Isingův model

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

Motivován studiem fázových přechodů a kritických jevů

Užíva se popis pomocí magnetických veličin

Vlastnosti pomocí partiční sumy

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

$s_i \in \{-1, 1\}$ $\quad J > 0$ feromagnet $\quad + + + + + +$ $\quad - - - - - -$

$J < 0$ antiferomagnet $\quad + - + - + -$

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

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

magnetizace

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

volná energie

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

počítej: měrné teplo, susceptibilitu etc.

Isingův model

Historie

1920 formulace W. Lenz
1925 vyřesen 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

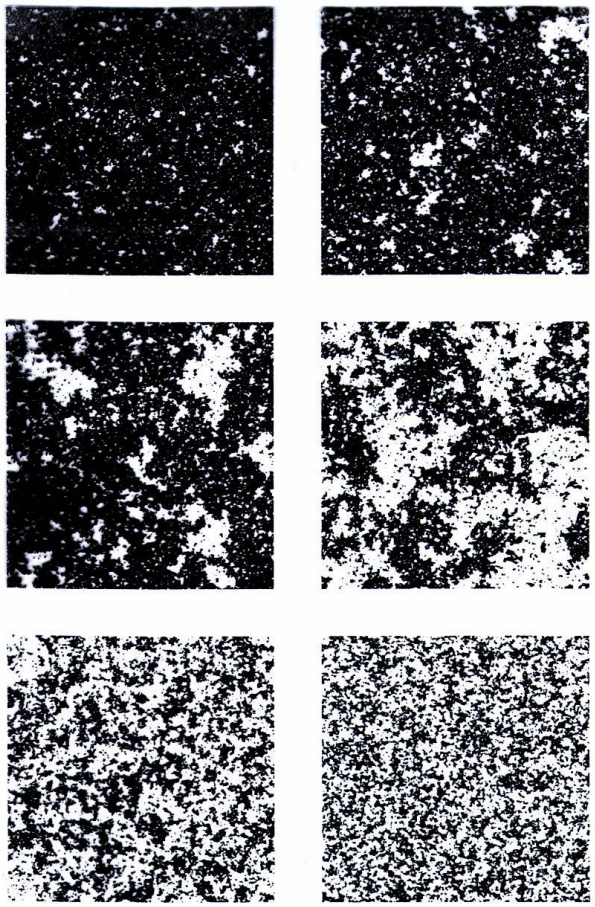
Vlastnosti Isingova modelu

V d=2,3 existuje kritický bod T_c .

Exaktní výsledek pro dvou-dimenzionální model (Onsager)
$T_c = 2J/k_B \log(1+\sqrt{2}) \simeq \mathbf{2,269}\ J/k_B$

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 $T \to T_c$



$T<T_C$

T_C

$T>T_C$

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.

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 v T_C je třeba měnit velké domény.

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

Celkový algoritmus pro Isingův model

volba parametrů

- fyzikální parametry: J, h, T
- parametry simulace: L, N_{totMC} , $N_{měř}$, 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 mod $N_{měř}$ = 0 THEN J-té měření, J=k/$N_{měř}$

středování přes běhy

END DO

J-té měření

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

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

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

po n měřeních se použije pro výpočet střední hodnoty <X> pomocí:

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

X = **E, M**

Metropolisova MC simulace spinového modelu

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

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

1. vyber uzel I (náhodně nebo sekvenčně)
2. obraťˊ spin s_I^{zkus} –> $\boldsymbol{S}^{zkus}$
3. spočti

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

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

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

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

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 s_ij; 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
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
   FOR j := 1 TO L DO
      zkušební 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
```

periodické hraniční podnímky

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

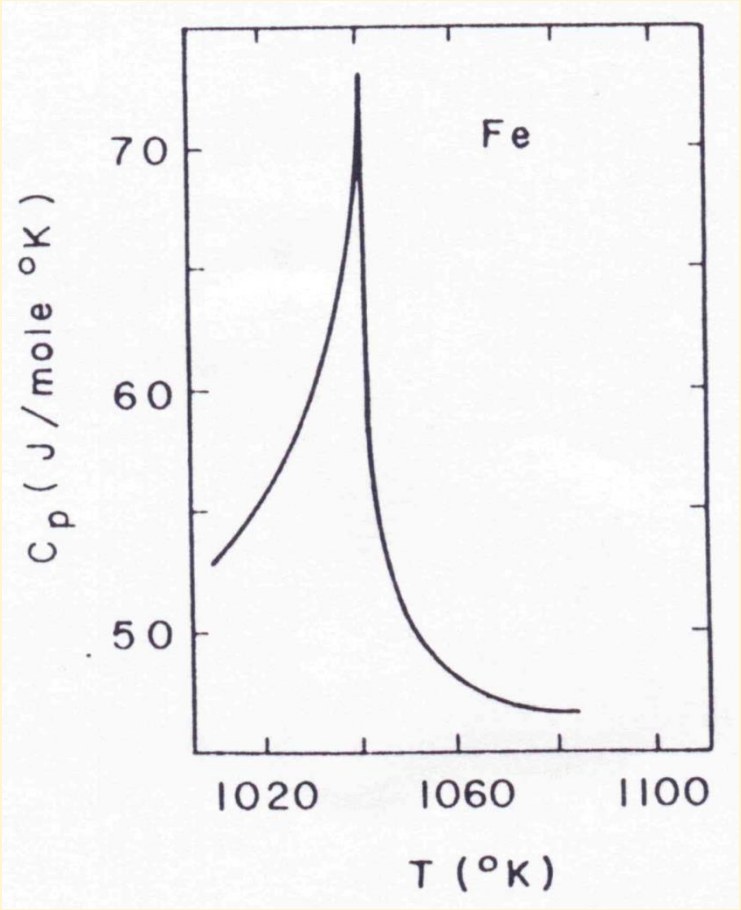
Nezbeda a kol. Karolinum, Praha 2003

