

SIMULACE VE FYZICE MNOHA ČÁSTIC

NTMF021 [12SFMC1 na FJFI], ZS 3/1 Z+Zk

Miroslav Kotrla

Oddělení teorie
kondenzovaných látek
FZÚ AV ČR, Praha 8
kotrla@fzu.cz
externě ÚTF MFF UK

Milan Předota

Ústav fyziky
PřF JU, Č. Budějovice
<http://ufy.prf.jcu.cz/predota>
predota@prf.jcu.cz
externě ÚTF MFF UK

http://kotrla.fzu.cz/?page_id=32

<https://elearning.jcu.cz/course/view.php?id=628>

přihlásit se jako host, hledat kurz obsahující 'NTMF' nebo 'simulace', heslo: simulant

Monte Carlo

Simulační metoda založená na užití stochastických procesů a generace náhodných čísel.

Typy MC simulací

- a) **Geometrické MC** (DLA, náhodné procházky, perkolace, celulární automaty, ...)
- b) **MC integrace**
- c) **Termodynamické MC** (Isingův model, ...)
- d) Modelování vývoje na strukturální úrovni
- e) Výpočet kinetických koeficientů (KMC)
- f) etc.

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

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.

Isingův model

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

otázky:

**Existuje fázový přechod
a kritické chování?**

Je to skutečně model
magnetika ?

Fázové přechody a kritické jevy

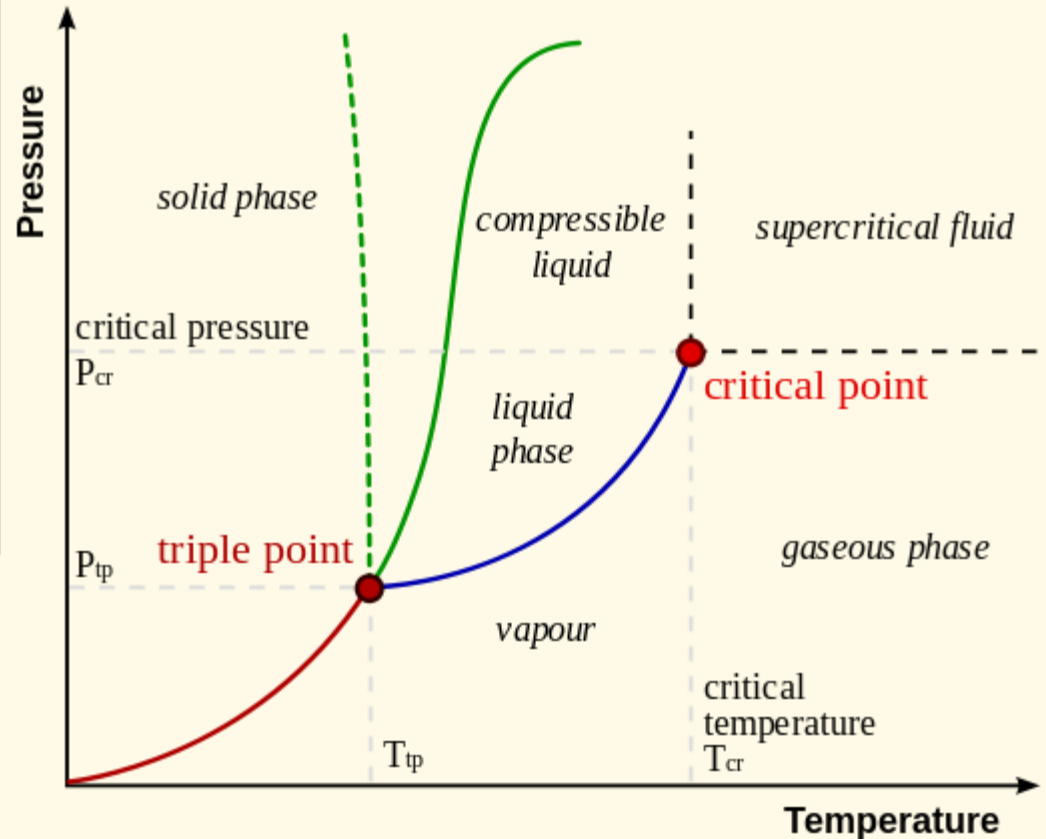
makroskopický popis

- **charakteristiky látky:** hustota hmoty, magnetizace, polarizace, koncentrace komponent etc.
- závislost uvedených **stavových parametrů** na vnějších podmínkách: teplota, tlak, magn. pole, etc.
- **fáze:** homogenní oblast s danými charakteristikami (kapalina, plyn, feromagnet)
- **parametr uspořádání** = veličina určující fázi

