مونت کارلو در فیزیک آماری (مدل آیزینگ)

مقدمه:

یک حالت ترمودینامیکی (Macrostate) ممکن است که از تعداد زیادی حالت‌های میکرو (Microstate) تشکیل شده باشد.

یک مثال ساده از مفهوم میکرو حالت را می‌توان با مثال زیر بیان کرد:
فرض کنید که ۴ اسپین مغناطیسی اتمی داریم که در یک میدان B قرار دارند، انرژی این 4 اسپین به صورت زیر خواهد بود:

$$E = -\mu B \sum s_i \qquad s_i = \pm 1$$

برای مثال اگر سه اسپین بالا و یک اسپین پایین باشد، تعداد حالت‌های میکرو به صورت زیر خواهد شد:

$$\left.\begin{array}{cccc} \downarrow & \uparrow & \uparrow & \uparrow \\ \uparrow & \downarrow & \uparrow & \uparrow \\ \uparrow & \uparrow & \downarrow & \uparrow \\ \uparrow & \uparrow & \uparrow & \downarrow \end{array}\right\}$$

۴ میکرو حالت که همگی دارای انرژی $E = -2\mu B$ هستند

می‌توان نشان داد که در یک سیستم که با محیط اطراف در دمای T به تعادل ترمودینامیکی رسیده است، احتمال اینکه یک میکرو حالت با انرژی E_s وجود داشته باشد متناسب است با:

$$P_s \propto e^{-E_s/k_B T} = e^{-\beta E_s} \quad , \quad \beta = \frac{1}{k_B T}$$

یا

$$P_s = \frac{e^{-E_s/k_B T}}{\sum_s e^{-E_s/k_B T}}$$

جمع روی تمام میکرو حالت‌های در دسترس سیستم

هر خاصیت سیستم (مثلاً A که به عنوان یک کمیت فیزیکی در نظر گرفته شود) به صورت زیر بدست می آید:

$$\langle A \rangle = \sum P_s A_s$$

$$= \frac{\sum_s A_s e^{-\beta E_s}}{\sum_s e^{-\beta E_s}}$$

جمع بر روی تمام حالت ها

برای اینکه ما بتوانیم یک خاصیت سیستم را بدست آوریم باید جمع بر روی تمام حالت های قابل دسترس بزنیم ولی اینکار از لحاظ عملی غیرممکن است و بنابراین:

$$\langle A \rangle \simeq A_m = \frac{\sum_{s=1}^{m} A_s e^{-\beta E_s}}{\sum_{s=1}^{m} e^{-\beta E_s}}$$

اینجاست که می توانیم از مفاهیم مونت کارلوی که تا به حال یاد گرفته ایم استفاده کنیم. در حقیقت اگر حالت های پر اهمیت تر را بیشتر انتخاب کنیم لازم نیست که روی تعداد تقریباً بی نهایت میکرو حالت یک سیستم جمع ببندیم. بنابراین کافی است:

$$A_m = \sum_{s=1}^{m} A_s$$

A_s ها با استفاده از نمونه گیری با اهمیت یا همان متروپولیس انتخاب شده است

بنابراین روش (مونت کارلو) متروپولیس را می‌توان در هر جایی که مکانیک آماری وارد می‌شود، استفاده کرد. موارد استفاده از روش مونت کارلو در مکانیک آماری بسیار زیاد است. یکی از ساده‌ترین مثال‌های استفادهٔ روش مونت کارلو در مدل سادهٔ آیزینگ دو بعدی است.

مدل آیزینگ (Ising)

مدل آیزینگ اولین بار برای توصیف گذار فاز پارامغناطیس به فرومغناطیس توسط لنز (Lenz) مطرح شد و توسط آیزینگ (Ising)، شاگرد لنز، مورد بررسی قرار گرفت. این مدل بسیار ساده است، در این مدل انرژی مجموعه اسپین‌ها در یک شبکه به صورت زیر نوشته می‌شود:

$$E = -J \sum_{\langle ij \rangle}^{N} S_i S_j - B \sum_{i=1}^{N} S_i$$

که علامت $\langle ij \rangle$ یعنی جمع روی همسایه‌های اول. S_iها می‌توانند مقادیر $S_i = \pm 1$ را به خود بگیرند و B میدان است. J قدرت برهمکنش بین اسپین‌ها است.

