

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

17. April 2020

Inhaltsverzeichnis

1 Ziele	3
2 Einführung	3
2.1 Festkörper im äußeren Magnetfeld	3
2.2 Mikroskopische Beschreibung magnetischen Verhaltens	3
2.2.1 Das Ising-Modell	4
2.2.2 Die Bedeutung des Ising-Modells für die Physikalische Chemie	5
2.3 Beschreibung des makroskopischen Magnetismus	6
2.3.1 Ensembles	6
2.3.2 Anzahl der Zustände: (Quanten-)Statistiken	7
2.3.3 Statistische Beschreibung und thermischer Mittelwert	8
2.3.4 Monte-Carlo-Verfahren	8
2.3.5 Markov-Ketten	9
3 Durchführung	10
3.1 Erste Schritte	10
3.1.1 Quantitative Bestimmung des Phasenübergangs	11
3.2 Qualitative Untersuchungen	11
3.2.1 2D-Ising-Magnet	12
3.2.2 Einfluss des Magnetfeldes	12
3.2.3 Einfluss der Kopplungskonstante	12
3.2.4 Simulation von Spinfrustration	13
3.3 Quantitative Bestimmung des Phasenübergangs	13
3.3.1 2D-Simulation	14
3.3.2 3D-Simulation	14

4	Protokoll	15
A	Anhang: Bestimmung der Curie-Temperatur	16
A.1	Fitten mit dem Programm <code>gnuplot</code>	16

1 Ziele

In diesem Versuch soll die Temperatur des Phasenübergangs zwischen dem ferro- und paramagnetischen Verhalten eines Festkörpers anhand des Ising-Modells bestimmt werden. Des Weiteren sind der Einfluss von Temperatur und Magnetfeldern sowie von Gitterperiodizität auf den antiferromagnetischen Festkörper mit dem gleichen Modell qualitativ zu beschreiben.

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 einteilen: Paramagnetismus, Ferromagnetismus und Antiferromagnetismus.

- Paramagnetismus:

Hier gilt eine umgekehrt proportionale Abhängigkeit: $\chi_M(T) \propto \frac{1}{T}$.

- Ferromagnetismus:

Unterhalb einer kritischen Temperatur, der Curie-Temperatur T_C , 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. Oberhalb von T_C liegt paramagnetisches Verhalten vor.

- Antiferromagnetismus:

Unterhalb einer kritischen Temperatur, der Néel-Temperatur T_N , richten sich die Spins antiparallel aus und die magnetische Suszeptibilität verschwindet beim absoluten Nullpunkt, d.h. $\chi(T = 0) = 0$. Auch ohne äußeres Magnetfeld erfolgt unterhalb von T_C eine spontane Magnetisierung. Oberhalb von T_N liegt paramagnetisches Verhalten vor.

2.2 Mikroskopische Beschreibung magnetischen Verhaltens

Die Wechselwirkung der Spins bestimmt maßgeblich die magnetische Ordnung in Festkörpern. Dabei sind die Dipol-Dipol-Wechselwirkungen zwischen den magnetischen Momenten viel zu schwach, um quantitativ die Effekte magnetischer Ordnungen zu beschreiben. Vielmehr beruht der Mechanismus auf der Austauschwechselwirkung, d.h. der Ununterscheidbarkeit identischer Teilchen wie beispielsweise Elektronen, so dass ein reiner Quanteneffekt vorliegt. Ausgehend von der allgemeinen quantenmecha-

nischen Grundgleichung, der Schrödinger-Gleichung

$$\hat{H}\Psi_n = E_n\Psi_n, \quad (1)$$

muss zunächst der Hamilton-Operator aufgestellt werden, der die Wechselwirkung beschreibt. Im vorliegenden Fall kann dies mit dem Heisenberg-Modell geschehen, bei dem der Hamilton-Operator folgende Form annimmt:

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

Hierbei sind

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

der Heisenberg-Operator, der die Wechselwirkung der einzelnen Spinzentren untereinander beschreibt, und