charakteristiky jsou obvykle jednoznačně určeny ALE ne vždy

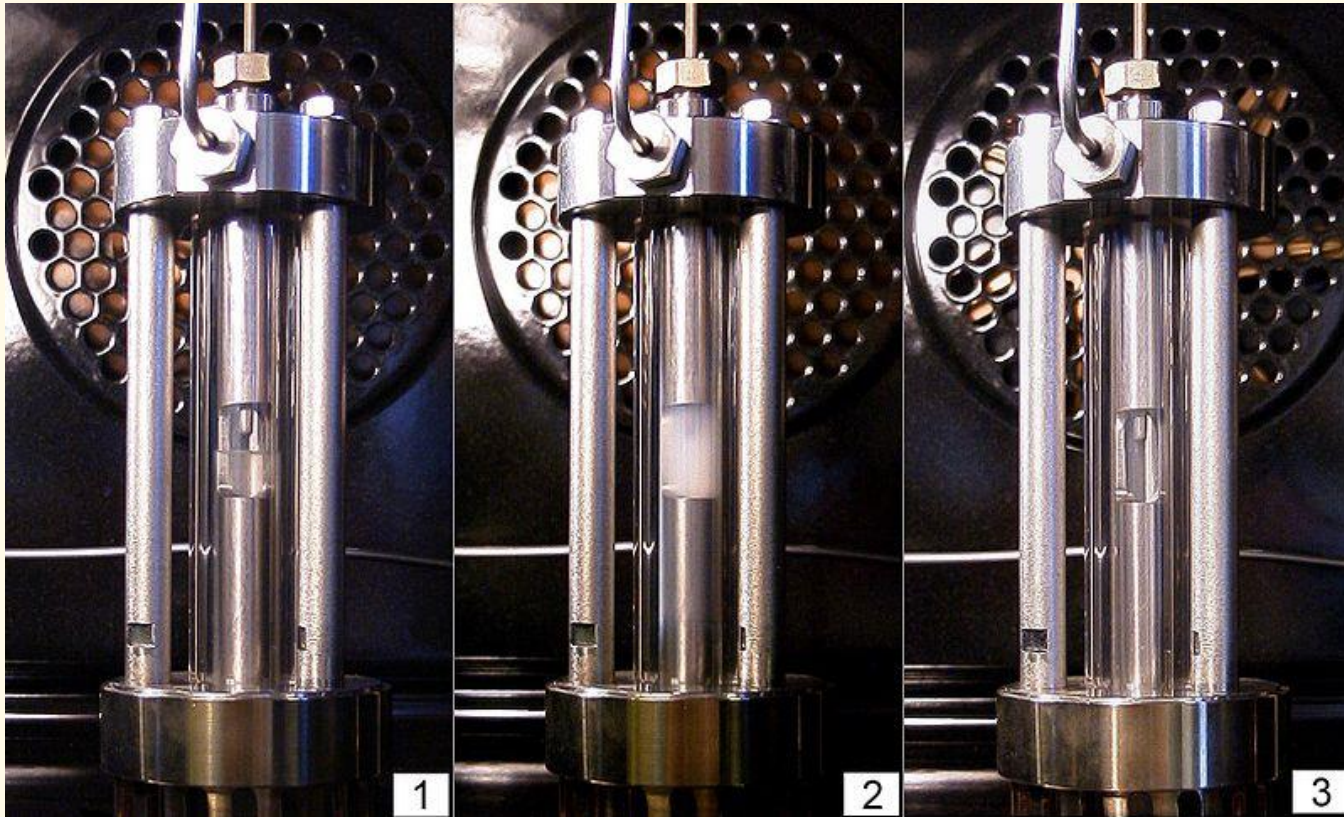
v kritickém bodě mizí možnost výběru fáze

kritický bod pára - kapalina



Fázové přechody a kritické jevy

experiment s etanem



v kritickém bodě mizí
možnost výběru fáze

- 1: Subcritical ethane, liquid and gas phase coexist
- 2: Critical point, opalescence
- 3: Supercritical ethane, fluid^[1]

Fázové přechody a kritické jevy

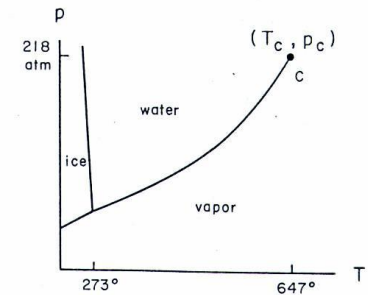
parametr uspořádání
-- určuje fázi

kritický bod
feromagnet - paramagnet

v kritickém bodě mizí
možnost výběru fáze

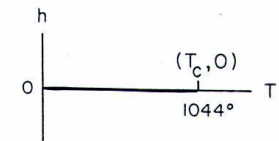
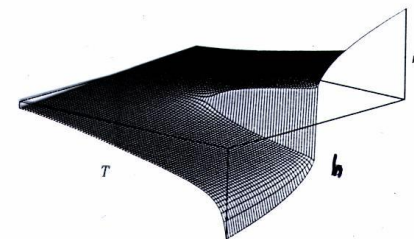
- nejednoznačnost stavu
- parametr uspořádání
- pojem fáze
- fázové přechody a jejich třídění
- kritické body a kritické chování

kapalina - pára



(a)

feromagnet - paramagnet



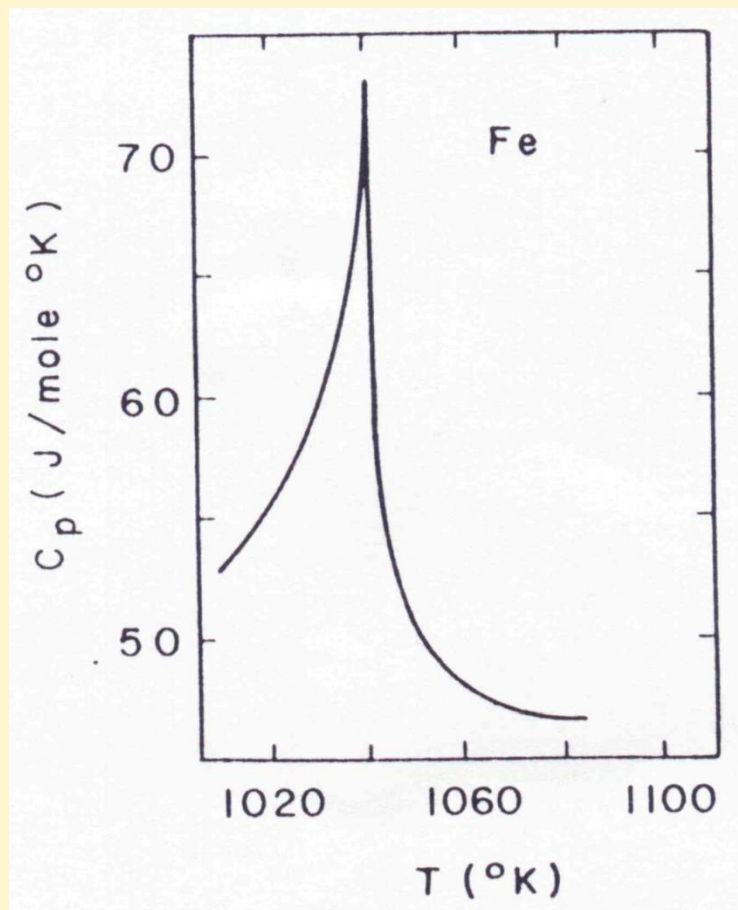
(b)

