УДК 537.6, 004.021

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ МОДЕЛИ ИЗИНГА МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО ВО ВНЕШНЕМ ПОСТОЯННОМ МАГНИТНОМ ПОЛЕ

А. А. Бирюков, Я. В. Дегтярева, М. А. Шлеенков

Методом Монте-Карло исследуется поведение двумерной модели Изинга во внешнем постоянном магнитном поле. Показана зависимость конфигурации системы спинов от ранее принимаемых состояний при различных температурах.

Изучение магнитных свойств веществ представляет интерес, как с теоретической, так и с практической стороны. Магнитные материалы широко используются в медицине, биологии, инженерии и многих других областях человеческой деятельности.

Все вещества можно разделить по магнитным свойствам на три группы.

Ферромагнетики выстраивают свою кристаллическую решетку при низких температурах так, что магнитные поля атомов однонаправленные и усиливают друг друга, в результате чего возникает магнитное поле за пределами материала.

В *парамагнетиках* нет внутренних сил выравнивания магнитной ориентации атомов, поэтому собственного магнитного поля они не создают. Однако для парамагнетиков характерна способность к временному намагничиванию, то есть магнитные моменты атомов выстраиваются в одном направлении при помещении вещества во внешнее сильное магнитное поле.

В *диамагнетиках* атомы также не обладают собственным магнитным моментом, однако при помещении такого материала во внешнее поле его электроны создают собственное магнитное поле, направленное в противоположную сторону по сравнению с внешним.

В парамагнетиках экспериментально наблюдается фазовый переход второго рода. При понижении температуры до определенного критического значения, характерного для каждого парамагнетика, наблюдается резкий скачок намагниченности образца. Он становится ферромагнетиком. Намагниченность сохраняется при более низких температурах и исчезает при температурах выше критической.

Изучение фазовых переходов и связанных с ними критических явлений традиционно привлекают к себе активное внимание физиков. В настоящее время представление о фазовых переходах проникают в различные области физики (физика твердого тела, физическая химия, биохимия и биофизика макромолекул, квантовой электроники). Большой интерес представляют фазовые переходы второго рода, связанные с перестройкой структуры вещества без обмена энергией с окружающей средой.

Для изучения закономерностей фазовых переходов весьма удобны оказались модели теории магнетизма. Для описания магнитных систем существует целый ряд моделей.

Модель магнитной системы, состоящей из элементарных магнитных моментов с двумя возможными ориентациями «вверх» и «вниз» была введена Вильгельмом Ленцем в 1920 году для объяснения магнитных свойств твердых тел [1]. Позже эта концепция была развита его учеником Э. Изингом для исследования свойств ферромагнетиков.

В своей диссертации 1924 года [2] Э. Изинг доказал, что в одномерной линей-

Бирюков Александр Александрович (biryukov@samsu.ru), к.ф.-м.н., профессор, заведующий кафедрой общей и теоретической физики физического факультета Самарского государственного университета, 443011, Россия, г. Самара, ул. Академика Павлова, 1.
Дегтярева Яна Владимировна (degt-yana@yandex.ru), магистрант 2 курса физического факультета Самарского государственного университета
Шлеенков Марк Александрович (shleenkov@list.ru), аспирант 2 года обучения физического факультета Самарского государственного университета

ной цепочке спинов, связанных взаимодействием с ближайшими соседями, фазового перехода не существует. Однако двумерная модель прекрасно иллюстрирует фазовый переход между ферромагнитным и парамагнитным состояниями (фазовый переход второго рода), что было показано в 1942 году Л. Онсагером, который смог точно рассчитать статистическую сумму такой модели [3]. Данная модель позволяла не только объяснить переход, но и определить температуру фазового перехода. Двумерная модель Э. Изинга рассматривалась многими авторами, которые уточняли методы точного решения задачи описания фазовых переходов [4–8].

Представляет интерес изучение поведения модели Изинга при разных температурах и различных значениях действующего на образец магнитного поля методами компьютерного моделирования.

Модель Э. Изинга. Двумерная модель описывается решеткой, в узлах которой расположены спины, принимающие только два значения: +1 или –1 (направление спина «вверх» или «вниз»). Гамильтониан системы имеет вид:

$$H = -J \sum_{neighbours} S_i S_j - \mu_B h \sum_i S_i$$

где J – константа взаимодействия между спинами, $\mu_{Â}$ – магнетон Бора, S_i – значение спина в i-м узле решетки, h – внешнее поле. Вероятность нахождения спина в каждом конкретном состоянии задается распределением Гиббса:

$$P = \frac{1}{Z}\exp(-\frac{1}{kT}H),$$

где k – коэффициент Больцмана, T – температура, Z – нормировочная константа.

