

Versuch C2: Monte-Carlo Simulationen eines Ferromagneten im Rahmen des Ising-Modells

15. November 2010

1 Zielstellung

Es gilt die Temperatur des Phasenüberganges zwischen dem ferro- und paramagnetischen Verhalten eines Festkörpers anhand des Ising-Modells zu bestimmen. Des weiteren sind Temperatur- und Magnetfeldeinfluss sowie Gitterperiodizität auf den (anti-)ferromagnetischen Festkörper mit dem gleichen Modell qualitativ zu untersuchen.

2 Einführung

2.1 Festkörper im äußeren Magnetfeld

Wir betrachten einen Festkörper, der aus Atomen mit ungepaarten Elektronen (typischerweise Übergangsmetallzentren) und daraus resultierenden lokalen Spins aufgebaut ist. Das magnetische Verhalten solcher Festkörper läßt sich anhand der Temperaturabhängigkeit der magnetischen Suszeptibilität $\chi_M(T)$ in verschiedene Klassen unterteilen: Paramagnetismus, Ferromagnetismus, und Antiferromagnetismus.

- Paramagnetismus:
Hier gilt eine Abhängigkeit von:

$$\chi_M(T) \propto \frac{1}{T}. \quad (1)$$

- Antiferromagnetismus:
Oberhalb einer kritischen Temperatur, der Néel-Temperatur, verhält sich die Substanz wie ein Paramagnet, unterhalb geht die magnetische Suszeptibilität zurück und geht bei $T = 0$ gegen 0.
- Ferromagnetismus:
Unterhalb einer kritischen Temperatur, der Curie-Temperatur, richten sich die Spins parallel aus und die magnetische Suszeptibilität steigt stark an. Auch ohne äußeres Magnetfeld erfolgt unterhalb von T_C eine spontane Magnetisierung.

2.2 Theoretische Beschreibung des kollektiven Magnetismus'

Die Wechselwirkung (WW) der Spins bestimmt maßgeblich die magnetische Ordnung in Festkörpern. Dabei sind Dipol-Dipol-WW zwischen den magnetischen Momenten viel zu schwach (zwischen 10^{-4} und 10^{-3} eV), um quantitativ die Effekte magnetischer Ordnungen

zu beschreiben. Vielmehr beruht der Mechanismus auf der Austauschwechselwirkung – das quantenmechanische Prinzip der Ununterscheidbarkeit identischer Teilchen (also z.B. Elektronen). Es handelt sich um einen reinen Quanteneffekt.

Vereinfacht kann die WW der Spins mit dem Heisenberg-Modell beschrieben werden. Der Hamilton-Operatoren hat dabei die Form:

$$\hat{H} = \hat{H}_{\text{HB}} + \hat{H}_Z, \quad (2)$$

wobei der Heisenberg-Operator

$$\hat{H}_{\text{HB}} = - \sum_{i \neq j} J_{ij} \vec{S}_i \vec{S}_j \quad (3)$$

die Wechselwirkung verschiedener Spinzentren und der Zeeman-Operator

$$\hat{H}_Z = \mu_B \vec{B} \sum_i \vec{S}_i \quad (4)$$

die Wechselwirkung der Spinzentren mit einem äußeren magnetischen Feld \vec{B} beschreibt. J_{ij} beschreibt die Austausch-Kopplung zwischen dem Spins S_i am Gitterplatz \vec{R}_i und S_j am Gitterplatz \vec{R}_j . Im einfachsten Fall des Heisenberg-Modells nimmt man nur einen Spin $= -1/2$ an jedem Gitterplatz an und geht von einer reinen Abstandabhängigkeit der J_{ij} -Werte (d.h. $J_{ij} = J_{ji}$) aus. Beschränkt man die Wechselwirkung weiterhin nur auf den nächsten Nachbarn, so spricht man vom “Tight-Binding”:

$$J_{ij} = \begin{cases} J & \text{für } \vec{R}_i, \vec{R}_j \text{ nächste Nachbarn} \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (5)$$

Für $J > 0$ ist eine parallele Ausrichtung der Spins energetisch begünstigt (Ferromagnetismus), für $J < 0$ eine antiparallele (Antiferromagnetismus). Bei $J = 0$ spricht von unabhängigen Spins, also von einem idealen paramagnetischem Verhalten.