Figure 1.7 The relationship between B , m and T for a typical magnetic material. The critical face in the $m(T, B)$ surface narrows to a point at $T = T_c$. Figure 1.5 shows two sections of this surface in planes of constant T .

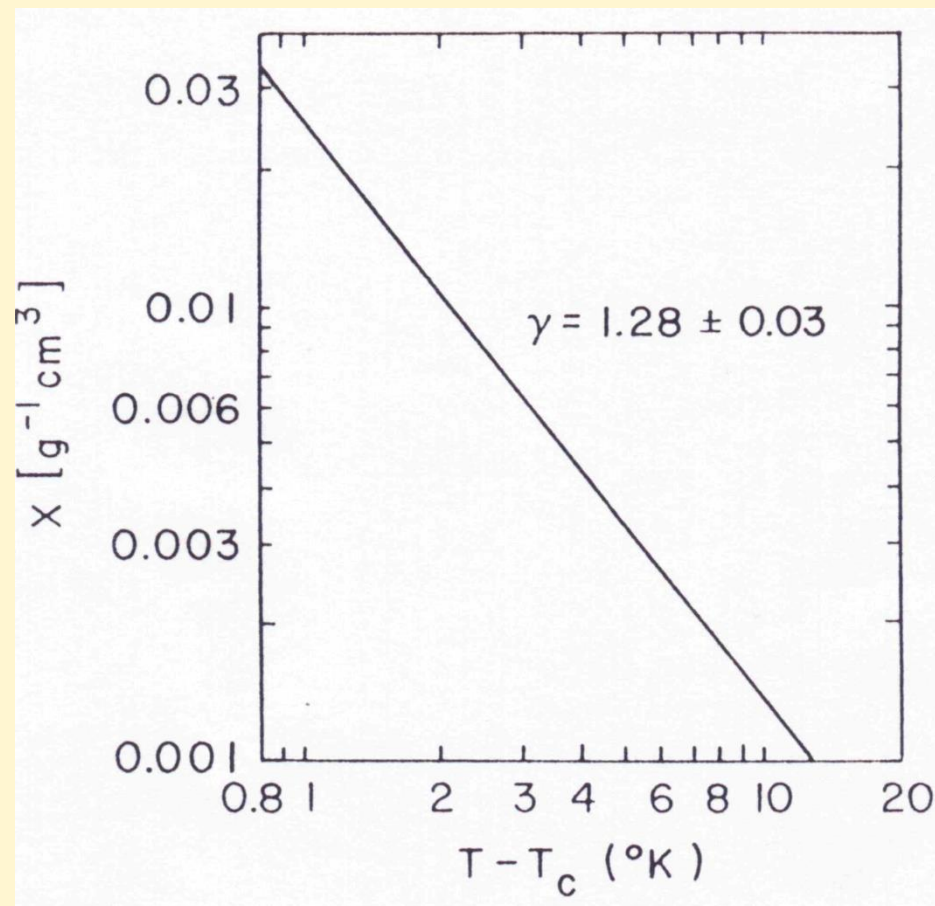
(a) The liquid-gas critical point of H_2O : $T_c = 647^\circ\text{K}$, $p_c = 218 \text{ atm}$. (b) The ferromagnetic point of Fe : $T_c = 1044^\circ\text{K}$, $h_c = 0$.

Experimentální výsledky pro kritické jevy: mocninná divergence

měrné teplo



susceptibilita v log-log měřítku



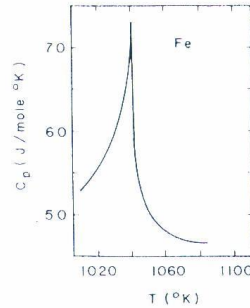
Experimentální výsledky – kritické exponenty

Termodynamické vlastnosti a exponenty

1) Specifické teplo
exponent α

($h=0$)

$$C \sim \begin{cases} C_+ (T - T_c)^{-\alpha} & T > T_c \\ C_- (T_c - T)^{-\alpha'} & T < T_c \end{cases}$$

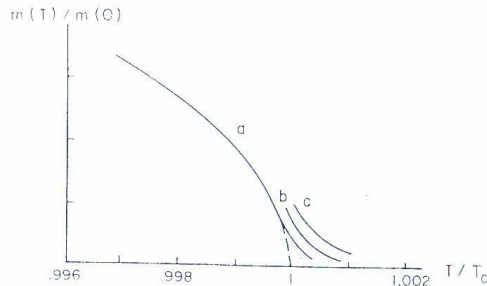


Specific heat of iron vs temperature, from Ledeman et al. (1974), Fig. 2.

