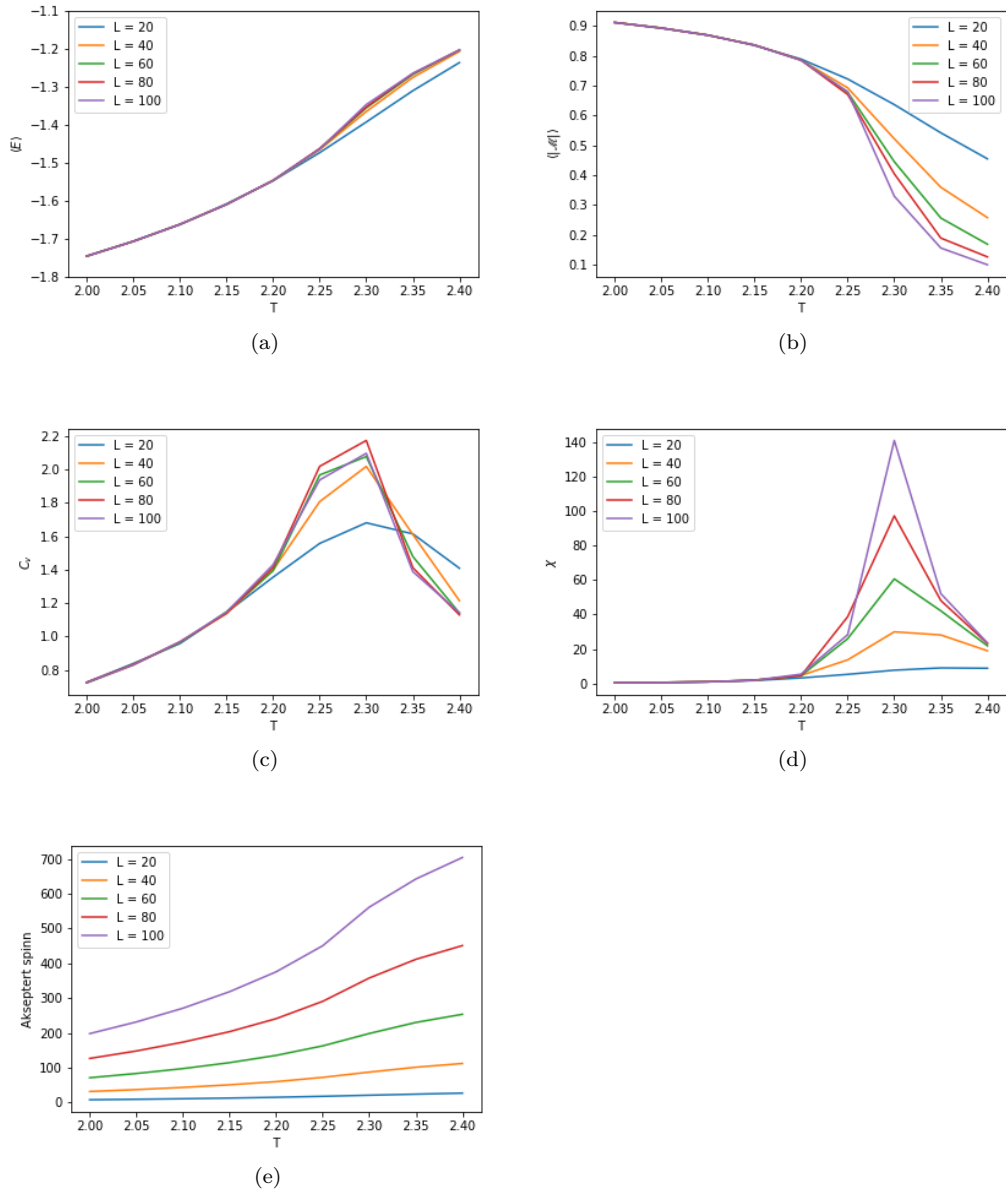


Figur 8: Viser sannsynlighetsfordelingene for et 20x20 gitter ved temperaturene (a): $T = 1.0$ og (b): $T = 2.4$. Figurene viser hvilken energi det er mest sannsynlighet å finne en spinnstilstand i etter at å ha oppnådd stabiliseringstilstand

