

2. PROJEKT – BESZÁMOLÓ

Másodrendű fázisátalakulás az Ising-modellben kétdimenziós négyzetrácson és fraktálon

PLASZKÓ NOEL LÁSZLÓ

Q9NW33



Computer Simulations in Physics

2020 december 5.

Tartalomjegyzék

1. Bevezetés	1
2. A ferromágneses Ising-modell 2 dimenzióban	2
3. Monte Carlo szimuláció és megvalósítása	5
4. 2 dimenziós négyzetrácson definiált Ising-modell vizsgálata	7
5. Sierpiński-szőnyegen definiált Ising-modell vizsgálata	12
6. Összegzés	17
Hivatkozások	18

1. Bevezetés

Ismert, hogy szilárdtestek bizonyos mágneses tulajdonságai – mint amilyen például a ferromágneses-paramágneses átmenet – az Ising-modell segítségével sikeresen megmagyarázhatók. Először PhD disszertációjában mutatta meg Ernst Ising, hogy modelljének 1 dimenziós változatában nincs fázisátmenet [1], és ebből tévesen arra következtetett, hogy magasabb dimenzióban sem lehet [2]. Ezt a következtetést cáfolta Onsager 1944-ben, aki végtelen kiterjedésű két dimenziós négyzetrácson vizsgálta az Ising-modellt, és mutatta meg, hogy abban másodrendű fázisátalakulás lép fel. Ugyancsak megsejtette az átalakulás kritikus hőmérsékletét is, azonban a mágnesezettség hőmérsékletfüggésének részletes leírása csak 1952-ben készült el Yang által [3]. Ezen néhány példán keresztül láthatjuk, hogy az Ising-modell már lassan 100 éve foglalkoztatja a kutatókat. Azonban néhány speciális esettől eltekintve a modell analitikusan nem megoldható, vagy csak különféle közelítések árán oldható meg. Ennek ellenére kitűnő terepasztalt biztosít számunkra a fázisátalakulások tanulmányozására, különösen most, hogy numerikus szimulációk útján a legkülönfélébb változatait vizsgálhatjuk.

Projekt munkám során először én is a legegyszerűbb 2 dimenziós Ising-modellt vizsgálok véges tartományon, valamint periodikus határfeltételt kiróva. Mivel ebben az esetben ismert a rendszer mágnesezettségének hőmérséklettől való függése (végtelen kiterjedésű 2 dimenziós rácson), valamint a rendszert jellemző kritikus exponensek, így ezek segítségé-

vel ellenőrizhetem a szimulációra használt algoritmusok helyes működését. Továbbá azt is megvizsgálom, hogy miként befolyásolja a rendszer mérete az átalakulási hőmérsékletet.

Ezt követően egy jóval komplexebb esetet fogok tanulmányozni: egy Sierpiński-szőnyeg által meghatározott rácson vizsgálom az Ising-modellt. A Sierpiński-szőnyeg Hausdorff-dimenziója 1.8928 [4], ami azt sugallja, hogy a rendszer az 1 és a 2 dimenziós eset között helyezkedik el. Érdekes lehet az a kérdésselvetés, hogy mi az a minimális (de nyilvánvalóan 1-nél nagyobb) dimenzió, amely esetén a másodrendű fázisátalakulás létrejön, és a fázisátalakulás lehetősége tisztán csak a rendszer dimenziójától függ-e. Ezen kérdések megválaszolása túlmutat a projektmunkám korlátain, így most csak a Sierpiński-szőnyeg vizsgálatára korlátozódok.

2. A ferromágneses Ising-modell 2 dimenzióban

Ebben a fejezetben röviden áttekintem a ferromágneses Ising-modellt, és a jellemzésére szolgáló termodinamikai mennyiségeket. Az áttekintés alapjául a [2] disszertáció szolgál. A dolgozat hátralévő részében a Boltzmann-állandó $k_B = 1$ és a Bohr-magneton $\mu_0 = 1$ választásával élek, és a különböző termodinamikai állapotjelzők mérésére dimenziótlanított mennyiségeket választok.

A ferromágneses rendszerek esetében külső mágneses tér nélkül is kialakulhat spontán mágnesezettség, azonban a hőmérséklet növekedtével ez a mágnesezettség fokozatosan csökken, majd egy kritikus T_C hőmérséklet felett eltűnik. Azt, hogy egy rendszer külső mágneses tér hiányában is eredő mágnesezettséggel rendelkezhet, a rendszert alkotó atomok spinjei közötti kölcsönhatás okozza. A ferromágnesség leírására a lehető legegyszerűbb – első szomszéd kölcsönhatáson alapuló, homogén – Ising-modellt tekintjük, ahol a spinek közötti kölcsönhatás Hamilton-függvénye az alábbi alakban adható meg:

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j. \quad (2.1)$$

J a kölcsönhatás csatolási állandója, ferromágneses esetben $J > 0$, míg antiferromágneses esetben $J < 0$. Az s_i spinek értékei ± 1 lehetnek, $\langle i, j \rangle$ pedig a rácson elhelyezkedő első szomszéd spinekre való összegzést jelent. Amennyiben külső mágneses tér is jelen van, úgy

a rendszert leíró Hamilton-függvény:

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j - h \sum_i s_i, \quad (2.2)$$

ahol h a külső tér nagysága. Célunk a rendszer termodinamikai viselkedésének leírása, az ehhez szükséges megfelelő termodinamikai mennyiségeket a rendszer $\mathcal{Z}(T, h)$ állapotösszegén keresztül definiálhatjuk [5]:

$$\mathcal{Z}(T, h) = \sum_{\{s_i\}} \exp(-\beta H(\{s_i\})), \quad (2.3)$$

ahol az összegzés az összes lehetséges $\{s_i\}$ spin konfigurációra vonatkozik, $\beta = \frac{1}{T}$ pedig az inverz hőmérséklet.

Ez alapján definiálhatjuk a rendszer – egy spinre vonatkoztatott – átlagos mágnesezettségét:

$$m = -T \cdot \frac{1}{\mathcal{Z}} \frac{\partial \mathcal{Z}}{\partial H} = \frac{1}{N} \cdot \left\langle \sum_i s_i \right\rangle, \quad (2.4)$$

ahol N a kölcsönható spinek száma. A T_C kritikus hőmérséklet alatt a mágnesezettség véges értéket vesz fel, majd a fázisátalakulás során eltűnik, $T_C < T$ esetén értéke 0. A rendszer rendezetlenségének jellemzésére bevezetjük az egy spinre jutó átlagos mágnesezettség $|m|$ abszolútértékét, mint rendparamétert. Ennek értéke 1, ha a rendszer teljesen rendezett, míg 0, ha a termikus fluktuációk folytán a rendszer teljesen rendezetlen. Érdeemes bevezetni a mágneses szuszceptibilitást is:

$$\chi = \left. \frac{\partial m}{\partial h} \right|_{h=0} = \frac{\langle m^2 \rangle - \langle m \rangle^2}{NT}. \quad (2.5)$$

Amennyiben egy rendszer másodrendű fázisátalakulásra képes, akkor azt a bevezetett két mennyiségen keresztül megfigyelhetjük. Mágneses rendszerek esetén a mágnesezettségnek a kritikus hőmérsékleten függőleges érintőjű inflexiós pontja van, a szuszceptibilitás pedig divergál. Bevezethetjük továbbá a rendszer egy spinre vonatkoztatott energiáját és a fajhőjét is:

$$E_1 = \frac{1}{N} \langle H \rangle, \quad (2.6)$$

$$C = \frac{\partial E_1}{\partial T} = \frac{\langle E_1^2 \rangle - \langle E_1 \rangle^2}{NT^2}. \quad (2.7)$$

A numerikus szimulációk során a numerikus hibák elkerülésének érdekében a χ és C mennyiségeket a második egyenlőség szerint definiált formula szerint határozzuk meg.

