# 伊辛模型与相变的数值研究

刘明扬 2015301110145 彭桓武班


## 摘要：

伊辛模型较好的模拟了物质的相变，但其分析解法较为困难，本文采用蒙特卡洛方法利用 python 来模拟伊辛模型，利用其来解释一阶相变与二阶相变，用图像给出较为直观的解释，并将其与平均场理论进行了对比，有助于读者对统计物理有较为深度的认识。



## 关键词：

伊辛模型，一阶相变，二阶相变，平均场，蒙特卡洛法，python


一、引言

相变和临界现象是一个跨学科领域，一直备受关注。在连续相变的临界点，热力学函数和关联函数呈现奇异性，他们来源于系统中粒子间的相互作用。这种相互作用，在临界点是以“合作的方式”进行的。也就是说，即使是短程作用，通过这种合作方式也会产生长程关联。因此，相变有时也被称为“合作现象”。伊辛模型是一个以物理学家恩斯特 • 伊辛( Ernst Ising)为名的数学模型，用于描述物质的铁磁性。该模型中包含了可以用来描述单个原子磁矩的参数$\sigma_i$，其值只能为+1 或-1，分别代表自旋向上或向下，这些磁矩通常会按照某种规则排列，形成晶格，并且在模型中会引入特定交互作用的参数，使得相邻的自旋互相影响。虽然该模型相对于物理现实是一个相当简化的模型，但它却和铁磁性物质一样会产生相变。事实上，一个二维的方晶格伊辛模型（square-lattice Ising model）是已知最简单而会产生相变的物理系统[1]。

伊辛模型最早是由物理学家威廉 • 冷次（Wilhem Lenz,1888-1957）在 1920 年发明的，他把该模型当成一个给他学生恩格斯 • 伊辛的问题。伊辛在他一篇 1924 年的论文中求得了一维伊辛模型的解析解，并且证明了它不会产生相变。二位方格晶格伊辛模型在 1943 年由拉斯 • 昂萨格给出。一般来说，二维伊辛模型的解析解可由传递矩阵法(transfer-matrix method)求得。对于三维伊辛模型目前还没有解析解，但其近似解可由平均场方法求得，本文采用平均场和数值方法进行求解，并讲两者进行对比，找出平均场近似的不足。

二、伊辛模型

磁现象是一种自发的量子现象，我们假设粒子存在自旋，并有着磁矩。在这里我们假设粒子自旋为$\pm1$（在这里自旋取值并不会影响所得的结果）。为方便起见，让每个粒子自旋的方向只能指向+z 或者-z, 也就是自旋向上或者向下，在伊

辛模型中我们让每个粒子固定在晶格上，每个粒子与其他晶格点的粒子有相互的作用（这里我们仅让最近的两个电子发生相互作用），在铁磁质中每个电子都会与其他晶格的电子趋于同向，当所有粒子同向时，铁磁质的磁性最大。基于这个假设体系的能量可以写为

$$E = -J\sum_{<ij>} s_i s_j \tag{2.1}$$

在这里求和是对所有的临近的电子求和，J 在这里是作用常数，为正数。如果仅仅考虑粒子之间的相互作用，所有的粒子都会趋于平行，造成物质的磁性，我们可以说由带有磁矩的粒子都会自发的呈现出磁性。

尽管如此，粒子自发的热运动必须被考虑在内，我们假设系统于温度为 T 的大热源达到平衡这被称为正则系统，根据统计物理的知识，我们可以得到，系统处于特定态的概率为

$$P_\alpha \backsim e^{-E_\alpha/kBT} \tag{2.2}$$

在这里$E_\alpha$是$\alpha$态的能量，$k_B$是玻尔兹曼常数，$P_\alpha$是系统在态$\alpha$的几率。如果我们的晶格有 N 个粒子，那么就会有$2^N$个态，当 N 极大时，系统趋于宏观态，解析解无法求得，可以采用数值计算的方法。

## 三、平均场近似

在这里我们将一个粒子的取向取平均用⟨s⟩来表示，每个粒子取向的平均值都相等，那么系统的总磁化可以写为

$$M = \sum_i < s_i > = N < s_i > \tag{3.1}$$

如果我们外加一个磁场，那么系统的能量可以写为

$$E = -J\sum_{<ij>} s_i s_j - \mu H \sum_i < s_i > \tag{3.2}$$

考虑一个粒子，那么该粒子处于$\pm 1$的概率为

$$P_+ = Ce^{+\mu H/k_B T} \tag{3.3}$$

$$P_- = Ce^{-\mu H/k_B T} \tag{3.4}$$

其中 C 为

$$C = \frac{1}{e^{+\mu H/k_B T} + e^{-\mu H/k_B T}} \tag{3.5}$$

那么自旋取向的平均值可以写为

$$< s_i \geq \sum_{s_i=\pm 1} s_i P_i = P_+ - P_- = tanh(\mu H/k_B T) \tag{3.6}$$

