

Isingův model

$$H^{\text{Ising}}(\{s\}) = -J \sum_{\langle i, j \rangle} s_i s_j - h \sum_i s_i$$

Motivován studiem fázových
přechodů a kritických jevů

Užíva se popis pomocí
magnetických veličin

Vlastnosti pomocí partiční sumy

$$H^{Ising}(s) = -J \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j - h \sum_i s_i$$

$$s_i \in \{-1, 1\}$$

$J > 0$ feromagnet

+++++

$J < 0$ antiferomagnet

+ - + - + -

$$Z^{(Ising)} = \sum_C e^{-\beta H(C)} = \sum_{s_1=-1}^1 \dots \sum_{s_N=-1}^1 e^{-\beta H^{(Ising)}(s)}$$

$$\beta = \frac{1}{k_B T}$$

magnetizace

$$M = \sum_{s_1} \dots \sum_{s_N} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N s_i e^{-\beta H(s)}$$

volná energie

$$F = -\frac{1}{\beta} \log Z \quad \text{etc.}$$

počítej: měrné teplo, susceptibilitu etc.

Isingův model

Historie

1920 formulace W. Lenz

1925 vyřešen Isingem v 1D

1944 exaktní řešení v 2D bez vnějšího pole – Onsager

1989 exaktní řešení v 2D s vnějším polem

3D

Není exaktní řešení jen aproximativní analytické řešení nebo
numerické simulace.

Chceme určit vlastnosti případně srovnat
jinými modely resp. s experimentem.

Počítáme:

- měrné teplo,
- susceptibilitu,
- spin-spinovou korelační funkci,
- kritickou teplotu
- kritické exponenty

Vlastnosti Isingova modelu

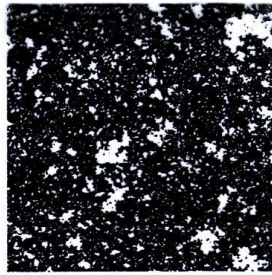
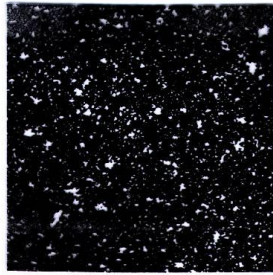
V $d=2,3$ existuje kritický bod T_c .

Exaktní výsledek pro dvou-dimenzionální model (Onsager)

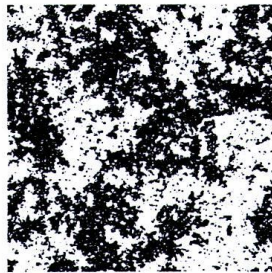
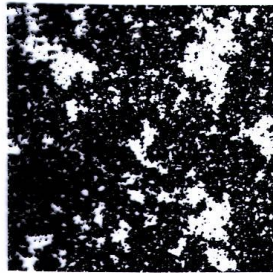
$$T_c = 2J/k_B \log(1 + \sqrt{2}) \approx 2,269 J/k_B$$

Pro $T < T_c$ má Isingův model se změnou H fázový přechod prvního druhu v bodě $H = 0$.

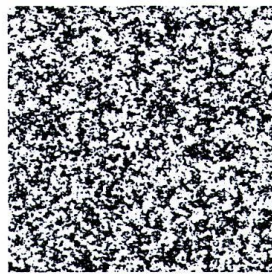
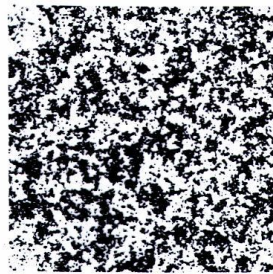
Magnetizace, měrné teplo C_v a susceptibilita χ , ... mají mocninnou singularitu při $T \rightarrow T_c$



$T < T_c$



T_c



$T > T_c$

Konfigurace Isingova modelu pro různé teploty, hodnota spinu (+-1) je zobrazena černým resp. bílým bodem.

Všimněte si velikosti domén stejně orientovaných spinů. Pro vývoj v okolí T_c je třeba měnit velké domény.

Růst velikosti domén v okolí T_c též naznačuje divergenci pro nekonečný systém v T_c .

Figure 1.10 As the temperature of the two-dimensional Ising model (see §3.1.1) is increased from near zero (top left), the typical size of the white regions, in which the order parameter differs from the background value, steadily increases until at a critical temperature T_c the white and black regions on average occupy equal areas (middle right panel). As the temperature is increased still further, the black and white regions become smaller and more numerous, generating a pepper-and-salt effect (lower right). The correlation length ξ offers a measure of the size of a typical white region. At the critical temperature $\xi = \infty$ because the biggest white region contains an infinite number of lattice points. From top left to bottom right $T/T_c = 0.97, 0.99, 1, 1.01, 1.06, 1.15$. Each square is 512 spins on a side and periodic boundary conditions have been imposed. The Wolff algorithm (see §4.6.4) was used to relax the system to thermal equilibrium.

Celkový algoritmus pro Isingův model

volba parametrů

- fyzikální parametry: J , h , T
- parametry simulace: L , N_{totMC} , $N_{\text{měř}}$, N_{run}

FOR $m=1$ TO N_{run} DO

..... cyklus přes nezávislé běhy

FOR $k=1$ TO N_{totMC} DO

..... MC výpočet

1 MC cyklus = 1 MC krok „s každým spinem“

IF $k \bmod N_{\text{měř}} = 0$ THEN

J-té měření, $J=k/N_{\text{měř}}$

středování přes běhy

END DO

J-té měření

počítané veličiny: (index $J=k/N_{\text{měř}}$)

▪ energie: $\mathbf{E}(J) = \mathbf{H}(\{\mathbf{s}\}^k)$

▪ magnetizace: $M(J) = \frac{1}{N_{\text{spin}}} \sum_{i=1}^{N_{\text{spin}}} S_i^k$

po n měřeních se použije pro výpočet střední hodnoty $\langle X \rangle$ pomocí:

$$\langle X_n \rangle = \frac{1}{n} \sum_{J=1}^n X(J)$$

$$X = \mathbf{E}, \mathbf{M}$$

Metropolisova MC simulace spinového modelu

1 MC cyklus = 1 MC krok „s každým spinem“

v k-tém kroku máme konfiguraci $\mathcal{S}^{(k)}$

1. vyber uzel I (náhodně nebo sekvenčně)
2. obrať spin $s_I^{\text{zkus}} \rightarrow \mathcal{S}^{\text{zkus}}$
3. spočti

$$\Delta E = H(\mathcal{S}^{\text{zkus}}) - H(\mathcal{S}^{(k)})$$

4. generuj náhodné číslo $u_{(0,1)}$
5. srovnej $u_{(0,1)}$ a $p = \exp\{-\beta\Delta E\}$
 $u_{(0,1)} \leq p$ pak $\mathcal{S}^{(k+1)} = \mathcal{S}^{\text{zkus}}$
 $u_{(0,1)} > p$ pak $\mathcal{S}^{(k+1)} = \mathcal{S}^{(k)}$

Pokud $\Delta E < 0$ pak změna je vždy přijata.
Nemusí se generovat náhodné číslo.

