



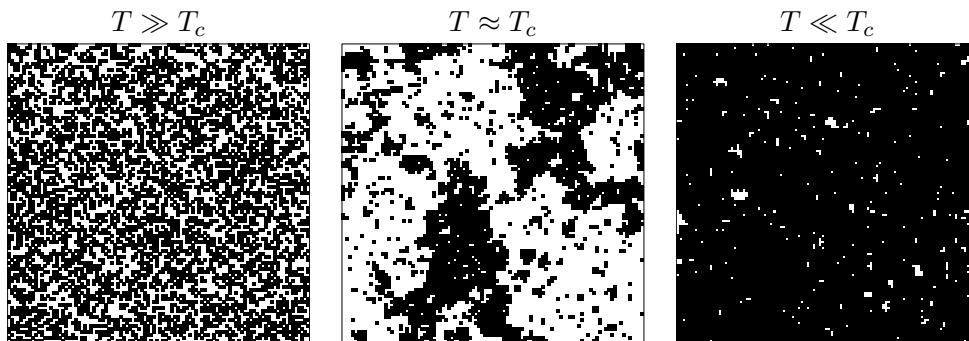
V16 – Phasenübergang und Hysterese im Ising-Modell

Ort: Labor C60.205 (Professur Simulation naturwissenschaftlicher Prozesse)

Betreuer: Prof. Dr. Martin Weigel

Das Praktikum soll den Rahmen des in der Statistischen Physik behandelten Stoffes erweitern. Neben der Beobachtung, wie ein System in einen thermodynamischen Gleichgewichtszustand relaxiert, soll ein Verständnis für Phasenübergänge und das Auftreten von Hysterese erlangt werden. Dies geschieht am Beispiel des zweidimensionalen Ising-Modells.

Um zum Verständnis des Ferromagnetismus beizutragen, wurde von Ernst Ising 1925 in der Arbeitsgruppe von Wilhelm Lenz ein System wechselwirkender Spins untersucht, das später als Ising-Modell bekannt wurde [1]. In seiner Dissertation untersuchte Ising den eindimensionalen Fall; da dieser keinen Phasenübergang in eine geordnete ferromagnetische Phase zeigt, schloss Ising, dass das Modell nicht von größerem Interesse sei. Enttäuscht verließ er das Forschungsumfeld, wurde Lehrer und wanderte nach Verfolgung durch die Nazis nach Amerika aus. Erst 25 Jahre nach seiner Promotion erfuhr er, dass das Ising-Modell trotz seiner konzeptionellen Einfachheit zu einem Schlüsselmodell der statistischen Physik geworden war. Heute reichen die Anwendungen bis in entfernte Gebiete wie etwa die Biologie, Hirnforschung, Soziologie und Ökonomie. Inzwischen sind zehntausende von wissenschaftlichen Arbeiten veröffentlicht worden, die sich mit dem Ising-Modell befassen.



Ziel der Arbeit soll die Simulation des zweidimensionalen Ising-Modells mit Nächste-Nachbar-Wechselwirkung auf einem Quadratgitter mit periodischen Randbedingungen mit Hilfe des Metropolis-Algorithmus sein. Das Ising-Modell mit Nächste-Nachbar-Wechselwirkung stellt eine Erweiterung eines Systems N unabhängiger Spins $\sigma_i \in \{-1, +1\}$ dar. Seine Energie ist durch folgende Hamilton-Funktion gegeben

$$\mathcal{H}(\sigma_1, \dots, \sigma_N) = -J \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j - H \sum_i \sigma_i$$

$\langle ij \rangle$ bezeichnet jene Paare (i, j) die auf dem gewählten Gitter benachbart sind, J ist die Wechselwirkungsstärke und H ein äußeres magnetisches Feld.



Im Metropolis-Algorithmus wählt man in einem Iterationsschritt zufällig einen Spin der aktuellen Konfiguration aus und entscheidet, ob er umgeklappt wird oder nicht. Die Wahrscheinlichkeit zum Umklappen des i -ten Spins, P_{flip} , hängt von der Energiedifferenz $\Delta \mathcal{H}$ der damit verbundenen Konfigurationen ab [2]:

- ▶ Wird durch das Umschalten Energie gewonnen $\Delta \mathcal{H} \leq 0$, wird der Spin geflippt, $P_{\text{flip}} = 1$.
- ▶ Ist die Energie der neuen Konfiguration größer, wird diese nur mit der Wahrscheinlichkeit $P_{\text{flip}} = e^{-\beta \Delta \mathcal{H}}$ angenommen, wobei $\beta = 1/(k_B T)$ der inversen Temperatur entspricht.

