

Metroplis Ising Modell mit Kopplung der nächsten Nachbarn

Michael Vogelpohl

Zusammenfassung

In dieser Simulation wird das Verhalten von Magnetismus in einem zweidimensionalen Atomgitter untersucht. Die verwendete Methode ist der Metropolisalgorithmus, wobei nur die Wechselwirkung zwischen benachbarten Gitterpunkten berücksichtigt wird. Man beobachtet einen Phasenübergang bei einer bestimmten Temperatur.

Inhaltsverzeichnis

0.1	Ising-Modell	3
0.1.1	Analytische Lösung für 2D	4
0.2	Metropolis Monte Carlo Simulation	4
0.3	Ergebnisse	5

0.1 Ising-Modell

Das Ising-Modell beschreibt Magnetismus in Festkörpern. Trotz seiner Einfachheit vermag es Phasenübergänge zu beschreiben.

Das Modell nimmt an, dass die Atome in den Festkörpern auf Gittern sitzen und dabei nur zwei Zustände annehmen können: $+1$ oder -1 .

Die Energie H des System ist dann gegeben durch:

$$H = - \sum_{ij} J_{ij} s_i s_j - \mu B \cdot \sum_{i=1}^N s_i \quad (1)$$

Folgende Bezeichnungen wurden benutzt:

s_i : Spin des Atoms i , wobei $s_i \in \{-1, 1\}$

J_{ij} : Kopplungskonstante zwischen den Spins der Atome i und j B : Magnetfeld

Im Folgenden wird $B = 0$ gesetzt. Weiterhin wird angenommen, dass J konstant für die nächsten Nachbarn des Atoms ist: $J_{ij} = J$ für j ein nächster Nachbar zu i , sonst $J = 0$.

Man erhält:

$$H = -J \cdot \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j \quad (2)$$

$\langle ij \rangle$: Diese Notation beschreibt Summation nur über nächste Nachbarn von Atom i .

Eine spezielle Konfiguration von Spins im Gitter hat nach der Boltzmannverteilung die Wahrscheinlichkeit

$$P_i = \frac{e^{-\beta H_i}}{Z}, \quad (3)$$

wobei $Z = \sum_i e^{-\beta H_i}$ und $\beta = \frac{1}{k_B T}$.

Wichtige Observablen im Modell sind:

- Ferro- und Antiferro-Magnetisierungen:

$$M_{Ferro} = \frac{1}{N} \sum_{ij} S_{ij} \quad (4)$$

$$M_{AntiFerro} = \frac{1}{N} \sum_{ij} (-1)^{i+j} S_{ij} \quad (5)$$

- Suszeptibilität

$$\chi = \beta (\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2) \quad (6)$$

- Spezifische Wärme

$$C_v = \frac{1}{T^2} (\langle H^2 \rangle - \langle H \rangle^2) \quad (7)$$

Dabei wurde folgende Notation für den Erwartungswert einer Observablen benutzt:

$$\langle O \rangle = \frac{1}{N_{iter}} \sum_{i=1}^{N_{iter}} O_i \quad (8)$$

Ausserdem bezeichnet S_{ij} den Spin an der Position (i,j) in einem zweidimensionalen Gitter.

Es werden periodische Randbedingungen verwendet. Für ein quadratisches Gitter der Grösse $n \times n$ gilt dann:

$$S_{n+1,j} = S_{1,j} \quad (9)$$

$$S_{i,n+1} = S_{i,1} \quad (10)$$

$$S_{0,j} = S_{n,j} \quad (11)$$

$$S_{i,0} = S_{i,n} \quad (12)$$

0.1.1 Analytische Lösung für 2D

Die analytische Lösung für den zweidimensionalen Fall wurde von Onsager 1944 gefunden.

Die Magnetisierung beträgt:

$$M = (1 - (\sinh(\log(1 + \sqrt{2}) \frac{T_c}{T}))^{-4})^{\frac{1}{8}}, \quad (13)$$

wobei

$$T_c = \frac{2J}{k_B \log(1 + \sqrt{2})} = 2.269 \frac{J}{k_B} \quad (14)$$

Bei dieser kritischen Temperatur erfolgt der Phasenübergang.