Metropolisova MC simulace 2D spinového modelu

```
INTEGER L velikost hrany mřížky  
SPINTYPE s[1..L,1..L] konfigurace sij; SPINTYPE je typ spinové proměnné  
REAL u(SPINTYPE s1,s2) funkce vracející interakční energii nejbližších sousedů  
INTEGER i, j  
INTEGER plus[1..L], minus[1..L] indexy sousedů  
REAL Uzkus, U
```

Předem: indexy sousedů

periodické hraniční podmínky

```
FOR i := 1 TO L-1 DO plus[i] := i+1  
plus[L] := 1  
FOR i := 2 TO L DO minus[i] := i-1  
minus[1] := L
```

jeden cyklus MC simulace (1 MC krok s každým spinem)

1 MC cyklus = 1 MC krok „s každým spinem“

```
FOR i := 1 TO L DO  
  FOR j := 1 TO L DO  
    zkušební změna spinu na vrchole i  
    SPINTYPE szkus  
    szkus := {nová náhodná hodnota}  
    jiná možnost: szkus := s[i,j] + {malá symetrická změna}  
    pro dvoustavový Isingův feromagnet stačí: szkus := -s[i,j]
```

výpočet staré a nové energie: součet přes všechny nejbližší sousedy

```
U := u(s[i,j],s[plus[i],j]) + u(s[i,j],s[minus[i],j])  
  + u(s[i,j],s[i,plus[j]]) + u(s[i,j],s[i,minus[j]])  
Uzkus := u(szkus,s[plus[i],j]) + u(szkus,s[minus[i],j])  
  + u(szkus,s[i,plus[j]]) + u(szkus,s[i,minus[j]])
```

Metropolisův test; k je Boltzmannova konstanta

```
IF rnd() < exp(-(Uzkus-U)/(k*T)) THEN  
  konfigurace přijata  
  s[i,j] := szkus
```

Předem: indexy sousedů

```
FOR i := 1 TO L-1 DO plus[i] := i+1  
plus[L] := 1  
FOR i := 2 TO L DO minus[i] := i-1  
minus[1] := L
```

jeden cyklus MC simulace (1 MC krok s každým spinem)

```
FOR i := 1 TO L DO    1 MC cyklus = 1 MC krok „s každým spinem“  
  FOR j := 1 TO L DO
```

zkusební změna spinu na vrcholu i

SPINTYPE szkus

szkus := {nová náhodná hodnota}

jiná možnost: szkus := s[i,j] + {malá symetrická změna}

pro dvoustavový Isingův feromagnet stačí: szkus := -s[i,j]

výpočet staré a nové energie: součet přes všechny nejbližší sousedy

```
U := u(s[i,j],s[plus[i],j]) + u(s[i,j],s[minus[i],j])  
    + u(s[i,j],s[i,plus[j]]) + u(s[i,j],s[i,minus[j]])  
Uzkus := u(szkus,s[plus[i],j]) + u(szkus,s[minus[i],j])  
    + u(szkus,s[i,plus[j]]) + u(szkus,s[i,minus[j]])
```

Metropolisův test; k je Boltzmannova konstanta

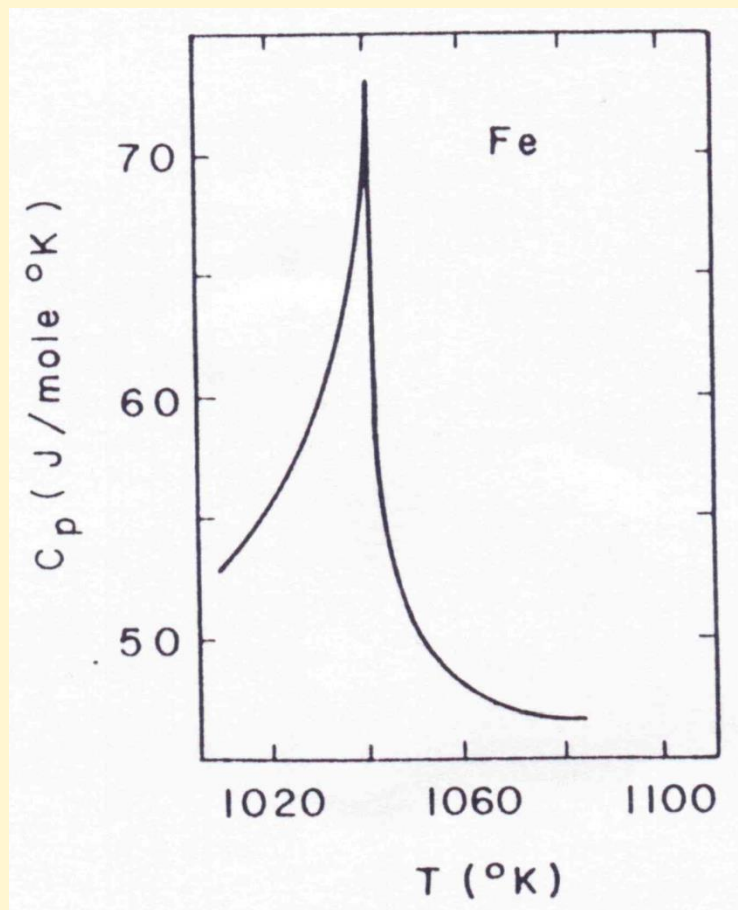
```
IF rnd() < exp(-(Uzkus-U)/(k*T)) THEN
```

