

Ising líkanið

í tveimur víddum fyrir þrjá spuna

Ása Skúladóttir og María Marteinsdóttir

4. desember 2006

Kennarar: Sigurður Ingi Erlingsson
og Viðar Guðmundsson

Efnisyfirlit

1	Inngangur	2
2	Ising líkanið	2
3	Monte Carlo aðferðin	5
4	Uppbygging forritunar	7
5	Niðurstöður	10
5.1	Tvívítt Ising líkan	10
5.2	Eðlisvarmi C	13
5.3	Segulsvið	15
5.4	β stuðull	17
5.5	Spunamyndir	18
5.6	Fylgni	22
5.7	Öðruvísi spunafærslur	25
6	Lokaorð	30

1 Inngangur

Ising líkanið er stærðfræðilegt líkan í safneðlisfræði sem lýsir fasabreytingum. Hefðbundið líkan er í tveimur víddum og miðast við tvo spuna $S = -1, 1$ en hér verður það útvíkkað fyrir þrjá spuna, $S = -1, 0, 1$, með tilheyrandi spunaskorðum. Þessi tvö líkón verða borin saman með ýmsum tilbrigðum. Að lokum verða áhrif ólíkra spunafærsla athuguð.

Verkefnið var gert af Ásu Skúladóttur og Maríu Marteinsdóttur í áfanganum Tölvueðlisfræði við Háskóla Íslands, haustið 2006.

2 Ising líkanið

Í tveimur víddum er hefðbundna Ising líkanið byggt upp af tvívíðri ferhyrningslaga grind af spunum. Gert er ráð fyrir að spunarnir geti aðeins tekið tvö gildi, $S = \pm 1$ miðað við z -stefnu. Þar sem áhrif víxlverkunnar milli spuna minnka hratt með fjarlægð víxlverka spunarnir einugis við sína næstu nágbranna, sjá mynd 1. Tveir samsíða spunar svara til orku $-I$ meðan tveir andsamsíða spunar til orku I . Orkumunurinn á milli samsíða spuna annars vegar og andsamsíða hins vegar er því

$$\epsilon_{\uparrow\uparrow} - \epsilon_{\uparrow\downarrow} = -2I \quad (1)$$

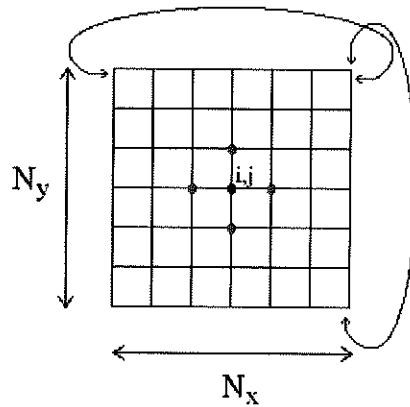
Ef $I > 0$ er orkulega hagstæðra að spunarnir séu samsíða, en andsamsíða ef $I < 0$. Við útvíkkun á Ising líkaninu fyrir þrjá spuna, $S = -1, 0, 1$, fæst að víxlverkunarorka tveggja spuna er

$$\epsilon = -I S_i \cdot S_j \quad (2)$$

Hamiltonvirkja kerfisins er lýst með [1]

$$H = -\frac{1}{2} I \sum_{i,j} S_i S_j - B \sum_i S_i \quad (3)$$

Þar sem að B er ytra segulsvið. Hér nær fyrri summan yfir næstu nágbranna og þátturinn $\frac{1}{2}$ er hér vegna tvítalningar. Seinni summan nær yfir alla spuna kerfisins.



Mynd 1: Spunagrind með lotubundnum jaðarskiðum. Fjórir næstu nágrannar fyrir gefinn spuna (i, j) eru sýndir.

Fyrir $I > 0$ er seglun kerfisins M_+ skilgreind sem meðalspuni kerfisins

$$M_+ = \frac{\sum_{i,j} S_{ij}}{N_x N_y} \quad (4)$$

þar sem stærð kerfisins er $N_x \times N_y$. Hins vegar þegar $I < 0$ leitast spunarnir við að radast andsamsíða og búast má við að seglunin stefni á núll. Þá er seglunin M_- skilgreind sem

$$M_- = \frac{\sum_{i,j} (-1)^{i+j} S_{ij}}{N_x N_y} \quad (5)$$

Aðrar áhugaverðar mælistærðir kerfisins eru eðlisvarminn C og segulviðtakið χ . Eðlisvarminn er gefinn með

$$C = \frac{(\Delta E)^2}{kT^2} \quad (6)$$

en hér er $(\Delta E)^2$ staðalfrávik orkunnar og er fengið með

$$(\Delta E)^2 = \langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2 \quad (7)$$

Segulviðtakið fæst með

$$X = \frac{(\Delta M)^2}{kT} \quad (8)$$

þar sem $(\Delta M)^2$ er staðalfrávik seglunarinnar. Eðlisvarminn og segulviðtakið taka hágildi við kritíska hitastigið T_c .

máttleiki hitastig

Við hitastig $T = 0$ eru allir spunarnir annars vegar samsíða en þá er $I > 0$ og hins vegar andsamsíða ef $I < 0$. Aftur á móti hefur víxlverkun milli spuna lítil áhrif við hátt hitastig, $kT \gg I$, og röðun spunanna er þá óregluleg. Tengsl milli uppröðunnar tveggja spuna við ákveðið hitastig T má fá með fylgnifalli

$$f(l) = \langle S_0 S_l \rangle \quad (9)$$

þar sem S_l er spuni í fjarlægð l frá viðmiðunarspunanum S_0 en l er mælt í grindarfasta kerfisins. Meðaltal er tekið yfir öll smásæ (e. microscopic) ástönd og yfir öll spunapör í fjarlægð l hvort frá öðru. ✓

Ekki er ljóst út frá Hamiltonvirkjanum hvort að breytingin frá óreglulegri uppröðun í reglulega með lækkandi hitastigi er samfelld eða gerist með fasabreytingu við ákveðið hitastig T_c . Til þess að ákvarða hvernig breytingin fer fram þarf að reikna kórsummu kerfisins

$$Z = \sum_i e^{-\beta H_i} \quad (10)$$

þar sem $\beta = 1/kT$ og summan nær yfir öll möguleg spunaástönd kerfisins. Út frá kórsummunni má reikna meðalorkuna \bar{E} og meðalseglunina \bar{M} . Að finna kórsummuna er þó hægara sagt en gert þar sem að fjöldi ástanda verður

fjótt mjög hár, sem dæmi má nefna verður fjöldi ástanda í grind af stærð 10×10

$$\Omega = 2^{100}$$

svo það tekur ofurtölvur um 3% af aldri alheimsins að reikna slíka kórsummu [1]. Til þess að komast fram hjá þessu vandamáli er Monte Carlo reikniaðferð notuð.

3 Monte Carlo aðferðin

Monte Carlo aðferðin fyrir Ising líkanið byggir á því að velja safn af ástöndum úr fasarúminu. Hvert ástand er valið með ákveðnum líkum þannig að safnið gefi góða mynd af líkindadreifingu allra ástandanna. Markmiðið er að líkja eftir hvernig spunakerfi vixlverkar við umhverfi sitt sem er við fast hitastig T . Kerfið fær orku eða missir orku til umhverfisins þar til varmajafnvægi næst. Við það snúast spunar sem leiðir til að kerfið fer í ný smásæ ástönd sem hvert um sig svarar til ákveðinnar uppröðunar á spunum. Gildi á mælistærðum eru þá háð líkunum á að kerfið sé í ólíkum smásæjum ástöndum [2].

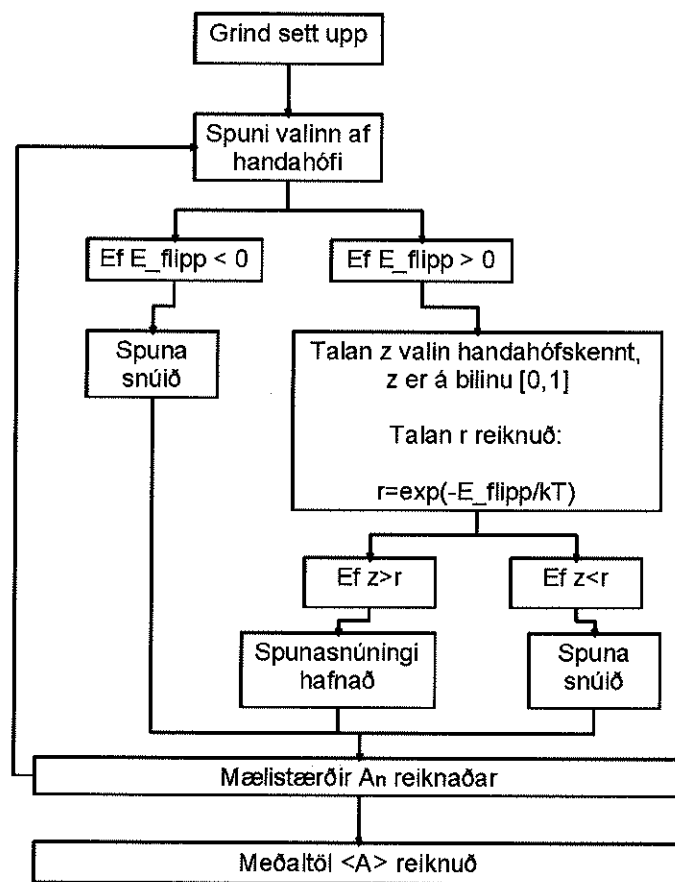
Á mynd 2 má sjá uppbyggingu reikniaðferðarinnar. Í upphafi er kerfið í ákveðnu smásæju ástandi. Spuni er valinn af handahófi og orkan sem þarf til að snúa spunanum, $E_{\text{flipp}} = E_{\text{eftir}} - E_{\text{fyrir}}$ er reiknuð. Ef $E_{\text{flipp}} < 0$ er spunanum snúið því kerfið leitast til að vera í orkulægra ástandi. Aftur á móti ef spunasnúningurinn kostar orku, það er $E_{\text{flipp}} > 0$, er spunanum snúið með ákveðnum líkum. Slembitala z er valin á bilinu $[0,1]$ og borin saman við Boltzmann þáttinn

$$r = \exp(-\beta E_{\text{flipp}}) \quad (11)$$

en líkur á að kerfi sé í tilteknu ástandi α eru í réttu hlutfalli við Boltzmann þáttinn, $P_\alpha \sim \exp(-\beta E_\alpha)$. Ef $z < r$ er spunanum snúið annars ekki. Því næst eru mælistærðir á borð við orku og seglun reiknaðar. Þetta ferli er síendurtekið og að lokum eru meðaltöl mælistærðanna fundin.

