

Monte Carlo Simulation
des
2-D Ising Modells

Seminararbeit am Institut für theoretische Physik
an der TU Braunschweig

Von
Thomas Schart
WS 2004/05

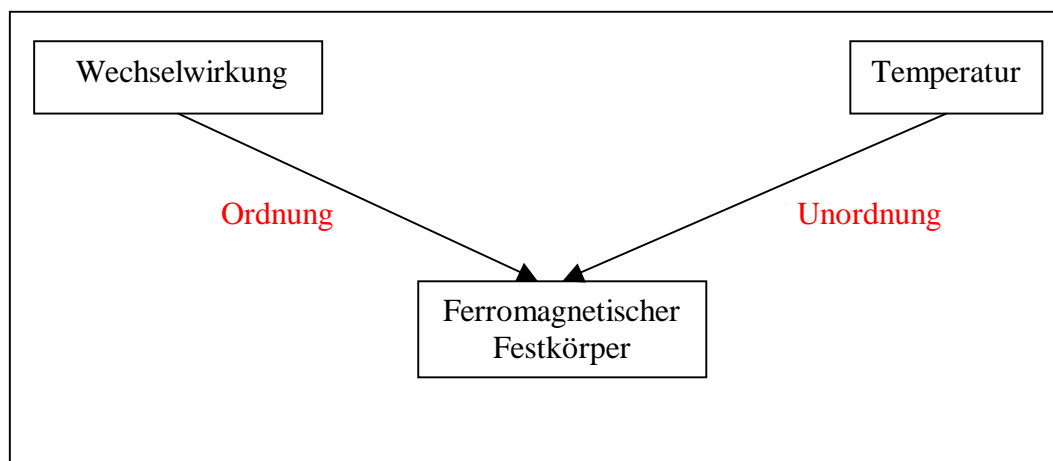
Inhaltsverzeichnis:

1. Einleitung.....	3
2. Das Ising Modell.....	6
3. Die Monte Carlo Methode.....	7
4. Implementierung des Metropolis Algorithmus.....	9
5. Ergebnisse der Simulation.....	12
6. Die Binder Kumulante.....	14
7. Auswertung.....	17
8. Zusammenfassung.....	20

Anhang: Programm - Quellcode

1. Einleitung

Ferromagnetische Stoffe haben die Eigenschaft, dass sie ohne ein äußeres magnetisches Feld eine spontane Magnetisierung aufweisen können. Diese Magnetisierung ist eine Folge der Wechselwirkung zwischen den Gitteratomen im Kristall. Jedem Gitterpunkt kann ein magnetisches Moment zugeordnet werden: der Spin. Die ferromagnetische Wechselwirkung verursacht eine parallele Ausrichtung der Spins. Die Folge hiervon ist eine spontane Magnetisierung. Da in der Regel ein Ferromagnet wie z.B. Eisen nicht vollständig aufmagnetisiert ist, muss es neben der Wechselwirkung noch einen zweiten entmagnetisierenden Prozess geben. Dieser wird durch eine endliche Temperatur des Stoffes hervorgerufen. Man kann sich die Situation an folgendem Schaubild (Abb. 1.a) verdeutlichen:



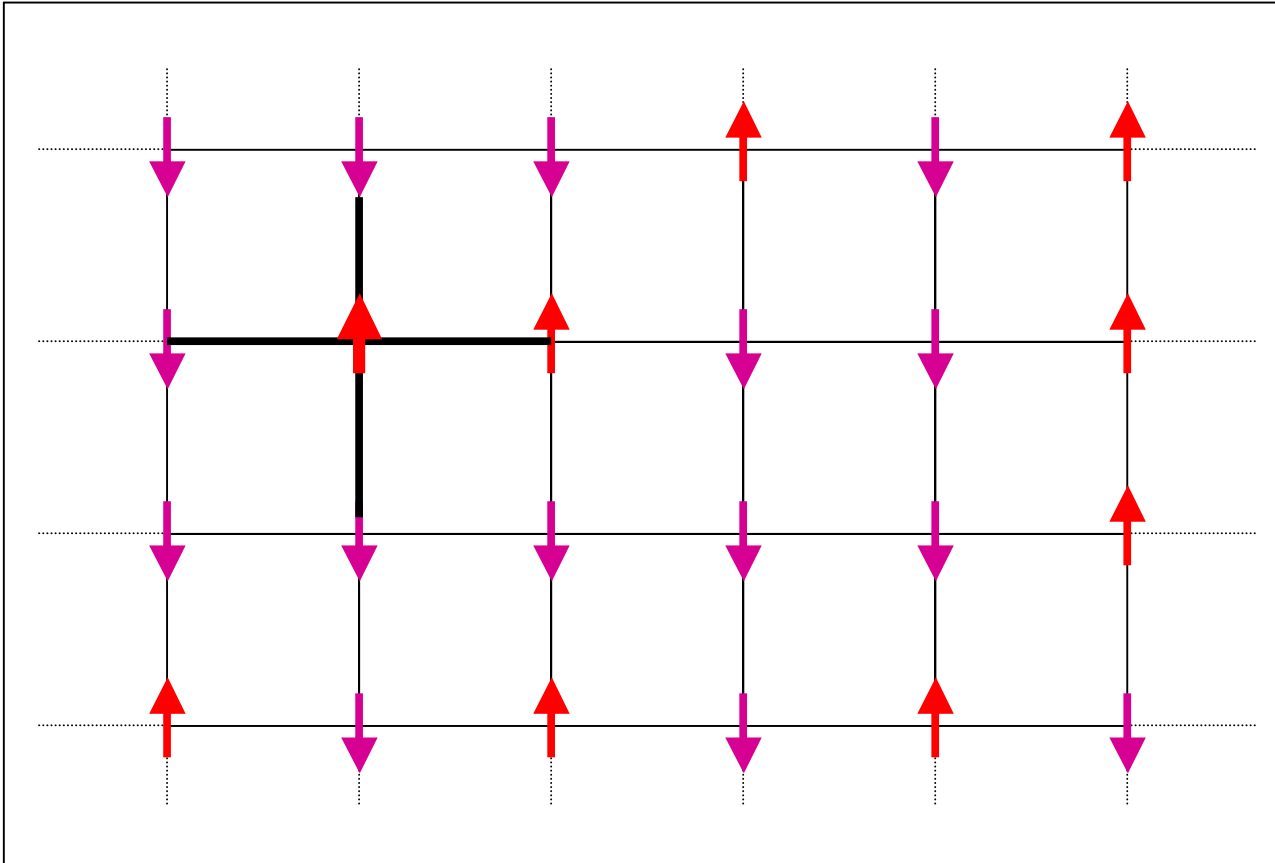
(Abb. 1.a Auf den ferromagnetischen Festkörper wirken zwei Prozesse ein: die ordnende Wechselwirkung und die unordnende Temperatur.)

