

## Vorlesung

# Monte-Carlo-Simulationen

*Prof. Karsten Held*

*IFP – AG Computational Materials Science*

## Vorlesung

# Monte-Carlo-Simulationen

*Prof. Karsten Held*

*IFP – AG Computational Materials Science*

## Idee

*Modellbildung in der Theoretischen Physik:*

*Physikalisches Phänomen → Modell → exakte Lösung?*

*numerische Simulation*

## Vorlesung

# Monte-Carlo-Simulationen

*Prof. Karsten Held*

*IFP – AG Computational Materials Science*

## Idee

*Modellbildung in der Theoretischen Physik:*

*Physikalisches Phänomen → Modell → exakte Lösung?  
numerische Simulation*

*Hier:*

*Ferromagnetismus → Ising-Modell → exakt in  $d = 1, 2, \infty$   
Monte-Carlo-Simulation*

## Vorlesung

# Monte-Carlo-Simulationen

*Prof. Karsten Held*

*IFP – AG Computational Materials Science*

- 1) Monte-Carlo-Integration (VO: 21.5. 12:00, Ü: 22./23.5.)
  - 2) MC-Simulation Ising-Modell (VO: 11.6. 12:00, Ü: 12./13.6.)
  - 3) Finite size scaling (14.6. 9:00 EDV-Prak)
2. Test (22.6. 15:00 Informatik HS)

# 1) Ising-Modell

## Idee

Modell *wechselwirkender Spins* von  
*Lenz und Ising (1925)*  
 zur Beschreibung von *Ferromagneten*

## Hamiltonian (Ising-Modell)

*Klassische Spins*  $\sigma_i \in \{+1, -1\} = \{\uparrow, \downarrow\}$   
 auf  $N$  Gitterplätzen  $i, j$  mit Magnetfeld  $\mathbf{B}$  ( $\mu_B \equiv 1$ ;  $g \equiv 2$ ):

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j - B \sum_i \sigma_i$$

$\langle ij \rangle$ : Summe über NN Paare, jedes Paar 1-fach gezählt

Allgemeiner: Heisenberg-Modell (Quanten-Spins)

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} \vec{S}_i \vec{S}_j - \mu_B B \sum_i \vec{S}_i^z$$

Verallgemeinerung auf beliebige Wechselwirkung:

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N J_{ij} \sigma_i \sigma_j - B \sum_{i=1}^N \sigma_i$$

- ferro- (antiferromagnetische) Kopplung:  $J > 0$  ( $J < 0$ )
- $J = 0$  trivial (unabhängige Spins)
- wichtiger Fall:  $B = 0$
- Eigenschaften hängen vom Gitter (insb. Dimension) ab

Ising- und Heisenberg-Modell beschreiben

**Elektronen** als **lokalisierte Spins**.

O.K. für einige **Isolatoren**, aber sicherlich nicht für **Metalle**.

Drosophila der klassischen statistischen Physik.

Kopplungskonstante  $J$  kann mit LDA berechnet werden.

# Statistische Physik

**Observable  $\mathcal{O}$  (klassisch):**

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \frac{1}{Z} \frac{1}{N! h^{3N}} \int d^3 x_1 \int d^3 p_1 \dots \int d^3 x_N \int d^3 p_N \mathcal{O}(x_1, p_1 \dots x_N, p_N) e^{-\beta E(x_1, p_1 \dots x_N, p_N)}$$

mit  $\beta = 1/k_B T$  und Zustandssumme

$$Z = \frac{1}{N! h^{3N}} \int d^3 x_1 \int d^3 p_1 \dots \int d^3 x_N \int d^3 p_N e^{-\beta E(x_1, p_1 \dots x_N, p_N)}$$

z.B. Magnetisierung  $M$  im Ising-Modell

$$\langle M \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\sigma_1=\pm 1} \dots \sum_{\sigma_N=\pm 1} \underbrace{\sum_{i=1}^N \sigma_i}_{\mathcal{O}(\sigma_1 \dots \sigma_N)} e^{-\beta H(\sigma_1 \dots \sigma_N)}$$