其中$\mu$是磁化率，考虑二维的系统一个粒子的临近粒子有 4 个，能量可以写为

$$E = -(J\sum_{<ij>} s_j)\, s_i - \mu H \sum_i < s_i > \tag{3.7}$$

取 H=0，粒子取向的平均值类似的可以写为

$$<s> = \tanh(zJ <s>/k_B T) \tag{3.8}$$

其中，$z = 4$, 对于该方程，可以进行数值求解，采用 Newton-Raphson 方法求解，可以得到该系统的解与温度的关系图像，在这里我们将 $J/k_B$ 取为 1，以后的讨论都会这样定标。

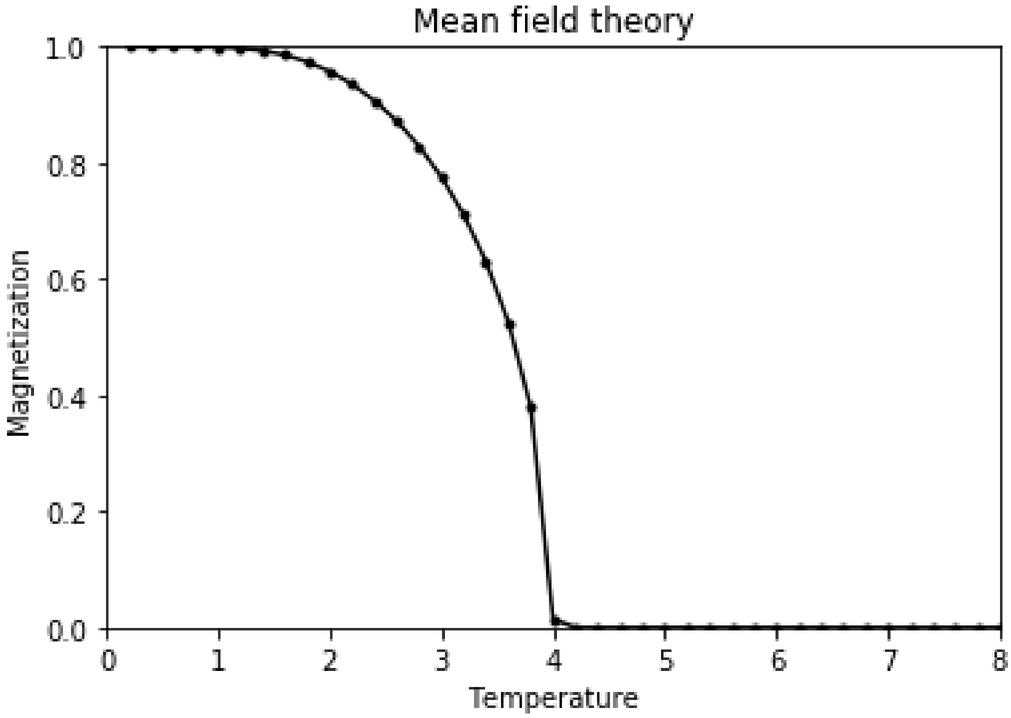



图 3.1 平均场的根与温度关系图像

三、蒙特卡洛方法

蒙特卡洛方法使用随机的过程来进行仿真，在这里使用蒙特卡洛的方法如下，在晶格中随机选择一个粒子，计算其自旋变向的能量 $E_{flip}$（采用式（2.1)），如果该能量为负，使其转向，如果为正，随机生成一个随机数，比较能量与 $\exp(-E_{flip}/k_B T)$ 的大小，如果随机数较小，翻转，否者不翻转[2]。

四、伊辛模型和二阶相变

相变时物质的化学势相等，但化学势的一级偏微商不等，这样的相变叫做一阶相变，如果在其变化过程中，摩尔体积不变，无潜热产生；但物质的摩尔热容、定压膨胀系数、等温压缩系数等发生突变，即化学势的一阶偏微商相等，二阶偏微商不等的相变叫做二阶相变[3]