Um die Größe der spontanen Magnetisierung in Abhängigkeit dieser beiden Prozesse berechnen zu können, benötigt man ein theoretisches Modell. Hier bieten sich zwei Modelle an:

1. Das Heisenberg Modell
2. Das Ising Modell

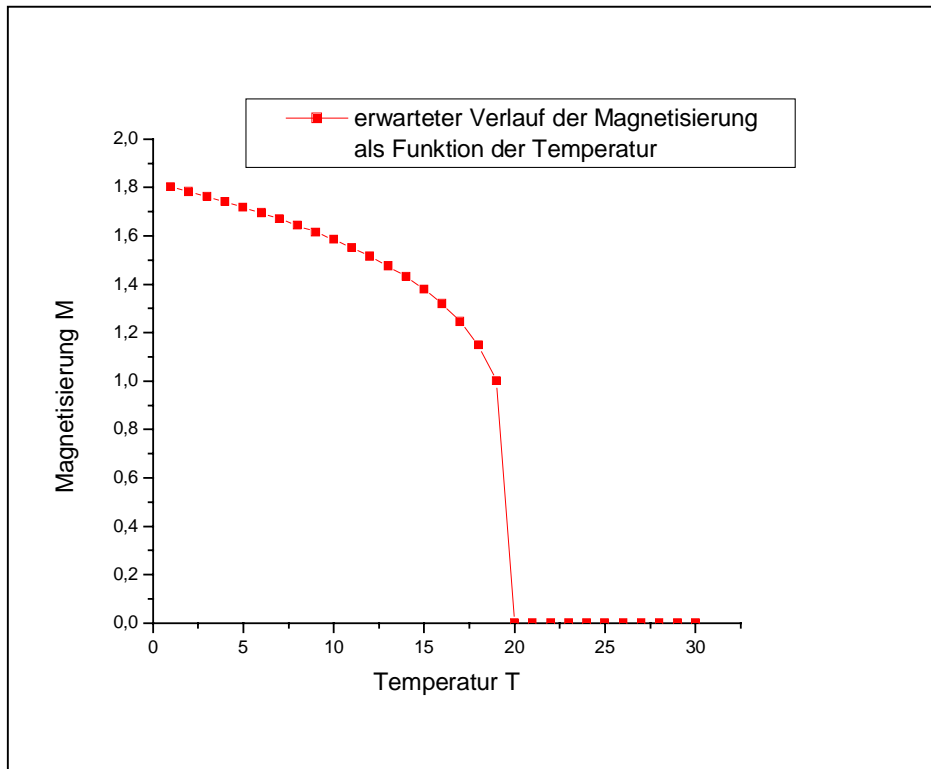
Das Heisenberg Modell beschreibt die Magnetisierung für beliebig einstellbare Spins. Man muss die Spins in den Gleichungen durch Vektoren beschreiben. Das Ising Modell hingegen lässt nur zwei Spineinstellungen zu. Man kann von daher den Spins die möglichen

Einstellungen +1 und -1 zuordnen, was einer wesentlichen Vereinfachung entspricht. Bei beiden Modellen betrachtet man aber lediglich die nächste Nachbarwechselwirkung. Die bisherigen Betrachtungen liefern folgendes Bild (Abb. 1.b) eines zweidimensionalen Festkörpers:



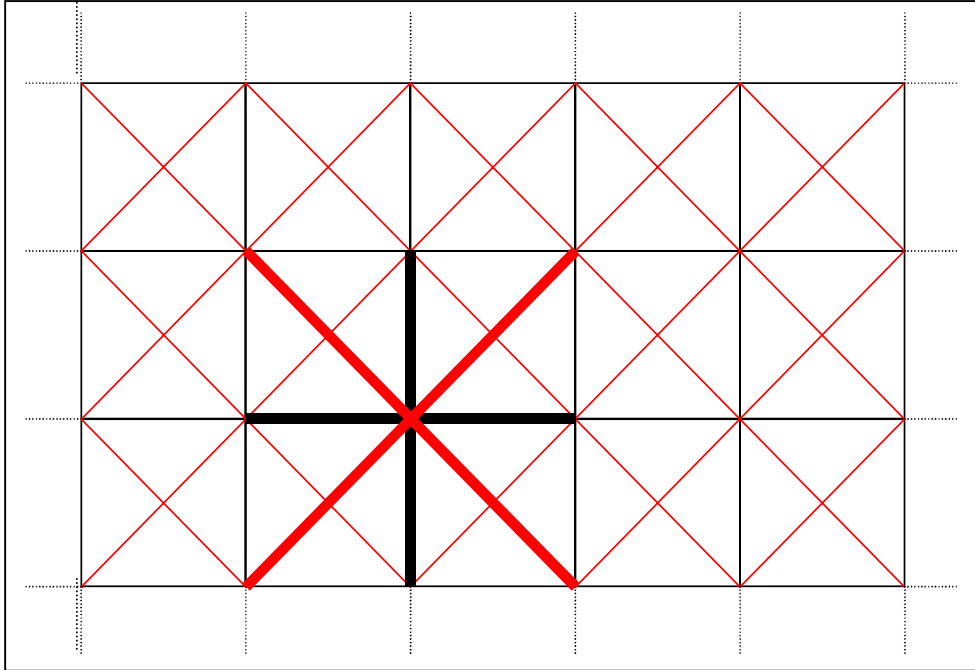
(Abb.1.b zeigt den schematischen Aufbau eines zweidimensionalen Ising Modells mit den beiden möglichen Spineinstellungen +1 und -1 sowie der nächsten Nachbarwechselwirkung, gekennzeichnet durch die schwarze Linie.)

In Anbetracht dieses Modells kann man bereits qualitativ vorhersagen, wie sich der Verlauf der spontanen Magnetisierung in Abhängigkeit der Temperatur verhält. Bei zunehmender Temperatur wird die Magnetisierung stetig abnehmen, bis die kritische Temperatur, an der keine Magnetisierung mehr existiert, erreicht wird. Dieser Verlauf ist in *Abbildung 1.c* schematisch dargestellt. Man erkennt eindeutig die stetige Abnahme der Magnetisierung bei steigender Temperatur. Die kritische Temperatur T_C beträgt hier $T_C = 20$. Dies ist natürlich ein völlig willkürlicher Wert, da hier lediglich Überlegungen und noch keine genaueren Berechnungen oder Simulationen stattgefunden haben.



(Abb. 1.c zeigt den erwarteten Verlauf der Magnetisierung in Abhängigkeit der Temperatur. Die kritische Temperatur T_C liegt hier bei $T_C = 20$.)

Das Ising Modell ist in einer und zwei Dimensionen analytisch lösbar. Erst beim Übergang zu drei Dimensionen muss eine Simulation angestrengt werden. Im Folgenden sei eine kleine Erweiterung des zweidimensionalen Ising Modells vorgestellt, die auch nicht mehr analytisch lösbar ist. Die bisherige positive nächste Nachbarwechselwirkung wird erweitert und es wird eine negative (antiferromagnetische) diagonale nächste Nachbarwechselwirkung hinzugefügt. Diese Situation kann man sich in *Abbildung 1.d* verdeutlichen. Das alte Bild der ferromagnetischen nächsten Nachbarwechselwirkung bleibt bestehen. Hinzu kommt die antiferromagnetische Diagonalkopplung, welche im Bild rot gekennzeichnet ist. Mit diesem Bild kann man die Zielsetzung dieser Simulation formulieren: mit Hilfe des Ising Modells soll das magnetische Verhalten eines Festkörpers in Abhängigkeit der Temperatur und einer antiferromagnetischen Diagonalkopplung bestimmt werden. Insbesondere wird die Lage der kritischen Temperatur T_C in Abhängigkeit dieser Größen berechnet. Des weiteren soll der kritische Exponent, der das Verhalten der Magnetisierung in der Nähe der kritischen Temperatur beschreibt, bestimmt werden.



(Abb 1.d zeigt ein zweidimensionales Ising Modell mit einer negativen Diagonalkopplung, gekennzeichnet durch die roten Linien)

Um genauer zu verstehen, welche Annahmen in der Simulation benutzt werden, wird im folgenden Kapitel kurz auf das Ising Modell eingegangen. Des weiteren sei darauf hingewiesen, dass für alle Betrachtungen periodische Randbedingungen gelten.