A ferromágneses-paramágneses fázisátalakulás kritikus hőmérséklete végtelen kiterjedésű négyzetrácson definiált Ising-modell esetében [3]:

$$T_C = \frac{2J}{\ln(1 + \sqrt{2})} \approx 2.26919.$$

Ugyancsak ismert a mágnesezettség hőmérsékletfüggése is [6]:

$$|m|(T) = \begin{cases} 0 & \text{ha } T < T_C \\ \left(1 - \left(\text{sh}\left(\frac{2J}{T}\right)\right)^{-4}\right)^{1/8} & \text{ha } T \geq T_C \end{cases}$$

A fázisátalakulások vizsgálatának szempontjából (is) hasznosnak bizonyul bevezetni az úgynevezett kritikus exponenseket. Belátható, hogy a fázisátalakuláshoz közeli hőmérsékleten a termodinamikai mennyiségek hatványfüggvényszerű viselkedést mutatnak (és a kísérleti eredmények is ezt támasztják alá), kritikus exponenseknek pedig az egyes mennyiségekhez tartozó hatványfüggvények megfelelő kitevőit nevezzük. Ezek definiálásához először vezessük be a redukált hőmérsékletet:

$$t = \frac{T - T_C}{T_C}. \quad (2.8)$$

Ennek segítségével a termodinamikai mennyiségek hatványfüggvényszerű viselkedései a következő módon fogalmazhatóak meg [7]:

$$m \sim |t|^\beta \quad (t < 0 \text{ és } h = 0), \quad (2.9)$$

$$\chi \sim |t|^{-\gamma} \quad (t > 0 \text{ és } h = 0), \quad (2.10)$$

$$m \sim h^{\frac{1}{\delta}} \quad (h = 0). \quad (2.11)$$

További exponensek is definiálhatók, azonban jelen munkámban ennek a fent definiált háromnak a teljesülését fogom ellenőrizni. A kritikus exponensek értékei bár rendszerről rendszerre változhatnak, de nem egymástól függetlenül. Megmutatható, hogy az alábbi

összefüggés közöttük mindig fenn áll [7]:

$$\gamma = \beta \cdot (\delta - 1). \quad (2.12)$$

Munkám során ennek teljesülését is ellenőrzöm a vizsgált rendszerek esetében. 2 dimenziós végtelen kiterjedésű négyzetrácson definiált Ising-modell esetében a kritikus exponensek irodalmi értékeit a 2.1. táblázat tartalmazza.

β	γ	δ
1/8	7/4	15

2.1. táblázat. Kritikus exponensek értékei a 2 dimenziós végtelen kiterjedésű rácson definiált Ising-modell esetében [7].

3. Monte Carlo szimuláció és megvalósítása

A numerikus számolások elvégzéséhez Monte Carlo szimuláción alapuló Metropolis algoritmust alkalmaztam. Ebben a fejezetben először ezt tekintem át röviden, majd ismertetek néhány - a tényleges megvalósítás szempontjából lényeges - technikai részletet.

A Metropolis algoritmus megvalósítása a [8] könyvben leírtakon alapul. A szimulációk során a hőmérséklet, a térfogat és a részecskeszám állandó, így ennek megfelelően alkalmazunk kanonikus sokaságot. T hőmérsékleten a rendszerben egy E_{α_j} energiájú α_j állapot megvalósulásának valószínűsége Boltzmann-eloszlást követ:

$$P(E_{\alpha_j}, T) \sim \exp(-E_{\alpha_j}/T). \quad (3.1)$$

Az algoritmus alappillére, hogy oly módon változtatja meg az egyes spinek beállítását, hogy a lehetséges konfigurációk megvalósulásának valószínűsége Boltzmann-eloszlást kövessen. A megvalósítás során a következő lépéseket alkalmazzuk, míg el nem érjük T hőmérsékleten az egyensúlyi állapotot:

1. A spineknek egy véletlenszerű beállítását generáljuk. A generálás során minden spin egyenletes eloszlás szerint vesz fel $+1$ vagy -1 értéket. (Ez annak felel meg, hogy a rendszer relaxálását magas hőmérsékletről indítjuk meg.)
2. Ezt követően újra és újra egy tetszőlegesen választott spin értékét -1 -szeresére változtatjuk, és megvizsgáljuk, hogy ennek eredményeképpen csökken-e a rendszer ener-

giája.

- (a) Ha a rendszer összenergiája csökken, akkor megtartjuk az új konfigurációt.
- (b) Ha a rendszer összenergiája nem csökken, akkor az új konfigurációt $R = \exp(-\Delta E/T)$ valószínűséggel fogadjuk el (ΔE a rendszer összenergiájának megváltozása).

Megmutatható, hogy az eljárás valóban a kanonikus sokaság követelményeinek megfelelő T hőmérsékletű rendszert állít elő. A relaxáció végeztével az előállított spinrendszerből a rendszer energiája és mágnesezettsége könnyedén meghatározható a (2.4) és (2.6) egyenletek segítségével. Ha pedig egy adott hőmérsékleten több (egymástól lényegében független) spinrendszert is előállítunk, akkor azok segítségével a rendszer szuszceptibilitása és fajhője is meghatározható a (2.5) és (2.7) egyenletek segítségével.

Bár az eljárást nem túl bonyolult implementálni, néhány praktikus trükk nélkül egy rendszer relaxálása nagyon hosszú ideig tartana. Nem beszélve arról, hogy 2 dimenziós spinrendszer esetében a spinek száma a rendszer lineáris méretének második hatványával növekszik, aminek következtében a relaxáláshoz szükséges idő a rendszer méretének növekedtével rohamos mértékben megnő. Az implementáció során a 2 dimenziós négyzet rácson definiált spinrendszer spinjeinek állapotát egy 1 dimenziós vektorba rendezzük megfelelő módon (például a kétdimenziós rács sorait egymás után fűzzük). A spinek állapotának ily módon eltárolt vektorához definiálhatunk egy \mathbf{J} kölcsönhatási mátrixot, amelynek $[\mathbf{J}]_{ij}$ eleme a vektor i -edik spinjének j -edik spinjével történő kölcsönhatásának csatolási erősségét tartalmazza (ebből adódóan a definíció az $i \leftrightarrow j$ indexcserére szimmetrikus). Ennek segítségével egy spinrendszer energiája könnyedén meghatározható:

$$E = -\frac{1}{2}\langle v|\mathbf{J}|v\rangle + h \cdot \langle 1|v\rangle, \quad (3.2)$$

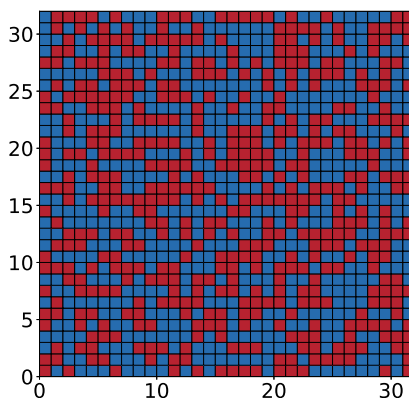
ahol $|v\rangle$ jelöli a spinek vektorát, $|1\rangle$ pedig egy csupa egyeseket tartalmazó vektor. Az $\frac{1}{2}$ szorzó oka, hogy a \mathbf{J} kölcsönhatási mátrix szimmetrikusan definiált. Több előnye is van annak, hogy a spineket és a köztük létrejövő kölcsönhatást ily módon definiáljuk. Először is az alkalmazott numerikus programcsomag (NumPy) jóval hatékonyabban tudja a (3.2) egyenlet szerint kijelölt vektorműveleteket elvégezni, mintha azt elemenként (egyenként) próbálnánk megtenni. Másfelől a kölcsönhatás ily módon történő implementációja könnyen általánosítható akár magasabb dimenziós rendszerekre, akár a projekt munkámban tanulmányozni kívánt fraktál elrendezésekre is. Ugyancsak könnyen módosíthatnánk

programunkat olyan esetekre is, amikor a spinek közötti kölcsönhatás nem homogén (például a csatolásierőssége különbözik az x és y tengelyeknek megfelelő irányokban, vagy 2 különböző atom is található a rendszerben), továbbá könnyedén figyelembe vehetnénk hosszabb hatótávolságú kölcsönhatásokat is.