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

der Zeeman-Operator, der die Wechselwirkungen der einzelnen Spinzentren mit einem äußeren Magnetfeld \vec{B} beschreibt. J_{ij} beschreibt die Austausch-Kopplung zwischen den Spins S_i

2.2.1 Das Ising-Modell

Im einfachsten Fall des Heisenberg-Modells nimmt man nur einen Spin $= -1/2$ an jedem Gitterplatz an und es gilt $J_{ij} = J_{ji}$. Beschränkt man die Wechselwirkung weiterhin nur auf den nächsten Nachbarn, so spricht man von der Tight-Binding-Näherung:

$$J_{ij} = \begin{cases} J & \text{falls } i,j \text{ nächste Nachbarn} \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (5)$$

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

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

Die neue Form des Heisenberg-Operators wird dabei auch als Ising-Operator bezeichnet. Das Ising-Modell und alle genannten Näherungen werden in diesem Versuch zur Berechnung der Magnetisierung und Energien der Modell-Festkörper benutzt.

Die Schrödinger-Gleichung ist eine Eigenwertgleichung und erfordert häufig das Berechnen der Eigenwerte und Eigenvektoren. Alternativ kann für jede beliebige Wellenfunktion, d.h. im vorliegenden Fall

Spinkonfiguration \vec{x}_n , der Erwartungswert berechnet werden:

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

auch wenn es sich bei \vec{x} um keine Eigenfunktion des Operators handelt. Für einen Ising-Magneten aus N Spins besteht der Phasenraum aus den 2^N möglichen Spinkonfigurationen, und die Spinkonfigurationen lassen sich schreiben als:

$$\vec{x} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \dots \\ x_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} s_1^z \\ s_2^z \\ \dots \\ s_N^z \end{pmatrix} \quad (8)$$

Hierbei ist s_i^z die S_z -Komponente des lokalen Spins am Zentrum i und kann nur die Werte $\pm S_i^z$ annehmen, siehe oben. Der Gesamtspin S_{ges} bzw. die Magnetisierung M_{ges} lassen sich aus einem Vektor berechnen als:

$$S_{\text{ges}} = \sum_i^N x_i = \sum_i^N s_i^z \quad (9)$$

$$M_{\text{ges}} = \mu_B S_{\text{ges}} \quad (10)$$

2.2.2 Die Bedeutung des Ising-Modells für die Physikalische Chemie

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. ¹ Bedauerlicherweise hat er für diesen Fall keinen ferromagnetischen Phasenübergang gefunden. Lars Onsager gelang es 1944, das Ising-Modell für den 2D-Fall analytisch zu lösen und einen Phasenübergang vorherzusagen. Für den 3D-Fall wurde das Ising-Modell noch nicht analytisch gelöst und man ist auf numerische Verfahren angewiesen wie beispielsweise auch für die molekulare Schrödinger-Gleichung in der Quantenchemie, siehe Versuch C1.

Die Beschränkung auf zwei Zustände legt es nahe, das Ising-Modell auch auf andere Phasenübergänge anzuwenden, beispielsweise den Phasenübergang flüssig-gasförmig eines Einkomponentensystems oder die flüssig-flüssig-Entmischung in einem Zweikomponentensystem. ² Den beiden Zuständen "Spin-up" und "Spin-down" entsprechen dann die beiden Dichten $\rho_{\text{fl.}}$ und $\rho_{\text{gasf.}}$. Das Analogon zur Curie-Temperatur ist dann die jeweilige kritische Temperatur. Die Dichtedifferenz, d.h. $\Delta\rho = \rho_{\text{fl.}} - \rho_{\text{gasf.}}$, bzw. die Konzentrationsdifferenz, d.h. $\Delta x = x_{\text{fl.}} - x_{\text{gasf.}}$, entsprechen somit der Magnetisierung, $M_z = n''_{\text{Spin-up}} - n''_{\text{Spin-down}}$. Diese Größen bezeichnet man auch als Ordnungsparameter des Phasenübergangs.

Die Leistung des Ising-Modells liegt darin, das Verschwinden des Ordnungsparameters bei Annäherung

¹E. Ising, Zeitschr. f. Physik **31**, 253 (1925); W. Lenz, Physik. Zeitschr. **21**, 613 (1920).