Ausgehend vom Heisenberg-Modell nimmt man im **Ising-Modell** an, dass die Spins nur entlang der z-Richtung ausgerichtet sind. Der Spinvektor am Zentrum i kann somit nur die Einstellungen $\vec{S}_i = (0, 0, S_i)$ und $\vec{S}_i = (0, 0, -S_i)$ annehmen. Da nur die S_z -Komponente der Spinvektoren berücksichtigt werden muß, erhält der Hamilton-Operator des Modells die Form:

$$\hat{H} = - \underbrace{\sum_{i \neq j} J_{ij} S_i^z S_j^z}_{\hat{H}_{\text{Ising}}} + \mu_B \vec{B} \sum_i S_i^z. \quad (6)$$

Die neue Form des Heisenberg-Operators wird dabei auch als Ising-Operator bezeichnet. Das Ising-Modell und alle genannten Näherung werden in diesem Versuch zur Berechnung der Magnetisierung und Energien der Modell-Festkörper benutzt. Während für zweidimensionale Festkörper nach dem Ising-Modell eine analytische Bestimmung der kritischen Temperatur eines Phasenübergangs (von einer magnetischen Ordnung zu einer anderen) möglich ist, kann dieser in drei Dimensionen nur aus numerischen Simulationen bestimmt werden.

Einschub: Bedeutung des Ising-Modells für die Physikalische Chemie¹

Das Ising-Modell (manchmal auch Lenz-Ising-Modell genannt) wurde erstmals von Ernst Ising in seiner Doktorarbeit untersucht. Er beschränkte sich dabei auf das Problem der eindimensionalen Spinkette, das er analytisch lösen konnte.² Bedauerlicherweise hat er für diesen Fall keinen ferromagnetischen Phasenübergang gefunden. Lars Onsager gelang es 1944, das Ising-Modell für den zweidimensionalen Fall analytisch zu lösen und einen Phasenübergang vorherzusagen. In drei Dimensionen ist das Isingmodell bisher analytisch nicht lösbar. Man ist auf numerische Verfahren angewiesen (z. B. Monte-Carlo-Simulationstechniken). Das ist Gegenstand des vorliegenden Versuchs.

Die Beschränkung auf zwei Zustände legt es nahe, das Ising-Modell auch auf andere Phasenübergänge anzuwenden. Als Beispiele wären hier der Phasenübergang flüssig-gasförmig eines Einkomponentensystems oder die flüssig-flüssig-Entmischung im Zweikomponentensystem zu nennen. Den beiden Zuständen „Spin-up“ und Spin-down“ entsprechen die beiden Dichten ρ_{liq} und ρ_{vap} . Das Analogon zur Curie-Temperatur ist dann die jeweilige kritische Temperatur. Der Magnetisierung entspricht die Dichtedifferenz $\Delta\rho = \rho_l - \rho_v$ bzw. die Konzentrationsdifferenz $\Delta x = x_1 - x_2$ der beiden koexistierenden Phasen. Diese Größen bezeichnet man auch als Ordnungsparameter des Phasenübergangs. Die Leistung des Ising-Modells liegt nun darin, dass es das Verschwinden des Ordnungsparameters bei Annäherung an den kritischen Punkt quantitativ richtig vorhersagt. Es liefert gleichsam die richtige Form der Koexistenzkurve. In der Nähe eines kritischen Punkts gelten nämlich sogenannte kritische Skalengesetze der Form:

$$\begin{aligned} M &\propto |T - T_c|^\beta \\ \rho_l - \rho_v &\propto |T - T_c|^\beta \\ x_1 - x_2 &\propto |T - T_c|^\beta \end{aligned}$$