```
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
   FOR j := 1 TO L DO
      zkušební 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
```

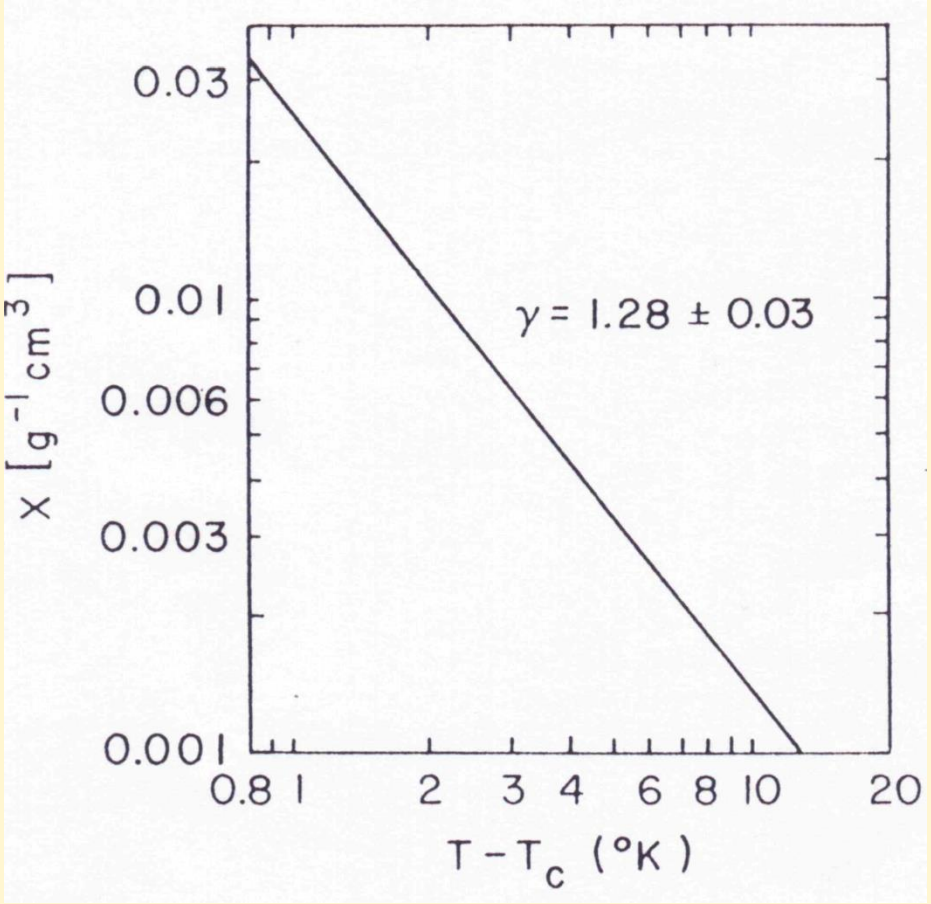
1 MC cyklus = 1 MC krok „s každým spinem“

Experimentální výsledky pro kritické jevy: mocninná divergence

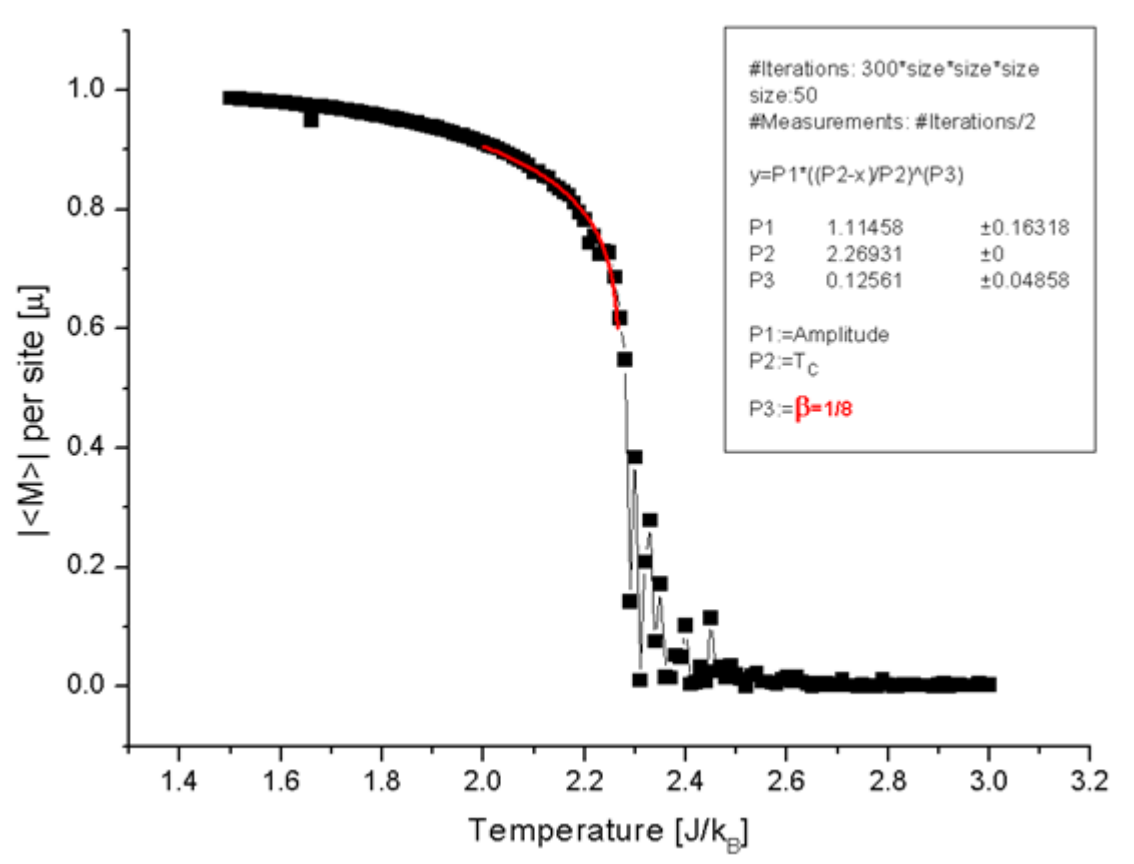
měrné teplo



susceptibilita v log-log měřítku



Vymizení magnetizace v T_c



http://quantumtheory.physik.unibas.ch/people/bruder/Semesterprojekte2007/p1/index.html

Jak počítáme:

- měrné teplo,
- susceptibilitu

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

$$Z = \sum_A \mathrm{A} \exp\left[-\beta H(A)\right]$$

