

Das Ising Modell

Frank Zirkelbach

28. Mai 2003

Inhaltsverzeichnis

1	Einführung	2
1.1	Zustandssumme und benötigte Größen	2
1.2	Phasenübergänge	2
1.3	Kritische Exponenten	3
1.4	Idee des Ising Modells	3
2	Lösungen des Ising Modells	6
2.1	Lösung für $d = 1$	6
2.2	Lösung für $d = 2$	9
2.3	Lösung für $d = 3$	10
3	Monte Carlo Simulation	11
4	Anwendungen	13
A	Quellen	15

Kapitel 1

Einführung

1.1 Zustandssumme und benötigte Größen

Unter der kanonischen Zustandssumme versteht man die Summation über alle möglichen Mikrozustände.

$$Z = \sum_{i=1}^N e^{\frac{-E_i}{k_B T}} = \text{Sp } e^{-\beta H} \quad \beta = \frac{1}{k_B T}$$

Sie ist eine fundamentale Größe in der statistischen Physik. Von ihr können viele wichtige Größen abgeleitet werden.

- Wahrscheinlichkeit für Zustand i : $P_i = \frac{1}{Z} e^{-E_i \beta}$
- freie Energie: $F = -k_B T \ln Z$
- Magnetisierung: $M = -\frac{\partial F}{\partial B}$
- magnetische Suszeptibilität: $\chi = -\frac{\partial M}{\partial H}$
- spezifische Wärmekapazität: $c = \frac{\partial E}{\partial T}$

1.2 Phasenübergänge

Die Phase ist eine mögliche Zustandsform eines makroskopischen Systems im thermischen Gleichgewicht. Unterschiedliche Phasen äußern sich in unterschiedlichen Werten makroskopischer Observablen.

Beispiele:

- Dichte (H_2O)
- Magnetisierung (Nickel)
- elektrische Leitfähigkeit ($YBa_2Cu_2O_7$)

Mit einem Phasenübergang verbunden ist ein kritischer Bereich einer Variablen, in dem sich die Phase ändert. Man unterscheidet Übergänge erster Ordnung (diskontinuierlich) und Übergänge zweiter Ordnung (kontinuierlich).

- diskontinuierlich: Unstetigkeit in erster Ableitung eines thermodynamischen Potentials
- kontinuierlich: Stetigkeit der ersten Ableitung, Unstetigkeit der zweiten Ableitung (Bsp: Magnetisierung - Suszeptibilität)

1.3 Kritische Exponenten

In der Nähe eines Phasenübergangs beobachtet man das gewisse physikalische Größen Potenzgesetzen gehorchen. Diese Exponenten beschreiben wie die physikalischen Größen nahe T_C divergieren.

- Magnetisierung $M \sim |T - T_C|^\beta$
- spezifische Wärmekapazität $c \sim |T - T_C|^\alpha$
- Suszeptibilität $\chi \sim |T - T_C|^{-\gamma}$

Anmerkung:

Kritische Exponenten sind zu einem hohen Grad universell, d.h. sie hängen nur von fundamentalen Parametern wie Dimension, Reichweite und Struktur der Wechselwirkung ab, nicht vom Modell selbst. Damit lassen sich Universalitätsklassen definieren.

1.4 Idee des Ising Modells

Ein Modell für magnetische Phasenübergänge.

Modellannahmen:

- d -dimensionales periodisches Gitter, $d = 1, 2, 3$
- permanentes magnetisches Moment mit 2 Einstellmöglichkeiten an jedem Gitterpunkt

$$\mu_i = \mu S_i \quad S_i = \pm 1 \quad \forall i$$

- lokalisierte Momente wechselwirken miteinander, Kopplungskonstante sei $\frac{J_{ij}}{\mu^2}$

Dann lautet die Hamilton-Funktion:

$$H = - \sum_{(i,j)} J_{ij} S_i S_j - \mu B_0 \sum_i S_i \quad (i,j) = \text{nächste Nachbarn im Gitter}, \quad \vec{B} = (0, 0, B_0)$$

Man erahnt: ($J > 0$, Ferromagnet)

- $T \rightarrow 0$:
 —→ Zustand niedriger Energie —→ Spins gleich ausgerichtet
 —→ hohe Magnetisierung
- $T \rightarrow \infty$:
 —→ Zustand hoher Energie —→ Spins zufällig ausgerichtet
 —→ keine Magnetisierung

Unter einer bestimmten Temperatur stellt sich auch ohne Änderung eines äußeren Magnetfeldes eine spontane Magnetisierung ein.