Für den kritischen Exponenten erhält man aus numerischen Simulationen des dreidimensionalen Ising-Modells $\beta \approx 0,325$, den man auch im Experiment misst (wohlgemerkt: derselbe Exponent für die Magnetisierung, für $\Delta\rho$ und für Δx !). Die klassische van-der-Waals-Zustandsgleichung für reale Gase liefert den falschen Exponenten mit einem Wert von $\beta = 1/2$.

¹ siehe z. B.: S. G. Brush, Rev. Mod. Phys. **39** (1967) 883; W. Gebhardt, U. Krey, *Phasenübergänge und kritische Phänomene*, Vieweg, Braunschweig (1980).

² http://www2.hs-augsburg.de/~harsch/germanica/Chronologie/20Jh/Ising/isi_intr.html; E. Ising, Zeitschr. f. Physik **31** (1925) 253; W. Lenz, Physik. Zeitschr. **21** (1920) 613.

2.3 Numerische Simulationen nach dem Monte-Carlo-Verfahren

In der statistischen Physik möchte man häufig makroskopische Größen eines aus vielen Teilchen bestehenden Systems beschreiben. Für einen Ising-Magneten aus N Spins besteht der Phasenraum aus den 2^N möglichen Spinkonfigurationen, die sich als Vektoren $\vec{x} = (s_1, s_2, s_3, \dots, s_N)$ darstellen lassen. s_i ist die S_z -Komponente des lokalen Spins am Zentrum i und kann in der Ising-Näherung nur die Werte S_i und $-S_i$ annehmen. Zu jedem dieser Spinkonfigurationen \vec{x} lassen sich die Energie $E(\vec{x})$ nach:

$$E(\vec{x}) = \langle \vec{x} | \hat{H} | \vec{x} \rangle \quad (7)$$

und der Gesamtspin $S_{\text{ges}}(\vec{x})$ bzw. die Magnetisierung $M(\vec{x})$ nach:

$$S_{\text{ges}}(\vec{x}) = \sum_i S_i^z \quad \text{bzw.} \quad M(\vec{x}) = \mu_B \sum_i S_i^z \quad (8)$$

berechnen. Uns interessieren bei gegebener Temperatur T die Mittelwerte der Energie $\langle E \rangle_T$ und der Magnetisierung $\langle M \rangle_T$. Thermischen Mittelwerte einer Observablen A können über dabei die Boltzmann-Verteilung bestimmt werden:

$$\langle A \rangle_T = \sum_i p_i A_i = \frac{1}{q} \sum_i \exp\left(-\frac{E_i}{k_B T}\right) A_i. \quad (9)$$

Im Fall des Ising-Magneten sind also bei einer gegebenen Temperatur T für alle möglichen Spinkonfiguration \vec{x}_i die Boltzmann-Gewichtungen $p_{\vec{x}_i}$ und die Zustandssumme $q = \sum_i \exp\left(-\frac{E_{\vec{x}_i}}{k_B T}\right)$ zu bestimmen. Man erkennt, dass bei Systemen mit großer Spinanzahl die exakte Berechnung der thermischen Mittelwerte in einem zeitlich vernünftigen Rahmen nicht mehr möglich ist. Stattdessen versucht man sie als statistisches Mittel aus einer deutlich kleineren Anzahl L an Spinkonfigurationen \vec{x}_l , $l = 1, \dots, L$ zu nähern. Die einfachste Möglichkeit – das **Simple Sampling** – besteht darin, zufällig Spinkonfigurationen zu wählen und diese mit den entsprechenden Boltzmann-Faktoren aufzusummieren

$$\langle A(\vec{x}) \rangle_T \approx \overline{A(\vec{x})}_T = \sum_l^L p_{\vec{x}_l} A(\vec{x}_l)$$