采用周期性边界条件，并且考虑$10 \times 10$的晶格，利用蒙特卡洛算法可以得到磁场与时间的关系

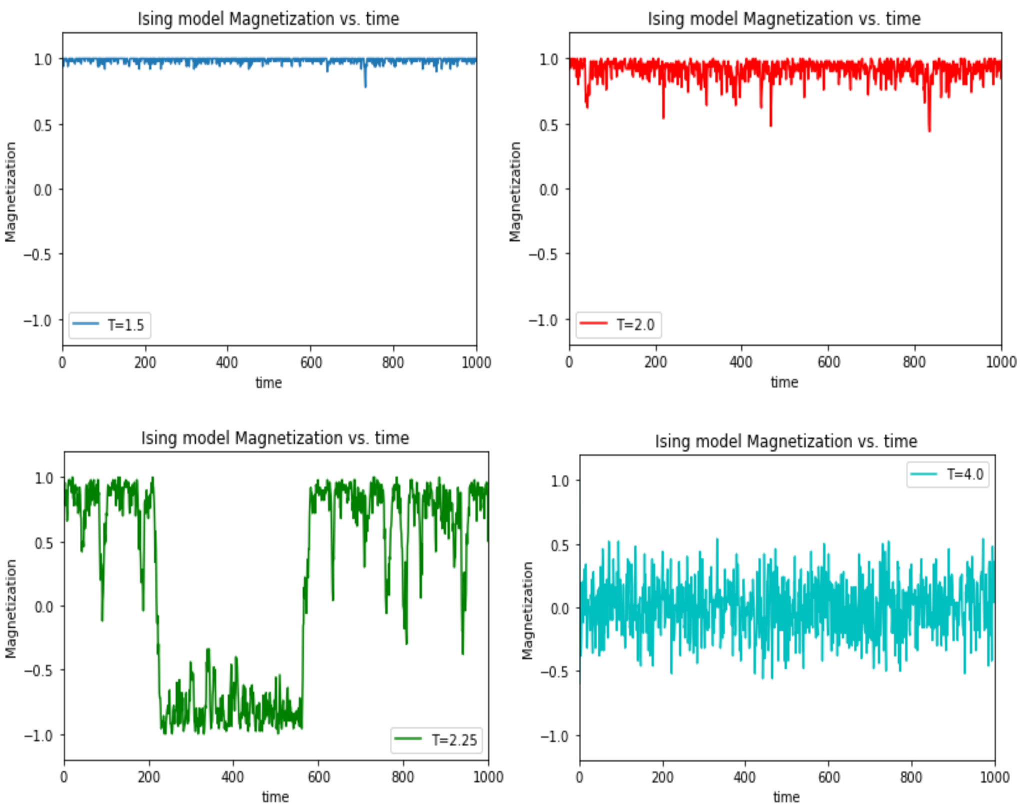



图 4.1 不同温度下磁场与时间的关系

可以看到在 T=2.25 附近，磁场开始发生剧烈变动，之后磁化消失，这与在平均场理论中磁场在 T=4 处消失有很大的不同。在这里我们将磁场对时间取平均值，可以得到如下所示

