Ising líkanið

Líkön og mælingar

8. janúar 2001

1 Fasabreytingar

Allt í kringum okkur fyrirfinnast efni í mismunandi fösum

- Vatnið í blóðinu í vökvafasa.
- Steypustyrktarjárn í föstum fasa.
- Súrefni í loftinu í gasfasa.

Við aðrar aðstæður getur vatn, súrefni og járn fundist í öðrum fösum.

Efni skiptir um fasa eftir því hvernig umhverfi það er í t.d. hitastig, þrýstingur, rúmmál og segulsvið.

Nokkur efni eru samtímis til í öllum fösum í umhverfi okkar eins og t.d. vatn (sbr. ís, vatn og gufa).

1.1 Bráðnun íss

Athugum ísmola við hitastig fyrir neðan frostmark. Við þessar aðstæður eru H_2O sameindum raðað þétt saman vegna aðdráttarkrafta milli þeirra:

$$\boxed{\text{van der Waals kraftar}}$$

Allar agnir hreyfast lítillega um jafnvægisstöðu og orkan sem er falin í titringnum er í réttu hlutfalli við hitastigi $[K]$:

$$E_{titr} \sim k_B T$$

þar sem k_B er fasti Boltzmanns.

- $\boxed{T < 0°C}$

  Sameindir alveg fastar saman (ís).

  $$E_{titr} < E_{\text{Bindiorka íss}}$$

- $\boxed{0°C < T < 100°C.}$

  Sameindir losna lítilega og geta hreyfst innbyrðis, flætt (vatn).

  $$E_{\text{Bindiorka íss}} < E_{titr} < E_{\text{Bindiorka vatns}}$$

- $\boxed{T > 100°C}$

  Sameinirnar skiljast alveg að og fara hver í sína áttina (gufa).

  $$E_{titr} > E_{\text{Bindiorka vatns}}$$

1.2 Samvinnufyrirbæri

Efnisheimurinn í kringum okkur er samsettur úr mörgum (missterkt) víxlverkandi ögnum t.d. frumeindum, sameindum, rafeindum og jónum.

Fasabreytingar, ásamt öðrum ferlum í náttúrunni, eru afleiðing hóphegðunar agnanna í kerfinu. Eiginleikar stakra agna týnast og efnið fer að sýna hegðun sem ekki er vænst af stökum ögnum.

Dæmi:

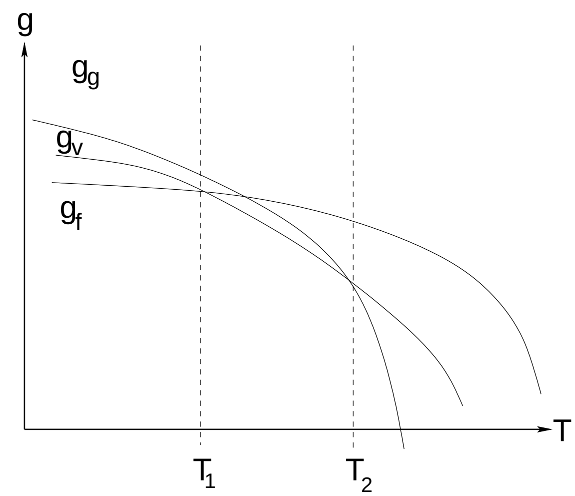
- Ofurleiðni í vissum málmum við lágt hitastig.
- Stórsæ uppröðun spuna í seglum.

Tískufrasi: **Emergent behaviour**.

1.3 Orkumunur fasa

Athugum eitthvað ákveðið efni sem til er í gas, vökva og föstum fasa. Hægt er að tileinka hverjum fasa ákveðna orku sem breytist með hitastigi:

$$g_{\mathbf{(g)as}}(T),\ g_{\mathbf{(v)\ddot{o}kvi}}(T),\ g_{\mathbf{(f)ast}}(T).$$



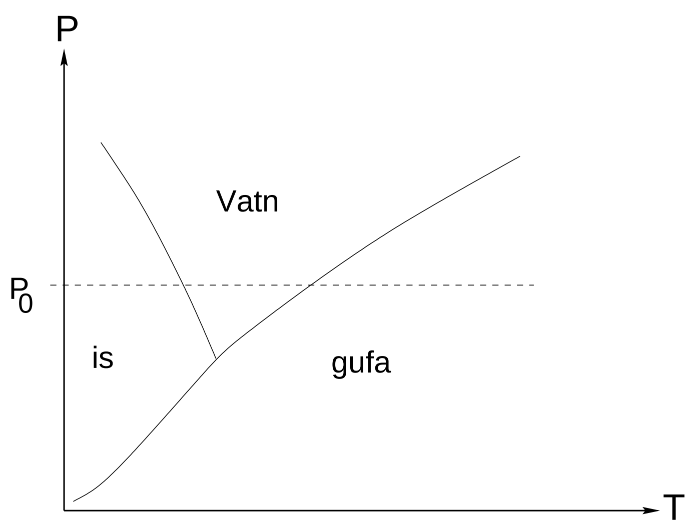
Náttúran vill lágmarka orku (í grófum dráttum) og því er hagstætt við T_1 og T_2 að efnið breyti um fasa.

- $\boxed{T < T_1}$
  $g_f < g_v, g_g$: Efnið í föstum fasa.
- $\boxed{T_1 < T < T_2}$
  $g_v < g_f, g_g$: Efnið í vökva fasa.
- $\boxed{T > T_2}$,
  $g_g < g_f, g_v$: Efnið í gas fasa.

