

Die Numerische Lösung des Ising-Modells

Johannes Thiele

22.11.2013

Inhaltsverzeichnis

1	Wiederholung der physikalischen Grundlagen	2
1.1	Modell	2
1.2	Die analytische Lösung des Ising-Modells	3
1.3	Die Boltzmann-Verteilung der statistischen Mechanik	4
2	Metropolis Algorithmus	4
3	Auswertung der Simulation des 1D-Ising Modells	7
3.1	Graphische Darstellung der Ergebnisse	7
3.2	Nachteile des 1D-Ising-Modells	9
4	Simulation des 2D-Ising-Modell	10
4.1	Anpassung von Modell und Algorithmus	10
4.2	Auswertung des 2D-Ising-Modells	10
5	Quellenangaben	12

1 Wiederholung der physikalischen Grundlagen

1.1 Modell

Wir verwenden erneut eine lineare Kette mit N Teilchen, wobei das i -te Teilchen den Spin s_i hat:

$$s_i \equiv s_{z,i} = \pm \frac{1}{2} \quad (1)$$

Der Spin ist entweder \uparrow (up) oder \downarrow (down). Es handelt sich also um das Ising-Modell.

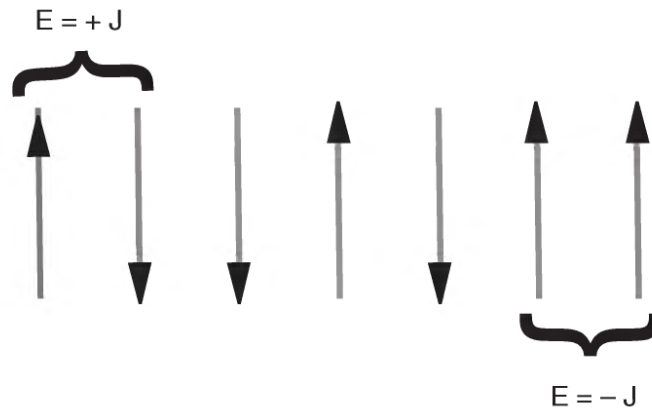


Abbildung 1: Wechselwirkungsenergie zwischen gleich gerichteten und entgegengerichteten Spins

Jede der Konfigurationen der N Teilchen sei nun durch einen Zustandsvektor beschrieben:

$$|\alpha_k\rangle = |s_1, s_2, \dots, s_N\rangle = \left\{ \pm \frac{1}{2}, \pm \frac{1}{2}, \pm \frac{1}{2}, \dots \right\}, \quad j = 1, \dots, 2^N \quad (2)$$

Die Energie eines Teilchen wird festgelegt durch das externe Feld \mathbf{B} und die Coulomb-Wechselwirkung mit dem nächsten Nachbarn. Wir erhalten also das Potential:

$$V_i = -J \mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_{i+1} - g\mu_b \mathbf{s}_i \cdot \mathbf{B} \quad (3)$$

Und den dazugehörigen Hamiltonian:

$$\mathbf{H} = \sum_{i=1}^{N-1} V_i = -J \sum_{i=1}^{N-1} \mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_{i+1} - g\mu_b \sum_{i=1}^N \mathbf{s}_i \cdot \mathbf{B} \quad (4)$$

- J : Austauschenergie

- \mathbf{B} : externes Magnetfeld
- g : gyromagnetisches Verhältnis
- $\mu_b = \frac{e\hbar}{2m_e c}$: Bohrsches Magneton

Sogar schon für eine kleine Anzahl an Teilchen wird die Anzahl der 2^N Konfigurationen sehr groß ($2^{20} > 10^6$)! Für einen Computer ist es daher unmöglich, bei einer realistische Probe mit 10^{23} Teilchen die Dynamik der einzelnen Spins zu simulieren.