Við lágt hitastig er $r \ll 1$ og því eru litlar líkur á að spuna sé snúið í orkuhærra ástand. Kerfið leitar í orkulægsta ástandið þar sem að allir spunarnir eru raðaðir samsíða eða andsamsíða. Við hátt hitastig er $r \simeq 1$ og álíka líklegt að snúa spuna í hvaða stefnu sem er.

Ljóst er að Monte Carlo aðferðin gefur góða mynd af kerfinu við mjög hátt eða mjög lágt hitastig. Til að skoða hegðun kerfis fyrir hitastig þar á



Mynd 2: Flæðirit af Monte Carlo aðferðinni.

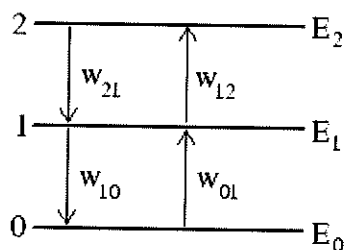
milli má líta á kerfi með þremur mismunandi orkuástandum E_0 , E_1 og E_2 , sjá mynd 3. Hér gildir að $E_0 < E_1 < E_2$. Tíðni (e. rate) færsla frá ástandi i í ástand j er táknuð með w_{ij} . Líkur á að fara úr orkuhærra ástandi í orkulægra ástand eru $w_{ij} = 1$ en ef $E_i - E_j > 0$ er tíðnin $w_{ij} = \exp(-\beta(E_i - E_j))$. Þegar kerfi er í varmajafnvægi eru líkur á að kerfi sé í ákveðnu ástandi óháðar tíma svo jafn margar færslur eru í hverja átt. Þá gildir að

$$\begin{aligned} dP_2 &= -w_{21}P_2 + w_{12}P_1 = 0 \\ dP_1 &= -w_{12}P_1 - w_{10}P_1 + w_{21}P_2 + w_{01}P_0 = 0 \\ dP_0 &= -w_{01}P_0 + w_{10}P_1 = 0 \end{aligned}$$

og því fæst að

$$\frac{P_i}{P_j} = \exp(-\beta(E_i - E_j)) \quad i, j = 0, 1, 2$$

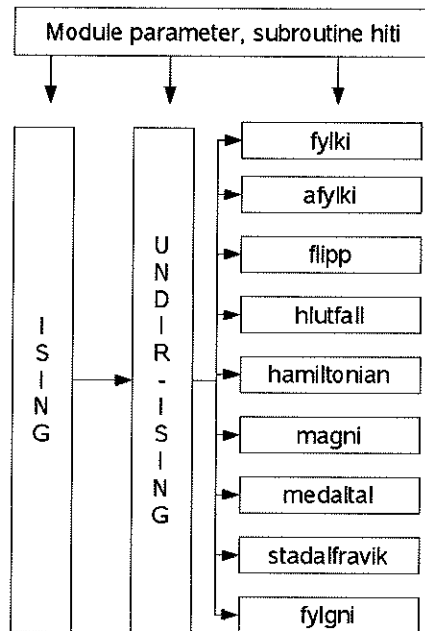
sem er eins og búist er við fyrir kerfi í varmajafnvægi.



Mynd 3: Kerfi með þremur orkuástandum, $E = E_0, E_1, E_2$. ✓

4 Uppbygging forritunar

Forritið sem notað var til reikninga var skrifað í Fortran og má finna forritskóðana í Viðauka. Á mynd 4 má sjá flæðirit af uppbyggingu forritsins.



Mynd 4: Flæðirit af uppbyggingu forrits.

Parameter

Módúllinn `parameter` hefur að geyma upplýsingar um stærð kerfisins, N_x og N_y , ásamt segulsviði B í einingum $[I]$. Í módúlnum er einnig að finna stýristærðir, svo sem stærðina `lengd` sem stýrir hversu mörg skref eru tekin í Monte Carlo aðferðinni. Að lokum ber að nefna undirforritið `hiti` en þar er hitastigið látið hlaupa frá $T = 0$ í $T = T_max$ í T_lengd skrefum.

Ising

Aðalforritið heitir `ising`. Þar er kallað á undirforritið `undir_ising` þar sem að Monte Carlo aðferðin fer fram. Þetta er gert fyrir mismunandi hitastig T og niðurstöður skrifaðar í `.txt` skrár. Til þess að koma í veg fyrir flökt, einkum í kringum kritíska hitastigið T_c , er forritið látið fara oft í gegnum Monte Carlo aðferðina fyrir hvert hitastig og meðaltal tekið. Stærðin `rand` skilgreinir þennan fjölda.

Undir_Ising

Í undirforritinu `undir_ising` er Monte Carlo aðferðin framkvæmd og til þess er kallað á fjölmörg undirforrit. `undir_ising` skilar svo helstu mælistærðum til aðalforritsins `ising`.

Fylki og Afylki

Til þess að búa til fylki S af stærð $N_x \times N_y$ með tilviljunarkenndri uppröðun spuna er undirforritið fylki notað. Til þess að allir spunar í kerfinu hafi fjóra næstu nágranna eru innleidd lotubundin jaðarskilyrði þannig að efsta lína fylkisins víxlverkar við neðstu línu og aftasti dálkur við þann fremsta, sjá mynd 1. Kerfið myndar þá torus eða kleinuhring. Þetta er gert í undirforritinu afylki. Þar er búið til fylkið A af stærð $(N_x + 2) \times (N_y + 2)$ með fylkið S fyrir miðju og í efstu línu fylkisins A má finna neðstu línu S og svo framvegis.

Flipp

Spunasætið (m, n) í fylkinu S er valið handahófskennt í undirforritinu flipp og er spuna í því sæti snúið. Leyfilegar spunafærslur eru

$$\begin{aligned} S = 1 &\rightarrow S = 0 \\ S = 0 &\rightarrow S = \pm 1 \\ S = -1 &\rightarrow S = 0 \end{aligned} \tag{12}$$

Einnig er mögulegt að leyfa spunasnúning $S = 1 \rightarrow S = -1$ ásamt spunasnúningnum $S = -1 \rightarrow S = 1$. Hér þarf að hafa í huga að í flipp er spunasnúningurinn valinn en undir_ising ákveður hvort snúningurinn sé leyfður.

Hlutfall

Í undirforritinu hlutfall er stærðin $r = \exp(-\beta E_{\text{flipp}})$ reiknuð. Hún er síðan borin saman við slembitöluna z í undir_ising og spunasnúningur leyfður eða honum hafnað, samkvæmt Monte Carlo aðferðinni.

Hamiltonian og Magni

Orka tiltekins ástands E er reiknuð í undirforritinu hamiltonian út frá jöfnu (3). Undirforritið magni sér svo um að reikna seglunina M , ef $I > 0$ er jafna (4) notuð en jafna (5) ef $I < 0$.

Meðaltal og Staðalfrávik

Meðaltal staka í vigri má finna með undirforritinu meðaltal en undirforritið stadalfravik reiknar út staðalfrávik staka í vigri út frá formúlu (7).

Fylgni

Í undirforritinu fylgni er fylgni spunanna reiknuð út frá formúlu (9). Fyrir spunagrind af stærð $N \times N$ með lotubundin jaðarskilyrði er mesta fjarlægð milli tveggja spuna í sömu röð $N/2$.

5 Niðurstöður

Góð venja er í forritun að vinna með einingarlausar stærðir. Því voru stærðir skalaðar til á eftirfarandi hátt

$$\frac{E}{I} \rightarrow E$$

$$\frac{B}{I} \rightarrow B$$

$$\frac{kT}{I} \rightarrow T$$

$$kC \rightarrow C$$

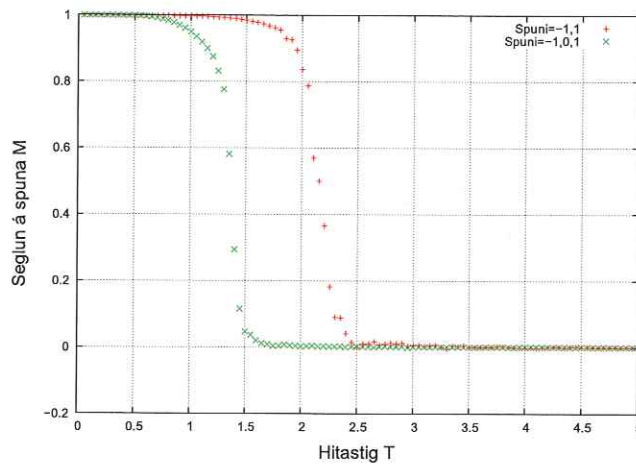
Í niðurstöðunum hér á eftir er einungis unnið með skalaðar stærðir en ekki eðlisfræðilegar einingar.