**Observable  $\mathcal{O}$  (quantenmechanisch):**

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \text{Spur } \mathcal{O} e^{-\beta \mathcal{H}}$$

## Weitere Observablen

X:

$$X = \langle H \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\sigma_1=\pm 1} \cdots \sum_{\sigma_N=\pm 1} H(\sigma_1 \cdots \sigma_N) e^{-\beta H(\sigma_1 \cdots \sigma_N)}$$



## Weitere Observablen

Innere Energie:

$$E = \langle H \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\sigma_1=\pm 1} \cdots \sum_{\sigma_N=\pm 1} H(\sigma_1 \cdots \sigma_N) e^{-\beta H(\sigma_1 \cdots \sigma_N)}$$

## Weitere Observablen

Innere Energie:

$$E = \langle H \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\sigma_1=\pm 1} \cdots \sum_{\sigma_N=\pm 1} H(\sigma_1 \cdots \sigma_N) e^{-\beta H(\sigma_1 \cdots \sigma_N)}$$

X:

$$X = \frac{\langle H^2 \rangle - \langle H \rangle^2}{(k_B T)^2}$$

## Weitere Observablen

Innere Energie:

$$E = \langle H \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\sigma_1=\pm 1} \cdots \sum_{\sigma_N=\pm 1} H(\sigma_1 \cdots \sigma_N) e^{-\beta H(\sigma_1 \cdots \sigma_N)}$$

X:

$$X = \frac{\langle H^2 \rangle - \langle H \rangle^2}{(k_B T)^2} = \frac{\partial E}{\partial T}$$

## Weitere Observablen

Innere Energie:

$$E = \langle H \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\sigma_1=\pm 1} \cdots \sum_{\sigma_N=\pm 1} H(\sigma_1 \cdots \sigma_N) e^{-\beta H(\sigma_1 \cdots \sigma_N)}$$

Spezifische Wärme:

$$C = \frac{\langle H^2 \rangle - \langle H \rangle^2}{(k_B T)^2} = \frac{\partial E}{\partial T}$$

## Weitere Observablen

Innere Energie:

$$E = \langle H \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\sigma_1=\pm 1} \cdots \sum_{\sigma_N=\pm 1} H(\sigma_1 \cdots \sigma_N) e^{-\beta H(\sigma_1 \cdots \sigma_N)}$$

Spezifische Wärme:

$$C = \frac{\langle H^2 \rangle - \langle H \rangle^2}{(k_B T)^2} = \frac{\partial E}{\partial T}$$

X:

$$X = -k_B T \ln Z$$

## Weitere Observablen

Innere Energie:

$$E = \langle H \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\sigma_1=\pm 1} \cdots \sum_{\sigma_N=\pm 1} H(\sigma_1 \cdots \sigma_N) e^{-\beta H(\sigma_1 \cdots \sigma_N)}$$

Spezifische Wärme:

$$C = \frac{\langle H^2 \rangle - \langle H \rangle^2}{(k_B T)^2} = \frac{\partial E}{\partial T}$$

X:

$$X = -k_B T \ln Z = E - TS$$

## Weitere Observablen

Innere Energie:

$$E = \langle H \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\sigma_1=\pm 1} \cdots \sum_{\sigma_N=\pm 1} H(\sigma_1 \cdots \sigma_N) e^{-\beta H(\sigma_1 \cdots \sigma_N)}$$

Spezifische Wärme:

$$C = \frac{\langle H^2 \rangle - \langle H \rangle^2}{(k_B T)^2} = \frac{\partial E}{\partial T}$$

Freie Energie:

$$F = -k_B T \ln Z = E - TS$$

## Weitere Observablen

Innere Energie:

$$E = \langle H \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\sigma_1=\pm 1} \cdots \sum_{\sigma_N=\pm 1} H(\sigma_1 \cdots \sigma_N) e^{-\beta H(\sigma_1 \cdots \sigma_N)}$$

