

Model Isinga

Karolina Banasiewicz, Magdalena Oćwieja,
Eryk Kozłowski, Mahdi Maurycy El Khourani

Grudzień 2016

1 Jednowymiarowy model Isinga

Jest to liniowy łańcuch N spinów mogących przyjmować wartości $\pm \frac{1}{2}\hbar$. Mikrostanem układu jest zbiór zmiennych

$$\sigma_i = \pm 1, \text{ gdzie } i=1,2,\dots,N \quad (1)$$

Określają one czy i – ty spin jest skierowany w górę, czy w dół. Zazwyczaj zakłada się periodyczne warunki brzegowe.

Geometrycznie oznacza to, że łańcuch spinów został zwinięty w kółko. Istnieje oddziaływanie pomiędzy najbliższymi sąsiadami. Jego energia zależy od tego czy sąsiednie spiny są równoległe, czy też ustawione w przeciwnych kierunkach. Energia oddziaływania równoległych spinów wynosi ϵ , a energia oddziaływania spinów o przeciwnych kierunkach wynosi ϵ' . Przyjmijmy

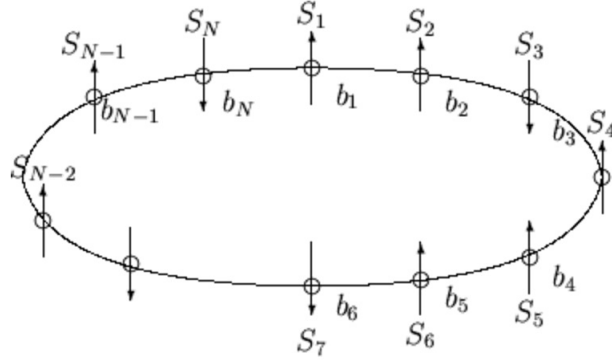
$$\epsilon < \epsilon' \quad (2)$$

to znaczy, że oddziaływanie faworyzuje spiny równoległe.

Analiza wyników dla tego przypadku nie wykazała jednak przejścia fazowego, które ujawniło się dopiero dla sieci dwuwymiarowej. Jako pierwszy dokonał tego Onsager w 1944 roku.

2 Dwuwymiarowy model Isinga

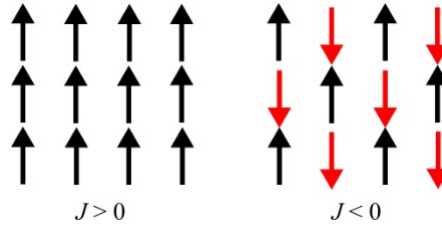
Model Isinga jest prostym modelem ferromagnetyzmu. Zakłada się w nim istnienie sieci w węzłach której zlokalizowane są spiny s_i (lub momenty magnetyczne) oddziałujące z najbliższymi sąsiadami i ewentualnie z zewnętrznym polem magnetycznym. Każdy ze spinów może przyjmować wartość $+1$ (spin skierowany do góry) lub -1 (spin skierowany w dół). Energia zależy od konfiguracji spinów $\{s_i\}$ i dana jest wzorem:



Rysunek 1: Jednowymiarowy model Isinga

$$E(\{s_i\}) = -J \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j - h \sum_i s_i, \quad (3)$$

gdzie J jest stałą sprzężenia, $\langle ij \rangle$ oznacza sumowanie po parach najbliższych sąsiadów, h jest zewnętrznym polem magnetycznym (zawiera w sobie czynnik $g\mu_B$). Gdy $J > 0$ energia jest minimalna przy wszystkich spinach ustawionych w tym samym kierunku (ferromagnetyzm); jeśli $J < 0$ energia jest minimalizowana przez taką konfigurację spinów, w której każdy spin ma najbliższych sąsiadów skierowanych w przeciwnym kierunku niż on (antyferromagnetyzm). Okazuje się, że nie dla wszystkich sieci taką konfigurację można zrealizować - dochodzi wówczas do frustracji, np. w przypadku sieci trójkątnej. Bada się także przypadek, w którym sprzężenie J nie jest stałe, tylko zmienia się dla różnych par spinów, przyjmując wartości losowo dodatnie i ujemne. Układ taki nazywany jest szkłem spinowym. W dalszej części będziemy zakładać, że $J > 0$, czyli mamy do czynienia z ferromagnetycznym modelem Isinga.