برای مثال اگر $B=0$ برای دو اسپین S_1 و S_2 برای انرژی رابطهٔ زیر را خواهیم داشت:

$$E = -J S_1 S_2 \begin{cases} S_1 = S_2 = 1 & E = -J \\ S_1 = +1, S_2 = -1 & E = +J \end{cases}$$

همانطور که مشاهده می‌کنیم برای یک سیستم فرومغناطیس باید $J > 0$ باشد تا حالت‌هایی که بیشتر اسپین‌ها در آن هم جهت باشند، حالت پایدارتری باشد.

چند کمیت فیزیکی مفید را می توان در این مدل محاسبه کرد:

۱- $\langle M \rangle$: مقدار مغناطش سیستم

۲- χ : پذیرفتاری مغناطیسی (Suscebtibility)

۳- C : ظرفیت گرمایی

این کمیت ها به صورت زیر تعریف می شوند:

تعداد اسپین‌های سیستم

$$M = \sum_{i=1}^{N} s_i \longrightarrow \langle M \rangle = \left\langle \sum_{i=1}^{N} s_i \right\rangle$$

پذیرفتاری مغناطیسی:

$$\chi = \left. \frac{\partial \langle M \rangle}{\partial B} \right|_{B=0}$$

ظرفیت گرمایی:

$$C = \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial T}$$

می توان نشان داد که:

$$C = \frac{1}{k_B T^2} \left(\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2 \right)$$

$$\chi = \frac{1}{k_B T} \left(\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2 \right)$$

برای بدست آوردن معادلات بالا چنین عمل می‌کنیم :

انرژی میکروحالت s وقتی میدان وجود ندارد

$$E_s = E_{0s} - B M_s$$ (طبق معادله $E = -J\sum s_i s_j - B\sum s_i$)

M_s: مغناطش میکروحالت s

$$\langle M \rangle = \frac{\sum M_s e^{-\beta E_s}}{\sum e^{-\beta E_s}}$$

$$Z = \sum e^{-\beta E_s}$$ (تابع پارش)

$$\langle M \rangle = \frac{1}{Z} \sum M_s e^{-\beta E_s}$$

از طرفی

$$\frac{\partial E_s}{\partial B} = -M_s$$

بنابراین

$$\frac{\partial \langle M \rangle}{\partial B} = -\frac{1}{Z^2}\frac{\partial Z}{\partial B} \sum M_s e^{-\beta E_s} + \frac{\beta}{Z}\sum M_s^2 e^{-\beta E_s}$$

از طرفی

$$\frac{\partial Z}{\partial B} = \sum_s \beta M_s e^{-\beta E_s} = \beta \frac{\sum M_s e^{-\beta E_s}}{Z} \times Z$$

$$= \beta \langle M \rangle Z$$

بنابراین

$$\frac{\partial\langle M\rangle}{\partial B} = -\frac{1}{Z^2}\beta\langle M\rangle Z\sum M_s e^{-\beta E_s} + \beta\frac{\sum M_s^2 e^{-\beta E_s}}{Z}$$

$$= \quad -\beta\langle M\rangle \quad + \beta\langle M^2\rangle$$

برای بدست آوردن C به صورت زیر عمل می‌کنیم :

$$C = \frac{\partial\langle E\rangle}{\partial T} = -\frac{1}{k_B T^2}\frac{\partial\langle E\rangle}{\partial\beta} \quad , \beta = \frac{1}{k_B T}$$