Spezifische Wärme:

$$C = \frac{\langle H^2 \rangle - \langle H \rangle^2}{(k_B T)^2} = \frac{\partial E}{\partial T}$$

Freie Energie:

$$F = -k_B T \ln Z = E - TS$$

X:

$$X = \langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2$$



## Weitere Observablen

Innere Energie:

$$E = \langle H \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\sigma_1=\pm 1} \cdots \sum_{\sigma_N=\pm 1} H(\sigma_1 \cdots \sigma_N) e^{-\beta H(\sigma_1 \cdots \sigma_N)}$$

Spezifische Wärme:

$$C = \frac{\langle H^2 \rangle - \langle H \rangle^2}{(k_B T)^2} = \frac{\partial E}{\partial T}$$

Freie Energie:

$$F = -k_B T \ln Z = E - TS$$

X:

$$X = \langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2 = \frac{\partial M}{\partial B}$$

## Weitere Observablen

Innere Energie:

$$E = \langle H \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\sigma_1=\pm 1} \cdots \sum_{\sigma_N=\pm 1} H(\sigma_1 \cdots \sigma_N) e^{-\beta H(\sigma_1 \cdots \sigma_N)}$$

Spezifische Wärme:

$$C = \frac{\langle H^2 \rangle - \langle H \rangle^2}{(k_B T)^2} = \frac{\partial E}{\partial T}$$

Freie Energie:

$$F = -k_B T \ln Z = E - TS$$

Suszeptibilität:

$$\chi = \langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2 = \frac{\partial M}{\partial B}$$

## Kritische Exponenten

Klassifikation **Phasenübergang** nach Ehrenfest

**1. Ordnung:** 1. Ableitung von  $F = -k_B T \ln Z$  nicht stetig

**2. Ordnung:** 1. Ableitung von  $F$  stetig, 2. Ableitung nicht stetig

**Kritische Exponenten** bei PÜ **2. Ordnung universell!**

(hängen von  **$d$**  & **Symmetrie** des **Ordnungsparameters** ab)

$$\left. \begin{array}{ll} \text{Magnetisierung} & m = m_0 \epsilon^\beta \\ \text{Suszeptibilität} & \chi = \chi_0 \epsilon^{-\gamma} \\ \text{Spezifische Wärme} & C = C_0 \epsilon^{-\alpha} \\ \text{Korrelationslänge} & \xi = \xi_0 \epsilon^{-\nu} \\ \text{Magnetisierung bei } T_c & m \propto B^{\frac{1}{\delta}} \end{array} \right\} \epsilon = \left| 1 - \frac{T}{T_c} \right|$$

Mean-Field:  $\beta = 1/2$ ,  $\gamma = 1$ ,  $\alpha = 0$ ,  $\xi_0 = 0$ ,  $\delta = 3$

# Monte-Carlo-Integration

**Generisches Problem:** Integral (oder Summe) über Volume  $V$

$$I = \int_V d^d x f(\vec{x}); \quad V \subset \mathbb{R}^d \quad (1)$$

## Wiederholung

*Deterministischer Ansatz* reguläres Gitter von Stützpunkten (mit Abstand  $h$ ):

$$\vec{x}_{\vec{n}} = h\vec{n} \quad (\vec{n} \in \mathbb{Z}^d) \quad (2)$$

Approximiere  $I$  durch diskrete Summe (*numerische Integration*):

$$I \approx h^d \sum_{\substack{\vec{n} \\ \vec{x}_{\vec{n}} \in V}} f(\vec{x}_{\vec{n}}) \alpha_{\vec{n}} \quad (3)$$

## Problem

*Fehler  $\Delta I \sim h^s$  (z.B.  $h^2$  für Trapez-Regel).*

*Rechenaufwand (zeit)  $t \sim \#f(\vec{x}_n)$  Berechnungen*

$$t \approx \frac{V}{h^d} \propto h^{-d} \Rightarrow \Delta I \propto h^s \propto t^{-\frac{s}{d}} \quad (4)$$

*für großes  $d$ : sehr langsame Konvergenz*

## Beispiel

Integrationsmethode 2. Ordnung ( $h^2$ ) in  $d = 200$  Dimensionen.  
Halbierung des Fehlers: Computer-Zeit muss erhöht werden  
um  $2^{100} \approx 10^{30}$ .