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

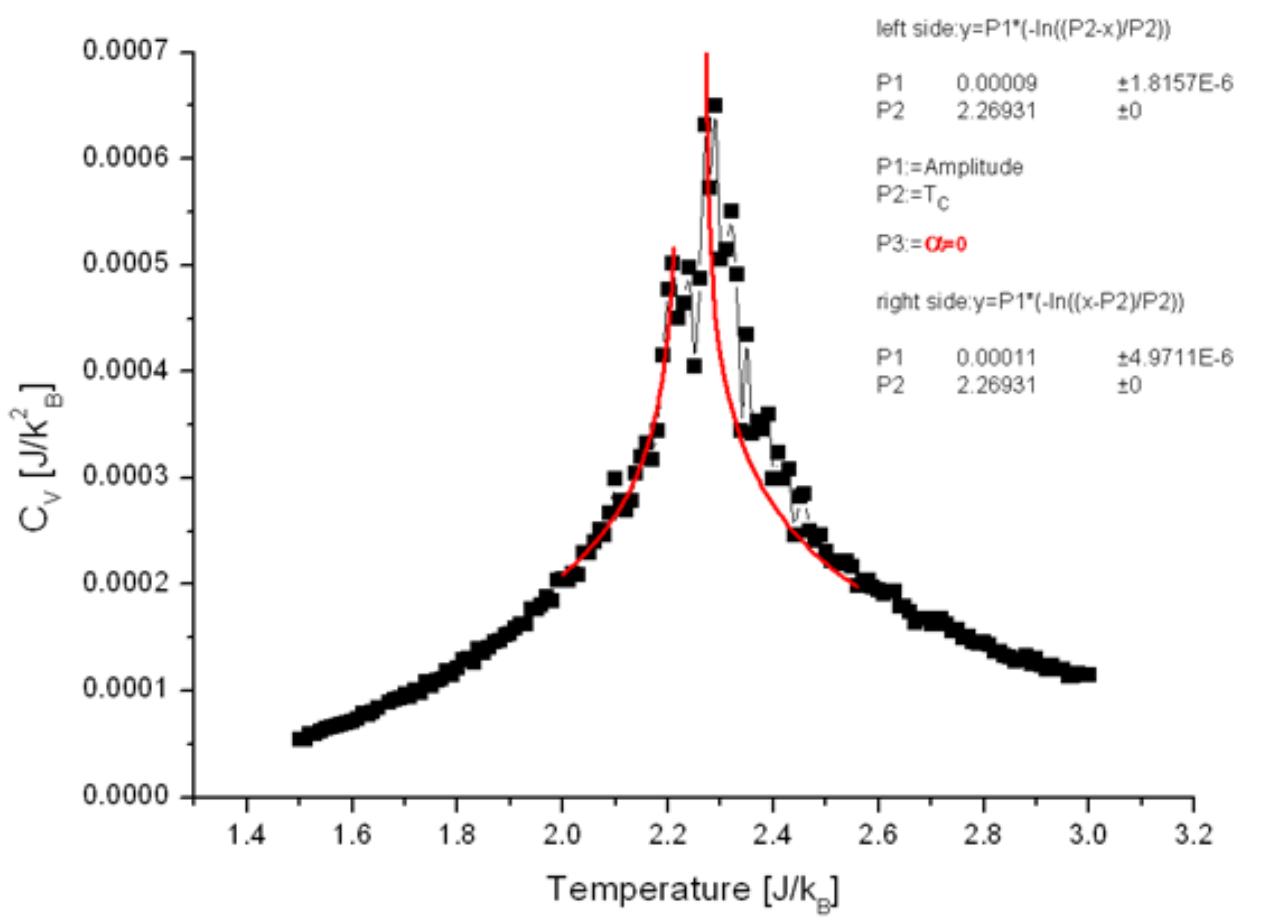
měříme fluktuace energie

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

v bezrozměrných jednotkách počítáme:

- měrné teplo

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

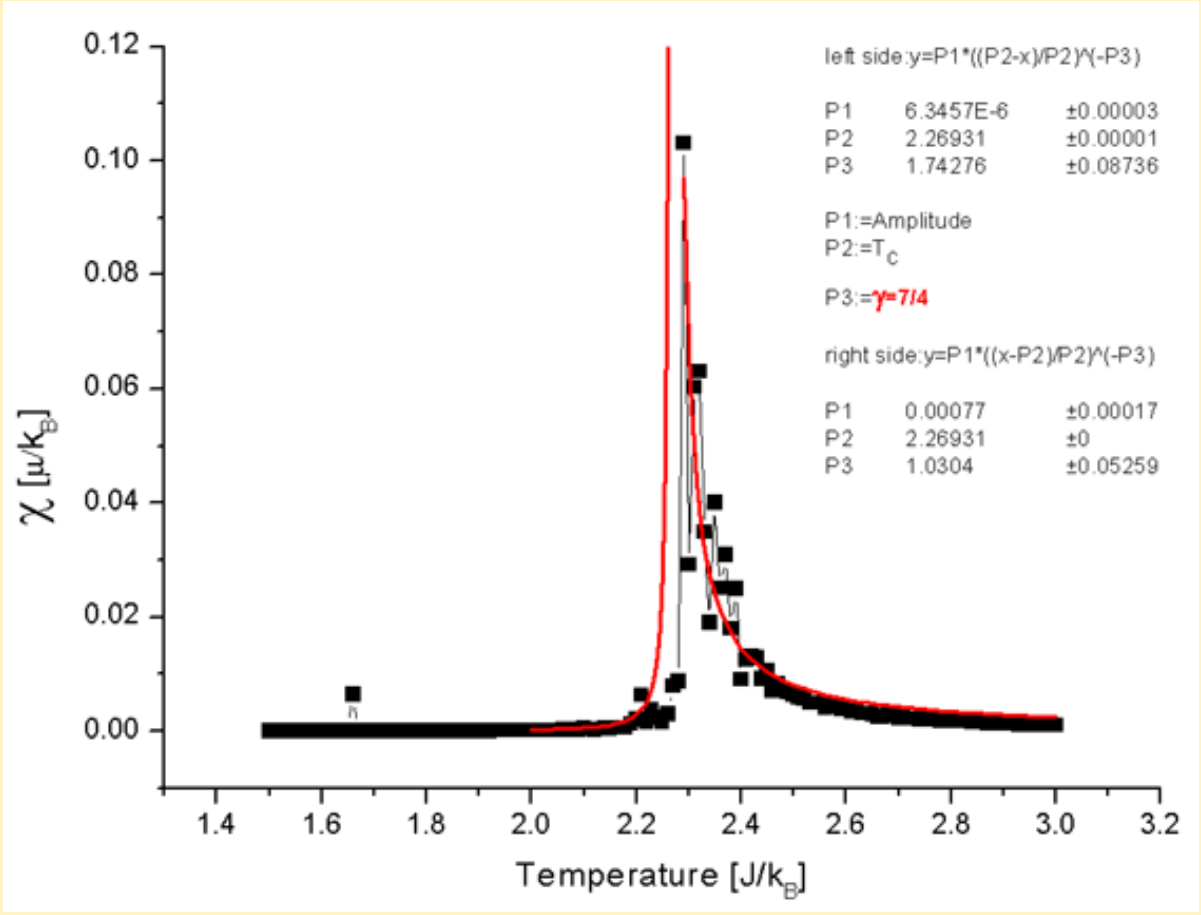


http://quantumtheory.physik.unibas.ch/people/bruder/Semesterprojekte2007/p1/index.html

v bezrozměrných jednotkách počítáme:

- susceptibilitu

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

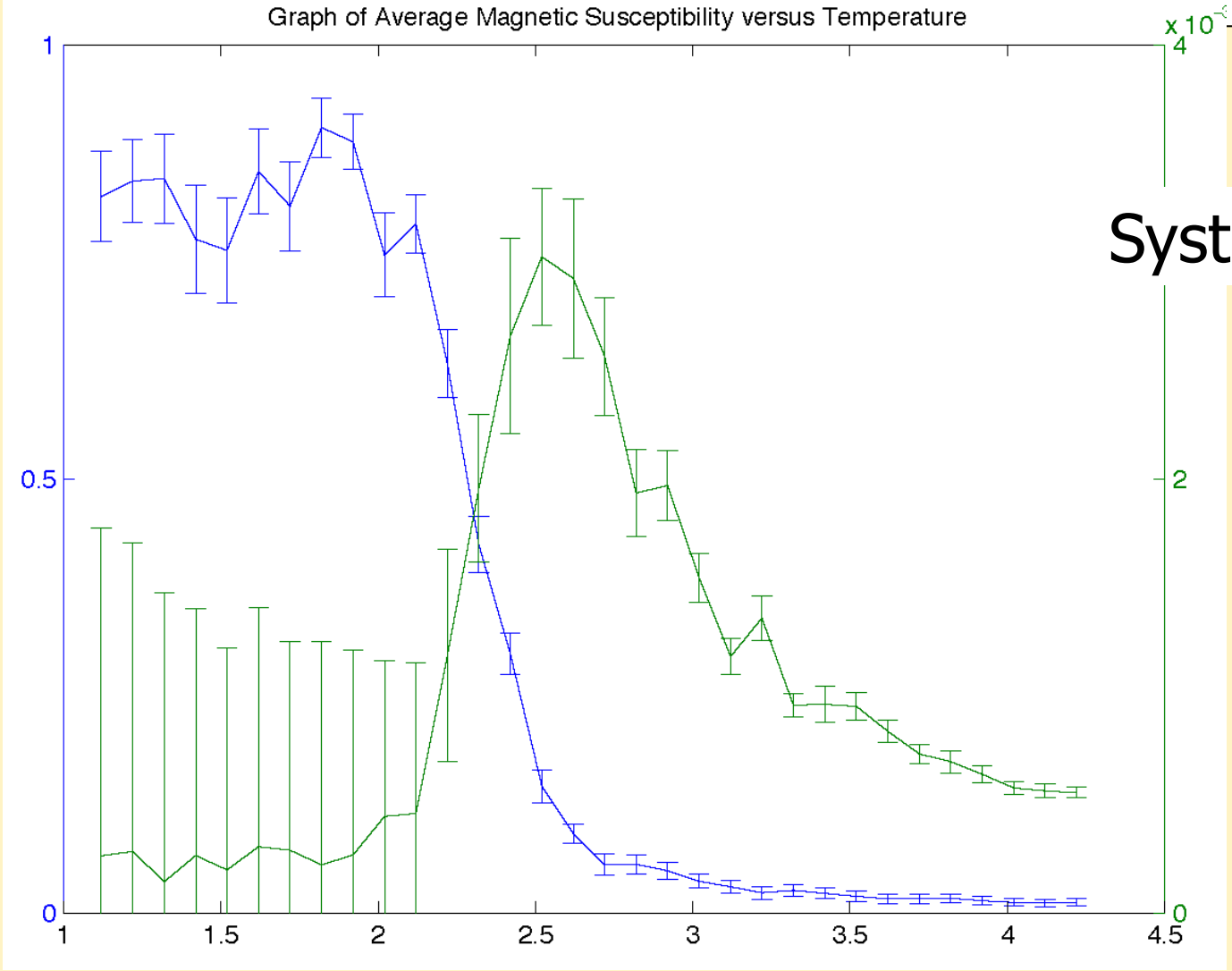


http://quantumtheory.physik.unibas.ch/people/bruder/Semesterprojekte2007/p1/index.html

Úloha p. Brandejs v bezrozměrných jednotkách

- susceptibilitu

