УДК 537.63, 004.021

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ В МОДЕЛИ ИЗИНГА С ДАЛЬНИМИ КОРРЕЛЯЦИЯМИ[1]

© 2012 А.А. Бирюков, Я.В. Дегтярева, М.А. Шлеенков[2]

В работе представлено исследование фазовых переходов в двумерной модели Изинга, в которой учитывается взаимодействие спина как со спинами, расположенными в соседних узлах решетки, так и со спинами, расположенными в последующих узлах на площади с некоторым выбранным радиусом. Данная модель исследуется методом Монте-Карло с алгоритмом Метрополиса. Показано, что с увеличением данного радиуса корреляции между спинами температура фазового перехода возрастает.

Ключевые слова: фазовый переход, модель Изинга с дальними корреляциями, численное моделирование методом Монте-Карло.

1. Предварительные сведения

Изучение фазовых переходов и связанных с ними критических явлений традиционно привлекает к себе активное внимание исследователей в различный областях науки. В настоящее время представление о фазовых переходах проникает в различные области физики (физика твердого тела, физическая химия, биохимия и биофизика макромолекул, квантовая электроника) [1]. 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 множество моделей. Одна из них — модель Изинга, которая была им использована для исследования свойств ферромагнетиков. В своей диссертации 1924 года [2] Изинг доказал, что в одномерной линейной цепочке спинов, связанных взаимодействием с ближайшими соседями, фазового перехода не существует. Однако двумерная модель прекрасно иллюстрирует фазовый переход между ферромагнитным и парамагнитным состояниями (фазовый

[1]Статья подготовлена в рамках Программы развития деятельности студенческих объединений "Интеграция студентов классического университета в науку, социально-проектную деятельность и гражданское общество — гарантия стабильного развития государства". Работа выполнена в рамках задания Министерства образования и науки Российской Федерации № 2.2459.2012 и Федеральной целевой программы "Научные и научно-педагогические кадры инновационной России" на 2009–2013 годы.

[2]Бирюков Александр Александрович (birykov@samsu.ru), Дегтярева Яна Владимировна (degt-yana@yandex.ru), Шлеенков Марк Александрович (shleenkov@list.ru), кафедра общей и теоретической физики Самарского государственного университета, 443011, Российская Федерация, г. Самара, ул. Акад. Павлова, 1.

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. Модель Изинга рассматривалась многими авторами, которые уточняли методы точного решения задачи описания фазовых переходов [4–6]. Представляет интерес как с точки зрения теории, так и в практическом приложении изучение модели Изинга, где учитывается взаимодействие каждого спина не только с ближайшими соседями, но и с более дальними. Аналитическое изучение фазовых переходов в предложенной модели вызывает большие затруднения. В нашей работе предлагается программа численного описания фазового перехода в данной модели методом Монте-Карло.

2. Модель Изинга с дальними корреляциями

Двумерная модель Изинга описывается решеткой, в узлах которой расположены спины, принимающие только два значения: $+1$ или -1 (направление спина "вверх" или "вниз"). Направим вдоль одной стороны решетки ось OX, вдоль другой — ось OY. Выберем спин с координатами (i, j).

Зададим радиус взаимодействия r, показывающий, сколько ближайших "соседей" находятся во взаимодействии с данным спином.

В стандартной модели Изинга радиус взаимодействия равен единице. В этом случае выбранный спин, находящийся в точке с координатами (i, j), взаимодействует с ближайшими соседями, координаты которых $(i, j+1)$, $(i, j-1)$, $(i+1, j)$,$(i-1, j)$. Рассмотрим модель, когда радиус площади, на которой спины взаимодействуют со спином, расположенным в точке (i, j), равен двум, то есть данный спин помимо ближайших соседей взаимодействует со спинами, расположенными в точках $(i, j+2)$, $(i, j-2)$, $(i+1, j+1)$, $(i-1, j+1)$, $(i+1, j-1)$, $(i-1, j-1)$, $(i+2, j)$, $(i-2, j)$, и аналогично модель, в которой этот радиус равен трем. Введенный радиус будем называть радиусом корреляции.