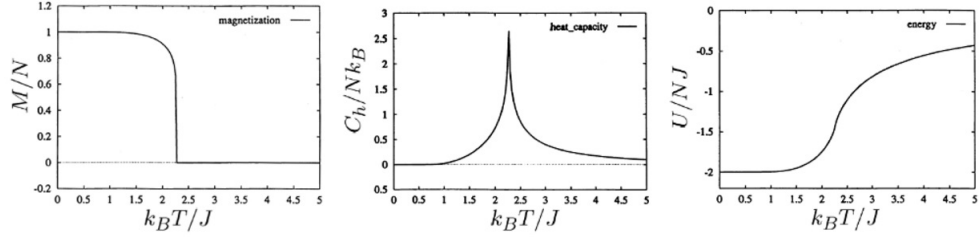
Rysunek 2: ułożenie spinów

Model Isinga udało się rozwiązać dokładnie w jednym i dwóch wymiarach. Ciekawe jest zwłaszcza rozwiązanie w dwóch wymiarach, gdyż wykazuje obec-

ność przejścia fazowego. Jego temperatura wynosi:

$$\frac{k_B T_C}{J} = \frac{2}{\ln(\sqrt{2} + 1)} \approx 2.269 \quad (4)$$

Rozwiązanie to, znalezione przez Onsagera pozwala wyliczyć nie tylko temperaturę krytyczną, ale między innymi temperaturową zależność magnetyzacji (M), ciepła właściwego (C) czy energii U . Poniższe wykresy przedstawiają właśnie te wielkości.



Rysunek 3: temperaturowa zależności: magnetyzacja (M), ciepło właściwe (C), energii U

Suma statystyczna modelu Isinga dana jest przez

$$Z = \sum_{\{s_i\}} \frac{\exp(-E(\{s_i\}))}{k_B T} \quad (5)$$

gdzie $E(\{s_i\})$ jest energią przy danej konfiguracji spinów $\{s_i\}$, a sumowanie przebiega po wszystkich możliwych konfiguracjach. Zgodnie z podstawami mechaniki statystycznej prawdopodobieństwo, że układ będzie w stanie danym przez konkretną konfigurację $\{s_i\}$ dane jest jako

$$P(\{s_i\}) = \frac{\exp(-E(\{s_i\})/k_B T)}{Z} \quad (6)$$

Wygodnie jest wprowadzić oznaczenie $\beta \equiv (k_B T)^{-1}$. Różniczkowanie Z po β daje

$$\frac{\partial Z}{\partial \beta} = - \sum_{\{s_i\}} E(\{s_i\}) \exp(-\beta E(\{s_i\})) = -Z \sum_{\{s_i\}} E(\{s_i\}) P(\{s_i\}) = -Z \langle E \rangle \quad (7)$$

Stąd średnia energia układu

$$\langle E \rangle = - \frac{\partial \ln Z}{\partial \beta} \quad (8)$$

Podobnie druga pochodna sumy statystycznej względem β daje

$$\langle E^2 \rangle = \frac{1}{Z} \frac{\partial^2 Z}{\partial \beta^2} \quad (9)$$

Ciepło właściwe

$$C_{nu} = \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial T} = -\frac{\beta}{T} \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial \beta} = \frac{\beta}{T} \frac{\partial}{\partial \beta} \left(\frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \beta} \right) = \frac{\beta}{T} \left[\frac{1}{Z} \frac{\partial^2 Z}{\partial \beta^2} - \frac{1}{Z^2} \left(\frac{\partial Z}{\partial \beta} \right)^2 \right] \quad (10)$$

Stąd ciepło właściwe proporcjonalne jest do wariancji energii (twierdzenie dyssypacyjno-fluktuacyjne):

$$C_{nu} = \frac{\beta}{T} (\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2) \quad (11)$$

W analogiczny sposób można wyrazić podatność magnetyczną poprzez wariancję magnetyzacji M :

$$\chi = \frac{\partial \langle M \rangle}{\partial H} = \beta (\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2) \quad (12)$$

Oba powyższe wyrażenia będą wykorzystywane przy symulacjach Monte Carlo modelu Isinga.