Egy további módosítás az algoritmus implementációjában, ha a 2. lépés során egyszerre nem csak egy, hanem több spin értékét is megváltoztatjuk, párhuzamosan. Ennek hatására egy relaxációs lépés során nem csak egy spin beállása változhat. A munkám során alkalmazott megoldás alapötlete a [9] publikusan elérhető kódból származik.

4. 2 dimenziós négyzetrácson definiált Ising-modell vizsgálata

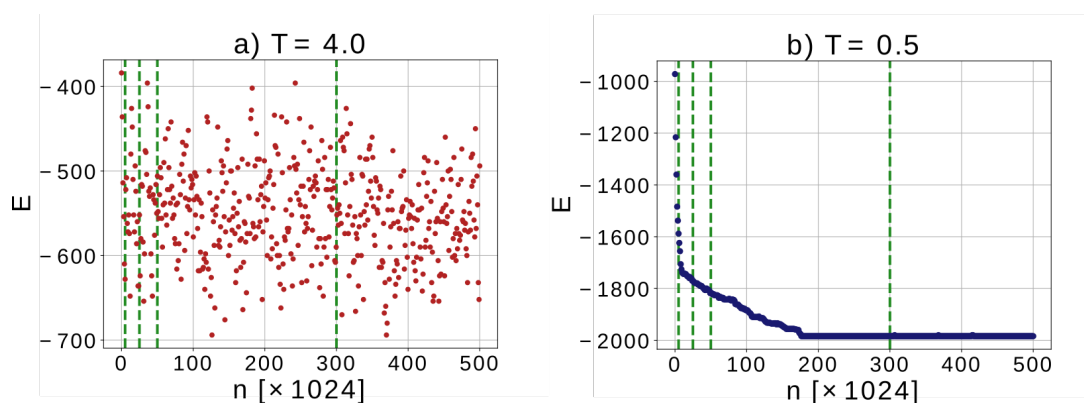
A munkám első felében 2 dimenziós négyzetrácson definiált Ising-modelleket vizsgáltam. Még mielőtt az eredményeket ismertetném, először a relaxáció folyamatát tekintem át. Ehhez kiindulásul a 4.1. ábrán is látható 32×32 rácspontból álló egyenletes eloszlás szerint véletlenszerűen inicializált (relaxálatlan) spinrendszer szolgál.



4.1. ábra. A relaxációt folyamatát az ábrán látható 32×32 rácsponton definiált, egyenletes eloszlás szerint véletlenszerűen inicializált spinrendszeren vizsgálom. Az ábrán a piros színű négyzetek az $s = +1$, míg a kék színű négyzetek az $s = -1$ állapotot jelölik.

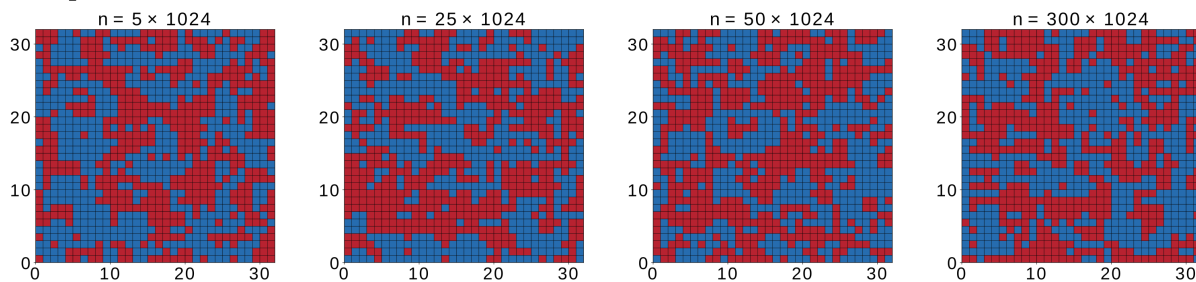
A spinrendszer inicializálása után célokom a relaxációs folyamat nyomonkövetése magas ($T_1 = 4$) és alacsony ($T_2 = 0.5$) hőmérsékleteken. A relaxáció során összesen $n = 300 \cdot 1024$ relaxációs lépést alkalmaztam. A szimulációk során minden 1024. relaxációs lépés után meghatározom a rendszer energiáját, ez látható a 4.2. a) és b) ábrákon. A 4.2. a) ábra

magas hőmérsékletű esetben mutatja az energia változását a relaxációs folyamat során. Láthatjuk, hogy az érték egy átlagos érték körül szór, de tényleges relaxációs folyamat valójában nem is történik. Ez egybevág azzal a korábbi állítással, miszerint a véletlenszerűen inicializált spinrendszer a magashőmérsékletű esetnek felel meg. A 4.2. b) ábrán az alacsony hőmérsékletre történő relaxáció folyamatát láthatjuk. Megfigyelhető, hogy az energia rendkívül gyorsan lecsökken az első néhány lépés során, majd végül teljesen bekonvergál. Továbbá érdemes azt is megfigyelni, hogy míg a kiindulási konfiguráció a két esetben megegyezett, addig az alacsony hőmérsékletű relaxáció során a rendszer energiája jóval alacsonyabb a magas hőmérsékletű esethez képest. A 4.2. a) és b) ábrán zöld szaggatott vonalakkal jelzett pontokban ($n \in \{5, 25, 50, 300\} \times 1024$ iteráció után) a spinek aktuális beállítását is ábrázolom a 4.3. a) és b) ábrásozatokon. A magas hőmérsékletű esetben csak kis méretű klaszterek tudnak kialakulni, és a nagy termikus fluktuációk ezeket is gyorsan átrendezik. Ezzel szemben alacsony hőmérsékleten nagy méretű klaszterek alakulnak ki, és ezeket a termikus fluktuáció sem képes lerombolni. A relaxáció során ezeknek a klasztereknek a határvonala folyamatosan vándorol, amíg egyszer létrejön a lehető legalacsonyabb energiájú állapot: minden spin egy irányba áll be. Ebben az esetben a rendszer mágnesezettsége maximális lesz. Természetesen a magashőmérsékletű esetben átlagosan a spinek fele $+1$, míg másik fele -1 értéket vesz fel, így a rendszer eredő mágnesezettsége ez esetben 0 . Már ez alapján láthatjuk, hogy a hőmérséklettől függően a rendszer lehet (teljesen) rendezett és rendezetlen is, és a két állapot között valahol átmenet kell, hogy történjen.