Для модели Э. Изинга существует аналитическое решение [2], однако оно получено для случая, когда внешнее поле h равно нулю. Если же внешнее поле отлично от нуля, то для решения удобнее воспользоваться численными методами. Один из таких методов – метод Монте-Карло.

Метод Монте-Карло – численные методы решения математических задач и прямое статистическое моделирование (физических, химических и других процессов) при помощи получения и преобразования случайных чисел. Основное преимущество методов Монте-Карло по сравнению с другими аналитическими и численными методами состоит в том, что с их помощью можно исследовать физические явления любой сложности, которые нельзя или очень трудно решить другими способами. Алгоритм составляется для одного случайного испытания (шага модели), а затем испытание повторяется большое число раз, причем все шаги должны быть независимы.

Впервые этот метод был исследован в 1873 году Холлом для экспериментального определения числа π путем бросания иглы на лист линованной бумаги. А в 1949 году Метрополис и Улам использовали метод Монте-Карло для решения линейных интегральных уравнений [9, 10].

В статистической физике метод Монте-Карло начал применяться достаточно давно. Он позволяет проводить «эксперименты» на эффективных «кристаллах» с любым гамильтонианом взаимодействия, что помогает исследовать такие явления, как, например, фазовые переходы.

При численных расчетах методом Монте-Карло сначала задается начальная конфигурация переменных модели, хранимых в памяти компьютера. Затем последовательно производятся псевдослучайные изменения переменных так, чтобы получаемая плотность вероятности появления некоторой конфигурации C была пропорциональна больцмановскому фактору:

$$p(C) \propto e^{-\beta H(C)},$$

где $H(C)$ – называется действием, определенным на конфигурации, β – обратная температура. После этого конфигурация C заменяется на некоторую новую конфигурацию C', для которой снова вычисляется $H(C')$ и сравнивается с $H(C)$. Если действие уменьшается, то есть $H(C')$ имеет больший больцмановский вес, чем $H(C)$, то замена конфигурации C на C' принимается (условие теплового равновесия с окружающей средой).

Постановка задачи

Имеется двумерная модель Э. Изинга с решеткой спинов размера N*N. На решетку действует внешнее постоянное магнитное поле h. Гамильтониан системы имеет вид:

$$H = -J\sum(S_{i,j}(S_{i+1,j} + S_{i-1,j} + S_{i,j+1} + S_{i,j-1}) - \mu_B S_{i,j} h)$$
.

В данной работе при помощи метода Монте-Карло исследуется состояние системы, описываемой моделью Э. Изинга при различных температурах.

Алгоритм решения

1. *Установка значений параметров*. При решении задачи предполагалось, что константа взаимодействия между спинами J и коэффициент Больцмана k_B равны 1. Размерность решетки была взята равной 100. Значения магнитного поля брались различные, конкретные значения указаны непосредственно на графиках.

2. *Инициализация двумерной решетки*. Двумерная решетка представлена матрицей, элементы которой – значения спинов в данном узле. Решетка считается периодической, то есть учитывается выход за ее границы при подсчете энергии взаимодействия с соседями. Начальное состояние решетки задается при $T \to \infty$ («горячий» старт, $\beta = 0$) и нулевом магнитном поле h. В этом случае вероятность того, что спин $S_{i,j}$ примет значение +1, равна

$$P(+1) = \frac{e^{-\beta H(+1)}}{e^{-\beta H(+1)} + e^{-\beta H(-1)}} = \frac{1}{2},$$

то есть спины расположены хаотически, а намагниченность обращается в ноль. Поэтому при $\beta = 0$ спины решетки задаются произвольным образом, и каждый спин направлен в противоположную сторону по отношению к своим соседям.

3. При охлаждении и действии внешнего поля конфигурация решетки меняется. Поэтому конфигурацию решетки нужно *изменить до нужной температуры*. Направления спинов решетки меняются в соответствии с формулами (см. шаг 4). Измерения при этом не производятся.

4. Далее для каждого узла решетки *вычисляем значение энергии H* и *вероятности*

$$P(\pm 1) = \frac{e^{-\beta H(\pm 1)}}{e^{-\beta H(+1)} + e^{-\beta H(-1)}}$$

(поскольку спин принимает лишь два возможных значения: +1 или –1). Затем, согласно алгоритму Монте-Карло, генерируется псевдослучайное число x из отрезка [0, 1] и сравнивается с полученными значениями вероятностей. В случае, когда $x > P(+1)$ значение спина принимается равным –1, иначе +1.