1.4 Fasarit

Fleiri ástandsbreytur en hitastig geta stýrt fasabreytingum. Dæmi um þetta er þrýstingur (P) og rúmmál (V).

Þegar ástandsbreyturnar eru fleiri en ein er gott að nota fasarit sem sýna hvaða fasi er til við ákveðið T og P.



Af fasaritinu er hægt að sjá:

- Hvernig suðumark breytist með þrýstingi.
- Hvernig bræðslumark lækkar við aukinn þrýsting.

2 Monte Carlo aðferðir

- Hugtak sem notað er yfir margar reikniaðferðir sem allar hafa það sameiginlegt að nýta sér á einhvern hátt slembitölur (e. random numbers).
- Nafnið er tilkomið vegna augljósra tengsla við spilavíti Monte Carlo í Monaco.
- Í fyrstu mætti ætla að þessar aðferðir (sem nýta slembitölur) nýttust eingöngu í vandamálum sem væru slembin (random) í eðli sínu. Þetta er ekki raunin.

Dæmi um notkun:

- Mat á margvíðum heildum.
- Grunnástandsorka sameinda.
- Hreyfing og orkutap nifteinda í föstu efni.

2.1 Hvernig virkar MC?

Oft kemur fyrir að reikna þurfi meðaltal margra liða. Stundum er um sjálfstætt vandamál að ræða eða hægt er að umrita ýmis verkefni þ.a. lausnirnar felist í því að reikna meðaltöl.

Meðaltalið er summa yfir alla liði margfaldað með viðkomandi líkindadreifingu P:

$$\boxed{\overline{E} = \sum_i P(E_i) E_i}$$

Oft er um óheyrilegan fjölda liða að ræða sem ekki er hægt að reikna með hefðbundnum aðferðum.

Hér kemur MC til hjálpar. Megin inntak MC er að velja út þá liði sem eru líklegastir og reikna meðaltal af þeim.

Þetta er hugmyndafræðin að baki skoðanakannana þar sem lítið úrtak er kannað og út frá því er spáð fyrir um eiginleika alls safnsins.

2.2 MC og heildun

Töluleg heildun notar venjulega fallsgildi jafndreift á bilinu til að meta heildið

$$\boxed{I = \int_a^b dx\, f(x) \simeq \sum_{i=1}^{N} \alpha_i f(x_i)}$$

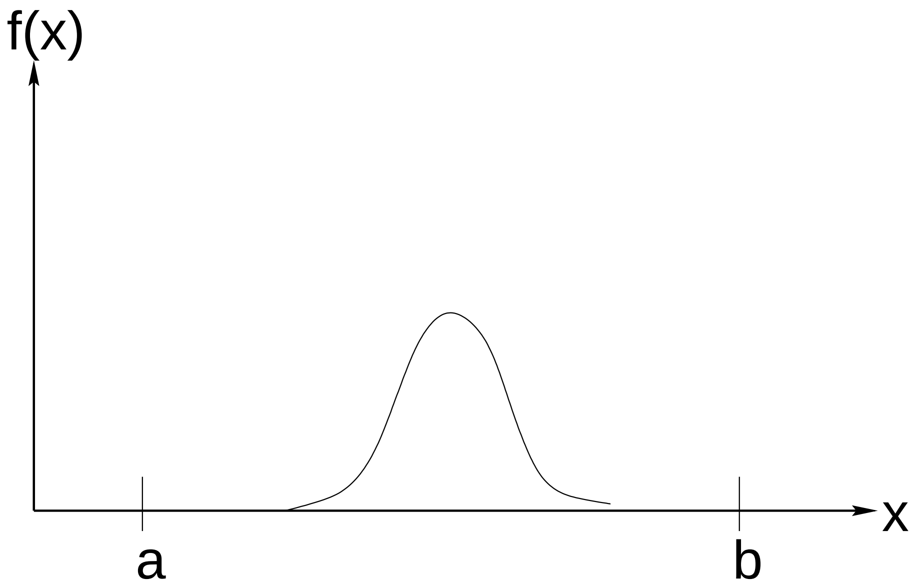
þar sem x_i er jafndreift á bilið (a, b).

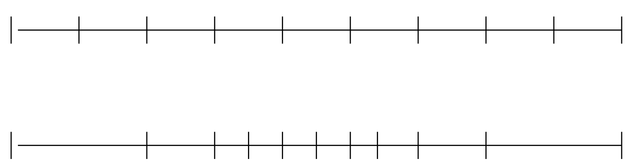
Hægt er að líta á summuna sem meðaltal og nota MC til að reikna heildið

$$\boxed{I = \int_a^b dx\, f(x) \simeq \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} f(x_i)}$$

þar sem x_i er valið af handahófi á bilinu (a, b).

MC gerir kleift að velja punkta þar sem $f(x)$ er stærst, þ.e. gefur mest framlag til heildis.





$\rightarrow$ Bætt mat á heildi fyrir sama fjölda reikniaðgerða!