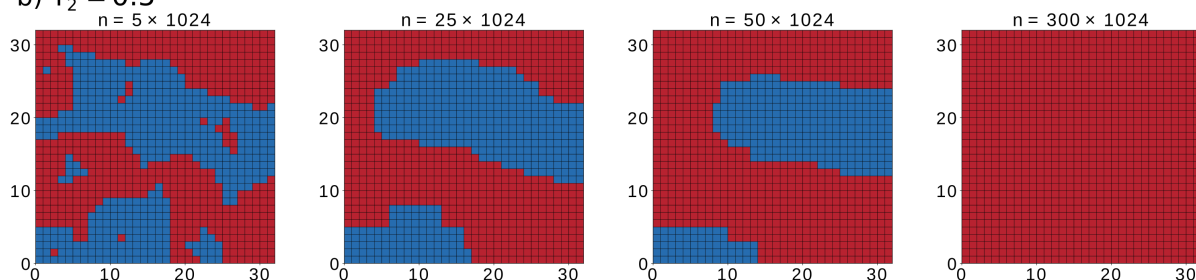


4.2. ábra. Véletlenszerűen inicializált spinrendszer relaxációja során a rendszer energiájának változása az iterációk n számának függvényében: a) magas hőmérsékletű ($T = 4.0$) és b) alacsony hőmérsékletű ($T = 0.5$) esetben. Magas hőmérsékletű esetben az energia egy átlagos érték körül fluktuál, míg az alacsony hőmérsékletű esetben a rendszer bekonvergál a lehető legalacsonyabb energiájú konfigurációba.

a) $T_1 = 4.0$



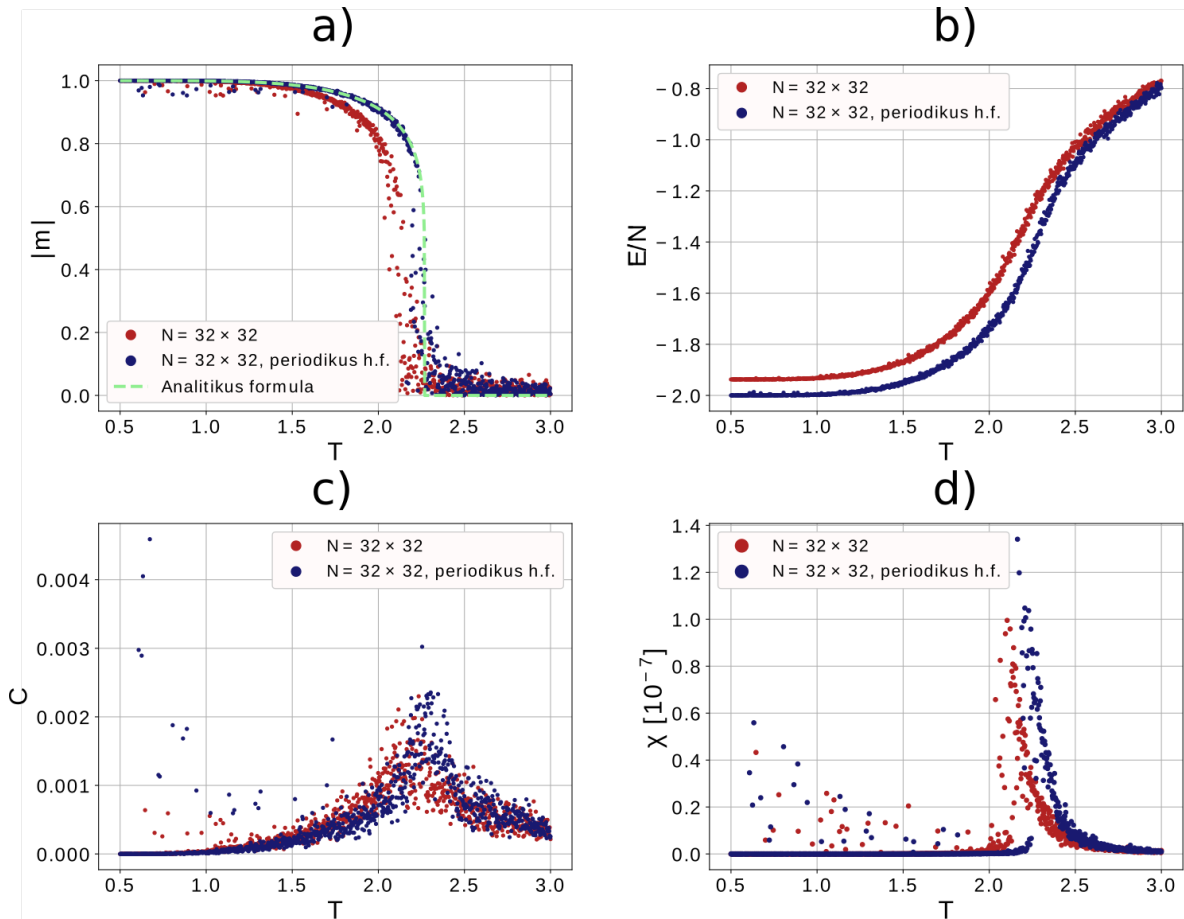
b) $T_2 = 0.5$



4.3. ábra. A vizsgált spinrendszer állapotának változása az iterációk n számának függvényében: a) magas hőmérsékletű eset ($T = 4.0$) és b) alacsony hőmérsékletű eset ($T = 0.5$). Látható, hogy magas hőmérsékleten nem tud rendezettség kialakulni a termikus fluktuációk miatt. Alacsony hőmérsékleten klaszterek alakulnak ki, amelyek határvonala változik a relaxáció során, amíg egyszer eléri a rendszer a teljesen rendezett fázist, amit a termikus fluktuációk már nem képesek lerombolni.

A 2 dimenziós Ising-modell mágnesezettség - hőmérséklet kapcsolata analitikusan végtelen nagy kiterjedésű négyzetrács esetében ismert. Azonban szimulálni csak véges méretű rácsokat tudunk, így érdemes lehet megvizsgálni azt, hogy mennyire egyezik meg egy véges méretű rács során kapott eredmény az analitikus formulával. E célból egy 32×32 rácpontból álló, továbbá egy ugyancsak 32×32 rácpontból álló, de periodikus határfeltétellel definiált rácsot választottam. Mindkét rács esetén meghatároztam a 2. fejezetben definiált $|m|$, $E_1 = \frac{E}{N}$, C és χ termodinamikai mennyiségeket a hőmérséklet függvényében (N a rendszerben lévő spinek száma), ezek a 4.4. ábrán láthatóak. Az ábrák mindegyikén felfedezhetjük a másodrendű fázisátalakulás 2. fejezetben diszkutált jellemzőit. Továbbá az ábrák alapján levonhatjuk azt a következtetést, hogy a periodikus határfeltételt kiróva szignifikánsabban jobb eredményt kaphatunk, és az így kapott $|m|$ rendparaméter értéke a hőmérséklet függvényében már 32×32 méretű rács esetében is nagy pontossággal megegyezik az analitikusan jósolt értékkel [4.4. a) ábra]. Ez indokolja a továbbiakban a periodikus határfeltétel alkalmazását 2 dimenziós négyzetrács esetén. Továbbá a 4.4. a) ábra alapján arra is következtethetünk, hogy 32×32 méretű négyzetrács esetében, peri-

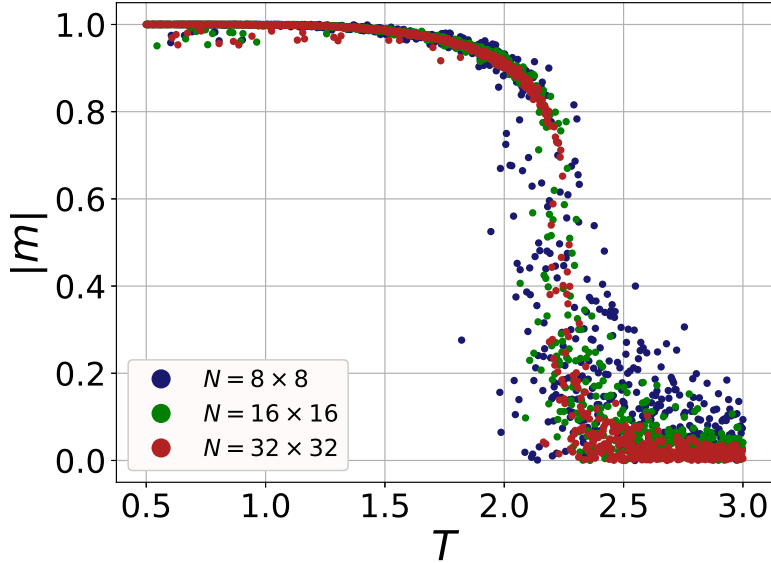
odikus határfeltétel mellett a fázisátalakulás kritikus hőmérséklete $T_C \approx 2.269$, ahogy az analitikus megoldás esetében is.



