Das Ising Modell

Frank Zirkelbach

28. Mai 2003

Inhaltsverzeichnis

1 Einführung

Zustandssumme und benötigte Größen

Zustandssumme: Summation über alle möglichen Mikrozustände

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

Ableitung wichtiger Größen:

- 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: $c = \frac{\partial E}{\partial T}$

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 ($YBa_2Cu_2O_7$)

Phasenübergang verbunden mit kritischen Bereich einer Variablen

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

Kritische Exponenten

Physikalische Größen gehorchen Potenzgesetzen nahe des kritischen Bereichs

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

Anmerkung:
$\rightarrow$ Abhängig von Dimension, Reichweite und Struktur der Wechselwirkung $\rightarrow$ Kritische Exponenten universell $\rightarrow$ Universalitätsklassen

Idee des Ising Modells

Modell für magnetische Phasenübergänge.

Modellannahmen:

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

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

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

Hamilton-Funktion:

$$H = -\sum_{(i,j)} J_{ij} S_i S_j - \mu B_0 \sum_i S_i \text{ , mit}$$

$$(i,j) = \text{nächste Nachbarn im Gitter,} \qquad \vec{B} = (0, 0, B_0)$$

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

- $T \to 0$:
  $\longrightarrow$ Zustand niedriger Energie $\longrightarrow$ Spins gleich ausgerichtet
  $\longrightarrow$ hohe Magnetisierung
- $T \to \infty$:
  $\longrightarrow$ Zustand hoher Energie $\longrightarrow$ Spins zufällig ausgerichtet
  $\longrightarrow$ keine Magnetisierung

Ergebnis: spontane Magnetisierung unterhalb kritischer Temperatur ohne externes B-Feld

Molekularfeldnäherung:
Approximation: Vernachlässigung der Spinfluktuationen
$S_i - < S_i >$
Spin-Wechselwirkungs-Term:

$$\begin{aligned} S_i S_j &= (S_i - m + m)(S_j - m + m) \\ &= m^2 + m(S_i - m) + m(S_j - m) + (S_i - m)(S_j - m) \end{aligned}$$

wobei:

- $m = \frac{1}{N}(\sum_i^N S_i)$, mittlere Magnetisierung pro Spin
- $(S_i - < S >)(S_j - < S >)$ in MFN vernachlässigt
- Definition: $\sum_j J_{ij} \equiv J' \cdot z \equiv J$, mit z Anzahl der nächsten Nachbarn

Hamiltonian:

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

Zustandssumme:

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

freie Energie und Magnetisierung pro Spin:

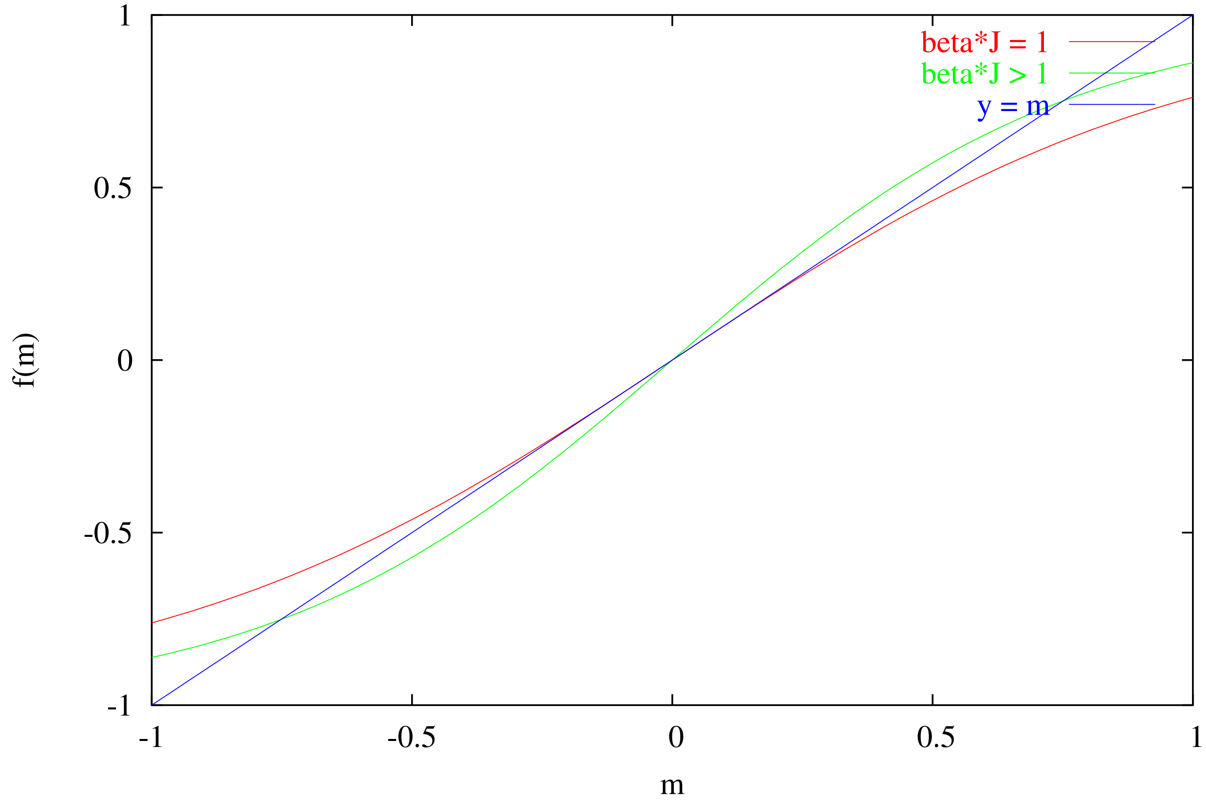
$$g = -\frac{1}{N\beta}\ln Z = -\frac{1}{2}Jm^2 - \frac{1}{\beta}\ln\Big(2\cosh(\beta(Jm + \mu B_0))\Big)$$
$$m = -\left(\frac{\partial g}{\partial B_0}\right) = \tanh(\beta(Jm + \mu B_0))$$

implizite Bestimmungsgleichung für $B_0 = 0$:

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

- Lösung: $m \neq 0 \longleftrightarrow \frac{\partial(\tanh(\beta J m))}{\partial m} > 1$
- kritische Temperatur: $\frac{\partial(\tanh(\beta J m))}{\partial m} = 1$ für $m = 0$

Graphische Bestimmung der Magnetisierung



- Phasenübergang unabhängig von Gitterdimension
- Widerspruch zu exakter $d = 1$ Lösung
- Typisch für alle klassischen Theorien (Bsp: Landau-Theorie)

2 Lösungen des Ising Modells

Lösung für $d = 1$

Hamilton-Funktion:

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

Annahmen:

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

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

Energie des Systems:

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

Zustandssumme:

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

Bestimmung der Zustandssumme mit Transfer-Matrix-Methode:

Finde Matrix $\mathbf{T}$ mit fogenden Eigenschaften:

$$< S_i|\mathbf{T}|S_{i,i+1} >= e^{KS_iS_{i,i+1}+\frac{h}{2}(S_i+S_{i,i+1})}$$

also:

$$< 1|\mathbf{T}|1 >= e^{K+h}$$

$$< -1|\mathbf{T}|-1 >= e^{K-h}$$

$$< 1|\mathbf{T}|-1 >=< -1|\mathbf{T}|1 >= e^{-K}$$

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

Die Matrix muss also wie folgt aussehen:

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

Zustandssumme:

$$
\begin{aligned}
Z &= \sum_{S_1} \sum_{S_2} \dots \sum_{S_N} < S_1|\mathbf{T}|S_2 >< S_2|\mathbf{T}|S_3 > \dots < S_N|\mathbf{T}|S_1 > \\
&= \sum_{S_1} < S_1|\mathbf{T}^N|S_1 > \\
&= \mathrm{Sp}\,\mathbf{T}^N
\end{aligned}
$$