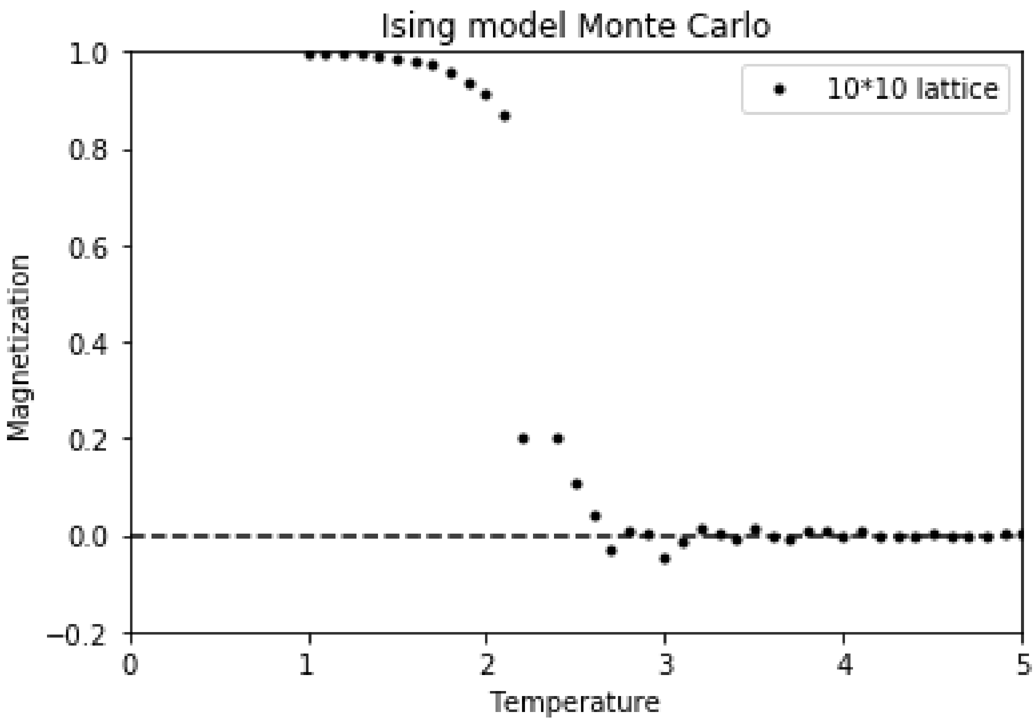



图 4.2 平均磁场与温度关系图

可以看到在 T=2.27 左右，物质的磁性消失，由铁磁质变为顺磁质，发生二阶相变。为了弄清楚平均场理论与实际的差别，我们做出物质能量与温度的关系。

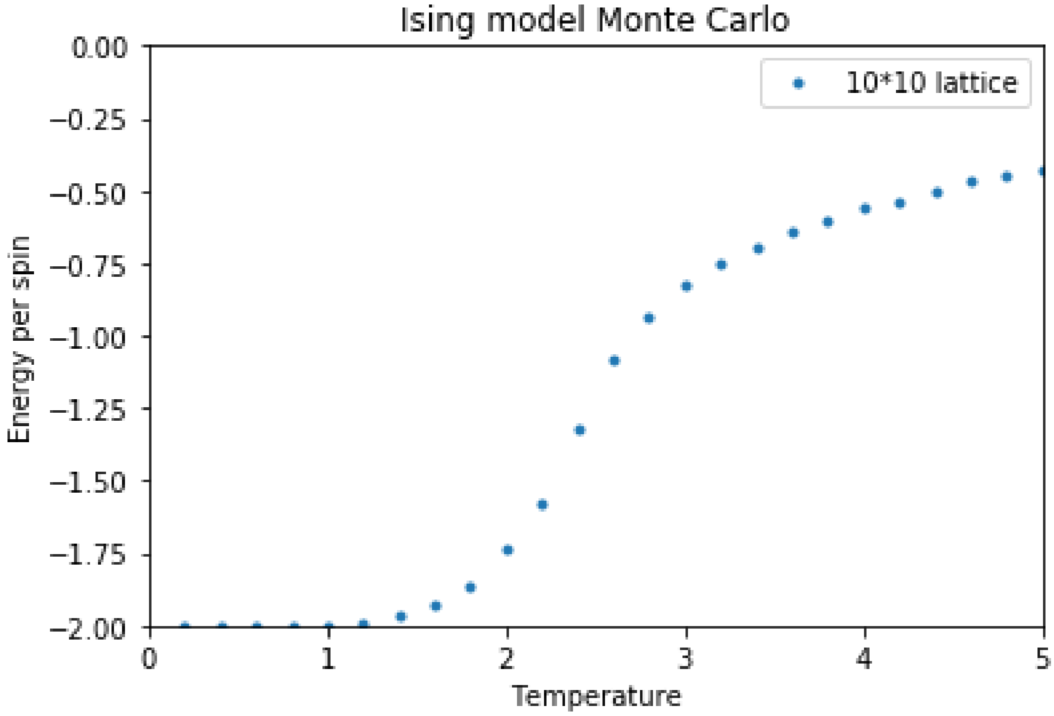



图 4.3 物质能量与温度关系图

在这里为了归一化，将 J 取为 1，从图中我们可以看出在 T=4 时，已经发生了相变，但是系统的能量却不为零，也就是说，在局部位置粒子仍然趋于同向，这是平均场理论所没有考虑到的。