4.4 Faseoverganger for ulike gitter størrelser

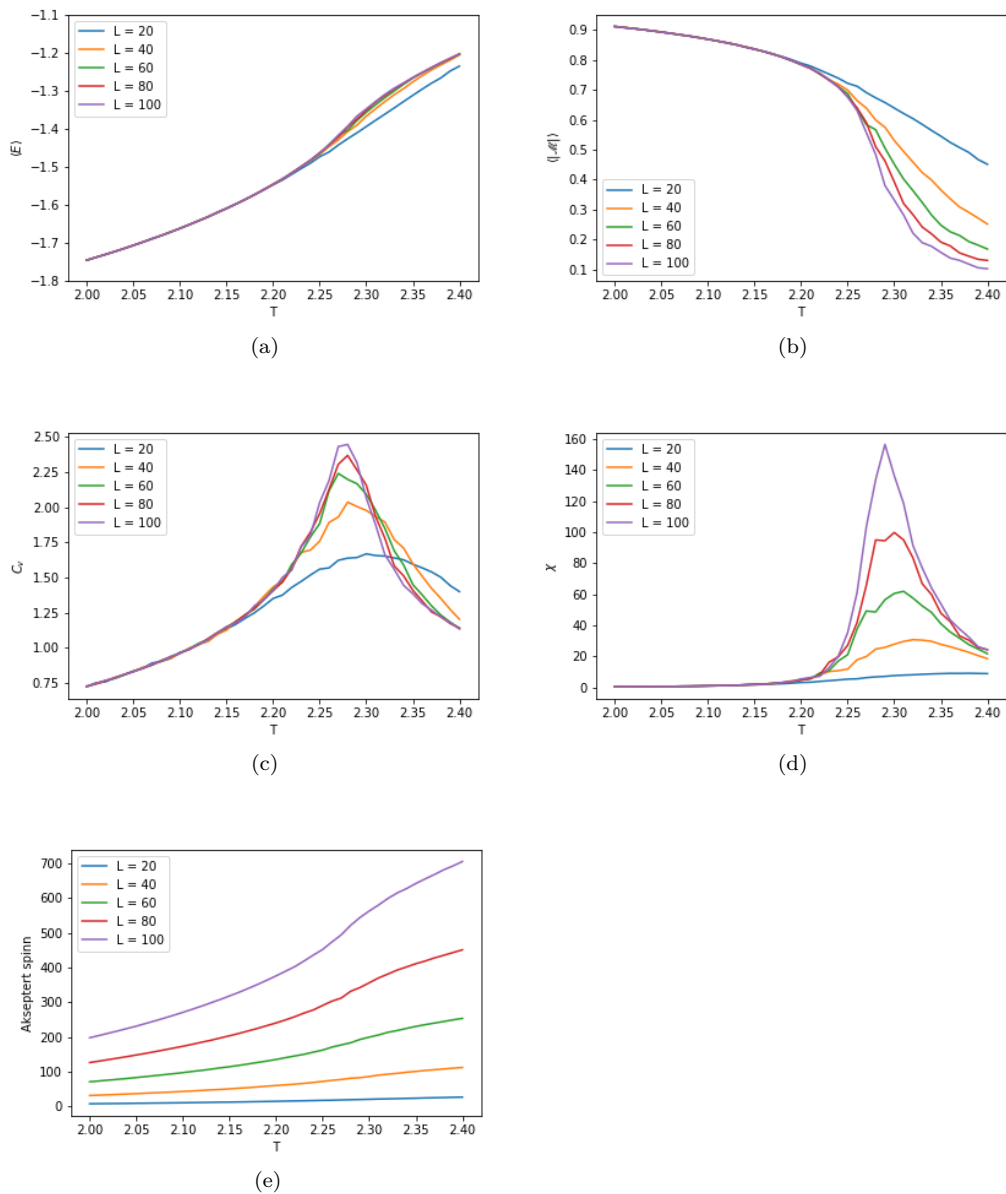
Det har blitt brukt $L = (20, 40, 60, 80, 100)$ verdier for gitter størrelsen. Programmet ble først kjørt med temperatur steglengde $\Delta T = 0.05$, men dette viste dårlig presisjon og var vanskelig å analysere faseovergangen. Deretter ble programmet kjørt med $\Delta T = 0.01$ i intervallet $kT/J = (2.0, 2.4)$. I figur 9 og figur 10 er plottene for temperatur steglengdene.