*Integration nicht mehr möglich!*

## Monte-Carlo-Integration

**Alternative:** *stochastischer Ansatz*

**(i) Monte Carlo (MC) ohne Gewichtung (simple MC)**

$$I_N = V \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f(\vec{x}_i) \quad (5)$$

mit *Zufalls*koordinaten gemäß Gleichverteilung  $p(\vec{x}_i) = \frac{1}{V}$

### Merke

*Zentraler Grenzwertsatz:* ( $\sigma_f$ : Standardabweichung von  $f$ ):

$$\Delta I_N = \frac{\sigma_f}{\sqrt{N}} \xrightarrow{N \rightarrow \infty} 0 \quad (6)$$

d.h. Fehler  $\Delta I_N \sim t^{-\frac{1}{2}}$

Bereits für  $d \geq 5$ , konvergiert das MC Verfahren schneller als die  $h^2$  Trapezregel (mit  $\Delta I_N \sim t^{-2/5}$ )

Beispiel  $d = 200$ : 1/2 Fehler durch 4mal längeres  $t$  (statt  $10^{30}$ ).

# Monte-Carlo-Integration

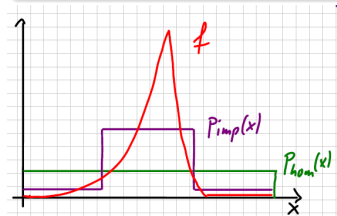
## Problem

Oft ist die Standardabweichung  $\sigma_f$  groß, z.B. in der Statistischen Physik wegen des Boltzmann Faktors  $\exp(-\beta E(\vec{x}))$

## (ii) Monte-Carlo mit Gewichtung ("importance sampling")

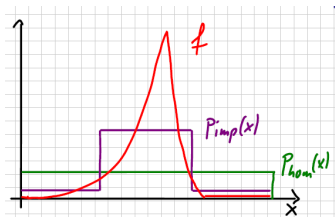
## Idee

Konzentriere  $\vec{x}_i$  auf Regionen von  $V$  mit großem Beitrag zu  $I$



Formal: Teile  $f(\vec{x}) = p(\vec{x}) o(\vec{x})$   
 in  $p(\vec{x}) > 0$ ,  $\int_V d^d x p(\vec{x}) = 1$   
 und Observable  $o(\vec{x})$ .

# Monte-Carlo-Integration



Formal: Teile  $f(\vec{x}) = p(\vec{x}) o(\vec{x})$   
 in  $p(\vec{x}) > 0$ ,  $\int_V d^d x p(\vec{x}) = 1$   
 und Observable  $o(\vec{x})$ .

$$I = \int_V d^d x f(\vec{x}) = \int_V d^d x p(\vec{x}) o(\vec{x}) \quad (7)$$

$$\approx \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N o(\vec{x}_i) \quad \text{mit Zufalls } \vec{x}_i \text{ gemäß } p(\vec{x}) \quad (8)$$

$$\Delta I_N = \frac{\sigma_o}{\sqrt{N}}; \quad \text{mit } \sigma_o \ll \sigma_f \text{ bei guter Wahl} \quad (9)$$



## Monte-Carlo-Integration

### Problem

*Wie erzeuge ich Zufallszahlen gemäß  $p(x)$ ?*

### Idee

#### (iii) Markov-Kette, Metropolis-Algorithmus

*Generiere Konfigurationen  $x_1, x_2, \dots, x_n$  gemäß  $p(x)$ .*

**Markov-Kette:** Jede Konfiguration  $\vec{x}_n$  hängt *nur* vom Vorgänger  $\vec{x}_{n-1}$  ab (kein Memory).

Sei  $W(x'|x)$  Wahrscheinlichkeit für  $x_n = x'$  in Schritt  $n$  wenn  $x_{n-1} = x$ .

