Wykład 11 18.12.2012

Model Isinga

Nazwany od Ernsta Isinga - fizyk Niemiecki

Model Isinga został wprowadzony w 1920r przez Wilhelma Lenza, który dał problem do rozwiązania swojemu studentowi Ernstowi Isingowi.

▽ Jedno-wymiarowy model Isinga, został rozwiązany przez Isinga w jego pracy doktorskiej w r. 1924

E. Ising "Beitrag zur Theorie des Ferromagnetismus" Z. Phys. 31, 253-258 (1925)

▽ Dwuwymiarowy model na sieci kwadratowej

Lars Onsager (1944) analityczne rozwiązanie "Crystal statistics. I A two dimensional model with an order-disorder phase transition" Phys. Rev. 65, 117-149 (1944)

To jest najprostszy model dla opisu przejścia fazowego

Definicja

- Jeżeli mamy graf (np. d-wymiarowa sieć) Λ z węzłami j, $j \in \Lambda$
- Na każdym węźle definiujemy wielkość σ_j, taką że $\sigma_j \in \{+1, -1\}$

  Nazywamy ją spinem

- σ - konfiguracja spinowa, otrzymujemy ją, gdy każdemu węzłowi przypisujemy wartość spin σ_j

Dla dwóch sąsiednich węzłów $i, j \in \Lambda$ mamy oddziaływanie J_{ij} i na każdym węźle pole magnetyczne h_i

Hamiltonian układu

$$H(\sigma) = -\sum_{\langle ij \rangle} J_{ij}\sigma_i\sigma_j - \sum_j h_j\sigma_j$$

sumujemy po sąsiednich spinach tylko RAZ

Prawdopodobieństwo konfiguracji spinowej σ dane jest przez rozkład Boltzmanna

$$P_\beta(\sigma) = \frac{e^{-\beta H(\sigma)}}{Z_\beta} \qquad \beta = \frac{1}{k_B T}$$

prawdopodobieństwo znalezienia układu w stanie σ w równowadze

$$Z_\beta = \sum_\sigma e^{-\beta H(\sigma)}$$

suma statystyczna (partition function)

Dla obserwabli, funkcji spinów mamy

$$\langle f \rangle_\beta = \sum_\sigma f(\sigma) P_\beta(\sigma)$$

wartość średnia (oczekiwana) funkcji f.

$J_{ij} > 0$ – oddziaływanie ferromagnetyczne
$J_{ij} < 0$ – " – antyferromagnetyczne
$J_{ij} = 0$ – spiny nie oddziałują

Popularne uproszczenia:

- $\forall_j\ h_j = 0$ bez zewn. pola magnetycznego
- $\forall_{ij}\ J_{ij} = J$

Dla zewnętrznego pola magnetycznego równego 0 ($h \equiv 0$), model Isinga jest symetryczny względem jednoczesnego obrócenia kierunku wszystkich spinów, dla $h \neq 0$ nie jest symetryczny.

Interesujące pytania

1) W typowej konfiguracji, czy większość spinów ma kierunek "+" czy "−", a może są rozłożone równo?

2) Jeżeli spin na węźle "i" jest 1, to jakie jest prawdopodobieństwo, że spin na węźle "j" jest również 1?

3) Jeżeli zmienimy β, to czy następuje przejście fazowe?

4) Na sieci, jaki jest wymiar fraktalny kształtu dużego klastra obszaru gdzie spiny mają wartość +1?

MODEL ISINGA na sieci kwadratowej

Rozwiązanie analityczne dla $h = 0$

Do tej pory nie znaleziono rozwiązania analitycznego dla $h \neq 0$

- Mamy N węzłów na kwadratowej sieci
- Nakładamy periodyczne warunki brzegowe

Często rozróżnienie pomiędzy horyzontalnym i wertykalnym oddziaływaniem J oraz J^*

$K = \beta J$; $L = \beta J^*$

suma statystyczna przyjmuje postać

$$Z_N(K,L) = \sum_{\{\sigma\}} \exp\left(K \sum_{\langle ij\rangle_H} \sigma_i \sigma_j + L \sum_{\langle ij\rangle_V} \sigma_i \sigma_j\right)$$

Ścisłe rozwiązanie na sieci kwadratowej dla $N \to \infty$

$$k := \frac{1}{\sinh(2K)\sinh(2L)}$$

Energia swobodna na węzeł

$$-\beta F = \frac{\log(2)}{2} + \frac{1}{2\pi}\int_0^{\pi} \log\left[\cosh(2K)\cosh(2L) + \frac{1}{k}\sqrt{1+k^2-2k\cos(2\theta)}\right] d\theta$$