4.4. ábra. A rendparaméter [a) ábra], az egy spinre jutó energia [b) ábra], a fajhő [c) ábra] és a mágneses szuszceptibilitás [d) ábra] hőmérséklettől való függése 32×32 méretű négyzetrács esetén, valamint ugyancsak 32×32 méretű rács esetén, de periodikus határfeltétel mellett. Az ábrák mindegyike a másodrendű fázisátalakulás 2. fejezetben részletezett jeleit mutatja. Az a) ábrán az $|m|$ rendparaméter hőmérséklettől való függésének 1. fejezetben megadott analitikus alakját is ábrázoltam. A periodikus határfeltétel mellett kapott mágnesezettség nagy pontossággal megegyezik az analitikus megoldással. Ebből arra is következtethetünk, hogy a ferromágneses-paramágneses fázisátalakulás kritikus hőmérséklete periodikus határfeltétel 32×32 méretű rács esetén is $T_C \approx 2.269$.

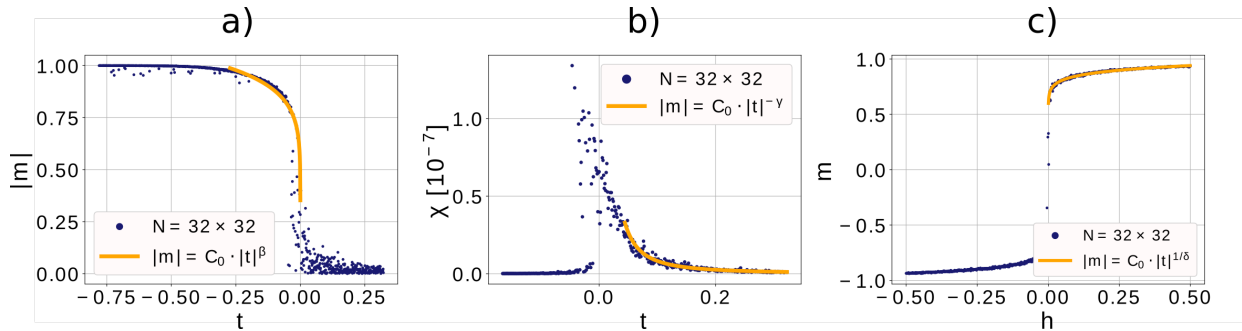
Nem utolsó szempont az sem, hogy egy-egy szimuláció elvégzéséhez mennyi idő szükséges, így érdemes azt is megvizsgálni, hogy periodikus határfeltétel mellett minimum mekkora méretű rendszert érdemes választanunk ahhoz, hogy az analitikus formulával összehangban lévő eredményeket kapjunk. $N = 8 \times 8$; 16×16 ; és 32×32 méretekkel rendelkező rendszereket tanulmányoztam e célból. Az $|m|$ rendparaméter hőmérsékletfüggése

az egyes esetekben a 4.5. ábrán látható. Az ábra alapján levonhatjuk azt a következtetést, hogy periodikus határfeltétel mellett is indokolt a minél nagyobb méretű rendszer választása, ha a cél az analitikus formulával minél inkább összhangban lévő eredmények előállítása.



4.5. ábra. Az $|m|$ rendparaméter hőmérsékletfüggése periodikus határfeltétel mellett, de különböző méretű rendszerek esetén. Bár a rendszer méretének növelésével a futási idő jelentősen nő, azonban a szimuláció „véletlenszerűségéből” adódó szórás csökken.

A fejezet végén a (2.9)-(2.11) módon definiált hatványfüggvények illesztésével meghatározom a 32×32 méretű periodikus határfeltétellel rendelkező rendszert jellemző kritikus exponenseket is, hogy azokat az irodalmi értékekkel összevethessem. A mágnesezettség a redukált hőmérséklet függvényében (mágneses tér nélkül), a mágnesezettség a külső tér függvényében ($t = 0$ redukált hőmérséklet esetén) és a mágneses szuszceptibilitás a redukált hőmérséklet függvényében, valamint az ezekre illesztett hatványfüggvények a 4.6. ábrán láthatók. Az illesztésekből kapott kritikus exponensek értékeit a 4.1. táblázat tartalmazza. A 2.1. táblázatban feltüntetett irodalmi értékekkel összehasonlítva az illesztésből kapott értékeket azt találjuk, hogy azok hibán belül megegyeznek. A kritikus exponensek között fennálló összefüggés szerint $\gamma = \beta \cdot (\delta - 1)$. A 4.1. táblázat értékei alapján $\beta \cdot (\delta - 1) = 1.66 \pm 0.14$, ami hibán belül valóban megegyezik γ értékével.



4.6. ábra. a) Az $|m|$ rendparaméter a redukált hőmérséklet függvényében $h = 0$ külső mágneses tér esetén. b) A mágneses szuszceptibilitás a redukált hőmérséklet függvényében $h = 0$ külső mágneses tér esetén. c) A mágnesezettség a külső mágneses tér függvényében $t = 0$ redukált hőmérséklet esetén. Valamint minden ábrán látható a szimuláció útján meghatározott adatpontokra (2.9)-(2.11) alapján illesztett megfelelő hatványfüggvény is.

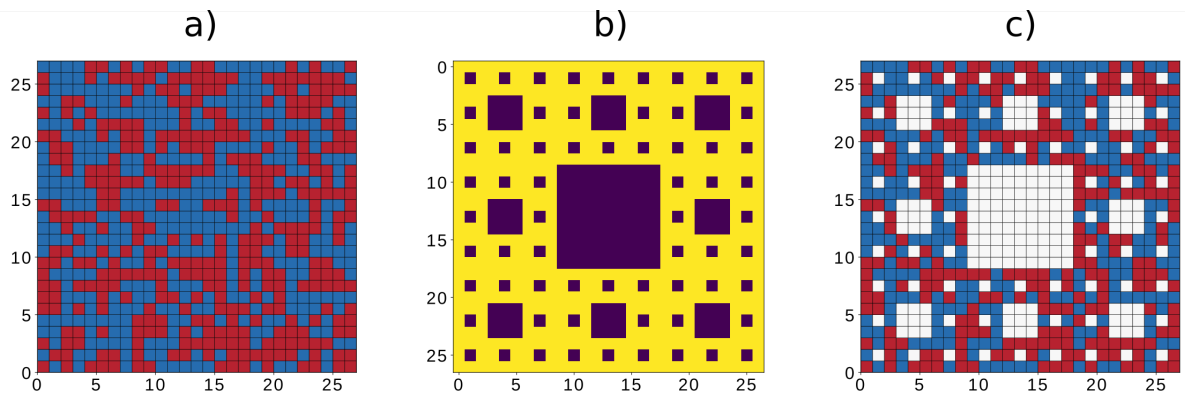
β	γ	δ
0.115 ± 0.09	1.70 ± 0.05	15.35 ± 0.09

4.1. táblázat. 32×32 négyzetrácson, periodikus határfeltétel mellett definiált Ising-modell szimulációja alapján meghatározott kritikus exponensek értékei.

5. Sierpiński-szőnyegen definiált Ising-modell vizsgálata

Ebben a fejezetben egy Sierpiński-szőnyegen definiált Ising-modell vizsgálatát tűzzük ki célul. Ismert, hogy 1 dimenzióban az Ising-modellben nem lép fel másodrendű fázisátalakulás, míg 2 dimenzióban – ahogyan azt az előző fejezetben is láttuk – igen. Ebben a fejezetben a másodrendű fázisátalakulás lehetőségét az 1.792 Hausdorff-dimenziójú [4] Sierpiński-szőnyegen tanulmányozzuk.