5.1 Tvívítt Ising líkan

Hér var ákveðið að keyra forritið fyrir tvo spuna, það er $S = \pm 1$. Byrjað var með kerfi þar sem allir spunar snúa upp, $S = 1$. Gerðar voru myndir af seglun M , orku E , eðlisvarma C og segulviðtaki χ sem fall af hitastigi T fyrir kerfi af stærð 10×10 án ytra segulsviðs $B = 0$ og víxlverkunarorku $I > 0$. Voru þær bornar saman við sambærilegar myndir í [2] og reyndust vera í góðu samræmi við niðurstöður þar. Þá var kerfið útvíkkað fyrir þrjá spuna $S = -1, 0, 1$ með snúningsskordum, sjá jöfnu (12). Niðurstöður má finna á myndum 5 til 8.

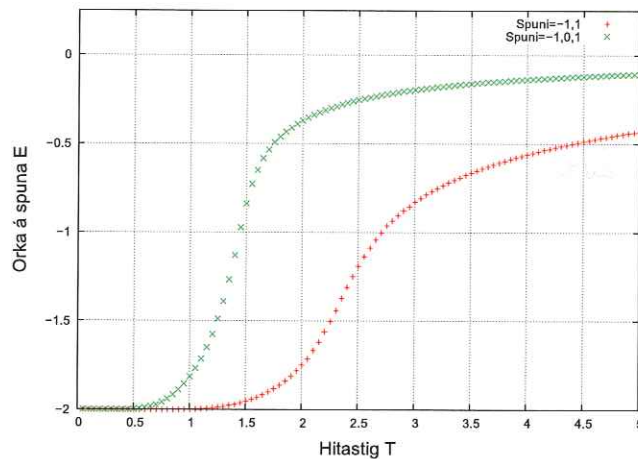
Mynd 5 sýnir hvernig seglunin á spuna M breytist með hitastigi T . Fyrir mjög lágt hitastig eru litlar líkur á spunasnúningi og meðalspuninn helst í $M = 1$ enda var kerfið í upphafi skilgreint með alla spuna upp, $S = 1$. Seglunin minnkar svo hægt þar til hún fellur hratt að $M = 0$ við ákveðið hitastig T_c . Þetta hitastig er nefnt krítíska hitastigið. Fyrir ofan það helst seglunin við $M = 0$ en það gefur til kynna að spunarnir séu raðaðir á tilviljunarkenndan hátt. Fyrir kerfi með tvo spuna er krítíska hitastigið $T_c \approx 2,5$ en $T_c \approx 1,4$ fyrir þriggja spuna kerfi.

Breytingu á orku á spuna E með hitastigi má sjá á mynd 6. Eins og hjá segluninni eru miklar breytingar við krítíska hitastigið. Við mjög lágt hitastig helst kerfið við orku á spuna $E = -2$. Ef kerfið hefði byrjað með alla spuna niður, $S = -1$, fengist á sama hátt að orkan væri stöðug við $E = 2$. Við hækkandi hitastig leitar kerfið í meðalorku á spuna $E = 0$ vegna þess að það er nánast jafn líklegt að spuni sé í ástandi $S = +1$ og $S = -1$. Kerfið nær þó ekki núllgildinu $E = 0$ strax fyrir ofan krítíska hitastig þrátt að meðalseglun sé núll. Þetta gefur til kynna að næstu nágrannar tiltekings spunar séu ekki tilviljunarkennt raðaðir heldur háðir spunastefnu hans.



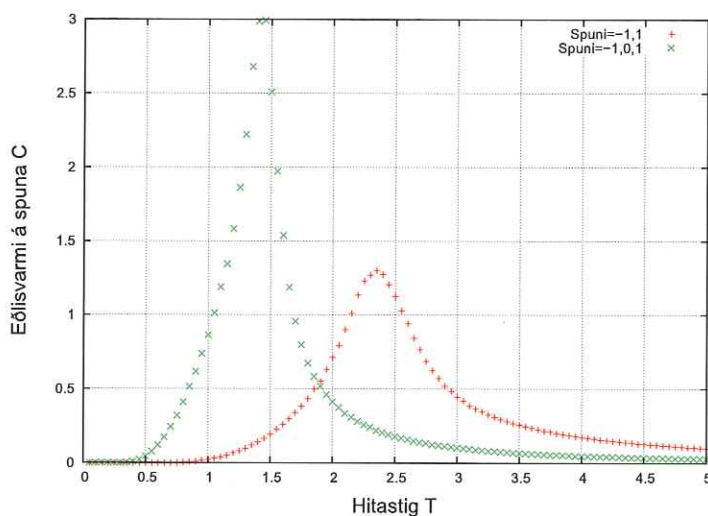
Mynd 5: Seglun á spuna M sem fall af hitastigi T fyrir tveggja og þriggja spuna kerfi.

Orkan nálgast núll hraðar fyrir þriggja spuna kerfi en fyrir tveggja spuna kerfi. Þetta stafar aðallega af því að kritíska hitastigið er lægra en einnig vegna þess að spuni $S = 0$ er leyfður. Víxlverkunarorka slíks ástands við aðra spuna er núll svo að meðaltali verður orkan nær núlli en ef bara ástönd $S = \pm 1$ eru leyfð.

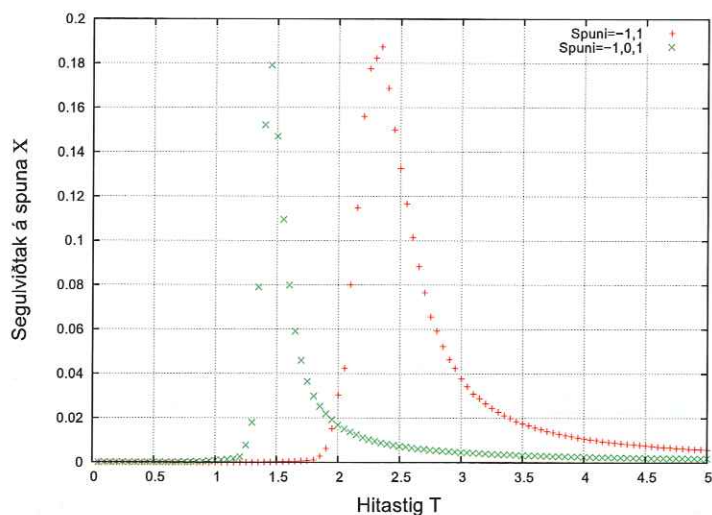


Mynd 6: Orka á spuna E sem fall af hitastigi T fyrir tveggja og þriggja spuna kerfi.

Á myndum 7 og 8 má sjá eðlisvarma C og segulviðtak χ sem fall af hitastigi T . Augljós toppur er á báðum myndum í kringum krítíska hitastigið T_c . Út frá jöfnum (6) og (8) sést að eðlisvarminn C og segulviðtakið χ eru í réttu hlutfalli við staðalfrávik orkunnar E og seglunnar M . Því er ljóst að þessi toppur er í beinum tengslum við mikið flökt á E og M við krítíska hitastigið. Toppurinn á eðlisvarmanum C er háður stærð kerfisins, ef kerfið er óendanlega stórt stefnir toppurinn á óendanlegt [2].



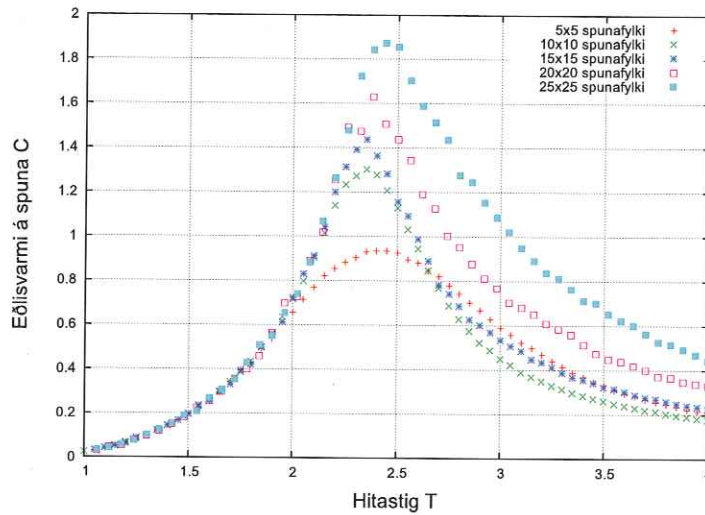
Mynd 7: Eðlisvarmi á spuna C fyrir tveggja og þriggja spuna kerfi.



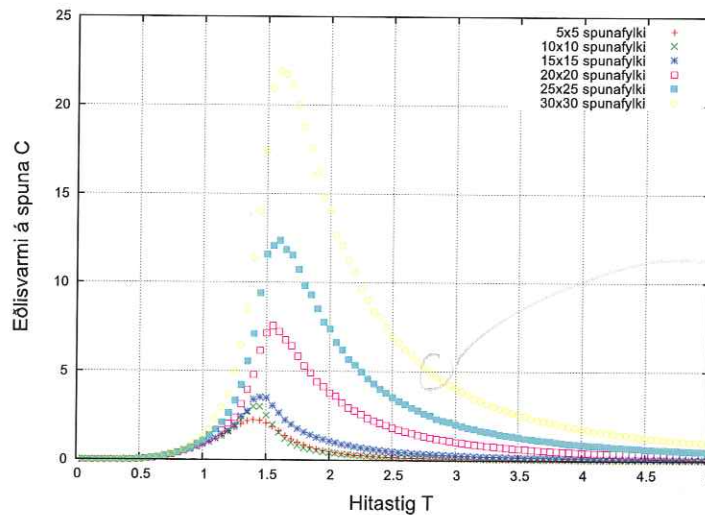
Mynd 8: Segulviðtak χ fyrir tveggja og þriggja spuna kerfi.

5.2 Eðlisvarmi C

Áhrif stærðar kerfis $N \times N$ á eðlisvarma C má sjá á myndum 9 og 10 fyrir tveggja og þriggja spuna kerfi. Þar má sjá að toppurinn vex með stækkandi kerfi. Hér er ytra segulsvið $B = 0$ og víxlverkunarorkan $I > 0$.