2. Das Ising Modell

Es gibt zwei grundlegende Annahmen, die das Ising Modell beschreiben:

1. Die Ausrichtung eines Spins an der Stelle i wird nur von den nächsten Nachbarn beeinflusst. Die Wechselwirkung ist konstant und bei Ferromagneten positiv.
2. Es gibt nur zwei mögliche Spinorientierungen, denen man die Zahlen $+1$ und -1 zuordnen kann.

Mit diesen Annahmen kann man den Hamilton Operator, der das System beschreibt, wie folgt formulieren [2]:

$$H = -J \sum_i s_i \cdot \sum_{j^*} s_{j^*} \quad (2.1)$$

Hierbei bezeichnet j^* die Indizes der nächsten Nachbarn des i -ten Spins. Bei N Spins und zwei Einstellungsmöglichkeiten pro Spin gibt es 2^N Möglichkeiten die Spins zu verteilen. Die

Frage ist nun, welche der möglichen Konfigurationen vom System realisiert wird. Bei $T = 0$ ist die Frage schnell beantwortet. Der unordnende Parameter in Form der Temperatur fällt weg. Die ferromagnetische Wechselwirkung richtet alle Spins in gleicher Richtung aus. Somit ist eine vollständige Magnetisierung des Stoffes erreicht. Erhöht man die Temperatur auf einen endlichen Wert, muss man den thermischen Erwartungswert berechnen. Dieser ist durch folgende Formel gegeben:

$$\langle A \rangle = \frac{\sum_q A(q) \exp\left(-\frac{H(q)}{k_B T}\right)}{\sum_q \exp\left(-\frac{H(q)}{k_B T}\right)} \quad (2.2)$$

Setzt man für $A = M$ erhält man den Erwartungswert der Magnetisierung. Die Summe über alle q bedeutet eine Summe über alle möglichen Zustände auszuführen. Jeder der Zustände geht mit unterschiedlichen Gewichten in den Erwartungswert ein. In der späteren Simulation werden typischerweise Spingitter in der Größenordnung von (100×100) Spins berechnet. Es wäre äußerst ungeschickt, eine Summe über 2^{10000} Zustände berechnen zu wollen. Aus diesen Gründen gibt es Näherungsverfahren, um Erwartungswerte dieser Form zu berechnen. Im folgenden Kapitel sollen exemplarisch die „Monte Carlo Methoden“ vorgestellt werden.

3. Die Monte Carlo Methode

Monte Carlo Methoden sind Näherungsverfahren, mit denen man Erwartungswerte $\langle A \rangle$ der Form 2.2 berechnen kann. Hier seien zwei Methoden vorgestellt [2]:

1. Simple Sampling Technik
2. Importance Sampling Technik

Die Simple Sampling Technik wählt mittels gleichverteilter Zufallszahlen einige der möglichen Konfigurationen aus und mittelt über diese. Da die Verteilung der Zustände in dem Festkörper einer Boltzmannverteilung genügt, tragen nicht alle Zustände im gleichem Maße zum Erwartungswert bei. Eine Auswahl weniger Konfigurationen per gleichverteilter Zufallszahlen ist aus diesen Gründen wenig sinnvoll. Man müsste schon eine sehr große Anzahl möglicher Konfigurationen nehmen, um gute Resultate zu erhalten. Eine wesentlich

schnellere und bessere Methode den Erwartungswert zu bestimmen, liefert die Importance Sampling Technik. Hier werden auf der Basis der Verteilungsfunktion spezielle Konfigurationen bestimmt. Um das weitere Vorgehen zu verstehen, müssen die Begriffe der „Markov Kette“ und des „ergodischen Systems“ definiert werden.

Definition:

1. Eine Markov Kette ist eine stochastische Folge von Konfigurationen, bei der jedes Element nur vom direkten Vorgänger abhängt.
2. Ein ergodisches System zeichnet sich dadurch aus, dass prinzipiell jeder Zustand von jedem anderen aus erreichbar ist.

(Ein Beispiel zum besseren Verständnis:

Man stelle sich einen Becher mit einem blauen und einem gelben Würfel vor. Man kann nun zwei (wahrscheinlich) verschiedene Zustände herbeiführen, indem man zweimal würfelt. Diese beiden Zustände haben nichts miteinander zu tun. Würfelt man allerdings nur einmal und dreht dann einen der beiden Würfel um, erzeugt man eine Konfiguration, die vom direkten Vorgänger abhängt. Das ist eine Markov Kette. Durch Drehen der Würfel sind alle möglichen Konfigurationen erreichbar. Somit liegt ein ergodisches System vor.)

Man kann für ergodische Systeme zeigen, dass sich durch geeignete Wahl von Übergangswahrscheinlichkeit $P(q_i \rightarrow q_{i+1})$ eine Markov Kette erzeugen lässt, die gegen den Erwartungswert des Systems geht.

Im stationären Zustand muss mit den Verteilungsfunktionen $p_s(q)$ folgende Bilanzgleichung erfüllt sein:

$$p_s(q_i)P(q_i \rightarrow q_{i+1}) = p_s(q_{i+1})P(q_{i+1} \rightarrow q_i) \quad (3.1)$$

Mit der Wahl $P(q_{i+1} \rightarrow q_i) \equiv 1$ erhält man für die Übergangswahrscheinlichkeiten $P(q_i \rightarrow q_{i+1})$ folgenden Ausdruck:

$$P(q_i \rightarrow q_{i+1}) = \begin{cases} \frac{p_s(q_{i+1})}{p_s(q_i)} & : p_s(q_{i+1}) < p_s(q_i) \\ 1 & : \textit{sonst} \end{cases} \quad (3.2)$$

Diese Wahl der Übergangswahrscheinlichkeiten erzeugt eine Markov Kette, die möglichst schnell gegen den Erwartungswert strebt. Die Wahrscheinlichkeit ist auf eins normiert. Deswegen würde ein Bruch, der größer als eins ist, keinen Sinn machen. In *Formel 3.2* ist

dies durch die Einschränkung $p_s(q_{i+1}) < p_s(q_i)$ gewährleistet. Der Erwartungswert selber ergibt sich mit den Elementen K der Markov Kette aus folgender Formel:

$$\langle A \rangle \approx \frac{1}{K} \sum_{i=1}^K A(q_i) \quad \text{für } K \rightarrow \infty \quad (3.3)$$

Mit diesen Ergebnissen kann man durch Einsetzen konkreter Verteilungsfunktionen in *Formel (3.2)* den Erwartungswert der Magnetisierung mittels *Formel (3.3)* berechnen.

Die Umsetzung in einem C-Programm erfolgt über den Metropolis Algorithmus und sei im nächsten Kapitel erläutert.

