

Das Ising-Modell

Hanno Rein und Peter Federsel

Vertiefung zum Praktikum Computational Physics
Universität Tübingen

28. April 2006

Überblick

- 1 Phasenübergänge
 - Auftreten von Phasenübergängen
 - Ferromagnete
- 2 Lösungsmethoden
 - Meanfield
 - Monte Carlo Methoden
 - Importance Sampling
 - Heat-Bath
 - Cluster Algorithmen
- 3 Ergebnisse
 - Swendsen-Wang
 - Sounds

Was sind Phasen?

Thermodynamik

Trennung durch die Eigenschaft der Materie, in einem größeren Volumen auf einen physikalischen Aspekt hin geordnet zu sein. Phasen sind immer durch einen Ordnungsparameter gekennzeichnet, der sich abhängig von den Zustandsgrößen ändern kann.

Beispiel I - Aggregatzustände

Wasser kann in drei verschiedenen Phasen existieren:

- fest
- flüssig
- gasförmig

Bei Wasser - oder auch anderen Stoffen - ist der Ordnungsparameter die **Ordnung der Moleküle**.

Beispiel II - Phasen bei elektrischer Leitfähigkeit

Materialen sind in Abhängigkeit von der Temperatur

- leitend
- supraleitend

Der Ordnungsparameter bei elektrischen Phasen ist also der **Widerstand**.

Beispiel III - Phasen eines magnetischen Materials

Ferromagneten sind bei unterschiedlichen Temperaturen

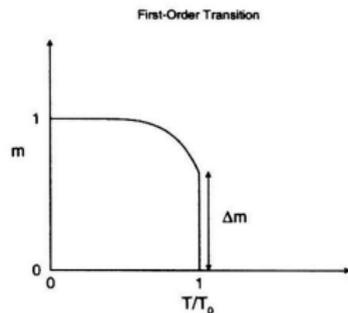
- ferromagnetisch
- paramagnetisch

Der Ordnungsparameter bei magnetischen Phasen ist die **Magnetisierung**.

Phasenübergänge

Phasenübergang erster Ordnung

- Unstetigkeit beim Phasenübergang
- Koexistenz beider Phasen

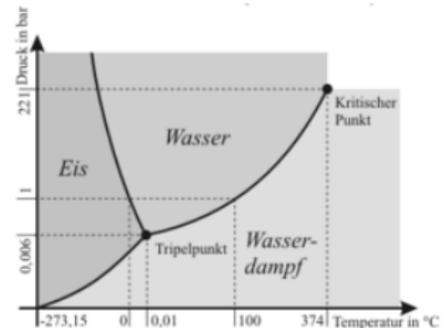


Beispiel I - Phasenübergang erster Ordnung

Wasser

- Schmelzen
- Verdampfen
- Sublimieren

Bei allen genannten Vorgängen muss dem Stoff latente Wärme zugeführt werden.



Beispiel II - Phasenübergang erster Ordnung

Supraleitung

von der normalleitenden in die
supraleitende Phase

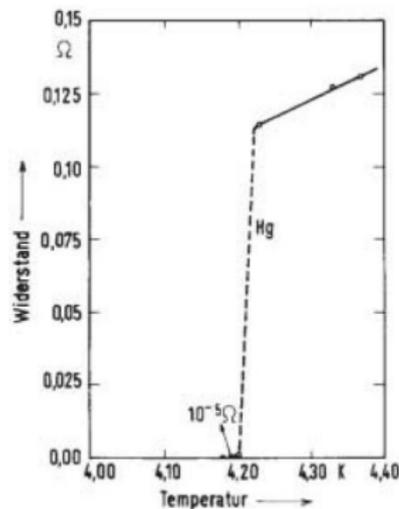


Abbildung: R-T-Diagramm von
Quecksilber

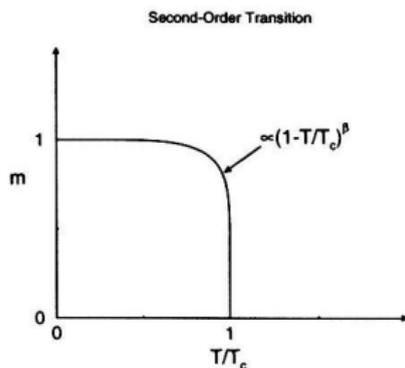
Phasenübergänge

Phasenübergang zweiter Ordnung

Verlauf des Ordnungsparameters ist stetig.

