MC – Simulationen des Ising-Modells

Quellen: Thijssen, Kap. 10
Sander, Kap. 4.6, 9.7
Kinzel und Reents, Kap. 5.5

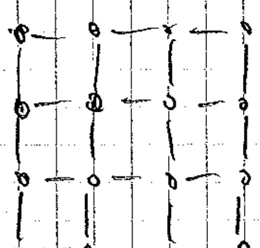
Physikalische Fragestellung

Kristallgitter mit lokalisierten, ungepaarten Elektronen
$\Rightarrow$ lokale Spin $S = \frac{1}{2}$

Bevorzugte Kristallrichtung $\Rightarrow$ $S_i^z = \frac{\hbar}{2} s_i$, $s_i = \pm 1$

Hamilton-Operator $H = -\tilde{J} \sum_{\langle ij \rangle} S_i^z S_j^z - \tilde{H} \sum_i S_i^z$

- mit ferromagnetischer Austauschkopplung $\tilde{J} > 0$ zwischen nächsten Nachbarn,
- äußerem Magnetfeld $\tilde{H}$ in Richtung z
- Summe $\langle ij \rangle$ über alle Paare von nächsten Nachbarn. z.B. für ein quadratisches Gitter



• = Gitterplatz

— = Verbindung zwischen nächsten Nachbarn

- I.A. mit periodischen Randbedingungen

Wir interessieren uns für die thermodynamischen Eigenschaften:

- Zustandssumme $\quad Z = \mathrm{Sp}\, e^{-\beta \tilde{H}}$

$$= \sum_{\{s\}} e^{-\beta E(s)}$$

mit der Energie $\quad E(s) = -J \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j - H \sum_i s_i$

für eine Konfiguration $\quad s = (s_1, s_2, \dots, s_N)$

$\sum_{\{s\}}$ bezeichnet die Summe über alle Spin-Konfigurationen

$$\equiv \sum_{s_1 = \pm 1} \sum_{s_2 = \pm 1} \cdots \sum_{s_N = \pm 1}$$

also 2^N Terme

Magnetisierung $\quad M(T,H) = \langle S^z \rangle = \frac{1}{Z} \mathrm{Sp}\left(S^z e^{-\beta \tilde{H}}\right)$

$$\underset{\left(\frac{\hbar}{2} \equiv 1\right)}{=} \langle \sum_i s_i \rangle = \frac{\sum_{\{s\}} \sum_i s_i \, e^{-\beta E(s)}}{\sum_{\{s\}} e^{-\beta E(s)}}$$

Suszeptibilität $\quad \chi = \frac{1}{N} \left.\frac{\partial M}{\partial H}\right|_{H \to 0}$

$$= \frac{1}{N k_B T} \quad \langle \left(\sum_i s_i\right)^2 \rangle - \langle \sum_i s_i \rangle^2$$

Energie $U(T,H) = \langle \tilde{\hat{H}} \rangle = \langle E(s) \rangle$

$$= \frac{\sum_{\{s\}} E(s)\, e^{-\beta E(s)}}{\sum_{\{s\}} e^{-\beta E(s)}}$$

Spezifische Wärme $C = \frac{1}{N} \frac{\partial U}{\partial T}$

$$= \frac{1}{N k_B T^2} \left(\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2 \right)$$

Wir wissen, dass das Ising-Modell einen Phasenübergang zwischen einem paramagnetischen Zustand bei hoher Temperatur und einem ferromagnetischen Zustand bei tiefer Temperatur aufweist:

$T = 0 \Rightarrow$ 2 Grundzustände : $\begin{cases} s_i = +1 & \forall i \\ s_i = -1 & \forall i \end{cases}$

$\Rightarrow$ Magnetisierung $M = \pm N$

$T \to \infty \Rightarrow$ Alle Spinrichtungen sind gleich wahrscheinlich

$\Rightarrow M = 0$

Fragen:
- Wert der kritischen Temperatur T_c ?
- Thermodynamische Eigenschaften im kritischen Bereich (d.h. $T \approx T_c$) ?

Anmerkung: Das Ising-Modell beschreibt kein Material realistisch. Aber es dient als Testproblem und Benchmark für numerische Methoden und Näherungsverfahren, weil es eins der wenigen Modelle mit einem Phasenübergang ist, das exakt lösbar ist.