Mynd 9: Eðlisvarmi C sem fall af hitastigi T fyrir kerfi með tvo spuna af mismunandi stærð $N \times N$.



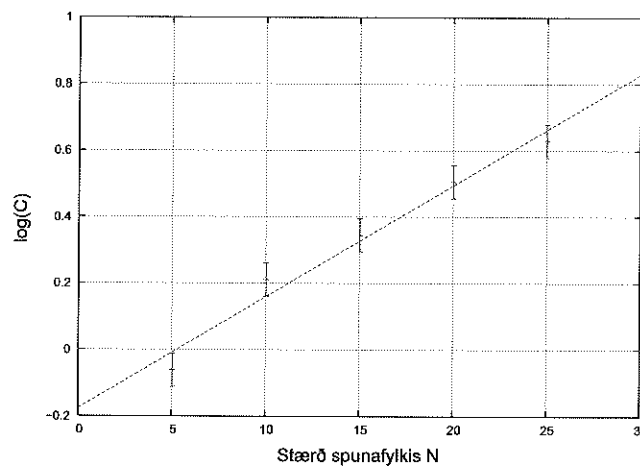
Mynd 10: Eðlisvarmi C sem fall af hitastigi T fyrir kerfi með þrjú spuna af mismunandi stærð $N \times N$.

Ákveðið var að athuga hvort einhver tengsl væru á milli hæð toppanna C_{max} og stærð kerfis. Í ljós kom að fyrir bæði kerfin fæst að

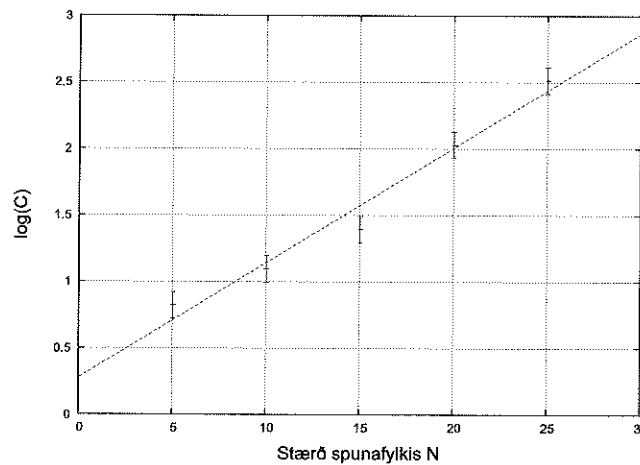
$$N \propto \ln(C_{max})$$

Hvernig er hægt að skilja þetta? Hver er undirstaðan á þessari frumsetningu?

Þetta má sjá á myndum 11 og 12.



Mynd 11: Logrinn af hæð topps C_{max} sem fall af stærð kerfis N fyrir tveggja spuna kerfi.



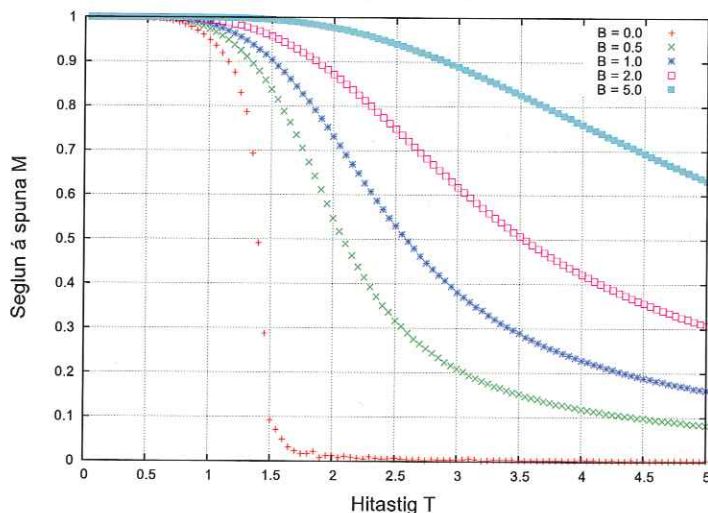
Mynd 12: Logrinn af hæð topps C_{max} sem fall af stærð kerfis N fyrir þriggja spuna kerfi.

5.3 Segulsvið

Ákveðið var að skoða áhrif ytra segulsviðs B á seglunina M þegar víxlverknarorkan $I > 0$. Niðurstöður má sjá á myndum 13 og 14 fyrir þriggja spuna kerfi af stærð 10×10 .

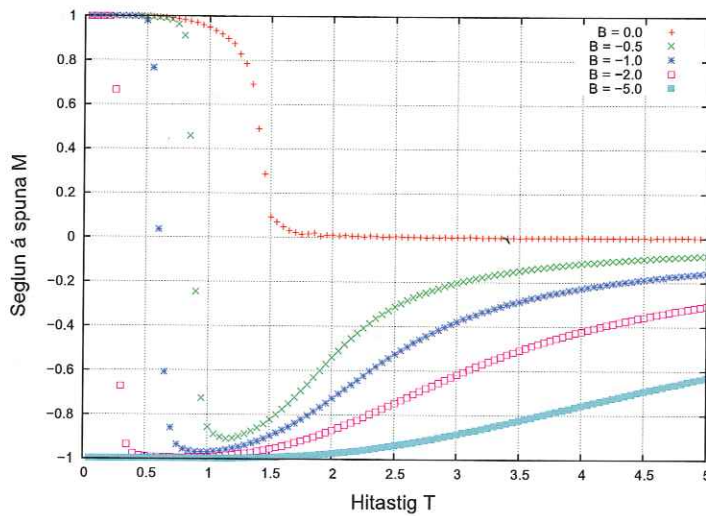
Á mynd 13 sést breytingin fyrir jákvætt segulsvið. Eins og sést á jöfnu (3) er orkan E lágmörkuð þegar allir spunar snúa upp, $S = 1$, fyrir $B > 0$. Með hækkandi segulsviði stefnir seglunin M hægar á núll. Jafnvægisástand kerfisins þar sem spunar eru raðaðir á tilviljunarkenndan hátt næst því við herra og herra hitastig, það er krítíska hitastigið hækkar.

↳ fyrir $B \neq 0$ er í raun ekki hægt að tala um markhitastig.



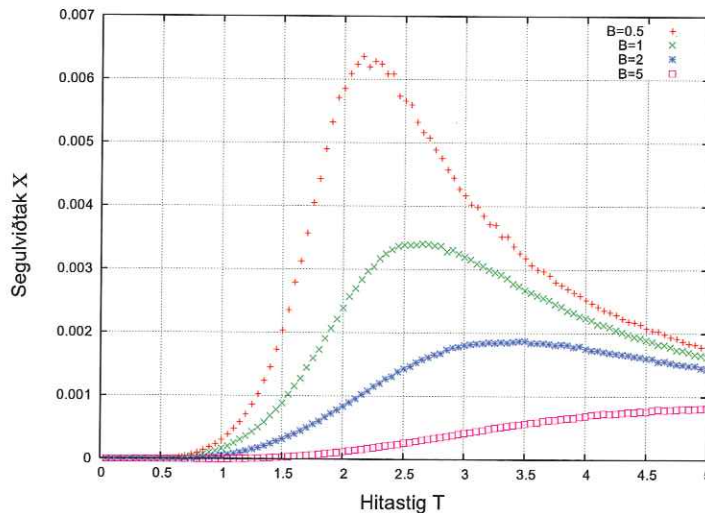
Mynd 13: Seglun M fyrir mismunandi jákvætt segulsvið.

Seglun við neikvætt segulsvið má sjá á mynd 14. Hér er orkulega hagstætt að spunar snúi niður, $S = -1$, samkvæmt jöfnu (3). Hér var kerfið í ástandi $S = 1$ í byrjun, kerfið leytast við að lágmarka orku sína og því snúast spunarnir fljótt við í ástand þar sem flestir snúa niður. Seglunin M stefnir svo á núll með hækkandi hitastigi líkt og fyrir jákvætt segulsvið svo krítíska hitastigið hækkar með auknu segulsviði.



Mynd 14: Seglun M fyrir mismunandi neikvætt segulsvið.

Á mynd 15 má sjá breytingu á segulviðtaki χ með jákvæðu ytra segulsviði. Þar sést greinilega að segulsviðið hefur þau áhrif að breytingar á seglun dreifast yfir stærra hitastigsbil en án þess. Því verður toppur segulviðtaksins minni og breiðari með auknu segulsviði þar til ekkert eiginlegt krítískt hitastig T_c er til staðar. Á myndinni má einnig sjá að segulviðtakið nær hámarki sínu við hærra hitastig eftir því sem segulsvið eykst.



Hér hefði verið áhugavert að sjú χ fyrir óvirkilegt spuna og þora samau við $B \gg I$.

Mynd 15: Segulviðtak χ fyrir mismunandi jákvætt segulsvið.