Beispiel: Ferromagnet im Magnetfeld

ferromagnetische Phase \rightarrow paramagnetische Phase



Motivation

Problem

- kurzreichweitige WW zwischen Teilchen
- langreichweitige Ordnung

Wie kommt die Ordnung zustande?

Weshalb gibt es Phasenübergänge?

Ising-Modell - Annahmen - 1

Ziel

- Verstehen der Phasenübergänge auf mikroskopischer Ebene
- Anwendung auf andere Arten von Phasenübergängen

Dimension

zweidimensionales Material in der x-y-Ebene

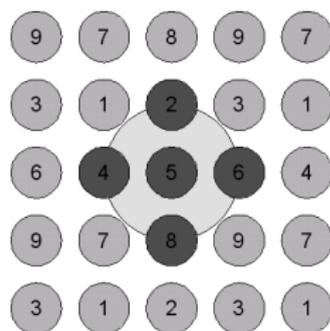
Spinrichtung

Spin ± 1 in z-Richtung

Ising-Modell - Annahmen - 2

Gitter mit n Punkten

- periodische Randbedingungen
- Beeinflussung nur durch nächste Nachbarn
- $\{\sigma_i\}$: Spinkonfiguration



Energiebetrachtung

Hamilton Operator

$$H[\{\sigma_i\}] = -B \sum_{\alpha} \sigma_{\alpha} - J \sum_{\langle \alpha \beta \rangle} \sigma_{\alpha} \sigma_{\beta}$$

Parallele Ausrichtung der Spins zueinander wird bevorzugt.

⇒ Streben zur Ordnung

Regeln der Thermodynamik

Wahrscheinlichkeit für das Auftreten eines Zustands

$$\omega(\{\sigma_i\}, T) = \frac{\exp(-H[\{\sigma_i\}]/T)}{Z}$$

Zustandssumme

$$Z = \sum_{\{\sigma_i\}} \exp(-H[\{\sigma_i\}]/T) \Rightarrow \sum_{\{\sigma_i\}} \omega[\{\sigma_i\}] = 1$$

$\omega(\{\sigma_i\}, T \rightarrow \infty) \approx \text{const}$
 \Rightarrow Streben zur Unordnung

Erwartungswerte

Ordnungsparameter: Magnetisierung

$$M(\{\sigma_i\}) = \sum_{\alpha} \sigma_{\alpha}$$

Erwartungswerte

$$\langle M \rangle = \sum_{\{\sigma_i\}} \omega[\{\sigma_i\}] M[\{\sigma_i\}]$$

$$\langle E \rangle = \sum_{\{\sigma_i\}} \omega[\{\sigma_i\}] H[\{\sigma_i\}]$$

Idee der Meanfield Näherung

Hamilton Operator

$$\begin{aligned}
 H[\{\sigma_i\}] &= -B \sum_i \sigma_i - J \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \cdot \sigma_j \\
 &\approx -B \sum_i \sigma_i - J \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \langle \sigma \rangle \\
 &= -(B + 4J \langle \sigma \rangle) \sum_j \sigma_j
 \end{aligned}$$

Importance Sampling

Problem

- 50×50 Gitter
- $2^{50 \times 50} \approx 10^{753}$ Summanden
- Zufällige Konfigurationsauswahl reicht nicht

Lösung

- Auswahl der Konfigurationen anhand des Boltzmann Faktors

$$P^{eq}[\{\sigma_i\}] = \frac{e^{-\beta H[\{\sigma_i\}]}{Z}$$

Markov Kette

Definition

Markov Kette

$$\dots \xrightarrow{W} \{\sigma_i\} \xrightarrow{W} \{\sigma'_i\} \xrightarrow{W} \{\sigma''_i\} \xrightarrow{W} \dots$$