为了更深层次的理解伊辛模型，我们做出单个粒子的比热图像，因为

$$C=\frac{(\Delta E)^2}{k_B T^2} \tag{4.1}$$

其中

$$(\Delta E)^2=<E^2>-<E>^2 \tag{4.2}$$

$$<E>^2=\frac{1}{N_m}\sum_{\alpha} E_{\alpha}^2 \tag{4.3}$$

可以做出比热与温度的图像如下

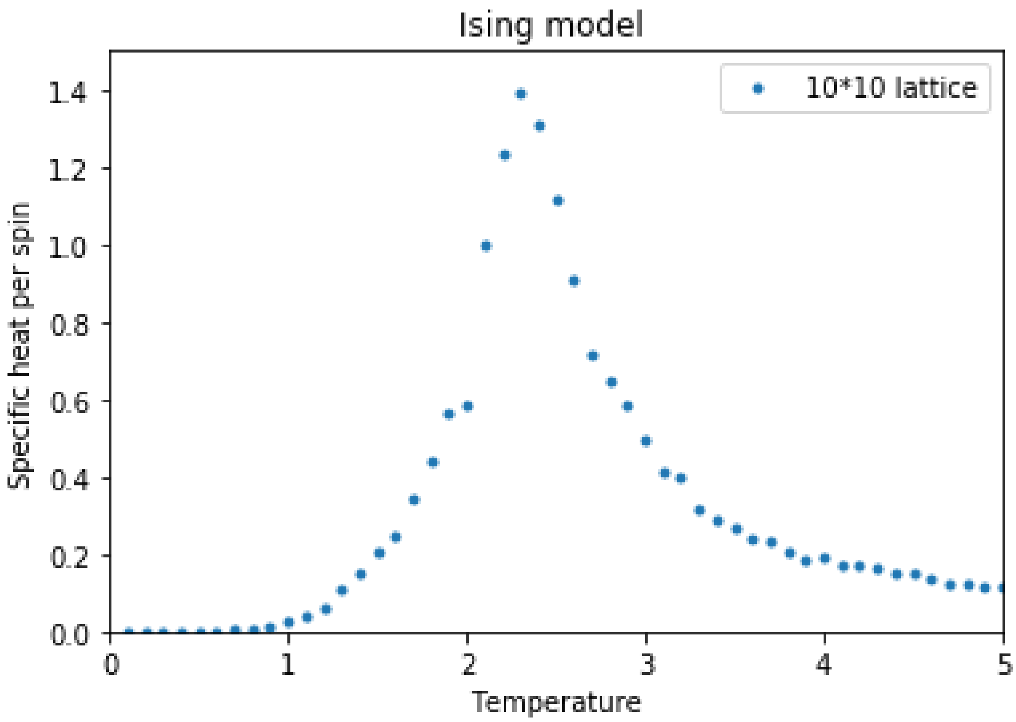