4. Implementierung des Metropolis Algorithmus

Die Anwendung der Monte Carlo Methode auf das Spingitter erfolgt über den Metropolis Algorithmus. Die Verteilungsfunktion ist hierbei durch die Boltzmannverteilung $p_s(q)$ mit der Zustandssumme Z gegeben. Mit $\beta = 1/kT$ gilt für die Verteilungsfunktion:

$$p_s(q) = \frac{1}{Z} \exp(-\beta E(q)) \quad (4.1)$$

Betrachtet man den Flip eines Spins an der Stelle k so kann man die Wahrscheinlichkeit für diesen Flip $P(-S_k \rightarrow S_k)$ durch Einsetzen von (4.1) in (3.2) berechnen. Einsetzen liefert:

$$P(-S_k \rightarrow S_k) = \begin{cases} \exp(-\beta \Delta E) & : \Delta E > 0 \\ 1 & : \Delta E < 0 \end{cases} \quad (4.2)$$

Das Argument, für diese Simulation ein Näherungsverfahren zu benutzen war, dass es mühselig wäre, die Zustandssumme Z

$$Z = \sum_q \exp(-\beta E(q)) \quad (4.3)$$

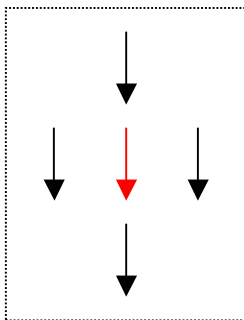
zu berechnen. In *Gleichung (4.2)* sieht man, dass sich die Zustandssumme wegekürzt. Des weiteren erkennt man, dass die Wahrscheinlichkeit eines Flips lediglich von der Energiedifferenz der beiden zu betrachtenden Zustände abhängt. Das bedeutet, dass im

Hinblick auf die Flipwahrscheinlichkeit nur die nächste Umgebung eines Spins von Interesse ist. Die Energiedifferenz ΔE selber kann man mit der Formel

$$\Delta E = 2JS_k \sum_{j^*} S_j \quad (4.4)$$

berechnen. Anschaulich bedeutet *Formel (4.2)*, dass das System versucht, ein Potentialminimum zu erreichen. Ist die Energiedifferenz kleiner als Null, dreht sich der Spin sofort um. Für den Fall, dass sich die Systemenergie erhöhen würde, kommt es auf die Wahrscheinlichkeit an, ob sich der Spin dreht oder nicht. Je höher die Temperatur ist, desto größer ist die Wahrscheinlichkeit, dass das System aus dem Potentialminimum entkommt. In der Simulation selber wird die über den Vergleich des Boltzmannfaktors $\exp(-\beta\Delta E)$ mit einer gleichverteilten Zufallszahl über Flip oder nicht Flip entschieden. Im folgenden seien drei Beispielszenarien vorgestellt:

1.

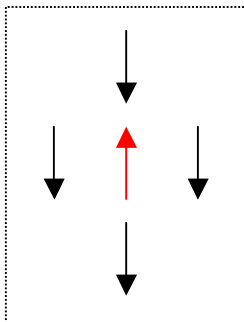


Das System befindet sich eigentlich in einem Potentialminimum. Die Energiedifferenz ΔE ist größer als Null. In solch einer Situation wird über den Vergleich einer gleichverteilten Zufallszahl z mit dem Boltzmannfaktor P

$$P = \exp(-\beta\Delta E)$$

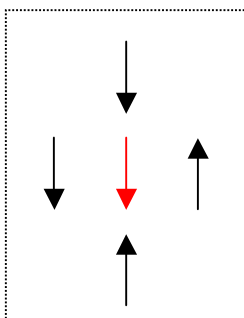
über Flip aufgrund einer thermischen Aktivierung entschieden.

2.



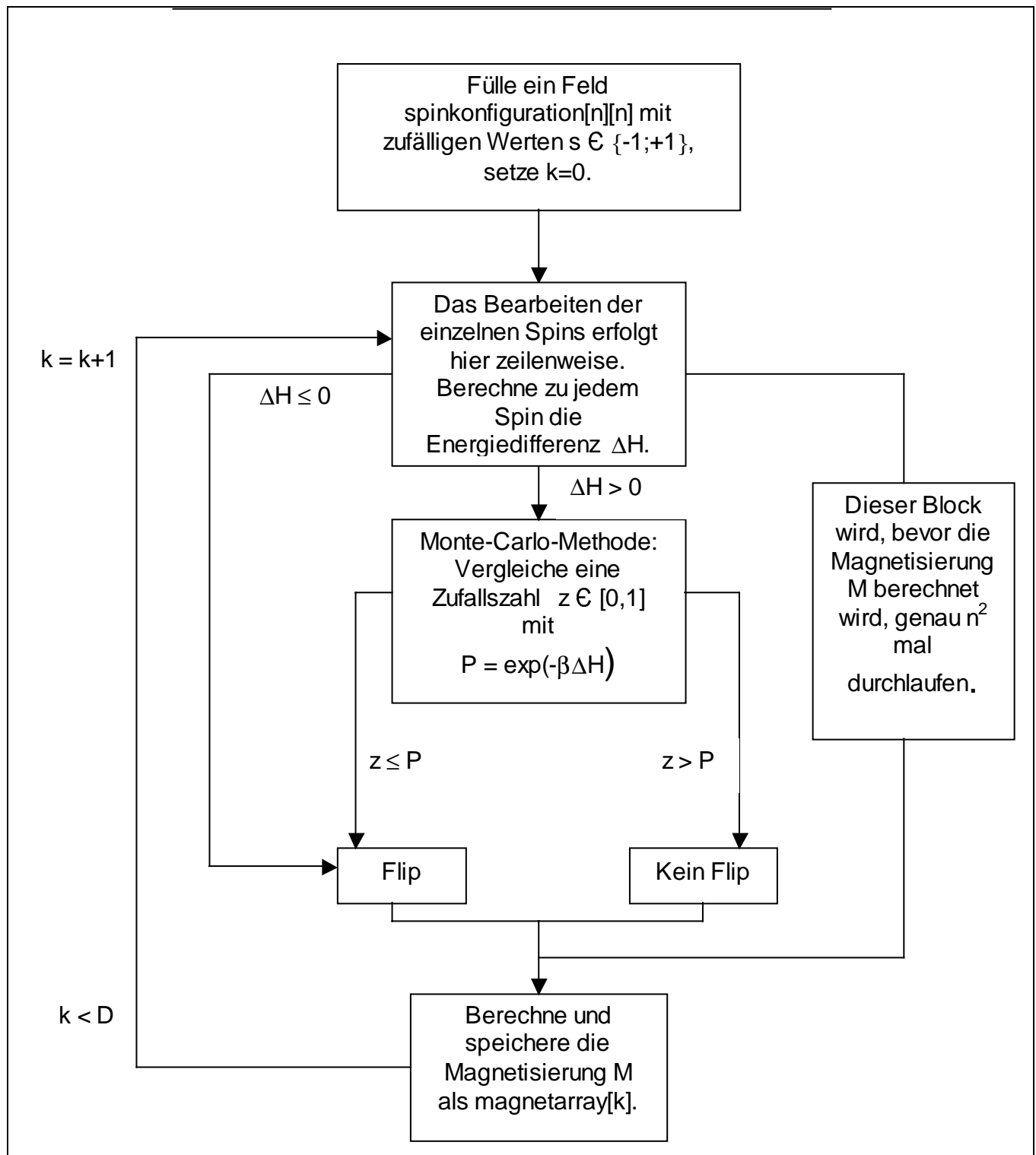
Das System befindet sich hier in einer energetisch ungünstigen Lage. Die Energiedifferenz ΔE ist kleiner als Null. Die Wahrscheinlichkeit, dass sich der rote Spin umdreht, ist gleich eins.

3.



In einer solchen Situation ist es eigentlich egal, ob der Spin flippt oder nicht. Dennoch ergibt sich aus den Gleichungen, dass bei dieser Konstellation auf jeden Fall ein Flip erfolgt.

Der Metropolis Algorithmus ist in folgendem Flussdiagramm (Abb. 4.a) dargestellt. Jeder Durchlauf betrachtet einen anderen Spin, oder ein anderes Glied der Markov Kette.