- Trick: Vollständigkeit der Spinzustände
- $\mathrm{Sp}\,\mathbf{T}^N$ ist Darstellungsunabhängig
- Eigenwerte: $\det(\mathbf{T} - \lambda\mathbf{1}) = 0$

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

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

Für den Fall $B_0 = 0$ gilt:

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

$$Z = 2^N \cosh^N(K) + 2^N \sinh^N(K) \stackrel{N>>1}{\longrightarrow} 2^N \cosh^N(K)$$

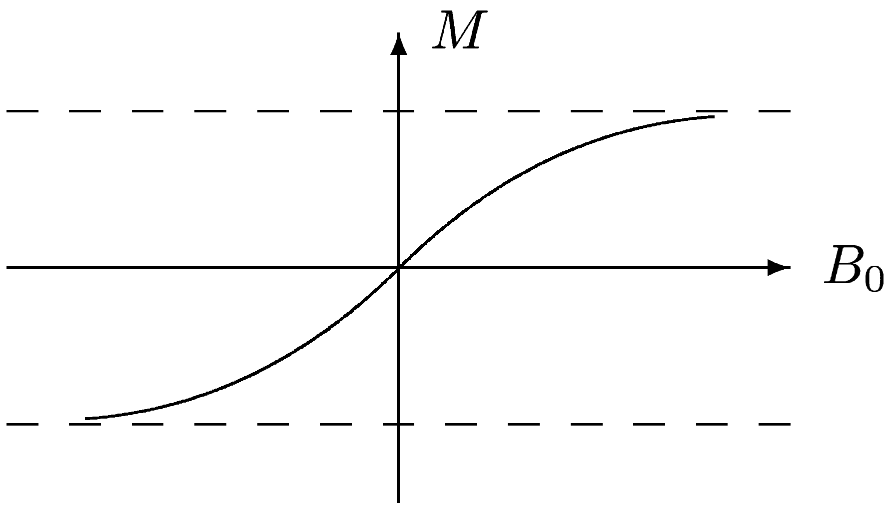
$$F = -k_B T \ln Z \stackrel{N>>1}{\longrightarrow} -N k_B T \ln\left(2\cosh(\beta J)\right)$$

weil λ_+^N viel größer als λ_-^N. (thermodynamischer Limes)
Magnetisierung:

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

Abbidlung:

- Magnetisierung in Abhängigkeit vom Magnetfeld
- Magnetisierung verschwindet für alle Temperaturen wenn kein Magnetfeld vorhanden ist
- Sättigung für große Magnetfelder



Erkenntnis:

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

Für $T = 0$:

$$\lim_{T \to 0} \frac{\lambda_+}{\lambda_-} = 1 \, , \text{ ist obere Approximation nichtmehr gültig}$$

Phasenübergang bei $B_0 = T = 0$ (Korrelationslänge geht gegen unendlich)
Kritische Exponenten:

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

Lösung für $d = 2$

- TFM analog $d = 1$ Lösung
- nur Lösung für $B = 0$

Hamiltonian:

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

Indizes $\equiv$ Gitterpunkte der Spins.

Abkürzung:

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

wobei

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

Transfer-Matrix $\mathbf{T}$, mit Matrixelementen:

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

$2^N \times 2^N$ - Matrix, Diagonalisierung.
[7] Kerson Huang, Statistical mechanics

Analog zum $d = 1$ Fall gilt:

$$Z = \mathrm{Sp}\,\mathbf{T}^N$$

freie Energie pro Spin $f = \lim_{N\to\infty} \frac{1}{N}(-k_B T \ln Z)$:

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

$$\text{mit } K = \frac{2}{\cosh(2\beta J)\coth(2\beta J)}$$

Magnetisierung:

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

kritische Temperatur:

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

spezifische Wärme: (logarithmische Divergenz)

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

kritische Exponenten:

$\beta = \frac{1}{8}$

$\alpha = 0$

Fazit:

- Phasenübergang zweiter Ordnung
- spontane Magnetisierung wenn $T < T_C$ ohne vorhandenes Magnetfeld

Lösung für $d = 3$

- keine exakte analytische Lösung
- überzeugende Resultate durch Approximation und Monte Carlo Simulation
- keine wieteren Informationen aus exakter Lösung erwartet
- $d = 3$ Ising Modell zeigt Phasenübergänge

3 Monte Carlo Simulation

Simulationen das Ising Modells durch Monte Carlo Simulation.