3 Przewidywane zachowanie układu

Energia swobodna dana jest wzorem łączącym energię wewnętrzną E , temperaturę T oraz entropię S :

$$F = -k_B T \ln Z = \langle E \rangle - TS \quad (13)$$

Układ osiąga stan równowagi termodynamicznej poprzez minimalizację F .

- w niskich temperaturach dominuje pierwszy wyraz, więc układ dąży do minimalizacji energii wewnętrznej. Może to zrobić poprzez zgodne równoległe ustawienie wszystkich spinów. Oczywiście entropia takiego stanu jest bardzo mała, ale ponieważ wchodzi ona do wzoru na energię swobodną położoną przez (niską) temperaturę, nie odgrywa to większej roli. Jest to stan, w którym magnetyzacja układu jest maksymalna.
- w wysokiej temperaturze dominuje wyraz TS , więc z punktu widzenia energii swobodnej "opłaca się" nieuporządkowanie spinów, które daje wysoką entropię. Oczywiście odbywa się to kosztem energii wewnętrznej, ale ponieważ entropia jest mnożona przez (wysoką) temperaturę, taki stan ma niższą energię swobodną. Ze względu na losowy rozkład spinów wypadkowa magnetyzacja jest bliska zeru.

- w pewnej pośredniej temperaturze następuje przejście fazowe pomiędzy fazami ze spinami uporządkowanymi i nieuporządkowanymi. W nieobecności zewnętrznego pola magnetycznego temperatura ta dla dwuwymiarowego modelu Isinga dana jest przez rozwiązanie Onsagera $T_c \approx 2.269$. Zgodnie z teorią przejść fazowych drugiego rodzaju pochodne energii swobodnej względem temperatury i pola magnetycznego są nieciągłe w punkcie przejścia fazowego. Ponieważ ciepło właściwe i podatność są funkcjami tych pochodnych, w temperaturze przejścia stają się rozbieżne.

4 Symulacje Monte Carlo

Idea symulacji Monte Carlo dla modelu Isinga polega na wygenerowaniu odpowiedniego zespołu stanów układu spinów i wykonaniu pomiarów na elementach tego zespołu. Ponieważ dla N – *wzowego* modelu Isinga możliwych jest 2^N konfiguracji spinów, w większości przypadków niemożliwe jest wygenerowanie wszystkich możliwych stanów i trzeba ograniczyć się do reprezentatywnej próby, w której stany występują odpowiednimi prawdopodobieństwami. Prawdopodobieństwo, że układ znajduje się w stanie o energii E_α dane jest przez

$$P_\alpha = \frac{e^{-E_\alpha}}{Z}. \quad (14)$$

Jeśli udałooby się wygenerować zespół w którym poszczególne stany wchodziły z prawdopodobieństwem określonym powyższym wzorem, obliczenie średniej energii czy średniej magnetyzacji sprowadziłoby się do obliczenia średniej arytmetycznej energii czy magnetyzacji dla poszczególnych składników zespołu:

$$\langle E \rangle = \frac{1}{N} \sum_{\alpha=1}^N E_\alpha \quad (15)$$

$$\langle M \rangle = \frac{1}{N} \sum_{\alpha=1}^N M_\alpha \quad (16)$$

Problem polega na tym, że do obliczenia prawdopodobieństwa P_α potrzebna jest suma statystyczna Z , a we wzorze na nią jest sumowanie po wszystkich możliwych konfiguracjach spinu. Używając współczesnych komputerów obliczenie jej już dla układu 3232 przekraczałoby czas istnienia wszechświata.