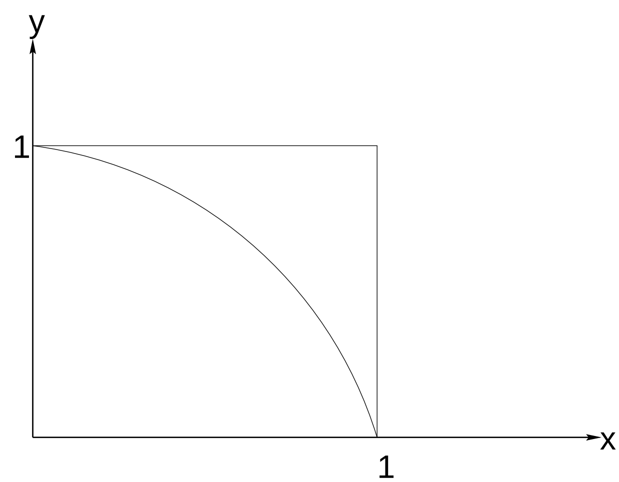
Hvernig er punktum dreift á bilið?

2.3 Annað MC dæmi

Talan π reiknuð með slembitölum. Hægt er að skilgreina π með heildinu

$$\pi = 4 \int_0^1 dx \int_0^1 dy \; \theta(1 - x^2 - y^2)$$

þar sem θ er Heaviside-fallið.



Búum til N mörg slembitölupör (x_i, y_i), $i = 1, \dots, N$. Þá er

$$\pi = 4 \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \theta(1 - x_i^2 - y_i^2).$$

Þessi summa er ekkert annað en fjöldi para sem lenda á skyggða svæðinu.

Auðvelt er að fara í hærri víddir, t.d. 3

$$\pi = \frac{3}{4}\, 8\, \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \theta(1 - x_i^2 - y_i^2 - z_i^2).$$

2.4 Mat á skekkju MC

Athugum heildið

$$I = \int_a^b dx f(x) \simeq \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} \frac{f(x(y_i))}{w(x(y_i))} = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} f_i.$$

Lögmál líkindafræðinnar gefa

$$\sigma_I^2 = \frac{\sigma_f}{N} = \frac{1}{N}\left(\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} f_i^2 - \left(\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} f_i\right)^2\right)$$

þar sem σ_f er breidd (skekkja) dreifingar f_i (óháð N fyrir stór N) og σ_I er skekkja í heildun.

Mikilvægt er að

$$\boxed{\sigma_I = \frac{\sigma_f}{\sqrt{N}}}$$

3 Safneðlisfræði

- Sú grein eðlisfræðinnar sem fæst við mjög margar víxlverkandi agnir og beitir hefðbundinni eðlisfræði í bland við líkindafræði.

- Lítum á kerfi sem getur verið í einu af mörgum ástöndum $\alpha = 1, 2, \ldots$ með orku E_α. Gerum ráð fyrir að kerfið sé í varmabaði við hitastig T.

  Þá gildir:

  Líkurnar á því að kerfið sé í ástandi α eru gefnar með

  $$P(E) = \frac{1}{Z} e^{-\beta E_\alpha}$$

  þar sem $\beta = 1/k_B T$ og $Z = \sum_\alpha e^{-\beta E_\alpha}$.

- Þessi líkindadreifing kallast kórdreifing (e. canonical distribution) og hún gildir um öll kerfi í jafnvægi við hitastig T.

- Út frá dreifingunni er hægt að reikna ýmsar stærðir

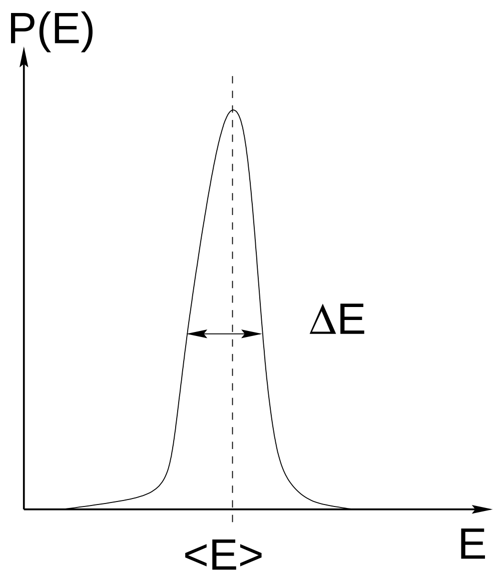
– Meðalorku, (táknuð með $\overline{E}$ eða $\langle E\rangle$)

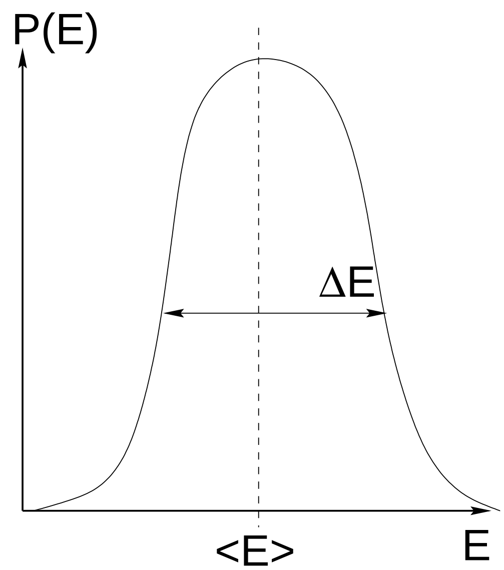
$$\overline{E^n(T)} = \sum_\alpha E_\alpha^n\, P(E_\alpha).$$

– Flökt í orku (breidd dreifingar)

$$\Delta E(T) = \left(\overline{E^2(T)} - \left(\overline{E(T)}\right)^2\right)^{1/2}.$$

– Margt fleira.