konfigurace přijata

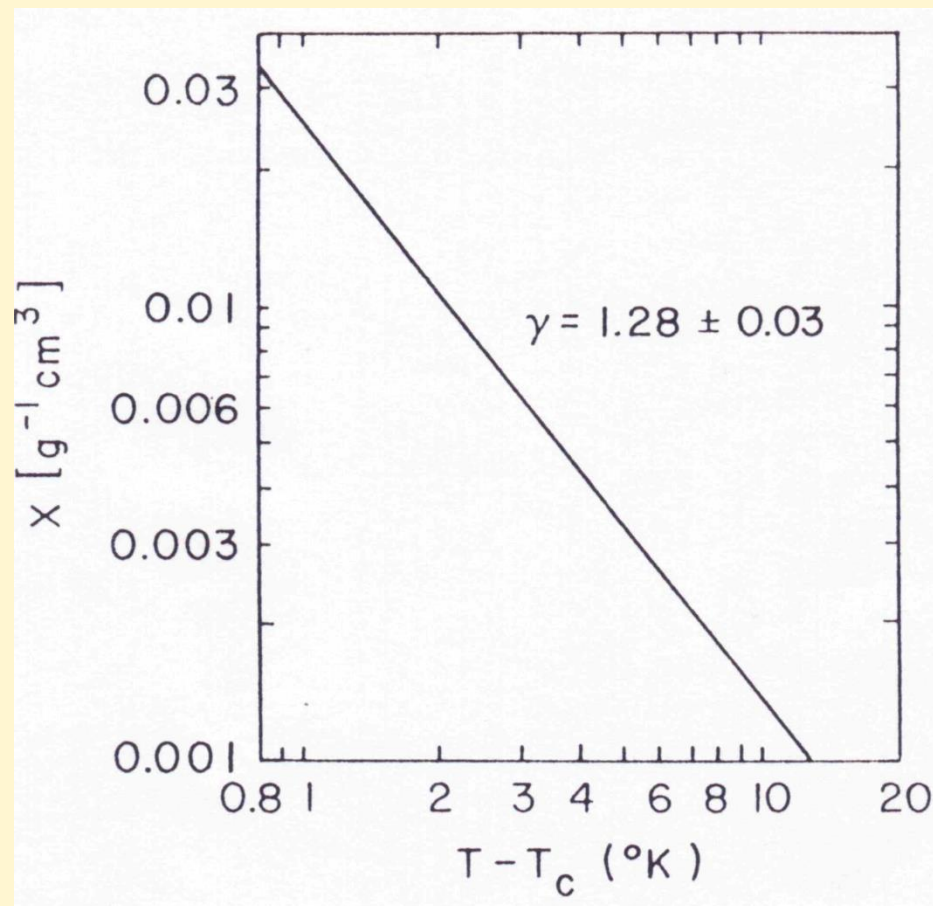
```
s[i,j] := szkus
```

Experimentální výsledky pro kritické jevy: mocninná divergence

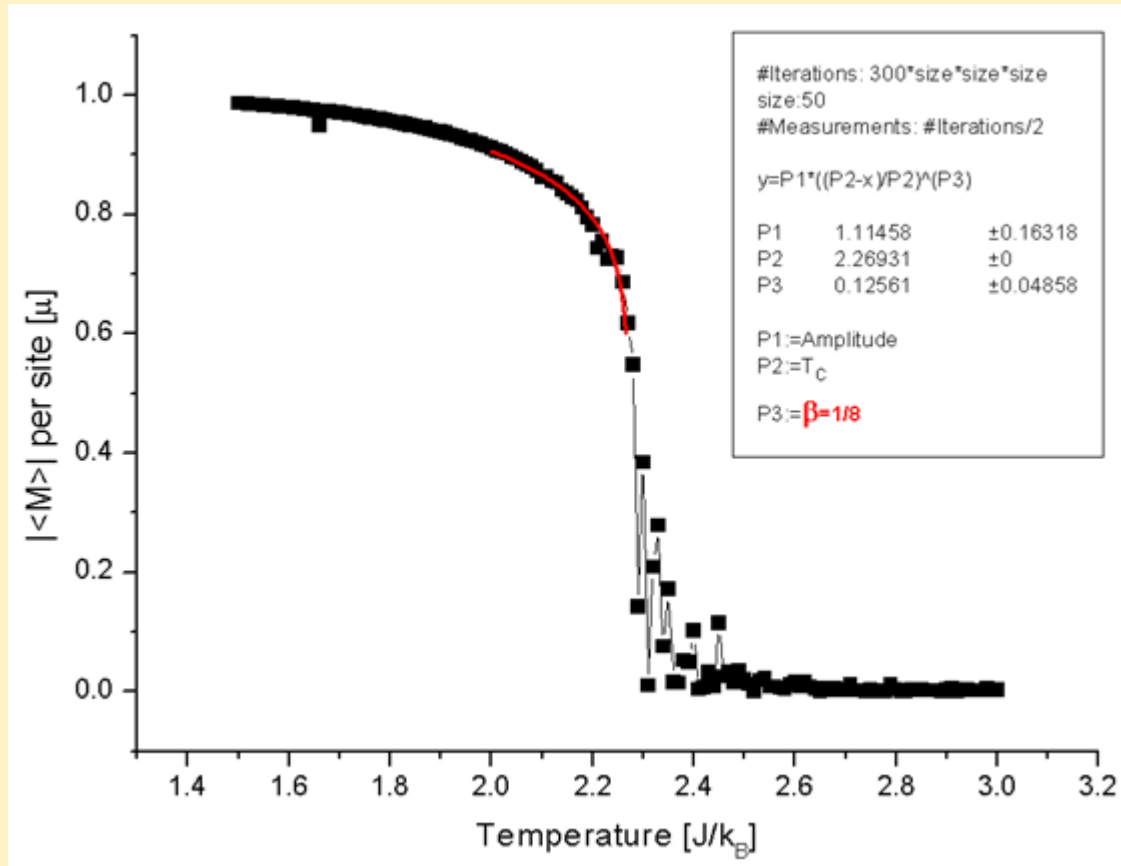
měrné teplo



susceptibilita v log-log měřítku



Simulace vymizení magnetizace v T_c



Jak počítáme:

- měrné teplo,
- susceptibilitu

$$U = \langle E \rangle = \sum_A A \exp[-\beta H(A)] / Z,$$

$$Z = \sum_A A \exp[-\beta H(A)]$$

$$C = \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial T} = k_B \beta^2 \frac{\partial^2 \log Z}{\partial \beta^2}$$

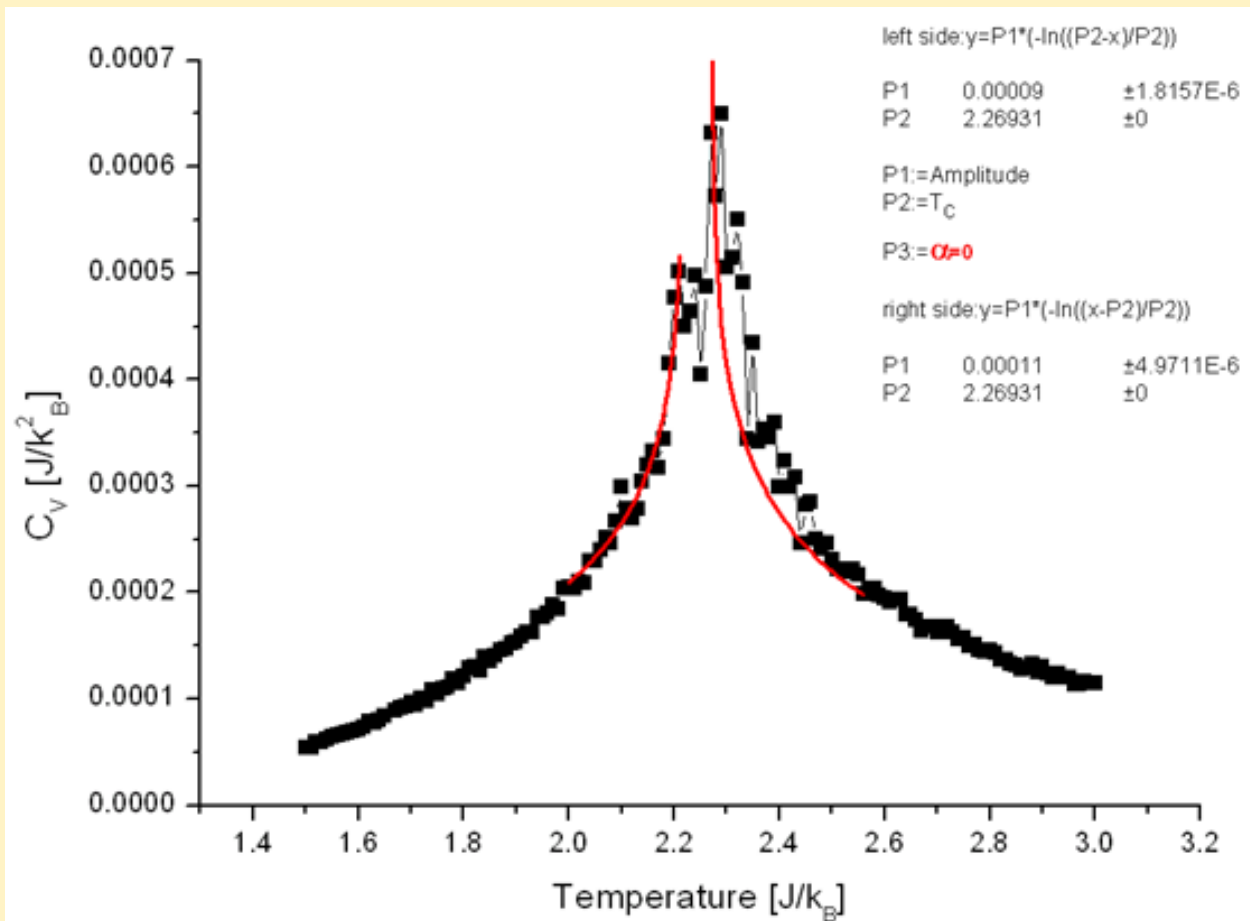
měříme fluktuace energie

$$C = k_B \beta^2 \left(\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2 \right)$$

v bezrozměrných jednotkách počítáme:

- měrné teplo

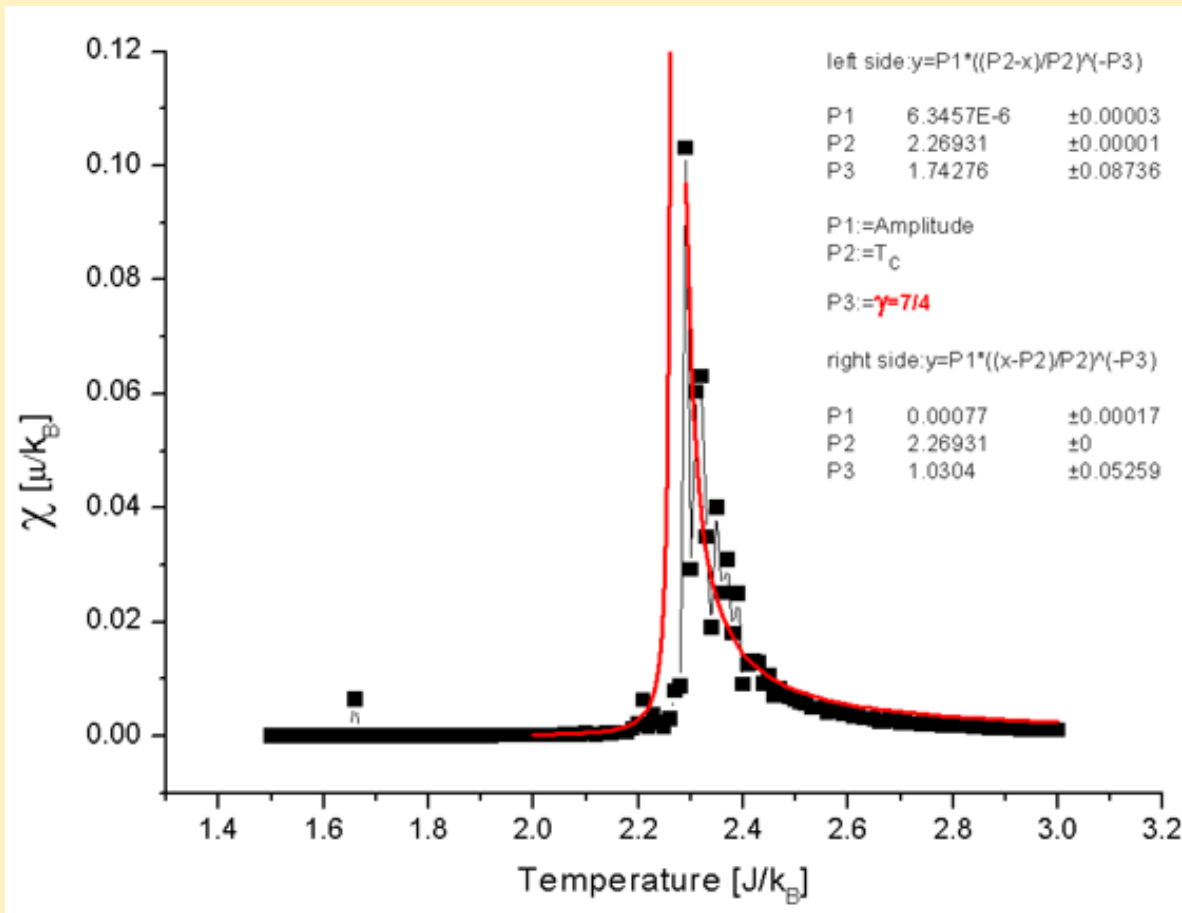
$$C_V = \frac{1}{T^2} \left(\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2 \right)$$



v bezrozměrných jednotkách počítáme:

- susceptibilitu

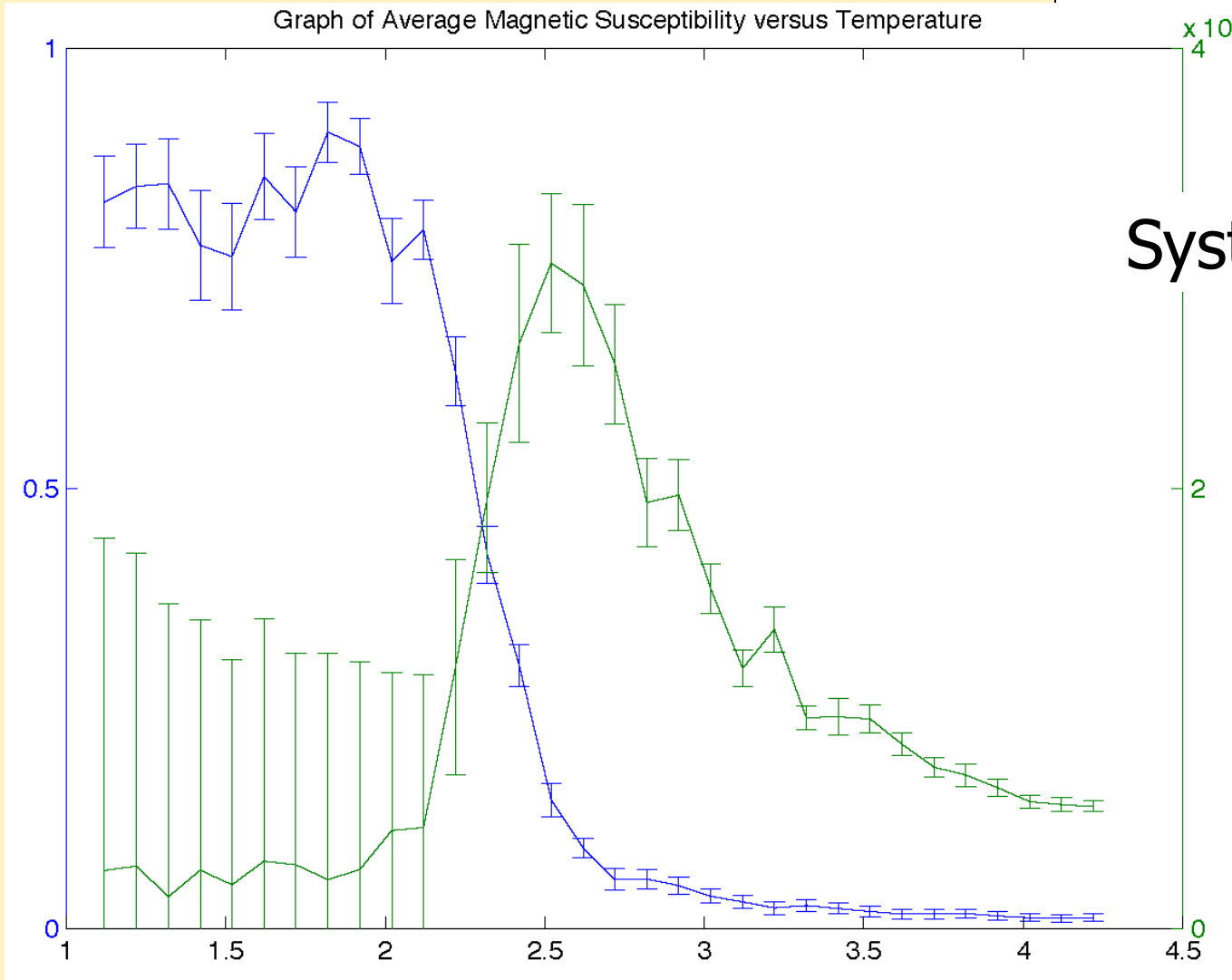
$$\chi = \frac{1}{T} \left(\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2 \right)$$