- $W(\{\sigma_i\} \rightarrow \{\sigma'_i\}) \geq 0$ für alle $\{\sigma_i\}, \{\sigma'_i\}$
- $\sum_{\{\sigma'_i\}} W(\{\sigma_i\} \rightarrow \{\sigma'_i\}) = 1$ für alle $\{\sigma_i\}$
- $\sum_{\{\sigma_i\}} W(\{\sigma_i\} \rightarrow \{\sigma'_i\}) P^{eq}[\{\sigma_i\}] = P^{eq}[\{\sigma'_i\}]$ für alle $\{\sigma'_i\}$

Local Update Algorithmen

Heat-Bath

- Wähle zufälligen Spin
- Gesamtenergie

$$H = \text{const} - \beta h_0 \sigma_0$$

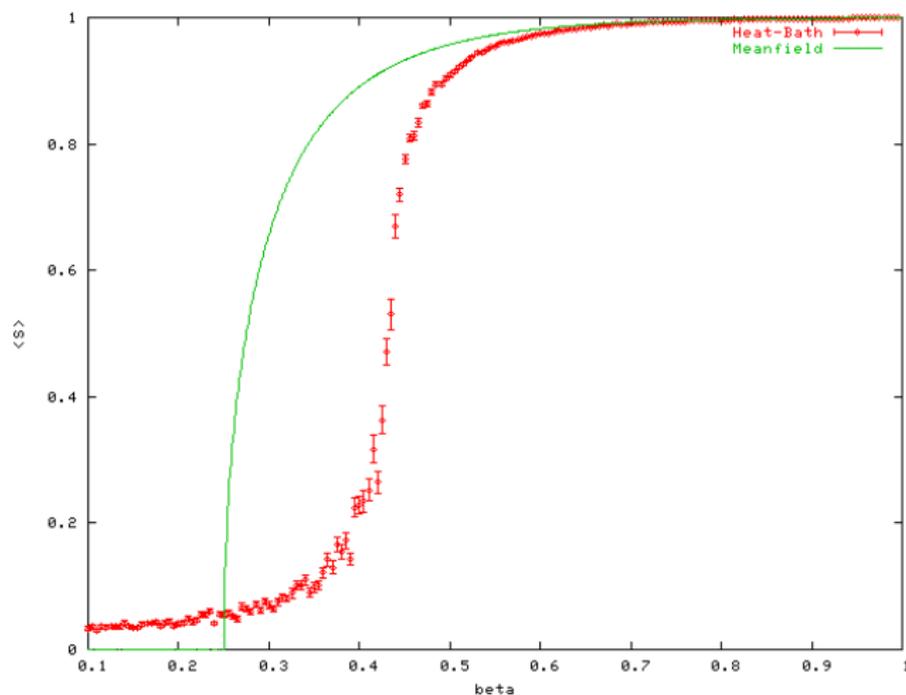
$$h_0 = \sum_{\sigma_i \in \langle \sigma_i \sigma_0 \rangle} \sigma_i + b$$

- Setze Spin mit Wahrscheinlichkeit P_{HB} auf 1, sonst auf -1

$$P_{\text{HB}}[\{\sigma_i\}] = \frac{e^{\beta h_0}}{e^{-\beta h_0} + e^{\beta h_0}}$$

```
./glade_cluster
```

Ergebnisse



Erwartungswerte

Berechnung

$$\langle O \rangle = \sum_{\{\sigma_i\}} O[\{\sigma_i\}] P^{\text{eq}}[\{\sigma_i\}] \approx \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N O[\{\sigma_i\}]_j = \tilde{O}$$

Statistisch unabhängig

$$\begin{aligned} \sigma_{\tilde{O}}^2 &= \langle \tilde{O}^2 \rangle - \langle \tilde{O} \rangle^2 \\ &= \frac{\sigma_{O_j}^2}{N} \end{aligned}$$

Statistisch abhängig

$$\begin{aligned} \sigma_{\tilde{O}}^2 &= \langle \tilde{O}^2 \rangle - \langle \tilde{O} \rangle^2 \\ &= \frac{\sigma_{O_j}^2}{N} \cdot 2\tau_{\tilde{O}, \text{int}} \end{aligned}$$

