

Praktikum
Computational Physics
LV-Nr. PR 132.391

Simulation
eines
Spin-1/2-Ising-Modells
mit der
Monte-Carlo-Methode

Martin Ellinger
9326616

Werner Scholz
9426502

Wien, Juni 1998

1 Einleitung

Computerexperimente werden häufig eingesetzt, um physikalische Modelle mit experimentellen Ergebnissen zu vergleichen und das Modell damit auf seine Verlässlichkeit und Anwendbarkeit zu überprüfen. Im speziellen können sie zum Test von Näherungsverfahren verwendet werden und ermöglichen auch die Behandlung von Systemen, die die Gültigkeitsgrenzen von Näherungsverfahren überschreiten. Computerexperimente haben auch überall dort ihre Berechtigung, wo es für ein physikalisches Modell nur in Teilbereichen analytische und damit exakte Lösungen gibt oder wo diese zu aufwendig zu bestimmen wären. Computersimulationen von Spin-Ising-Modellen erlauben die Untersuchung von Phasenübergängen in dünnen magnetischen Schichten. Analytische Lösungen gibt es nur in ein und zwei Dimensionen. Um Mehrschicht-Systeme zu behandeln, muß man auf mean-field-Theorien mit entsprechenden Näherungen zurückgreifen, oder Computersimulationen durchführen, deren Ergebnisse wir im folgenden zeigen.

2 Grundlagen

2.1 Spin-1/2-Ising-Modell

Beim Spin-1/2-Ising-Modell wird angenommen, daß sich Spins s_i an den Gitterplätzen eines Kristallgitters, das dem zu simulierenden Material entspricht, befinden. Nimmt man die Spinquantenzahl mit $l = 1/2$ an, dann können die Spins lediglich $2l + 1 = 2$ Zustände $s_i = \pm 1$ haben. Die Hamiltonfunktion dieses Systems hat die Form

$$H = - \sum_{\substack{i,j \\ i \neq j}} J_{ij} s_i s_j - H_{ext} \sum_i s_i. \quad (1)$$

Die erste Summation erstreckt sich theoretisch über das gesamte Gitter, praktisch werden jedoch nur Wechselwirkungen zwischen nächsten Nachbarn angenommen. Nimmt man weiters an, daß die Wechselwirkungen für alle nächsten Nachbarn konstant sind, so reduziert sich J_{ij} auf ein Skalar J . Im Fall $J > 0$ führt die parallele Ausrichtung der Spins zu einer Reduzierung der Energie und wird daher bevorzugt, sodaß es zu ferromagnetischem Verhalten kommt. Ist $J = 0$, dann verschwindet die Wechselwirkung zwischen den Spins und man erhält paramagnetisches Verhalten. Ist schließlich $J < 0$, so wird antiparallele Ausrichtung benachbarter Spins favorisiert und damit antiferromagnetisches Verhalten hervorgerufen.

2.2 Mittelwertbildung

Um thermodynamische Erwartungswerte zu bestimmen, wird beim Monte-Carlo-Verfahren der Konfigurationsraum entlang eines Zufallspfads („random walk“) abgetastet. Das Phasenraumintegral des kanonischen Ensembles

$$\langle A \rangle = \frac{\int A(z) \exp(-\beta H(z)) dz}{\int \exp(-\beta H(z)) dz}$$

wird durch einen stochastischen Mittelwert ersetzt.

$$\langle A \rangle = \frac{\sum_{\{z\}} A(z) \exp(-\beta H(z))}{\sum_{\{z\}} \exp(-\beta H(z))}$$

Werden alle Phasenraumpunkte z gleich gewichtet, so wird das als „direct sampling“ bezeichnet. Dabei werden jedoch auch nicht repräsentative Phasenraumpunkte berücksichtigt. Beim „importance sampling“ werden diese nicht zufällig ausgewählt, sondern entsprechend einer Wahrscheinlichkeitsverteilung $P(z)$.

$$\langle A \rangle = \frac{\sum_{\{z\}} A(z) P^{-1}(z) \exp(-\beta H(z))}{\sum_{\{z\}} P^{-1}(z) \exp(-\beta H(z))}$$

2.3 Markov-Kette

Einen Zufallspfad, der eine Folge von Punkten $\{z\}$ im Phasenraum auswählt, die gemäß $P(z)$ verteilt sind, kann man durch einen Markov-Prozeß erzeugen. Nach Metropolis verwendet man die Wahrscheinlichkeit für einen Übergang von einem Zustand z zu einem Zustand z'

$$W(z \rightarrow z') = \begin{cases} \exp(-\beta(H(z') - H(z))) & H(z') - H(z) > 0 \\ 1 & H(z') - H(z) \leq 0 \end{cases} \quad (2)$$

und erhält damit eine Markov-Kette, die gegen die Gibbsche Verteilung $\exp(-\beta H(z))$ konvergiert.

