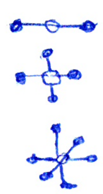
Isingovy modely - ukázka aplikace termodynamického MC

- tyto modely byly původně navržené jako velmi hrubé modely magnetických materiálů, ale má i jiné interpretace, např. jako model binárních slitin apod.
- byl to první mikroskopický model pro systémy s fázovými přechody, který byl přesně řešitelný v uzavřené formě v 1D a v některých případech i ve 2D
- jde o modely na pravidelné mřížce, kam umisťujeme např. „spiny" či atomy, které mají obvykle 2 stavy a interagují jen se svými blízkými sousedy
- metoda Monte Carlo může být použita k výpočtu termodynamických vlastností těchto modelů, kdy středujeme přes „náhodně" generované stavy celého systému a jde tedy o vhodný model pro ukázku, jak MC funguje

- Hamiltonián systému pro spiny na mřížce
  - označme σ_α hodnotu spinu v bodě α mřížky (může být 1D, 2D, 3D), která může nabývat hodnot ± 1 (spin nahoru a dolů)
    (jde o klasický model, kvantově tento systém popisuje tzv. Heisenbergův model)
  - každý spin na mřížce interaguje jednak s externím magnetickým polem B a dále se svými sousedy přes vazbovou konstantu J:

v 1D — 2 sousedé
ve 2D — 4
ve 3D — 6



$$H = -\mu B \sum_\alpha \sigma_\alpha - J \sum_{\langle\alpha\beta\rangle} \sigma_\alpha \sigma_\beta$$

μ … magnetický moment (obvykle položen 1)
$\sum_\alpha$ … suma přes všechny spiny
$\sum_{\langle\alpha\beta\rangle}$ … suma přes všechny sousedící páry

přičemž uvažujeme periodické okrajové podmínky
např. v 1D σ_1 interaguje s σ_2 a σ_N ← počet spinů v 1D
ve 2D σ_{11} interaguje s σ_{12}, σ_{21}, σ_{1N} a σ_{N1}

- první člen hamiltoniánu odpovídá tomu, že se spiny snaží zarovnat ve směru pole B (díky znaménku minus je nižší energie, pokud σ_α mají stejný směr (znaménko) jako B) a druhý člen bude mít minimum, pokud jsou všechny spiny stejné a $J>0$ ($\uparrow\uparrow\uparrow\ldots\uparrow$ – případ „feromagnetismu") nebo se naopak střídají a $J<0$ ($\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\ldots$ – „antiferomagnetismus")

- <u>termodynamické veličiny</u>
  - nechť N značí celkový počet spinů na mřížce, pak máme 2^N možných konfigurací (celkových stavů) systému s rozložením spinů $\sigma = \{\sigma_\alpha\}_{\alpha=1}^{N}$
  - zajímá nás, jak se tento systém chová při určité konečné teplotě T a uvažujeme tedy <u>kanonický soubor</u> stavů, kde se stav σ vyskytuje s pravděpodobností

$$\varrho(\sigma) = \frac{e^{-\beta H(\sigma)}}{Z}, \quad \text{kde} \quad \beta = \frac{1}{\underbrace{k_B}_{\text{Boltzmannova konstanta}} T}$$

a Z je tzv. partiční suma

$$Z(B,T) = \sum_{\underbrace{\sigma}_{2^N \text{ stavů}}} e^{-\beta H(\sigma)}$$

  - pokud bychom znali $Z(B,T)$, pak z ní můžeme spočítat další termodynamické veličiny

[např. pro jednorozměrnou mřížku lze $Z(B,T)$ vyjádřit jako $Z(B,T) = \lambda_+^N + \lambda_-^N$

kde $\lambda_\pm = e^{\beta J}\left[\cosh(\beta\mu B) \pm \sqrt{\sinh^2(\beta\mu B) + e^{-4\beta J}}\right]$ (vlastní čísla matice $\begin{pmatrix} e^{\beta(J+\mu B)} & e^{-\beta J} \\ e^{-\beta J} & e^{\beta(J-\mu B)} \end{pmatrix}$)

(viz např. Huang: Statistical Mechanics, 2nd ed. (Wiley 1987), str. 361–3)]

- <u>volná energie</u> (na jeden spin, viz faktor $\frac{1}{N}$)

$$f(B,T) = -\frac{1}{\beta N} \ln Z(B,T)$$

[v limitě $N \to \infty$ přispívá jen λ_+ a dostaneme pro 1D model
$$f(B,T) = -J - \frac{1}{\beta} \ln\left[\cosh(\beta\mu B) + \sqrt{e^{-4\beta J} + \sinh^2(\beta\mu B)}\right]$$]

- z volné energie pak derivacemi podle T nebo B dostaneme: pro $H = -\mu B \sum_\alpha \sigma_\alpha - J \sum_{\langle\alpha\beta\rangle} \sigma_\alpha \sigma_\beta$