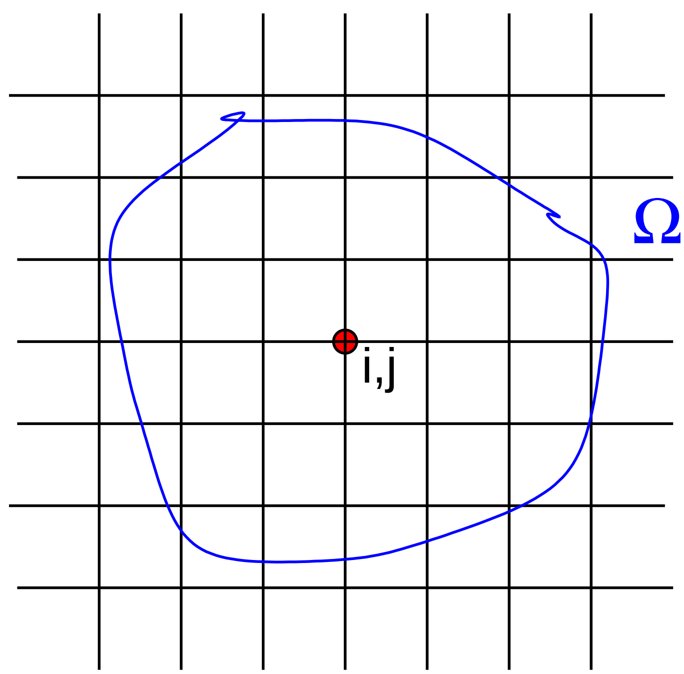


4 Tvívíða Ising líkanið

- Ising líkanið er líkan sem notið hefur mikillar velgengni í að lýsa hóphegðun og fasabreytingum í ýmsum ólíkum kerfum.

- Ising líkanið er safn sígildra spuna $s = \pm 1$ (engin skammtafræði) sem raðað er á reglulega grind. Heildarfjöldi spuna er

$$\boxed{N = N_x \cdot N_y}$$



- Spuni i, j víxlverkar við alla spuna innan svæðis Ω.

Í þessum reikningum eru aðeins víxlverkun næstu nágranna skoðuð.

Fasabreytingar eru afleiðing hópheg ðunar agna í kerfinu. Gerum þá kröfu að aðlægir spunar hagnist orkulega á því að snúa í sömu stefnu.

Orku hverrar uppröðunar α er lýst með jöfnunni

$$\boxed{E_\alpha = -\frac{1}{2}\sum_{\langle i,j\rangle} J S_i S_j - \sum_i H S_i.}$$

Þessi jafna sýnir að

1. Spunar hagnast á því að stefna í sömu átt og H $(S_i = 1)$.

2. Aðlægir spunar hagnast á því að stefna í sömu átt $(S_i S_j = 1)$.

Orkulágmörkun felst í því að finna þau E_α sem hafa lægstu orku.

4.1 Jaðarskilyrði

Hver eru áhrif spunanna sem liggja á jaðrinum á eiginleika kerfisins?

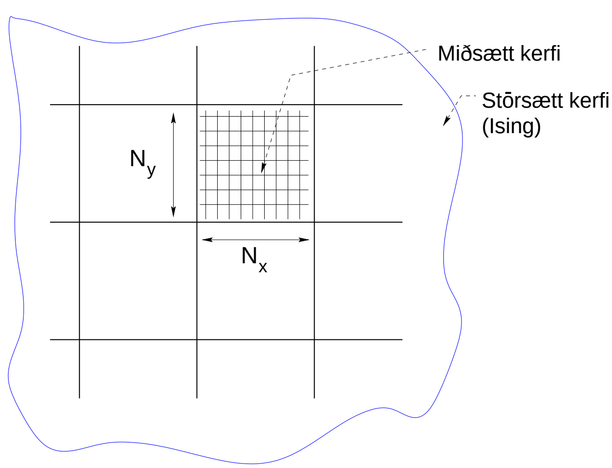
- Jaðarspuna skortir *nn*.
- Hlutfall jaðarspuna af heildarfjölda er