Molekularfeldnäherung:

Approximation des Ising Modells durch Vernachlässigung der Spinfuktuationen $S_i - \langle S_i \rangle$. Damit kann man den Spin-Wechselwirkungs-Term umschreiben:

$$S_i S_j = (S_i - m + m)(S_j - m + m) = m^2 + m(S_i - m) + m(S_j - m) + (S_i - m)(S_j - m)$$

wobei $m = \frac{1}{N}(\sum_i^N S_i)$ die mittlere Magnetisierung pro Spin ist und der letzte Term damit von der Gestalt $(S_i - \langle S \rangle)(S_j - \langle S \rangle)$ ist und in der MFN vernachlässigt wird. Mit der Definition $\sum_j J_{ij} \equiv J' \cdot z \equiv J$, wobei z die Anzahl der nächsten Nachbarn ist, erhalten wir folgenden Hamiltonian,

$$H_{MFN} = \frac{1}{2} N J m^2 - (Jm + \mu B_0) \sum_i S_i$$

und Zustandssumme:

$$\begin{aligned} Z &= e^{-\beta \frac{N J m^2}{2}} \sum_{S_1} \dots \sum_{S_N} e^{\beta (Jm + \mu B_0) \sum_i S_i} \\ &= e^{-\beta \frac{N J m^2}{2}} \left(\sum_{S=\pm 1} e^{\beta (Jm + \mu B_0) S} \right)^N \\ &= e^{-\beta \frac{N J m^2}{2}} \left(2 \cosh(\beta (Jm + \mu B_0)) \right)^N \end{aligned}$$

Damit erhalten wir für die freie Energie und Magnetisierung pro Spin folgendes:

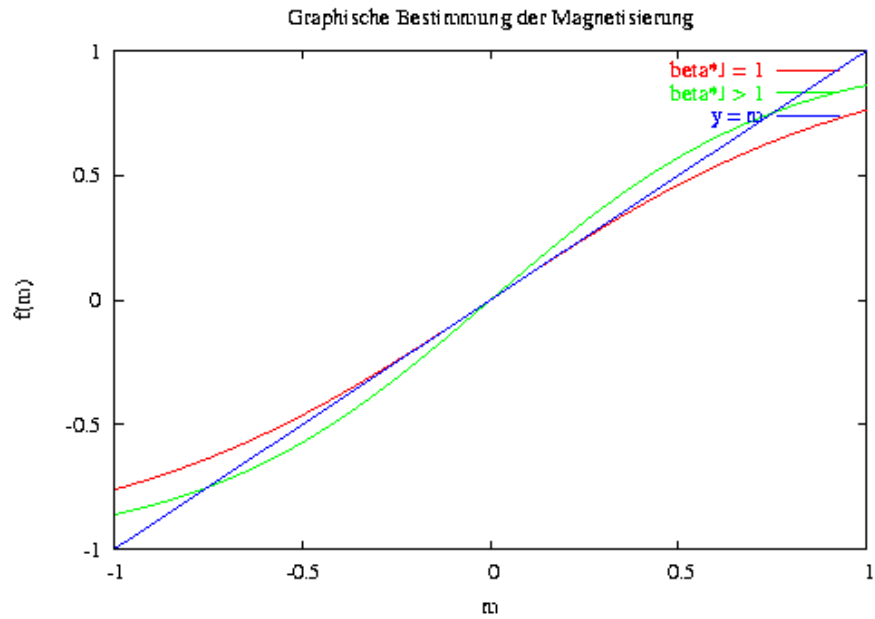
$$\begin{aligned} g &= -\frac{1}{N\beta} \ln Z = -\frac{1}{2} J m^2 - \frac{1}{\beta} \ln \left(2 \cosh(\beta (Jm + \mu B_0)) \right) \\ m &= -\left(\frac{\partial g}{\partial B_0} \right) = \tanh(\beta (Jm + \mu B_0)) \end{aligned}$$

Legt man nun kein magnetisches Feld B_0 an, so hat man eine implizite Bestimmungsgleichung für die Magnetisierung

$$\tanh(\beta J m) = m$$

die grafisch diskutiert werden kann. Man findet Lösungen $m \neq 0$ wenn die Anfangssteigung der linken Seite der Gleichung größer 1 ist. Für die kritische

Temperatur gilt somit $\frac{\partial(\tanh(\beta J m))}{\partial m} = 1$.