²siehe z.B. S. G. Brush, Rev. Mod. Phys. **39**, 883 (1967); W. Gebhardt, U. Krey, *Phasenübergänge und kritische Phänomene*, Vieweg, Braunschweig (1980).

an den kritischen Punkt quantitativ richtig vorherzusagen. Das Ising-Modell liefert gleichsam die richtige Form der Koexistenzkurve. In der Nähe des kritischen Punkts gelten folgende Skalengesetze (für $T \leq T_C$):

$$M \propto (T_C - T)^\beta \quad (11)$$

$$\Delta\rho \propto (T_C - T)^\beta \quad (12)$$

$$\Delta x \propto (T_C - T)^\beta, \quad (13)$$

wobei der gleiche Exponent β für alle drei Größen verwendet wird! Für den kritischen Exponenten erhält man aus numerischen Simulationen des 3D-Ising-Modells $\beta \approx 1/3$, den man auch im Experiment misst. Die klassische van-der-Waals-Zustandsgleichung für reale Gase liefert mit $\beta_{\text{vdW}} = 1/2$ einen falschen Exponenten.

2.3 Beschreibung des makroskopischen Magnetismus

In der Quantenmechanik wird ein N -Teilchensystem bei einer Temperatur von 0K beschrieben. Um, basierend auf einer quantenmechanischen Grundlage, Phasenübergänge untersuchen zu können, muss eine Beschreibung des temperaturabhängigen Verhaltens des Systems erfolgen. Eine solche Beschreibung ist mittels Methoden der statistischen Physik möglich.

2.3.1 Ensembles

Ein Ensemble (oder die Gesamtheit) ist in der statistischen Physik eine Menge gleichartig präparierter Teilchen im thermodynamischen Gleichgewicht. Unter anderem können folgende Ensembles unterschieden werden:

Name	Gegebene Größen	System
Mikrokanonisch	U, V, N	abgeschlossen
Kanonisch	T, V, N	geschlossen bzgl. V und N
Großkanonisch	T, V, μ	offen

U : innere Energie, V : Volumen, T : Temperatur, N : Teilchenzahl, μ : chemisches Potential

Abb. 1 zeigt schematisch das kanonische Ensemble (links), in dem das System S offen gegenüber Energieaustausch mit einem Reservoir R (Wärmebad) ist, aber isoliert gegenüber Austausch von Teilchen N oder Volumen V . Dabei ist das Reservoir makroskopisch und sehr viel größer als das System S, das im Extremfall aus einem einzelnen Teilchen bestehen darf. Das Gesamtsystem R+S ist wieder abgeschlossen (isoliert) und kann als mikrokanonisches Ensemble betrachtet werden. Im kanonischen Ensemble ist das System S offen bezüglich Energieaustausch mit einem makroskopischen Reservoir R, und es gilt $T = T_R = T_S$. Teilchenzahlen N_S, N_R und Volumina V_S, V_R von System und Reservoir sind fest.