4.4.1 Temperatur variasjoner, $\Delta T = 0.05$



Figur 9: Viser (a) forventningsenergien, (b) forventningsverdien til absloutt magnetiseringen, (c) varmekapasitet, (d) susceptibilitet og (e) antall aksepterte spinn som funksjon av temperatur til gitteret. Disse plottene ble plottet ved gitte gitterstørrelser og temperatur steglende $\Delta T = 0.05$.

4.4.2 Temperatur variasjoner, $\Delta T = 0.01$



Figur 10: Viser (a) forventningsenergien, (b) forventningsverdien til absolutt magnetiseringen, (c) varmekapasitet, (d) susceptibilitet og (e) antall aksepterte spinn som funksjon av temperatur til gitteret. Disse plottene ble plottet ved gitte gitterstørrelser og temperatur steglende $\Delta T = 0.01$.

4.4.3 Kritiske temperaturer

L	$T_c(L)$ for $\Delta T = 0.05$	$T_c(L)$ for $\Delta T = 0.01$
20	2.40	2.38
40	2.30	2.32
60	2.30	2.31
80	2.30	2.30
100	2.30	2.29

Tabell 3: Viser kritiske temperaturer for faseovergangen som ble oppnådd ved temperatur steglengde 0.05 og 0.01 som funksjon av gitterstørrelse L.

4.4.4 CPU-tiden for kjøring av programmet

L	CPU-tiden for $\Delta T = 0.05$	CPU-tiden for $\Delta T = 0.01$
20	1.7 min	8.43 min
40	6.40 min	31.65 min
60	14.50 min	1.17 timer
80	28,04 min	2.33 timer
100	52.90 min	3.60 timer

Tabell 4: Viser CPU-tiden det tok for å kjøre programmet ved temperatur steglengde 0.05, 0.01 og gitterlegnden L.

5 Diskusjon

5.1 2x2 gitter for $T=1 \frac{kT}{J}$

For 2x2 gitteret ble forskjellige verdier plottet ved $T=1 \frac{kT}{J}$. Det er lett å se i figur 2, at jo flere Monte Carlo sykluser som blir brukt, jo bedre overlapp blir det mellom de numeriske løsningene og den analytiske løsningen. Altså vil flere Monte Carlo sykluser gå på bekostning av mer tidskrevende beregninger, men vil føre til enda nøyaktigere løsninger.

5.2 Utregninger ved gitterstørrelse 20x20

For gitterstørrelse 20x20 er det utregnet flere forskjellige verdier for både ordnede og uordnede spinnstilstander for temperaturene $T=1 \frac{T_k}{J}$ og $T=2.4 \frac{T_k}{J}$.

For $T=1 \frac{T_k}{J}$ viser figur 3 til figur 6 at ved ordnede tilstander av spinnene er verdiene stabile fra start av. Dette er fordi stabil likevekt vil oppnås når systemet oppnår sin laveste tilstand. Siden forskjellige spinnorienteringer vil øke energien, prøver systemet å rette alle spinnene i samme retning. Dette kan ses i figur 7 der det er lett å se at ved $T=1 \frac{kT}{J}$ trenger ikke noen av spinnene og flippes under kjøring av metoden ved en ordnet tilstand i utgangspunktet.

Ser også at susceptibiliteten nærmer seg 0 ved $T=1 \frac{T_k}{J}$. Dette gir mening da susceptibilitet sier noe om hvor lett et stoff lar seg magnetisere ved et påført elektrisk felt, og om alle spinntilstandene er ordnet vil det ikke være noe magnetisering til stedet[5]

For $T=2.4 \frac{T_k}{J}$ ligger $\langle E \rangle$ litt høyere enn ved $T=1$ som er naturlig atomisk sett, da høyere temperatur vil gjøre elektronene mer energirike. Dette passer også med testen vår i Metropolis algoritmen hvor en større verdi for T vil gi større sannsynlighet for at et spinn flipper over. For ordnede spinn starter også verdien for $\langle E \rangle$ relativt nære sluttverdien for $\langle E \rangle$ som passer med at ordnede spinnutgangspunkt trenger færre spinn flipps.