Für die inverse Temperatur gilt dann:

$$\beta = \frac{0.441}{J} \quad (15)$$

0.2 Metropolis Monte Carlo Simulation

Monte Carlo Simulationen bestehen aus sogenannten Zufallsexperimenten, dh. sie verwenden wahrscheinlichkeitstheoretische Erkenntnisse, um Probleme zu lösen. Einsatzgebiete sind solche Probleme, die analytisch nicht oder nur schwer zu lösen sind.

Der Metropolisalgorithmus ist eine MC-Simulation, welche eine Folge von Zuständen entsprechend der Boltzmannverteilung erzeugt. Die Metropolismethode beschreibt also Gleichgewichtszustände. Daher muss das Prinzip der "detailed balance" eingehalten werden. Dieses Prinzip sorgt für das Erreichen des thermodynamischen Gleichgewichts. Detailed Balance:

$$\frac{P(b)}{P(a)} = \frac{A(a,b)}{A(b,a)} \quad (16)$$

$P(a)$ bezeichnet die Wahrscheinlichkeit des Zustands a. $A(a,b)$ ist die Wahrscheinlichkeit, b zu akzeptieren gegeben Zustand a. Damit lässt sich A bestimmen. Mit $P(x) = \exp(-\beta H_x)$:

$$A(a,b) = \begin{cases} \exp(-\beta(H_b - H_a)) & \text{wenn } H_b - H_a \geq 0 \\ 1 & \text{sonst} \end{cases} \quad (17)$$

Der Algorithmus funktioniert dann wie folgt:

1. Wähle einen zufälligen Gitterpunkt. Dabei haben alle Gitterpunkte die gleiche Wahrscheinlichkeit gewählt zu werden.
2. Schlage einen Spinflip an diesem Punkt vor. Berechne die Energiedifferenz $\Delta E = H(neu) - H(alt)$. Falls $\Delta E < 0$, akzeptiere den Spinflip immer. Andernfalls akzeptiere mit der Wahrscheinlichkeit $\exp(-\beta\Delta E)$.
3. Fahre mit Schritt 1 fort.

Da nur nächste Nachbarn in die Energieberechnung einfließen, ist der Ausdruck für die Energiedifferenz besonders einfach:

$$\begin{aligned}\Delta E &= H(neu) - H(alt) \\ &= 2J \cdot S_{i,j} (S_{i+1,j} + S_{i-1,j} + S_{i,j+1} + S_{i,j-1}).\end{aligned}$$

Messungen an der Simulation werden nur alle N Schritte durchgeführt (N=Anzahl Spins), sodass jeder Spin in einer Messung die gleiche Wahrscheinlichkeit hat, ausgewählt zu werden.

0.3 Ergebnisse

In meinen Berechnungen wurden die Fälle $J = 1$ und $J = -1$ untersucht. Die oben behandelten thermodynamischen Größen Magnetisierung, magnetische Suszeptibilität und spezifische Wärme wurden gegen die inverse Temperatur β aufgetragen. Die Gittergröße beträgt 20×20 . Die Simulation für $J=1$ wurde mit 100000 Iterationen durchgeführt, für $J=-1$ mit 20000. Die ersten 5000 Iterationen werden fallengelassen, um sicherzustellen bei den Messungen Gleichgewichtskonfigurationen zu erhalten. Die Schrittweite beträgt $\Delta\beta = 0.05$.

Einige interessante Spin-Konfigurationen bei verschiedenen Temperaturen werden in den Abbildungen (4),(8) für $J=1$ und $J=-1$ dargestellt. Die Größe des Grids ist wiederum 20×20 .

Für $J=1$ ist der Phasenübergang bei der kritischen Temperatur $\beta_c = 0.44$ deutlich erkennbar: Für $\beta < \beta_c$ ist die Magnetisierung gering, für $\beta > \beta_c$ nahe 1. Ebenfalls zu sehen ist der Phasenübergang bei den Messgrößen Suszeptibilität und spezifische Wärme.

Für $J=-1$ ist zu beachten, dass die Anzahl der Iterationen geringer ist, da die Berechnung der Antiferromagnetisierung mehr Zeit braucht.