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



Systém 40x40

Kritické exponenty pro Isingův model

exponent	střední pole	2 d - Onsager	3d rozvoj vysoké T
α	nespojitost	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	nespojitost	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

Kritické chovaní je spojeno s růstem korelací v okolí teploty T_c

Korelace lze popisovat např. pomocí:

- korelační délky,
- korelačního času.

Chceme určit vlastnosti a počítáme:

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

Kritická teplota T_c

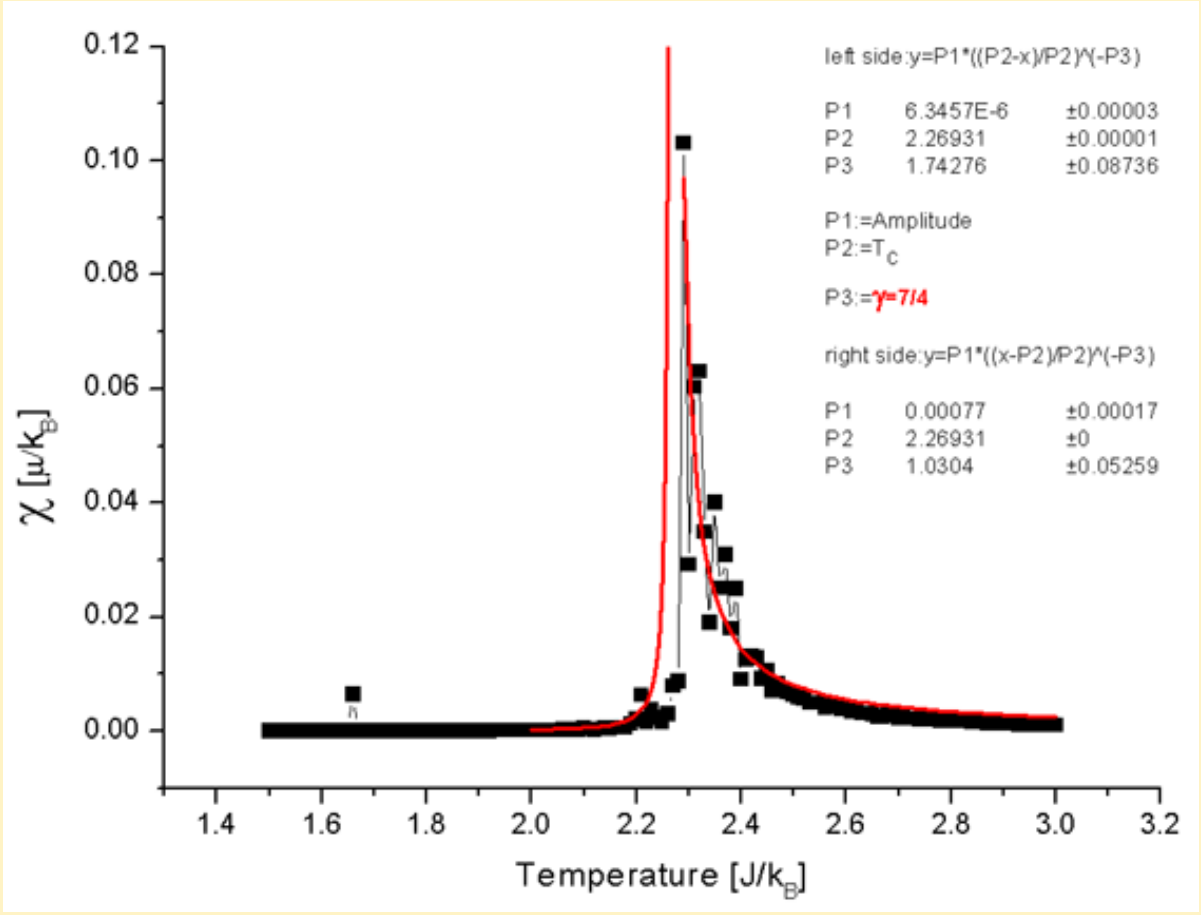
známý výsledek:
Onsager 2D
exaktní $T_c = 2J/k_B \log(1+\sqrt{2}) \simeq 2{,}269\ J/k_B$