- magnetizace (na jeden spin)

$$M(B,T) = -\frac{\partial F(B,T)}{\partial B} = +\frac{1}{\beta N} \frac{\frac{\partial Z}{\partial B}}{Z(B,T)} = \frac{1}{\beta N} \sum_\sigma \left(\frac{e^{-\beta H}}{Z} \mu\beta \sum_\alpha \sigma_\alpha \right) =$$

$$= \frac{\mu}{N} \sum_\sigma \varrho(\sigma) \left(\sum_\alpha \sigma_\alpha \right) = \frac{1}{N} \langle m \rangle$$

$\mu \sum_\alpha \sigma_\alpha$ ← magnetizace dané konfigurace spinů

- susceptibilita (na jeden spin)

$$\chi(B,T) = \frac{\partial M}{\partial B} = \frac{\mu}{N} \frac{\partial}{\partial B} \sum_\sigma \frac{e^{-\beta H}}{Z(B,T)} \left(\sum_\alpha \sigma_\alpha \right) =$$

$$= \frac{\mu}{N} \sum_\sigma \left[\frac{\mu\beta \left(\sum_\alpha \sigma_\alpha\right)^2 e^{-\beta H}}{Z} - \frac{e^{-\beta H}}{Z^2} \left(\sum_\alpha \sigma_\alpha \right) \sum_\sigma \mu\beta \left(\sum_\alpha \sigma_\alpha \right) e^{-\beta H} \right] =$$

$$= \frac{\beta}{N} \left(\langle m^2 \rangle - \langle m \rangle^2 \right)$$, kde opět $m = \mu \sum_\alpha \sigma_\alpha$

- vnitřní energie (na jeden spin)

$$U(B,T) = -T^2 \frac{\partial}{\partial T} \left(\frac{F(B,T)}{T} \right) = \frac{k_B T^2}{N} \frac{\partial \ln Z}{\partial T} =$$

$$= \frac{k_B T^2}{N} \frac{\sum_\sigma e^{-\frac{H}{k_B T}} \left(\frac{H}{k_B T^2} \right)}{Z} = \frac{1}{N} \sum_\sigma \varrho(\sigma) H(\sigma)$$

tj. dle očekávání středujeme energii přes konfigurace

- specifické teplo (na jeden spin)

$$c(B,T) = \frac{\partial U(B,T)}{\partial T} = \frac{1}{N} \sum_\sigma H(\sigma) \frac{\partial}{\partial T} \frac{e^{-\frac{H}{k_B T}}}{Z(B,T)} =$$

$$= \frac{1}{N} \sum_\sigma H(\sigma) \left[\frac{e^{-\frac{H}{k_B T}}}{Z} \frac{H(\sigma)}{k_B T^2} - \frac{e^{-\frac{H}{k_B T}}}{Z^2} \sum_\sigma e^{-\frac{H}{k_B T}} \frac{H(\sigma)}{k_B T^2} \right] =$$

$$= \frac{1}{N k_B T^2} \left(\langle H(\sigma)^2 \rangle - \langle H(\sigma) \rangle^2 \right)$$

tedy buď jde o střední hodnoty (až na konstantu) pro magnetizaci a vnitřní energii nebo o střední kvadratickou odchylku pro susceptibilitu a specifické teplo příslušných „naměřených" hodnot pro jednotlivé konfigurace (stavy)

- poznámky k implementaci metody MC

- k výpočtu středních hodnot termodyn. veličin použijeme přímo odvozené vzorce, jen se omezíme na omezený počet konfigurací spinů generovaných např. pomocí Metropolisova algoritmu s rozdělením pravděpodobnosti $\varrho(\sigma, T, B) = \dfrac{e^{-\beta H(\sigma)}}{Z}$

- při rozhodování, zda je nová konfigurace přijata nebo ne, potřebujeme pouze poměr

$$\frac{\varrho(\sigma_{trial})}{\varrho(\sigma_{(k)})} = e^{-\beta[H(\sigma_{trial}) - H(\sigma_k)]} = e^{-\beta \Delta E}$$

konfigurace v kroku k

kde ΔE je změna energie při pokusné změně konfigurace systému z σ_k na σ_{trial}

- změna konfigurace je přijata pokud $\Delta E < 0$

  nebo $e^{-\beta \Delta E} \geq \xi_{\langle 0,1)}$ = náhodné číslo na int. $\langle 0,1)$

- obvykle se mění jen jeden spin σ_i (buď náhodný nebo systematický výběr)

  v 1D je pak změna energie jednoduše

$$\Delta E = 2\sigma_i \left[\mu B + J(\sigma_{i-1} + \sigma_{i+1})\right]$$

kde σ_i je hodnota původní (ne zkušební)

a $i \pm 1$ jsou sousední spiny (včetně periodických pod-inek)

ve 2D bude

$$\Delta E = 2\mu B \sigma_{ij} + 2J\sigma_{ij}(\sigma_{i^+j} + \sigma_{i^-j} + \sigma_{ij^+} + \sigma_{ij^-})$$

kde $i^+ = i+1$ pro $i < N$ a podobně
$\quad\;\; = 1$ pro $i = N$ pro i^-, j^+ a j^-

- pro vyšší efektivitu středování je důležité nejprve provést termalizaci (relaxaci) systému, zvláště pro nízké teploty, případně velká pole B
(viz notebooky v Mathematice)