

Gittermodelle in der statistischen Physik:

Wichtiges Beispiel: [Isingmodell](#), zur Geschichte siehe Wikipedia-artikel über Ernst Ising, der von 1922-1924 sich mit diesem Modell auf einer eindim. Kette beschäftigt hat (und dem Modell seinen Namen gegeben hat).

Ursprünglich war das Isingmodell als einfaches klassisches Modell eines Ferromagneten gedacht. In einem Gitter sitzen auf den Gitterpunkten Elementarmagnete. Im Isingmodell können sich diese nur entlang einer Achse ausrichten. Mathematisch wird dies beschrieben durch

$$s_x \in \{-1, 1\}$$

wobei s_x der “Spin” am Gittergitterpunkt x ist. In zwei Dimensionen betrachtet man häufig das Quadrat-Gitter; In der Literatur sind aber auch z.B. Honigwaben- oder Dreiecksgitter betrachtet worden.

In drei Dimensionen werden neben dem einfachkubischen auch kubisch innenzentriertes, kubisch flächenzentriertes usw. betrachtet. Hier beschränken wir uns der Einfachheit halber auf Quadratgitter in zwei und einfachkubische Gitter in drei Dimensionen.

Um statistische Physik zu betreiben müssen wir eine Hamiltonfunktion definieren. Hier beschränken wir uns auf den am häufigsten diskutierten Fall:

$$H = -J \sum_{\langle xy \rangle} s_x s_y - h \sum_x s_x$$

$\langle xy \rangle$ bezeichnet ein Paar von nächsten Nachbargitterpunkten. Die Wechselwirkung ist also (ultra)-kurzreichweitzig. In der Literatur werden aber auch z.B. potenzartig zerfallende Kopplungsstärken diskutiert. Ebenso werden ortsabhängige Kopplungsstärken J und äussere Felder h betrachtet.

Im Folgenden wählen wir immer Gitterabstand $a = 1$. Resultate lassen sich immer auf $a \neq 1$ umskalieren

Alternative Notation:

$$H = \sum_x \left[-J \sum_{\mu=1}^d s_x s_{x+\hat{\mu}} - h s_x \right]$$

$\hat{\mu}$ Einheitsvektor in μ -Richtung.

Als nächstes definieren wir das kanonische Ensemble:

Zustandssumme

$$Z = \sum_{\{s\}} \exp[-\beta H(\{s\})]$$

wobei $\beta = 1/k_b T$. Mit $\{s\}$ bezeichnen wir eine Konfiguration. Eine Konfiguration ist eine mögliche Belegung der Gitterpunkte mit -1 oder 1 . Die Zahl der Konfigurationen ist 2^V wobei V die Anzahl der Gitterpunkte ist. Nehmen wir grob an, dass wir den Boltzmannfaktor $\exp[-\beta H(\{s\})]$ in 100 Zyklen der CPU berechnen können, sehen wir, dass wir auf einer CPU mit 3 GHz an einem Tag etwa 9×10^{11} Konfigurationen schaffen. Dies ist etwa 2^{33} . Ganz naive schaffen wir also z.B. in 3 Dimensionen noch 3^3 Gitter mit 27 Gitterpunkten. $4^3 = 64$ ist aber schon klar zu viel. (Die exakte Berechnung der Zustandssumme für 4^3 schafft man noch mit Tricks.)

Observablen, einfache Beispiele

Magnetisierung

$$m = \frac{1}{V} \sum_x s_x$$

“Energiedichte”

$$E = \frac{1}{V} \sum_{\langle xy \rangle} s_x s_y$$

Erwartungswerte einer Observablen A :

$$\langle A \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\{s\}} \exp[-\beta H(\{s\})] A(\{s\})$$

Freie Energiedichte

$$f = -\frac{k_B T}{V} \ln Z$$

Stand der Theorie:

In einer Dimension lässt sich das Modell leicht auf verschiedene Arten lösen. z.B. mit der Transfermatrix-Methode. Kein Phasenübergang bei endlicher Temperatur.