Wir benötigen also ein statistisches Verfahren. Dieses wird umso genauer, je größer wir N wählen. Dazu müssen wir zunächst die Energie einer Spinkonfiguration festlegen:

$$E_{\alpha_k} = \langle \alpha_k | \sum_i V_i | \alpha_k \rangle = -J \sum_{i=1}^{N-1} s_i^{(k)} s_{i+1}^{(k)} - B\mu_b \sum_{i=1}^N s_i^{(k)} \quad (5)$$

Der Einfachheit halber wählen wir $B = 0$. Die Energie des Systems ist also nur durch die Interaktion der Spins untereinander bestimmt. Wie sich die Spins im Gleichgewichtszustand (also bei minimaler Energie) aufreihen hängt im wesentlichen von J ab.

- $J > 0$: Benachbarte Spins gleich gerichtet \rightarrow Ferromagnet
- $J < 0$: Benachbarte Spins entgegengesetzt \rightarrow Antiferromagnet

1.2 Die analytische Lösung des Ising-Modells

Für sehr große N lässt sich das Ising-Modell analytisch lösen:

$$U = \langle E \rangle \quad (6)$$

$$\frac{U}{J} = -N \tanh \frac{J}{k_B T} = -N \frac{e^{\frac{J}{k_B T}} - e^{-\frac{J}{k_B T}}}{e^{\frac{J}{k_B T}} + e^{-\frac{J}{k_B T}}} = \begin{cases} N, & k_B T \rightarrow 0 \\ 0, & k_B T \rightarrow \infty \end{cases} \quad (7)$$

Die analytische Lösung für die spezifische Wärme pro Teilchen und die Magnetisierung sind:

$$C(k_B T) = \frac{1}{N} \frac{dU}{dT} = \frac{\left(\frac{J}{k_B T}\right)^2}{\cosh^2\left(\frac{J}{k_B T}\right)} \quad (8)$$

$$M(k_B T) = \frac{N e^{\frac{J}{k_B T}} \sinh\left(\frac{B}{k_B T}\right)}{\sqrt{e^{\frac{2J}{k_B T}} \sinh^2\left(\frac{B}{k_B T}\right) + e^{-\frac{2J}{k_B T}}}} \quad (9)$$

1.3 Die Boltzmann-Verteilung der statistischen Mechanik

Wir nehmen nun an, dass die Teilchenzahl, das Volumen und die Temperatur fest sind. Hat ein System im Gleichgewicht die Temperatur T , so bedeutet das, dass jedes Atom im Durchschnitt eine Energie proportional zu T hat. Die Energie E_{α_k} eines Zustands α_k in einem kanonischen Ensemble ist gemäß der Boltzmann-Verteilung verteilt:

$$\mathcal{P}(E_{\alpha_k}, T) = \frac{e^{\frac{-E_{\alpha_k}}{k_B T}}}{Z(T)}, \quad Z(T) = \sum_{\alpha_k} e^{\frac{-E_{\alpha_k}}{k_B T}} \quad (10)$$

Dabei ist $Z(T)$ die Verteilungsfunktion.

2 Metropolis Algorithmus

Im Allgemeinen ist es unmöglich, bei einer thermodynamischen Simulation alle Punkte eines Phasenraums mit einzubeziehen, da der Phasenraum viel zu groß ist (hier 2^N). Wir wissen in diesem Fall, dass die Wahrscheinlichkeitsverteilung in einem kanonischen Ensemble einer Boltzmann-Verteilung gehorcht. Dieses Ensemble ist hier die Konfiguration der Spins. Unser Ziel ist es eine Funktion dieser Verteilung bestimmen, in unserem Fall E und M .