2) Parametr uspořádání (magnetizace)
exponent β

($h=0$)

$$m(T) \sim (T_c - T)^\beta, \quad T < T_c$$



Magnetization vs temperature of single crystal $YFeO_3$ for T very close to T_c . A small field h is applied. Curves a, b, c are taken at $h = 38$ Oe, 210 Oe and 460 Oe, respectively. The broken line is the extrapolation to $h=0$. (Data taken from G. Gorodetsky et al. (1966) Fig. 1.)

3) susceptibilita
exponent γ

($h=0$)

$$\chi \sim \begin{cases} A_+ (T - T_c)^{-\gamma} & T > T_c \\ A_- (T_c - T)^{-\gamma'} & T < T_c \end{cases}$$

4) kritická teplota
exponent δ

parametr uspořádání jako funkce
pole h při $T=T_c$

$$m \sim h^{1/\delta}$$

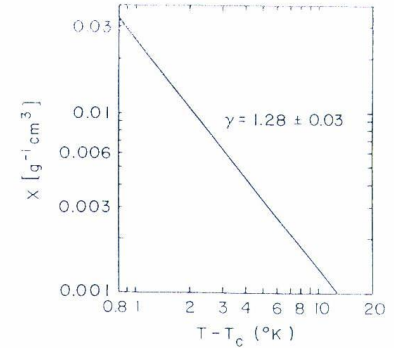
5) korelační funkce
exponent η

($h=0, T=T_c$)

$$G(r) \sim \frac{1}{r^{d-2+\eta}}$$

6) korelační délka
($h=0$) exponent ν

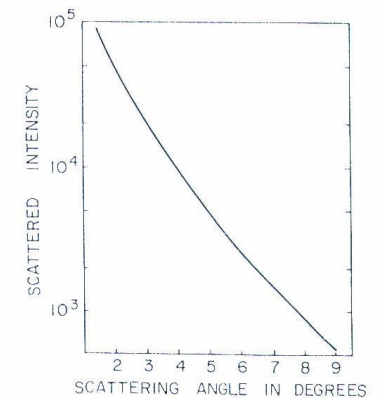
$$\xi \sim \begin{cases} (T - T_c)^{-\nu} & T > T_c \\ (T_c - T)^{-\nu'} & T < T_c \end{cases}$$



Temperature dependence of the magnetic susceptibility of nickel. (Taken from S. Arajs (1965), Fig. 3.)

intenzita rozptylu $I_k \sim k^{-2+\eta}$

$I_k \sim G_k$; G_k Fourierova transf. $G(x)$



Neutron scattering intensity vs scattering angle (which is proportional to the momentum transfer) in Fe at T slightly above T_c . (Taken from Passell et al. (1965), Fig. 9.)

Termodynamické Monte Carlo

Cíl: výpočet termodynamických vlastností, např. střední hodnotu energie etc.

System popsán: klasickým hamiltoniánem H a stavy A s rozdělením $\pi(A)$

$$\pi(A) = \exp[-\beta H(A)] / Z, \quad Z = \int \pi(A) DA$$

Střední hodnota:

$$\langle X \rangle = \int X(A) \pi(A) DA$$

změna míry pro preferenční vzorkování:

$$\pi(A) = \exp[-\beta H(A)] \frac{1}{Z}$$

$$\langle X \rangle = \int \frac{X(A) \pi(A)}{p(A)} p(A) DA$$

**POTŘEBUJEME
PREFERENČNÍ VZORKOVÁNÍ**

odhad pro MC:

pro $p(A) = \pi(A)$:

$$\langle X \rangle \approx \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n \frac{X(A_k) \pi(A_k)}{p(A_k)}$$

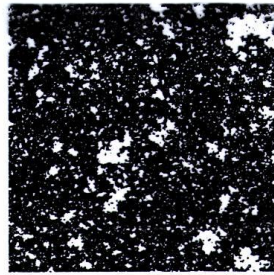
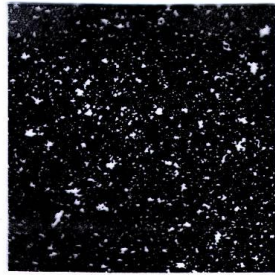
$$\langle X \rangle \approx \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n X(A_k)$$

Jak to vyřešit ?

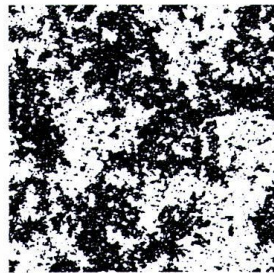
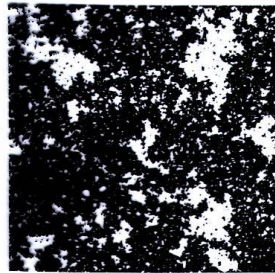
Správné rozdělení pro vzorkování najdeme pomocí limitního Markovova procesu

K tomu potřebujeme znát náhodné (stochastické) procesy: vědět, kdy existuje tzv. limitní rozdělení.

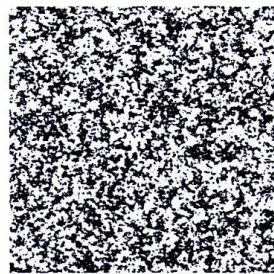
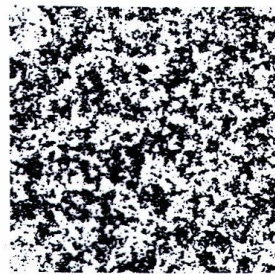
Limitní rozdělení bude kanonické rozdělení pokud:
Platí podmínka detailní rovnováhy + je splněna podmínka ergodicity.



$T < T_c$



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 .