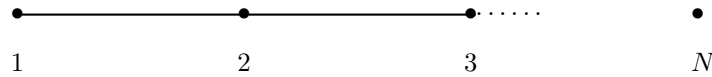


Man findet also einen Phasenübergang unabhängig von der Gitterdimension. Die folgende exakte Lösung des eindimensionalen Isingmodells widerspricht dem, ist jedoch typisch für alle klassischen Theorien (Bsp: Landau-Theorie).

Kapitel 2

Lösungen des Ising Modells

2.1 Lösung für $d = 1$



Die Hamilton-Funktion in einer Dimension lautet:

$$H = - \sum_{i=1}^N J_{i,i+1} S_i S_{i+1} - \mu B_0 \sum_{i=1}^N S_i$$

Annahmen:

- periodische Randbedingungen, $S_{N+1} \equiv S_1$
- Translationsinvarianz, $J_{i,i+1} \equiv J$

Abkürzung: $K = \beta J$, $h = \mu B \beta$

Die Energie des Systems ist nun gegeben durch:

$$E = -J \sum_{i=1}^N S_i S_{i+1} - \mu B_0 \sum_{i=1}^N S_i$$

Die Magnetisierung entspricht dem Erwartungswert des magnetischen Moments an einem Gitterplatz:

$$M = \langle S_1 \rangle$$

Es gibt 2^N mögliche Spinzustände. Die Zustandssumme lautet:

$$Z = \sum_{S_1} \sum_{S_2} \dots \sum_{S_N} e^{\beta(K \sum_{i=1}^N S_i S_{i+1} + \frac{1}{2} h \sum_{i=1}^N S_i + S_{i,i+1})}$$

Die Zustandssumme wird mit Hilfe der Transfer-Matrix-Methode berechnet:

Finde Matrix \mathbf{T} mit folgenden Eigenschaften:

$$\langle S_i | \mathbf{T} | S_{i,i+1} \rangle = e^{K S_i S_{i,i+1} + \frac{h}{2}(S_i + S_{i,i+1})}$$

also:

$$\langle 1 | \mathbf{T} | 1 \rangle = e^{K+h}$$

$$\langle -1 | \mathbf{T} | -1 \rangle = e^{K-h}$$

$$\langle 1 | \mathbf{T} | -1 \rangle = \langle -1 | \mathbf{T} | 1 \rangle = e^{-K}$$

wobei :

$$|S_i = +1 \rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |S_i = -1 \rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Die Matrix muss also wie folgt aussehen:

$$\mathbf{T} = \begin{pmatrix} e^{K+h} & e^{-K} \\ e^{-K} & e^{K-h} \end{pmatrix} \quad \text{Transfer-Matrix}$$

Damit läßt sich die Zustandssumme neu schreiben:

$$\begin{aligned} Z &= \sum_{S_1} \sum_{S_2} \dots \sum_{S_N} \langle S_1 | \mathbf{T} | S_2 \rangle \langle S_2 | \mathbf{T} | S_3 \rangle \dots \langle S_{N-1} | \mathbf{T} | S_N \rangle \langle S_N | \mathbf{T} | S_1 \rangle \\ &= \sum_{S_1} \langle S_1 | \mathbf{T}^N | S_1 \rangle \\ &= \text{Sp } \mathbf{T}^N \end{aligned}$$

Wegen der Vollständigkeit der Spinzustände kann obere Vereinfachung vorgenommen werden. Die Spur ist Darstellungsunabhängig. \mathbf{T} ist in ihrer Eigenbasis diagonal. Aus $\det(\mathbf{T} - \lambda \mathbf{1}) = 0$, erhält man folgende Eigenwerte:

$$\lambda_{\pm} = e^K (\cosh h \pm \sqrt{\sinh^2 h + e^{-4K}})$$

Daraus folgt:

$$\text{Sp } \mathbf{T}^N = \lambda_+^N + \lambda_-^N = Z$$

Für den Fall $B_0 = 0$ gilt:

$$\lambda_{\pm} = e^K \pm e^{-K}$$

$$Z = 2^N \cosh^N(K) + 2^N \sinh^N(K) = 2^N \cosh^N(K) (1 + \tanh^N(K)) \xrightarrow{N \gg 1} 2^N \cosh^N(K)$$