Kritickou teplotu určujeme:
1) pomocí divergence, tj. maxima specifického tepla resp. susceptibility,
2) pomocí Binderových kumulantů.

v bezrozměrných jednotkách počítáme:

- susceptibilitu

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



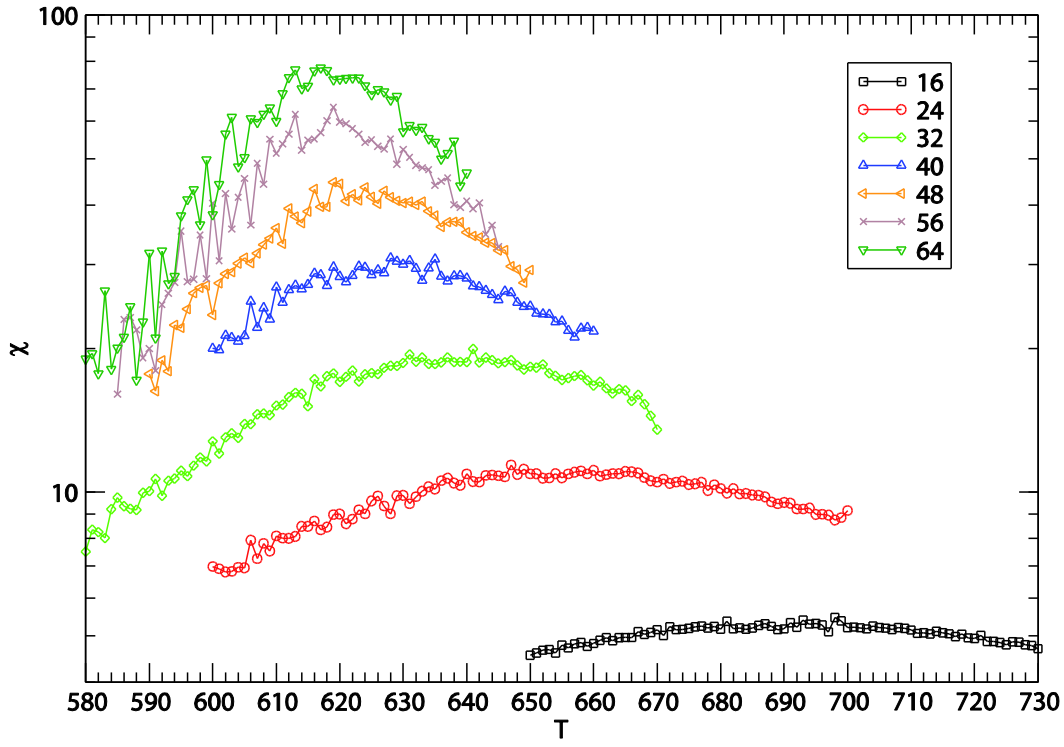
http://quantumtheory.physik.unibas.ch/people/bruder/Semesterprojekte2007/p1/index.html

Kritická teplota T_c

známý výsledek:
Onsager 2D
exaktní $T_c = 2J/k_B \log(1+\sqrt{2}) \simeq 2{,}269\ J/k_B$

Kritickou teplotu určujeme:
1) pomocí divergence, tj. maxima specifického tepla resp. susceptibility,
2) pomocí Binderových kumulantů.

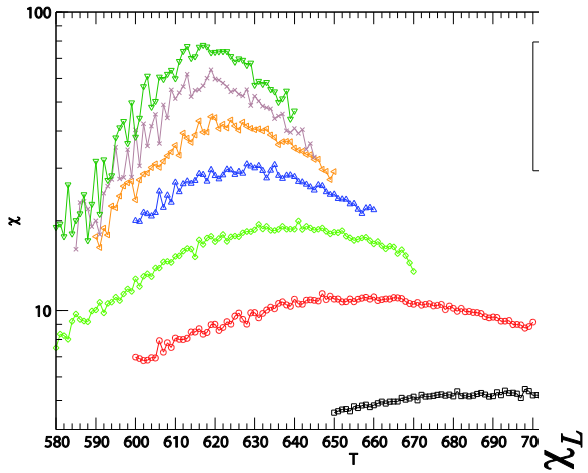
teplotní závislot susceptibility pro různé velikost systému