Da die zufällige Auswahl an Spinkonfigurationen gleichverteilt ist, kann bei kleinen L eine signifikante Abweichung zum erwarteten thermischen Mittelwert auftreten. Kann nur ein kleines L gewählt werden, ist es effizienter das sogenannte **Importance Sampling** anzuwenden. Die zufällige Auswahl einer Spinkonfiguration ist nicht mehr gleichverteilt, sondern mit seiner Wahrscheinlichkeit in der Boltzmann-Verteilung verknüpft. Eine solche Auswahl kann man über **Markov-Ketten** erreichen. Dabei entscheidet man, ob eine neue Spinkonfiguration berücksichtigt wird, gemäß folgender Regel:

1. \vec{x}_l sei gegeben. Man erzeugt die Konfiguration \vec{x}_{l+1} durch das Rotieren eines zufällig gewählten Spins.
2. Man berechnet den Energieunterschied $\Delta \mathfrak{E}$ zwischen \vec{x}_l und \vec{x}_{l+1} , sowie die Übergangswahrscheinlichkeit:

$$W(\vec{x}_l \rightarrow \vec{x}_{l+1}) = \frac{\exp\left(-\frac{\Delta \mathfrak{E}}{k_B T}\right)}{1 + \exp\left(-\frac{\Delta \mathfrak{E}}{k_B T}\right)}. \quad (10)$$

3. Man generiert eine Zufallszahl η zwischen 0 und 1. Falls $W(\vec{x}_l \rightarrow \vec{x}_{l+1}) > \eta$, wird die Spinkonfiguration \vec{x}_{l+1} berücksichtigt, sonst verworfen. Für den Spezialfall $T = 0$ K wird die Konfiguration \vec{x}_{l+1} akzeptiert, falls E_{l+1} gleich oder niedriger ist als E_l .

Als Folge der Anwendung der Markov-Ketten ergibt sich der gesuchte thermische Mittelwert direkt aus der Mittelwertbildung der einzelnen berücksichtigten $A(\vec{x}_l)$:

$$\overline{A(\vec{x})} = \frac{1}{L} \sum_{l=1}^L A(\vec{x}_l).$$

3 Durchführung

3.1 Anmerkungen

- a.) Sie benötigen zum Speichern der Daten einen USB-Stick.
- b.) Zur Durchführung der Monte-Carlo-Simulationen wird ein Java-basierende Programm verwendet. Die originale Version dieses Programms von *J. Nebus* ist online unter <http://www.rpi.edu/~limc/applets/ising/> zugänglich. Die hier installierte Version wurde so modifiziert, dass zusätzlich eine Ergebnisdatei (`simulat.dat`) erzeugt wird. In dieser werden, beginnend mit dem 500. Simulationsschritt, aller 100 Schritte die Werte:

i (Schritt), T (Temperatur), J (Kopplg.), E (Energie), M_z (Magnetisierung)

in jeweils einer Spalte abgespeichert. Mit Hilfe dieser Daten sollen die Phasenübergänge des Ising-Magneten analysiert werden.

3.2 Qualitative Untersuchungen

Versuchsvorbereitung & Programmstart

Öffnen Sie ein Terminalfenster¹ durch Anklicken des Bildschirmsymbols in der unteren Menüleiste. Wechseln Sie in das Unterverzeichnis `WS1011_C2`:

```
cd WS1011_C2
```

Erzeugen Sie ein Unterverzeichnis mit Ihrer Gruppennummer, z. B. `Gruppe_X1` via²:

```
mkdir Gruppe_X1
```

und wechseln Sie in dieses Unterverzeichnis durch den Befehl:

```
cd Gruppe_X1
```

Aus diesem Unterverzeichnis starten Sie das Simulationsprogramm mit dem Befehl:

```
MonteCarlo
```

Es öffnet sich ein Fenster mit dem Titel *Monte Carlo Simulations*.