5.4 β stuðull

Breyting á seglun M nálægt kritíska hitastiginu T_c má meta út frá tengslunum

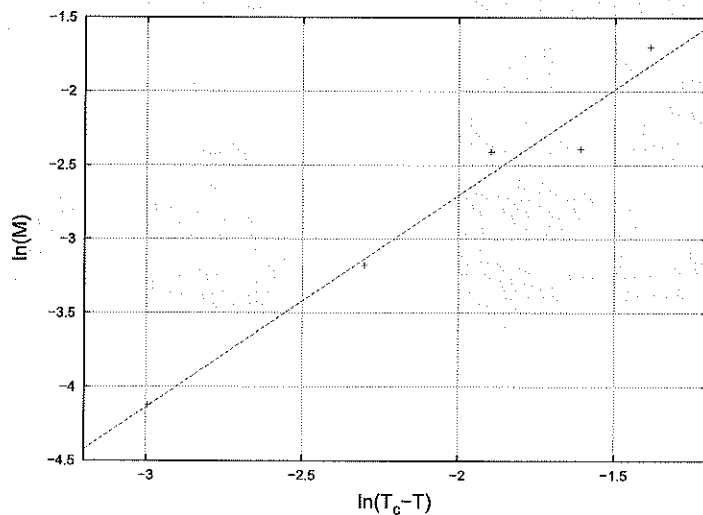
$$M \propto (T_c - T)^\beta$$

Fyrir tvívítt Ising líkan er [2] $\beta_{\text{likan}} = 0,125$. Á myndum 16 og 17 sjást þessi tengsl fyrir tveggja og þriggja spuna kerfi. Hér er hallatala grafanna β og niðurstöðurnar gefa

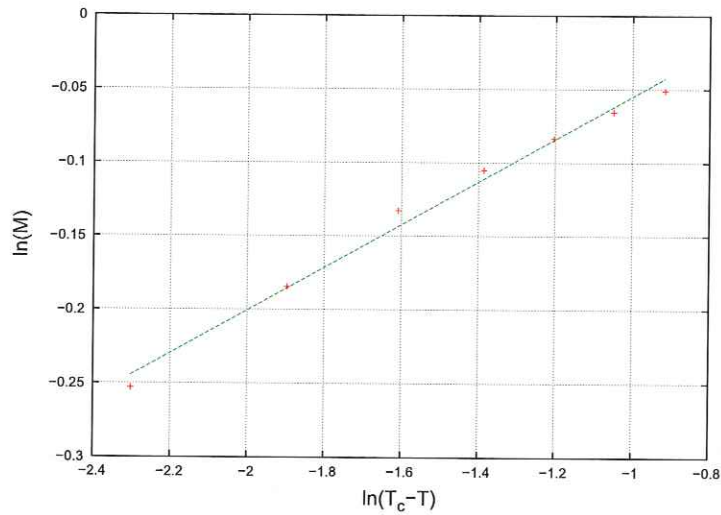
$$\beta_{2\text{spunar}} \approx 0,16 \tag{13}$$

$$\beta_{3\text{spunar}} \approx 0,14$$

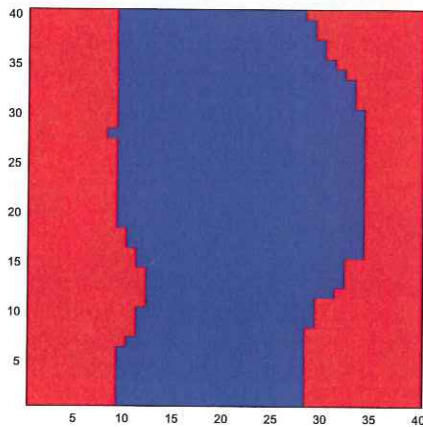
Hér var aðaltilgangurinn að fá niðurstöður af sömu stærðargráðu og β_{likan} og tókst það prýðilega. Með lengri keyrslu má eflaust fá nákvæmari gildi á β .



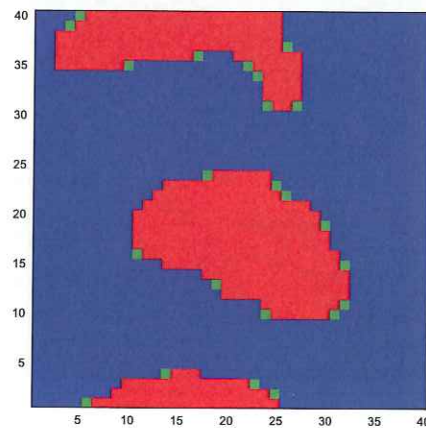
Mynd 16: Logrinn af seglun M sem fall af logra $(T_c - T)$ fyrir tveggja spuna kerfi. Hér er hallatalan $\beta_{2\text{spunar}}$.



Mynd 17: Logrinn af seglun M sem fall af logra $(T_c - T)$ fyrir þriggja spuna kerfi. Hér er hallatalan $\beta_{3\text{spunar}}$.



Mynd 18: Hér er hitastig $T = 0,1$, tveggja spuna kerfi með $I > 0$.



Mynd 19: Hér er hitastig $T = 0,1$, þriggja spuna kerfi með $I > 0$.

athugasemdir
 fylgni með
 $S=0$ kemur
 þann!

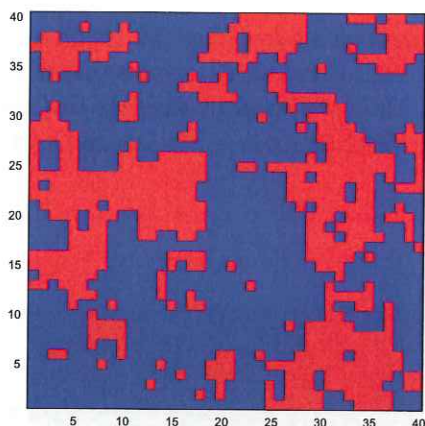
5.5 Spunamyndir

Til að sjá betur myndrænt breytingu á spuna í kerfinu fyrir mismunandi hitastig voru gerðar spunamyndir fyrir kerfi af stærð 40×40 án ytra segulsviðs. Í upphafi var spunauppröðun handahófskennd. Hér er $S = 1$ táknað með rauðum lit, $S = 0$ með grænum og $S = -1$ með bláum lit.

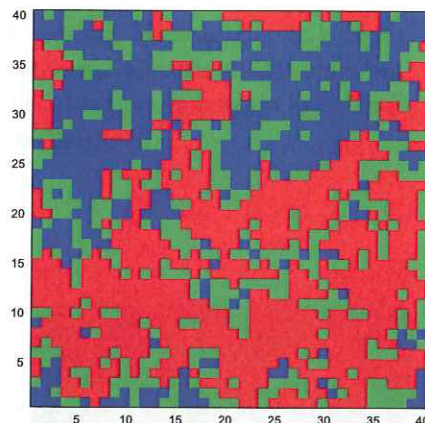
Víxlverkunarorkan $I > 0$

Á myndum 18 og 19 má sjá muninn á tveggja og þriggja spuna kerfi við mjög lágt hitastig, $T = 0, 1$. Hér leitast spunarnir við að raða sér samsíða og mynda samfelldar eyjur, ýmist með spuna $S = 1$ eða $S = -1$. Engar eyjur með spuna $S = 0$ eru til fyrir þriggja agna kerfi enda er orkulega hagstæðast að nálægir spunar snúi annað hvort upp eða niður, sjá jöfnu (3). Myndirnar fyrir tveggja spuna kerfi og þriggja spuna kerfi eru mjög líkar en í því síðar-nefnda má sjá einstaka spuna $S = 0$ á jöðrum eyjanna.

Tveggja og þriggja spuna kerfi við krítíska hitastigið T_c má sjá á myndum 20 og 21. Hér er $T_c \approx 2,5$ fyrir tveggja spuna kerfi en $T_c \approx 1,4$ fyrir þriggja spuna kerfi. Uppröðunin er orðin mun óreglulegri en fyrir mjög lágt hitastig en þó sést móta fyrir eyjum af spuna $S = \pm 1$. Fyrir þriggja spuna kerfi sést vel að spuni $S = 0$ leitast við að vera á milli spunaeyjanna.

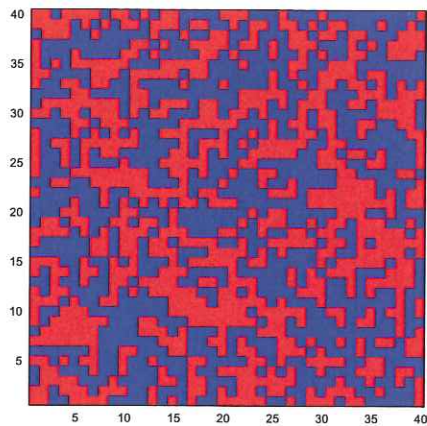


Mynd 20: Hér er hitastig $T = T_c$, tveggja spuna kerfi með $I > 0$.

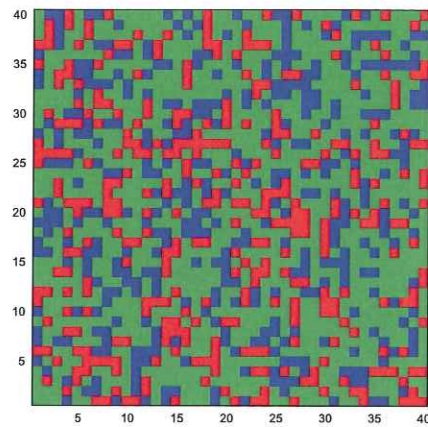


Mynd 21: Hér er hitastig $T = T_c$, þriggja spuna kerfi með $I > 0$.

Spunamyndir 22 og 23 sýna spunakerfi fyrir hátt hitastig, $T = 10$. Hér eru eyjurnar að mestu leyti horfnar og spunarnir raðast nánast tilviljunarkennt eins og búist var við.