5. Следующий шаг – для определенного значения внешнего поля и температуры *вычислить среднее значение намагниченности по всей решетке*. Намагниченность здесь – алгебраическая сумма спинов системы. Поскольку метод Монте-Карло является статистическим, то необходимо проделать несколько измерений для каждой конфигурации, а потом провести по ним усреднение.

Результаты и их обсуждение

На рисунке 1 изображена зависимость намагниченности от температуры при различных значениях магнитного поля.

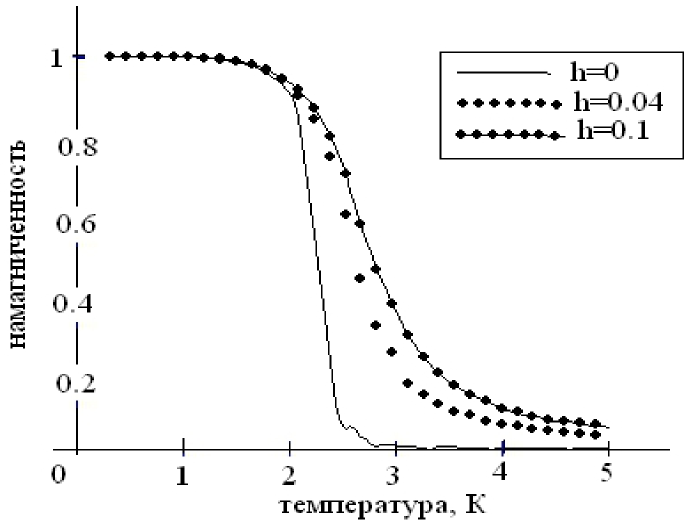
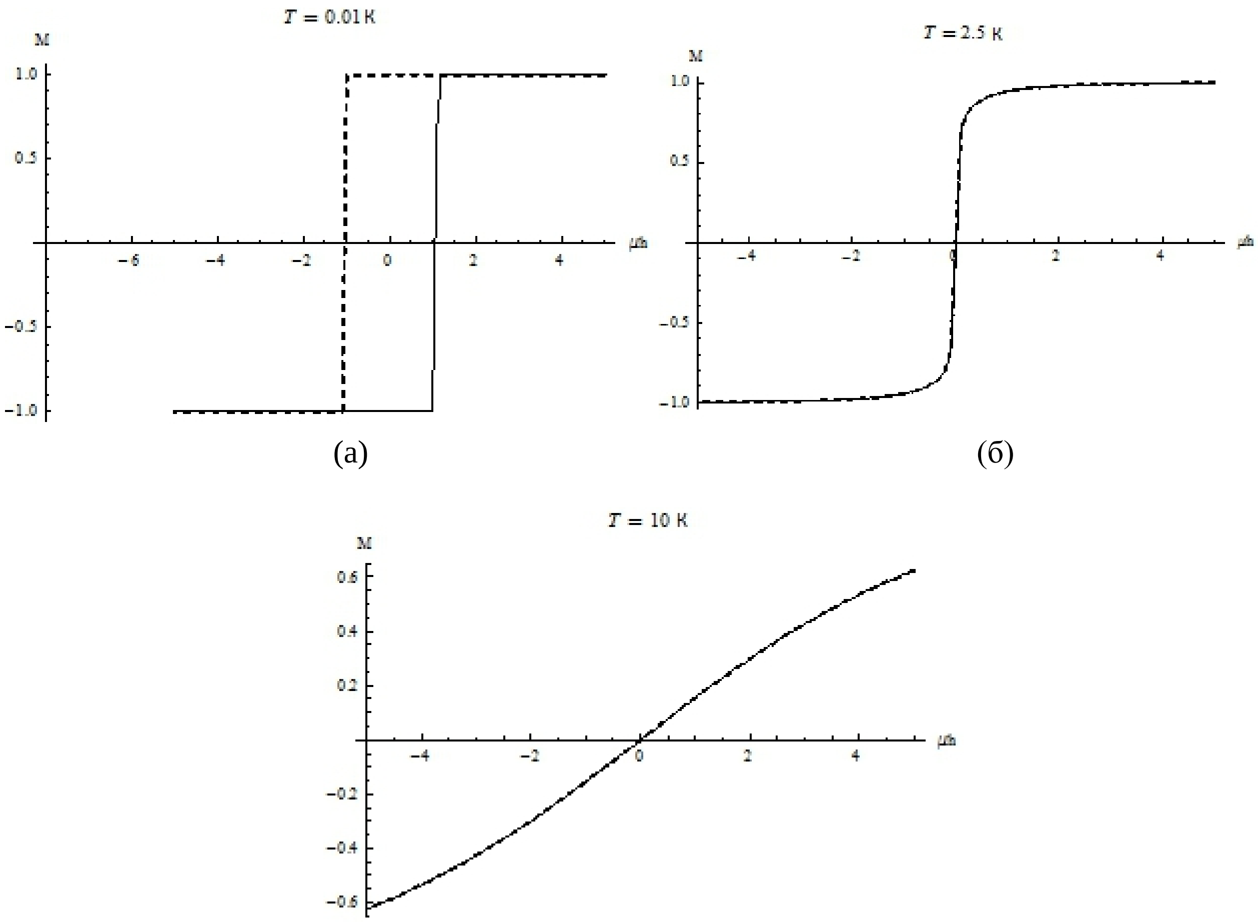