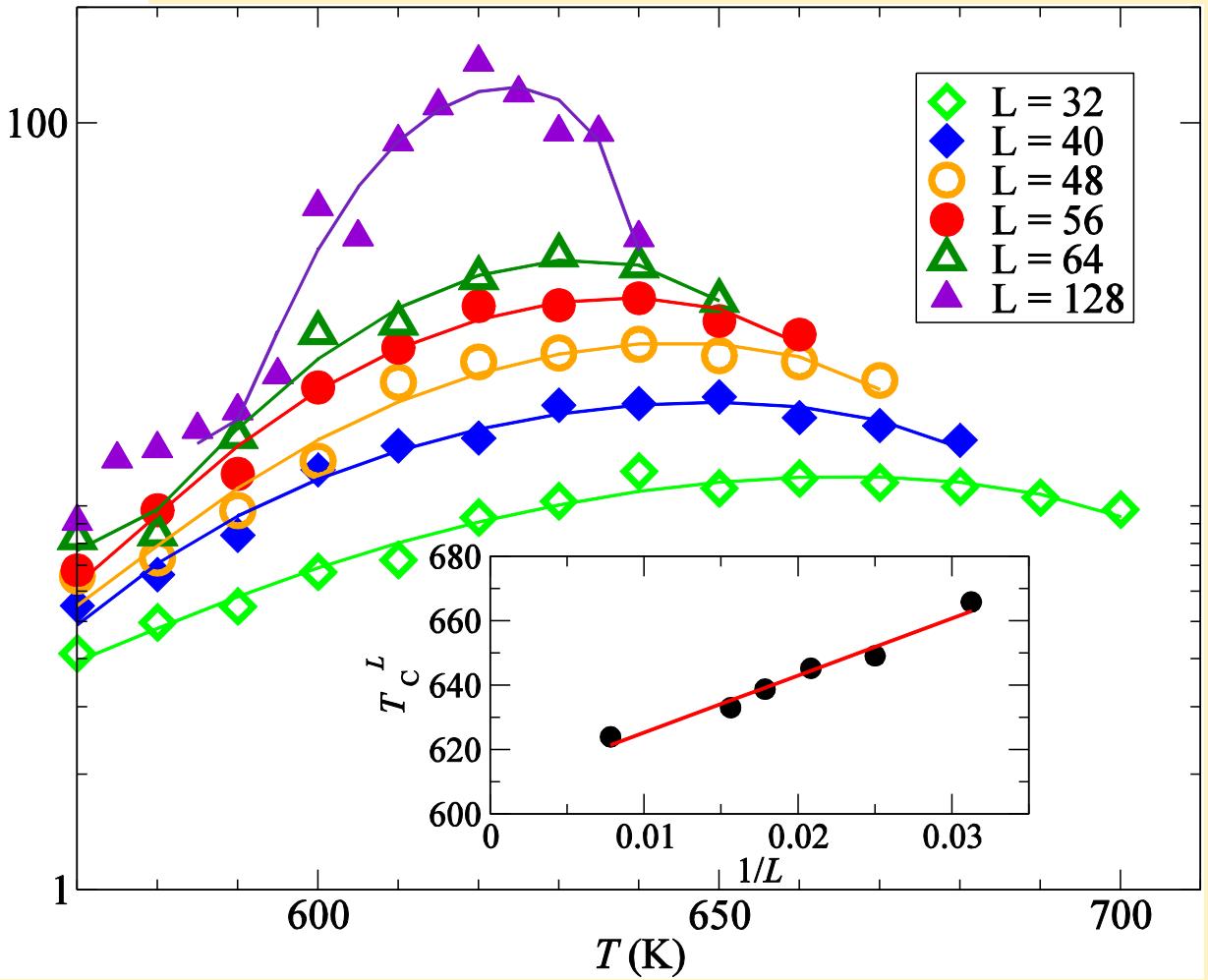


V simulacích maxima měnící se s velikostí systému !

reálný materiál
slitina Fe + Co
Heisenbergův model

teplotní závislot susceptibility
pro různé velikost systému





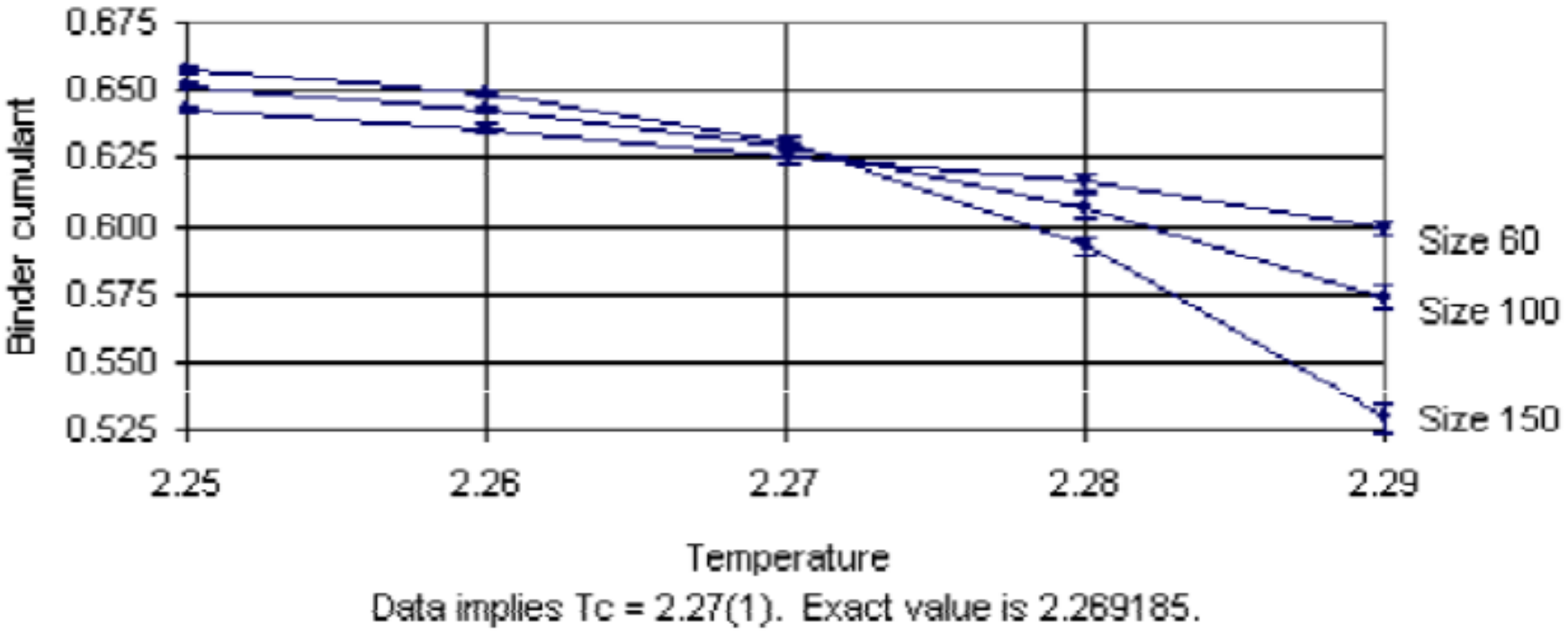
Určení kritické teploty z polohy maxima susceptibility

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

pro Fe $1/\nu \doteq 1,5$

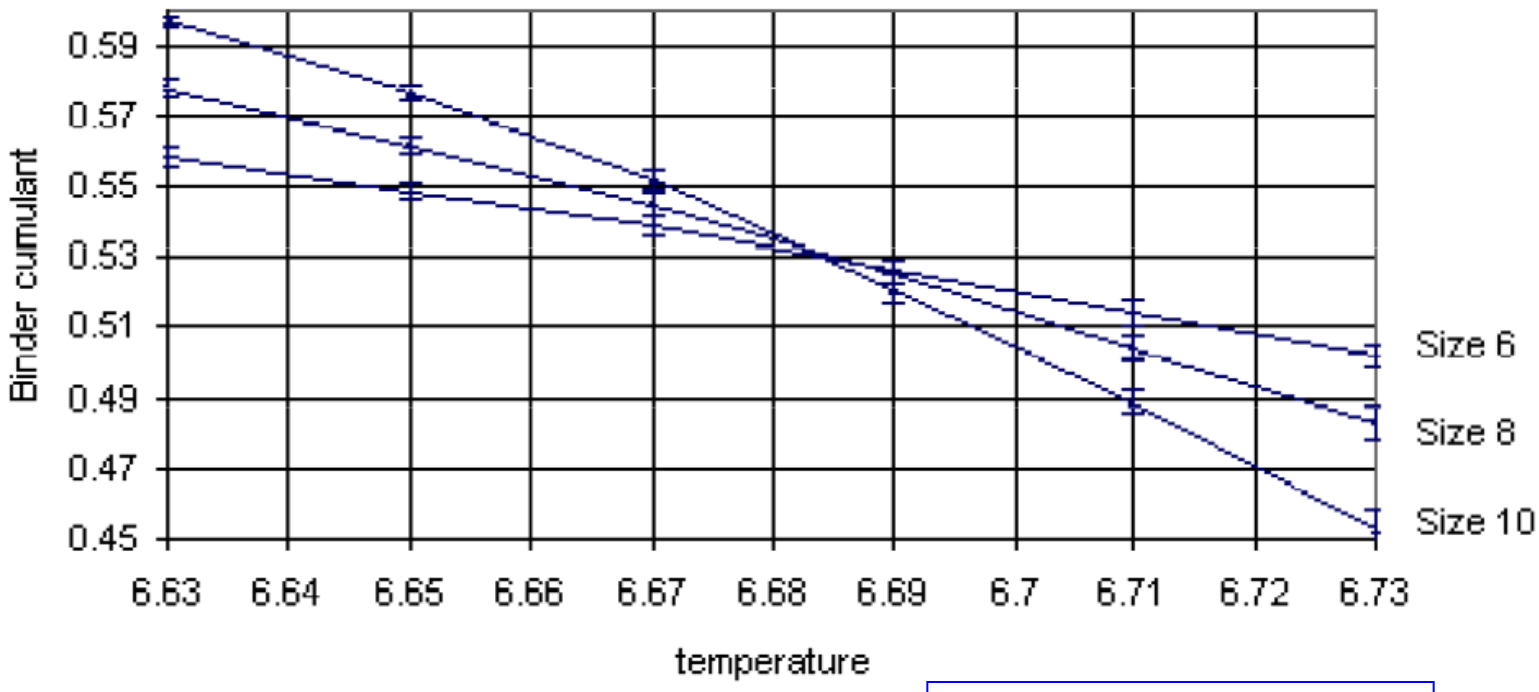
Binderův kumulant

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



Herrmann ETH 2010

Binderův kumulant



Herrmann ETH 2010

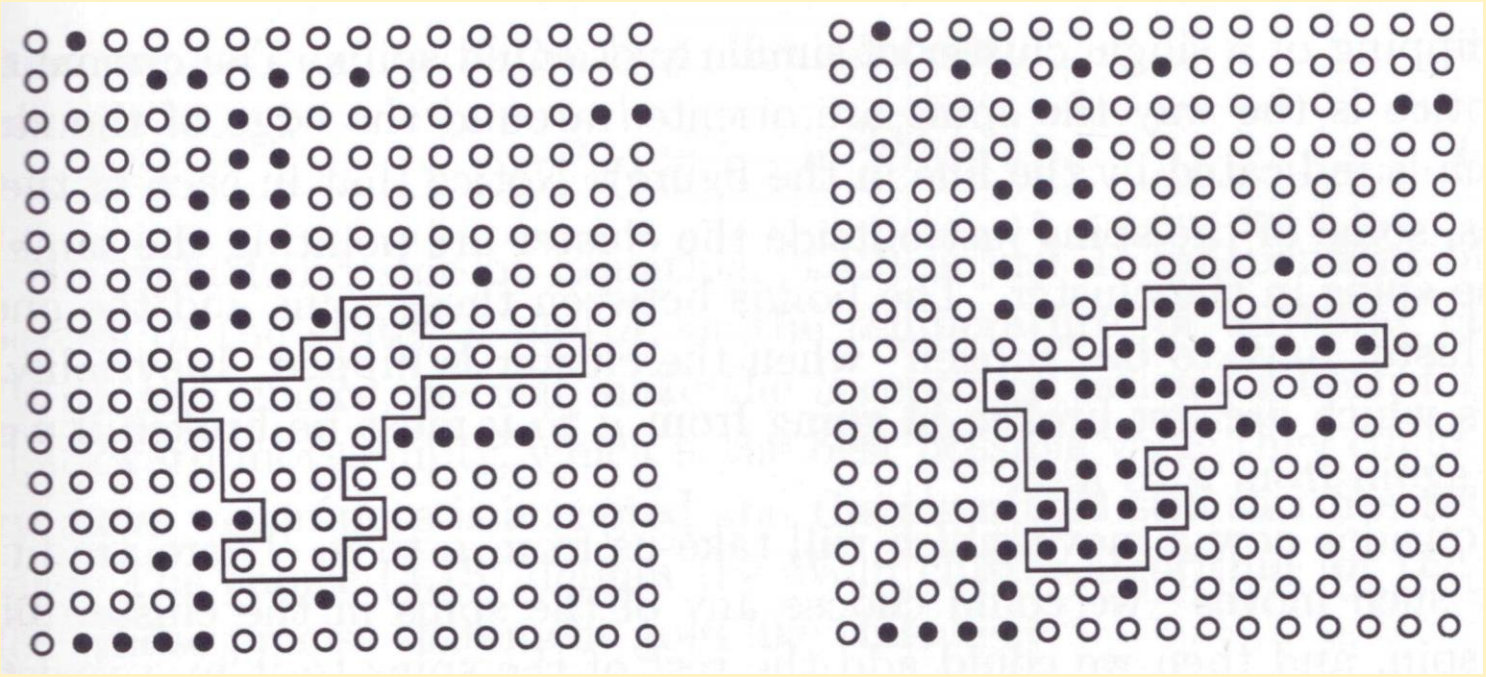
Binderův kumulant v případě kapaliny