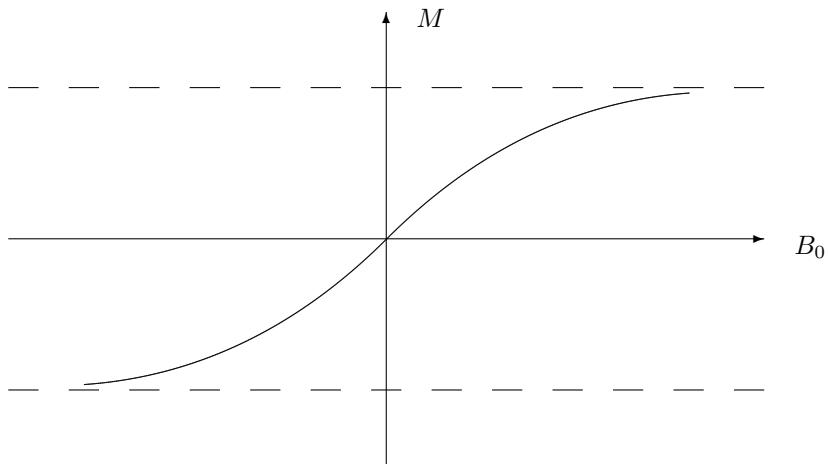
$$F = -k_B T \ln Z \xrightarrow{N \gg 1} -N k_B T \ln(2 \cosh(\beta J))$$

Dabei wurde verwendet, dass λ_+^N im thermodynamischen Limes viel größer ist als λ_-^N .

Für die Magnetisierung mit Magnetfeld gilt:

$$\begin{aligned}
 M &= \frac{1}{Z} \sum_{\{S\}} \left(\sum_i \mu S_i \right) e^{-\beta H} \\
 &= \frac{1}{\beta} \left(\frac{\partial}{\partial B_0} \ln Z \right) \\
 &\xrightarrow{N \gg 1} \frac{N}{\beta \lambda_+} \frac{\partial \lambda_+}{\partial B_0} \\
 &= N \mu \frac{\sinh(\beta \mu B_0)}{\sqrt{\cosh^2(\beta \mu B_0) - 2e^{-2\beta J} \sinh(2\beta J)}}
 \end{aligned}$$

Folgende Abbildung zeigt die Magnetisierung in Abhängigkeit vom Magnetfeld. Die Magnetisierung verschwindet für alle Temperaturen wenn kein Magnetfeld vorhanden ist. Für sehr grosse Magnetfelder sättigt sie.



Erkenntnis:

- magnetisches Moment verschwindet für alle endlichen Temperaturen wenn $B_0 = 0$
- es gibt keinen Phasenübergang für das eindimensionale Isingmodell für $T > 0$

Für $T = 0$ kann obere Approximation nicht mehr verwendet werden, da gilt:

$$\lim_{T \rightarrow 0} \frac{\lambda_+}{\lambda_-} = 1$$

Mann kann zeigen, daß bei $B_0 = T = 0$ ein Phasenübergang liegt (Korrelationslänge geht gegen unendlich), und eine spontane Magnetisierung existiert. Kritische Exponenten:

$$\alpha = 1 \quad \beta = 0 \quad \gamma = 1$$

2.2 Lösung für $d = 2$

Während das eindimensionale Modell noch relativ leicht zu lösen war, und deshalb hier detailliert beschrieben wurde, ist das zweidimensionale höchst nicht-trivial. Es wird auf eine genau Lösung verzichtet. Tatsächlich ist das einzige Problem die Diagonalisierung einer $2^N \times 2^N$ - Matrix (wieder Transfer-Matrix-Methode). Eine Lösung wird nur ohne vorhandenes Magnetfeld gefunden.