Disse trendene går igjen i figur 5, 4 og 6 også, bortsett fra at $\langle |M| \rangle$ minker med økende temperatur. Dette er fordi en stabil tilstand for magnetiseringen vil være en tilstand der halvparten av spinnene peker opp samtidig som halvparten av spinnene peker ned.

I tillegg vil antall Monte Carlo sykluser tilsvare hvor lang tid det tar å finne verdiene. Da flere Monte Carlo sykluser før likevekt oppnås, tilsvarer mer tid på å kjøre programmet. Utifra figur 3 til 6 gir det et inntrykk av at det ofte tar omtrent like lang tid å finne verdier for begge temperatur. Derimot ser det ut som ordnede spinnutgangspunkter har en tendens til å trenge litt mindre tid på å slå seg til ro enn for uordnede tilstander.

5.3 sannsynlighetsfordeling for 20x20 gitter

Sannsynlighetsfordelingene er listet opp i figurene 8. Her kan det observeres at sannsynlighetsfordelingene varierer med temperaturen. For $kT/J = 1.0$ er den mest fylte tilstanden ved $E \approx -2.00$ og noen andre mindre tilstander ved $E \approx -1.98$. For $kT/J = 2.4$ er det mer spredt i intervallet $(-0.5, -1.8)$. Den meste fylte tilstanden er ved $E \approx -1.25$. Variansen for energien blir dermed $\sigma_{kT/J=1}^2 = 0.023321$ og $\sigma_{kT/J=2.4}^2 = 8.1519518$.

5.4 Faseovergang for ulike gitterstørrelser

I dette prosjektet ble det analysert faseovergang for fem forskjellige gitterstørrelser. I Ising modellen er det tatt utgangspunkt i en ferromagnetisk struktur, der den magnetiske selvpolariseringen vil være ulik 0 under den kritiske temperaturen. Når temperaturen er over T_c vil gjennomsnittsmagnetiseringen i modellen være 0, som betyr at det ikke vil være spinn som selvpolariserer og strukturen blir dermed paramagnetisk. Dette kan observeres i figurene 9d og 10d. Her er det enkelt å se at etter å ha passert toppunktetene på plottene så minker susceptibiliteten, det vil si at det skjer en faseovergang fra en ferromagnetisk- til paramagnetisk struktur. Altså gitteret mister evnen til å magnetisere seg selv etter dette punktet. Dette kan også observeres i plottene 9b og 10b der magnetiseringen minsker og konvergerer mot null som funksjon av temperatur. Denne konvergensens avhenger av gitterstørrelsen. Jo større gitterstørrelse jo forttere

kovergerer den mot null. Det samme gjelder også for varmekapasiteten i figur 9c og 10c som minker etter å ha passert toppunktet, men forventningsenergien øker.

De estimerte kritiske temperaturene for disse gitterstørrelsene er listet i tabell (3). Her observeres det at det er upresise resultater for $\Delta T = 0.05$ ettersom det ikke er mulig å skille mellom størrelsene 40, 60, 80 og 100. Men for $\Delta T = 0.01$ fås gode resultater. $T_C(L)$ -verdiene konvergerer mer og mer mot den teoretiske verdien:

$$\frac{kT_c}{J} = \frac{2}{\ln 1 + \sqrt{2}} \approx 2.269 \quad (31)$$

Den numeriske Curie temperaturen kan dermed approksimeres til følgende (Utleddning kan ses i appendiks):

$$T_c(L \rightarrow \infty) = 2.250$$

med en relativ feil på:

$$\epsilon = \frac{2.269 - 2.250}{2.269} = 8.373 \cdot 10^{-3}, \quad (32)$$

6 Konklusjon

Det er dermed vist hvordan det er mulig å simulere faseoverganger ved bruk av Ising modellen. Det er vist hvordan nabospinn påvirker hverandre i et gitter, tillegg til hvordan $\langle E \rangle$, $\langle M \rangle$, C_V og χ påvirkes av både temperatur, gitterstørrelser og beregningstid. Det ble også studert hvordan et system endrer seg når temperaturen nærmer seg Curie temperaturen, og hvordan evnen til å selvpolarisere minker med temperaturen som til slutt fører til en faseovergang fra ferromagnetisme til paramagnetisme.