Azonban még mielőtt ezt megtennénk, röviden térjünk ki arra, hogy hogyan is generálhatunk a szimulációhoz spinrendszert Sierpiński-szőnyegen. Ehhez kiindulásul egy megfelelő méretű – az előző fejezetben bemutatott – hagyományos négyzetrács alapú spinrendszert hozunk létre. Továbbá generálunk egy – a négyzetrácscsal azonos méretű – maszkot, amely a Sierpiński-szőnyeg rácspontjaiban 1 értékeket, míg ahol nem található Sierpiński-szőnyeghez tartozó rácspont ott 0 értéket vesz fel. A négyzetrácsot a maszkkal elemenként szorozva elő is állítottuk a kívánt spinrendszert. A módszer előnye, hogy az implementációban a kölcsönhatást leíró \mathbf{J} mátrix nem igényel módosítást, hiszen az energiához nem ad járulékot olyan tag, ahol a maszk által a spin értékét 0 értékre állítottuk. A maszkolás folyamatát az 5.1. ábra szemlélteti.



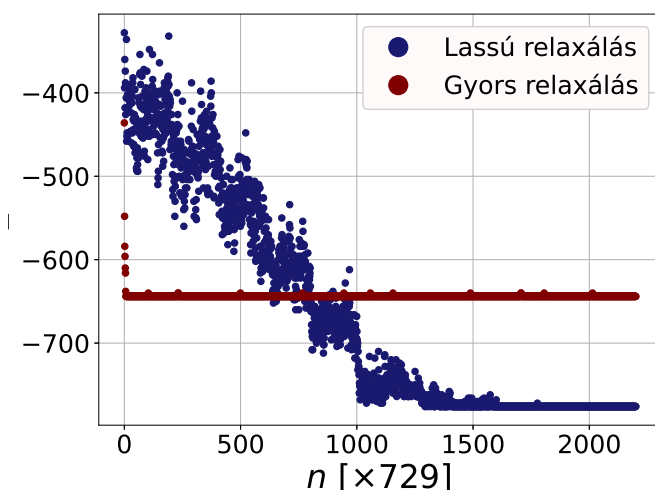
5.1. ábra. a) A kiindulásként generált négyzetrács. b) A Sierpiński-szőnyeg létrehozásához használt maszk. A sárga négyzetrács 1 értéknek felel meg, míg a lila négyzetrács 0-nak. c) A négyzetrácsnak és a maszknak elemenként vett szorzata: egy Sierpiński-szőnyegen definiált spinrendszer.

Ahogy az előző fejezetben, úgy itt is elsőként a relaxálás folyamatát vizsgáljuk meg. Azonban itt nem a hőmérséklet szerepének, hanem a relaxálás módjának tanulmányozására helyezzük a hangsúlyt. Két relaxálási folyamatot különböztetünk meg:

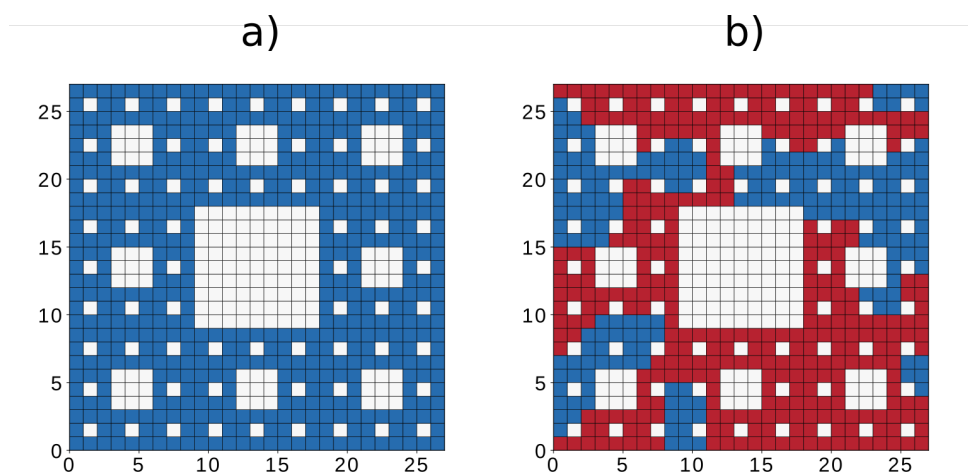
1. Gyors relaxálás: a magashőmérsékletű (véletlenszerűen inicializált) kiindulási rendszert azonnal a kívánt hőmérsékleten kezdjük relaxálni.
2. Lassú relaxálás: a magashőmérsékletű (véletlenszerűen inicializált) kiindulási rendszert oly módon relaxáljuk, hogy ha az elérni kívánt hőmérséklet T , akkor a relaxálást $T + 2$ -ről indítjuk el, és az i -edik lépésként $T + 2 - 0.1 \cdot i$ hőmérsékleten relaxáljuk a rendszert. Ezt a folyamatot addig végezzük, amíg el nem érjük a kívánt hőmérsékletet.

Ennek megfelelően a gyors relaxálás hirtelen hűtésnek felel meg, míg a lassú relaxálás olyan lehűtésnek, ahol a minta hőmérséklete a környezet egyre csökkenő hőmérsékletével folyamatosan kiegyenlítődni próbál. Az 5.2. ábrán azt láthatjuk, hogy magas hőmérsékletű helyzetből indulva miként változik a rendszer energiája az iterációk számával gyors és lassú relaxálás során. Láthatjuk, hogy bár $n \approx 1600 \cdot 729$ iteráció után egyik esetben sem változik az energia, azok értéke mégis különbözik, pedig az elérni kívánt hőmérséklet mindkét esetben $T = 0.05$ volt, azaz végeredményül két különböző egyensúlyi állapotot kaptunk. Az 5.3. ábrán a lassú és gyors relaxáció végeztével kapott spinrendszert láthatjuk. Hasonlót négyzetrács esetében nem figyelhetünk meg: fraktálon definiált Ising-modell

esetében gyors lehűtés során a rendszerben kialakuló klaszterek befagynak, és azokat alacsony hőmérsékleten a termikus fluktuációk már nem képesek lerombolni. Amennyiben a rendszert lassan hűtjük le, úgy a kialakult klaszterek fokozatosan tűnnek el, így a folyamat végeztével a spinek azonos irányba rendeződnek. Az 5.2. ábrán láthatjuk, hogy a rendszernek mindkét spinbeállítás lehet egyensúlyi állapota.



5.2. ábra. Az energia az iterációk számának függvényében gyors és lassú relaxáció során. Az elérni kívánt hőmérséklet: $T = 0.05$ volt.

