

Protokoll

Physikalisch-Chemisches Praktikum für Fortgeschrittene

K. B.
Matthias Ernst
Gruppe 11

Datum des Praktikumstags: 15.11.2007
Protokoll-Datum: 20.11.2007
Assistent: K. Fink

Testat:

7. Versuch (C2) - Monte-Carlo Simulationen eines Ferromagneten im Rahmen des Ising-Modells

Aufgabenstellung

Zunächst soll qualitativ das Verhalten eines zweidimensionalen Ferromagneten im Rahmen des Ising-Modells untersucht werden, wobei der Einfluss des Magnetfelds und der Kopplungsstärke variiert werden und durch Wahl der Randbedingungen Spinfrustration simuliert wird.

Dann wird der Phasenübergang in einem zwei- und dreidimensionalen Ferromagneten quantitativ untersucht, wobei im Falle des zweidimensionalen noch unterschiedliche Kopplungsstärken berücksichtigt werden.

Theoretischer Hintergrund

Das Verhalten von Stoffen, in denen ungepaarte Spins und somit ein i.d.R. nicht verschwindender Gesamtspin auftreten, lässt sich in mehrere Klassen einteilen:

- Wenn die Spins nicht miteinander wechselwirken, spricht man von Paramagnetismus. Dabei sind die Spins im Normalfall ungeordnet, können sich aber in einem angelegtem Magnetfeld ausrichten.
- Wenn sich die Spins unterhalb einer bestimmten Temperatur (der Néel-Temperatur) antiparallel ausrichten, spricht man von Antiferromagnetismus. Im Extremfall heben sich dabei alle Spins gegenseitig auf, sodass die Gesamtmagnetisierung verschwindet. Falls eine ungerade Anzahl Spins im Systems vorhanden ist, können sich nicht alle antiparallel zu allen anderen ausrichten, weshalb der energetische Grundzustand nicht erreicht werden kann und ständig einzelne Spins umklappen.
- Beim Ferromagnetismus richten sich unterhalb einer bestimmten Temperatur (der Curie-Temperatur) die Spins parallel aus, darüber verhält sich der Stoff paramagnetisch. Dieser Übergang wird im Folgenden näher betrachtet.

In Festkörpern kann man die Spins quantenmechanisch mit einem Hamiltonoperator beschreiben:

$$\hat{H} = - \sum_{i,j \neq i} J_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - \vec{H} \sum_i \vec{S}_i \quad (1)$$

Dabei wird von einem regelmäßigen Gitter ausgegangen, wobei an jedem Zentrum i und j im Gitter ein Spin S_i bzw. S_j lokalisiert ist. Die Größe J_{ij} beschreibt die Wechselwirkung zweier Spins im Gitter. Der

Protokoll

Physikalisch-Chemisches Praktikum für Fortgeschrittene

zweite Summenterm beschreibt die Wechselwirkung der Spins mit einem externen Magnetfeld H . Im Fall $J_{ij} > 0$ ist eine parallele Anordnung der Spins energetisch günstiger, es liegt also Ferromagnetismus vor. Im Fall $J_{ij} < 0$ ist dagegen die antiparallele Anordnung günstiger, es liegt Antiferromagnetismus vor. Falls $J_{ij} = 0$, koppeln die Spins nicht miteinander und der Stoff ist rein paramagnetisch.

Das im Rahmen dieses Versuches angewendete Isingmodell geht davon aus, dass jeder Spin nur mit den Spins an den nächstbenachbarten Zentren wechselwirken kann und dass diese Wechselwirkung für alle Spins gleich groß ist. Außerdem sind alle Spins parallel zur z-Achse orientiert und können sich entweder parallel oder antiparallel dazu ausrichten:

$$\hat{H} = -J \sum_{i,j \neq i} \vec{S}_i^z \vec{S}_j^z - \vec{H} \sum_i \vec{S}_i^z \quad (2)$$

Im Rahmen des Isingmodells lässt sich ein Ferromagnet im eindimensionalen Fall (von Ising selbst, es tritt kein Übergang ferromagnetisch – paramagnetisch auf) sowie im zweidimensionalen Fall (von Onsager, es tritt ein solcher Übergang auf) exakt lösen. Im dreidimensionalen Fall ist dies allerdings nicht möglich.

Daher wird das Verfahren der Monte-Carlo-Simulation verwendet, um die Lösung numerisch näherungsweise zu ermitteln.