Dla $J = J^*$ isotropowy model

Energia wewnętrzna na węzeł

$$U = -J\coth(2\beta J)\left[1 + \frac{2}{\pi}\left(2\tanh^2(2\beta J)-1\right) \times \int_0^{\pi/2} \frac{1}{\sqrt{1-4k(1+k)^{-2}\sin^2(\theta)}} d\theta\right]$$

Spontaniczna magnetyzacja (namagnesowanie) dla $T < T_c$

$$M = \left[1 - \sinh^{-4}(2\beta J)\right]^{1/8}$$

gdzie (dla $J = J^*$) $\quad k_B T_c / J = \frac{2}{\ln(1+\sqrt{2})}$

$$T_c = \frac{J}{k_B} 2.269$$

$$M = \left(1 - \left[\sinh\left(\ln(1+\sqrt{2})\frac{T_c}{T}\right)\right]^{-4}\right)^{1/8}$$

MODEL ISINGA na SIECI

- $L = |\Lambda|$; całkowita liczba węzłów sieci

$\sigma \in \{+1, -1\}^L$ – stan układu

Mamy 2^L możliwych stanów

Jest jasne dlaczego metoda Monte Carlo może być bardzo użyteczna do rozwiązania modelu ISINGA.

Przykład 2×2 sieć bez warunków periodycznych

Mamy 16 stanów

− − − − + + + +	daję energię $E = -4J$	Wszystkie inne stany daję energię $E = 0$
+ − − +	daję energię $E = 4J$	
− + + −		

2^L stanów spinowych $i = 1, 2, \ldots 2^L$

Każdy stan spinowy można związać z reprezentacją binarną liczby $i-1$

"−" spin down = 0

"+" spin up = 1

stan

$\{+,-,+,-\} = \underset{2^3\,2^2\,2^1\,2^0}{1010}$ = reprezentacja binarna liczby 10

To bardzo ułatwia arytmetykę komputerową!

Metropolis Algorithm (Algorytm Metropolisa)

nazywany czasami Metropolis-Hasting używany do modelu Isinga

Algorytm
- wybiera prawdopodobieństwa $g(\mu,\nu)$, które daje prawdopodobieństwo, że stan ν zostanie wybrany ze wszystkich stanów, jeżeli obecnie system jest w stanie μ
- używa prawdopodobieństw acceptacji (acceptance probabilities) $A(\mu,\nu)$, tak żeby zachować stan równowagi szczegółowej
- Jeżeli stan ν zostaje zaakceptowany to przechodzimy do tego stanu, jeżeli nie zostaje zaakceptowany to pozostajemy w stanie μ
- Proces jest powtarzany, do spełnienia pewnego kryterium

Ważne
- Periodyczne warunki brzegowe ⇒ każdy węzeł ma identyczną liczbę sąsiadów
- Przechodząc do nowego stanu odwracamy spin tylko na jednym węźle (single-spin-flip dynamics)
- Skoro mamy L węzłów to bierzemy

$g(\mu,\nu) := \frac{1}{L}$ Każdy węzeł może mieć odwrócony spin z równym prawdopodobieństwem

Równowaga szczegółowa

$$\frac{P_\beta(\nu)}{P_\beta(\mu)} = \frac{P(\mu,\nu)}{P(\nu,\mu)} = \frac{g(\mu,\nu)\,A(\mu,\nu)}{g(\nu,\mu)\,A(\nu,\mu)} = \frac{A(\mu,\nu)}{A(\nu,\mu)}$$

$$\frac{e^{-\beta H(\nu)}/Z}{e^{-\beta H(\mu)}/Z} = e^{-\beta(H_\nu - H_\mu)} = \frac{A(\mu,\nu)}{A(\nu,\mu)}$$

Zauważmy, że jeżeli $H_\nu > H_\mu$ to

$$A(\nu,\mu) > A(\mu,\nu)$$

W Algorytmie Metropolisa większa z wartości jest wzięta za 1.

$$A(\mu,\nu) = \begin{cases} e^{-\beta(H_\nu - H_\mu)} & \text{if } H_\nu - H_\mu > 0 \\ 1 & H_\nu - H_\mu < 0 \end{cases}$$

Co to znaczy, że stan jest zaakceptowany z prawdopodobieństwem $A(\mu,\nu) = e^{-\beta\delta E}$?

Losujemy przypadkową liczbę $r \in [0,1]$
stan ~~μ~~ ν jest zaakceptowany gdy

$$e^{-\beta\delta E} > r$$

$\equiv$

Algorytm Metropolisa stanowi przykład Łańcucha Markowa.

Jaka jest korzyść z takiego algorytmu Monte Carlo?

Nie tracimy czasu na obliczenia, które wnoszą mały wkład do rozwiązania?

N.p. Jest wysoce nieprawdopodobne, żeby w wysokiej temperaturze układ znajdował się w stanie gdzie prawie wszystkie spiny mają jednakowy kierunek.