In 1944 Onsager found an exact solution of the two dimensional Ising model for $h = 0$. [L. Onsager, Phys. Rev. 65 (1944) 117]. In two dimensions there is a phase transition at a finite temperature.

In three dimensions there is still no exact solution of the Ising model. Here we have to rely on approximations (e.g. high temperature series expansions, field theoretic methods) and (as discussed in this lecture) Monte Carlo simulations. In four and higher dimensions some properties of the model are given exactly by the “Mean-field” approximation.

Discussions of the Ising model are given in many text books like chapter 14-18 in the second edition of Kerson Huang, Statistical Mechanics , John Wiley & Sons.

ϕ^4 -Modell auf dem Gitter als Verallgemeinerung des Isingmodells:
Statt $s_x \in \{-1, 1\}$ nimmt der "Spin" den wir jetzt aus Konvention
Feld nennen, Werte $\phi_x \in \mathbb{R}$ an.

Hamiltonian

$$S = \beta H = \sum_x \left(-2\kappa \sum_{\mu} \phi_x \phi_{x+\hat{\mu}} + \phi_x^2 + \lambda(\phi_x^2 - 1)^2 \right)$$

In der Feldtheorie ist "S" die Wirkung (action); In der statistischen Physik nennt man βH reduzierte Hamiltonfunktion (reduced Hamiltonian); ähnlich: $\tilde{f} = -1/V \ln Z$ reduzierte freie Energiedichte.

$$Z = \int D[\phi] \exp(-S[\phi])$$

wobei

$$\int D[\phi] := \int d\phi_1 \dots \int d\phi_V$$

Für $\lambda = 0$ erhalten wir das Gaußsche Modell (freie Feldtheorie). Dies kann durch Fouriertransformation exakt gelöst werden.
Feldtheoretische Rechnungen beruhen nun auf einer Entwicklung in Potenzen von λ .

Im Limes $\lambda \rightarrow \infty$ erhalten wir das Isingmodell.

Verwendung dieser Modelle:

Weniger eine genaue mikroskopische Beschreibung konkreter Festkörper oder binärer Gemische.

Vorrangiges Ziel: grundsätzliches Verständnis von [Phasenübergängen](#).

Klassifizierung von Phasenübergängen: (Ehrenfest)

1.ter Ordnung:

Eine erste Ableitung der freien Energiedichte ist unstetig.

Beispiele: Wasser-Eis, Wasser-Dampf bei normalem Umgebungsdruck.

Sonst: Kontinuierliche Phasenübergänge (moderne Klassifikation)
“2.ter Ordnung Phasenübergang” für Übergänge mit divergierenden zweiten Ableitung üblich.

Power law behaviour in the neighbourhood of second order phase transition: (Of quantities in the thermodynamic limit)

Magnetization

$$m \propto |t|^\beta$$

Magnetic susceptibility:

$$\chi \propto |t|^{-\gamma}$$

Specific heat

$$C \propto |t|^{-\alpha}$$

Correlation length

$$\xi \propto |t|^{-\nu}$$

Reduced temperature $t = (T - T_c)/T_c$.

Universality

For large classes of models and experimental systems these **critical exponents** are identical. These **universality classes** are characterized by the dimension of the space, the range of the interaction and the symmetry properties of the order parameter.

This is explained by the **Renormalization Group (RG)** theory.
(Ken Wilson 1970)

Simple sampling

Generate configurations of the Ising model with equal probability for each configuration:

```
for(i=0;i<V;i++)  
{  
    if(drand48()>0.5) {s[i]=1;} else {s[i]=-1;}  
}
```

Suppose we have generated m configurations this way. Then

$$\langle A \rangle \approx \frac{\sum_{j=1}^m \exp[-\beta H(\{s\}_j)] A(\{s\}_j)}{\sum_{j=1}^m \exp[-\beta H(\{s\}_j)]}$$

Problem: only a small fraction of the configurations contributes significantly to the partition function. This problem becomes worse with increasing lattice size.