Konkret werden die Gesamtenergie E sowie die Gesamtmagnetisierung M betrachtet:

$$E = \frac{\langle \hat{H} \rangle_T}{N} \quad \text{und} \quad M = \frac{\langle \sum_i S_i^z \rangle_T}{N} \quad (3) \text{ und } (4)$$

Die Mittelungen müssten eigentlich nach der Boltzmann-Mittelung berechnet werden (hier für eine beliebige Größe A , die vom Vektor \vec{x} aller Spins abhängt, angegeben):

$$\langle A(\vec{x}) \rangle_T = \frac{\sum_{\vec{x}} e^{\left(\frac{-E(\vec{x})}{k_B T}\right)} A(\vec{x})}{\sum_{\vec{x}} e^{\left(\frac{-E(\vec{x})}{k_B T}\right)}} \quad (5)$$

Bei sehr großen Systemen ist diese Summe aber nur unter sehr großem Aufwand bzw. überhaupt nicht mehr exakt berechenbar. Daher wird nicht mehr über alle möglichen Konfiguration gemittelt, sondern nur über eine noch gut zu berechnende Anzahl.

Dafür können einerseits zufällige Konfigurationen der Spins verwendet und gemittelt werden (dies bezeichnet man als „simple sampling“). Andererseits können die Konfigurationen auch entsprechend ihrer Wahrscheinlichkeit in der Boltzmann-Mittelung ausgewählt und gemittelt werden („importance sampling“).

Versuchsdurchführung

Die Simulationen wurden mit einem Java-Programm (dessen Name, da es ursprünglich ein Java-Applet war, nicht bekannt ist) durchgeführt. Die variierbaren Parameter sind die Anzahl der Gitterpunkte in x-, y- und z-Richtung, die Temperatur sowie ein prozentuales Temperaturgefälle, die Stärke der Kopplung sowie die Periodizität des Gitters in den drei Raumrichtungen.

Das Programm erzeugte eine Ausgabedatei, die unten ausgewertet wurde.

Zunächst wurden qualitative Untersuchungen durchgeführt.

Protokoll

Physikalisch-Chemisches Praktikum für Fortgeschrittene

- 1) Dazu wurde zunächst ein in x- und y-Richtung periodisches Gitter mit $20 \times 20 \times 1$ ($X \times Y \times Z$) Punkten ab 100K simuliert, wobei die Temperatur in 10%-Schritten gesenkt wurde. Dies wurde mehrfach wiederholt.
- 2) Es wurde ein Magnetfeld in x-, y- und schließlich in z-Richtung angelegt und wie bei 1) verfahren.
- 3) Die Kopplungsstärke wurde vergrößert und verkleinert, auch negative Werte wurden gewählt und wieder wie bei 1) verfahren.
- 4) Zur Simulation von Spinfrustration wurde die Gittergröße auf $21 \times 21 \times 1$ Punkte verändert (x und y wurden periodisch belassen) und die Simulation wieder mehrfach durchgeführt.

Dann wurden folgende quantitativen Untersuchungen durchgeführt:

- 5) Es wurde ein Gitter mit $10 \times 10 \times 1$ Punkten, periodisch in x und y angelegt und die Simulation bei einer Temperatur von $T=100\text{K}$ und mit $J=10$ gestartet. Nachdem einige Werte in die Datei geschrieben worden waren, wurde die Temperatur sukzessive in 10K-Schritten gesenkt, bis entweder alle Spins parallel ausgerichtet waren oder $T=0\text{K}$ erreicht war.
- 6) Schritt 5) wurde wiederholt, allerdings mit $J=4$ und $J=20$.
- 7) Ein dreidimensionaler Isingmagnet mit $10 \times 10 \times 4$ Punkten (in allen Richtungen periodisch) wurde angelegt und mit $J=10$ wie bei Schritt 5) verfahren.

Für die hier aufgeführten Messwerte wurden der Mittelwert aus den Beträgen von je 15 einzelnen Werten zu jeder Temperatur berechnet:

T [K]	$ S_z $			
	J=4	J=10	J=20	J=10, 3D
100	7,6	8,9	14,1	20,9
90	8,0	9,1	18,1	35,5
80	7,7	6,8	14,0	28,6
70	6,7	12,9	16,3	24,0
60	7,5	12,1	30,9	34,2
50	8,7	13,5	52,5	40,4
40	9,4	19,3	88,4	53,4
30	10,8	24,4	99,2	342,7
20	16,9	91,5	100,0	391,4
10	60,9	100,0	100,0	400,0
0	99,9	100,0	100,0	400,0