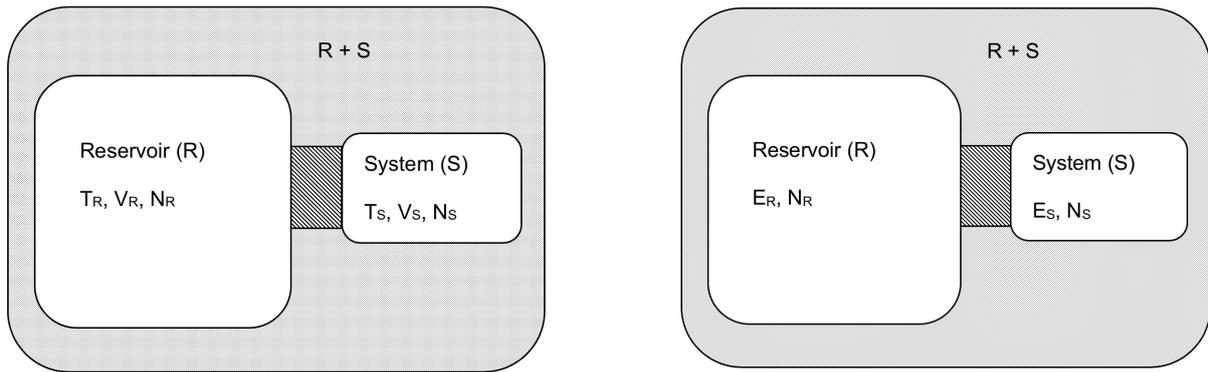


Abbildung 1: Links: Im **kanonischen Ensemble** ist das System S offen bezüglich Energieaustausch mit einem makroskopischen Reservoir R, und es gilt $T = T_R = T_S$. **Rechts:** Im **großkanonischen Ensemble** ist das System S offen bezüglich Energie- und Teilchenaustausch mit einem makroskopischen Reservoir R, und es gilt $T = T_R = T_S$ sowie $\mu = \mu_R = \mu_S$.

Abb. 1 zeigt ebenfalls schematisch das großkanonische Ensemble (rechts), in dem das System S offen bezüglich Energie- und Teilchenaustausch mit einem makroskopischen Reservoir ist, aber isoliert gegenüber Austausch von Volumen V .

Je nach Ensemble stellt sich nun die Frage nach der Wahrscheinlichkeit eines (einzelnen) Zustands. Hierzu muss die Anzahl der möglichen Zustände berechnet werden unter gleichzeitiger Berücksichtigung, dass mehrere Zustände die gleiche Energie haben können.

2.3.2 Anzahl der Zustände: (Quanten-)Statistiken

Man geht davon aus, dass sich das Gesamtsystem in einem Zustand befindet, der durch makroskopische Größen bestimmt ist, aber durch eine große Anzahl von Mikrozuständen beschrieben werden kann. Bei Magnetismus ist dies unumgänglich, da Magnetismus auf einer quantenmechanischen Beschreibung beruht. In der Quantenstatistik müssen also die Mikrozustände gezählt werden unter der Berücksichtigung, dass ein Vertauschen zweier gleicher Teilchen keinen neuen Mikrozustand hervorbringt.

Es werden folgende Statistiken unterschieden:

1) Bose-Einstein-Statistik:

Teilchen sind ununterscheidbar, mehrere Teilchen können den gleichen Ein-Teilchen-Zustand besetzen.

2) Fermi-Dirac-Statistik:

Teilchen sind ununterscheidbar, mehrere Teilchen können nicht den gleichen Ein-Teilchen-Zustand besetzen.

3) Boltzmann-Statistik:

Unterscheidbarkeit bei der Abzählung, z.B. Unterscheidbarkeit von Ein-Teilchen-Zuständen ("Spin-

up" vs. "Spin-down"), wobei jeder Ein-Teilchen-Zustand beliebig oft besetzt sein darf. Bei großen Energien bzw. Temperaturen gehen die Fermi-Dirac-Statistik und die Bose-Einstein-Statistik in die Boltzmann-Statistik über.

Fragen:

- 1) Wie viele Möglichkeiten gibt es, 2 ununterscheidbare Teilchen auf 3 Kästen zu verteilen, wobei beliebig viele in jedem Kasten Platz haben?
- 2) Wie viele Möglichkeiten gibt es, 2 Elektronen auf 3 Spinorbitale zu verteilen?
- 3) Wie viele Möglichkeiten gibt es, die Spins von 3 Spinzentren entlang der z-Achse auszurichten?

Skizzieren Sie jeweils alle Möglichkeiten und benennen Sie die Statistik!