Importance sampling

The solution of the problem is to imitate the physical process and to generate configurations X with a probability that is proportional to their Boltzmann factors

$$P_B(X) = \frac{1}{Z} \exp[-\beta H(X)]$$

The problem with that is that the normalization $1/Z$ is unknown. Therefore it is not possible to generate configurations ad hoc with the correct distribution.

This problem can be overcome by using a Markov chain. Here only ratios of probabilities are needed:

$$\frac{P_B(X)}{P_B(Y)} = \frac{\exp(-\beta H(X))}{\exp(-\beta H(Y))}$$

which can be computed easily.

Markov chain

A **Markov chain of first order** is characterised by the fact that, the probability to generate a configuration Y that follows the configuration X , depends only on X and not on configurations before X . The Markov chain of first order is completely characterized by the transition probability $W(Y, X)$ from a configuration X to Y .

The Markov chain has to satisfy certain conditions in order to generate the Boltzmann distribution:

i) **normalization:**

$$\sum_Y W(Y, X) = 1$$

for all X . ii) **Ergodicity:**

$$W(Y, X) > 0$$

for all X and Y . I.e. all configurations can be reached

iii) "Stability":

the Boltzmann distribution is eigenvector with eigenvalue 1 of
 $W(Y, X)$

$$\sum_X W(Y, X) B(X) = B(Y)$$

for all Y . Where $B(Y) = \exp(-\beta H(Y))$.

If i,ii,iii are satisfied:

Assume a start distribution $V_0(X)$.

The chain is continued by

$$V_{t+1}(X) = \sum_Y W(X, Y) V_t(Y)$$

Then in the limit of large t we get the Boltzmann distribution:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} ||V_t - B|| = 0$$

with

$$||V_t - B|| := \sum_X |V_t(X) - B(X)|$$

Composition of algorithms:

If W_1, W_2, \dots, W_n satisfy stability, then also the composition

$$W = W_1 W_2 \dots W_N$$

satisfies stability.

From detailed balance:

$$\frac{W(X, Y)}{W(Y, X)} = \frac{B(X)}{B(Y)}$$

follows

$$\sum_X W(X, Y) B(Y) = \sum_X W(Y, X) B(X)$$

follows with i)

$$B(Y) = \sum_X W(Y, X) B(X)$$

stability

Often so called “linear congruential” generators are used. They are a deterministic sequence given by

$$I_{j+1} = (aI_j + c) \bmod m . \quad (1)$$

where a, c and m are integer. For sure $0 \leq I_j < m$ for all j .

An important property of a generator is its period. The period p says when the generator repeats itself. I.e. p is the smallest number such that $I_j = I_{j+p}$. One should chose a , c and m such that one obtains a long period.

In the optimal case the period is given by $p = m$. Indeed a and c can be found such that $p = m$ holds. These a and c are completely classified: (Hull and Dubell, SIAM Review 4 (1962) 230)

A linear congruential generator with the modulus m has a period m if and only if:

(i) c and m have no common prime factor.

(ii) $a - 1$ is a multiple of each prime factor of m .

(iii) $a - 1$ is a multiple of 4, if m is a multiple of 4.

Examples

drand48 in the C-library:

$$a = 0x5DEECE66D \text{ (base 16)} = 0273673163155 \text{ (base 8)}$$

$$c = 0xB \text{ (base 16)} = 013 \text{ (base 8)}$$

In Dezimal numbers $a = 25214903917$, $c = 11$, $m = 2^{48}$.

The conditions (i) -(iii) hold;

Therefore the period of drand48() is $m = 2^{48}$.

G05CAF from the NAG-library:

$$a = 13^{13}, c = 0, m = 2^{59}$$

The period of G05CAF is $p = 2^{57}$.