Tabelle 1: Messwerte

Auswertung

- 1) Zu Beginn sind die Spins offenbar zufällig verteilt und können aufgrund der thermischen Energie ihre Richtung umdrehen ("Spinflip"). Bei Absenkung der Temperatur treten zunächst Bereiche gleicher Spinanordnung auf, die sich allmählich vergrößern. Im Endzustand sind meistens alle Spins gleich ausgerichtet, die Richtung (+z oder -z) variiert allerdings. Diese Zustände sind die energetisch günstigsten, allerdings energiegleich, daher würde man eine 50:50-Verteilung erwarten. Manchmal treten auch bei $T=0\text{K}$ "Streifen", also zusammenhängende Bereiche gleicher Spins und ähnlicher Größe auf, ohne dass alle Spins gleich ausgerichtet sind. Dies rührt daher, dass schon zusammenhängende Bereiche energetisch begünstigt sind und ab einer bestimmten Temperatur die Energie nicht mehr ausreicht, um diese Bereiche komplett zu flippen, daher "frieren sie ein".
Insgesamt ist dies auch das Verhalten, was man von einem Ferromagneten erwartet.

Protokoll

Physikalisch-Chemisches Praktikum für Fortgeschrittene

- 2) Bei Anlegen eines Magnetfeldes in x- oder y-Richtung tritt kein Effekt auf, da das Magnetfeld orthogonal zu den Spins ausgerichtet ist und somit keinen Einfluss auf sie ausüben kann. Wird ein Magnetfeld in z-Richtung angelegt, so wird die Ausrichtung der Spins in Richtung des Magnetfelds begünstigt und die Spins richten sich schneller entlang des Magnetfelds aus. Die Einstellung entgegen dem Magnetfeld ist hingegen ungünstig und tritt faktisch nicht auf.
- 3) Bei stärkerer Kopplung zwischen den Spins erfolgt die Teilordnung in einzelne Bereiche wesentlich schneller. Allerdings wird die komplette Gleichordnung schwieriger erreicht, da es ja aufgrund der starken Kopplung noch mehr Energie bräuchte, komplette Bereiche zu flippen als bei schwächerer Kopplung. Bei negativer Kopplung ordnen sich die Spins antiparallel an, wie man es von Antiferromagneten erwartet. Verkleinert man die Kopplungsstärke weiter (erhöht also den Betrag bei negativem Wert), so erfolgt die Einstellung wiederum schneller.
- 4) Bei ungerader Anzahl an Gitterpunkten erfolgt im periodischen Gitter bei negativer Kopplungskonstanten tatsächlich Spinfrustration: die Spins ordnen sich weitgehend parallel an, eine völlige Antiparallelstellung ist aber nicht möglich, da die Spins am einen Rand ja auch mit denen auf der anderen Seite koppeln. Daher flippen immer noch einzelne Spins, es herrscht immer "Bewegung" im Gitter. Wird die Periodizität abgeschaltet, so ist eine völlige Antiparallelstellung wieder möglich, diese tritt auch ein, aber nach recht langer Zeit.
- 5) Die Mittelwerte der Gesamtmagnetisierung sind in Tabelle 1 aufgeführt. Im folgenden Schaubild sind die Messreihen für $J=4$, $J=10$, $J=20$ (auf der Achse links) sowie den 3D-Isingmagneten mit $J=10$ (auf der Achse rechts) aufgetragen.

