Projekt nr C.6.5

Model dwuwymiarowego ferro- i antyferromagnetyka

Wprowadzenie

Termin ferromagnetyzm [1] używany jest w odniesieniu do materiałów wykazujących obecność spontanicznej magnetyzacji, będącej wynikiem równoległego ustawienia spinów. Taka konfiguracja jest stabilna (odpowiada minimum energii), gdy sprzężenie wymiany $J > 0$. W przeciwnym wypadku (tzn. gdy $J < 0$) mamy do czynienia z antyferromagnetykiem, czyli substancją preferującą antyrównoległe ustawienia spinów. Antyferromagnetyk nie wykazuje spontanicznej magnetyzacji, a od paramagnetyka różni się występowaniem regularnego układu spinów.

W przypadku ferromagnetyka w niskich temperaturach ($T \to 0$) spiny są uporządkowane (równoległe), występuje więc duże namagnesowanie; w wysokiej temperaturze ($kT > J$) dominuje przypadkowe ustawienie spinów, w wyniku czego brak jest namagnesowania.

Porównując wielkości namagnesowania dla zmieniających się temperatur można zaobserwować przemianę fazową drugiego rodzaju. Istnieje krytyczna temperatura T_c, powyżej której namagnesowanie (parametr uporządkowania) jest zerowe w zerowym polu magnetycznym. Poniżej T_c występuje dwukrotnie zdegenerowane namagnesowanie spontaniczne [2].

<u>Model Isinga</u>

Dwuwymiarowy model ferro- i antyferromagnetyka, nazywany <u>Modelem Isinga</u> [2], zdefiniowany jest na sieci L x L. Z każdym węzłem związany jest spin s_i, przyjmujący wartości +1 („do góry”) lub –1 („w dół”). Oddziaływanie pomiędzy spinami zachodzi poprzez sprzężenie wymiany J. Dodatkowo uwzględnić można istnienie zewnętrznego pola magnetycznego H. Hamiltonian takiego układu ma postać:

$$H = -J\sum_{<i,j>} s_i s_j + \mu H \sum_i s_i$$

Oznaczenie <i,j> w pierwszej sumie oznacza sumowanie po wszystkich parach najbliższych sąsiadów, natomiast druga suma przebiega po wszystkich ($N = L^2$) spinach; μ jest momentem magnetycznym spinu.

Kolejne konfiguracje spinowe generowane są przez odwracanie pojedynczych spinów (*single-spin-flip*). Relaksację układu do stanu podstawowego dla zadanej temperatury T osiągnąć można przez użycie algorytmu Metropolisa. Po osiągnięciu stanu równowagi wyznaczamy namagnesowanie, zdefiniowane jako:

$$M = \frac{1}{N}\sum_i s_i$$

Algorytm

W trakcie symulacji następuje odwracanie pojedynczych spinów zgodnie ze schematem Metropolisa. Zmiana energii układu po odwróceniu spinu s_k wynosi:

$$\Delta E = 2s_k\left(J\sum_{<j>} s_j - \mu H\right)$$

Gdzie sumowanie przebiega po sąsiadach s_k.

Schemat Metropolisa

1. Określamy konfigurację początkową
2. Wybieramy k-ty spin (s_k)
3. Obliczamy ΔE (zmianę energii układu po odwróceniu s_k)
4. Jeżeli ΔE < 0, to akceptujemy odwrócenie i wracamy do kroku 2.
5. Jeżeli ΔE > 0, to losujemy liczbę losową R z przedziału [0,1]
6. Jeżeli R < exp(-ΔE/kT) to odwracamy s_k i wracamy do kroku 2.
7. Jeżeli R > exp(-ΔE/kT) to pozostawiamy starą konfigurację i wracamy do kroku 2.

Sieć może być przeglądana sekwencyjnie lub losowo. Za jeden krok Monte Carlo (MCS – *Monte Carlo Step*) przyjmujemy sprawdzenie możliwości odwrócenia spinów w N węzłach sieci.

Prawidłowa symulacja zachowania układu nieskończonego wymaga zastosowania periodycznych warunków brzegowych.

Zadanie do wykonania

- Zbudowanie modelu Isinga o parametrach (J, kT, μH) dla sieci o wymiarach od 32x32 do 1024x1024;
- Badanie zachowania modelu pod względem ilościowym (wartości namagnesowania) oraz jakościowym (obserwacja zmian uporządkowania spinów) dla różnych parametrów układu;
- Prezentacja uzyskanych wyników

Literatura

1. Soshin Chikazumi, *Physics of Ferromagnetism*, Oxfor University Press, 1997
2. Dieter W. Heermann, *Podstawy symulacji komputerowych w fizyce*, WNT, Warszawa 1997
3. Paul Coddington, Monte Carlo Simulation for Statistical Physics, Northeast Parallel Architectures Centre at Syracuse University http://www.npac.syr.edu/users/paulc/lectures/montecarlo/p_montecarlo.html

4. Angus MacKinnon, Computational Physics
http://www.sst.ph.ic.ac.uk/angus/Lectures/compphys/compphys.html

5. Peter Young, The Two-Dimensional Ising Model,
http://bartok.ucsc.edu/peter/java/ising/isingText.html