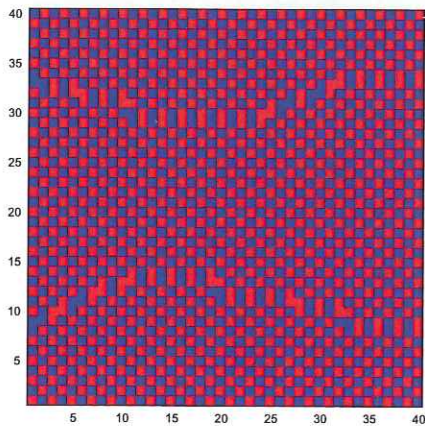
Mynd 22: *Hér er hitastig $T = 10$, tveggja spuna kerfi með $I > 0$.*



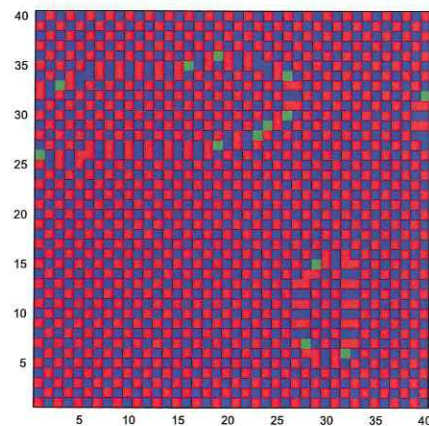
Mynd 23: *Hér er hitastig $T = 10$, þriggja spuna kerfi með $I > 0$.*

Víxlverkunarorkan $I < 0$

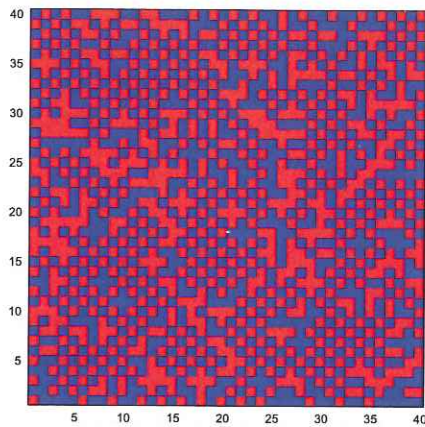
Á myndum 24 og 25 má sjá spunauppröðun við lágt hitastig $T = 0,1$ þegar víxlverkunarorkan er neikvæð. Hér leitast spunarnir að vera andsamsíða þar sem það er orkulega hagstætt. Lítil munur er á tveggja og þriggja agna kerfi fyrir utan staka $S = 0$ spuna í síðarnefndu kerfinu.



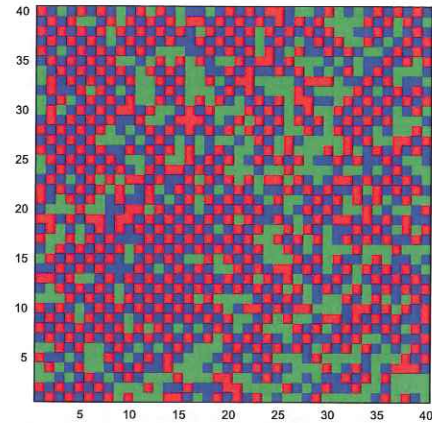
Mynd 24: *Hér er hitastig $T = 0,1$, tveggja spuna kerfi með $I < 0$.*



Mynd 25: *Hér er hitastig $T = 0,1$, þriggja spuna kerfi með $I < 0$.*

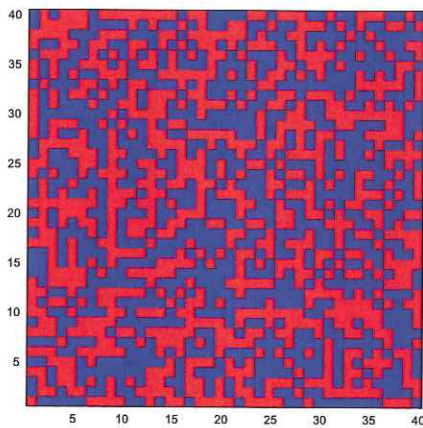


Mynd 26: Hér er hitastig $T = T_c$,
tveggja spuna kerfi með $I < 0$.

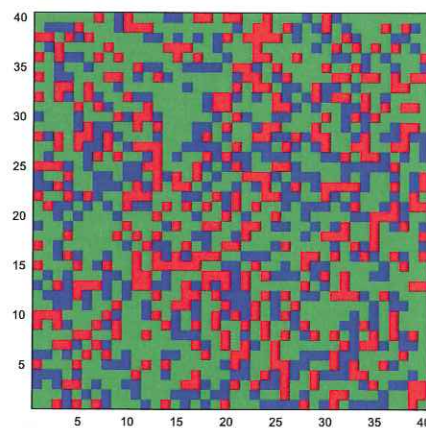


Mynd 27: Hér er hitastig $T = T_c$,
þriggja spuna kerfi með $I < 0$.

Spunamyndir 26 og 27 sýna kerfin við krítíska hitastigið T_c . Hér er $T_c \approx 2,5$ fyrir tveggja spuna kerfi en $T_c \approx 1,4$ fyrir þriggja spuna kerfi. Komin er óregla í andsamsíðu spunauppröðunina sem sást á spunamyndum 24 og 25. Þó má enn sjá andsamsíða spunaklasa sem gefa til kynna að víxlverkunarorkan er neikvæð. Fyrir þriggja spuna kerfi raðast spunar $S = 0$ sér milli þessarra klasa á sambærilegan hátt og fyrir jákvæða víxlverkunarorku, sjá mynd 21.



Mynd 28: Hér er hitastig $T = 10$,
tveggja spuna kerfi með $I < 0$.



Mynd 29: Hér er hitastig $T = 10$,
þriggja spuna kerfi með $I < 0$.

Tveggja og þriggja spunakerfi fyrir hátt hitastig, $T = 10$, má sjá á myndum 28 og 29. Hér er ekki lengur hægt að greina andsamsíða uppbyggingu og lítill sem enginn munur er á kerfunum fyrir jákvæða eða neikvæða víxlverkarorku.

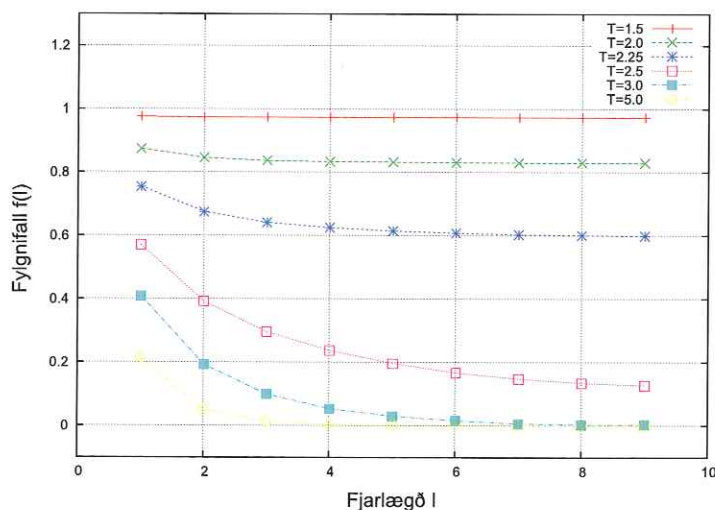
5.6 Fylgni

Á myndum 30 og 31 má sjá fylgnifall $f(l)$ sem fall af fjarlægð l mæld í grindarfasta kerfisins fyrir kerfi með tvo spuna, $S = -1, 1$, og þrjá spuna, $S = -1, 0, 1$. Fyrir lágt hitastig helst fylgnin nánast föst í kringum $f(l) = 1$ en við hærra hitastig minnkar hún með aukinni fjarlægð frá viðmiðunarspuna. Fylgnifallið minnkar hægt fyrir lágt hitastig, $T < T_c$. Fylgnin fellur hraðar fyrir ofan T_c og athyglisvert er að fylgnin fellur ekki strax í núll þó að um töluvert hátt hitastig er að ræða.

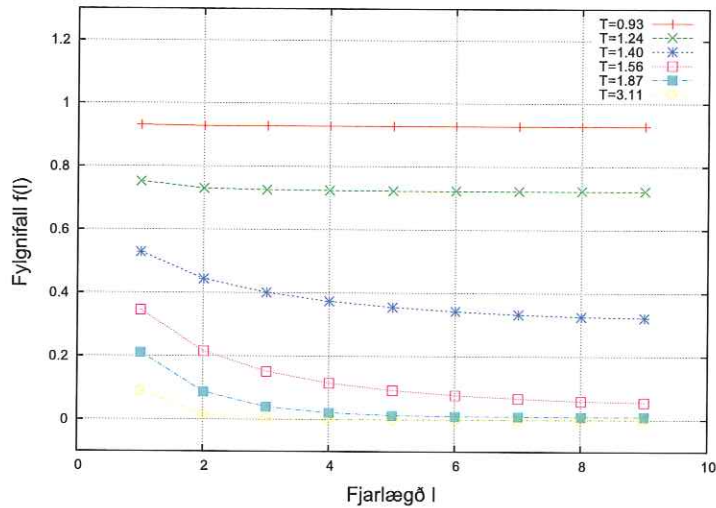
Fyrir ofan krítiska hitastigið má nálga fylgnifallið með

$$f(l) \propto C_1 + C_2 \exp(-l/\xi) \quad (14)$$

þar sem C_1 og C_2 eru fastar og ξ er fylgnistuðull.



Mynd 30: Fylgnifall $f(l)$ sem fall af fjarlægð l fyrir mismunandi hitastig T , tveggja spuna kerfi.



Mynd 31: Fylgnifall $f(l)$ sem fall af fjarlægð l fyrir mismunandi hitastig T , þriggja spuna kerfi.