图 4.4 比热与温度的关系图

在这里，共取了 100 个粒子，在相变点附近，比热发生突变，取极大值。不难想象，如果取无穷多粒子，极值会趋于无穷，即发生了二阶相变。

接着我们做出粒子之间相互作用的图像，我们将两晶格之间距离取为 1，可以得到

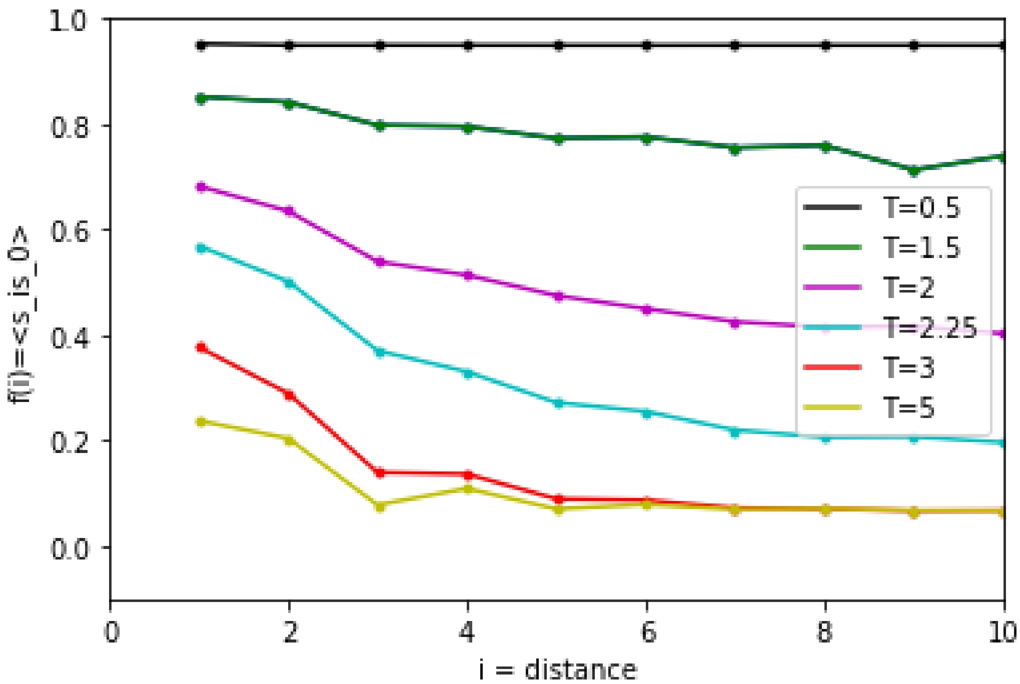



图 4.5 相互作用与晶格点距离之间的关系

可以发现当温度很低的时候，粒子的相互作用较强，而且不随距离增加而衰减，当维度达到临界点时，作用随距离增加而减少。