Exakte Lösung für ein quadratisches Gitter:

$$k_B T_c \approx 2.27\ J$$

$$M(T) \sim (T_c - T)^{\beta} \quad \text{mit } \beta = \frac{1}{8} \text{ für } T \lessapprox T_c,\ H = 0$$

$$\chi(T) \sim |T - T_c|^{-\gamma} \quad \text{mit } \gamma = \frac{7}{4} \text{ für } T \approx T_c$$

Monte Carlo - Methode

Die Summe über alle Spinkonfigurationen kann nur für kleine Anzahl von Spins durchrechnen:

$N = 10 \quad \to \quad 2^N \approx 10^3$

$N = 20 \quad \to \quad 2^{20} \approx 10^6$

$N = 30 \quad \to \quad 2^{30} \approx 10^9$

$N = 40 \quad \to \quad 2^{40} \approx 10^{12}$

...

Erwartungswerte können mit der Monte Carlo - Methode berechnet werden

$$\langle f \rangle = \frac{\sum_{\{s\}} f(s)\, e^{-\beta E(s)}}{\sum_{\{s\}} e^{-\beta E(s)}}$$

$$\approx \frac{1}{S} \sum_{t=1}^{S} f(s^t)$$

wobei $s^1, s^2, \ldots, s^t$ ist eine Markov-Kette von Spinkonfigurationen ($s^t = \{ s_1^t, s_2^t, \ldots, s_N^t \}$) mit der Wahrscheinlichkeitverteilung

$$P(s) = \frac{e^{-\beta E(s)}}{\sum_{\{s\}} e^{-\beta E(s)}}$$

Metropolis-Schritt $s^t \to s^{t+1}$

0. Sei die Konfiguration $s^t = \{ s_1^t, s_2^t, \dots, s_N^t \}$

1. Ein Spin s_j^t wird ausgewählt (entweder zufällig oder durch einen systematischen Durchlauf durch das Gitter)

2. $\Rightarrow$ Ansatz für eine neue Konfiguration

$$s' = \{ s_1^t, s_2^t, \dots, -s_j^t, \dots, s_N^t \}$$

2. Das Verhältnis der Wahrscheinlichkeit wird berechnet

$$W(s^t \to s') = \frac{P(s')}{P(s^t)} = e^{-\beta\left[E(s') - E(s^t)\right]}$$

3. Eine Zufallszahl $z \in [0,1)$ wird erzeugt (gleichmässige Verteilung)

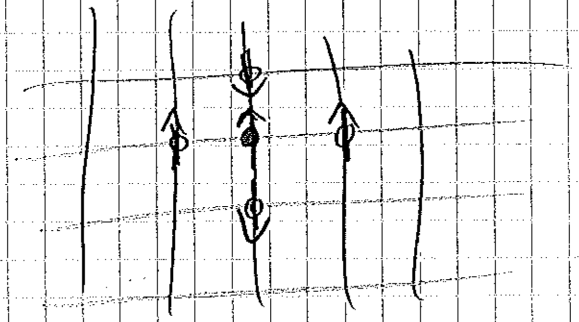
4. Falls $W > z$ wird die neue Konfiguration angenommen: $s^{t+1} = s'$

Sonst wird die Konfiguration verworfen

Anmerkung: W kann nur eine kleine Zahl von verschiedenen Werten annehmen. Diese Werte sollten einmal berechnet werden und dann gespeichert werden.

$$W = \exp\left[-\beta\left(2J \sum_{\substack{n.N.\, i \\ \text{von } j}} s_i s_j + 2H s_j\right)\right]$$

$$= \begin{cases} f\left(\sum\limits_{\substack{n.N.\, i \\ \text{von } j}} s_i\right) & \text{falls } s_j = +1 \\ 1/f\left(\sum\limits_{\substack{n.N.\, i \\ \text{von } j}} s_i\right) & \text{falls } s_j = -1 \end{cases}$$



mit $f(x) = e^{-\beta(2Jx + 2H)}$

$$x = \sum_{\substack{n.N.\, i \\ \text{von } j}} s_i = \underbrace{-4, -2, 0, 2, +4 \quad [\,5 \text{ Werte}\,]}_{\text{2D quadratisches Gitter}}$$

Autokorrelationen

$$C(t,t') = \frac{\frac{1}{N}\sum_i s_i^t s_i^{t'} - \frac{1}{N}\sum_i s_i^t \cdot \frac{1}{N}\sum_i s_i^{t'}}{\sigma^t \, \sigma^{t'}}$$

mit

$$(\sigma^t)^2 = \frac{1}{N}\sum_i \left(s_i^t\right)^2 - \left(\frac{1}{N}\sum_i s_i^t\right)^2$$

$$= 1 - \left(\frac{1}{N}\sum_i s_i^t\right)^2$$

$$C(t,t') \sim e^{-|t-t'|/\tau_{KC}}$$