از طرفی :

$$Z = \sum e^{-\beta E_s}$$

$$\frac{\partial Z}{\partial\beta} = \sum -E_s e^{-\beta E_s}$$

از طرفی $$\langle E\rangle = \frac{\sum E_s e^{-\beta E_s}}{\sum e^{-\beta E_s}} \longrightarrow \langle E\rangle = \frac{-\partial Z/\partial\beta}{Z}$$

$$\rightarrow \frac{\partial\langle E\rangle}{\partial\beta} = -\frac{\partial^2 Z/\partial\beta^2}{Z} + \frac{(\partial Z/\partial\beta)^2}{Z^2}$$

$$= -\langle E^2\rangle + \langle E\rangle^2$$

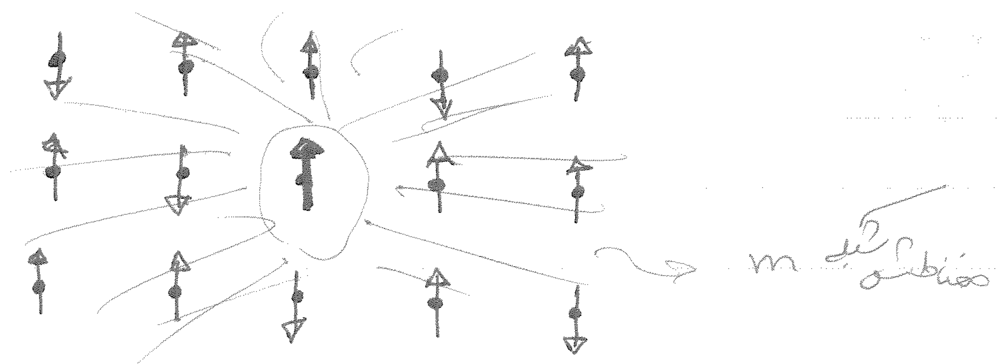
بنابراین C به صورت زیر درخواهد آمد:

$$C = \frac{1}{k_B T^2}\left(\langle E^2\rangle - \langle E\rangle^2\right)$$

حل میدان میانگین برای مدل آیزینگ

ساده‌ترین حل برای مدل آیزینگ (کلاسیک) استفاده از تقریب میدان میانگین است.

ایده این تقریب این است که می‌توان اثرات بقیه اسپین‌ها بر روی یک اسپین را به صورت یک میدان مغناطیسی میانگین در نظر گرفت:



مقدار مغناطش شبکه در دمای T در واقع متوسط مغناطش تک تک اسپین‌هاست یعنی

$$m = \langle S_i \rangle$$

حال انرژی یک اسپین مثلا اسپین شماره ۰ را می‌توان به شکل زیر نوشت:

$$H(S_0) = -S_0\left(J\sum_{j=1}^{z} S_j + B\right)$$

جمع بر روی همسایه‌های اول S_0

با

$$H(s_0) = -s_0(qJm+B) - Js_0\sum_{j=1}^{q}(s_j - m)$$

که q تعداد نزدیکترین همسایه‌های اول s_0 است. اگر افت و خیز اسپینی زیاد نباشد جمله دوم

یعنی

$$Js_0\sum_{j=1}^{q}(s_j - m)$$

برابر با صفر است چرا که :

$$\sum_{j=1}^{q}s_j \sim m$$

بنابراین

$$H(s_0) = -s_0(qJm+B)$$

و $\langle s_0 \rangle$ برابر خواهد بود با :

$$m = \langle s_0 \rangle = \sum_{s_0=\pm 1} s_0 e^{-\beta H(s_0)} \Big/ \sum_{s_0=\pm 1} e^{-\beta H(s_0)}$$

$$= \frac{e^{-\beta H(s_0=+1)} - e^{-\beta H(s_0=-1)}}{e^{\beta H(s_0=+1)} + e^{-\beta H(s_0=-1)}}$$

$$= \tanh[\beta(qJm+B]$$

بنابراین به یک معادله ای به شکل زیر می‌رسیم :