Der Metropolis-Algorithmus dient nun dazu, Konfigurationen gemäß einer bestimmten Wahrscheinlichkeitsverteilung zu produzieren. Dies geschieht durch eine sogenannte Markov-Kette, bei der der nächste Zustand jeweils aus dem vorherigen konstruiert wird. Das Ziel des Algorithmus ist in diesem Fall die Erzeugung einer zufälligen Kombination von Spins α_k mit Wahrscheinlichkeit:

$$\mathcal{P}(E_{\alpha_k}, T) \propto e^{\frac{-E_{\alpha_k}}{k_B T}} \quad (11)$$

Der Grund warum dies funktioniert ist der folgende: Im Gleichgewicht sind die Werte der Verteilungsfunktion \mathcal{P} folgendermaßen mit der Übergangsrate \mathcal{T} der Zustände α_k und α_{k+1} verknüpft:

$$\frac{\mathcal{T}(\alpha_k \rightarrow \alpha_{k+1})}{\mathcal{T}(\alpha_{k+1} \rightarrow \alpha_k)} = \frac{\mathcal{P}(\alpha_{k+1})}{\mathcal{P}(\alpha_k)} \quad (12)$$

Dies nennt man auch 'detailed balance condition'. Wenn wir die Übergänge zwischen den einzelnen Glieder der Markov-Kette nach dieser Vorschrift durchführen, sollten die einzelnen Glieder gemäß einer Boltzmann-Verteilung verteilt sein. In der Praxis geschieht dies folgendermaßen: In jedem Schritt erstellen wir eine zufällige Testkonfiguration α_{k+1} und berechnen deren Energie und Boltzmann-Faktor. Anschließend wählen wir eine Zufallszahl r_j im Bereich $(0, 1]$ und akzeptieren den Zustand nur, falls:

$$\frac{\mathcal{P}(\alpha_{k+1})}{\mathcal{P}(\alpha_k)} \geq r_j \quad (13)$$

Im Falle der Akzeptanz wird die Testkonfiguration als neue Ausgangskonfiguration gesetzt. Bezogen auf unseren Fall wird der Metropolis-Algorithmus also folgendermaßen implementiert:

1. Beginne mit einer beliebigen Spin-Konfiguration $\alpha_k = \{s_1, s_2, \dots, s_N\}$.
2. Produziere eine Testkonfiguration α_{tr} :
 - a) Wähle ein zufälliges Teilchen i aus.
 - b) Flippe seinen Spin.
3. Berechne die Energie $E_{\alpha_{tr}}$ der Testkonfiguration.
4. Falls $E_{\alpha_{tr}} \leq E_{\alpha_k}$, akzeptiere die Testkonfiguration und setze $\alpha_k = \alpha_{tr}$.
5. Falls $E_{\alpha_{tr}} > E_{\alpha_k}$, akzeptiere mit relativer Wahrscheinlichkeit $\mathcal{R} = e^{\frac{-\Delta E}{k_B T}}$:
 - a) Wähle eine Zufallszahl $0 < r_j \leq 1$.
 - b) Setze $\alpha_k = \begin{cases} \alpha_{tr}, & \text{falls } \mathcal{R} \geq r_j \rightarrow \text{akzeptieren} \\ \alpha_k, & \text{falls } \mathcal{R} < r_j \rightarrow \text{verwerfen} \end{cases}$
6. Gehe wieder zu Schritt 2.

$\mathcal{R} = \frac{P_{tr}}{P_k} = e^{\frac{-\Delta E}{k_B T}}$ ist das Verhältnis der Testkonfiguration zur aktuellen Konfiguration, und damit die Übergangsrate $\frac{T(\alpha_{tr})}{T(\alpha_k)}$. Falls die Energie kleiner wird, ist \mathcal{R} größer als 1 und die Konfiguration wird auf jeden Fall akzeptiert. Das besondere am Metropolis-Algorithmus ist, dass auch ungünstige Zustände teilweise akzeptiert werden können. Dadurch wird in die Suche einen gewisse Nichtlinearität eingebaut, die in sehr flexibler werden lässt.

Diese Eigenschaft des Metropolis-Algorithmus basiert anschaulich auf der physikalischen Tatsache, dass auch im thermischen Gleichgewicht statistische Fluktuationen um $k_B T$ möglich sind. Es ist also nur unwahrscheinlich, ein Teilchen in einem Zustand größer als der Mittelwert vorzufinden, aber nicht unmöglich.