Dann gilt die **Master-Gleichung**

$$p_n(x) = p_{n-1}(x) + \int_{x'} W(x|x') p_{n-1}(x') - \int_{x'} W(x'|x) p_{n-1}(x) \quad (10)$$

## Monte-Carlo-Integration

Eine hinreichende Bedingung für die Stationarität

$p_n(x) \xrightarrow{n \rightarrow \infty} p_{eq}(x)$  ist die **detaillierte Balance** der  $W$ 's:

$$W(x|x')p_{eq}(x') = W(x'|x)p_{eq}(x) \quad \forall x, x' \quad (11)$$

**Markov-Ketten Monte-Carlo-Algorithmus:** Markov-Kette mit  
(i) detaillierter Balance und (ii) Ergodizität (alle Konfigurationen vom Startpunkt erreichbar)

$\Rightarrow$  Konfigurationen  $x_i$  gemäß Wahrscheinlichkeit  $p_{eq}(x)$

**Metropolis-Algorithmus:**

$$W(x'|x) = \min\{1, r\}; \text{ mit } r = \frac{p_{eq}(x')}{p_{eq}(x)} \quad (12)$$

Metropolis-Algorithmus hat höchst mögliche Akzeptanzrate

In Statistischer Physik: Boltzmann Gewicht  $p_{eq}(x) = e^{-\beta E(x)} / Z$

## Metropolis-Algorithmus

### Metropolis-Algorithmus:

$$W(x'|x) = \min\{1, r\}; \text{ mit } r = \frac{p_{eq}(x')}{p_{eq}(x)} \quad (13)$$

### Wärme-Bad-Verfahren:

$$W(x'|x) = r/(1 + r); \text{ mit } r = \frac{p_{eq}(x')}{p_{eq}(x)}. \quad (14)$$

## Monte-Carlo-Integration

Algorithmus:

Wähle Anfangskonfiguration  $x$

- ① Wähle neue Konfiguration  $x'$
- ② Berechne  $r = e^{-\beta[E(x')-E(x)]}$
- ③ Erzeuge Zufallszahl  $rand \in [0, 1)$
- ④ Wenn  $rand \leq \min(1, r)$  akzeptiere neue Konfiguration  $x \equiv x_{n+1} = x'$ , sonst behalte  $x$ .
- ⑤ Berechne Observablen  $\bar{o} += o(x)/N$
- ⑥ Mache bei 1.)  $N_{mal}$  weiter
- ⑦ (Berechne Mittelwerte, Standardabweichungen ...)

**Beachte (i):** Die ersten Werte können nicht genommen werden, da vom Startpunkt abhängig ( $p_n(x)$  noch nicht stationär).

Typische Wahl: 1%-10% warm-up runs.

**Beachte (ii):** in 2.) z.B.  $x' = x + (rand' - 0.5) \times \text{stepsize}$

## Weissche Molekularfeldtheorie des Ising-Modells

Mean-field (MF) Approximation: keine Korrelationen

$$\langle \sigma_i \sigma_j \rangle \stackrel{MF}{\approx} \langle \sigma_i \rangle \langle \sigma_j \rangle,$$

ähnlich wie Hartree-Approximation

Homogenes System:  $(\langle \sigma_i \rangle = \langle \sigma_j \rangle \equiv \langle \sigma \rangle = m \text{ mit } m = M/N)$

$$\begin{aligned} H &= -J \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j - B \sum_i \sigma_i \\ &\stackrel{MF}{\approx} -J \sum_i \sigma_i \sum_{j \text{ NN. of } i} \langle \sigma \rangle - B \sum_i \sigma_i \\ &= -\underbrace{(B + qJ\langle \sigma \rangle)}_{B_{\text{eff}}} \sum_i \sigma_i \end{aligned}$$