Der Ensemble-Mittelwert kann dann durch einen Mittelwert über die Markov-Kette ersetzt werden

$$\langle A \rangle \simeq \bar{A} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n A(z_i),$$

der sich mit geringerem Aufwand berechnen läßt.

2.4 Berechnung der thermodynamischen Größen

Aus der Energie und der Magnetisierung lassen sich die spezifische Wärme und die Suszeptibilität entsprechend dem Fluktuations-Dissipations-Theorem durch folgende Ausdrücke bestimmen:

$$C = \frac{\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2}{k_B T^2}$$

und

$$\chi = \frac{\langle M^2 \rangle - \langle |M| \rangle^2}{k_B T}$$

Zur Bestimmung der kritischen Temperatur kann man die Divergenzen der spezifischen Wärme oder der Suszeptibilität heranziehen. Einfacher ist es, den Kumulanten vierter Ordnung

$$U_L = 1 - \frac{\langle M^4 \rangle_L}{3 \langle M^2 \rangle_L^2}$$

zu verwenden. Bestimmt man diesen als Funktion der Temperatur für verschieden große Simulationszellen bei gleicher Schichtanzahl, so schneiden sich diese Kurven bei der kritischen Temperatur.

2.5 Randbedingungen

Reale Systeme enthalten größenordnungsmäßig 10^{23} Teilchen, wir haben Monte-Carlo-Simulationen mit bis zu $32 \cdot 32 \cdot 10 = 1024$ Teilchen durchgeführt. Daraus ergibt sich das Problem, daß das Verhältnis von Oberfläche zu Volumen des Systems in Computersimulationen wesentlich größer ist als in realen Systemen. Um Oberflächeneffekte zu reduzieren, kann man periodische Randbedingungen verwenden. Dadurch wird ein „unendlich“ großes Gitter aufgebaut und Oberflächeneffekte werden vermieden. Das System muß aber eine ausreichende Größe aufweisen, um auch unerwünschte Effekte durch die Periodizität des Gitters zu verhindern.

2.6 Kritische Exponenten

In Experiment und Theorie wird bei $T \approx T_c$, also in der Nähe eines Phasenübergangs, beobachtet, daß gewisse physikalische Größen Potenzgesetzen gehorchen. Die entsprechenden Exponenten werden als „kritische Exponenten“ bezeichnet. Sie sind zu einem hohen Grad universell, d.h. nur von wenigen fundamentalen Parametern, wie etwa der Dimension des Systems,

abhängig. Damit lassen sich Universalitätsklassen definieren. Für die Magnetisierung in Abhängigkeit von der Temperatur findet man das Gesetz

$$M \sim (T_c - T)^\beta \quad T < T_c. \quad (3)$$

Bei der kritischen Temperatur gilt für die Magnetisierung in Abhängigkeit vom äußeren Feld

$$H \sim |M|^\delta \operatorname{sgn}(M). \quad (4)$$

Für Spin-1/2-Ising Modelle sind folgende kritische Exponenten zu erwarten:

Universalitäts- klasse	β	δ
2D Ising	1/8	15
3D Ising	1/3	4.8

3 Implementierung

Bei dem verwendeten Single-Spin-Flip-Modell ändert sich der Spin s_i bei einem Übergang vom Zustand z in einen neuen Zustand z' nur für ein festes l ($s'_i = -s_i$ und $s_l = \pm 1$ beim Ising-Spin-1/2-Modell), also gilt

$$s'_i = s_i - 2s_l \delta_{il}.$$

Einsetzen in (1) und Ausnutzen der Symmetrie $i \leftrightarrow j$ in der Summe und von $i \neq j$ liefert für die Energiedifferenz zwischen neuem und bisherigem Zustand

$$\Delta H = H(z') - H(z) = 2J s_l \sum_{\langle j \rangle} s_j,$$

wobei $\langle j \rangle$ die nächsten Nachbarn (= NN) von l bezeichnen soll.