Для традиционной модели Изинга гамильтониан системы имеет вид:

$$H = -J \sum_{neighbours} S_i S_j, \tag{2.1}$$

где J — константа взаимодействия между спинами, S_i — значение спина в i-м узле решетки. Для модели с $r = 2$ гамильтониан модифицируется и принимает вид:

$$H_i = -J \sum_{|i-j|=1} S_i S_j - \frac{J}{2} \sum_{|i-j|=2} S_i S_j, \tag{2.2}$$

где суммирование происходит по j с указанными условиями на решетке. Аналогично была просчитана модель с радиусом корреляции, равным трем.

Вероятность нахождения спина в каждом i-м состоянии определяется распределением Гиббса:

$$P_i = \frac{1}{Z} \exp(-\frac{1}{kT} H_i), \tag{2.3}$$

где k — коэффициент Больцмана, T — температура, $Z = \sum_i P_i$ — нормировочная константа.

3. Метод Монте-Карло

Для вычисления используется метод Монте-Карло с алгоритмом Метрополиса [7; 8]. Этот метод успешно применяется для описания фазовых переходов [9].

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:

$$p(C) \propto \exp[-\beta H(C)],$$

где $H(C)$ — действие, определенное на конфигурации, $\beta = \frac{1}{kT}$. 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) [10].

Расчеты будем проводить на двумерной решетке размерности 100×100, элементы которой — значения спинов в данном узле. Коэффициент Больцмана полагаем равным 1. Константу взаимодействия будем определять выражением $J = \frac{1}{r}$, где $r = \sqrt{(x-i)^2 + (y-j)^2}$ — расстояние между узлами решетки с координатами (i, j) и (x, y). В расчетах радиусы корреляции брались равными 1, 2 и 3. 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, $\beta = 0$). В этом случае вероятность того, что спин примет значение $+1$, равна (см. формулы ниже)

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

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

Проведение расчета осуществляется в следующем порядке.

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 $P(+1) < x$, значение спина считается равным -1, иначе $+1$.

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.

4. Результаты расчетов

Были построены графики намагниченности и критической температуры от радиуса корреляции. Значения радиуса взаимодействия брались равными 1, 2, 3.

На рис. 1 изображена зависимость намагниченности от температуры при различных радиусах корреляции r, а на рис. 2 – зависимость критической температуры от радиуса корреляции.

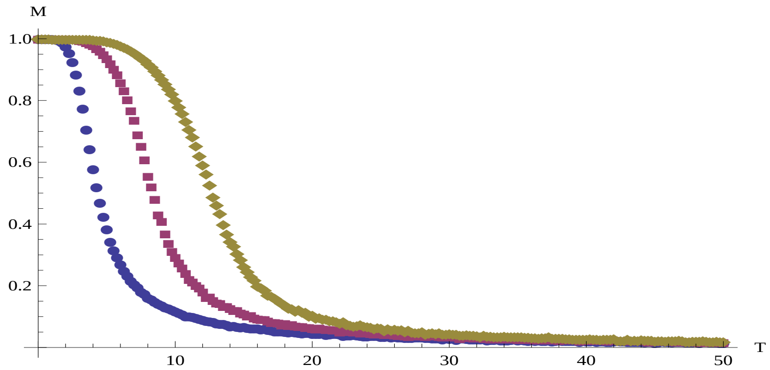

Рис. 1. Графики намагниченности при различных значениях радиуса корреляции r и нулевом внешнем поле: r=1 — круги, r=2 — квадраты, r=3 — ромбы