$q$ : Koordinationszahl (# nächster Nachbarn)

effektiver Einspin-Hamiltonian mit Selbstkonsistenzbedingung

## Mean-field Zustandssumme

⇒ Zustandssumme:

$$\begin{aligned} Z &= \sum_{\sigma_1=\pm 1} \dots \sum_{\sigma_N=\pm 1} \exp \left( \sum_i \sigma_i \frac{B + qJ\langle\sigma\rangle}{k_B T} \right) \\ &= \left( \sum_{\sigma_i=\pm 1} \exp \left( \sigma_i \frac{B + qJ\langle\sigma\rangle}{k_B T} \right) \right)^N \\ &= \left( 2 \cosh \frac{B + qJ\langle\sigma\rangle}{k_B T} \right)^N \end{aligned}$$

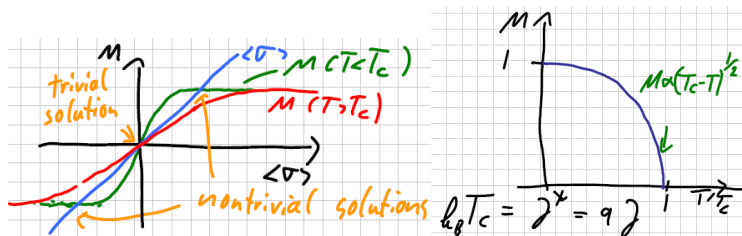
⇒ Magnetisierung:

$$m = \langle\sigma_i\rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\sigma_1=\pm 1} \dots \sum_{\sigma_N=\pm 1} \sigma_i \exp \left( \sum_i \sigma_i \frac{B + qJ\langle\sigma\rangle}{k_B T} \right) = \tanh \frac{B + qJ\langle\sigma\rangle}{k_B T}$$

## Mean-field Lösung (exakt für $d \rightarrow \infty$ )

$$m = \langle \sigma_i \rangle = \tanh \frac{B + qJ \langle \sigma \rangle}{k_B T}$$

Graphische Lösung (Bilder: N. Blümer)  $k_B T_c = qJ$ :



### Anmerkung

Für  $q \rightarrow \infty$  ( $d \rightarrow \infty$ ) wird MF Lösung exakt.

Zentraler Grenzwertsatz:

Korrekturen zur MF Lösung  $\sim 1/\sqrt{q} \xrightarrow{q \rightarrow \infty} 0$ .

## Exakte Lösung in $d = 1, 2$

### Ising-Modell: Lösung in $d = 1$

Kein Ferromagnetismus für  $T > 0$  (Rechnung im Anschluss)

### Ising-Modell: Lösung in $d = 2$ (Quadratgitter)

Kombination von Hoch- und Tief-Temperatur-Entwicklung

(Kramers, Wannier, 1941) Konzept der Dualität

$$k_B T_c = \frac{2}{\ln(\sqrt{2} + 1)} J \approx 2.2692 J$$

Onsager (1944) berechnete Zustandssumme  $Z$

Kritische Exponenten:  $\beta = \frac{1}{8}$ ,  $\gamma = \frac{7}{4}$ ,  $\alpha = 0$ ,  $\nu = 1$ ,  $\delta = 15$ .



## Exakte Lösung in $d = 1$

Ising-Modell  $d = 1$ , offene Kette,  $B = 0$

$$H = -J \sum_{i=1}^{N-1} \sigma_i \sigma_{i+1} = -J \sum_{i=2}^N \sigma_{i-1} \sigma_i$$

$$Z = \sum_{\sigma_1=\pm 1} \sum_{\sigma_2=\pm 1} \dots \sum_{\sigma_N=\pm 1} e^{-\beta H(\sigma_1 \dots \sigma_N)}$$