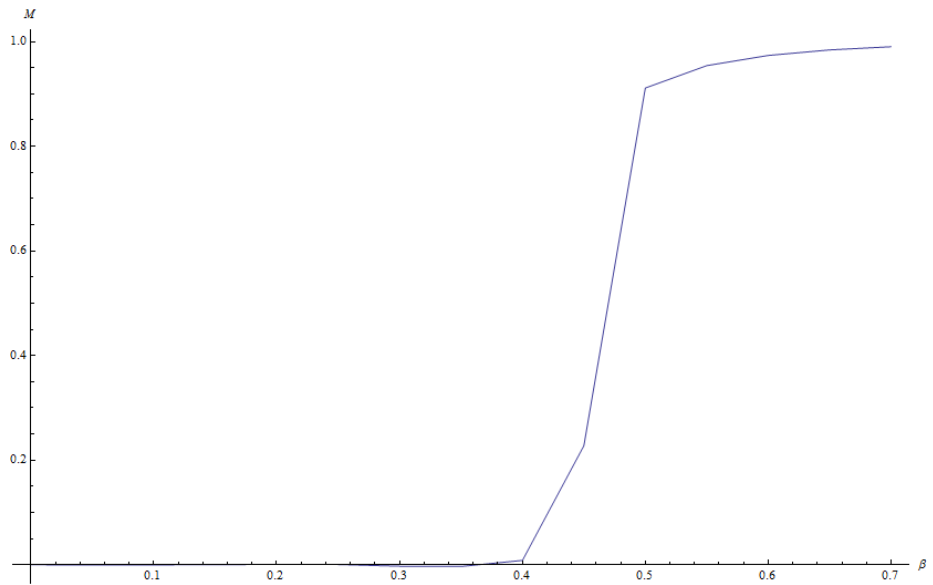


Abbildung 1: Magnetisierung, $J=1$

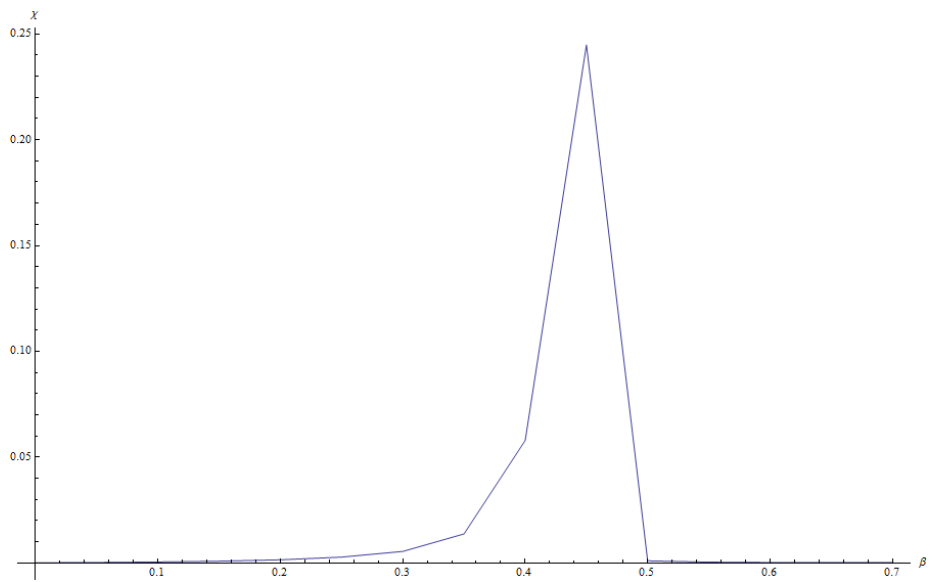


Abbildung 2: Suszeptibilität, $J=1$

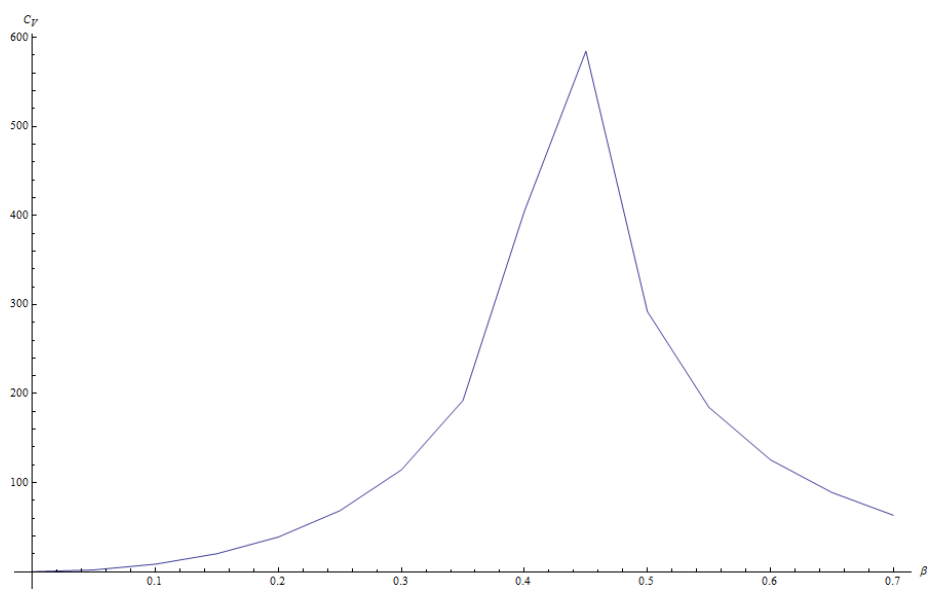