Um fylgnistuðulinn gildir

$$\xi \propto \frac{1}{|T - T_c|^\nu} \quad (15)$$

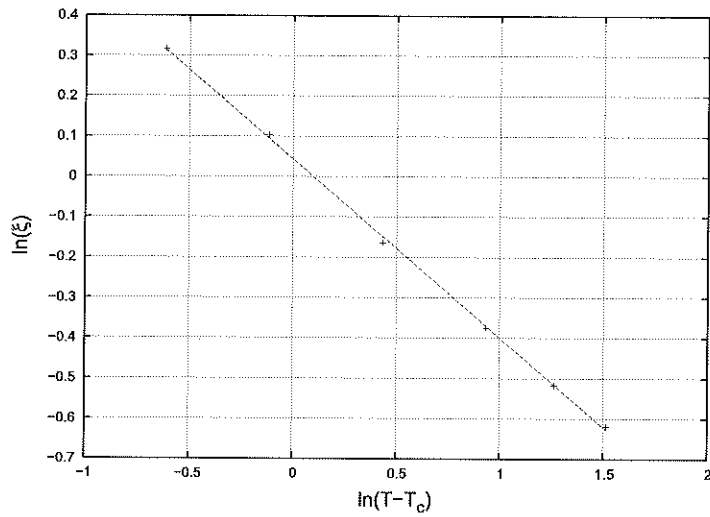
þar sem ν er fasti. Myndir 32 og 33 sýna þetta samband fyrir tveggja og þriggja spuna kerfi. Hér er hallatala grafanna ν og niðurstöður gefa

$$\nu_{2\text{spunar}} \approx 0,44 \quad (16)$$

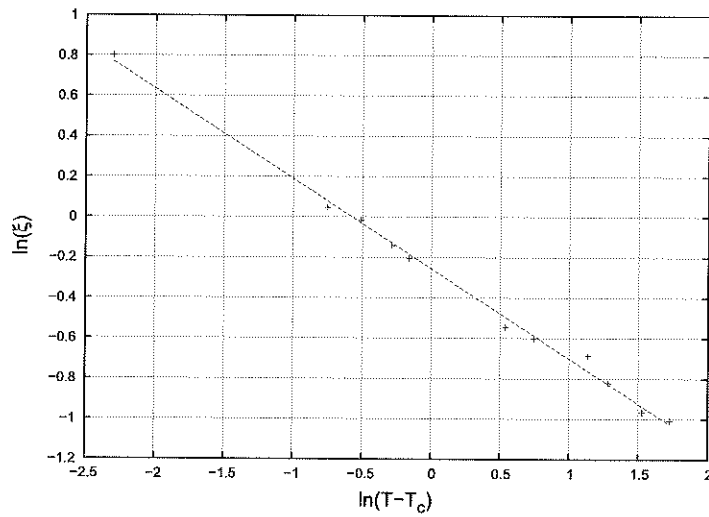
$$\nu_{3\text{spunar}} \approx 0,45$$

Því sést að stuðullinn ν er sá sami fyrir tveggja og þriggja spuna kerfi.

↳ Er það? Hver er
Gvissan á gildum
í Jöfnun (16)?



Mynd 32: Logrinn af ξ sem fall af logranum ($T - T_c$) fyrir tveggja spuna kerfi. Hér er hallatalan ν .



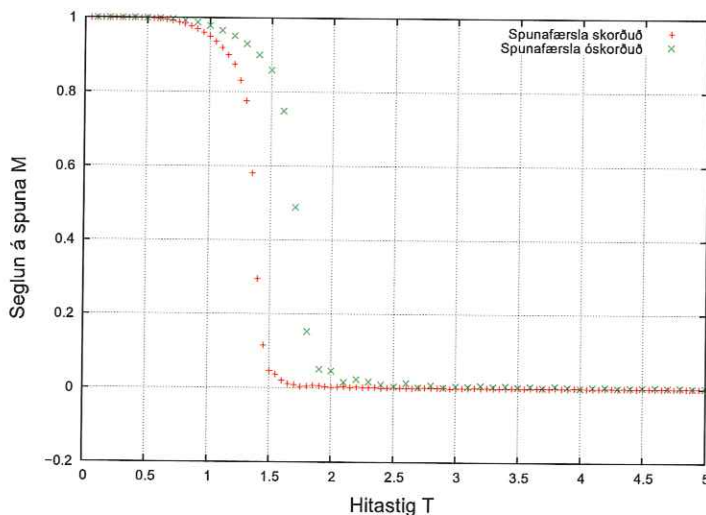
Mynd 33: Logrinn af ξ sem fall af logranum ($T - T_c$) fyrir þriggja spuna kerfi. Hér er hallatalan ν .

5.7 Öðruvísi spunafærslur

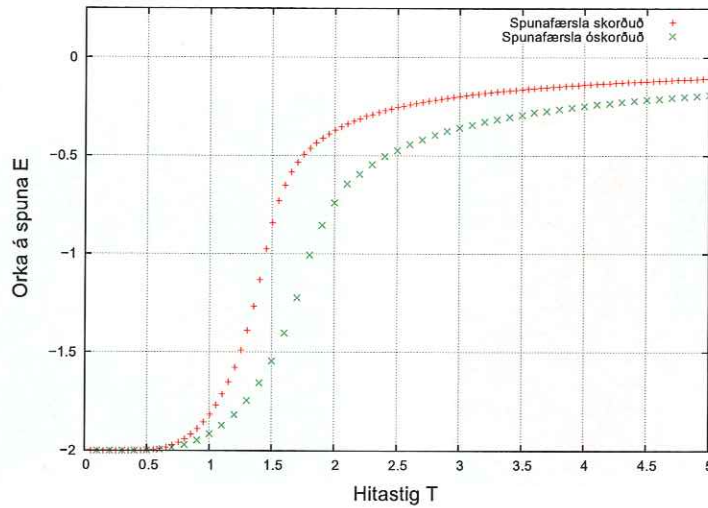
Í stað leyfðra spunafærsla samkvæmt formúlu (12) voru óskorðaðar spunafærslur athugaðar

$$\begin{aligned} S = 1 &\rightarrow S = 0, 1 \\ S = 0 &\rightarrow S = -1, 1 \\ S = -1 &\rightarrow S = -1, 0 \end{aligned} \quad (17)$$

Ákveðið var að skoða kerfi af stærð 10×10 án ytra segulsviðs með jákvæða víxlverkunarorku og bera saman við skorðuðu færslurnar. Byrjað var með kerfi þar sem allir spunar snúa upp, $S = 1$. Á myndum 34 og 35 má sjá breytingu á seglun M og orku E fyrir þessar tvær spunafærslur. Hér hliðrast krítíska hitastigið T_c aðeins fyrir óskorðuðu færslurnar, T_c skorðað $\approx 1,4$ en T_c óskorðað $\approx 1,8$. Einnig má sjá að seglunin fellur hægar fyrir óskorðuðu færslurnar og orkan stefnir hægar á núll. Þetta stafar af því að ólíklegra er að spuni sé í ástandi $S = 0$ en fyrir skorðaðar færslur.

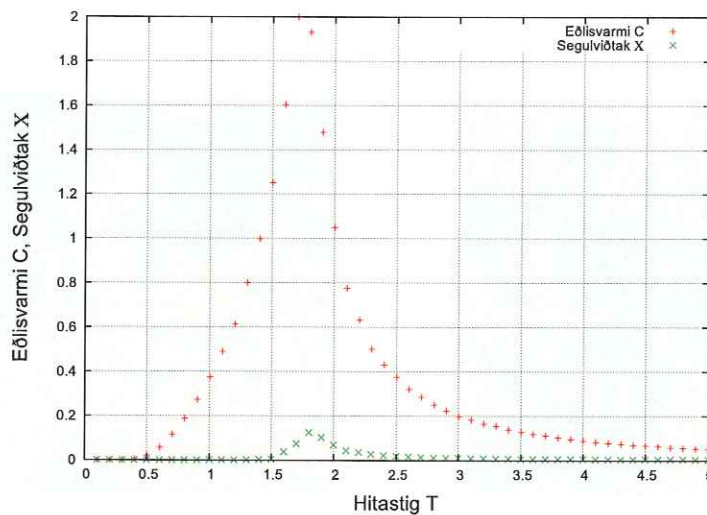


Mynd 34: Seglun á spuna M sem fall af hitastigi T fyrir skorðað og óskorðað kerfi.



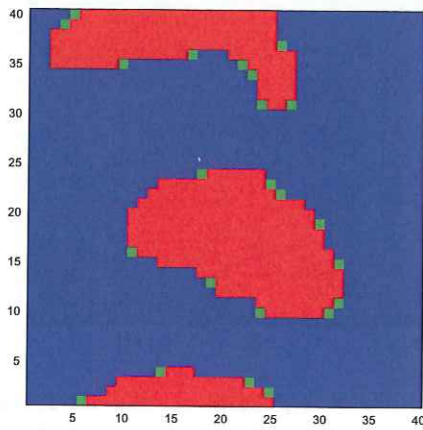
Mynd 35: Orka á spuna E sem fall af hitastigi T fyrir skorðuð og óskorðuð kerfi.

Á mynd 36 má sjá eðlisvarma C og segulviðtak χ fyrir óskorðuð kerfi. Hér sést greinilega að kritíska hitastigið er $T_c \approx 1,8$. Toppur eðlisvarmans C_{\max} er lægri en fyrir skorðuð kerfi, sjá mynd 10, sem er bein afleiðing af því að orkan rís hægar.

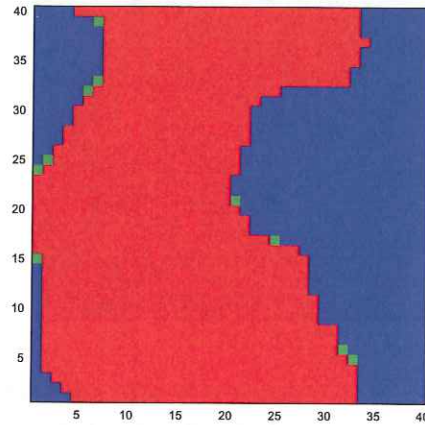


Mynd 36: Eðlisvarmi á spuna C og segulviðtak χ sem fall af hitastigi T fyrir óskorðuð kerfi.

Víxlverkunarorkan $I > 0$

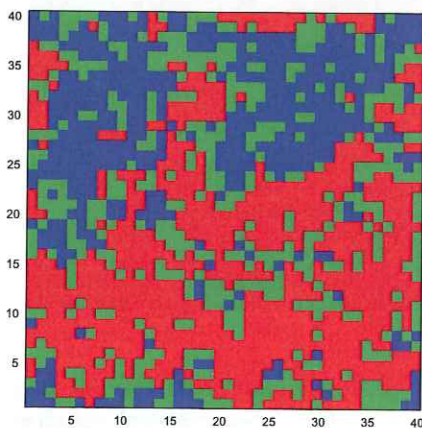


Mynd 37: Hér er hitastig $T = 0,1$, skorðaðar færslur með $I > 0$.