1. Simulation des zweidimensionalen Ising-Modells

Realisieren Sie ein zweidimensionales Quadratgitter mit Kantenlänge L mit Ising-Spins und die zugehörige Spinflipdynamik unter Benutzung des Metropolis-Algorithmus in einer Programmiersprache ihrer Wahl. Bestimmen Sie die mittlere Magnetisierung m sowie die mittlere Energie e pro Spin. Untersuchen Sie die folgenden Fragen:

- ▶ Wie lässt sich die Annahme des Umklappens für den Fall $\Delta \mathcal{H} \geq 0$ mit einer Wahrscheinlichkeit $P_{\text{flip}} < 1$ mit Hilfe einer (Pseudo-)Zufallszahl realisieren?
- ▶ Betrachten Sie die zeitliche Entwicklung der Magnetisierung pro Spin

$$m = \frac{1}{L^2} \sum_i \sigma_i$$

sowie der Energie pro Spin $e = \mathcal{H}/L^2$. Vergleichen Sie den Verlauf beim Start der Simulation in einer geordneten Konfiguration mit dem in einer zufälligen Anordnung. Wie lassen sich die zu erwartenden Werte dieser Größen im thermischen Gleichgewicht abschätzen?

- ▶ Welche Werte für die Energie und Magnetisierung erwarten Sie für $T \rightarrow 0$ und $T \rightarrow \infty$. Stimmen diese mit Ihren Ergebnissen überein?
- ▶ Wie verändern sich die Ergebnisse, wenn Sie unterschiedliche Systemgrößen betrachten? Was passiert, wenn Sie periodische statt freier Randbedingungen betrachten (oder umgekehrt)?

2. Phasenübergänge und Hysterese

Onsager [3] löste das 2-dimensionale Ising-Modell und hat bei Abwesenheit eines äußeren Feldes einen Phasenübergang bei $\beta_c = \frac{1}{2} \ln(1 + \sqrt{2})$ gefunden. Die in der Simulation gefundenen Gleichgewichtswerte der mittleren Magnetisierung sowie der Energie pro Spin in Abhängigkeit von der Temperatur und in Abwesenheit eines äußeren Feldes können mit den analytischen Ergebnissen aus der Literatur [4, 3, 5, 6, 7] verglichen werden. Darüber hinaus kann die mittlere Magnetisierung in Abhängigkeit der Temperatur T auch in einem äußeren Feld untersucht werden.

Betrachten Sie ebenfalls die Temperaturabhängigkeit der spezifischen Wärme pro Spin. Wie lässt sich der auftretende Phasenübergang charakterisieren, siehe Ref. [8]? Betrachten Sie hierzu auch, wie sich die Suszeptibilität χ bei der kritischen Temperatur T_c verhält. Betrachtet man die Gleichgewichtswerte der mittleren Magnetisierung bei konstanter Temperatur T unter Variation des äußeren Feldes B , in dem man als Startkonfiguration des Spingitters zum neuen Wert des äußeren Feldes stets eine repräsentative Konfiguration zum alten Wert des äußeren Feldes nimmt, kann Hysterese beobachtet werden. Diskutieren Sie dieses Verhalten zum einen für unterschiedliche Temperaturen und zum anderen unter Zuhilfenahme der inneren Energie!



3. Molekularfeldtheorie des Ising-Modells

Stellen Sie den Ergebnissen der Simulation die Lösungen aus der Molekularfeldnäherung gegenüber. Diese Näherung ist besonders geeignet um Systeme mit hoher Gitterdimension d zu beschreiben, so dass die durchschnittliche Magnetisierung der Nachbarspins durch die mittlere Magnetisierung pro Spin m gut approximiert wird,

$$\sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j \approx \sum_i \sigma_i z m.$$

Dabei bezeichnet z die Koordinationszahl, d. h. die Anzahl der nächsten Nachbarn. Für ein d -dimensionales kubisches Gitter gilt $z = 2d$.

Hinweis: Die Mean-Field-Theorie des Ising-Modells fällt mit der Molekularfeldtheorie von Weiss [9] zusammen, einem der ersten Konzepte zur Erklärung ferromagnetischen Verhaltens.

- [1] E. Ising, "Beitrag zur Theorie des Ferromagnetismus," *Z. Phys.* **31**, 253–258 (1925).
- [2] M. Newman and G. Barkema, *Monte Carlo Methods in Statistical Physics* (Oxford University Press, Oxford, 1999).
- [3] L. Onsager, "Crystal statistics. I. A two-dimensional model with an order-disorder transition," *Phys. Rev.* **65**, 117 (1944).
- [4] H. Nishimori and G. Ortiz, *Elements of phase transitions and critical phenomena* (Oxford University Press, Oxford, 2011).
- [5] C. N. Yang, "The spontaneous magnetization of a two-dimensional Ising model," *Phys. Rev.* **85**, 808 (1952).
- [6] B. Kaufman, "Crystal statistics. II. Partition function evaluated by spinor analysis," *Phys. Rev.* **76**, 1232 (1949).
- [7] A. E. Ferdinand and M. E. Fisher, "Bounded and inhomogeneous Ising models. I. Specific heat anomaly of a finite lattice," *Phys. Rev.* **185**, 832 (1969).
- [8] K. Huang, *Statistical Mechanics* (Wiley India Pvt. Limited, 2008).
- [9] P. Weiss, "Molekulares Feld und Ferromagnetismus," *Physikalische Zeitschrift* **9**, 31 (1908).