Úloha p. Brandejs v bezrozměrných jednotkách

- susceptibilitu

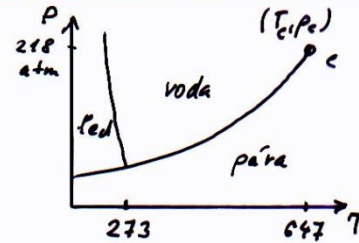
$$\chi = \frac{1}{T} \left(\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2 \right)$$



System 40x40

FÁZOVÝ PŘECHOD KAPALINA - PÁRA

parameter uspořádaní:
hustota ρ

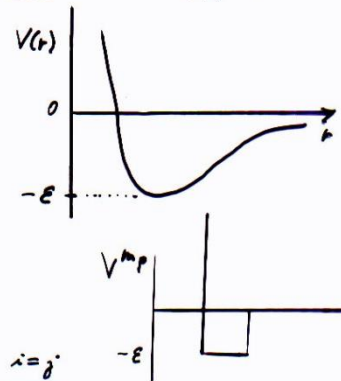


- nejjednodušší spojitý model
Lennard-Jones

$$V^{(LJ)}(r) = 4\epsilon \left[\left(\frac{r_e}{r} \right)^{12} - \left(\frac{r_e}{r} \right)^6 \right]$$

potenciální energie:

$$E = \sum_{i,j} V(\vec{r}_i - \vec{r}_j)$$



- mřížový plyn

rozděl prostor na

$$\square \leftarrow i$$

$$n_i = \begin{cases} 0 \\ 1 \end{cases} \quad i$$

$$V_{ij}^{(mp)} = \begin{cases} \infty & i=j \\ -\epsilon & i,j \text{ sousedi} \\ 0 & \text{ostatní} \end{cases}$$

$$E^{(mp)} = - \sum_{\langle ij \rangle} \epsilon n_i n_j, \quad N = \sum_i n_i, \quad \rho = \frac{1}{L^d} N$$

grand kanonická partiční suma

$$Z = \sum_{\{n_i\}} \exp \left\{ \beta \epsilon \sum_{\langle ij \rangle} n_i n_j - \mu \sum_i n_i \right\}$$

při $n_i = \frac{s_i + 1}{2}$ ekvivalentní Isingovu modelu

$$E^{(mp)} - \mu N = - \frac{\epsilon}{4} \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j - \sum_i \left(\frac{\mu}{2} + \frac{\epsilon}{4} c \right) s_i - \frac{L^d}{2} \left(\mu + \frac{\epsilon}{4} c \right)$$

c konektivita = počet nejbližších sousedů

$$J = \frac{\epsilon}{4}, \quad h = \frac{\mu}{2} + \frac{\epsilon c}{4}, \quad M = 2\rho - 1$$

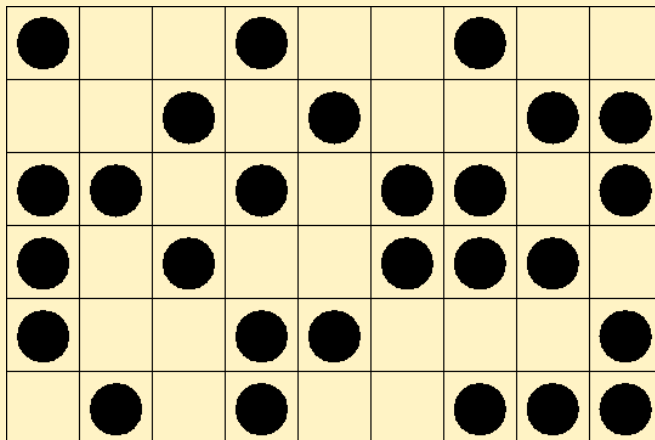
Ekvivalentní modely k Isingovovu modelu

- Mřížový plyn
- Binární slitina

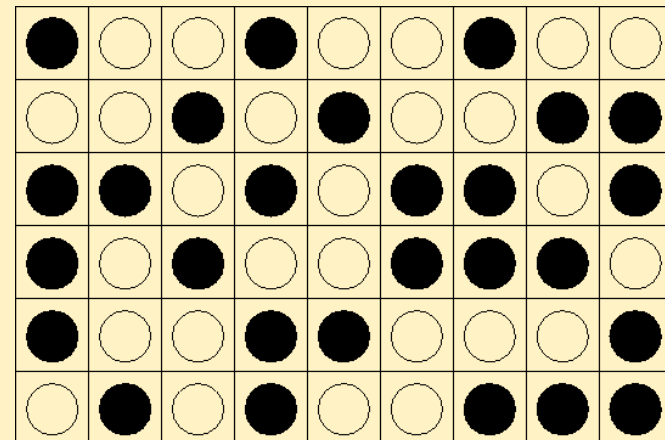
<http://borisv.lk.net/matsc597c-1997/phases/Lecture3/node3.html>

mřížový plyn

$$n = (1+s)/2$$



binární slitina



Ekvivalentní modely k Isingovovu modelu

- Mřížový plyn
- Binární slitina

korespondující parametry:

	J	H	M
mřížový plyn	$\varepsilon/4$	$\mu/2 + \varepsilon q/4$	$2\rho - 1$
binární slitina	$-\frac{1}{4}(e_{AA} + e_{BB} - 2e_{AB})$	$\frac{q}{4}(e_{AA} - e_{BB})$	$c_A - c_B$

Kritické exponenty pro Isingův model

exponent	střední pole	2 d - Onsager	3d rozvoj vysoké T
α	nespojnost	0	0.119 ± 0.006
β	$1/2$	$1/8$	0.326 ± 0.004
γ	1	$7/4$	1.239 ± 0.003
δ	3	15	5
η	$1/2$	1	0.024 ± 0.007
ν	0	$1/4$	0.627 ± 0.002

Srovnání Isingův model vs. experiment

exponent	IM - 3d	exper. data - Ni	exper. data fluid
α	0.119 ± 0.006	0.04 ± 0.12	0.101 - 0.116
β	0.326 ± 0.004	0.358 ± 0.003	0.316 - 0.327
γ	1.239 ± 0.003	1.33 ± 0.02	1.23 - 1.25
ν	0.627 ± 0.002	0.64 ± 0.1	0.625 ± 0.006

Kritické exponenty pro Isingův model

exponent	střední pole	2 d - Onsager	3d rozvoj vysoké T
α	nespojnost	0	0.119 ± 0.006
β	$1/2$	$1/8$	0.326 ± 0.004
γ	1	$7/4$	1.239 ± 0.003
δ	3	15	5
η	$1/2$	1	0.024 ± 0.007
ν	0	$1/4$	0.627 ± 0.002

Srovnání Isingův model vs. experiment

exponent	IM - 3d	exper. data - Ni	exper. data fluid
α	0.119 ± 0.006	0.04 ± 0.12	0.101 - 0.116
β	0.326 ± 0.004	0.358 ± 0.003	0.316 - 0.327
γ	1.239 ± 0.003	1.33 ± 0.02	1.23 - 1.25
ν	0.627 ± 0.002	0.64 ± 0.1	0.625 ± 0.006