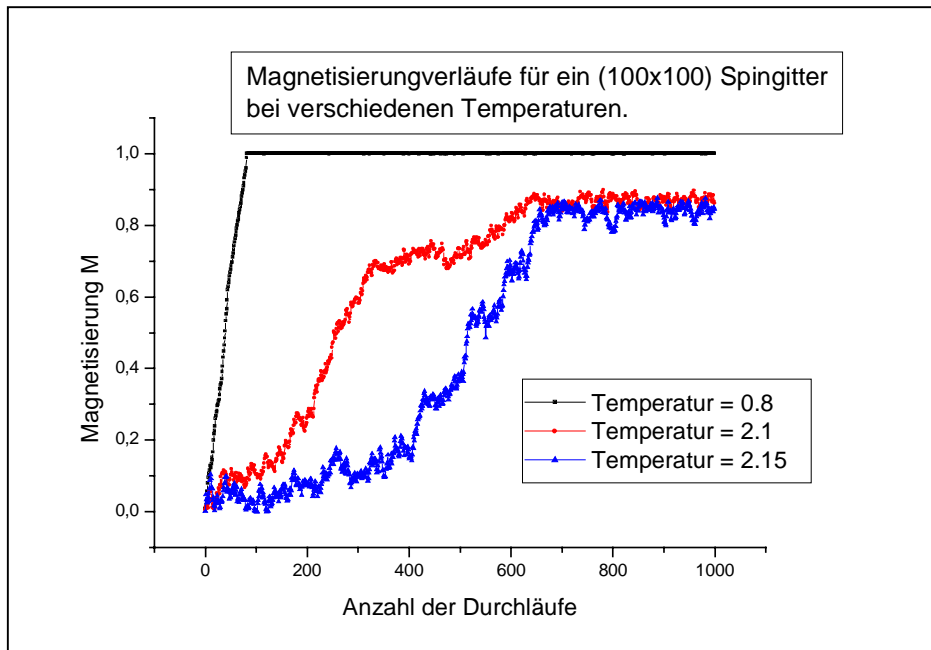


(Abb. 4.a zeigt die Funktionsweise des Metropolis Algorithmus in Form eines Flussdiagramms. Nach diesem Schema funktioniert auch die spätere Simulation.)

Mit diesen Grundlagen gerüstet, werden im nächsten Kapitel die Ergebnisse der Simulation dargestellt.

5. Ergebnisse der Simulation

Der Metropolis Algorithmus liefert pro Durchlauf der n^2 Spins eine Magnetisierung des Spingitters bei einer festen Temperatur T . In *Abbildung 5.a* sind die Magnetisierungsverläufe M für drei unterschiedliche Temperaturen dargestellt. Der Startzustand ist jeweils beliebig. In allen Simulationen wird ein zufällig gewählter Startzustand bearbeitet. Aus diesem Grund ist der Startzustand meist unmagnetisiert.

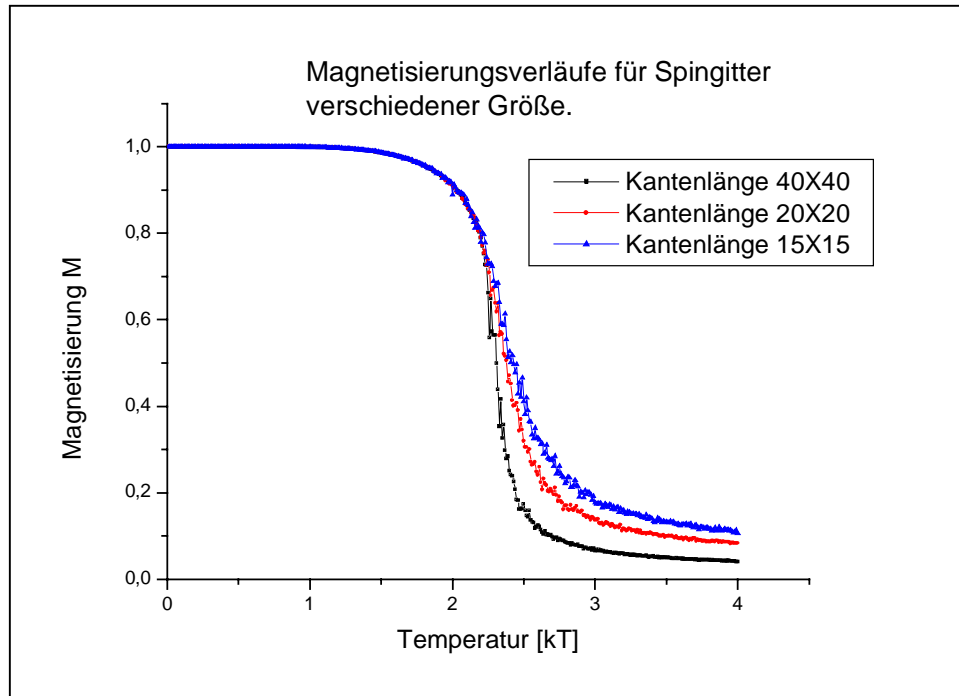


(Abb. 5.a zeigt drei Magnetisierungsverläufe für unterschiedliche Temperaturen im Falle eines (100x100) Spingitters ohne Diagonalkopplung)

Man kann aus dieser Graphik erkennen, dass bei niedrigen Temperaturen der stationäre Zustand schneller erreicht wird als bei hohen Temperaturen. Des weiteren sieht man, dass die erreichte Sättigungsmagnetisierung bei zunehmender Temperatur abnimmt. Nach *Formel 3.3* ergibt sich der Erwartungswert $\langle M \rangle$ aus dem Mittelwert der Elemente der Markov Kette, falls es davon unendlich viele gibt. Dies ist aber nicht der Fall. In den folgenden Betrachtungen wird aus diesen Gründen der „Einschwingvorgang“ abgeschnitten und der Mittelwert aus den Elementen, die im stationären Zustand sind, berechnet. In den folgenden Simulationen ist die Anzahl der Durchläufe wesentlich größer. Typischerweise werden hier ca. 20.000 Durchläufe pro Temperaturwert erfasst.

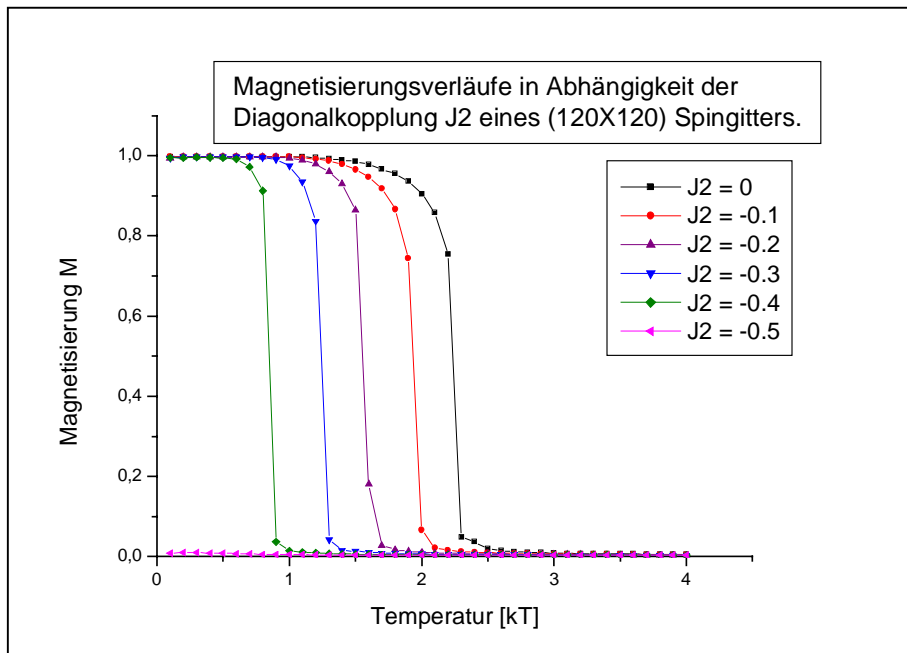
Die Frage, wie die erreichte Sättigungsmagnetisierung in Abhängigkeit der Temperatur verläuft, ist in *Abbildung 5.b* dargestellt. Man erkennt eindeutig die Abnahme der Sättigungsmagnetisierung bei steigender Temperatur. Ferner ist zu bemerken, dass die Systemgröße offenbar bei hohen Temperaturen einen Einfluss auf den Verlauf von $M(T)$ hat.