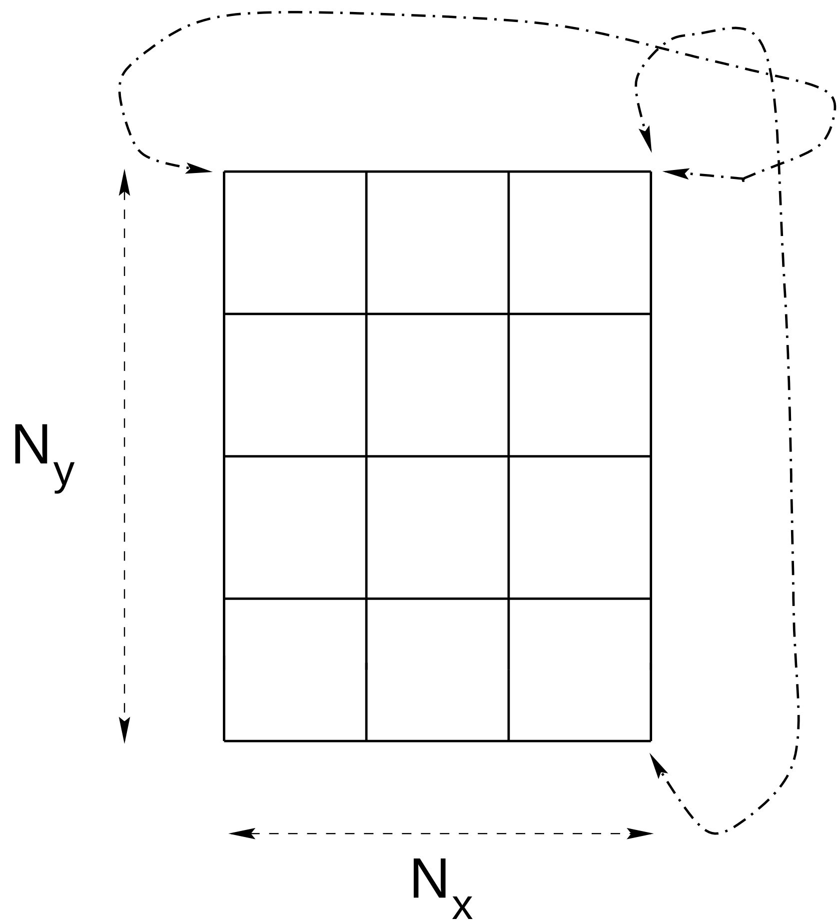
$$\frac{2\,(N_x + N_y) - 4}{N_x N_y} = 0.36 \quad (10 \times 10 \text{ grind}).$$

Framlag jaðarspuna hverfur þegar $N_x, N_y \rightarrow \infty$ en er hægt að herma óendanlegt kerfi án þess að stækka kerfið úr hófi?

$\boxed{\textbf{Lotubundin jaðarskilyrði}}$

Dæmi:





Útfærsla á lotubundnum jaðarskilyrðum.

Ágætt að nota modulus reikning þ.a. þegar $i, j > N_x, N_y$ færist vísirinn í fylkinu beint á upphafi, þ.e. $i = 1$ og $j = 1$.

4.2 Metropolis Algrímið

Til að reikna meðalorku $\overline{E}$ og meðalseglun $\overline{M}$ í Ising likaninu þarf að þekkja Z úr kórdreifingu:

$$\boxed{P(E_\alpha) = \frac{1}{Z} e^{-\beta E_\alpha}.}$$

Z krefst summu yfir öll ástönd í kerfinu. Hver spuni getur snúið upp eða niður.

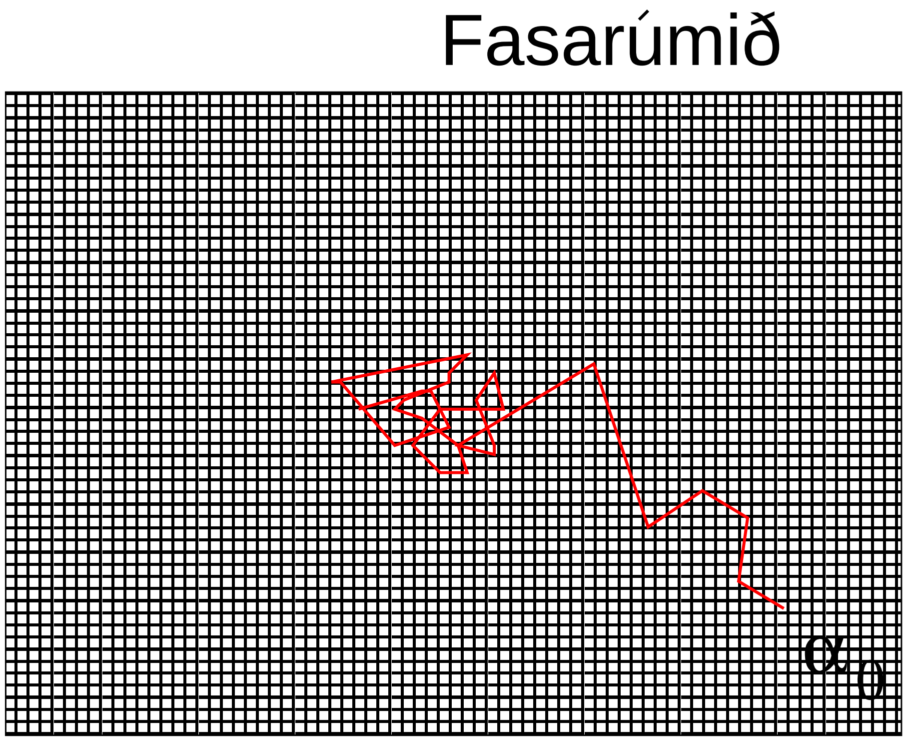
Fjöldi ástanda er

$$2^N = 10^{N \log(2)} \simeq 10^{72} \quad (16 \times 16 \text{ grind}).$$

Hvernig er hægt að finna þau ástönd sem hafa mesta vægið í líkindadreifingunni?

Metropolis algrímið býr til nýtt ástand α' út frá α, fáum röð ástanda sem mynda Markov-keðju.

„Ferðumst“ um fasarúmið og veljum þau ástönd sem eru líklegust, þ.e. hafa minnsta orku og hæstar líkur. Varmaflöktið er hermt með slembitölum.



Innan dökka svæðisins eru ástönd með hæstar líkur.