## 五、一阶相变

为了研究一阶相变我们在伊辛模型基础上加上磁场，这时能量的表达式变为式（3.2），采用相同的办法我们可以做出磁场随 H 变化的图像

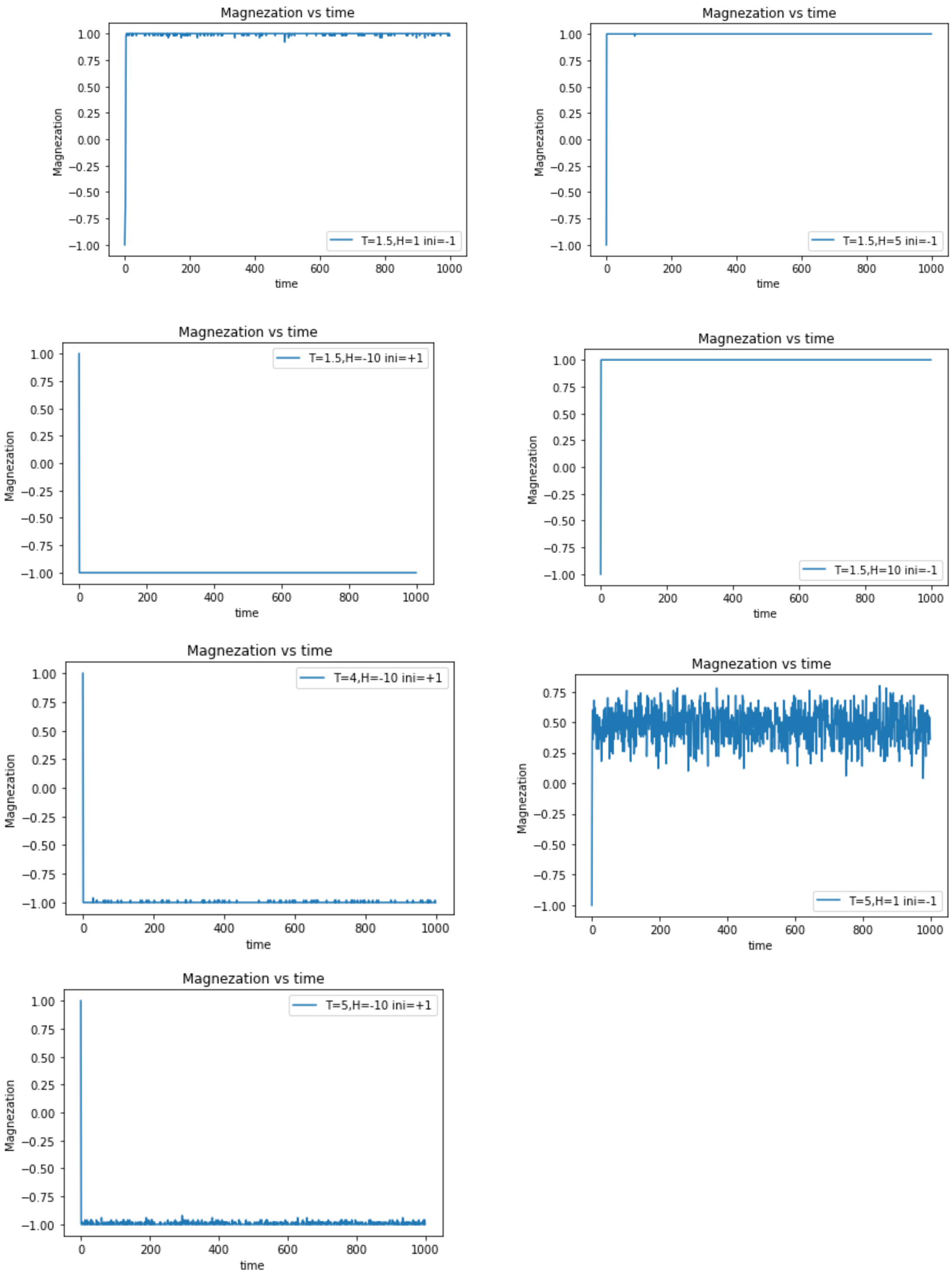
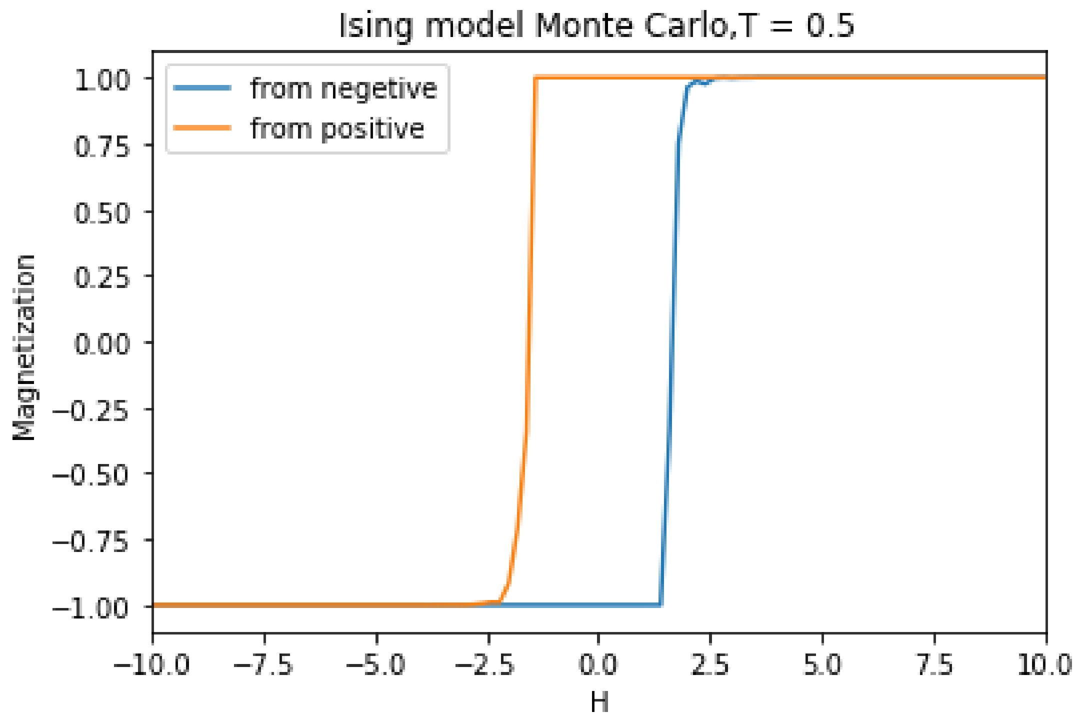
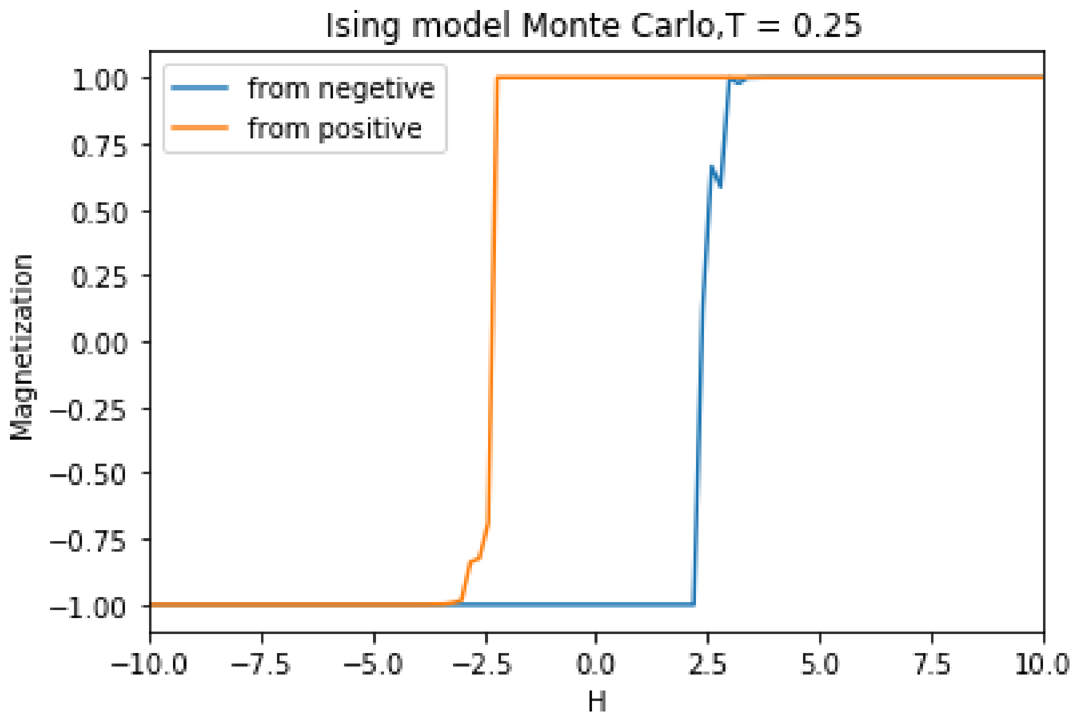
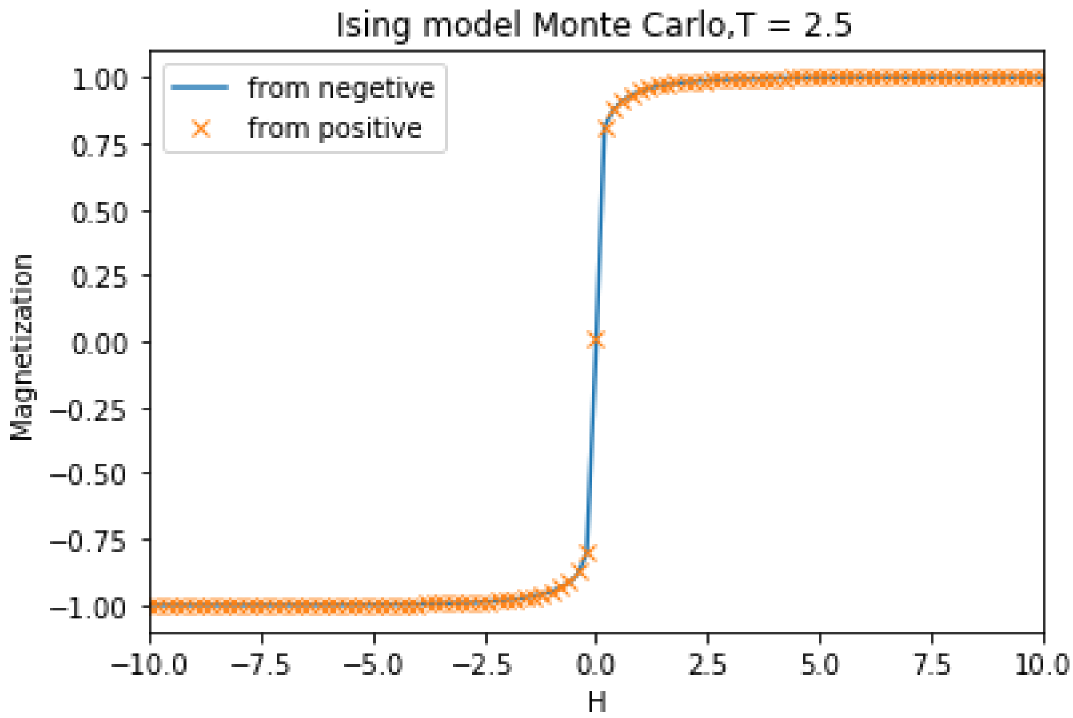