Abbildung 3: Spezifische Wärme, $J=1$

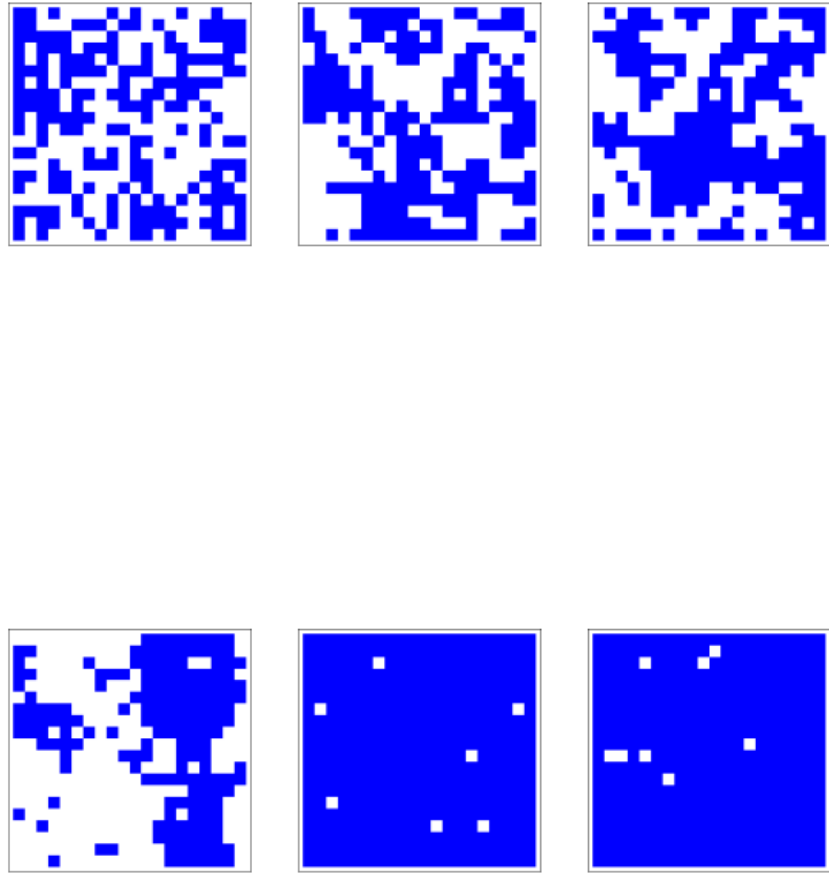


Abbildung 4: Verschiedene Spinkonfigurationen von $\beta = 0.1$ bis $\beta = 0.6$, $J = 1$.

