

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) Ising-Modell (17.5. 12:30 HS3)
- 2) Monte-Carlo-Integration (31.5. 12:30 HS3)
- 3) Monte-Carlo-Simulation Ising-Modell (7.6. 12:30 HS3)

Diplom-/Projektarbeiten 23.06. 10:30 Raum 138C

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):

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

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

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

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

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:

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

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: $\langle \sigma_i \rangle = \langle \sigma_j \rangle \equiv \langle \sigma \rangle = m$ 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:

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

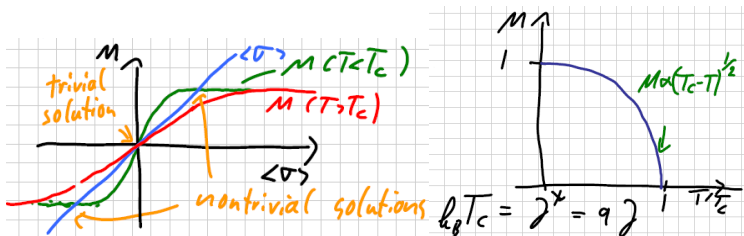
⇒ Magnetisierung:

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

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 $\sim 1/\sqrt{q} \xrightarrow{q \rightarrow \infty} 0$.

Kritische Exponenten

Kritische Exponenten bei einem Phasenübergang 2. Ordnung
universell! (hängen nur von d und Symmetrie und Dimension
des Ordnungsparameters ab)

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

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

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 $d = 1$

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

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

∞ 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)