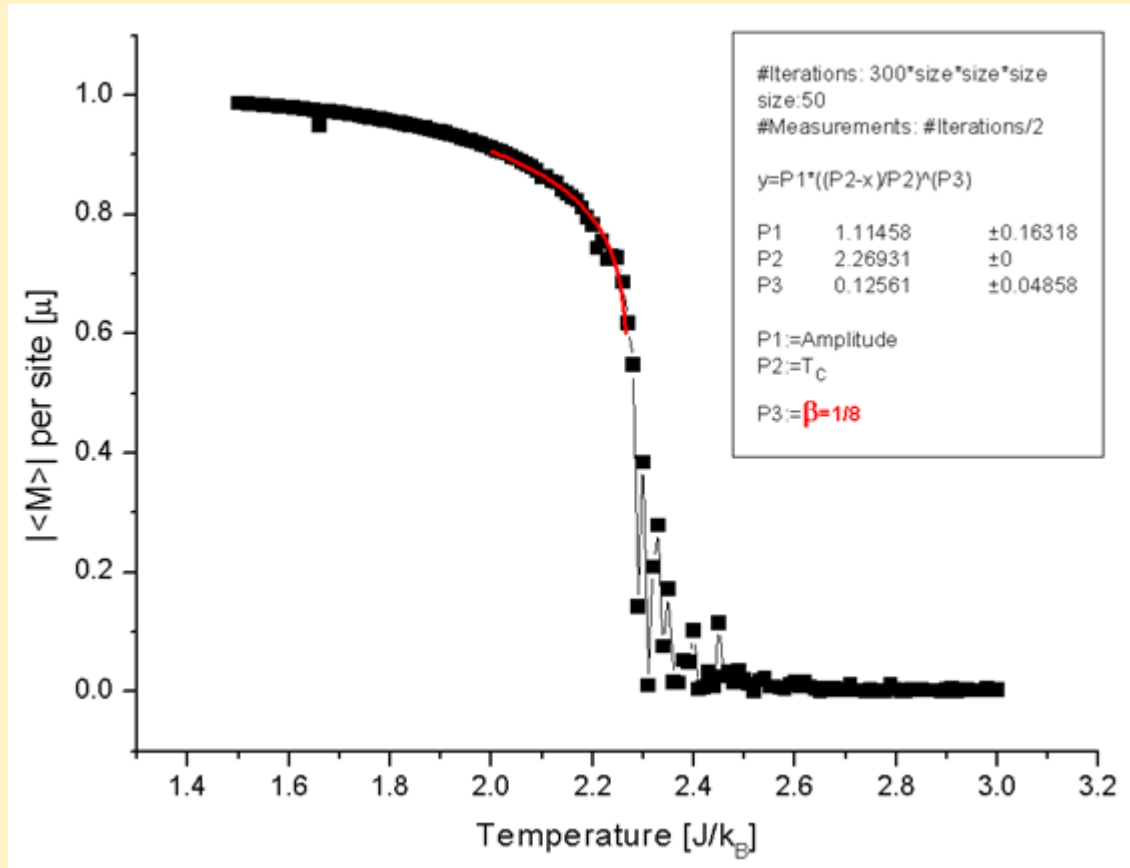
Figure 1.10 As the temperature of the two-dimensional Ising model (see §3.1.1) is increased from near zero (top left), the typical size of the white regions, in which the order parameter differs from the background value, steadily increases until at a critical temperature T_c the white and black regions 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.

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

Počítáme:

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

Vymizení magnetizace v T_c



Celkový algoritmus pro Isingův model

volba parametrů

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

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 $p = \exp\{-\beta\Delta E\}$

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

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

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 vracující 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)

```
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
```

Jak počítáme:

- měrné teplo,
- susceptibilitu

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

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

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

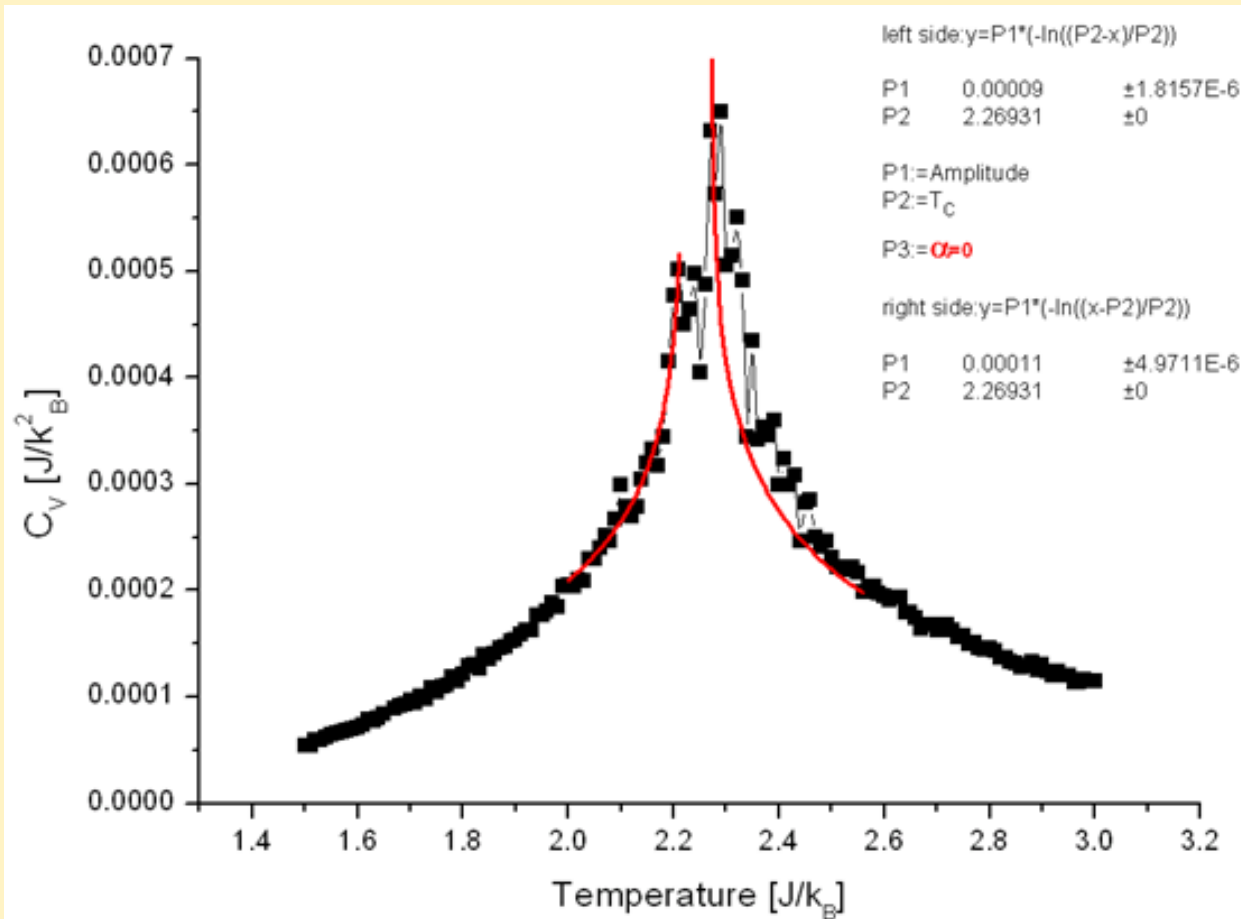
měříme fluktuace energie

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

v bezrozměrných jednotkách počítáme:

- měrné teplo

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

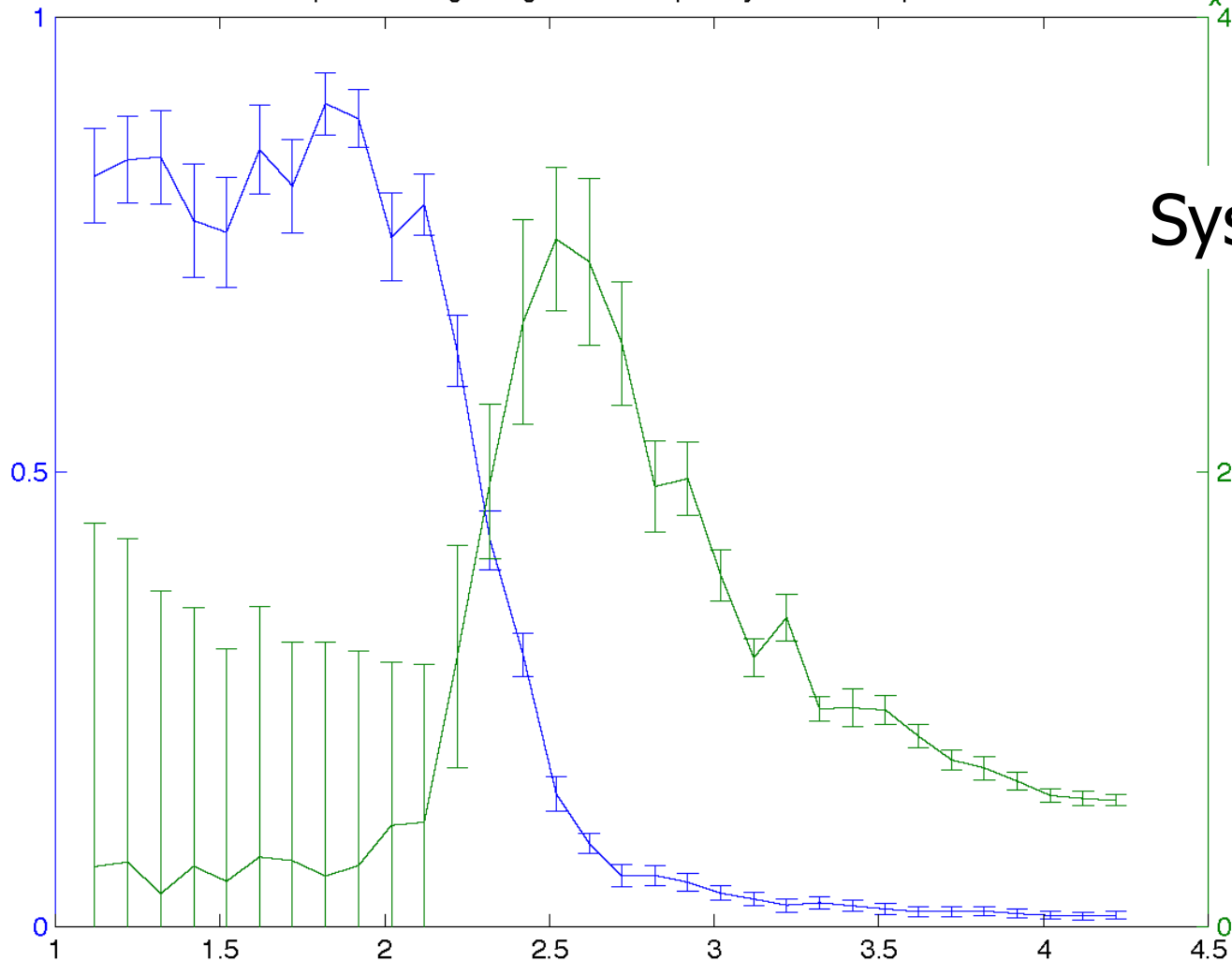


Úloha p. Brandejs v bezrozměrných jednotkách

- susceptibilitu

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

Graph of Average Magnetic Susceptibility versus Temperature



System 40x40

Vlastnosti Isingova modelu

V $d=2,3$ existuje kritický bod T_c .