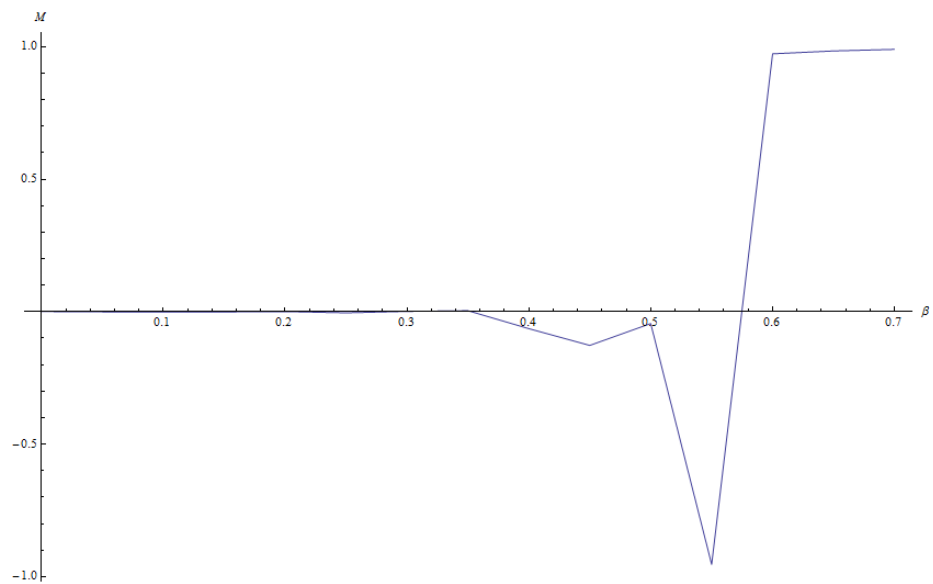


Abbildung 5: Magnetisierung, $J=-1$

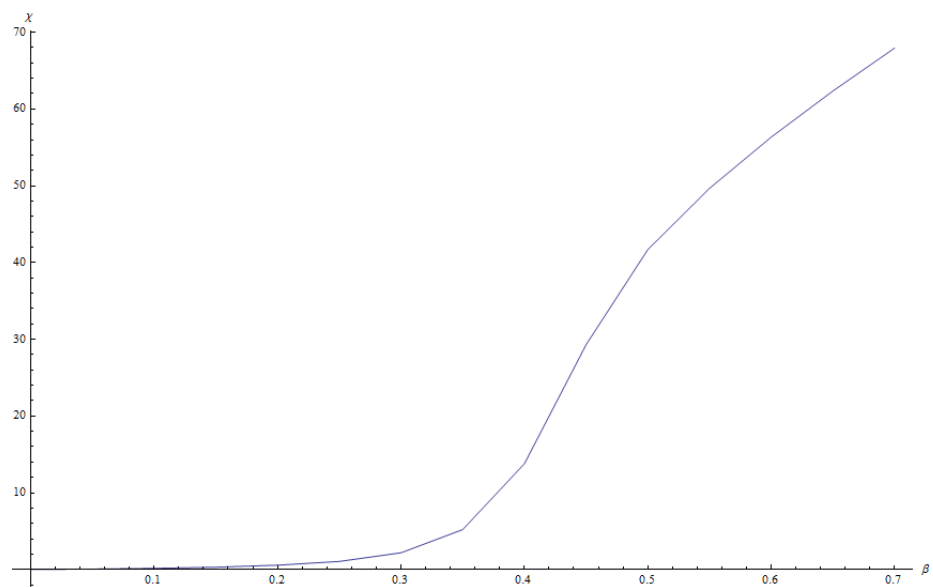


Abbildung 6: Suszeptibilität, $J=-1$

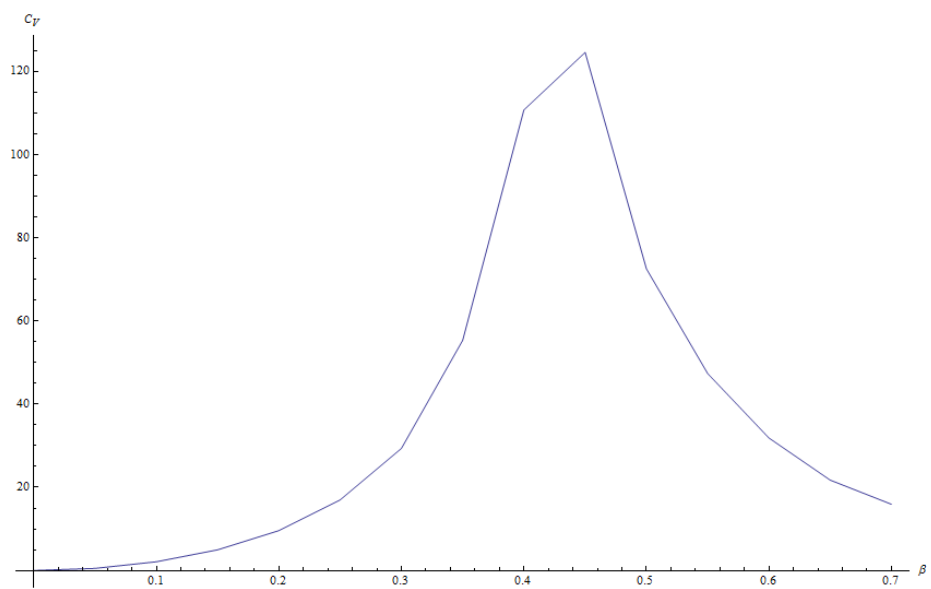


Abbildung 7: Spezifische Wärme, $J=-1$

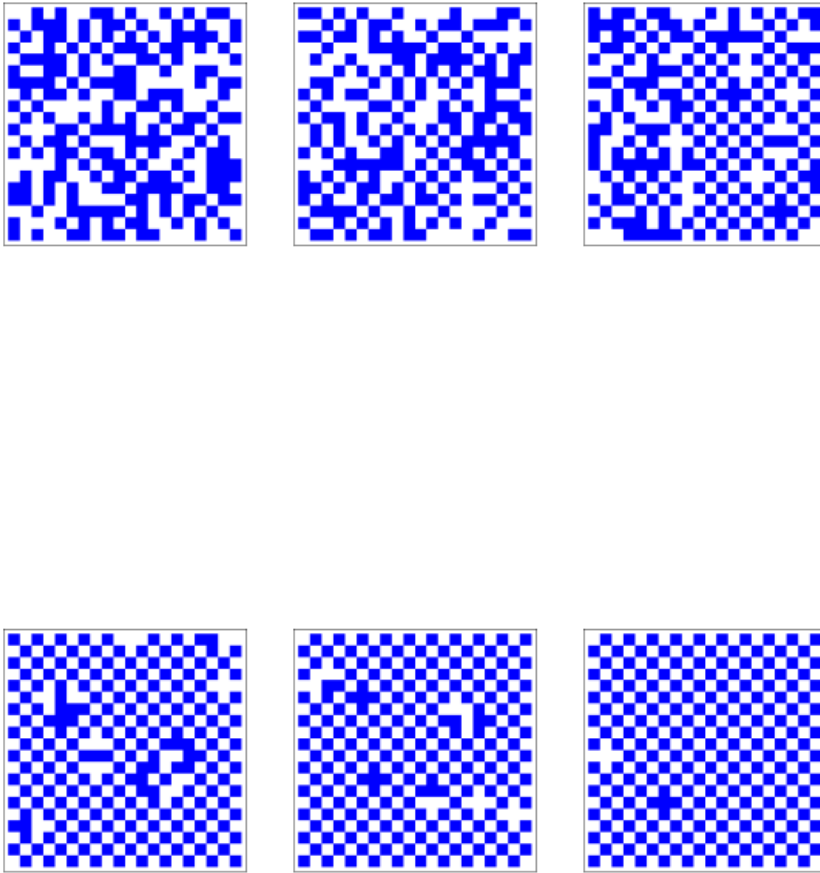


Abbildung 8: Verschiedene Spinkonfigurationen von $\beta = 0.1$ bis $\beta = 0.6$, $J = -1$.

Literaturverzeichnis

[1] Jan Kierfeld,

Computational Physics: Ising Modell,

http://t1.physik.tu-dortmund.de/kierfeld/teaching/CompPhys_13/kierfeld_CompPhys.pdf

[2] "Das Ising Modell mit Monte Carlo Methoden", Marcel Wirz,

http://www.wiese.itp.unibe.ch/theses/wirz_bachelor.pdf