Um die kritische Temperatur, bei der keine Sättigungsmagnetisierung mehr vorhanden ist zu bestimmen, muss man diesen Zusammenhang herausrechnen. Ein Verfahren, mit dem dieses möglich ist, wird in Kapitel 5 mit dem Konzept der Binder Kumulanten vorgestellt.



(Abb. 5.b zeigt drei Verläufe der erreichten Sättigungsmagnetisierung $M(T)$ für unterschiedliche Systemgrößen)

Ziel dieser Arbeit ist es, eine Aussage über die Lage der kritischen Temperatur in Abhängigkeit einer antiferromagnetischen Diagonalkopplung zu gewinnen. Dazu kann man in *Abbildung 5.c* erste Ergebnisse festhalten. Hier ist die Sättigungsmagnetisierung $M(T)$ für fünf unterschiedliche Diagonalkopplungen (von 0 bis $-0,5$) im Falle eines (120×120) großen Spingitters aufgetragen. Man erkennt, dass die kritische Temperatur T_C linear mit der Diagonalkopplung J_2 abnimmt. Zwischen den Werten $-0,4$ und $-0,5$ jedoch verschwindet die kritische Temperatur sehr rasch. Um genauere Aussagen zu erhalten sei im folgenden Kapitel das Konzept der Binder Kumulanten vorgestellt.



(Abb. 5.c zeigt fünf Magnetisierungsverläufe $M(T)$ für unterschiedliche Diagonalkopplungen J_2 .)

6. Die Binder Kumulante

Das Konzept der Binder Kumulanten dient der genaueren Bestimmung der kritischen Temperatur. Sie ist durch folgenden Ausdruck definiert [3],[4]:

$$U = 1 - \frac{\langle M^4 \rangle}{3\langle M^2 \rangle^2} \quad (6.1)$$

Die Binder Kumulante U hat die Eigenschaft, dass sie unterhalb der kritischen Temperatur T_C konstant den Wert $2/3$ annimmt. Dies liegt daran, dass sich die Erwartungswerte um M_0 und $-M_0$ befinden und sich in (6.1) herauskürzen. Bei Temperaturen oberhalb der kritischen Temperatur beschreibt die Verteilung der Magnetisierungswerte allerdings eine Gaußkurve $P(M)$ um die Nulllage. Für eine auf Eins normierte Gaußkurve $P(S)$ gilt allgemein:

$$P(s) = \sqrt{\frac{K}{2\pi}} e^{-K \frac{s^2}{2}} \quad (6.2)$$

Für die Erwartungswerte $\langle s^2 \rangle$ und $\langle s^4 \rangle$ erhält man damit:

$$\begin{aligned}\langle s^2 \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} ds s^2 P(s) = \frac{1}{K} \\ \langle s^4 \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} ds s^4 P(s) = \frac{3}{K^2}\end{aligned}\tag{6.3}$$

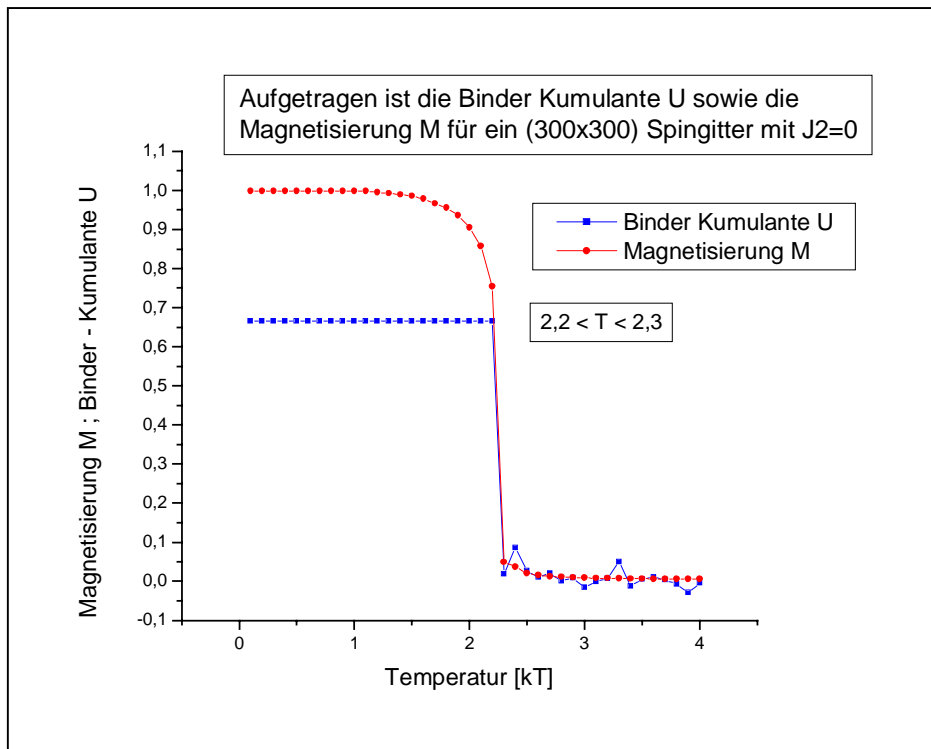
Damit folgt:

$$\frac{\langle s^4 \rangle}{\langle s^2 \rangle^2} = 3\tag{6.4}$$

Bei Temperaturen oberhalb der kritischen Temperatur kürzen sich die Erwartungswerte nicht heraus. Durch die Wahl der Konstanten verschwindet die Binder Kumulante also an dieser Stelle. Für die Binder Kumulante folgt somit [3],[4]:

$$U \rightarrow \begin{cases} \frac{2}{3} & : T < T_C \\ 0 & : T > T_C \end{cases}\tag{6.5}$$

Der Verlauf der Binder Kumulante ist in *Abbildung 6.a* für ein (300x300) Spingitter dargestellt. Man erkennt deutlich den raschen Abfall der Binder Kumulanten bei $2,2 < T_C < 2,3$. Dieses Verfahren liefert bis jetzt eine Abschätzung der Lage der kritischen Temperatur auf eine Nachkommastelle genau. Da bisher die Diagonalkopplung keine Rolle spielt, kann man den Wert mit dem analytisch berechneten vergleichen, der bei $T_C = 2,269185$ liegt (vgl. [1]).