$$U_L = 1 - \frac{\left\langle (\Delta\rho)^4 \right\rangle_L}{3\left\langle (\Delta\rho)^2 \right\rangle_L^2} \xrightarrow{L\to\infty} \begin{cases} 0 & \text{pro jednu fázi} \\ 2/3 & \text{pro dvě fáze} \end{cases}$$

KLASTROVÉ ALGORITMY

klastrový algoritmus

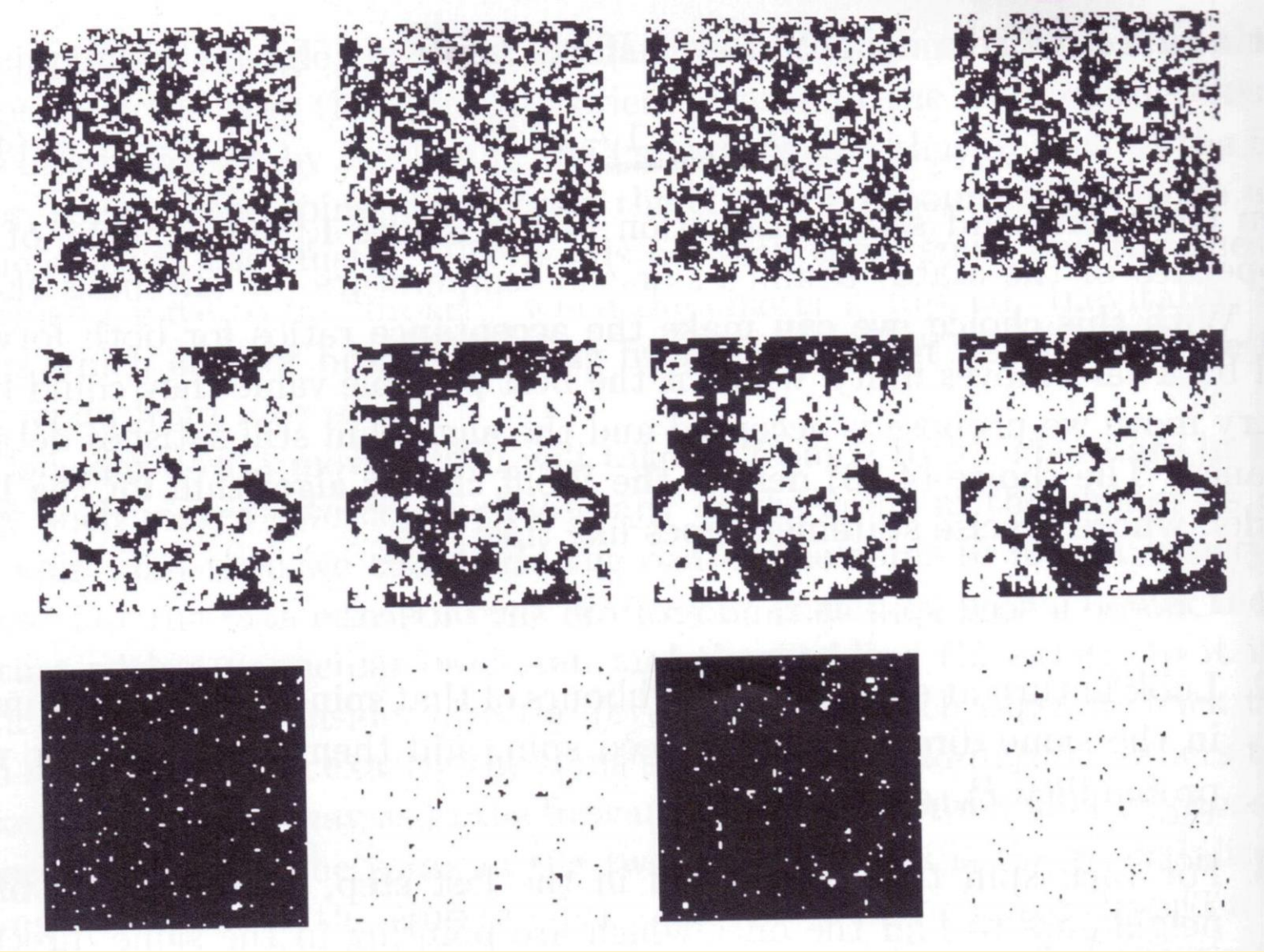
Wolfův algoritmus



Procházej okolí zvoleného spinu a částice přidávej s pravděpodobností:

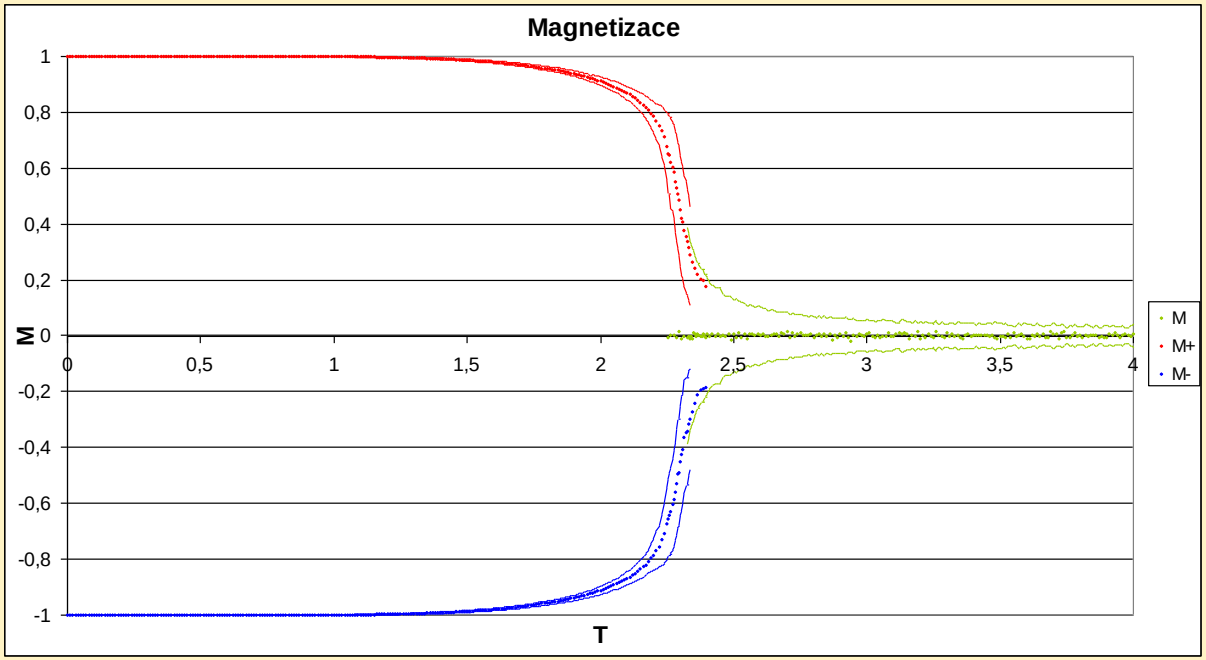
$$P_{add} = 1 - e^{-2\beta J}$$

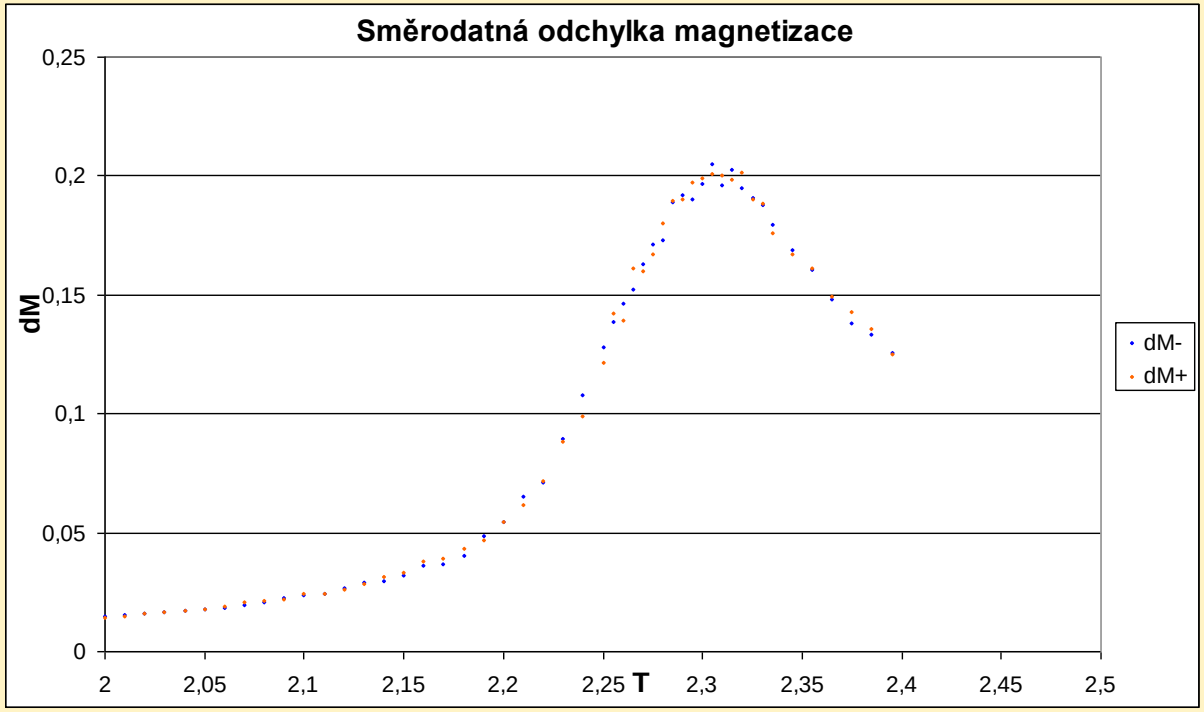
následující konfigurace u Wolfova algoritmu



Příklad výsledků získaných pomocí Wolfova algoritmu

Havrdová 2005





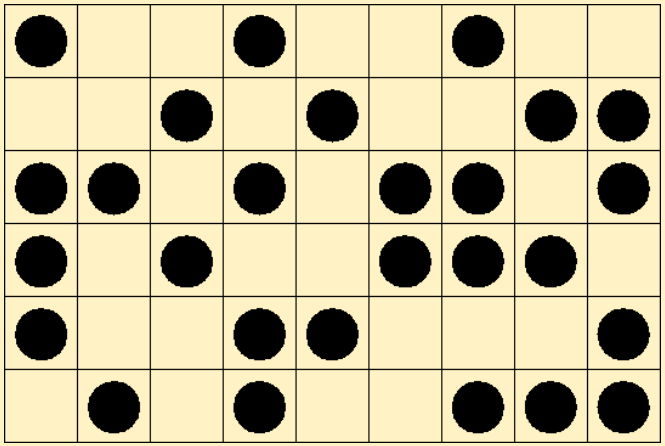
Ekvivalentní modely k Isingovovu modelu