¹<http://www.ee.surrey.ac.uk/Teaching/Unix/>

²Achtung, Linux ist ein "case-sensitive"s Datensystem

Programmeinstellungen für 2-dimensionalen Ising-Magneten

Klicken Sie **nur einmal** auf die Schaltfläche **Change parameters**. Es öffnet sich ein zweites Fenster mit dem Titel: *Set Model Parameters*. In diesem Fenster lassen sich die gewünschten Simulationsbedingungen einstellen. Für einen Ising-Magneten stellen Sie die folgenden Parameter ein:

<i>Number of x lattice points:</i>	20
<i>Number of y lattice points:</i>	20
<i>Number of z lattice points:</i>	1
<i>Periodic X Boundaries:</i>	ein
<i>Periodic Y Boundaries:</i>	ein
<i>Periodic Z Boundaries:</i>	aus
<i>Constrained to Z axis:</i>	ein
<i>Equalize after Resets:</i>	ein

Wählen Sie außerdem $T = 100$ K, eine prozentuale Temperaturerniedrigung (*Temperature Decline Percentage*) von 1 und eine Kopplungskonstante (*Interaction Strength*) von $J = 1$. Änderungen der Parameter werden erst durch Anklicken der Schaltfläche **Set These Parameters** wirksam. Starten Sie die Simulation.

3.2.1 2D-Ising-Magnet

Beschreiben Sie ihre Beobachtungen bezüglich der Änderung der Anordnung der Spins während der Simulation. Wiederholen Sie das Absenken der Temperatur mehrfach, indem Sie die aktuelle Simulation mit der Schaltfläche **Stop** anhalten, die ursprünglichen Einstellung über **Set These Parameters** wiederherstellen, und schließlich die Simulation erneut starten (**Start**).

Beantworten Sie für das Protokoll folgende Fragen:

- Wie verändert sich die Anordnung der Spins während der Abkühlung?
- Wie sieht der Endzustand in Bezug auf Art und Anzahl der Phasen aus?
- Ist der Endzustand immer gleich?

3.2.2 Einfluss des Magnetfeldes

Führen Sie mit den bisherigen Einstellungen ein Serie aus Simulationen unter dem Einfluss verschieden starker als auch verschieden ausgerichteter Magnetfelder durch. Vergleichen Sie Verlauf und Ergebnisse der Simulationen mit denen aus der Aufgabe 3.2.1. Welchen Einfluss hat das Anlegen sowie die Richtung eines Magnetfeldes auf die Simulation?

3.2.3 Einfluss der Kopplungskonstante

Variieren Sie die Kopplungskonstante J unter Beibehaltung aller bisherigen Einstellungen. Kombinieren Sie sowohl positive und negative als auch große und kleine Kopplungskonstanten mit verschiedenen Magnetfeldstärken (einschließlich kein Magnetfeld). Worin besteht der Unterschied zu den Ergebnissen aus 3.2.1 und 3.2.2? Diskutieren Sie besonders die Ergebnisse der negativen Kopplungskonstanten.

3.2.4 Simulation von Spinfrustration durch die Wahl verschiedener Randbedingungen

Hintergrund: Normalerweise beobachtet man Spinfrustration bei antiferromagnetischen Kopplungen und trigonalen Gittern. Zu zwei antiparallel ausgerichteten Spins, gibt es

einen dritten, der zu diesen beiden Spins gleichzeitig antiparallel sein möchte. Da dies nicht möglich ist, kann er sich nicht entscheiden, welche Richtung er annehmen soll.