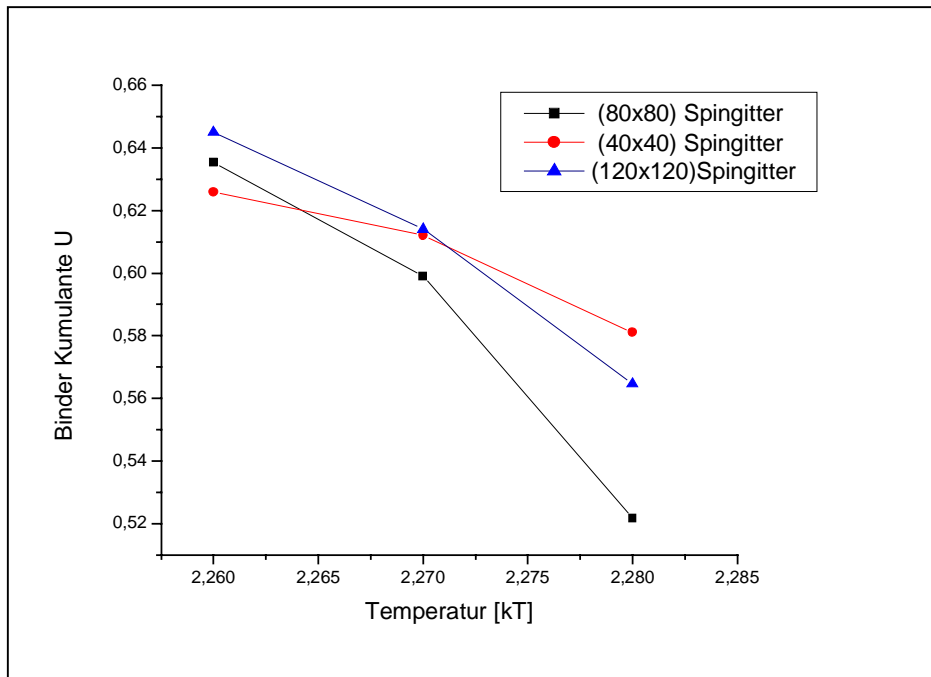


(Abb. 6.a zeigt den Verlauf der Binder Kumulanten für ein (300x300) Spingitter. Eine erste Abschätzung für die kritische Temperatur liefert: $2,2 < T_C < 2,3$)

Der Verlauf der Binder Kumulanten ist abhängig von der Systemgröße. Bei kleineren Systemen ist der Verlauf etwas ausgewaschen. Die Binder Kumulante fällt früher ab und erreicht die Nulllage später als bei größeren Systemen. Diese Tatsache erlaubt es, für verschiedene Systemgrößen einen Schnittpunkt der Verläufe zu bestimmen, der die Lage der kritischen Temperatur angibt, die eigentlich unabhängig von der Systemgröße sein sollte. Diese Unabhängigkeit ist allerdings erst bei sehr großen Systemen gegeben. Mit der Binder Kumulanten kann man somit viel Rechenzeit sparen. Im nächsten Kapitel werden die Ergebnisse, die mit den vorgestellten Konzepten erzielt worden sind, dargestellt.

7. Auswertung

Mit den soeben gewonnenen Erkenntnissen kann man die Binder Kumulante für drei relativ kleine Systemgrößen berechnen. Das Ergebnis ist in *Abbildung 7.a* dargestellt.

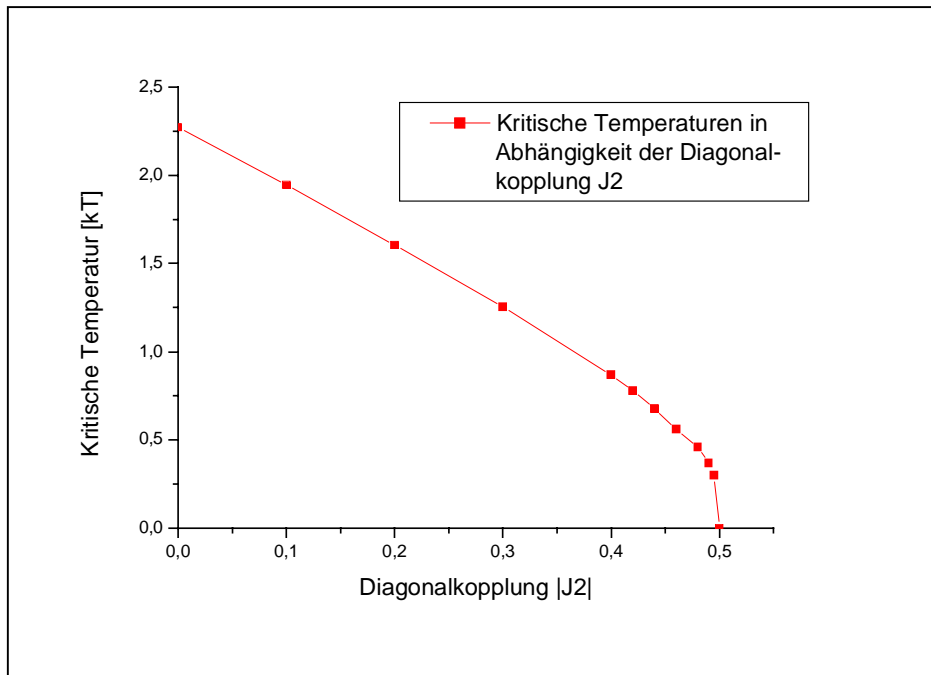


(Abb. 7.a zeigt den Verlauf der Binder Kumulanten in der Nähe von T_C für unterschiedliche Systemgrößen bei verschwindender Diagonalkopplung.)

Hier und auch in den nächsten Berechnungen ist jeweils der Schnittpunkt des größten mit dem kleinsten System als kritische Temperatur gewählt worden. Der Abstand zu den anderen Schnittpunkten wurde als Abschätzung für einen Fehler benutzt. Der hier ermittelte Wert der kritischen Temperatur T_C liegt bei $T_C = 2,271$. Ein Vergleich mit dem analytisch berechneten Wert $T_{C,lit} = 2,269185$ [1] liefert ein befriedigendes Resultat, insbesondere da dieser Wert zwischen den beiden Schnittpunkten liegt, was in *Abbildung 7.a* deutlich zu erkennen ist.

Mit dieser Methode können nun die kritischen Temperaturen in Abhängigkeit der Diagonalkopplung bestimmt werden. Die Ergebnisse sind in *Abbildung 7.b* dargestellt. Wie in Kapitel 5 schon vermutet, nimmt die kritische Temperatur mit zunehmender Diagonalkopplung zunächst linear ab und fällt bei dem Wert von $J_2 = -0,48$ rasch auf Null ab. Der Wert $-0,5$ scheint tatsächlich der kritische Wert zu sein, bei dem die kritische Temperatur vollständig verschwindet. Dass die kritische Temperatur T_C mit zunehmender negativer Diagonalkopplung abnimmt begründet sich darin, dass zu dem unordnenden Parameter der

Temperatur auch der unordnende Parameter der Diagonalkopplung hinzu kommt. Es steht also 2:1 für die Größen, die der spontanen Magnetisierung entgegenwirken.



(Abb. 7.b zeigt den Verlauf der kritischen Temperaturen in Abhängigkeit der Diagonalkopplung J_2 .)