- Mřížový plyn
- Binární slitina

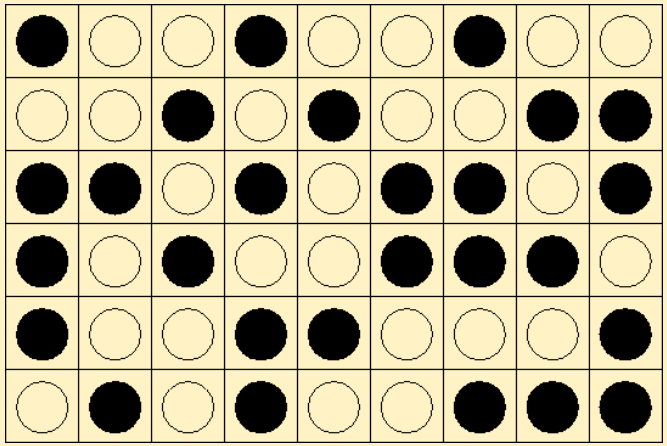
http://borisv.lk.net/matsc597c-1997/phases/Lecture3/node3.html

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	$-\frac{1}{4}(e_{AA} + e_{BB} - 2e_{AB})$	$\frac{q}{4}(e_{AA} - e_{BB})$	$c_A - c_B$

Kapalina s danou hustotou = Isingův model se zachovávající se magnetizací

Místo obrácení spinu podle Metropolise 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 –> $\boldsymbol{S}^{zkus}$
3. spočti

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

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

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

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