$$m = \tanh[\beta(qJm + B)]$$

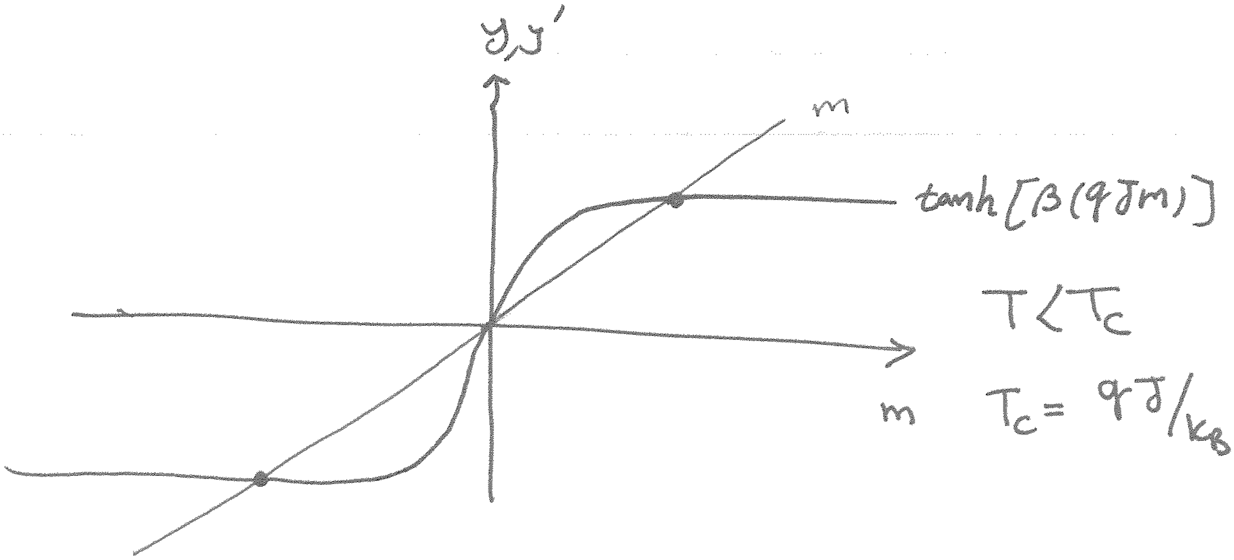
برای حل این معادله هرکدام از دو طرف معادله را رسم می‌کنیم یعنی :