Wenn, so wie hier in diesem Fall, die Austauschwechselwirkung J nur für die NN ungleich Null ist und für diese außerdem konstant bleibt, empfiehlt es sich, sogenannte NN-Tabellen für die Berechnung der Übergangswahrscheinlichkeit anzulegen. Diese muß dann nicht für jeden einzelnen Monte-Carlo-Step, sondern nur noch einmal für eine feste Temperatur berechnet werden. Da wir freie Randbedingungen in z -Richtung und periodische in der x - y -Ebene haben, benötigen wir mehrere NN-Tabellen:

- für die Oberflächen in z -Richtung
- für das Innere

- für den Sonderfall einer einzigen Schicht

Die für die Berechnung der Übergangswahrscheinlichkeit wesentliche Summe $s_l \sum_{\langle j \rangle} s_j$ nimmt im Inneren (die Anzahl der NN liegt hier immer bei sechs) nur Werte aus der Menge $\{0; \pm 2; \pm 4; \pm 6\}$ an. In der folgenden Tabelle sind die zu diesen Werten passenden Spinkonfigurationen aufgelistet und bereits in einer für unsere Zwecke geeigneten Weise sortiert. Neben der Stellung des betrachteten Spins (l ist hier und im folgenden immer fest) ist für die Berechnung der Summe bei den NN nur die Anzahl der \uparrow - und \downarrow -Spins von Interesse. In der Spalte s_j finden sich nacheinander die Anzahl der \uparrow - und dann die der \downarrow -Spins der NN von s_l . iss ($\equiv iss_l$) ist der Wert der entsprechenden Spinkonfiguration in der Spintabelle. Liegt zum Beispiel ein Eintrag in der Spintabelle bei vier, so entspricht das $s_l = 1$ für den betrachteten Spin, $s_j = -1$ für fünf NN und $s_j = 1$ für einen NN.

$s_l \sum_{\langle j \rangle} s_j$	s_l	s_j	iss_l	ien
-6	\downarrow	6 \uparrow 0 \downarrow	-1	1
	\uparrow	0 \uparrow 6 \downarrow	+2	2
-4	\downarrow	5 \uparrow 1 \downarrow	-3	3
	\uparrow	1 \uparrow 5 \downarrow	+4	4
-2	\downarrow	4 \uparrow 2 \downarrow	-5	5
	\uparrow	2 \uparrow 4 \downarrow	+6	6
0	\downarrow	3 \uparrow 3 \downarrow	-7	7
	\uparrow	3 \uparrow 3 \downarrow	+8	8
+2	\downarrow	2 \uparrow 4 \downarrow	-9	9
	\uparrow	4 \uparrow 2 \downarrow	+10	10
+4	\downarrow	1 \uparrow 5 \downarrow	-11	11
	\uparrow	5 \uparrow 1 \downarrow	+12	12
+6	\downarrow	0 \uparrow 6 \downarrow	-13	13
	\uparrow	6 \uparrow 0 \downarrow	+14	14

Die Wahrscheinlichkeit, mit der für eine bestimmte Spinkonfiguration (die Spalten s_l und s_j) ein Spin-Flip stattfindet, ist in der Tabelle der Übergangswahrscheinlichkeiten am zugehörigen Tabellenplatz $ien = |iss|$ eingetragen und errechnet sich mit Hilfe von (2) und

$$s_l \sum_{\langle j \rangle} s_j = \begin{cases} ien - 7 & \text{für } ien \in \mathbb{N}_u \\ ien - 8 & \text{für } ien \in \mathbb{N}_g \end{cases}$$

Erfolgt nun ein Spin-Flip, so geht in der Spintabelle iss_l für den betreffenden Spin s_l in $iss_l - 15 \operatorname{sgn}(iss_l)$ und für dessen NN s_j geht iss_j in $iss_j - 2 \operatorname{sgn}(iss_l)$

über.

Für die NN-Tabelle bei den Oberflächen in z-Richtung und die bei einer einzigen Schicht ist die Vorgangsweise gleich. Man geht dann nur von fünf beziehungsweise vier NN aus, woraus sich eine entsprechende Änderung der zuvor präsentierten Ergebnisse ableitet.

Als Anfangskonfiguration haben wir alle Spins \uparrow gewählt ($s_l = 1 \forall l$).

Die Anfangsmagnetisierung ist daher proportional zu $L^2 L_3$, die Anfangsenergie aufgrund von (1) proportional zu $-L^2(3L_3 - 1)$, wobei L die Längendimension in x- und y-Richtung und L_3 die in z-Richtung ist. Bei der Berechnung der Energie ist die unterschiedliche Anzahl der NN in den Oberflächenschichten in z-Richtung, im Inneren und in einer einzigen Schicht zu berücksichtigen.

Die im Programm verwendete Rechengröße m_{mcs} steht mit der tatsächlichen Magnetisierung m_t über

$$m_{mcs} = m_t \frac{L^2 L_3}{m_{t,Anfang}}$$

in Zusammenhang, die Rechengröße E_{mcs} mit der tatsächlichen Energie E_t über

$$E_{mcs} = E_t \frac{L^2(3L_3 - 1)}{E_{t,Anfang}}.$$

m_{mcs} ändert sich beim Spin-Flip um $-2 \operatorname{sgn}(iss)$, E_{mcs} um $\Delta H/J$.