2.3.3 Statistische Beschreibung und thermischer Mittelwert

Grundlegend für die statistische Physik ist die Einführung thermischer Mittelwerte von Energie, d.h. $\langle E \rangle_T$, und Magnetisierung, d.h. $\langle M \rangle_T$. Diese Mittelwerte einer (beliebigen) Observablen A können für ein kanonisches Ensemble über die Boltzmann-Verteilung bestimmt werden:

$$\langle A \rangle_T = \sum_n^{2^N} p_n(T) A_n. \quad (14)$$

Hierbei stellt der Summationsindex i alle Spinkonfigurationen dar. Das Boltzmann-Gewicht $p_n(T)$ der jeweiligen Spinkonfiguration ist gegeben als Boltzmann-Faktor geteilt durch eine Normierungskonstante,

$$p_n = \frac{1}{q} \exp\left(-\frac{E_n}{k_B T}\right). \quad (15)$$

Damit die Summe aller Gewichte p_n normiert ist, ergibt sich die Normierungskonstante als

$$q = \sum_n^{2^N} \exp\left(-\frac{E_n}{k_B T}\right), \quad (16)$$

und wird als Zustandssumme bezeichnet.

Im vorliegenden Fall beträgt die Anzahl der Zustände (Spinkonfigurationen) 2^N , so dass für kleine Festkörpermodelle von $10 \times 10 \times 10$ bereits $2^{1000} \approx 10^{301}$, d.h. eine eins mit 300 Nullen (!), Summanden berücksichtigt werden müssten. Somit ist auch eine numerische Lösung des 3D-Ising-Modells für sehr kleine Beispiele zunächst jenseits der Anwendbarkeit.

2.3.4 Monte-Carlo-Verfahren

Um das Problem der (zu) großen Anzahl an Summanden in der Berechnung des thermischen Mittelwerts zu bewältigen, versucht man, die thermischen Mittelwerte als statistisches Mittel aus einer deutlich

kleineren Anzahl L an Spinkonfigurationen zu nähern.

Die einfachste Möglichkeit, das **Simple-Sampling**, besteht darin, zufällige Spinkonfigurationen zu wählen und diese mit den entsprechenden Boltzmann-Faktoren aufzusummieren:

$$\langle A \rangle_T \approx \sum_l^L p_l(T) A_l. \quad (17)$$

In diesem Verfahren ist die zufällige Auswahl an Spinkonfigurationen gleichverteilt, so dass bei kleinen L eine signifikante Abweichung zum erwarteten Mittelwert auftreten. Im Umkehrschluss bedeutet dies, dass L vergleichsweise groß gewählt werden muss, um quantitative Ergebnisse zu erhalten, so dass die Rechenzeit immer noch signifikant sein wird und sich ggf. kein echter Vorteil ergibt.

Sollen oder können nur wenige Summanden berechnet werden, d.h. kann nur ein kleines L gewählt werden, ist es effizienter das **Importance-Sampling** anzuwenden. Die Auswahl der Terme ist hierbei wieder zufällig, jedoch nicht mehr gleichverteilt, sondern mit seiner Wahrscheinlichkeit in der Boltzmann-Verteilung verknüpft, so dass sich eine signifikant bessere Statistik ergibt.

2.3.5 Markov-Ketten

Eine technische Umsetzung des Importance-Sampling, d.h. der Verknüpfung der Auswahl der Terme an die Boltzmann-Verteilung, kann über Markov-Ketten erreicht werden. 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 ("Umklappen") eines zufällig gewählten Spins.
- 2) Man berechnet den Energieunterschied $\Delta = \langle E \rangle_l - \langle E \rangle_{l+1}$ und daraus die Übergangswahrscheinlichkeit wie folgt:

$$W(\vec{x}_l \rightarrow \vec{x}_{l+1}) = \frac{\exp\left(-\frac{\Delta}{k_B T}\right)}{1 + \exp\left(-\frac{\Delta}{k_B T}\right)}. \quad (18)$$

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

Als Folge der Anwendung der Markov-Kett ergibt sich der gesuchte thermische Mittelwert direkt aus der Mittelwertbildung der einzelnen berücksichtigten Summanden:

$$\langle A \rangle_T \approx \frac{1}{L} \sum_l^L A_l. \quad (19)$$

3 Durchführung

3.1 Erste Schritte

- 1) Öffnen Sie ein Terminalfenster (verfügbar unter "System").
- 2) Durch Eingabe von `ll` können Sie den Inhalt des aktuellen Verzeichnisses sehen.
- 3) Wechseln Sie in das Verzeichnis für das F-Praktikum:

```
cd F_PRAKTIKUM_RECHNUNGEN
```