Trick: definiere neue Variablen  $\mathbf{s}_1 = \sigma_1$ ;  $\mathbf{s}_i = \sigma_{i-1} \sigma_i$  für  $i \geq 2$

$$\Rightarrow \sigma_i = \prod_{j=1}^i s_j$$

$$\Rightarrow H = -J \sum_{i=2}^N s_i$$

$$\begin{aligned} Z &= \left( \sum_{s_1=\pm 1} \right) \left( \sum_{s_2=\pm 1} e^{-\beta J s_2} \right) \dots \left( \sum_{s_N=\pm 1} e^{-\beta J s_N} \right) \\ &= 2(2 \cosh(\beta J))^{N-1} = 2^N [\cosh(\beta J)]^{N-1} \end{aligned}$$

## Exakte Lösung in $d = 1$

$$Z = 2(2 \cosh(\beta J))^{N-1} = 2^N [\cosh(\beta J)]^{N-1}$$

$$\Rightarrow E(\beta) = -\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta} = -(N-1) \tanh(\beta J)$$

$\infty$  oft differenzierbar  $\Rightarrow$  kein Phasenübergang ( $0 < T < \infty$ )

Klassifikation nach Ehrenfest

- 1. Ordnung: 1. Ableitung von  $F = -k_B T \ln Z$  nicht stetig
- 2. Ordnung: 1. Ableitung von  $F$  stetig, 2. Ableitung nicht stetig  
(evt. divergent)

# Monte-Carlo-Simulation Ising-Modell

## Idee

Modell *wechselwirkender Spins* von  
*Lenz und Ising (1925)*  
zur Beschreibung von *Ferromagneten*

## Hamiltonian (Ising-Modell)

*Klassische Spins*  $\sigma_i \in \{+1, -1\} = \{\uparrow, \downarrow\}$   
auf  $N$  Gitterplätzen  $i, j$  mit Magnetfeld  $\mathbf{B}$  ( $\mu_B \equiv 1$ ;  $g \equiv 2$ ):

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j - B \sum_i \sigma_i$$

$\langle ij \rangle$ : Summe über NN Paare, jedes Paar *1-fach* gezählt

## Monte-Carlo-Simulation Ising-Modell

Numerische Simulation  $\rightarrow$  endliches System

### Problem

*Kein Phasenübergang da*

$$Z = \sum_{\sigma_1=\pm 1} \sum_{\sigma_2=\pm 1} \dots \sum_{\sigma_N=\pm 1} e^{-\beta H(\sigma_1 \dots \sigma_N)} \quad (15)$$

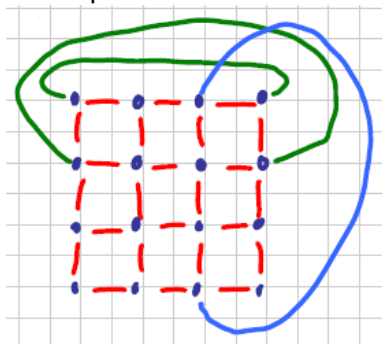
$\infty$ -oft differenzierbar (analytische Funktion)

$\Rightarrow$  "finite size scaling" wichtig und schwierig

## Randbedingungen

endliches System  $\rightarrow$  Randbedingungen wichtig

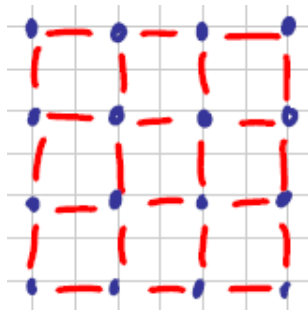
- periodische Randbedingungen  
 $\Rightarrow$  alle Gitterplätze equivalent



## Randbedingungen

endliches System  $\rightarrow$  Randbedingungen wichtig

- offene Randbedingungen  
 $\Rightarrow$  Innen  $\neq$  Oberfläche

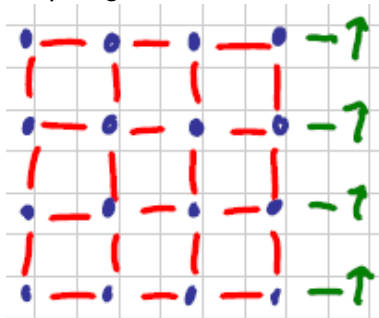


## Randbedingungen

endliches System  $\rightarrow$  Randbedingungen wichtig

- fixierte Randbedingungen:

Kooplung an externes Medium



## Monte-Carlo-Simulation Ising-Modell

### Single-Spin-Flip-Algorithmus

Wähle Anfangs Spin-Konfiguration  $x = \{\sigma_i\}$

- ① Wähle Gitterplatz  $i$ ,  $x'$  ist gleich  $x$  außer  $\sigma_i \rightarrow -\sigma_i$
- ② Berechne  $\Delta E = E_{\{\sigma_1 \dots -\sigma_i \dots \sigma_N\}} - E_{\{\sigma_i\}}$
- ③ Wenn Zufallszahl  $\text{rand} \in [0, 1) < \min(1, r = e^{-\frac{\Delta E}{k_B T}})$ ,  
flippe Spin ( $\sigma_i \rightarrow -\sigma_i$ ); sonst behalte  $\sigma_i$
- ④ nach warm-up(!):  
nach jedem "sweep" ( $\equiv N$  versuchte Spin-Flips):

$$n_{\text{sum}} += 1, m_{\text{sum}} += m_{\{\sigma_i\}}, E_{\text{sum}} += E_{\{\sigma_i\}} \quad (16)$$

- ⑤ genug sweeps?
  - ja: Berechne Mittelwerte und Fehler
  - nein: weiter bei 1.

**Beachte:**  $\Delta E$  hängt nur von den Nachbarn von  $i$  ab  
 $\Rightarrow$  einfach zu berechnen!



## Monte-Carlo-Simulation Ising-Modell

### Ising-Modell (Nächst-Nachbar-WW) - kritische Temperatur

dim	lattice	q	$\frac{k_B T_c}{J}$	$\frac{k_B T_c}{qJ}$
1	chain/ring	2	0	0
2	honeycomb	3	$\sim 1.52$	$\sim 0.5$
	square	4	2.269	0.57
	triangular	6	$\sim 3.64$	$\sim 0.61$
3	diamond	4	$\sim 2.704$	$\sim 0.68$
	cubic	6	$\sim 4.512$	$\sim 0.75$
	bcc	8	$\sim 6.35$	$\sim 0.79$
	fcc	12	$\sim 9.79$	$\sim 0.82$
4	hypercubic	8	$\sim 6.68$	$\sim 0.84$
$\infty$	"	$\infty$	$\infty$	1.0

vorwiegend aus *P. Meyer, PhD Thesis, Univ. of Derby (2000)*

- Phasenübergänge für alle Gitter in  $d > 1$
- $T_c \xrightarrow{q \rightarrow \infty} \frac{qJ}{k_B}$

## Monte-Carlo-Simulation Ising-Modell

### Kritische Exponenten des Ising-Modells in $d = 3$

$$\alpha = 0.110(1); \quad \beta = 0.3265(3); \quad \gamma = 1.2372(5);$$

$$\delta = 4.789(2); \quad \nu = 0.6301(4); \quad \eta = 0.0364(5); \quad \omega = 0.84(4)$$

Pelissetto, Vicari, Physics Reports 386, 549 (2002)

$$\left. \begin{array}{ll} \text{Magnetisierung} & m = m_0 \epsilon^\beta \\ \text{Suszeptibilität} & \chi = \chi_0 \epsilon^{-\gamma} \\ \text{Spezifische Wärme} & C = C_0 \epsilon^{-\alpha} \\ \text{Korrelationslänge} & \xi = \xi_0 \epsilon^{-\nu} \\ \text{Magnetisierung bei } T_c & m \propto B^{\frac{1}{\delta}} \end{array} \right\} \epsilon = \left| 1 - \frac{T}{T_c} \right|$$

Zum Vergleich:

**mean field**  $d \geq 4$ :  $\alpha = 0, \beta = 1/2, \gamma = 1, \nu = 1/2$

$d = 2$ :  $\alpha = 0, \nu = 1, \beta = \frac{1}{8}, \gamma = \frac{7}{4}, \delta = 15$