

# Metropolis Ising Modell

Michael Vogelpohl

24. Januar 2014

# 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

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

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 Zufallszahlen entsprechend der Boltzmannverteilung erzeugt.

Das Prinzip der "detailed balance" muss eingehalten werden:

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

$P(a,b)$  bezeichnet die Wahrscheinlichkeit des Zustands b gegeben a,  $A(a,b)$  die Wahrscheinlichkeit, b zu akzeptieren (gegeben a). Damit lässt sich A bestimmen:

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

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.

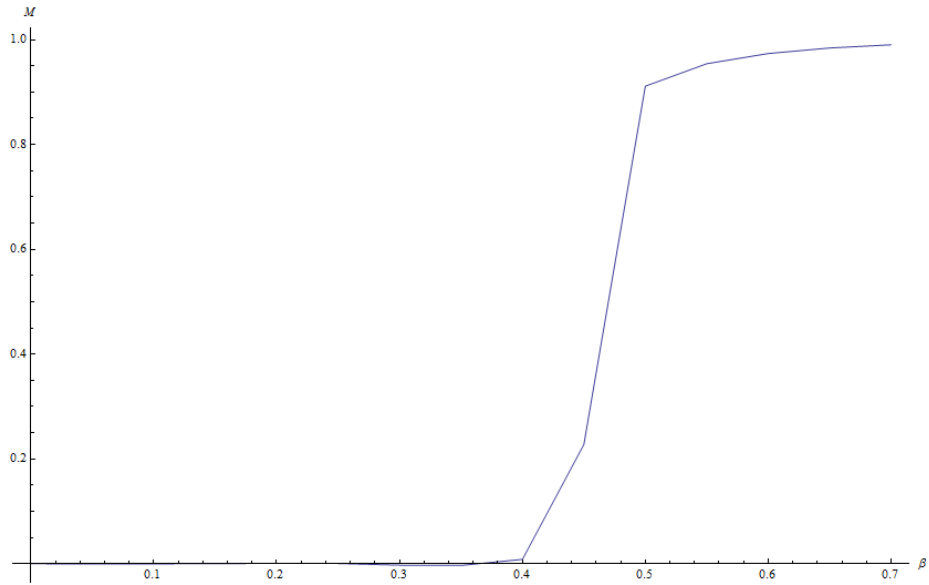


Abbildung 1: Magnetisierung

### 0.3 Ergebnisse

In meinen Berechnungen untersucht wurden die Fälle  $J = 1$  und  $J = -1$ .

Die oben behandelten thermodynamischen Grössen Magnetisierung, magnetische Suszeptibilität und spezifische Wärme wurden gegen die inverse Temperatur  $\beta$  aufgetragen. Die Gittergrösse beträgt  $20 \times 20$ . Die Simulation wurde mit 100000 Iterationen durchgeführt. Die Schrittweite ist  $\Delta\beta = 0.05$ .

Der Phasenübergang bei der kritischen Temperatur  $\beta_c = 0.44$  ist 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.

Einige interessante Spin-Konfigurationen werden nun bei verschiedenen Temperaturen hier dargestellt. Die Grösse des Grids ist wiederum  $20 \times 20$ . Der Phasenübergang im 5. Bild ist gut erkennbar.