Vegna þess að nýja ástandið er aðeins háð því sem kom á undan þá helst slembigengillinn („random walkerinn“) innan „mið“ svæðisins.

→ Veljum aðeins þau ástönd sem hafa mestar líkur.

$$\boxed{\overline{E} = \sum_{\alpha} P(E_{\alpha}) E_{\alpha}.}$$

4.3 Útfærsla á MP

1. Frumstillum grindina í ástand α_1.

$$\boxed{\text{Reikna } E_{\alpha_1} \text{ og } M_{\alpha_1}.}$$

2. Búum til prufuástand α_t með því að snúa einum spuna $S_{ij} \rightarrow -S_{ij}$.

$$\boxed{\text{Reiknum } r = \frac{P(E_{\alpha_t})}{P(E_\alpha)}.}$$

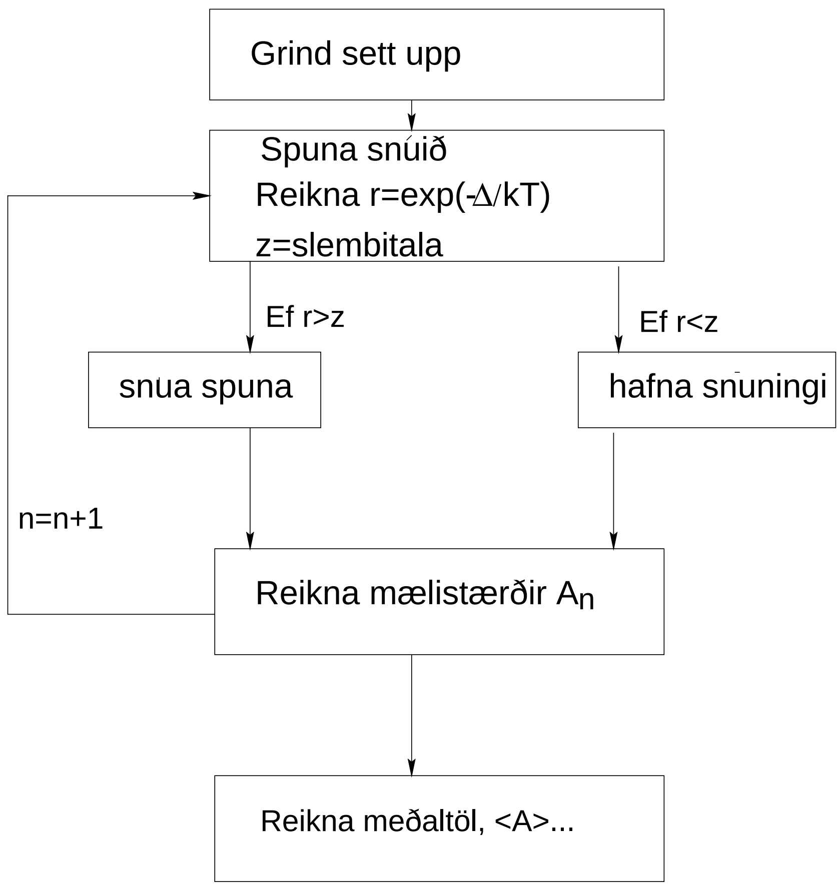
3. Notum α_t sem nýtt ástand ef r stenst ákveðnar kröfur, annars $\alpha' = \alpha$.

Athugum stærðina r

$$r = \frac{P(E_{\alpha_t})}{P(E_\alpha)} = e^{-\beta(E_{\alpha_t} - E_\alpha)} = e^{2\beta S_{ij}(Jf_{ij}+H)}$$

þar sem $f_{ij} = S_A + S_B + S_C + S_D$.
(S_A ... eru næstu grannar)

4.4 Flæðirit fyrir MP



Endurtökum þetta ferli N_{MC} sinnum og fáum safn orku- og seglunargilda:

$$E_{\alpha_1}, E_{\alpha_2}, \ldots, E_{\alpha_{N_{MC}}}$$
$$M_{\alpha_1}, M_{\alpha_2}, \ldots, M_{\alpha_{N_{MC}}}$$

sem notuð eru til að finna $\overline{E}$ og $\overline{M}$.

4.5 Mat á meðalgildum í MP

Þegar MP algrímið er notað til að finna ástönd þá breytist skilgreiningin á meðaltalinu:

$$\overline{E} = \sum_{\alpha} P(E_\alpha) E_\alpha \quad \to \quad \overline{E_m} = \sum_{\gamma} \frac{1}{N_m} E_\gamma$$
$$\overline{M} = \sum_{\alpha} P(E_\alpha) M_\alpha \quad \to \quad \overline{E_m} = \sum_{\gamma} \frac{1}{N_m} M_\gamma$$

þar sem summurnar vinstra megin við örvarnar eru yfir öll ástönd α á meðan summurnar hægra megin við þær eru yfir öll ástönd γ sem valin eru með MP.