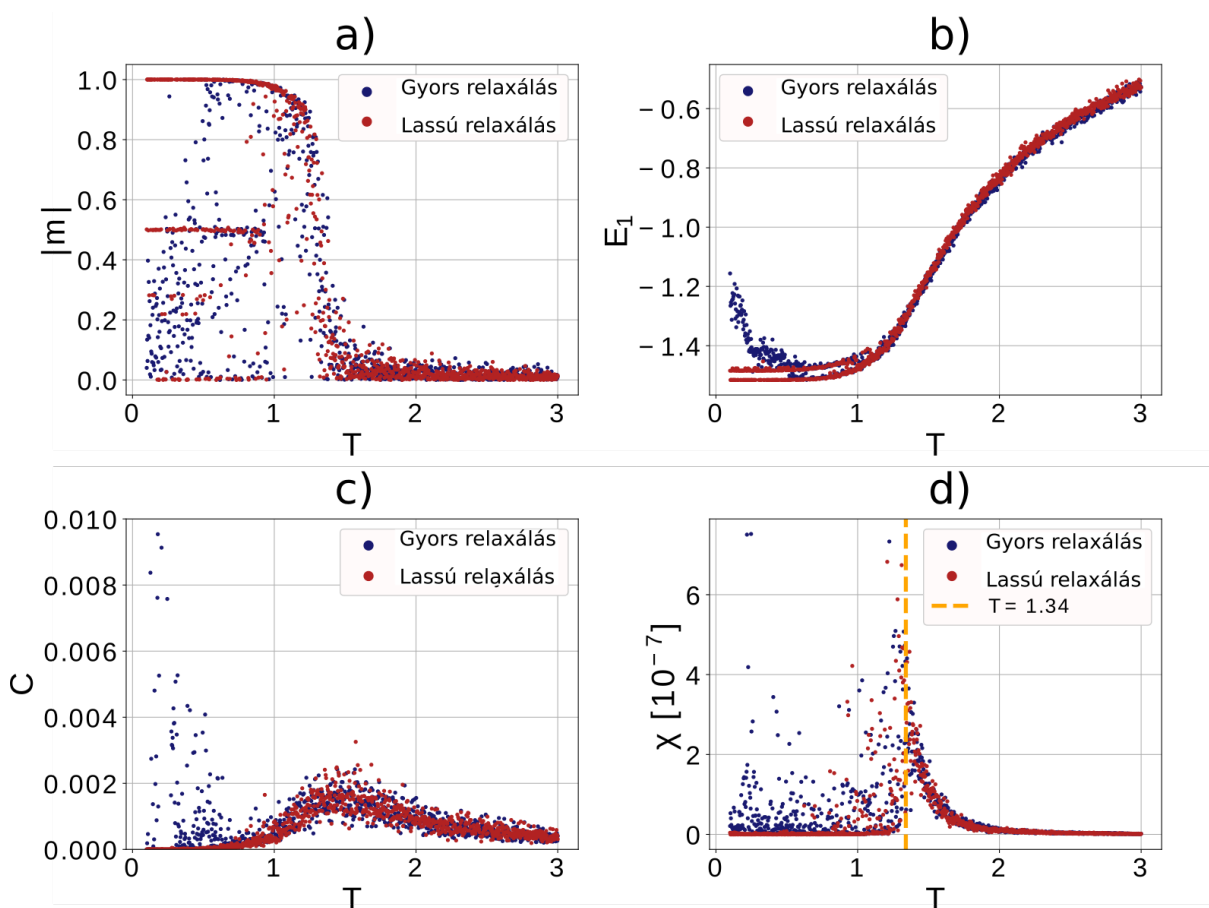


5.3. ábra. a) A lassú relaxáció végeztével kapott spinrendszer. A spinek azonos irányba rendeződtek. b) A gyors relaxáció végeztével kapott spinrendszer. Domének alakultak ki, amelyek a gyors hűtés következtében befagytak, azokat a termikus fluktuációk alacsony hőmérsékleten már nem képesek lerombolni.

Azt, hogy ez a jelenség (nagy valószínűséggel) megvalósulhat annak köszönhetjük, hogy valójában a fraktálok "nagyon ritka" alakzatok. A mintában található sok üregnek köszönhetően egyes helyeken szűkületek alakulnak ki benne. Megmutatható, hogy egy ilyen szűkület mentén kialakuló doménfal a rendszer energiájában lokális minimum megjelenését okozza, azaz a doménfal lerombolása az energia lokális növekedését vonja maga után. Azonban annak valószínűsége, hogy egy ilyen esemény a termikus fluktuációk miatt megtörténjen a Boltzmann-faktorral arányos: $P \sim \exp\left(-\frac{\Delta E}{T}\right)$. Ha megbecsüljük a Boltzmann-faktor értékét egy ilyen szűkület mentén alacsony hőmérsékleten, akkor azt kapjuk eredményül, hogy a doménfal lerombolódásának valószínűsége nagyságrendileg $P \approx 10^{-11}$, tehát ebben a tekintetben a gyors lehűtés esetén kialakuló, lokális energiaminimummal rendelkező konfiguráció a termikus fluktuációkkal szemben stabil egyensúlyi helyzetnek tekinthető.

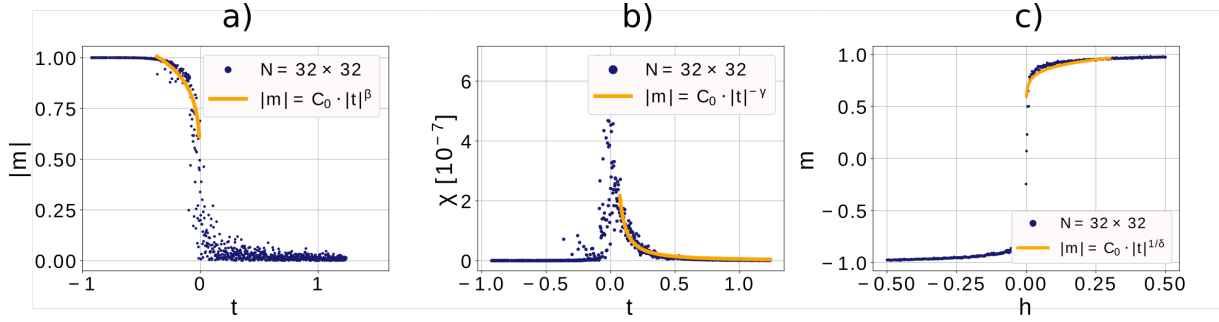
A továbbiakban visszatérünk eredeti célunkra: a rendszert jellemző termodinamikai mennyiségek meghatározására. Ezt lassú és gyors relaxálás esetén is megteszük. A számolásokat egy 27×27 méretű négyzetrácson definiált Sierpiński-szőnyegen végeztem. A kapott eredmények az 5.4. ábrán láthatóak. Az 5.4. a) ábrán a mágnesezettség abszolútértékét láthatjuk a hőmérséklet függvényében. A mágnesezettség a másodrendű fázisátalakulásra jellemző viselkedést mutat, azonban a kapott eredmény lassú és gyors relaxálás esetén is eltér az egyszerű négyzetrács esetében kapott eredménytől. A gyors relaxálás esetében azt láthatjuk, hogy a hőmérséklet csökkentésével a rendszer mágnesezettsége először megnövekszik, majd újra csökkenni kezd (bár az adatpontok szórása meglehetősen nagy). Ez a jelenség a rendszer gyors lehűtéséből adódó befagyással megmagyarázható. Lassú relaxálás esetén megfigyelhetünk egy, a hagyományos négyzetrács esetében kapott görbéhez nagyon hasonló görbét, ilyenkor alacsony hőmérsékleten minden spin azonos irányba áll be. Azonban érdekes módon alacsony hőmérsékleten további adatpontokat találunk $|m| \approx 0.5$ és $|m| \approx 0$ körül. Sajnos ennek az okát nem sikerült kiderítenem, csupán sejtést tudok rá megfogalmazni: feltételezésem szerint a lassú relaxálás sem volt elég lassú, és emiatt a gyors relaxáláshoz hasonló klaszter befagyás itt is megtörtént néhány esetben. Azonban ez nem magyarázza meg azt, hogy miért pont $|m| \approx 0.5$ és $|m| \approx 0$ mágnesezettségű rendszerek alakulnak ki. Az 5.4. b) ábrán az egy spinre jutó energiát láthatjuk a hőmérséklet függvényében. Látható, hogy gyors lehűtés esetén alacsony hőmérsékleten a relaxált rendszer energiája újra növekedni kezd a klaszterek befagyása miatt. Lassú relaxálás esetén alacsony hőmérsékleten két karakterisztikus energiaértéket láthatunk, az alacsonyabb energia az összes spin azonos beállításának felel meg. A magasabb energia vo-

nala valójában két különböző energiához tartozó vonal, amelyek egybe olvadnak. Ez az érték $|m| \approx 0.5$ és $|m| \approx 0$ eredő mágnesezettségű állapotoknak felel meg. Ennek a jelenségnek a megértéséhez szükséges lenne ezen állapot részletesebb feltérképezése, azonban ez a feladat ezen a projektmunkán túlmutat. Az 5.4 c) ábrán a fajhő látható a hőmérséklet függvényében, amely a hagyományos négyzetrács esetében tapasztaltakhoz nagyon hasonló viselkedést mutat. Az 5.4 d) ábrán pedig a szuszceptibilitást láthatjuk a hőmérséklet függvényében. A szuszceptibilitás $T \approx 1.34$ hőmérsékleten divergál, amely $T_C = 1.34$ kritikus hőmérsékletű másodrendű fázisátalakulást jelez az 1.792 Hausdorff-dimenziójú Sierpiński-szőnyeg esetében is.