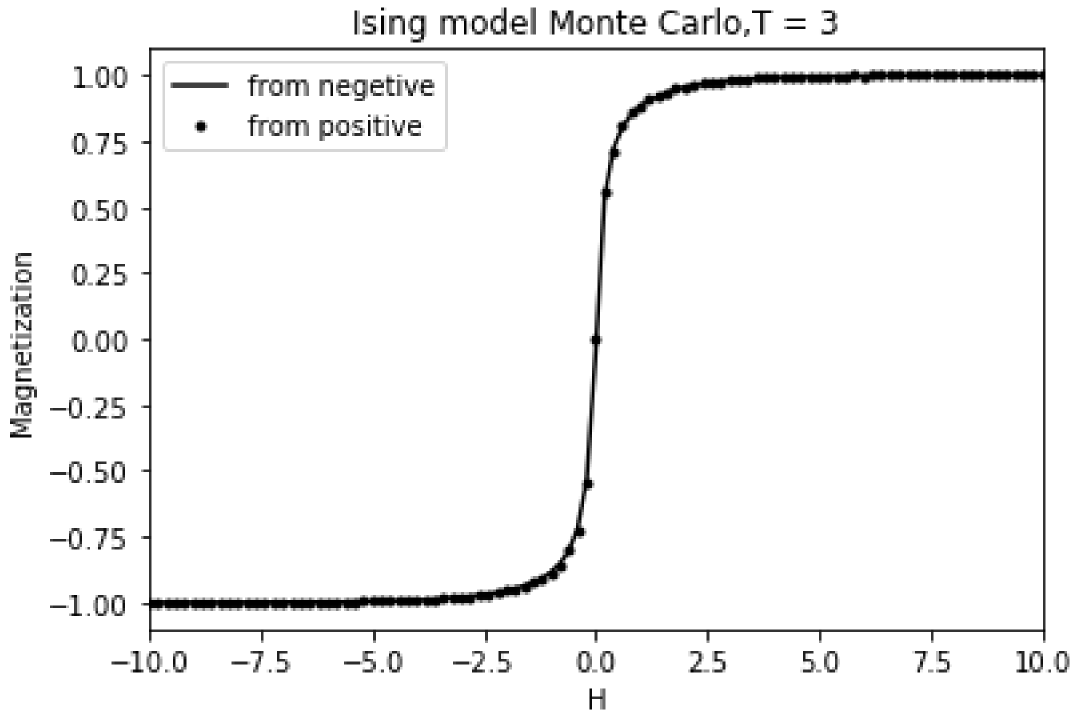

图 5.1 不同外加磁场温度下磁场与时间关系

我们发现 H 规定了磁场的取向，尽管一开始磁场与初始的取法完全相反，但是系统会在一个时间间隔后转向，因此在取平均的时候仅仅需要将初始时刻抛弃即可。同样可以发现当温度较低时，粒子趋于同向，当温度较高时，磁场减弱。我们做出不同温度下，平均磁场与外加磁场的关系。




Ising model Monte Carlo,T = 2.5
from negetive
from positive
Magnetization
1.00
0.75
0.50
0.25
0.00
−0.25
−0.50
−0.75
−1.00
−10.0
−7.5
−5.0
−2.5
0.0
2.5
5.0
7.5
10.0
H


Ising model Monte Carlo,T = 3
from negetive
from positive
Magnetization
1.00
0.75
0.50
0.25
0.00
−0.25
−0.50
−0.75
−1.00
−10.0
−7.5
−5.0
−2.5
0.0
2.5
5.0
7.5
10.0
H

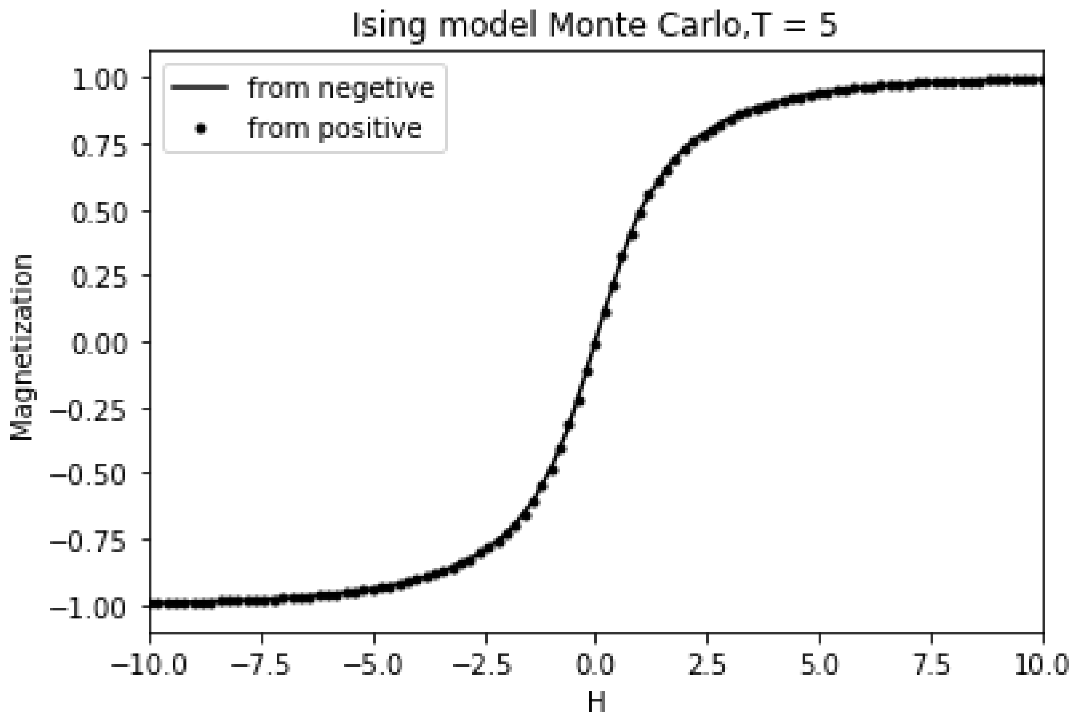



图 5.2 不同温度下，磁场与外加磁场的关系

我们有趣的发现当温度较低时，会出现滞磁性，且磁场会发生突变，为一阶相变，当温度较高时，滞磁性消失，外加磁场从负到正与从正到负图像重合，图像不突变，物质变为顺磁质，发生二阶突变。因此，可以得知若想发生相变，可以直接在临界点下发生一阶，或者到临界点以上，绕过一阶相变，发生二阶相变。

六、源代码及图片

所有的代码和图片均上传到 GitHub 上 code and pictures

七、参考文献

[1] 伊辛模型. 维基百科
[2] Computational Physics.Nicholas J.Giordano ,Hisao Nakanishi
[3] 热力学与统计物理. 胡承正. 科学出版社. 2009