Exaktní výsledek pro dvou-dimenzionální model
(Onsager)

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

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 $T \rightarrow T_c$

Kritická teplota T_c

známý výsledek:

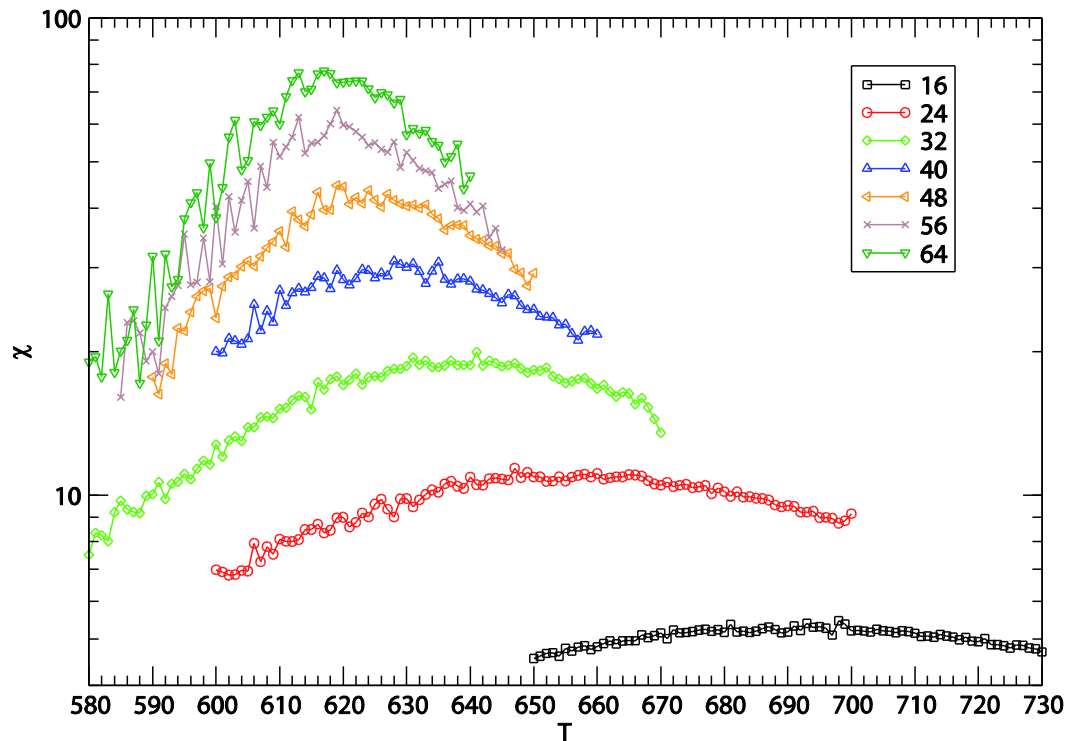
Onsager 2D

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.

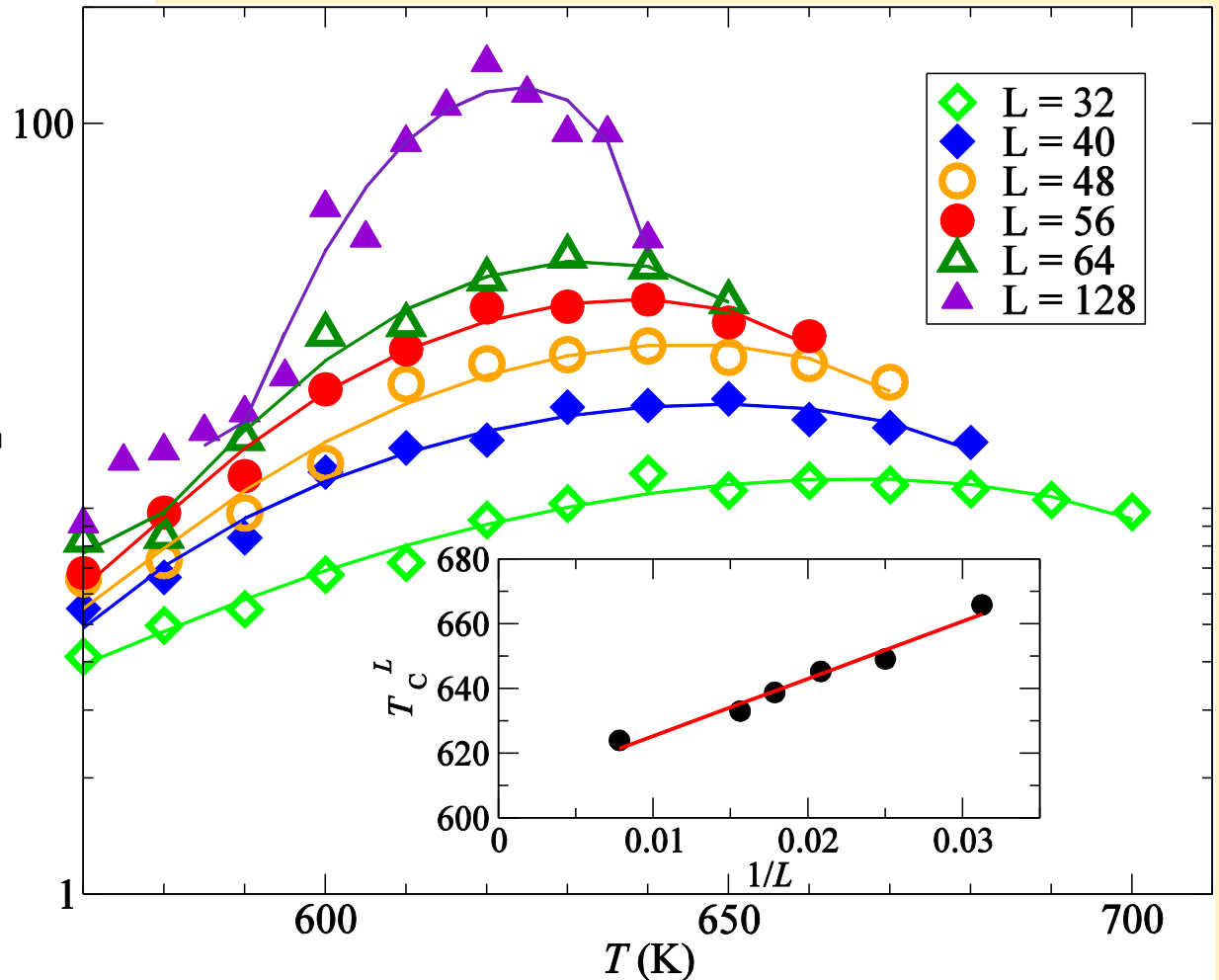
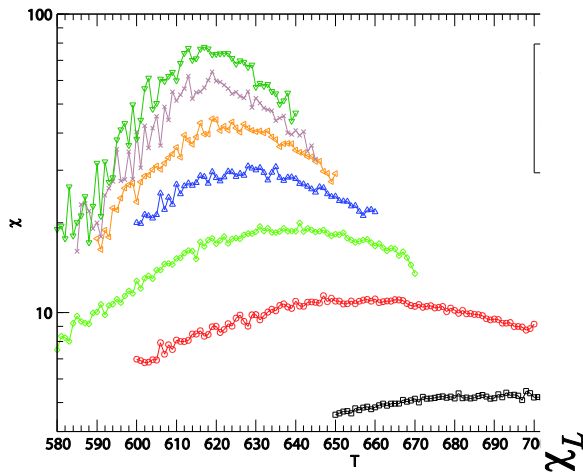
teplotní závislost susceptibility pro různé velikost systému