5 Ising og Metropolis

Nánari lýsing á útfærslu:

1. **Spunar og grind:**

   Fjöldi spuna er $N_x N_y$. Stök í fylkinu (spunar á grind) eru táknaðir með

   $$S_{ij}: \quad i = 1, \dots, N_x \quad j = 1, \dots, N_y$$

   Stundum notaður almennur ritháttur

   $$S_i: \quad i = 1, \dots, N_x N_y.$$

   Hver spuni getur verið í tveimur ástöndum þ.e. $\uparrow$ eða $\downarrow$. Fjöldi ástanda sem **kerfið** getur verið í er því

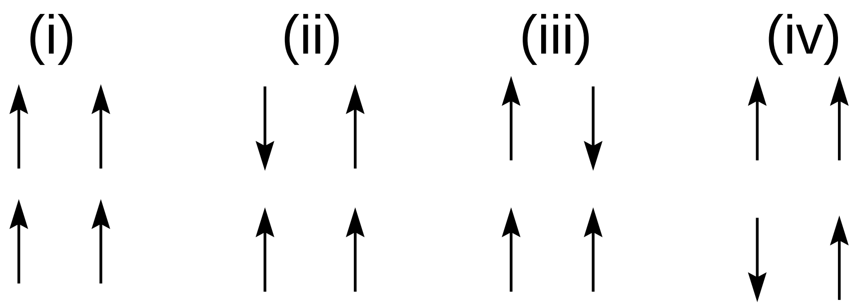
   $$\underbrace{2 \cdot 2 \cdot 2 \cdot \ldots \cdot 2}_{N_x N_y} = 2^{N_x N_y}.$$

2. **Spunauppraðanir og ástönd:**

   Ástönd eða spunauppraðanir kerfisins ákvarðast af stöðu stakra spuna.

Dæmi:

2×2 grind þ.e. $N_x = N_y = 2$. Fjöldi ástanda er $2^{2 \cdot 2} = 16$.



Orka og seglun ástandanna fyrir $B = 0$ er

$$E_{(i)} = -8J, \qquad E_{(ii)} = E_{(iii)} = E_{(iv)} = -2J,$$
$$M_{(i)} = 4, \qquad M_{(ii)} = M_{(iii)} = M_{(iv)} = 2.$$

Mikilvægt er að rugla ekki saman eftirfarandi stærðum

- N_x : Fjöldi spuna í x stefnu.
- N_y : Fjöldi spuna í y stefnu.
- N_{MP} : Fjöldi ástanda sem eru fundin með Metropolis algríminu.

3. **Metropolis**

Ef prufu-ástandið α_t er samþykkt er spunagrind breytt:

$$S_{ij} \to -S_{ij}.$$

Þetta þýðir að nýtt ástand, nýja spunauppröðun með orku $E_{\alpha_{l+1}}$ og seglun $M_{\alpha_{l+1}}$:

$$\begin{aligned} E_{\alpha_{l+1}} &= E_{\alpha_l} - 2\, S_{ij}\,(Jf_{ij} + H), \\ M_{\alpha_{l+1}} &= M_{\alpha_l} + 2S_{ij}. \end{aligned}$$

Búum til nýju ástöndin með því að snúa spunum kerfisbundið eða slembið og fáum runu af ástöndum:

$$\begin{aligned} &E_{\alpha_1}, E_{\alpha_2}, \ldots , E_{\alpha_{N_{MP}}} \\ &M_{\alpha_1}, M_{\alpha_2}, \ldots , M_{\alpha_{N_{MP}}}. \end{aligned}$$

6 Skölun reikninga

Viljum losna við leiðinlegar einingar með því að nota víddarlausar stærðir.

Hvaða stærðir í vandamálinu hafa vídd (lengd, massi, orka, …).

$$\begin{aligned}[J] &\equiv \text{orka},\\ [k_BT] &\equiv \text{orka},\\ [H] &\equiv \text{orka}.\end{aligned}$$

Mælum varmaflökt og ytra svið í einingunni J:

$$E_\alpha \to \frac{E_\alpha}{J} = -\frac{1}{2}\sum_{<i,j>} S_iS_j - \sum_i \left(\frac{H}{J}\right) S_i$$

$$r = e^{2(\beta J)(f_{ij}+(\frac{H}{J}))S_{ij}}.$$

Notum því skalaðar stærðir

$$\beta J = \left(\frac{J}{k_BT}\right) \to \beta \quad : \quad \text{víddarlaus stærð}$$

$$\frac{H}{J} \to B \quad : \quad \text{víddarlaus stærð}$$

Notum því hitastig á skalanum $k_B T = 0, \ldots$ (í einingum J).

Þurfum ekki að hafa áhyggjur af einingum eða víddum. Fáum eðlisfræðina óháða vídd án þess að missa eiginleika kerfisins:

$$\boxed{k_B T_c \text{ mældur á skalanum } J.}$$

7 Normun stærða

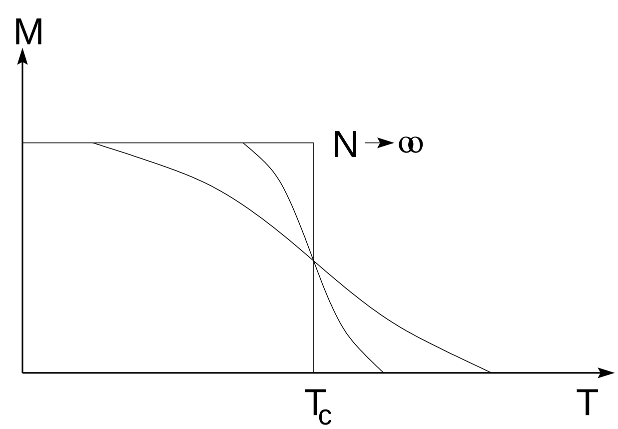
Til að geta borið $\overline{E}$ og $\overline{M}$ saman fyrir mismunandi stærðir á grindum þarf að norma allar stærðir með $N_x N_y$.