Gesucht sei der Erwartungswert $< A >$.

$$< A >= \sum_i p_i A_i \text{ , wobei}$$

$$p_i = \frac{e^{-\beta E_i}}{\sum_j e^{\beta E_j}} \text{ Boltzmann Wahrscheinlichkeitsverteilung}$$

E_i Energie im Zustand i

important sampling: Aufsummieren einiger zufälliger Zustände (Boltzmann verteilt).

$$< A >_{est} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} A(i)$$

$N \equiv$ Anzahl der Iterationen in der Computersimulation

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

Damit gilt:

$$P(A,t+1) = P(A,t) + \sum_B \Big(W(B \to A) P(B,t) - W(A \to B) P(A,t) \Big)$$

Vergessen der Anfangskonfiguration für große t, $P(A,t) \to p(A)$.
Bedingung für zeitunabhängige Wahrscheinlichkeitsverteilung:

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

somit gilt:

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

Realisierung einer Boltzmannverteilung: Metropolis Algorithmus
[4]
http://www.npac.syr.edu/users/gcf/slitex/CPS713MonteCarlo96/

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

Pseudocode:

- 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))

4 Anwendungen

Spingläser ([8] W. Kinzel, Spingläser, Optimierung und Gedächtnis)

- 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, sehr langsame Relaxation
- Modell:
  - Unordnung und Konkurrenz der magnetischen Wechselwirkung
  - Hamilton: $H = -\sum J_{ij} S_i S_j - \mu B_0 \sum S_i$, wobei die J_{ij} zufällige, symmetrisch um 0 verteilte Kopplung darstellt

Spingläser: Optimierung und Gedächtnis

- Traveling Salesman Problem:
  - "Aufheizen" des Systems, Wegstrecken bekommen gleiche Gewichtung
  - "Abkühlen" des Systems, Zustand niedrigster Energie stellt sich ein, der ideale Weg?

- Gedächtnis:
  - Modell:

$$\begin{aligned}
S_i \quad &\longleftrightarrow \text{Neuron i} \\
S_i = 1 \quad &\longleftrightarrow \text{Neuron i sendet Impuls} \\
S_i = -1 \quad &\longleftrightarrow \text{Neuron i sendet keinen Impuls} \\
J_{ij} \quad &\longleftrightarrow \text{erregende und hemmende Synapsen} \\
\mu B_0 \quad &\longleftrightarrow \text{Potential einer sensorischen Nervenzelle}
\end{aligned}$$

  - einige Eigenschaften
    * Fähigkeit spontane Information zu speichern
    * Information wird nach Inhalt zurückgerufen, nicht nach Addresse, daher schneller als im Computer
    * häufige Information wird stärker gespeichert (Langzeitgedächtnis)
    * Relaxation wenig oft erhaltener Information (Kurzzeitgedächtnis)

- Ghetto Formationen [5]

$$\begin{aligned} |S=+1> &\longleftrightarrow \text{immigrant} \\ |S=-1> &\longleftrightarrow \text{native} \\ k_B T &\longleftrightarrow \text{social temperature} \\ m &\longleftrightarrow \text{coexistence} \end{aligned}$$

- Social phase transition [6]

$$\begin{aligned} H &\longleftrightarrow \text{global trend, world wide fashion} \\ \delta E &\longleftrightarrow \text{possible mind change} \\ S_i &\longleftrightarrow \text{opinion} \end{aligned}$$

- weitere Anwendungen
  – Quantum Game Theory
  – duopoly markets

5 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.h
4. http://www.npac.syr.edu/users/gcf/slitex/CPS713MonteCarlo96/
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