**Isingův model má kritické chování
pro přechod pára-kapalina**

Kapalina s danou hustotou = Isingův model se zachovávající se magnetizací

Místo obrácení spinu podle Metropolisise
použij Kawasakiho algoritmus (1965)

1. náhodně **vyber dvojici uzlů I,J** (ze všech možných párů)
2. pokud jsou **spiny s_I a s_J** různé tak je **vzájemně vyměň** a získej
tak $\rightarrow \mathcal{S}^{\text{zkus}}$

3. spočti

$$\Delta E = H(\mathcal{S}^{\text{zkus}}) - H(\mathcal{S}^{(k)})$$

4. generuj náhodné číslo $u_{(0,1)}$
5. srovnej $u_{(1,1)}$ a $p = \exp\{-\beta\Delta E\}$

$$u_{(0,1)} \leq p \quad \text{pak } \mathcal{S}^{(k+1)} = \mathcal{S}^{\text{zkus}}$$

$$u_{(0,1)} > p \quad \text{pak } \mathcal{S}^{(k+1)} = \mathcal{S}^{(k)}$$

Kritická teplota T_c

známý výsledek:

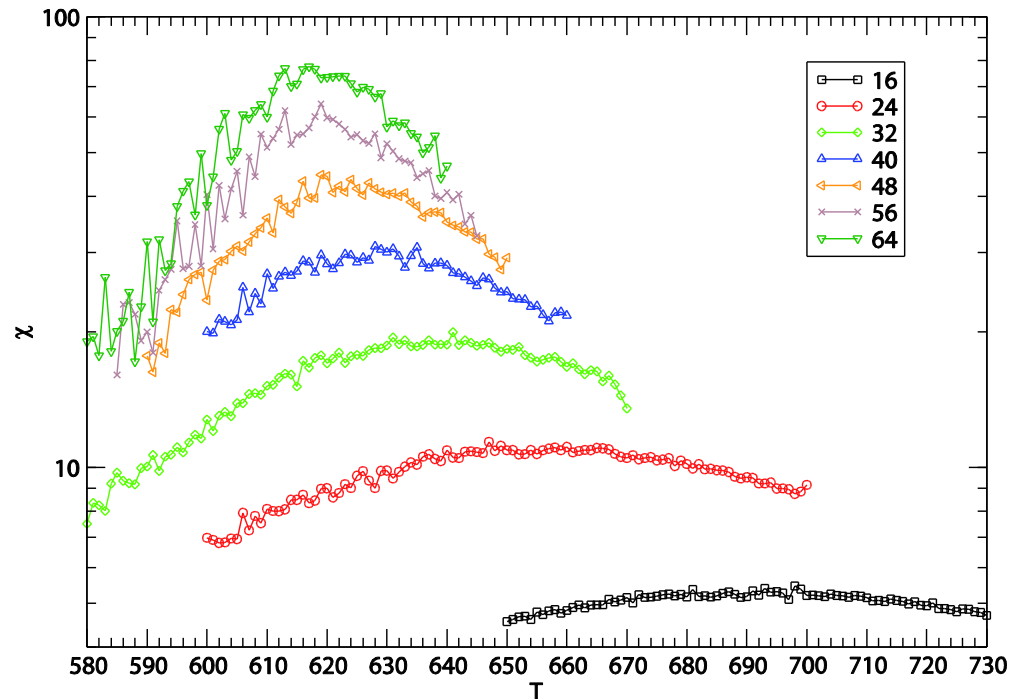
Onsager 2D

exaktní $T_c = 2J/k_B \log(1 + \sqrt{2}) \approx 2,269 J/k_B$

Kritickou teplotu určíme:

- 1) pomocí divergence, tj. maxima specifického tepla
resp. susceptibility,
- 2) pomocí Binderových kumulantů.

teplotní závislost susceptibility pro různé velikost systému

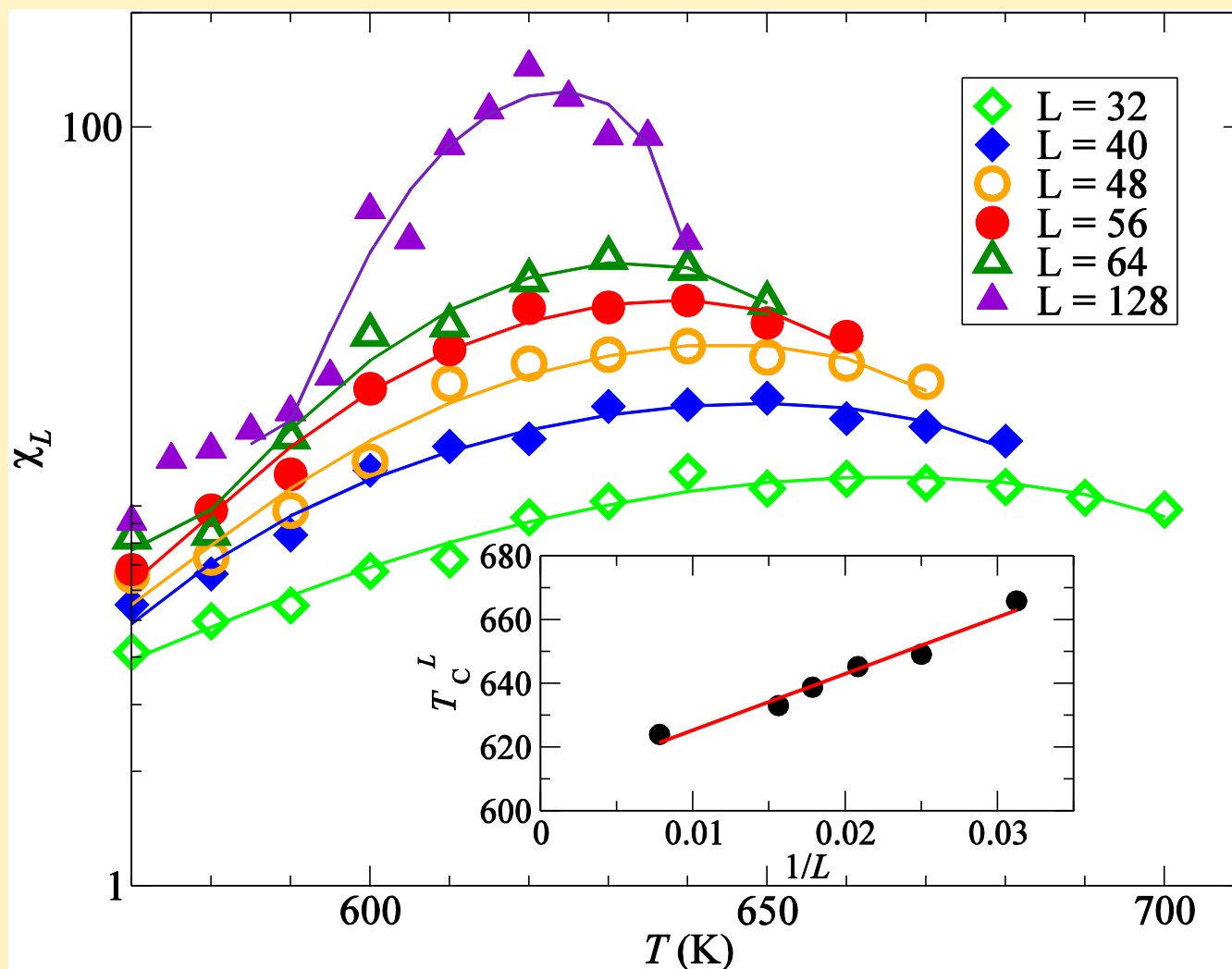


V simulacích maxima měnící se s velikostí systému.