Autokorrelation

Autokorrelationszeit

$$\tau_{\tilde{O},int} = \frac{1}{2} + \sum_{j=1}^N A(j) \left(1 - \frac{j}{N}\right)$$

$$A(j) = \frac{\langle O_i O_{i+j} \rangle - \langle O_i \rangle \langle O_i \rangle}{\langle O_i^2 \rangle - \langle O_i \rangle \langle O_i \rangle}$$

$$\lim_{j \rightarrow \infty} A(j) = a e^{-j/\tau_{\tilde{O},exp}}$$

Korrelationslänge

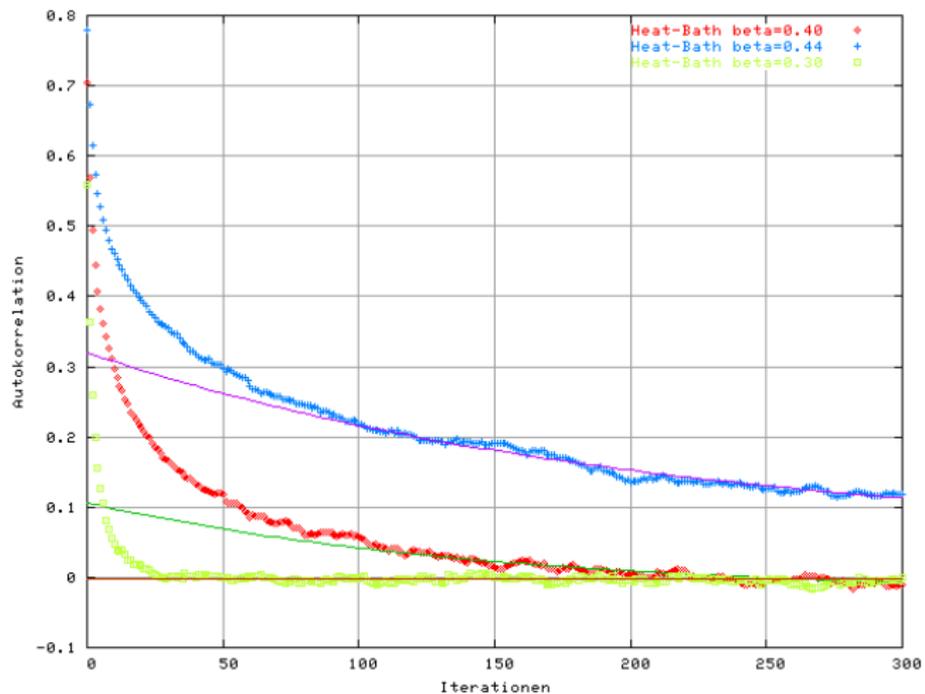
$$\xi = - \lim_{|x| \rightarrow \infty} \frac{|x|}{\ln \langle \sigma_i \cdot \sigma_j \rangle}$$

Autokorrelation

- Bei kritischem Wert β_c wächst die Korrelationslänge ξ stark an
- Autokorrelationszeit $\tau \propto \xi^z$, $z \approx 2$

```
./glade_cluster
```

Ergebnisse



Cluster Algorithmen

Zustandssumme

$$\begin{aligned}
 Z &= \sum_{\{\sigma_i\}} \exp \left(\beta \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \cdot \sigma_j \right) \\
 &= \sum_{\{\sigma_i\}} \prod_{\langle ij \rangle} e^{\beta [(1-p) + p\delta_{\sigma_i, \sigma_j}]} \quad , p = 1 - e^{-2\beta} \\
 &= \sum_{\{\sigma_i\}} \sum_{\{n_{ij}\}} \prod_{\langle ij \rangle} e^{\beta [(1-p)\delta_{n_{ij}, 0} + p\delta_{\sigma_i, \sigma_j} \delta_{n_{ij}, 1}]}
 \end{aligned}$$