Eine wichtige Voraussetzung für das Funktionieren des Algorithmus ist, dass Ergodizität sichergestellt ist. Das bedeutet anschaulich, dass jeder Zustand des Phasenraums prinzipiell durch eine endliche Anzahl an Schritten erreicht werden kann. Gleichzeitig darf dies aber nicht zu lange dauern, da der Algorithmus sonst zu langsam konvergiert.

Die zu bestimmenden Größen E und M erhält man durch Summation über die Zustände nach einer ausreichenden Zahl an Anfangsiterationen. Umso länger man wartet, bevor man die Summation beginnt, desto eher ist das System tatsächlich im Gleichgewichtszustand. Die Energie und die Magnetisierung für eine Spinkonfiguration α_k sind im Gleichgewicht gegeben durch:

$$E_{\alpha_k} = -J \sum_{i=1}^{N-1} s_i^{(k)} s_{i+1}^{(k)}, \quad |M_k| = \sum_{i=1}^N s_i^{(k)} \quad (14)$$

Die innere Energie ist der Mittelwert der Energien von einer großen Zahl an α_k :

$$U(T) = \langle E_{\alpha_k} \rangle. \quad (15)$$

Die Wärmekapazität (pro Teilchen) kann man theoretisch über die elementare Definition:

$$C = \frac{1}{N} \frac{dU}{dT} \quad (16)$$

berechnen, aufgrund der Fluktuationen ist dies allerdings numerisch ungenau. Besser ist es die Wärmekapazität über die Fluktuationen der Energie im Gleichgewicht zu berechnen. Man summiert für den Mittelwert über M' Iterationen:

$$U_2 = \frac{1}{M'} \sum_{t=1}^{M'} (E_t)^2, \quad (17)$$

$$C = \frac{1}{N^2} \frac{U_2 - (U)^2}{k_B T^2} = \frac{1}{N^2} \frac{\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2}{k_B T^2}. \quad (18)$$

Als Startkonfiguration kann man nun entweder einen sogenannten "kalten Start" nehmen, bei dem alle Spins gleichgerichtet oder abwechseln ausgerichtet sind, oder einen "heißen Start", bei dem die Spins zufällig ausgerichtet sind. Beide müssen aber nach genügend langer Zeit ($\approx 10N$ Iterationen) das gleiche Ergebnis liefern.

3 Auswertung der Simulation des 1D-Ising Modells

3.1 Graphische Darstellung der Ergebnisse

Folgende Abbildung zeigt die Ergebnisse für E , M und C als Funktion der Temperatur. Da eine Markov-Kette nur für eine bestimmte Temperatur erzeugt wird, muss man hierfür das Programm mit jeweils verschiedenen Temperaturen durchführen. Die folgenden Graphiken zeigen die numerischen und analytischen Lösungen bezogen auf ein Teilchen:

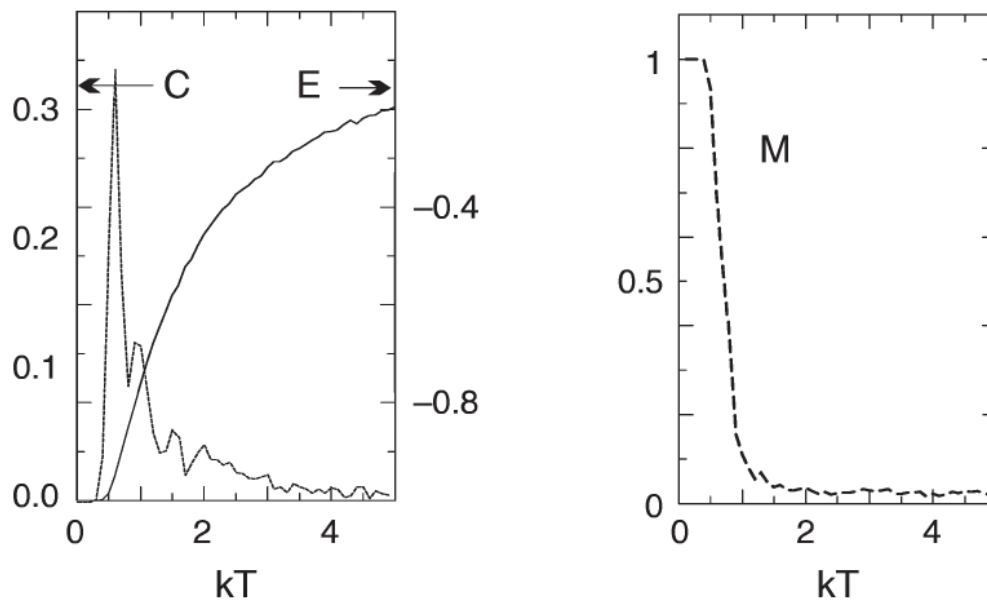


Abbildung 2: Ergebnisse für 100 Spins und $J=1$ als Funktion der Temperatur

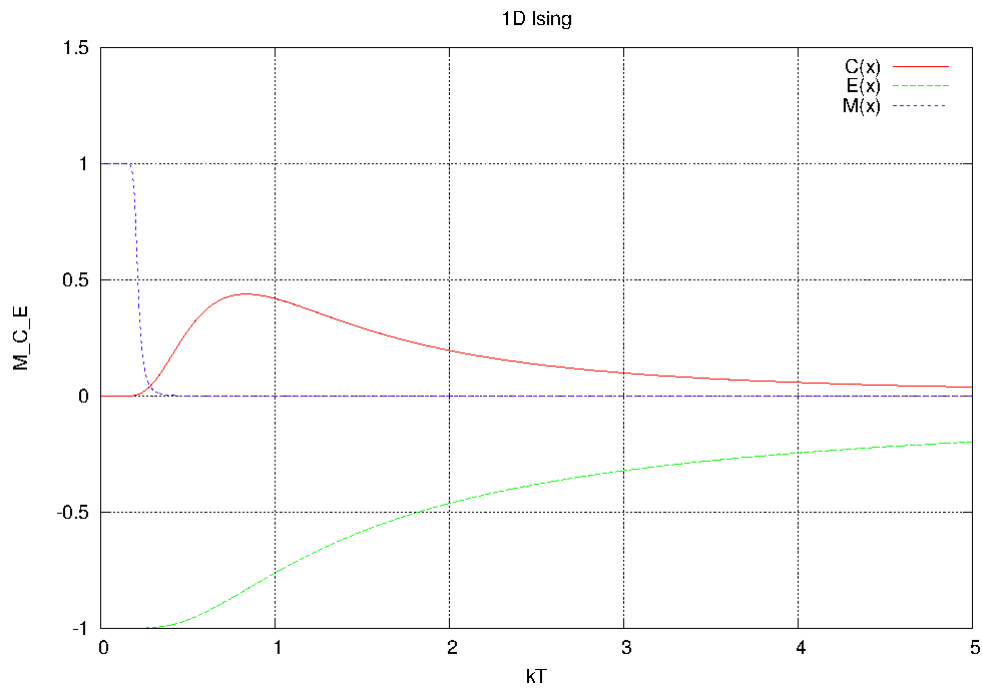


Abbildung 3: Exakte Lösung für 100 Spins und $J=1$. Für B wurde ein sehr kleiner Wert ungleich 0 gewählt