Im Fall eines 2D-Ising-Antiferromagnets in trigonalen Gittern braucht es zwei Spinbesetzungen, die zudem energetisch entartet sind, um die Spinfrustration darzustellen. Auch für das kubisch-primitive Gitter, das in diesem Versuch zur Anwendung kommt, lassen sich unter bestimmten Umständen Spinfrustrationen erzeugen. Diese sind gegeben, wenn ein Spin von der gleichen Anzahl *paralleler* und *antiparalleler* Spins umgeben ist. Unter diesen Voraussetzungen tritt bei Spinumkehr keine energetische Veränderung im System auf. Der Algorithmus des Java-Applets erlaubt dann auch Spinveränderung bei $T = 0$ K.

Versuchen Sie den Zustand einer Spinfrustration unter Beibehaltung aller bisherigen Einstellungen – aber negativer Kopplungskonstante und ausgeschaltetem Magnetfeld – zu finden, indem Sie:

- die Gittergröße in X- und/oder Y-Richtung zwischen ungeraden und geraden Werten variieren,
und
- die periodischen Randbedingungen in X- und/oder Y-Richtung ein- und ausschalten.

Zeigen Sie in einer Skizze (für das Protokoll) die Position der Spinfrustration im kubisch-primitiven Gitter.

3.3 Quantitative Untersuchung des Phasenübergangs

Vorbereitung

Stoppen Sie die Simulation und löschen Sie die Datei `simul.dat` mit dem Befehl in dem Terminalfenster:

```
rm simul.dat
```

3.3.1 Phasenübergang im zweidimensionalen Ising-Magneten

Für diesen Teil des Versuchs stellen Sie die folgenden Parameter ein:

<i>Number of x lattice points:</i>	10
<i>Number of y lattice points:</i>	10
<i>Number of z lattice points:</i>	1
<i>Periodic X Boundaries:</i>	ein
<i>Periodic Y Boundaries:</i>	ein
<i>Periodic Z Boundaries:</i>	aus
<i>Temperature decline:</i>	aus
<i>Equalize after Resets:</i>	aus

Beachten Sie, dass der Phasenübergang aus einer geeigneten Anzahl von Datenpaaren (Temperatur versus Magnetisierung) gezeichnet oder mit einem geeigneten Programm gefittet werden soll. Da der Phasenübergang einen Sprung darstellt, ist es ratsam erst über einen großen Temperaturbereich mit großen Intervallen, z.B. 10 K, nach dem Phasenübergang zu suchen. Ist dieser gefunden oder abgeschätzt, sollten im Sprungbereich mindestens 10 Datenpaare bestimmt werden. Bezogen auf einen Sprungbereich von z.B. 10 K, sollten somit Datenpaaren im Abstand von 1 K nach Beendigung der Untersuchung vorliegen. Weiterhin sollten vor und nach dem Sprungbereich jeweils 3 bis 4 Datenpaare

vorhanden sein. Hier sind große Intervalle für die graphische Formgebung des Phasenübergangs vorteilhaft.

Die thermisch gemittelte Magnetisierung $\overline{M_z}(T)$ wird in diesem Versuch durch das Importance Sampling bestimmt. Hierfür ist es ausreichend mit dem Java-Applet 20 Werte zu einer festgelegten Temperatur generieren zu lassen. Nach der Eingabe einer Temperatur starten Sie die Simulation und warten jeweils solange ab, bis diese 20 Werte in die Datei `simul.dat` geschrieben wurden. Da die Datei permanent neu beschrieben wird, ist ein ständiges Neuladen der Datei in einem Editor umständlich. Unter Linux gibt es die Möglichkeit mit dem `tail` Befehl immer das aktuelle Ende einer Datei anzeigen zu lassen. In diesem Versuch sollen immer die letzten 100 Zeilen von `simul.dat` angezeigt werden. Dazu geben Sie nach dem Start der Simulation in der Konsole ein:

```
tail -100f simul.dat
```

*Hinweis: Die Ausgabe dieses Befehls "blockiert" die Konsole für weitere Eingaben. Das Beenden dieses tail Befehls erfolgt durch gleichzeitiges Drücken von **Strg** und **C**.*

Wählen Sie nun eine Kopplungskonstante zwischen **J = 10** und **20** aus. Sind weitere Praktikumsgruppen anwesend, sprechen Sie sich untereinander ab, sodass keine Doppelbestimmungen auftreten.