5 Algorytm Metropolis

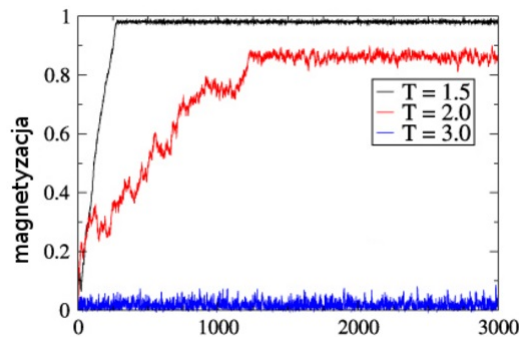
Okazuje się, że zespół zawierający stany z odpowiednim prawdopodobieństwem można wygenerować bez obliczania sumy statystycznej. Posłużyć się można algorytmem Metropolis:

1. Ustalamy temperaturę T oraz pole magnetyczne h .

2. Generujemy stan początkowy (np. z losowo skierowanymi spinami, albo wszystkimi spinami ustawionymi tak samo).
3. Obliczamy energię układu E_1 . wybieramy jeden z węzłów układu i obracamy w nim spin.
4. Wyliczamy nową energię E_2 i różnicę energii $\Delta E = E_2 - E_1$.
5. Jeśli $\Delta E \leq 0$ akceptujemy nową konfigurację (dołączamy ją do zespołu).
6. Jeśli $\Delta E > 0$ generujemy losową liczbę r o rozkładzie jednorodnym pomiędzy 0 i 1.
7. Jeśli $\exp(\Delta E/k_B T) \geq r$ akceptujemy nową konfigurację; w przeciwnym wypadku spin obrócony w punkcie 4
8. Powracamy do punktu 4.

Punkty od 4 do 9 tworzą tzw. krok Monte Carlo.

Ponieważ wygenerowany w punkcie 2 stan początkowy może nie być stanem równowagowym, przed rozpoczęciem "pomiarów" należy punkty od 4 do 9 powtórzyć odpowiednią ilość razy. Mówimy wówczas o termalizacji układu. Ilość niezbędnych kroków termalizacji zależy od stanu początkowego, od temperatury i od rozmiaru układu. Najłatwiej poznać, że układ już jest w stanie równowagowym na podstawie wykresów energii lub magnetyzacji w funkcji numeru kroku Monte Carlo. Rysunek obok ilustruje proces termalizacji na przykładzie magnetyzacji. Symulacja rozpoczęła się od stanu nieuporządkowanego (z losowo ustawionymi spinami). Widać, że w temperaturze $T = 3.0$ (w jednostkach J/k_B , niebieska linia) układ praktycznie nie wymaga termalizacji, bo przy tak wysokiej temperaturze jest on w stanie równowagi nieuporządkowany. W temperaturze $T = 2.0$ (czerwona linia) układ osiągnął stan równowagi po ok. 1200 krokach Monte Carlo, natomiast w $T = 1.5$ (czarna linia) już po ok. 1250 krokach.



Rysunek 4: krok Monte Carlo

Po zakończeniu procesu termalizacji można rozpocząć "pomiar". Ponieważ stany generowane w kolejnych krokach Monte Carlo różnią się jedynie kierunkiem jednego spinu nie należy wykonywać "pomiarów", czyli obliczać np. energii czy magnetyzacji, w każdym kroku. Obliczenia należy wykonywać jedynie dla stanów, pomiędzy którymi występuje liczba kroków na tyle duża, żeby kolejny stan był niezależny od stanu poprzedniego, tzn. odległość tych stanów powinna być większa od tzw. czasu autokorelacji. Dla niewielkich układów zazwyczaj wystarcza kilkaset kroków Monte Carlo.

Literatura

- [1] Landau, R.H. and Páez, J., Bordeianu, C.C *A Survey of Computational Phys: Introductory Computational Science*.
- [2] Wikipedia: Model Isinga
https://pl.wikipedia.org/wiki/Model_Isinga
- [3] <http://xbeams.chem.yale.edu/~batista/vaa/node37.html>
- [4] <https://sage2.icse.us.edu.pl/home/pub/489/>
- [5] <http://rajeshrinet.github.io/>
- [6] <https://github.com/RaewynD/IsingModel>
- [7] <http://www.pha.jhu.edu/~c171704/lecture1/index.html/>