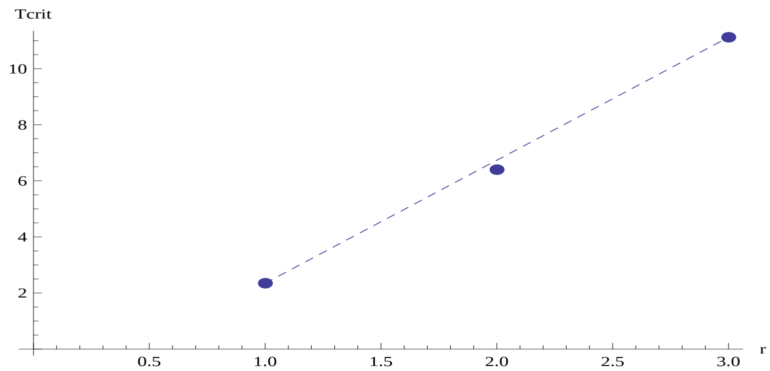

Рис. 2. Зависимость критической температуры от радиуса корреляции при нулевом магнитном поле

Из поведения графиков видно, что при увеличении радиуса корреляции между спинами температура фазового перехода повышается.

Заключение

В ходе исследования с помощью разработанной программы была изучена модифицированная модель Изинга, в которой учитываются взаимодействия всех спинов в пределах заданного радиуса корреляции. Было выяснено, что температура фазового перехода и поведение намагниченности в окрестности фазового перехода существенно зависят от выбранной модели корреляций, то есть формально от радиуса корреляции. Данный результат показывает, что фазовый переход второго рода определяется микроскопической структурой системы. Метод позволяет исследовать фазовые переходы второго рода в разных аспектах.

Литература

[1] Елесин В.Ф., Кашурников В.А. Физика фазовых переходов. М.: МИФИ, 1997. 180 с.

[2] Ising E. Beitrag zur Theorie des Ferro- und Paramagnetimus // Z. Phys. 1924. № 31. P. 253–258.

[3] Onsager L. Crystalstatistics. A two-dimensional model with order-disorder transitions // Phys Rev. 1944. V. 65. № 3–4. P. 117–149.

[4] Изюмов Ю.А., Скрябин Ю.Н. Статистическая механика магнитоупорядоченных систем. М.: Наука, 1987. 264 с.

[5] McCoy B.M., Tsun Wu Tai. The two-dimensional Ising model. Cityplace Cambridge: StateMA: Harvard Univ. Press, 1973.

[6] Зиновьев Ю.М. Спонтанная намагниченность в двумерной модели Изинга // ТМФ. 2003. Т. 136. С. 444–462.

[7] Hall A. On an experiment determination of π // Messeng. Math. 1873. № 2.

[8] Metropolis N., Ulam S. The Monte-Carlo method // J. Amer. Stat. Assos. 1949. V. 44. № 247.

[9] Соболь И.М. Численные методы Монте-Карло. М.: Наука, 1973.

[10] Кройц М. Кварки, глюоны и решетки. М.: Мир, 1987. С. 148–160.

[11] Биндер К., Хеерман Д.В. Моделирование методом Монте-Карло в статистической физике. М.: Наука, 1995. 142 с.

Поступила в редакцию 25/*XII*/2012;
в окончательном варианте — 25/*XII*/2012.

MONTE-CARLO SIMULATIONS OF PHASE TRANSITIONS IN THE TWO-DIMENSIONAL ISING MODEL WITH LONG-RANGE CORRELATIONS

 A.A. Biryukov, Y.V. Degtyareva, M.A. Shleenkov[3]

In this article phase transitions in the modified two-dimensional Ising model with long-range correlations investigated. This model was studied with Monte-Carlo method and Metropolis algorithm. Critical temperature increase is shown in such model.

Key words: phase transition, Ising model with long range correlations, Monte-Carlo simulation.

Paper received 25/*XII*/2012.
Paper accepted 25/*XII*/2012.

[3]Biryukov Alexander Alexandrovich (`biryukov@samsu.ru`), Degtyareva Yana Vladimirovna (`degt-yana@yandex.ru`), Shleenkov Mark Alexandrovich (`shleenkov@list.ru`), Dept. of General and Theoretical Physics, Samara State University, Samara, 443011, Russian Federation.