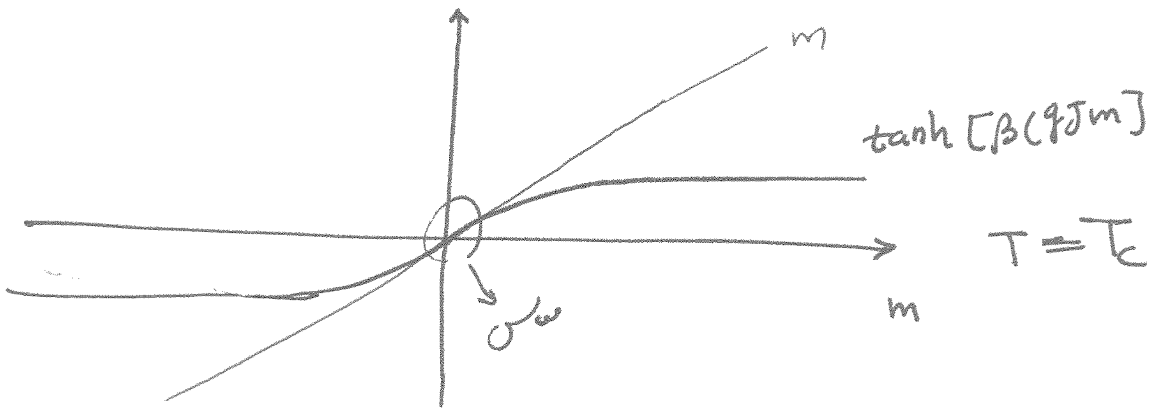
$$y(m) = m$$

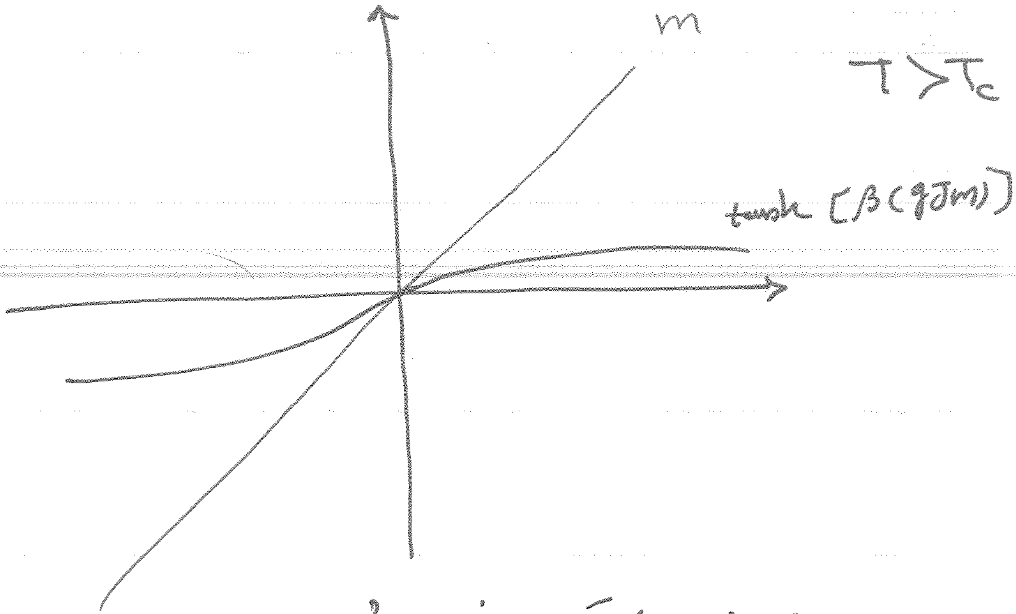
$$y'(m) = \tanh[\beta(qJm + B)]$$

هرکجا خطوط این دو معادله همدیگر را قطع کنند یعنی به جواب رسیده‌ایم :

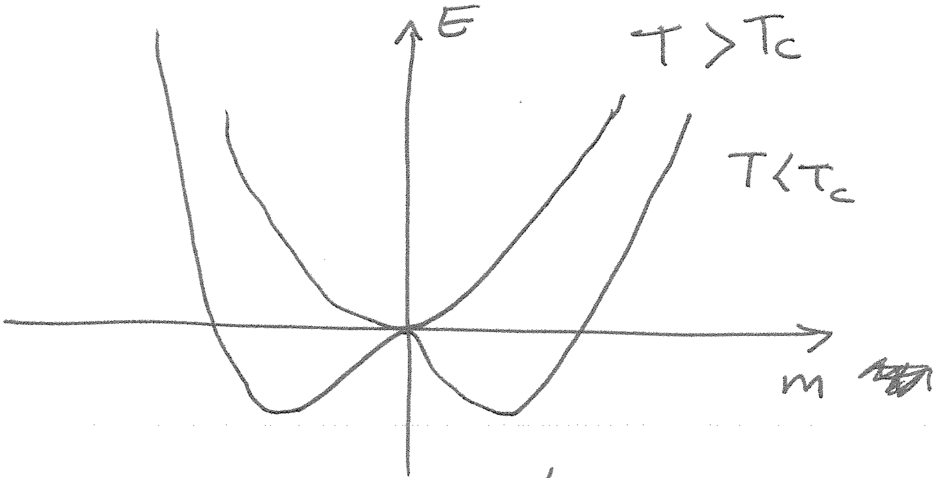
چند حالت را می‌توان برحسب دما متصور شد (با فرض $B=0$) :







نمودار انرژی نیز به صورت زیر خواهد شد



مقایسه دمای دقیق و جواب میدان میانگین (T_c)

	تقریب میدان میانگین	جواب دقیق
آیزینگ یک بعدی	$T_c = 2J/k_B$	$T_c = 0$
آیزینگ دو بعدی (شبکه مربعی)	$T_c = 4J/k_B$	$T_c = \left(\frac{2}{\ln(1+\sqrt{2})}\right) J/k_B \simeq 2.27\, J/k_B$

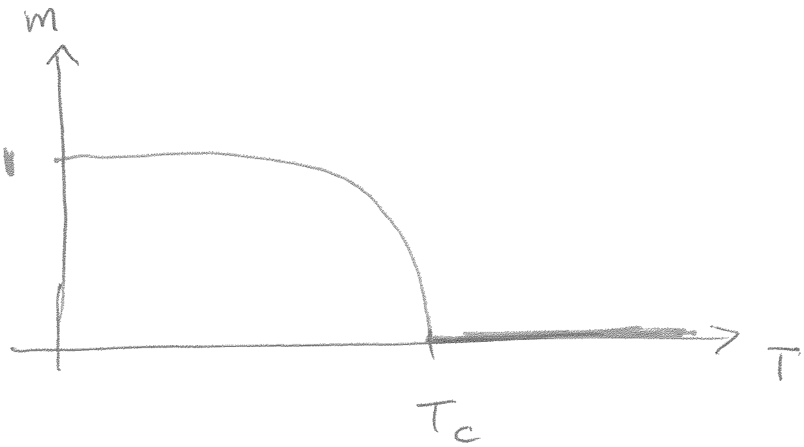
پارامتر نظم و دمای گذار T_c :