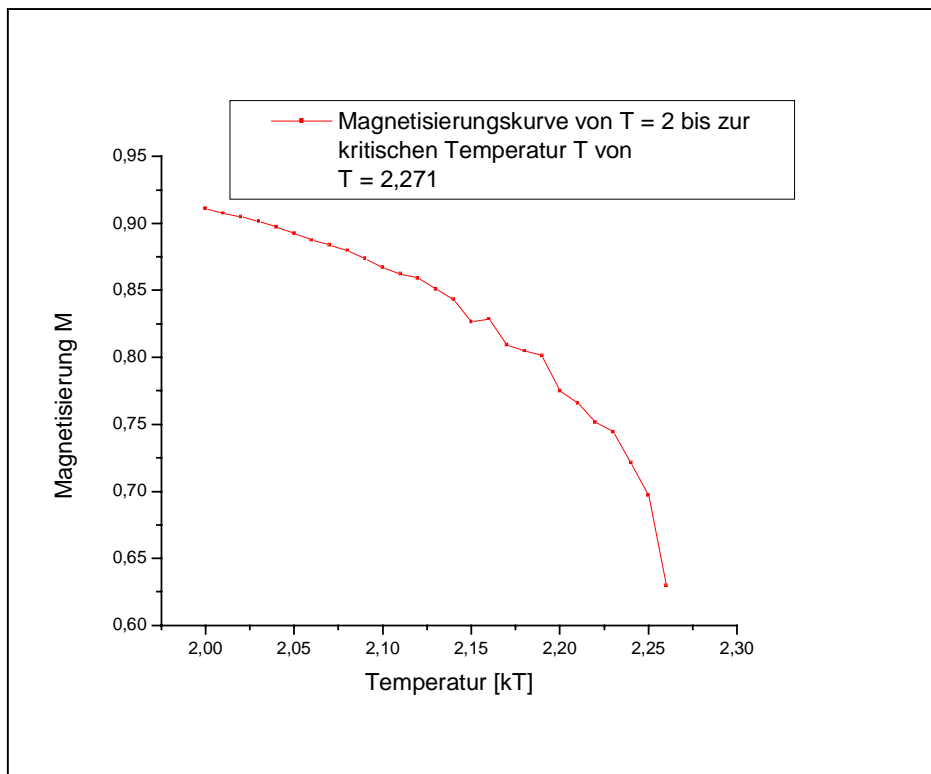
Der Verlauf der Sättigungsmagnetisierung in Abhängigkeit der Temperatur folgt in der Nähe der kritischen Temperatur $T < T_C$ einem Potenzgesetz. Den Exponenten, der dieses Verhalten beschreibt, bezeichnet man als kritischen Exponenten. In *Abbildung 7.c* ist der Verlauf für diesen Bereich bei verschwindender Diagonalkopplung dargestellt.

Setzt man für den Verlauf der Magnetisierung $M(T)$ einen Potenzansatz an, folgt nach Umformung:

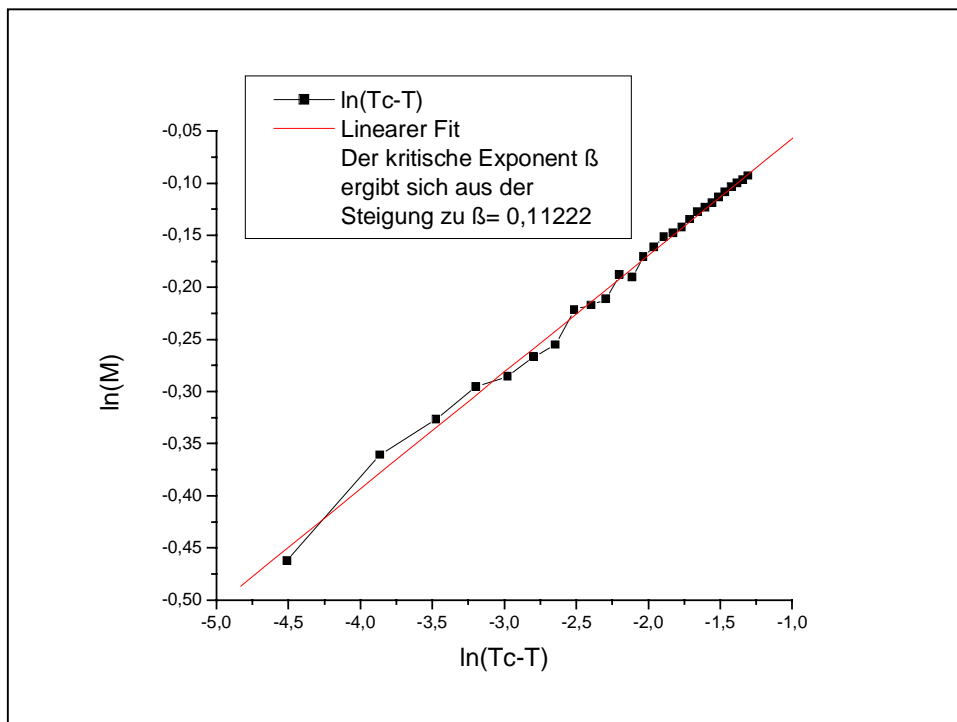
$$M(T) \propto (T_C - T)^\beta \quad \Bigg| \quad \ln(\) \quad (7.1)$$

$$\ln(M(T)) = \beta \cdot \ln(T_C - T) + C$$

Bei einer logarithmischen Auftragung ergibt sich der kritische Exponent β aus der Steigung der entstehenden Geraden. In *Abbildung 7.d* ist das Ergebnis dargestellt.



(Abb 7.c zeigt den Verlauf der Sättigungsmagnetisierung in der Nähe der kritischen Temperatur T_c .)



(Abb. 7.d zeigt den Verlauf der Sättigungsmagnetisierung in logarithmischer Auftragung. Die Steigung der Geraden liefert den kritischen Exponenten.)

Der kritische Exponent β , welcher von der Größe der Diagonalkopplung unabhängig ist, ergibt sich zu $\beta = 0,112$. Der Literaturwert β_{lit} beträgt $\beta_{lit} = 0,125 = 1/8$ [1]. Auch dieses ist im Rahmen dieser Simulation ein befriedigendes Ergebnis.

8. Zusammenfassung

In dieser Arbeit sollte das Verhalten zweidimensionaler ferromagnetischer Stoffe simuliert werden. Insbesondere wurde dabei die spontane Magnetisierung betrachtet, welche ihren Ursprung in der ordnenden Wechselwirkung der einzelnen Gitteratome untereinander hat. Neben der Wechselwirkung ist die Temperatur des Stoffes dafür verantwortlich, dass nicht alle Spins der Gitteratome parallel ausgerichtet sind. Mit der Einführung einer antiferromagnetischen Diagonalwechselwirkung ist das Problem nicht mehr analytisch lösbar. Zur mathematischen Beschreibung wurde das Ising Modell benutzt. Die Simulation als solche erfolgte über eine Monte Carlo Methode, welche in dem Metropolis Algorithmus in einem C-Programm umgesetzt wurde. Zum Vergleich seien hier noch mal die Ergebnisse gezeigt, die mit einer analytischen Lösung verglichen werden können:

<u>J2=0</u>	Kritische Temperatur	Kritischer Exponent
analytisch	2,269185	0,125
Simulation	2,271	0,11222

Literarnachweis:

- [1]: „Statistical Mechanics“, Kerson Huang, John Wiley & Sons, Inc., New York – London
- [2]: „Monte-Carlo-Simulation des Ising-Modells“
Felix Hagemann, 26.Juli 2001
- [3]: K.Binder, Finite Size Scaling Analysis of Ising Model Block Distribution
Funktions, Z.Phys B43 (1981) 119 – 140
- [4]: „Monte Carlo Simulation in statistical Physiks“, K. Binder, D.W. Heermann
ISBN: 3-540-19107-0 Springer-Verlag Berlin Heidelberg New York
- [5]: „Introduction to Computer Simulation Methods“, Harvey Gould, Benjamin
Cummings, ISBN: 0-201-50604-1, 30.08.1995