Рис. 1. Графики зависимости средней намагниченности от температуры для различных значений внешнего магнитного поля

Как видно из графика, при увеличении величины внешнего поля температура фазового перехода возрастает. Температура фазового перехода определяется из условия: разница между соседними значениями намагниченности максимальная. Для нулевого магнитного поля она равна 2,5 К, что совпадает с результатами теоретических расчетов. Для данной системы характерно такое явление как гистерезис, то есть состояние системы зависит не только от значений температуры, внешнего поля и взаимодействия между спинами, но и от предыстории системы, то есть от состояний, которые она принимала ранее. На рисунке 2 изображены петли гистерезиса для различных фиксированных температур. Исследования проводились для двух случаев: в первом случае величина внешнего поля менялась от –5 до 5 Тл (сплошная линия), во втором случае – от 5 до –5 Тл (пунктирная линия).



(а) (б)

(в)

Рис. 2. Гистерезис системы при различных температурах
(а) – температура ниже критической, (б) – в окрестности точки фазового перехода,
(в) – температура больше критической

Заключение

При низких температурах ($\beta \to \infty$) энергия системы уменьшается, и спины упорядочиваются в одном направлении. Уровень упорядоченности спинов определяется намагниченностью системы. Самое сильное изменение конфигурации спинов происходит в окрестности точки фазового перехода (здесь фазовый переход «ферромагнетик – парамагнетик» второго рода, при котором нарушается симметрия системы). Намагниченность выступает в качестве параметра порядка. При $T_{крит}$ критической температуре средняя намагниченность в двумерной модели Э. Изинга стремится к нулю с бесконечным наклоном. В этом интервале наблюдается резкий «скачок» кривой зависимости намагниченности решетки от температуры *T*. При температуре $T < T_{крит}$ ориентация спинов решетки существенно зависит от состояний, которые система принимала прежде. Однако, начиная от температуры фазового перехода, такая зависимость исчезает. Это означает, что спины упорядочены в одном направлении. Таким образом, по наличию или отсутствию гистерезиса можно сказать, в каком состоянии (ферромагнитном или парамагнитном) находится вещество.

Литература

1. Ising E. Beitrag zur Theorie des Ferro- und Paramagnetimus. Hamburg, 1924. p.253-258.
2. Onsager L. Crystalstatistics. A two-dimensional model with order-disorder transitions // PhysRev.1944. P.117-149.
3. Изюмов Ю. А., Скрябин Ю. Н., Статичтическая механика магнитоупорядоченных систем. М.: Наука, 1987. 264 с.
4. Lenz W. Beiträge zum Verständnis der magnetischen Eigenschaften in festen Körpern//Phys. Zeitschrift. 1920. Bd. S. 613–615.
5. Yang C. N. The Spontaneous Magnetization of a Two-Dimensional Ising Model // PhysRev.1952.Vol.85. P. 808–816.
6. Schultz T. D., Mattis D. S., Lieb E. H. // Rev. Mod. Phys. Vol.36. P. 856–871.
7. McCoy B. M., Wu Tai Tsun. The two-dimensional Ising model. Cambridge: Harvard Univ. Press. 1973.
8. Зиновьев Ю. М. Спонтанная намагниченность в двумерной модели Изинга // ТМФ. 2003. Т.136. С. 444–462.
9. Hall A. On an experiment determination of π. Messeng. Math. № 2. 1873.P. 113-114.
10. Metropolis N., Ulam S. The Monte-Carlo method // J.Amer. Stat. Assos. Vol. 44. № 247. 1949. P.335-341.
11. Соболь И. М. Численные методы Монте-Карло. М.: Наука, 1973. 313 с.
12. Equation of State Calculations by Fast Computing Machines/ Metropolis N. et al. // J.Chem.Phys. № 21. 1953. P.1087-1092.
13. Кройц М. Кварки, глюоны и решетки. М.: Мир. 1987. С. 148–160.
14. Биндер К., Хеерман Д. В. Моделирование методом Монте-Карло в статистической физике. М.: Наука, 1995. 142 с.

Статья поступила в редакцию 30.10.2012 г.