5.4. ábra. Az $|m|$ rendparaméter hőmérsékletfüggése [a)], az egy spinre jutó energia hőmérsékletfüggése [b)], a fajhő hőmérsékletfüggése [c)] és a mágneses szuszceptibilitás hőmérsékletfüggése [d)] Sierpiński-szőnyegen definiált spinrendszer esetében gyors és lassú relaxáció mellett. A szuszceptibilitás $T = 1.34$ hőmérsékleten divergál, amely alapján megállapíthatjuk, hogy a Sierpiński-szőnyeg esetében is tapasztalhatunk másodrendű fázisátalakulást.

A fejezet zárásaként ebben az esetben is meghatároztam a fázisátalakulást jellemző kritikus exponenseket. Ehhez a lassú relaxálás útján nyert adatokat használtam. A 4. fejezetben leírtakkal azonos módon jártam el. Az adatsorok, és az azokra illesztett megfelelő hatványfüggvények az 5.5. ábrán láthatóak, a kritikus exponensek értékeit pedig az 5.1. táblázat tartalmazza.



5.5. ábra. A 27×27 rácspontból álló négyzetrácson definiált Sierpiński-szőnyeg másodrendű fázisátalakulásához tartozó kritikus exponensek meghatározása. a) Az $|m|$ rendparaméter a redukált hőmérséklet függvényében $h = 0$ külső mágneses tér esetén. b) A mágneses szuszceptibilitás a redukált hőmérséklet függvényében $h = 0$ külső mágneses tér esetén. c) A mágnesezettség a külső mágneses tér függvényében $t = 0$ redukált hőmérséklet esetén. Valamint minden ábrán látható a szimuláció útján meghatározott adatpontokra (2.9)-(2.11) alapján illesztett megfelelő hatványfüggvény is.

β	γ	δ
0.13 ± 0.02	1.40 ± 0.02	11.9 ± 0.6

5.1. táblázat. 27×27 rácspontból álló négyzetrácson definiált Sierpiński-szőnyeg másodrendű fázisátalakulását jellemző kritikus exponensek.

Bár a kritikus exponensek értékei kissé eltérnek a négyzetrács esetében kapott értékektől, a kritikus exponensekre vonatkozó (2.12) összefüggés teljesüléséről ebben az esetben is meggyőződhetünk:

$$\beta \cdot (\delta - 1) = 1.47 \pm 0.29,$$

ami hibán belül megegyezik γ értékével.

6. Összegzés

Munkám célja az Ising-modellben megjelenő másodrendű fázisátalakulás tanulmányozása volt. E célból 2 dimenziós rendszerek tanulmányozására alkalmas Metropolis algorit-

muson alapuló szimulációt készítettem, amelynek segítségével egy egyszerű négyzetrácson és egy Sierpiński-szőnyegen definiált Ising-modellt vizsgáltam. A program elkészítésénél külön figyelmet fordítottam a lehetséges optimalizációkra (vektorizáció és párhuzamosítás), továbbá arra, hogy a program könnyedén általánosítható legyen, így lehetőséget biztosítva akár jóval bonyolultabb rendszerek tanulmányozására is. Az egyszerű 2 dimenziós négyzetrácson definiált Ising-modell esetében fő célom a mágnesezettség hőmérsékletfüggésére vonatkozó ismert formula saját eredményeimmel való összehasonlítása volt. Megmutattam, hogy periodikus határfeltétel alkalmazása esetén már 32×32 rácspontból álló rendszer esetén nagy pontossággal visszakapjuk a végtelen kiterjedésű rendszer esetében ismert analitikus eredményeket. Ezt követően azt is megmutattam, hogy periodikus határfeltételek alkalmazása mellett a rendszer méretének növelésével a szimuláció statisztikus jellegéből adódó szórás csökkenthető rögzített iterációs szám mellett. A projektmunkám második felében egy Sierpiński-szőnyegen definiált Ising-modellt vizsgáltam. Megmutattam, hogy fraktálok esetében – azok „üregességéből” adódóan a rendszer lassú és gyors relaxálása esetében különböző alacsony hőmérsékletű egyensúlyi állapotokat kaphatunk. Gyors relaxálás esetében a rendszerben lérejevő klaszterek befagynak, és azokat alacsony hőmérsékleten a termikus fluktuációk már nem képesek lerombolni. Ezt követően megvizsgáltam a legfontosabb termodinamikai mennyiségeket egy 27×27 rácspontból álló négyzetrácson definiált Sierpiński-szőnyeg esetében is. Az eredmények azt mutatják, hogy másodrendű fázisátalakulás ebben az esetben is fellép. Ami ettől meglehetősen volt, az a rendszer alacsony hőmérsékletű viselkedése a befagyásra képes klaszterek csak részben magyarázzák meg a rendszer érdekes viselkedését, néhány felvetett kérdés egyelőre megválaszolatlan maradt, ezek további vizsgálatokat igényelnek.

Megjegyzés

A tervezetemben egy további fraktálon definiált Ising-modell vizsgálatát is ígértem. Ennek implementációja el is készült, amely megtalálható a mellékelt Python notebookban is. Azonban ez a rendszer nem mutatott jelentősen eltérő tulajdonságokat a Sierpiński-szőnyeghez képest, így a terjedelempre való tekintettel ennek külön fejezetet nem szenteltem a beszámolómban.

Hivatkozások

- [1] Ernst Ising. *Beitrag zur theorie des ferromagnetismus*. Zeitschrift für Physik, 31(1):253–258, 1925
- [2] László Környei. *Fraktál geometriák és nemegyensúlyi viselkedésük két dimenziós Ising rendszerekben*. 2008
- [3] C. N. Yang. *The spontaneous magnetization of a two-dimensional ising model*. Phys. Rev., 85:808–816, 1952
- [4] https://en.wikipedia.org/wiki/Sierpi%C5%84ski_carpet
- [5] Bálint Boldizsár and Noel Plaszkó. *Statisztikus fizika "A" előadás*. http://vattay.web.elte.hu/lectures/StatisztikusFizika/Statisztikus_fizika_jegyzet.pdf, 2019
- [6] Jahangir Mohammed and Swapna Mahapatra. *A comparative study of 2 d ising model at different boundary conditions using cellular automata*. International Journal of Modern Physics C, 29(08):1850066, 2018
- [7] László Sasvári. *Fejezetek a fázisátalakulások köréből*. [http://fizweb.elte.hu/download/Fizikus-MSc/Fazisatalakulasok/Fazisatalakulasok\(fejezetek\).pdf](http://fizweb.elte.hu/download/Fizikus-MSc/Fazisatalakulasok/Fazisatalakulasok(fejezetek).pdf)
- [8] Cristian C. Bordeianu. Rubin H. Landau, José Páez. *A Survey of Computational Physics: Introductory Computational Science*. Princeton University Press, 2012
- [9] Stefan Hermann Sack. https://github.com/shsack/ising_neural_net/blob/master/ising_lattice.py