Nach Beendigung aller Simulationen zur gewählten Kopplungskonstante speichern Sie die Datei `simul.dat` unter einem neuen Namen ab; empfohlen ist die eigene Gruppennummer und den aktuellen J -Wert "yy" zu verwenden, d.h. `Gruppe-X1_yyJ_2D.dat`. Der Befehl lautet:

```
mv simul.dat Gruppe-X1_yyJ_2D.dat
```

Hinweis: Vergessen Sie nicht die Bildung der **Beträge** aller M_z vor der Mittelwertbildung. Sowohl die Mittelwertbildung, die graphische Auftragung von $\overline{M_z}(T)$ als Funktion der Temperatur, als auch die nichtlineare Anpassungen (Fit) kann mit einem Tabellenkalkulationsprogramm ihrer Wahl durchgeführt werden. T_c ist dabei dem Wendepunkt der Fitfunktion gleichzusetzen.

3.3.2 Abhängigkeit des Phasenübergangs von der Kopplungsstärke

Wiederholen Sie Aufgabe 3.3.1 für zwei weitere J -Werte zwischen **20** und **60**. Sind weitere Praktikumsgruppen anwesend, sprechen Sie sich untereinander ab, sodass keine Doppelbestimmungen auftreten.

Beachten Sie dass im Allgemeinen größere Kopplungskonstanten höhere Curie-Temperaturen bewirken. Warum ist das so? Verändern Sie entsprechend Ihren Temperaturbereich zur Suche nach dem Phasenübergang. Für das Protokoll werten Sie bitte auch die Daten zu den Kopplungskonstanten der anderen teilnehmenden Praktikumsgruppe(n)³ aus und tragen $T_c(J)$ als Funktion der Kopplungskonstante J auf. Diskutieren Sie das Ergebnis.

3.3.3 Phasenübergang im dreidimensionalen Ising-Magneten

Ermitteln Sie für eine bereits von Ihnen untersuchte Kopplungskonstante J den Phasenübergang eines 3D-Ising-Magneten. Bestimmen Sie die Curie-Temperatur und vergleichen

³Falls keine weiteren Praktikumsgruppen teilnehmen, bekommen Sie vom Assistenten weitere Datensätze.

Sie diese mit dem 2D-Ising-Magneten. Diskutieren Sie die Ursachen eventueller Unterschiede.

Folgende Parameter von Aufgabe 3.3.1 sind zu verändern:

Number of z lattice points: 4
Periodic Z Boundaries: ein

4 Literatur

- Informieren Sie sich zur Funktionsweise des Ising-Simulators unter:
<http://www.rpi.edu/~limc/applets/ising/>
<http://threeplusone.com/code/ising.html>.
- Falls Sie noch nicht mit Linux/Unix-Systemen gearbeitet haben, machen Sie sich mit der Terminalbenutzung vertraut.
<http://www.ee.surrey.ac.uk/Teaching/Unix/>
- Weitere Information zum Ising-Model erfahren Sie unter:
<http://www.physik.tu-dresden.de/itp/members/kobe/isingphbl/>.
- Detaillierte Beschreibung zu Festkörpern im äußeren Magnetfeld und kollektivem Magnetismus können Sie nachschlagen in den Kapiteln **10** und **12** des Buchs:
Gerd Czycholl. *Theoretische Festkörperphysik - Von den klassischen Modellen zu modernen Forschungsthemen* (Vieweg Verlag, 2000).
- Grundlegendes zum Magnetismus finden Sie unter:
Horst Stöcker. *Taschenbuch der Physik* (Verlag Harri Deutsch, 2005), 5. Edition.
Kapitel **15.10–15.20** and **29.8**.