Dies deckt sich gut mit der analytischen Lösung. Für hohe Temperaturen nähert sich \mathcal{R} immer näher an 1 an. Dadurch werden neue Konfigurationen sehr oft akzeptiert, auch wenn die Energie steigt, wodurch starke Fluktuationen entstehen. Die Magnetisierung verschwindet also. Die Energie steigt mit der Temperatur an und nähert sich einem Sättigungswert, da irgendwann im Mittel gleich viele Spins parallel und antiparallel sind. C ist ungenauer, da es indirekt aus einer anderen fehlerbehafteten Größe errechnet wird. Das Modell simuliert auch einen anderen Prozess bei der Magnetisierung, nämlich die Bildung von magnetischen Domänen. Folgende Abbildung zeigt die Bildung von Domänen für 100 Spins nach einem kalten Start in Abhängigkeit von der Anzahl an Iterationen:

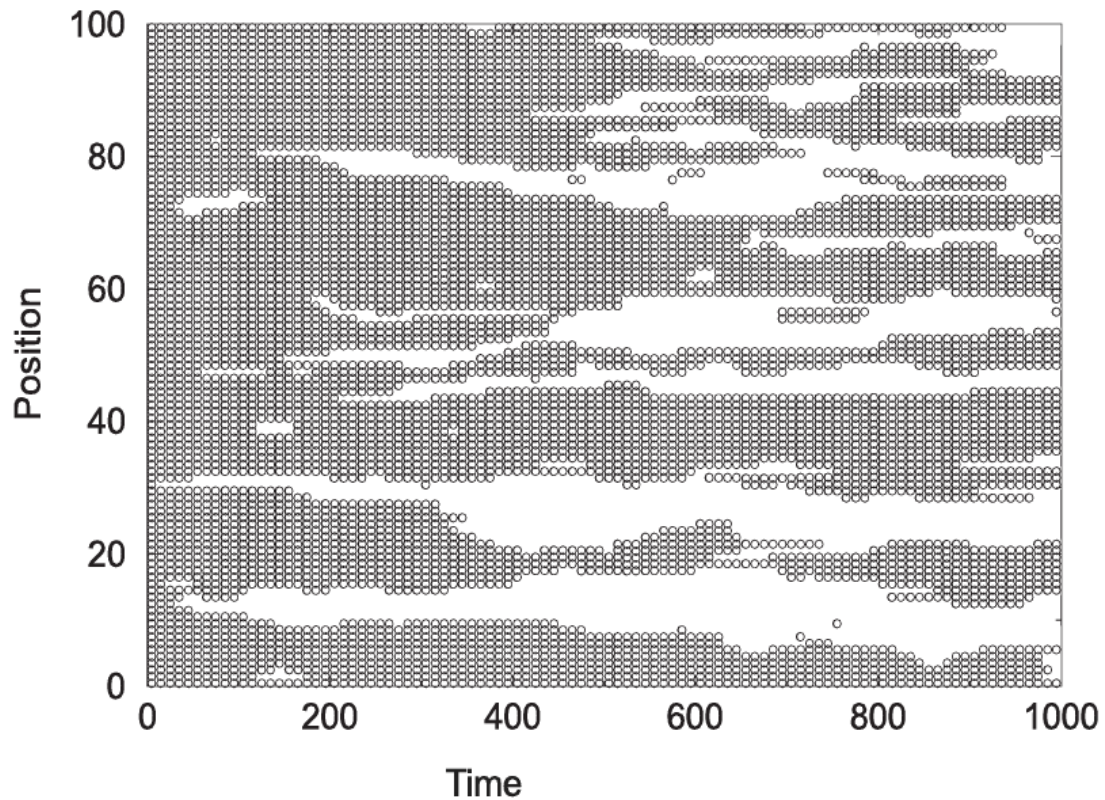


Abbildung 4: Bildung von Domänen im Gleichgewicht

3.2 Nachteile des 1D-Ising-Modells

Das eindimensionale Ising-Modell hat, obwohl es den Sachverhalt ganz gut darstellt, einige Nachteile:

- Der Weg zum Gleichgewicht wird schlecht beschrieben
- Es sind keine Phasenübergänge möglich, wie an den Graphiken zu sehen ist. Dieser Sachverhalt liegt auch bei der analytischen Lösung vor, scheint also im grundlegenden Modell selbst begründet zu sein.
- Die Simulation funktioniert effizient auch nur für kleine N in der Größenordnung 10^4 . Dies reicht aber meist aus, um die richtigen thermodynamischen Eigenschaften zu erzeugen.