Det ble vist hvordan 10^6 Monte Carlo sykluser var mer enn nok, for beregninger da systemet oppnådde likevekt ved ca. $10^4 - 10^5$ sykluser for et 20x20 gitter. Det ble også vist hvordan det er viktig å velge riktig steglengde for temperaturen da det viste seg at $\Delta T = 0.05$ viste en relativt dårlig presisjon.

7 Appendiks

7.1 Utledning for analytiske verdier for 2x2 gitter

Med i utregningene til de analytiske verdiene er både partisjonsfunksjonen Z og sannsynlighetsfordelingen $P_i(\beta)$ brukt.

$$Z = \sum_{i=1}^{16} e^{-\beta E_i} = 2e^{8\beta J} + 2e^{-8\beta J} + 12 = 4\cosh(8\beta J) + 12 \quad (33)$$

Hvor den hyperbolske cosinus funksjonen er brukt til å forenkle uttrykket for Z . Videre brukes Z til å uttrykke $P(\beta)$

$$P(\beta) = \frac{e^{-\beta E_i}}{Z} = \frac{e^{-\beta E_i}}{4\cosh(8\beta J) + 12} \quad (34)$$

En oversikt over verdier for magnetisering, energi og degenerasjon står i tabell 1.

7.1.1 Forventningsenergi og varmekapasitet

For å regne ut varmekapasiteten må forventningsenergiene for E og E^2 først utregnes. Det gjøres på følgende måte:

$$\langle E \rangle = \sum_i E_i P(\beta) = \frac{1}{Z} \sum_i^{16} E_i e^{-\beta E_i} \quad (35)$$

$$= \frac{1}{Z} (-8J \cdot 2e^{8\beta J} + 8J \cdot 2e^{-8\beta J}) \quad (36)$$

$$= \frac{-16J(e^{8\beta J} - e^{-8\beta J})}{4(\cosh(8\beta J) + 3)} \quad (37)$$

Hvor den hyperbolsk sinusfunksjonen brukes på eksponential leddene.

$$\langle E \rangle = \frac{-8J \sinh(8\beta J)}{\cosh(8\beta J) + 3} \quad (38)$$

Så brukes samme formel men på $\langle E^2 \rangle$:

$$\langle E^2 \rangle = \sum_i E_i^2 P(\beta) = \frac{1}{Z} \sum_i^{16} E_i^2 e^{-\beta E_i} \quad (39)$$

$$= \frac{1}{Z} (64J^2 \cdot 2e^{8\beta J} + 64J^2 \cdot 2e^{-8\beta J}) \quad (40)$$

$$= \frac{128J^2(e^{8\beta J} + e^{-8\beta J})}{4(\cosh(8\beta J) + 3)} \quad (41)$$

Hvor den hyperbolsk cosinusfunksjonen brukes på eksponential leddene.

$$\langle E^2 \rangle = \frac{64J^2 \cosh(8\beta J)}{\cosh(8\beta J) + 3} \quad (42)$$

Så er det klart for å regne ut varmekapasiteten til 2x2 gitteret, hvor følgende formel blir brukt:

$$C_V = \frac{\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2}{kT^2} \quad (43)$$

Denne gir varmekapasiteten:

$$C_V = \frac{1}{kT^2} \left(\frac{64J^2 \cosh(8\beta J)}{\cosh(8\beta J) + 3} - \left(\frac{-8J \sinh(8\beta J)}{\cosh(8\beta J) + 3} \right)^2 \right) \quad (44)$$

7.2 Forventningsmagnetisering og susceptibilitet

For å regne ut susceptibiliteten må forventningsmagnetiseringene for M og M^2 først utregnes. Det gjøres på følgende måte:

$$\langle M \rangle = \sum_i M_i P(\beta) = \frac{1}{Z} \sum_i^{16} M_i e^{-\beta E_i} \quad (45)$$

$$= \frac{1}{Z} (4 \cdot e^{8\beta J} + 2 \cdot 4e^0 - 4 \cdot e^{8\beta J} - 2 \cdot 4e^0) \quad (46)$$