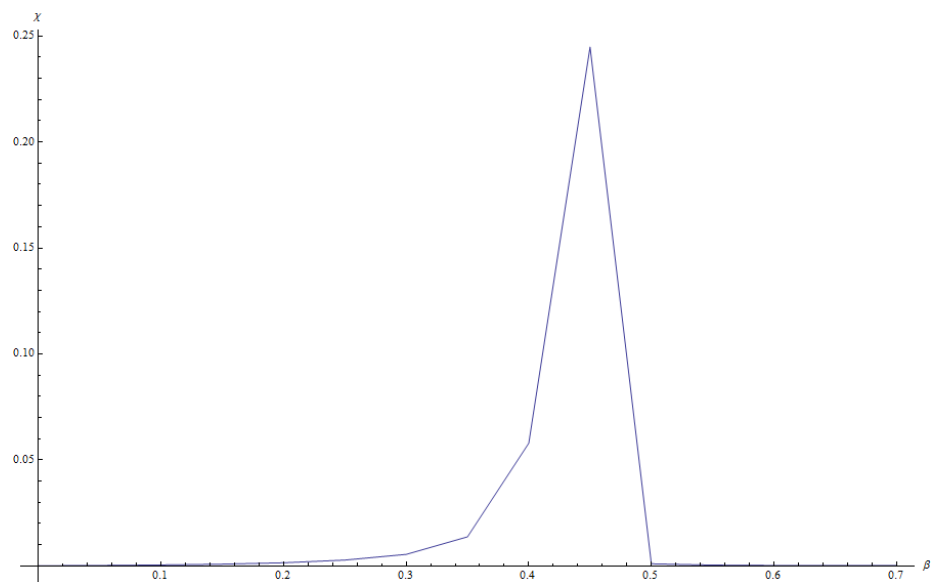


Abbildung 2: Suszeptibilität

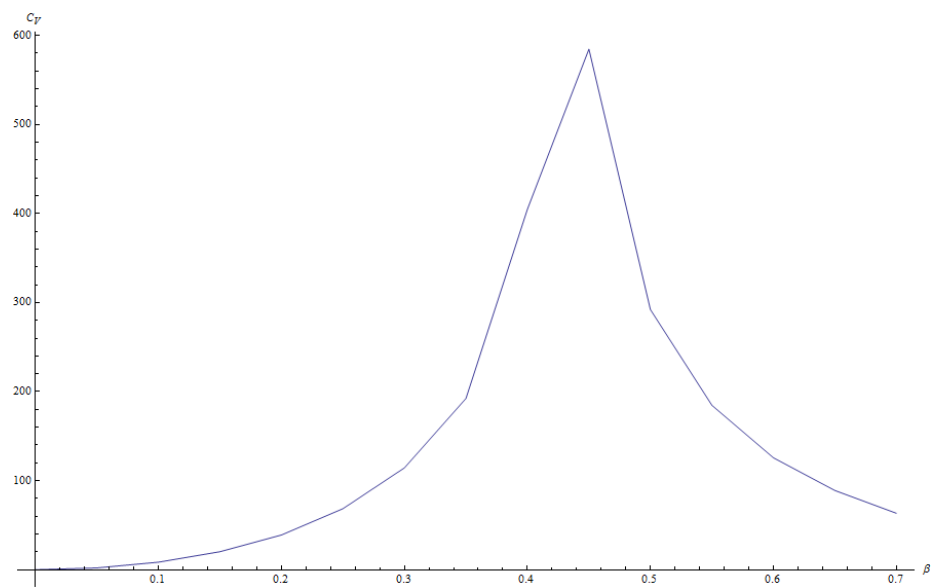


Abbildung 3: Spezifische Wärme

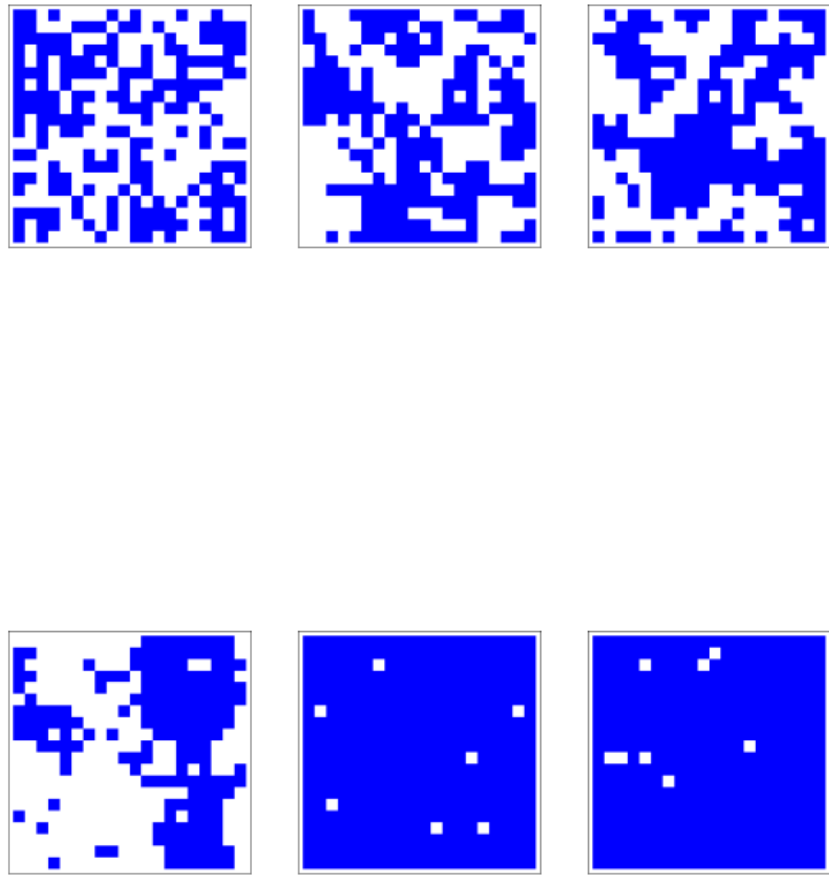


Abbildung 4: Verschiedene Spinkonfigurationen von  $\beta = 0.1$  bis  $\beta = 0.6$



# Literaturverzeichnis

- [1] Jan Kierfeld,  
Computational Physics: Ising Modell,  
  
[http://t1.physik.tu-dortmund.de/kierfeld/teaching/CompPhys\\_13/kierfeld\\_CompPhys.pdf](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](http://www.wiese.itp.unibe.ch/theses/wirz_bachelor.pdf)
- [3]