در مدل آیزینگ m را که به صورت زیر توصیف می‌شود پارامتر نظم می‌نامیم

$$m = \frac{\langle M \rangle}{N}$$

N ← تعداد اسپین‌ها

این پارامتر در دمای $T=0$ به مقدار بیشینه خود یعنی $m=1$ می‌رسد و در دمای بزرگتر از دمای گذار (T_c) صفر می‌شود. نمودار پارامتر نظم به صورت زیر خواهد بود:

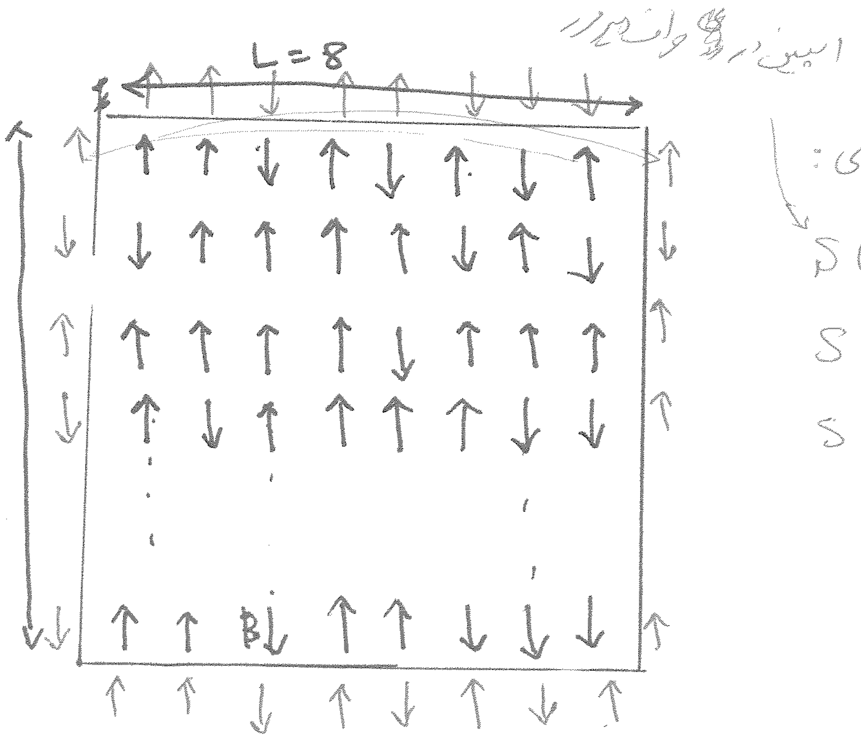


پروژه: مدل آیزینگ دوبعدی

برنامه ای بنویسید که تعداد گام های مونت کارلو، ابعاد شبکه دوبعدی و دمای اولیه و دمای نهایی و همچنین گام های دمایی (ΔT) و J (قدرت برهمکنش) را از ورودی بگیرد و سپس C ظرفیت گرمایی و $\langle M \rangle$ را برحسب دما رسم کند.

راهنمایی ها:

برای نوشتن این برنامه ابتدا یک شبکه اسپینی که اسپین های به صورت رندم بالا و پایین اند می سازیم:



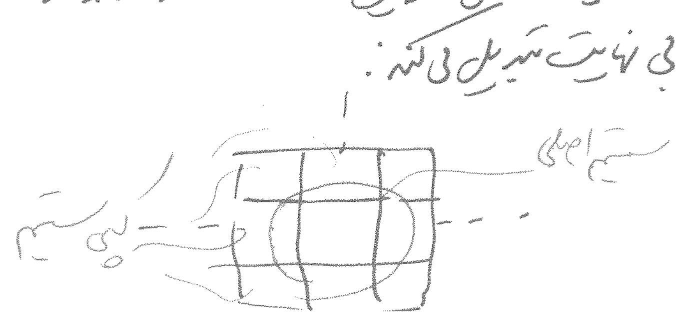
شرایط دوره ای:

$S(L+1, y) = S(1, y)$

$S(x, L+1) = S(x, 1)$

$S(0, y) = S(L, y)$

برای نقاط روی مرز باید چاره ای اندیشید. یکی از راه های انتخاب شرایط مرزی دوره ای است. شرایط مرزی دوره ای علاوه بر اینکه مشکل اسپین های روی مرز را برطرف می کند، سیستم را به یک سیستم بی نهایت تبدیل می کند.



بعد از اینکه شبکه ی اسپینی را تشکیل دادیم، باید گام های مونت کارلو را به روش متروپلیس اعمال کنیم:

مرحله ۱- انرژی شبکه که از اسپین ها تشکیل داده ایم را طبق فرمول زیر

$$E = -J \sum S_i \cdot S_j$$

بدست می آوریم و این انرژی را برابر E_b قرار می دهیم.

مرحله ۲- پیکربندی اسپینی را با بالا و پائین کردن جهت یک اسپین تغییر می دهیم و دوباره انرژی این پیکربندی را محاسبه می کنیم (E_t)

مرحله ۳- مقدار $\Delta E = E_t - E_b$ را محاسبه می کنیم. شایان ذکر است که مقادیر ΔE فقط می توانند ۵ مقدار مجاز بخود بگیرند که در ادامه به آن اشاره می کنیم.

مرحله ۴- اگر $\Delta E < 0$ باشد، پیکربندی جدید را می پذیریم که این به معنای این است که ما خوشبختانه به طرف انرژی مینیمم حرکت کرده ایم. بعد از آن به مرحله ۷ می رویم.

مرحله ۵- اگر $\Delta E > 0$ باشد مقدار $W = e^{-\beta \Delta E}$ را محاسبه می کنیم.

مرحله ۶- W را با یک عدد رندم r مقایسه می کنیم، اگر $r \leq W$ باشد پیکربندی جدید را می پذیریم در غیر اینصورت پیکربندی قبلی را حفظ می کنیم.

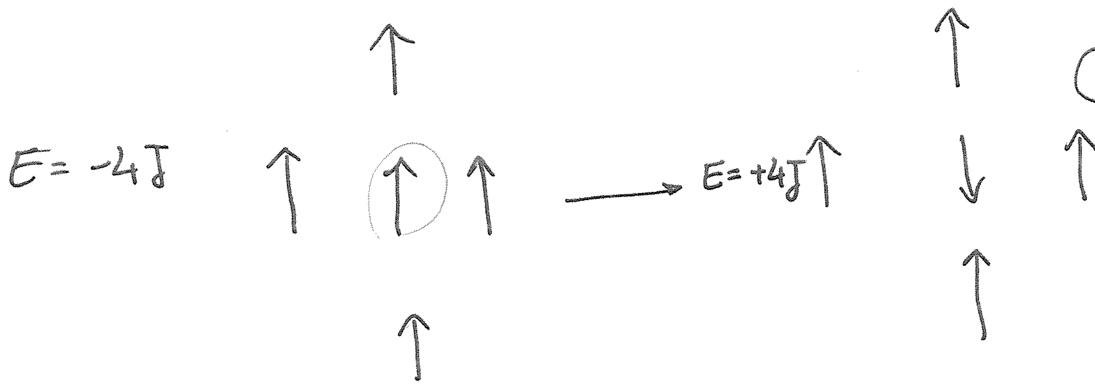
مرحله ۷- کمیت های فیزیکی مورد نظر را مطابق تغییرات انجام شده، تغییر می دهیم.

مرحله ۸- مراحل ۲ تا ۷ را آنقدر تکرار می کنیم تا کمیت های فیزیکی به دقت مطلوبی بدست آیند.

نکته ۱- در واقع برای محاسبه کمیت های فیزیکی هر بار به جای کامل شبکه را جارو بکنیم یعنی L×L بار به صورت رندم اسپین های شبکه را انتخاب می کنیم و بالا و پائین می کنیم و الگوریتم متروپولیس را اجرا می کنیم و بعد از آن کمیتی مانند M را محاسبه می کنیم، این کار را به دفعات زیاد انجام می دهیم و سپس $\langle M \rangle$ را بدست می آوریم.