V simulacích maxima mění se s velikostí systému !

reálny materiál
 slitina Fe + Co
 Heisenbergův model

teplotní závislost susceptibility
 pro různé velikost systému



Určení kritické teploty z polohy maxima susceptibility

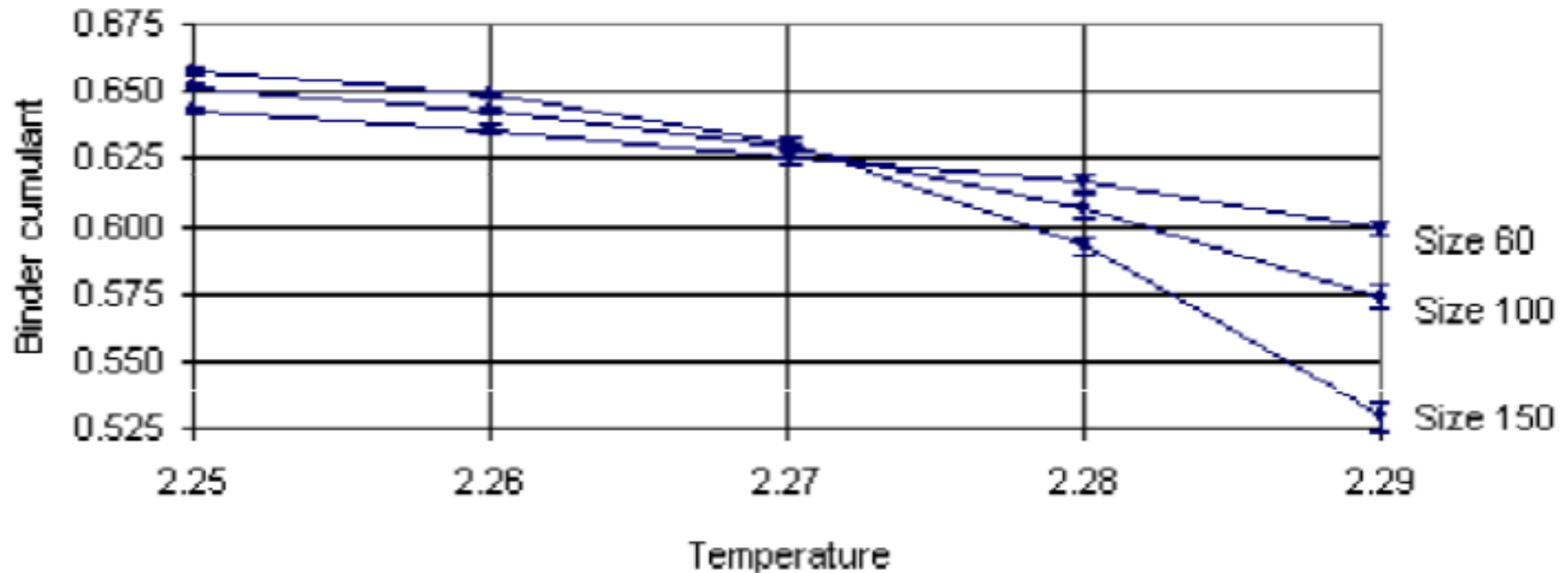
$$T_c(L) = T_c(L = \infty) + \lambda L^{-1/\nu}$$

pro Fe $\frac{1}{\nu} \approx 1,5$

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.

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