Reiknum per spuna:

$$E_\alpha \to \frac{E_\alpha}{N_x N_y} \qquad \text{orka per spuna,}$$

$$M_\alpha \to \frac{M_\alpha}{N_x N_y} \qquad \text{seglun per spuna.}$$

Dæmi:
Hegðun seglunar sem fall af grindarstærð
$N_x = N_y = N$.



8 Stærðir sem á að skoða

Viljum reikna meðalgildi orkunnar og seglunarinnar. Höfum einnig áhuga á flökti í kringum meðalgildin:

Flöktið er skilgreint með

$$\boxed{(\Delta E)^2 = \overline{E^2} - \overline{E}^2}$$

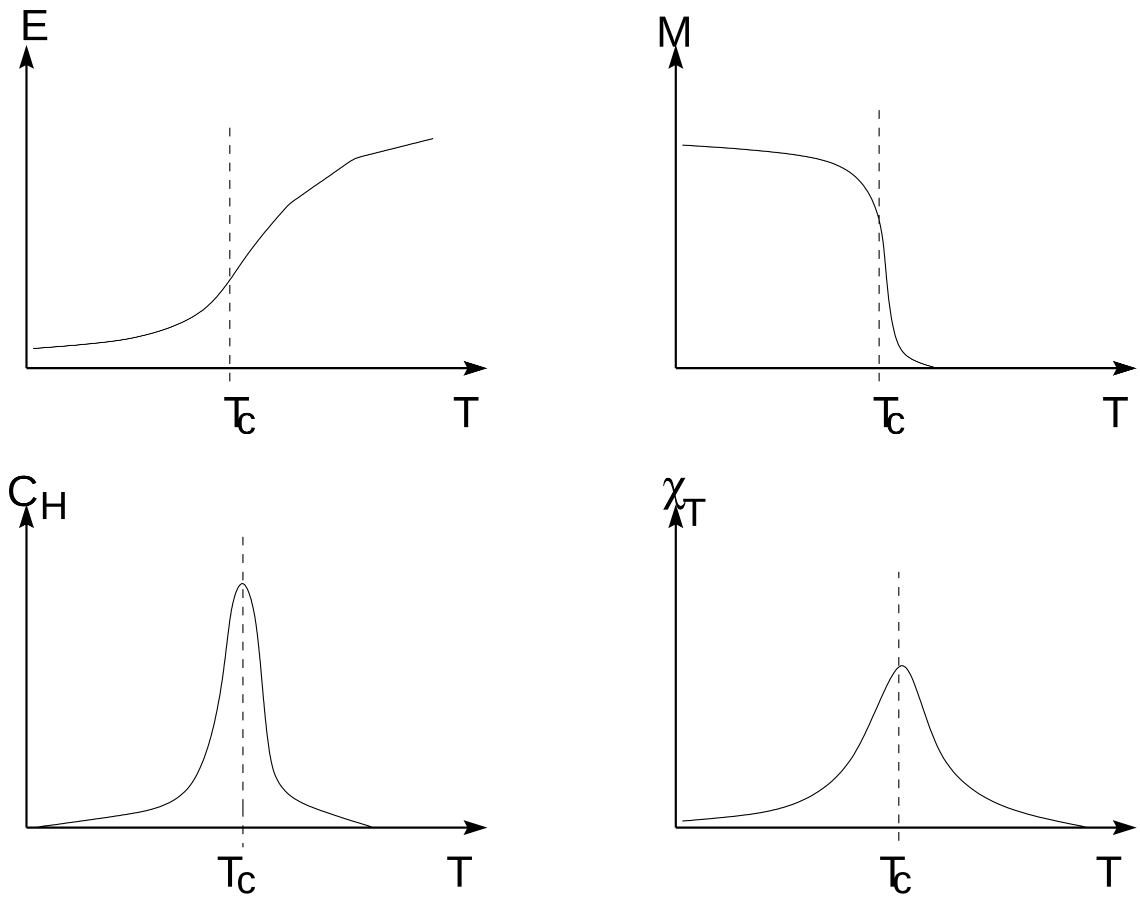
$$\boxed{(\Delta M)^2 = \overline{M^2} - \overline{M}^2}$$

og það er hægt að tengja við varmarýmd C_B og segulviðtak χ_T:

$$\boxed{C_B = \frac{(\Delta E)^2}{k_B T^2}}$$

$$\boxed{\chi_T = \frac{(\Delta M)^2}{k_B T}}$$

Merkileg hópheg ðun á sér stað við markhitastigið $k_B T \simeq 2.27J$ þar sem C_H og χ_T taka hámark. Í óendanlegum kerfum „myndast“ sérstöðupunktar:


E
Tc
T
M
Tc
T
CH
Tc
T
χT
Tc
T

9 Framsetning gagna

- Lýsing á því hvað þið reiknuðuð, þ.e. gildin á N_x, N_y, N_{MP}, hitastigsgildin o.s.frv.

- Setja niðurstöður fram á samfelldan og rökréttan hátt (án þess að semja margra blaðsíðna kjaftavaðal).

- Láta forritið prenta út eins mikið af upplýsingum og hægt er og reynið að setja þau fram á skynsaman hátt.

  - Bera saman mism. fjölda ástanda.
  - Bera saman mism. fjölda kerfa.
  - ...