Hamiltonian:

$$H = -J \sum_{(i,j)} (S_{i,j} S_{i+1,j} + S_{i,j} S_{i,j+1}) - \mu B_0 \sum_{i,j} S_{i,j}$$

Dabei geben die Indizes der Spins deren Punkt im Gitter an. Dies schreiben wir kürzer

$$H = \sum_{j=1}^N \left(E(\mu_j, \mu_{j+1}) + E(\mu_j) \right)$$

wobei

$$\begin{aligned} E(\mu_j, \mu_k) &\equiv - \sum_{i=1}^N S_{i,j} S_{i,k} \\ E(\mu_j) &\equiv -J \sum_{i=1}^N S_{i,j} S_{i+1,j} - \mu B_0 \sum_{i,j} S_j \\ \mu_j &\equiv \{S_{1,j}, \dots, S_{N,j}\} \end{aligned}$$

Damit bestimmen wir analog zum eindimensionalen Fall eine Transfer-Matrix \mathbf{T} , mit Matrixelementen:

$$\langle \mu_j | \mathbf{T} | \mu_k \rangle = e^{-\beta \left(E(\mu_j, \mu_k) + E(\mu_j) \right)}$$

Dies ist eine $2^N \times 2^N$ - Matrix, die es wie erwähnt zu diagonalisieren gilt. Analog zum $d = 1$ Fall gilt:

$$Z = \text{Sp } \mathbf{T}^N$$

Diesen Schritt kann man sich zum Beispiel in [7] genauer anschauen. Im Folgenden werden nur die Endresultate betrachtet.

Für die freie Energie pro Spin $f = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} (-k_B T \ln Z)$ erhält man

$$f = -k_B T \ln \left(2 \cosh(2\beta J) \right) - \frac{k_B T}{2\pi} \int_0^\pi d\phi \ln \frac{1}{2} \left(1 + \sqrt{1 - K^2 \sin^2 \phi} \right)$$

mit $K = \frac{2}{\cosh(2\beta J) \coth(2\beta J)}$, und demnach für die Magnetisierung:

$$m = \begin{cases} (1 - \sinh^{-4}(2\beta J))^{\frac{1}{8}} & : T < T_C \\ 0 & : T > T_C \end{cases}$$

Für den kritischen Exponenten β gilt also $\beta = \frac{1}{8}$. Als Bedingung für die kritische Temperatur erhält man:

$$2 \tanh^2(2\beta J) = 1, \text{ also } k_B T_C \approx 2.269185 \cdot J$$

In der Nähe von $T = T_C$ erkennt man eine logarithmische Divergenz der spezifischen Wärme.

$$C = k_B \frac{2}{\pi} \left(\frac{2J}{k_B T_C} \right) \left(-\ln \left(1 - \frac{T}{T_C} \right) + \ln \left(\frac{k_B T_C}{2J} \right) - \left(1 + \frac{\pi}{4} \right) \right)$$

Damit ist der kritische Exponent $\alpha = 0$.

Fazit:

- es existiert ein Phasenübergang zweiter Ordnung
- auch ohne vorhandenes Magnetfeld hat der Ising Ferromagnet eine spontane Magnetisierung wenn $T < T_C$

2.3 Lösung für $d = 3$

Das dreidimensionale Modell kann bis heute nicht exakt analytisch gelöst werden. Approximationen und Monte Carlo Simulationen liefern jedoch überzeugende Resultate. Man erwartet von der analytisch exakten Lösung keine weiteren Informationen mehr.

Das dreidimensionale Ising Modell zeigt Phasenübergänge.

Kapitel 3

Monte Carlo Simulation

Im Folgenden soll gezeigt werden wie man durch sogenannte Monte Carlo Simulationen das Ising Modell simuliert.

Gesucht sei der Erwartungswert $\langle A \rangle$.

$$\langle A \rangle = \sum p_i A_i, \text{ wobei}$$
$$p_i = \frac{e^{-\beta E_i}}{\sum_j e^{\beta E_j}}, \text{ Boltzmann Wahrscheinlichkeitsverteilung}$$

E_i Energie im Zustand i

Anstatt über alle Zustände zu summieren, greift man nur einige zufällige Zustände auf, deren Wahrscheinlichkeit idealerweise natürlich der Boltzmannverteilung entspricht (importance sampling).

$$\langle A \rangle_{est} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N A(i)$$

N entspricht hierbei der Anzahl der Iterationen in der Computersimulation.

- $P(A, t)$ sei die Wahrscheinlichkeit der Konfiguration A zur Zeit t
- $W(A \rightarrow B)$ sei Wahrscheinlichkeit pro Zeiteinheit, daß die Konfiguration von A nach B wechselt

Damit gilt:

$$P(A, t+1) = P(A, t) + \sum_B \left(W(B \rightarrow A)P(B, t) - W(A \rightarrow B)P(A, t) \right)$$

und für große t ist dir willkürliche Anfangskonfiguration vergessen, $P(A, t) \rightarrow p(A)$.