- 4) Ggf. Eingabe von `ll`.
- 5) Wechseln Sie in das Verzeichnis für das aktuelle Semester:

```
cd SSXX_C2      bzw.      cd WSXX_C2
```

- 6) Ggf. Eingabe von `ll`.
- 7) Erstellen Sie sich ein Gruppenverzeichnis:

```
mkdir Gruppe_XY
cd Gruppe_XY
```

- 8) Starten Sie das Programm: `MonteCarlo`

Zur Durchführung der Monte-Carlo-Simulation wird ein Java-basierendes Programm verwendet. Die Originalversion dieses Programms von J. Nebus ist online zugänglich:

<http://homepages.rpi.edu/~limc/applets/ising/>

Die hier installierte Version wurde so modifiziert, dass zusätzlich die Ergebnisdatei "simul.dat" erzeugt wird. In dieser werden, beginnend mit dem 500. Simulationsschritt, alle 100 Schritte die Werte:

Schritt i , Temperatur T , Kopplungskonst. J , Energie E , Magnetisierung M_z

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

Klicken Sie einmal auf die Schaltfläche "Change parameters". Es öffnet sich ein zweites Fenster mit dem Titel "Set Model Parameters". In diesem Fenster lassen sich die Simulationsbedingungen einstellen.

Klicken Sie bei jeder Simulation immer:

- (a) "Set these parameters"
- (b) "Equalize"
- (c) "Start"

3.1.1 Quantitative Bestimmung des Phasenübergangs

Aufnehmen der Messwerte:

- 1) Durch Eingabe von

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

im Terminalfenster wird die Datei kontinuierlich auf dem Bildschirm ausgegeben. Eine Zeile entspricht einem Messwert.

- 2) Nehmen Sie ca. 20 Messwerte auf.
- 3) Bilden Sie die Beträge der aufgenommenen Magnetisierungen, d.h. $|M_z|$.
- 4) Berechnen Sie den Mittelwert \bar{M}_z aus den erhaltenen Beträgen.

Hinweis: Die Ausgabe der Datei "blockiert" die Konsole für weitere Eingaben. Die Ausgaben kann durch Drücken von Strg+c abgebrochen werden, falls das Programm neu gestartet werden muss.

Vorgehensweise zur Bestimmung des Phasenübergangs:

- 1) Suchen Sie in Schritten von 50 K und anschließend 25 K zunächst grob nach dem Phasenübergang.
- 2) Im Sprungbereich müssen 7 Datenpaare im Abstand von 2 K vorliegen.
- 3) Vor und nach dem Sprungbereich sollten jeweils 4 Datenpaare mit mindestens 10 K-Schritten für die graphische Formgebung des Phasenübergangs vorliegen.
- 4) Schliesslich soll der Phasenübergang mit einem geeigneten Programm gefittet werden. T_C ist dabei dem Wendepunkt der Fitfunktion gleichzusetzen.

3.2 Qualitative Untersuchungen

Stellen Sie folgende Simulationsbedingungen ein:

Number of x lattice points	20
Number of y lattice points	20
Number of z lattice points	1
Temperature	100
Temperature decline percentage	1
Interaction strength	1
Periodic X boundaries	"ein" (Haken setzen)
Periodic Y boundaries	"ein"
Periodic Z boundaries	"aus" (Haken entfernen)
Movement	"Constrained to Z axis"
Equalize after Resets	"ein" (Haken setzen)

3.2.1 2D-Ising-Magnet

Wiederholen Sie das Absenken der Temperatur mehrfach, indem Sie die Simulation mit den gleichen Einstellungen durchführen. Hierzu drücken Sie "Stop" und danach erneut "Set these parameters", "Equalize" und "Start". Beschreiben Sie Ihre Beobachtungen:

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

3.2.2 Einfluss des Magnetfeldes

Führen Sie mit den bisherigen Einstellungen eine Serie aus Simulationen unter dem Einfluss verschiedenen starker als auch verschieden ausgerichteter Magnetfelder aus.