4 Simulation des 2D-Ising-Modell

4.1 Anpassung von Modell und Algorithmus

Im zweidimensionalen Fall ändert sich das Potential zwischen den Spins und damit die Energie. Jeder Spin hat nun 4 nächste Nachbarn:

$$E_{\alpha_k} = -J \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=1}^{M-1} (s_{ij}^{(k)} s_{i+1,j}^{(k)} + s_{ij}^{(k)} s_{i-1,j}^{(k)} + s_{ij}^{(k)} s_{i,j+1}^{(k)} + s_{ij}^{(k)} s_{i,j-1}^{(k)}) - B\mu_b \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^M s_{ij}^{(k)} \quad (19)$$

Da der Metropolis-Algorithmus nur auf der Energie der Konfiguration basiert, ist seine Funktionsweise unabhängig von der Dimension des Systems. Das Prinzip ist also identisch.

Die Energie und Magnetisierung einer Konfiguration α_k im Gleichgewicht (mit $B = 0$) sind analog gegeben durch:

$$E_{\alpha_k} = -J \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=1}^{M-1} (s_{ij}^{(k)} s_{i+1,j}^{(k)} + s_{ij}^{(k)} s_{i-1,j}^{(k)} + s_{ij}^{(k)} s_{i,j+1}^{(k)} + s_{ij}^{(k)} s_{i,j-1}^{(k)}), \quad (20)$$

$$|M_k| = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^M s_{ij}^{(k)}. \quad (21)$$

Die innere Energie ist ebenfalls wieder der Durchschnittswert der Energien im Gleichgewicht:

$$U(T) = \langle E \rangle. \quad (22)$$

Die Berechnung von C erfolgt ebenfalls wie im eindimensionalen Fall:

$$C = \frac{1}{N^2} \frac{\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2}{k_B T^2}. \quad (23)$$

Die Erweiterung zum dreidimensionalen Fall erfolgt auf die gleiche Art und Weise.

4.2 Auswertung des 2D-Ising-Modells

Folgende Abbildung zeigt die drei relevanten Größen in Abhängigkeit von der Temperatur:

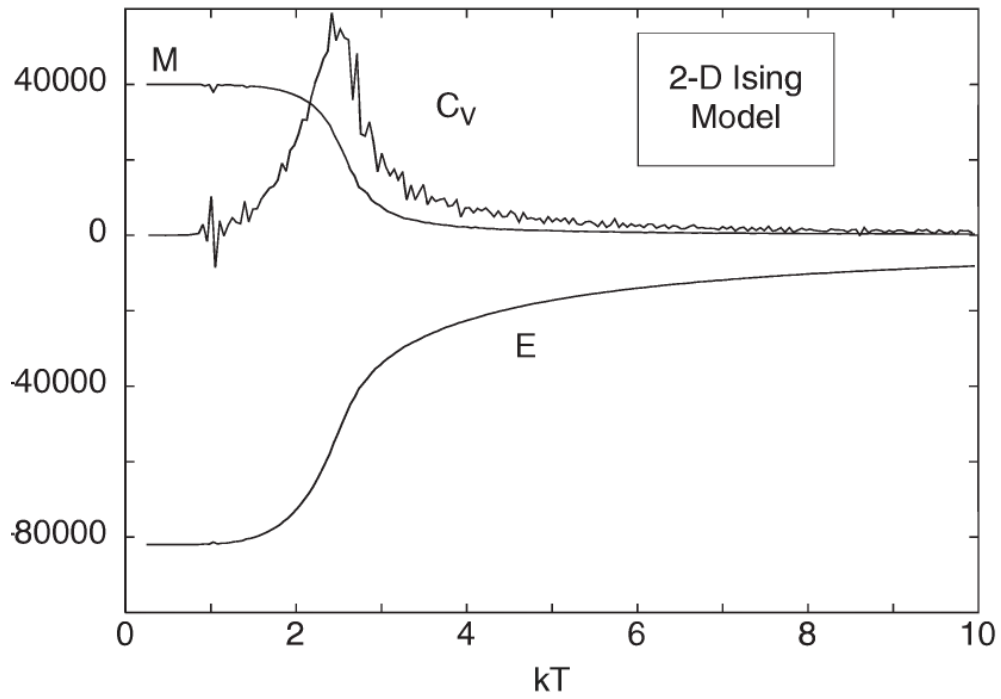


Abbildung 5: Ergebnisse für 40000 Spins und $J=1$ als Funktion der Temperatur. Die Werte von C und E wurden skaliert, um ins gleiche Diagramm zu passe

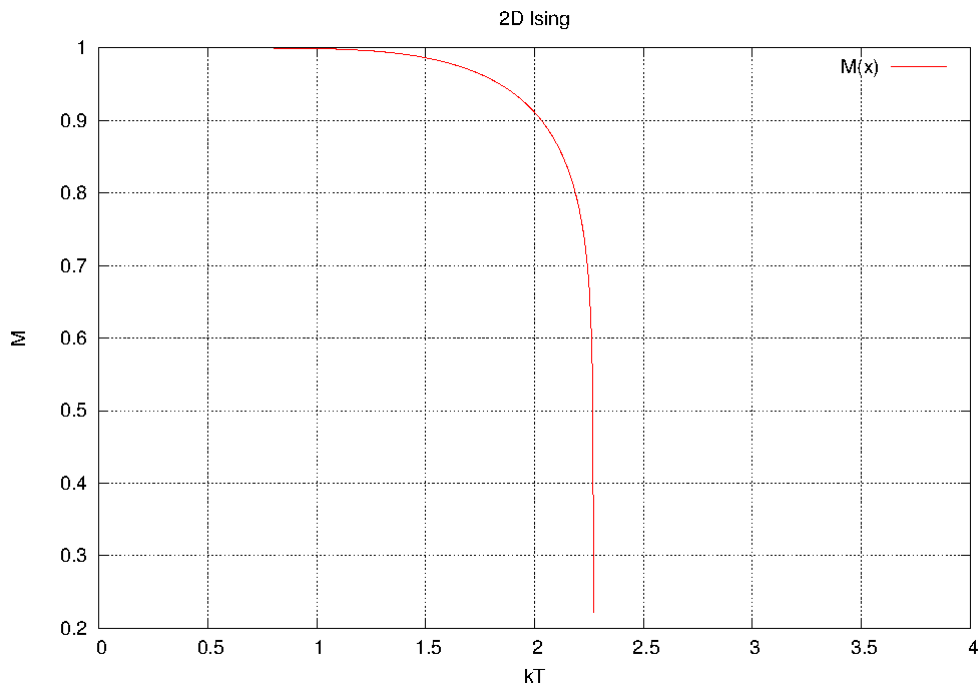


Abbildung 6: Exakte Magnetisierung für $J=1$ als Funktion der Temperatur

Gut zu erkennen ist hier der Phasenübergang bei $kT \approx 2,269$. In diesem Punkt scheint das 2D-Modell dem 1D-Modell qualitativ Überlegen zu sein. Die anderen Nachteile des 1D-Ising-Modells bleiben aber. Vor allem ist diese Berechnung noch deutlich zeitaufwändiger für große N .

5 Quellenangaben

- Rubin H. Landau, Manuel Jose Paez Christian C. Bordeianu, A Survey of Computational Physics, 2008, Princeton University Press
- Tao Pang, An Introduction to Computational Physics, 2006, Cambridge University Press