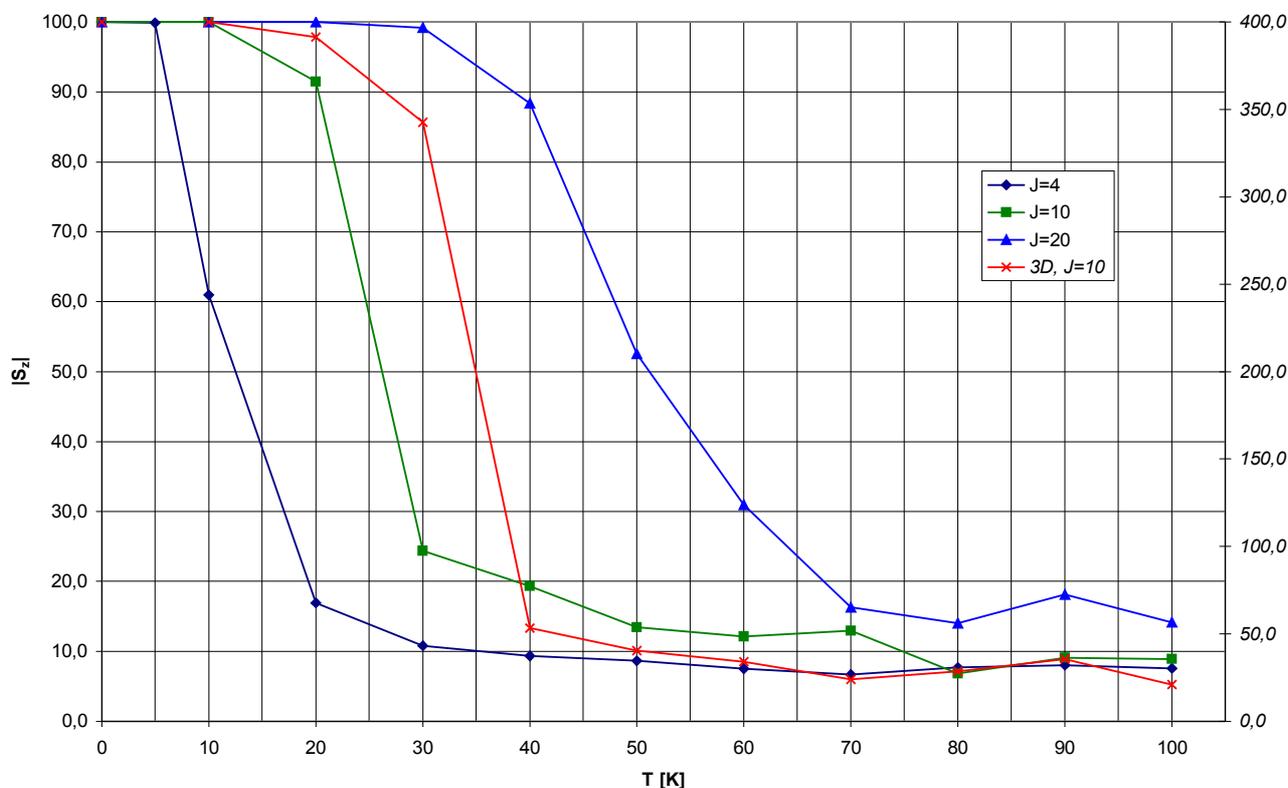


Abbildung 1: Auftragung der Messwerte gegen die Temperatur

Protokoll

Physikalisch-Chemisches Praktikum für Fortgeschrittene

Aus dem Schaubild lassen sich folgende Phasenübergänge ungefähr abschätzen:

J	T _{Phasenübergang} [K]
4	12
10	26
20	52
3D, 10	35

Der Phasenübergang des 3D-Isingmagneten erfolgt also bei gleicher Kopplungsstärke bei deutlich höherer Temperatur als beim 2D-Magneten.

Vermutet werden könnte auch ein linearer Verlauf der Temperatur des Phasenübergangs mit der Kopplungsstärke, um dies zu belegen, reicht allerdings die Anzahl der verschiedenen Messreihen nicht aus.

Fehlerbetrachtung und Diskussion

Durch das prinzipielle Modell (das Ising-Modell selbst) entsteht bereits ein gewisser Fehler, da ja die Mittelung nicht über alle möglichen Konfigurationen durchgeführt wird, sondern nur über einen Teil. Außerdem können die Werte erheblich schwanken, je nachdem, von welcher Startkonfiguration ausgegangen wird und wie im Folgenden die Wechselwirkungen auftreten. Durch die zufällige Wahl der Startparameter entsteht also eine gewisse Schwankung der Werte.

Auch sind die Werte, die hier verwendet wurden, mehr oder weniger willkürlich herausgepickte, besser wäre es, eine größere Menge an Werten zu verwenden, am Besten alle, die das Programm in einer bestimmten Zeit produziert (in die Datei wird ja auch nur der Wert bestimmter Schritte und nicht der Mittelwert der Schritte dazwischen ausgegeben).

Und schließlich sind die Temperaturen der Phasenübergänge aus dem Schaubild nur grob abgeschätzt, für eine genauere Angabe würden im Bereich des Sprunges feiner aufgelöste Werte benötigt. Insbesondere im Fall $J=4$ ist offenbar ein Wert schon recht nah am Sprung (oder es wurden zufälligerweise "ungünstige" Werte für die Berechnung verwendet).

Hiermit bestätige ich, dass ich das Protokoll eigenständig geschrieben habe.

Karlsruhe, den _____ 2007

Matthias Ernst