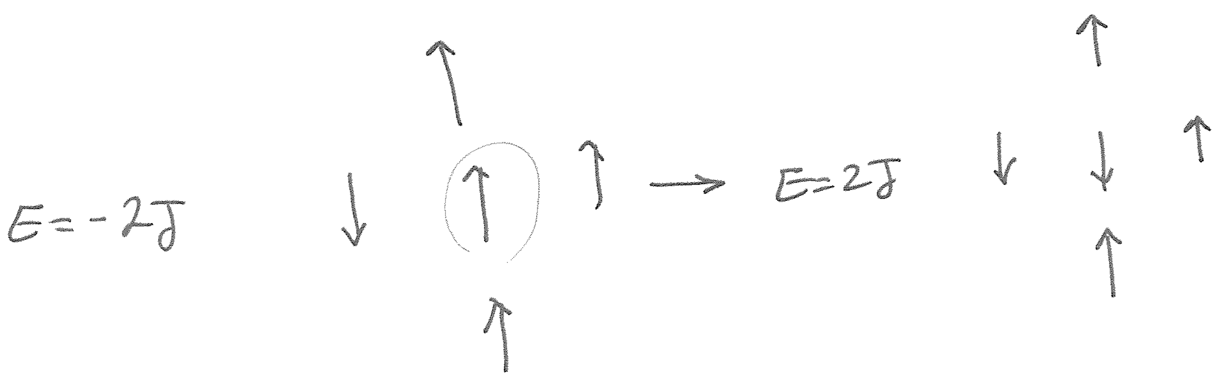
نکته ۲ - برای این مورد، یعنی مدل آیزینگ لازم نیست هر بار محاسبه ΔE یعنی اختلاف انرژی پیکربندی قدیمی با پیکربندی جدید هر بار $e^{-\beta \Delta E}$ را تشکیل داد. می توان نشان داد که ΔE پنج حالت بیشتر ندارد:

①



$\boxed{\Delta E = 8J}$

②



$\boxed{\Delta E = 4J}$

3

$$E=0 \quad \begin{array}{ccc} & \uparrow & \\ \downarrow & \uparrow & \uparrow \\ & \downarrow & \end{array} \longrightarrow E=0 \quad \begin{array}{ccc} & \uparrow & \\ \downarrow & \downarrow & \uparrow \\ & \downarrow & \end{array}$$

4

$$E=2J \quad \begin{array}{ccc} & \downarrow & \\ \downarrow & \uparrow & \uparrow \\ & \downarrow & \end{array} \longrightarrow E=-2J \quad \begin{array}{ccc} & \downarrow & \\ \downarrow & \downarrow & \uparrow \\ & \downarrow & \end{array}$$

$$\boxed{\Delta E=-4J}$$

5

$$E=4J \quad \begin{array}{ccc} & \downarrow & \\ \downarrow & \uparrow & \downarrow \\ & \downarrow & \end{array} \longrightarrow E=-4J \quad \begin{array}{ccc} & \downarrow & \\ \downarrow & \downarrow & \downarrow \\ & \downarrow & \end{array}$$

$$\boxed{\Delta E=-8J}$$

بنابراین می‌توان چنین عمل کرد (تشکیل جدول)

$$W(-8) = e^{+8J/T}$$
$$W(-4) = e^{4J/T}$$
$$W(0) = e^{0}$$
$$W(4) = e^{-4J/T}$$
$$W(8) = e^{-8J/T}$$

نکته ۳- در این محاسبات $k_B=1$ در نظر گرفته‌ایم. بنابراین T و J هر دو واحد انرژی به خود می‌گیرند و می‌توان T را برحسب J در نظر گرفت:

$$T = 0.1J\,,\ 0.2J\,,\ \ldots\ldots\,,\ J\,,\ \ldots\ 1.5J\,,\ \ldots$$

و ΔT را نیز به همین ترتیب مثلاً می‌توان به اندازهٔ $0.1J$ در نظر گرفت.