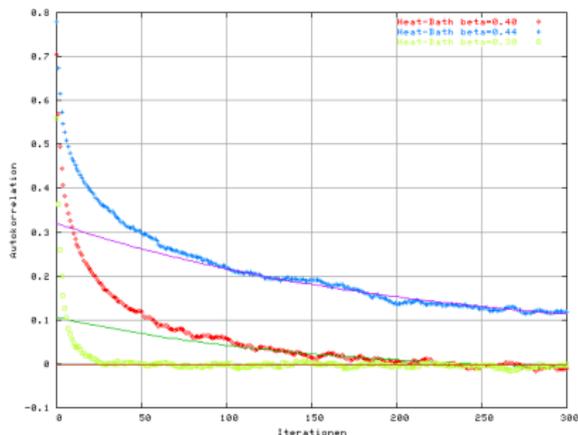
Swendsen-Wang Cluster Algorithmen

Vorgehensweise

- 1 Setze $n_{ij} = 0$ falls $\sigma_i \neq \sigma_j$
Sonst setze $n_{ij} = 1$ bzw 0 mit der Wahrscheinlichkeit p bzw $1 - p$
- 2 Finde zusammenhängende Cluster
- 3 Setze jedes Cluster zufällig auf ± 1

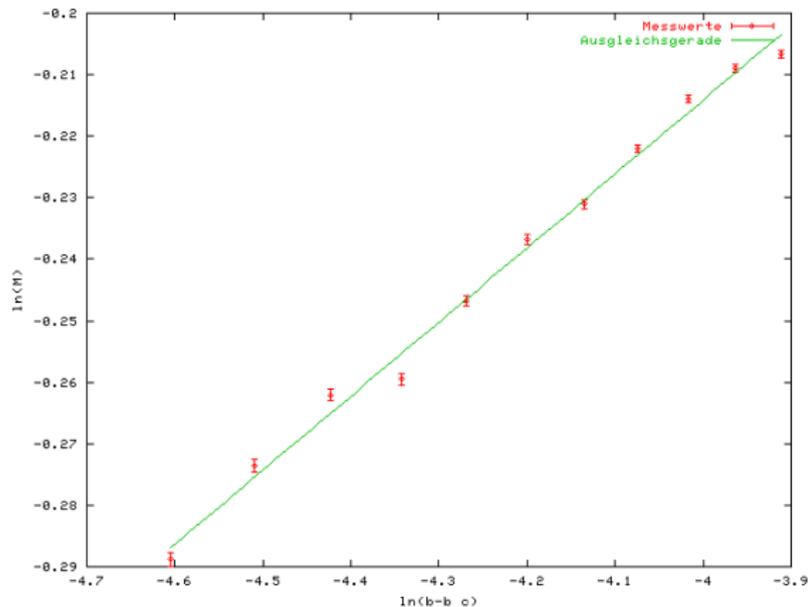
Autokorrelation

- Autokorrelationszeit nur noch $\tau \propto \xi^z$, $z \approx 0.35$
- 50×50 Gitter: Reduktion der Iterationen um Faktor 600



```
./glade_cluster
```

Kritischer Exponent



Swendsen-Wang

$$\beta = 0.120 \pm 0.006$$

Onsager

$$\beta = 0.125$$

Barkhausen Effekt

Heat Bath Algorithmus

1 Spin/Iteration, 1600 Iterationen/s, Sampling=8000/s

Cluster Algorithmus

1 Cluster/Iteration, 1600 Iterationen/s, Sampling=8000/s

[stop]

Literatur



KURT LANGFELD. *Ising Modell. Monte-Carlo Sampling auf dem Gitter, Phasenübergänge*
<http://www.tat.physik.uni-tuebingen.de/~kley/lehre/cp-prakt/projekte/projekt2.pdf>



H. KAMERLINGH ONNES. *1911: The Superconductivity of Mercury.*
Comm. Phys. Lab. Univ. Leiden, 199,120b,122b and 124c



L. ONSAGER. *Crystal Statistics. A two-dimensional model with an order-disorder transition*
Physical Review 65, 177-149



WOLFHARD JANKE. *Monte Carlo Simulations of Spin Systems.*
Institut für Physik, Johannes Gutenberg-Universität Mainz



THE WHOLE WORLD. *Wikipedia.*
<http://wikipedia.org>.