Podobné chování pro další magnetické systémy.

reálny materiál
slitina Fe + Co
Heisenbergův model

teplotní závislost susceptibility
pro různé velikost systému



Určení kritické teploty z polohy
maxima susceptibility

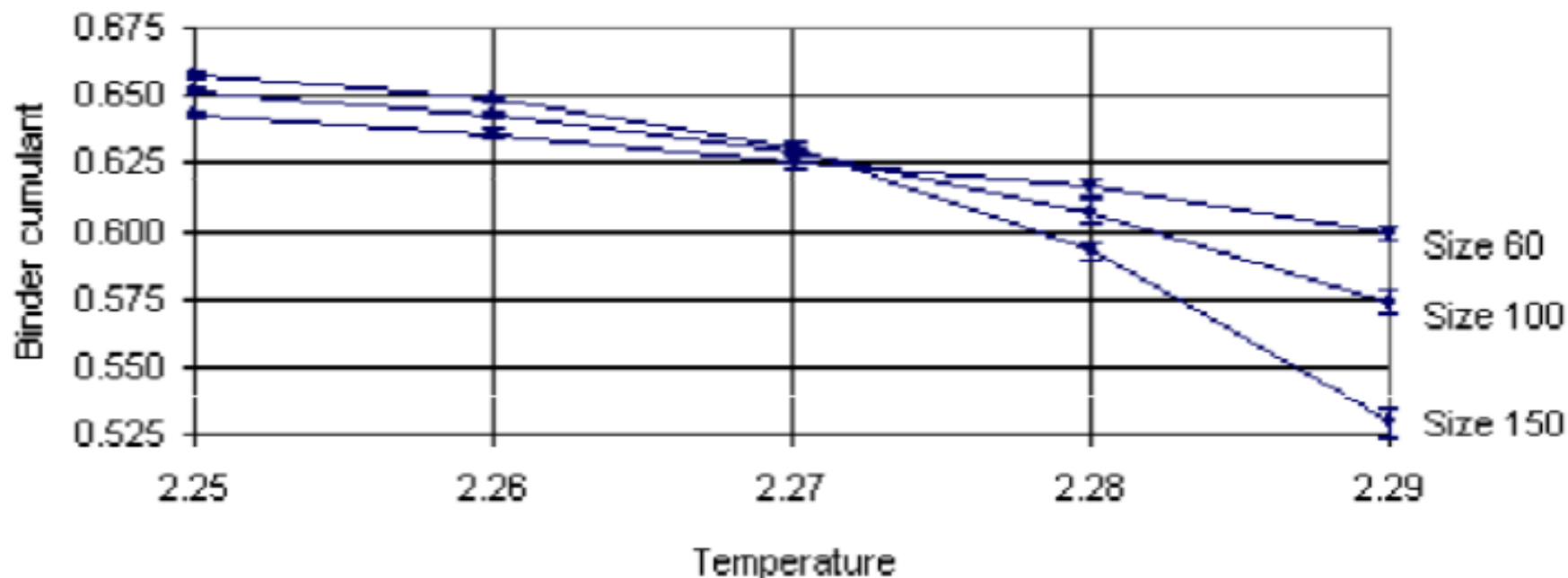
$$T_c(L) = T_c(L = \infty) + \lambda L^{-1/\nu}$$

$$\text{pro Fe} \quad 1/\nu \doteq 1,5$$

Binderův kumulant

$$U_L = 1 - \frac{\langle M^4 \rangle_L}{3 \langle M^2 \rangle_L^2} \xrightarrow{L \rightarrow \infty} \begin{cases} 0 & \text{for } T > T_c \\ \frac{2}{3} & \text{for } T < T_c \end{cases}$$

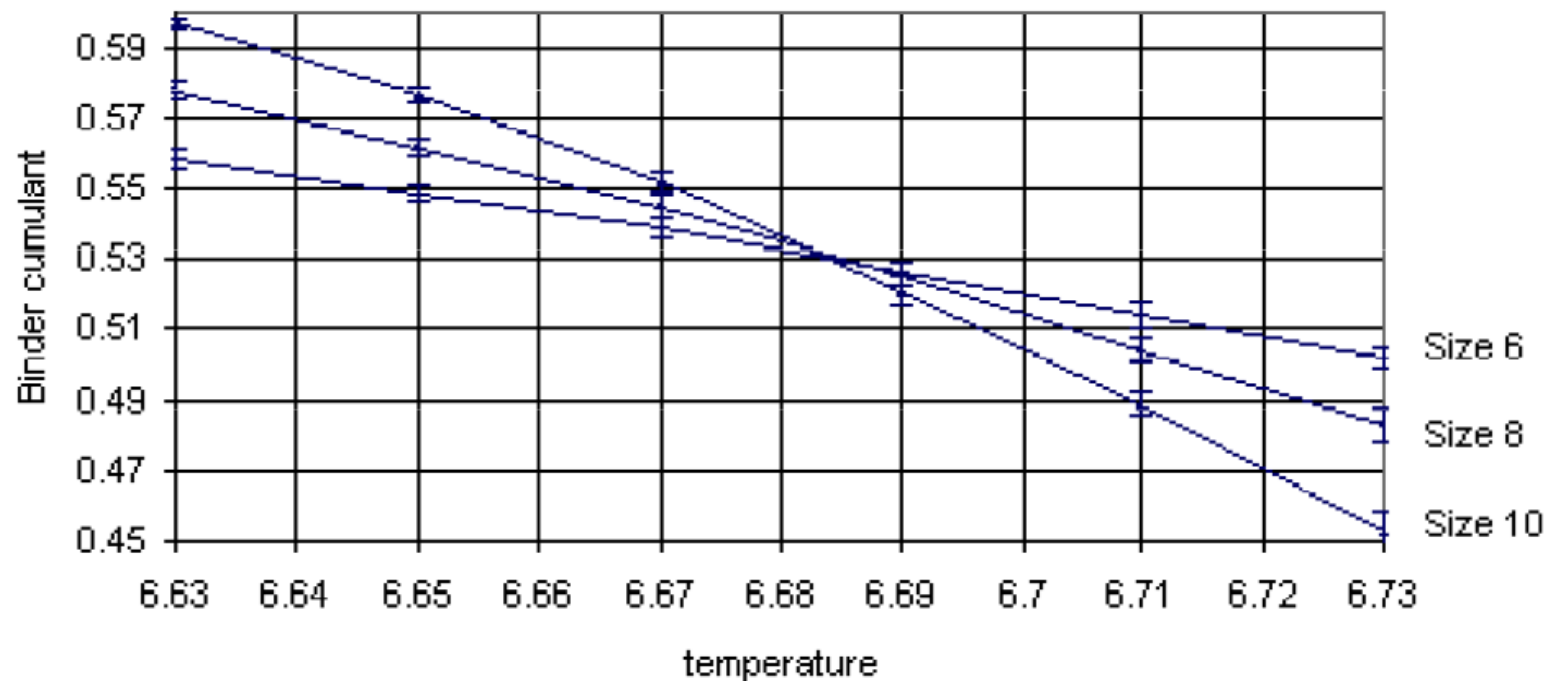
Figure 3.3.1: Ising 2d square (1000 samples)



Data implies $T_c = 2.27(1)$. Exact value is 2.269185.