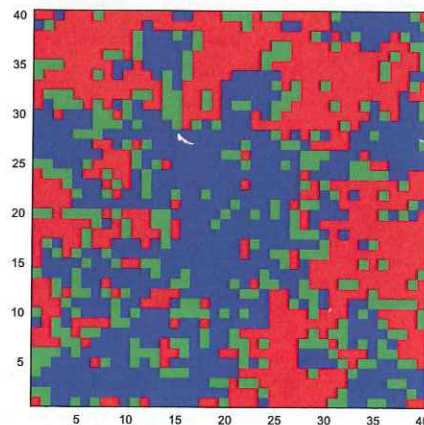


Mynd 38: Hér er hitastig $T = 0,1$, óskorðaðar færslur með $I > 0$.

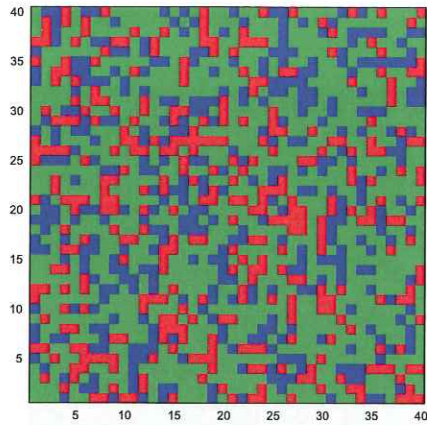
Spunamyndir 37 og 38 sýna mun á kerfunum tveimur með mismunandi spunaskorður við lágt hitastig, $T = 0,1$. Í upphafi var spunaröðun tilviljunarkennd. Myndir 39 og 40 sýna kerfin við krítíska hitastigið $T = T_c$, T_c skorðað $\approx 1,4$ en T_c óskorðað $\approx 1,8$. Eins og sést þá er enginn munur á þessum tveimur kerfum við svo lág hitastig.



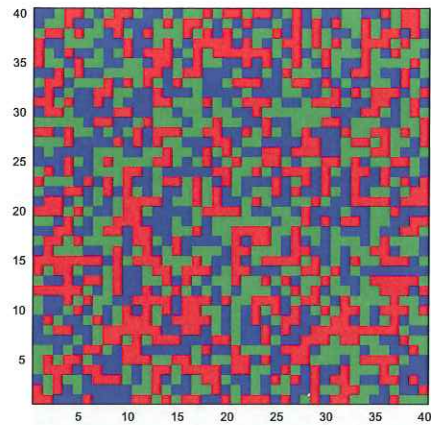
Mynd 39: Hér er hitastig $T = T_c$, skorðaðar færslur með $I > 0$.



Mynd 40: Hér er hitastig $T = T_c$, óskorðaðar færslur með $I > 0$.

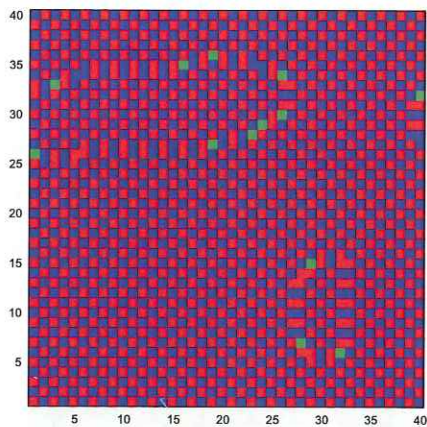


Mynd 41: *Hér er hitastig $T = 10$, skorðaðar færslur með $I > 0$.*

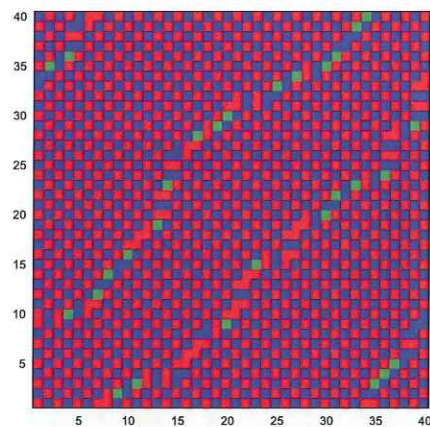


Mynd 42: *Hér er hitastig $T = 10$, óskorðaðar færslur með $I > 0$.*

Þegar komið er í hærra hitastig, $T = 10$, má sjá mun á óskorðaða kerfinu og því skorðaða, sjá myndir 41 og 42. Hér felst munurinn í því að spuni $S = 0$ er mun algengari fyrir skorðað kerfi. Þetta sést þegar færsluskilyrðin eru skoðuð, jöfnur (12) og (17).

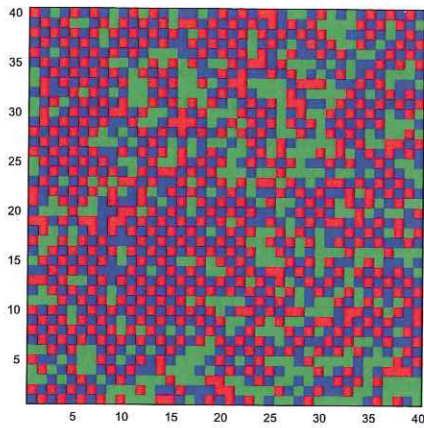


Mynd 43: *Hér er hitastig $T = 0,1$, skorðaðar færslur með $I < 0$.*

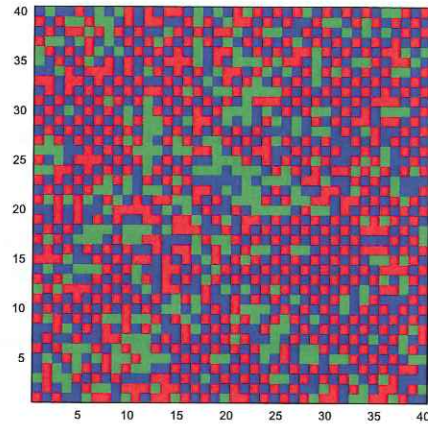


Mynd 44: *Hér er hitastig $T = 0,1$, óskorðaðar færslur með $I < 0$.*

Víxlverkunarorkan $I < 0$

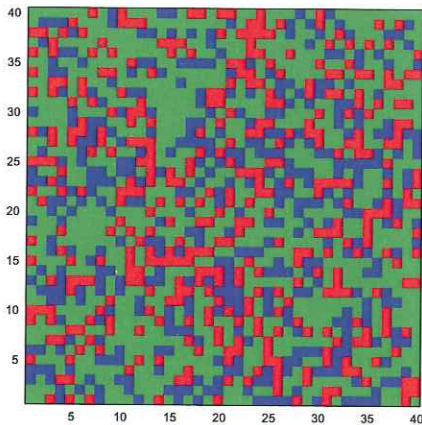


Mynd 45: Hér er hitastig $T = T_c$, skorðaðar færslur með $I < 0$.

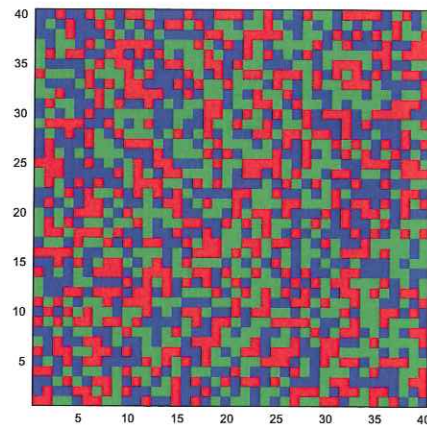


Mynd 46: Hér er hitastig $T = T_c$, óskorðaðar færslur með $I < 0$.

Á myndum 43 og 44 má sjá skorðað og óskorðað kerfi fyrir neikvæða víxlverkunarorku, $I < 0$, og mjög lágt hitastig, $T = 0,1$. Sambærilegar myndir fyrir krítíska hitastigið T_c má finna á myndum 45 og 46. Hér er líkt og áður, fyrir $I > 0$, líttill sem enginn munur á kerfunum tveimur. Fyrir hátt hitastig, $T = 10$, kemur fram munur á kerfunum. Spuni $S = 0$ er algengari í skorðaða kerfinu líkt og áður fyrir jákvæða víxlverkunarorku, $I > 0$.



Mynd 47: Hér er hitastig $T = 10$, skorðaðar færslur með $I < 0$.



Mynd 48: Hér er hitastig $T = 10$, óskorðaðar færslur með $I < 0$.

6 Lokaorð

Keyrsla á forriti sýndi réttar niðurstöður fyrir tveggja spuna kerfi. Við sam-
anburð á kerfi fyrir tvo og þrjá spuna kom í ljós að krítíska hitastigið reyndist
ekki vera það sama. Tveggja spuna kerfið gaf $T_c \approx 2,5$ meðan $T_c \approx 1,4$ fyrir
þrjá spuna. Þessi mismunur stafar af því að spuni $S = 0$ er leyfður fyrir
þriggja spuna kerfið svo meðalspuninn nálgast núll fyrr. Óskorðaðar spuna-
færslur gáfu enn eitt gildið, $T_c \approx 1,8$, enda er spuni $S = 0$ ólíklegri þar en
fyrir skorðaðar spunafærslur.

Hágildi eðlisvarmans C_{max} jókst með stærð kerfis N eins og við var að
búast. Með ytra segulsviði B hækkaði krítíska hitastigið T_c og spunauppröð-
unin varð handahófskennd við hærri hitastig T en áður.

Spunamyndir sýndu skýrt hve mikill munur verður á uppröðun spuna
fyrir jákvæða og neikvæða víxlverkunarorku I fyrir mismunandi hitastig T .

Reykjavík, 4. desember 2006

Ása Skúladóttir

Ása Skúladóttir

María Marteinsdóttir

María Marteinsdóttir