Som gir

$$\langle M \rangle = 0 \quad (47)$$

Så gjøres det samme med $\langle M^2 \rangle$:

$$\langle M^2 \rangle = \sum_i M_i^2 P(\beta) = \frac{1}{Z} \sum_i^{16} M_i^2 e^{-\beta E_i} \quad (48)$$

$$= \frac{1}{Z} (16 \cdot e^{8\beta J} + 4 \cdot 4e^0 + 4 \cdot 4e^0 + 16 \cdot e^{8\beta J}) \quad (49)$$

$$= \frac{32(e^{8\beta J} + 1)}{4 \cosh 8\beta J + 12} \quad (50)$$

Som gir

$$\langle M^2 \rangle = \frac{8e^{8\beta J} + 8}{\cosh 8\beta J + 3} \quad (51)$$

Itillegg regnes forventningsmagnetiseringen til $|M|$ ut. (Denne brukes ikke til å beregne susceptibiliteten.)

$$\langle |M| \rangle = \sum_i |M_i| P(\beta) = \frac{1}{Z} \sum_i^{16} |M_i| e^{-\beta E_i} \quad (52)$$

$$= \frac{1}{Z}(4 \cdot e^{8\beta J} + 2 \cdot 4e^0 + 4 \cdot e^{8\beta J} + 2 \cdot 4e^0) \quad (53)$$

$$\langle |M| \rangle = \frac{8e^{8\beta J} + 16}{4\cosh(8\beta J) + 12} \quad (54)$$

Som gir

$$\langle |M| \rangle = \frac{2e^{8\beta J} + 4}{\cosh(8\beta J) + 3} \quad (55)$$

Alt er klart til å beregne suceptibiliteten og følgende formel brukes:

$$\chi = \frac{\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2}{kT} \quad (56)$$

Siden $\langle M \rangle = 0$ blir χ følgende:

$$\chi = \frac{1}{kT} \frac{8e^{8\beta J} + 8}{\cosh(8\beta J) + 3} \quad (57)$$

7.3 Approksimasjon av kritisk temperatur

Det er mulig å estimere den numeriske Curie temperaturen. Ved bruk av ligning 22:

$$T_C(L) - T_C(L = \infty) = aL^{-\frac{1}{v}}$$

Bruker denne ligningen til å finne et uttrykk for a:

$$a = \frac{T_c(L_1) - T_c(L_2)}{L_1^{-1/v} - L_2^{-1/v}}$$

Ved å bruke $L_1 = 100$ og $L_2 = 80$ fås det:

$$a = 4$$

Setter dette inn i ligning 22, og velger $L = 100$, $v = 1$:

$$T_c(L \rightarrow \infty) = 2.29 - 4 \frac{1}{100} = 2.250$$

Ved å sammenligne med den teoretiske verdien 31 fås følgende relativ feil:

$$\epsilon = \frac{2.269 - 2.250}{2.269} = 8.373 \cdot 10^{-3}, \quad (58)$$

8 Bibliografi

[1] Morten Hjorth-Jensen, august 2015, Computational Physics Lecture Notes, 12 Random walks and the Metropolis algorithm og 13 Monte Carlo methods in statistical physics

(<https://github.com/CompPhysics/ComputationalPhysics/blob/master/doc/Lectures/lectures2015.pdf>)

[2] Morten Hjorth-Jensen, November 2019 Project 4,

(<https://github.com/CompPhysics/ComputationalPhysics/blob/master/doc/Projects/2019/Project4/pdf/Project4.pdf>).

[3] Wikipedia, Ising Model, sist endret November 2019,

(https://en.wikipedia.org/wiki/Ising_model)

[4] Wikipedia, Ising Model, sist endret November 2019,

(https://en.wikipedia.org/wiki/Phase_transition)

[5] Richard J. D. Tilley, 2013, Understanding Solids-The Science of Materials

(https://en.wikipedia.org/wiki/Phase_transition)

Link til githubmappen: <https://github.com/philipkarim/Philip-and-Rohullah-ComFys>