Binderův kumulant

Figure 3.5.2: Binder cumulant, Ising 4d hypercubic, 4000 samples

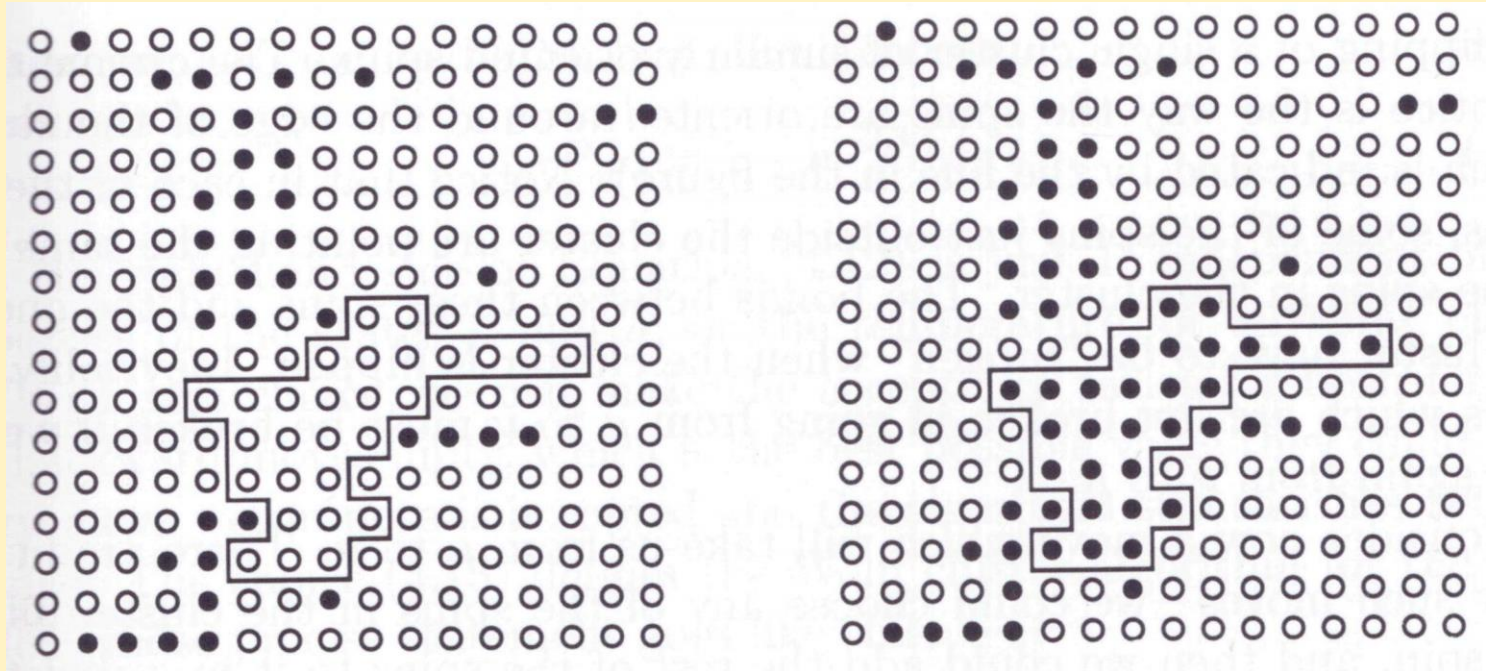


Data implies $T_c = 6.68(3)$. Cf. 6.682(2)

Herrmann ETH 2010

klastrový algoritmus

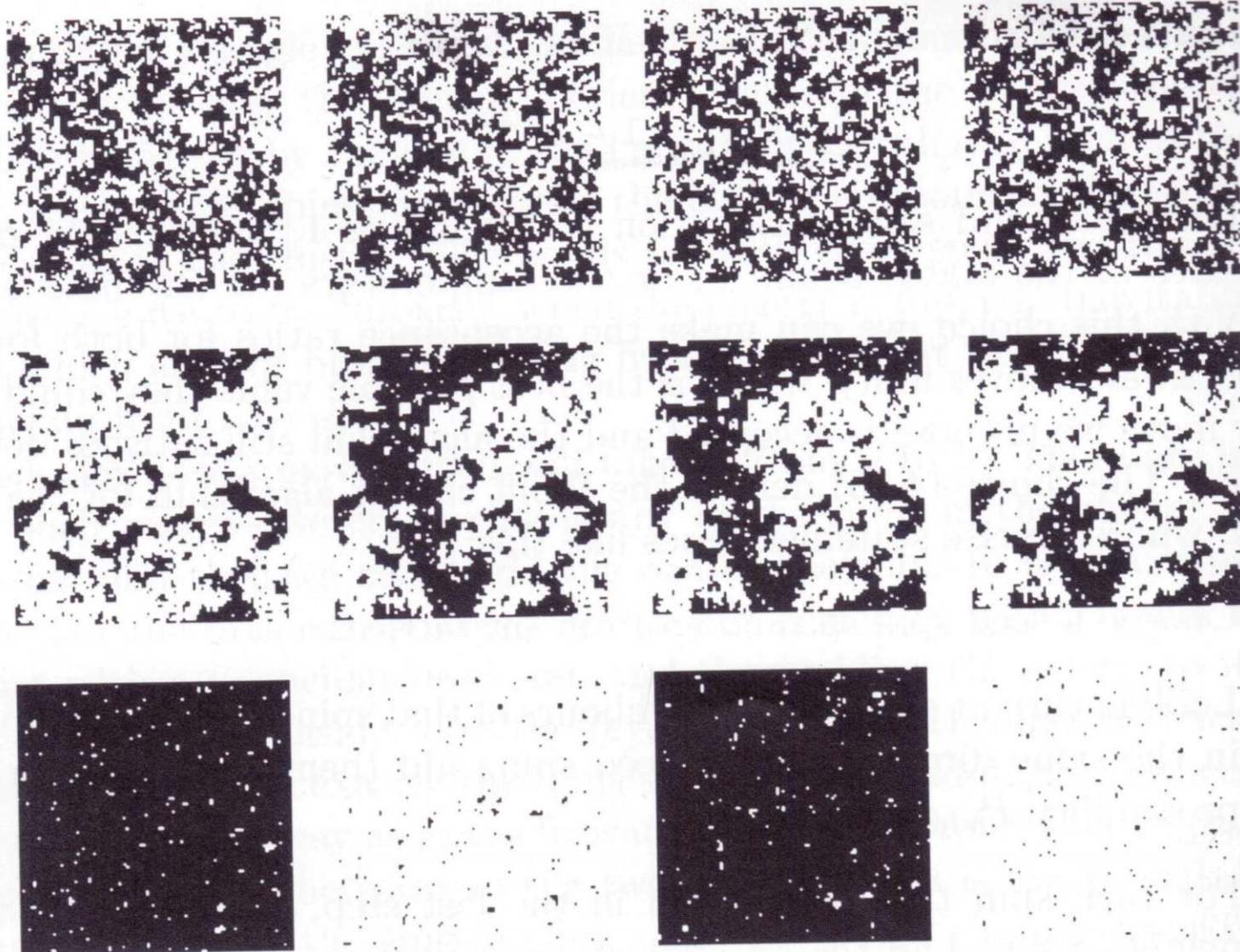
Wolfův algoritmus



Procházej okolí zvoleného spinu a částice přidávej s pravděpodobností:

$$P_{add} = 1 - e^{-2\beta J}$$

následující konfigurace u Wolfova algoritmu



Havrdová
2005