Sowohl Magnetisierung als auch Energie sind im endgültigen Plot auf ihre Anfangsgrößen, die daraus abgeleiteten Größen χ und C hingegen auf willkürliche Einheiten normiert.

4 Ergebnisse und Zusammenfassung

Wie die Tabelle

L_3	T_c	β	δ
1	429	0,113	17,122
2	608	0,133	12,796
3	689	0,152	10,213
4	736	0,178	8,402
5	763	0,190	7,676
6	785	0,226	6,863
7	797	0,235	6,506
8	808	0,254	6,163
9	815	0,263	6,040
10	820	0,266	5,901
11	823	0,268	5,901
<i>period.RB</i>	852	0,289	5,830

zeigt, steigt die Curietemperatur T_c ebenso wie der kritische Exponent β mit zunehmender Schichtdicke in z-Richtung an. Anfangs ist der Anstieg stärker, bei größeren Werten von L_3 verflacht er allmählich.

Verglichen mit den theoretischen Werten für β ist festzustellen, daß die bei unserem Computereperiment erhaltenen Daten um 15 bis 20% unter den theoretischen liegen. Zwar haben wir für die Austauschwechselwirkung J mit $J = 16,3$ meV einen Wert verwendet, der korrekterweise nur für ein System mit periodischen Randbedingungen in allen drei Achsenrichtungen zu verwenden wäre, doch selbst dieser Umstand scheint keine ausreichende Erklärung dafür zu liefern, daß der kritische Exponent gegen einen zu niedrigen Wert strebt.

Ähnliches gilt für den kritischen Exponenten δ . Dieser fällt schon bei wenigen Schichten schnell ab und nähert sich bei Systemen mit mehr Schichten langsam dem für ein 3D-Ising Modell erwarteten Wert.

Zu erwähnen wäre weiters, daß sich die Kumulanten U_L für unterschiedliche Dimensionen in x-y-Richtung und konstante Dimension in z-Richtung nicht in einem „Punkt“, sondern in einem Bereich von zirka 10 K schneiden. Innerhalb dieses Temperaturbereichs wurde T_c so bestimmt, daß die mittlere quadratische Abweichung der Regressionsgeraden für den doppellogarithmischen Plot $\log_{10}(M/M_s)$ gegen $\log_{10}(1 - T/T_c)$ minimal wird.

Die den Maxima der Funktionen $\chi(T)$ und $C(T)$ entsprechenden kritischen Temperaturen weichen von dem über den Kumulanten bestimmten Wert von T_c ab, bei steigender Systemgröße in x-y-Richtung nähern sie sich jedoch etwas an.

5 Abbildungen

5.1 Bestimmung des kritischen Exponenten β

Auf den folgenden Seiten sind die Ergebnisse unserer Simulationen zu finden. Wir haben Simulationen von Systemen mit einer bis elf Schichten durchgeführt. Auf jeder Seite sind die relevanten Simulationsparameter angegeben: die Anzahl der Schichten, die Gesamtzahl der Monte-Carlo-Schritte, die Anzahl der Monte-Carlo-Schritte nach der mit der Mittelwertbildung begonnen wurde, sowie die kritische Temperatur, die aus dem Schnittpunkt der Kumulanten für verschiedene Zellgrößen bestimmt wurden, und der kritische Exponent β .

5.2 Bestimmung des kritischen Exponenten δ

Unter Verwendung der in Abschnitt 5.1 bestimmten kritischen Temperaturen wurde auch der Verlauf der Magnetisierung in einem äußeren Magnetfeld bei $T = T_c$ berechnet. In den folgenden Abbildungen sind die entsprechenden Größen als Funktionen des äußeren Magnetfeldes angegeben. Neben den schon vorhin beschriebenen Simulationsparametern ist auch der kritische Exponent δ angegeben.

Literatur

- [1] D.W. Heermann, Computer Simulation Methods in Theoretical Physics. (Springer, Berlin, 1990)
- [2] J.M. Yeomans, Statistical Mechanics of Phase Transitions. (Clarendon Press Oxford, 1992)
- [3] D. Spišák, J. Hafner, Surface and interface phase transitions in thin magnetic films with frustrated exchange interaction.
- [4] J. Hafner, Computereperimente in der Physik. Vorlesungsskriptum
- [5] P. Kasperkovitz, G. Kahl, Statistische Physik. Vorlesungsskriptum