- 1) Wie verändert sich die Anordnung der Spins während der Abkühlung?
- 2) Wie sieht der Endzustand in Bezug auf Art und Anzahl der Phasen aus?
- 3) Ist der Endzustand immer gleich?
- 4) Geben Sie eine zusammenfassende Schlussfolgerung ab, bei der Sie mit den Ergebnisse aus [3.2.1](#) vergleichen.

3.2.3 Einfluss der Kopplungskonstante

Variieren Sie die Kopplungskonstante J . Verwenden Sie hierzu positive und negative Kopplungskonstanten (einschließlich $J = 0$) sowie positive und negative Magnetfeldstärken (einschließlich keinem Magnetfeld).

- 1) Was beobachten Sie bei $J = 0$ und ausgeschaltetem Magnetfeld?
- 2) Was beobachten Sie bei $J = 0$ und eingeschaltetem Magnetfeld?
- 3) Was beobachten Sie bei negativem J und ausgeschaltetem Magnetfeld?
- 4) Was beobachten Sie bei negativem J und eingeschaltetem Magnetfeld?
- 5) Interpretieren Sie explizit die Fälle $J < 0$, $J = 0$, und $J > 0$ auf Basis der gemachten Beobachtungen.

3.2.4 Simulation von Spinfrustration

Eine manchmal verwendete Erklärung im "Laborslang" für Spinfrustration lautet: 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.

- 1) Geben Sie eine Beschreibung von Spinfrustration in der Fachsprache an, d.h. beispielsweise unter Verwendung der Begriffe "Energie" bzw. "Energiegewinn" oder "Entartung".

Normalerweise beobachtet man Spinfrustration bei antiferromagnetischen Kopplungen und trigonalen Gittern. Für ein 2D kubisch primitives Gitter im vorliegenden Versuch kann unter gewissen Randbedingungen ebenfalls Spinfrustration erzeugt werden.

- 2) Was ist die Grundvoraussetzung für das Vorliegen von Spinfrustration im vorliegenden 2D kubisch primitiven Gitter?

Versuchen Sie den Zustand einer Spinfrustration unter Beibehaltung der bisherigen Einstellungen ($J < 0$ und kein Magnetfeld) zu finden, indem Sie die Gittergrößen in x- und y-Richtung zwischen geraden und ungeraden Werten variieren und die periodischen Randbedingungen in x- und y-Richtung ein- und ausschalten.

- 3) Wann erhalten Sie eine Spinfrustration?
- 4) Zeigen Sie in einer Skizze die gefundene Position der Spinfrustration im vorliegenden 2D-Gitter.

3.3 Quantitative Bestimmung des Phasenübergangs

Stellen Sie folgende Simulationsbedingungen ein:

Number of x lattice points	10
Number of y lattice points	10
Number of z lattice points	1
Temperature	10
Temperature decline percentage	0
Periodic X boundaries	"ein" (Haken setzen)
Periodic Y boundaries	"ein"
Periodic Z boundaries	"aus" (Haken entfernen)
Movement	"Constrained to Z axis"
Equalize after Resets	"aus" (Haken entfernen)

Löschen Sie nun im Terminalfenster die Datei "simul.dat": `rm simul.dat`

3.3.1 2D-Simulation

Wählen Sie drei unterschiedliche Kopplungskonstanten mit $10 \leq J_1 \leq 20 < J_2 \leq 40 < J_3 \leq 60$ aus. Bestimmen Sie gemäß den Angaben unter 3.1.1:

- 1) Die Curie-Temperatur für $10 \leq J_1 \leq 20$ im 2D-Ising-Magneten.
- 2) Die Curie-Temperatur für $20 < J_2 \leq 40$ im 2D-Ising-Magneten.
- 3) Die Curie-Temperatur für $40 < J_3 \leq 60$ im 2D-Ising-Magneten.