Eine Bedingung für eine zeitunabhängige Wahrscheinlichkeitsverteilung ist:

$$W(A \rightarrow B)P(A, t) = W(B \rightarrow A)P(B, t) \quad (\text{detailed balance})$$

und somit gilt:

$$\frac{W(A \rightarrow B)}{W(B \rightarrow A)} = \frac{p(B)}{p(A)} = \frac{e^{-\beta E(B)}}{e^{-\beta E(A)}} = e^{-\beta \delta E}$$

Eine Realisierung einer solchen Boltzmannverteilung bietet der Metropolis Algorithmus [4].

$$W(A \rightarrow B) = \begin{cases} e^{-\beta \delta E} & : \delta E > 0 \\ 1 & : \delta E < 0 \end{cases}$$

Der Pseudocode eines Programms könnte nun wie folgt aussehen:

- Gehe alle Gitterplätze durch
- Berechne δE für Spinflip (Nächste Nachbarn anschauen)
- Wenn $\delta E < 0$ flip, ansonsten nur wenn Zufallszahl kleiner $e^{\frac{-\delta E}{k_B T}}$
- Spins aufsummieren, dies entspricht der Magnetisierung (nach genügend vielen Iterationen (N^3))

Kapitel 4

Anwendungen

- Spingläser [8]
 - Betrifft: magnetische Legierungen (Bsp.: $Au_{1-x}Fe_x$)
 - Beobachtungen:
 - * keine spontane Magnetisierung
 - * zufälliges Einfrieren der Spins unterhalb kritischer Temperatur
 - * Remanenz nach kurzen Einschalten eines externen Magnetfelds, die sehr langsam relaxiert
 - Modell:
 - * Unordnung und Konkurrenz der magnetischen Wechselwirkung
 - * Hamilton: $H = -\sum J_{ij}S_iS_j - \mu B_0 \sum S_i$, wobei die J_{ij} zufällige, symmetrisch um 0 verteilte Kopplung darstellt

- Spingläser: Optimierung und Gedächtnis [8]

- Traveling Salesman Problem:

- * "Aufheizen" des Systems, Wegstrecken bekommen gleiche Gewichtung

- * "Abkühlen" des Systems, Zustand niedrigster Energie stellt sich ein, der ideale Weg?

- Gedächtnis:

- * Modell:

- S_i \longleftrightarrow Neuron i

- $S_i = 1$ \longleftrightarrow Neuron i sendet Impuls

- $S_i = -1$ \longleftrightarrow Neuron i sendet keinen Impuls

- J_{ij} \longleftrightarrow erregende und hemmende Synapsen

- μB_0 \longleftrightarrow Potential einer sensorischen Nervenzelle

- * einige Eigenschaften

- Fähigkeit spontane Information zu speichern

- Information wird nach Inhalt zurückgerufen, nicht nach Adresse, daher schneller als im Computer

- häufige Information wird stärker gespeichert (Langzeitgedächtnis)

- Relaxation wenig oft erhaltener Information (Kurzzeitgedächtnis)

- Ghetto Formationen [5]

- $|S = +1 \rangle$ \longleftrightarrow immigrant

- $|S = -1 \rangle$ \longleftrightarrow native

- $k_B T$ \longleftrightarrow social temperature

- m \longleftrightarrow coexistence

- Social phase transition [6]

- H \longleftrightarrow global trend, world wide fashion

- δE \longleftrightarrow possible mind change

- S_i \longleftrightarrow opinion

- weitere Anwendungen

- Quantum Game Theory

- duopoly markets

Anhang A

Quellen

1. W. Nolting, Grundkurs: Statistische Physik, Band 6
2. Rodney J. Baxter, Exactly Solved Models in Statistical Mechanics
3. http://www.nyu.edu/classes/tuckerman/stat.mech/lectures/lecture_26/node2.html
4. <http://www.npac.syr.edu/users/gcf/slitex/CPS713MonteCarlo96/index.html>
5. Hildegard Meyer-Ortmanns, Abstract: Immigration, integration and ghetto formation
6. K. Malarz, Abstract: Social phase transition in Solomon network
7. Kerson Huang, Statistical mechanics
8. W. Kinzel, Spingläser, Optimierung und Gedächtnis