3.3.2 3D-Simulation

Ändern Sie, ausgehend von den aktuellen Einstellungen, folgende Simulationsbedingungen:

Number of z lattice points	4
Periodic Z boundaries	"ein" (Haken setzen)

- 1) Bestimmen Sie gemäß den Angaben unter 3.1.1 für J_2 die Curie-Temperatur im 3D-Ising-Magneten.
- 2) Diskutieren Sie das Ergebnis, indem Sie mit dem 2D-Ising-Magneten vergleichen.

Zusatzaufgabe: Tragen Sie M/M_C in Abhängigkeit von $|T - T_C|$ auf und fitten Sie die Koeffizienten m und β für folgende Funktion:

$$\frac{M}{M_C} = 1 + m \cdot |T - T_C|^\beta \quad (20)$$

Vergleichen Sie den erhaltenen Exponenten β mit den "klassischen" Wert $\beta_{\text{vdW}} = 1/2$ sowie dem experimentellen Wert von $\beta_{\text{exp}} \approx 1/3$.³

³Siehe z.B. S. Jünger, B. Knuth, and F. Hensel, Phys. Rev. Lett. **55**, 2160 (1985).

4 Protokoll

Allgemein:

- 1) Geben Sie den Theorie-Teil in eigenen Worten wieder.
- 2) Beantworten Sie explizit jede einzelne im Theorie-Teil gestellte Frage mit der gleichen Nummerierung!
- 3) Beantworten Sie explizit jede einzelne unter "Durchführung" aufgeführte Frage mit der gleichen Nummerierung!

Quantitative Auswertung:

- 1) Fügen Sie dem Protokoll für jede der 4 Bestimmungen von T_C den Graphen samt Fit-Auswertung dem Protokoll bei.
- 2) Fügen Sie dem Protokoll für jeden Graphen die Ergebnistabelle, jeweils bestehend aus mind. 15 Datenpaaren, bei.

A Anhang: Bestimmung der Curie-Temperatur

Sie können zum Fitten der Messpunkte beispielsweise das Programm `Origin` verwenden, für das eine Campuslizenz verfügbar ist. Verwenden Sie das Programm `Origin`, so benötigen Sie das Programm `gnuplot` nicht.

A.1 Fitten mit dem Programm `gnuplot`

Können Sie auf das Programm `Origin` nicht zugreifen, so können Sie das Programm `gnuplot` zum Bestimmen der Curie-Temperatur T_c verwenden, das Sie kostenlos und frei verfügbar aus dem Internet herunterladen können. Verwenden Sie die Funktion der Form

$$f(x) = \frac{a - b}{1 + \exp\left(\frac{T_c - x}{d}\right)} + b, \quad (21)$$

wobei a , b , T_c und d die zu fittenden Parameter der Funktion sind. In `gnuplot` kann eine Funktion sowie alle benötigten Parameter frei definiert werden. Oft ist es hilfreich, das obere Limit, b , nicht bestimmen zu lassen, sondern nur das untere Limit, a . Ein möglicher Fit-Code für `gnuplot`, bei dem a , T_c sowie d gefittet werden und b konstant gehalten wird, sieht somit wie folgt aus:

```
a=0.
```

```
b=100.
```

```
Tc=120
```

```
d=10.
```

```
f(x)=(a - b) / (1. + exp((Tc-x)/d) ) + b
```

```
fit f(x) "your_data.dat" using 2:3 via a,Tc,d
```

```
plot "your_data.dat" using 2:3 w lp, f(x) ti sprintf("fit function resulting in Tc = %3.4f",Tc)
```

In diesem Beispiel wird angenommen, dass eine Datei `your_data.dat` vorliegt, die in der in der ersten Spalte den J-Wert enthält, in der zweiten Spalte die Temperatur T und in der dritten Spalte die für jeweils eine Temperatur gemittelten Messwerte \bar{M} .

Wichtig: Beachten Sie, dass Sie die Startwerte für die Variablen a , b , T_c , d für jeden einzelnen Fit angemessen wählen müssen, auch wenn diese durch den Fit geändert werden! Verwenden Sie insbesondere für den 3D-Fall als Startwert $b = 400$.