SIF 4088 Ikkelineær dynamikk, høst 2001, løsning oppgave 2

Strogatz, oppgave 3.6.7 (Ising-modellen)

I termodynamikk og statistisk mekanikk behandler vi gjerne et fysisk system som er i termodynamisk likevekt, og det betyr at vi interesser oss lite for tidsavhengige egenskaper til systemet — termodynamikk handler lite om dynamikk! Denne oppgaven med Ising-modellen er mer et eksempel på at metoder fra ikkelineær dynamikk kan brukes på andre områder.

I Ising-modellen har vi et system med N spinn S_j som hvert har to mulige tilstander ± 1, enten "spinn opp" eller "spinn ned". Gitt alle spinnene $S_1, S_2, \ldots, S_N$ er energien til systemet

$$E = -h \sum_{j=1}^{N} S_j - J \sum_{j=1}^{N} S_j \left(\sum_{k \text{ nabo til } j} S_k \right) .$$

Her er h en konstant som representerer et ytre magnetfelt, og J er en konstant som angir styrken av vekselvirkningen mellom to nabospinn. Vi ser at et spinn som peker i samme retning som det ytre magnetfeltet, har lavere energi enn et som peker i motsatt retning. Hvis $J > 0$, betyr det at energien reduseres når nabospinn peker i samme retning, og da er systemet ferromagnetisk. Hvis $J < 0$, reduseres energien når nabospinn peker i motsatt retning, og da er systemet antiferromagnetisk. Vi antar her at $J > 0$.

Hele systemet har altså 2^N mulige tilstander, og tilstand nr. I, der $I = 1, 2, 3, \ldots, 2^N$, har en veldefinert energi E_I. Til hver tilstand I tilordner vi en Boltzmann-faktor

$$W_I = \mathrm{e}^{-\frac{E_I}{kT}} ,$$

der k er Boltzmanns konstant, og T er temperaturen. For enkelhets skyld velger vi temperaturskalaen slik at $k = 1$. I termodynamisk likevekt er sannsynligheten for å finne systemet i denne tilstanden lik W_I/Z, der Z er partisjonsfunksjonen,

$$Z = \sum_{I=1}^{2^N} W_I = \sum_{I=1}^{2^N} \mathrm{e}^{-\frac{E_I}{T}} = \sum_{S_1=\pm 1} \sum_{S_2=\pm 1} \cdots \sum_{S_N=\pm 1} \mathrm{e}^{-\frac{E_I}{T}} .$$

Hvis vi definerer magnetiseringen som

$$m = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^{N} S_i = -\frac{1}{N} \frac{\partial E}{\partial h} ,$$

altså uten absoluttverditegn, så er forventningsverdien av m gitt som

$$\langle m \rangle = \sum_I \frac{W_I}{Z} m_I = \sum_I \frac{1}{Z} \frac{T}{N} \frac{\partial W_I}{\partial h} = \frac{1}{Z} \frac{T}{N} \frac{\partial Z}{\partial h} = \frac{T}{N} \frac{\partial (\ln Z)}{\partial h} .$$

I middelfeltapproksimasjonen antar vi simpelthen at summen over de n nabospinnene til spinn nr. j, i uttrykket for energien, er lik n ganger forventningsverdien $\langle m \rangle$. Energien blir da

$$E = -h \sum_{j=1}^{N} S_j - J \sum_{j=1}^{N} S_j n \langle m \rangle = -(h + Jn\langle m \rangle) \sum_{j=1}^{N} S_j .$$

Med denne tilnærmingen kan vi regne ut partisjonsfunksjonen, og får at

$$\begin{aligned} Z &= \left(\sum_{S_1=\pm 1} \mathrm{e}^{\frac{(h+Jn\langle m\rangle)S_1}{T}}\right)\left(\sum_{S_2=\pm 1} \mathrm{e}^{\frac{(h+Jn\langle m\rangle)S_2}{T}}\right)\cdots\left(\sum_{S_N=\pm 1} \mathrm{e}^{\frac{(h+Jn\langle m\rangle)S_N}{T}}\right) \\ &= 2^N \cosh^N\left(\frac{h+Jn\langle m\rangle}{T}\right) . \end{aligned}$$

Innsatt i uttrykket for forventningsverdien $\langle m\rangle$ gir det:

$$\langle m\rangle = \frac{T}{N}\,\frac{\partial(\ln Z)}{\partial h} = T\frac{\partial}{\partial h}\cosh\left(\frac{h+Jn\langle m\rangle}{T}\right) = \tanh\left(\frac{h+Jn\langle m\rangle}{T}\right) \ .$$

Denne ligningen, som må løses for $\langle m\rangle$, kan omskrives slik:

$$\frac{h}{T} + \frac{Jn}{T}\,\langle m\rangle = \operatorname{arctanh}\langle m\rangle \ .$$

Skriver vi m for $\langle m\rangle$, så er dette den ligningen som er gitt i oppgaven. Vi kan skrive den som

$$\alpha + \beta m = \operatorname{arctanh} m \ ,$$

der $\alpha = h/T$ og $\beta = Jn/T$. Denne ligningen kan vi løse grafisk ved å finne skjæringspunktene mellom den rette linjen $y = \alpha + \beta m$ og kurven $y = \operatorname{arctanh} m$.

Hvis $y = \operatorname{arctanh} m$, så er

$$m = \tanh y = \frac{\mathrm{e}^y - \mathrm{e}^{-y}}{\mathrm{e}^y + \mathrm{e}^{-y}} = \frac{\mathrm{e}^{2y} - 1}{\mathrm{e}^{2y} + 1} \ ,$$

som er det samme som at

$$y = \frac{1}{2}\,\ln\frac{1+m}{1-m} \ .$$

Vi ser at $y \to -\infty$ når $m \to -1$, og at $y \to \infty$ når $m \to 1$. Videre er

$$\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}m} = \frac{1}{2}\left(\frac{1}{1+m} + \frac{1}{1-m}\right) = \frac{1}{1-m^2} \ .$$

Den deriverte $\mathrm{d}y/\mathrm{d}m$ antar sin minimalverdi 1 når $m = 0$.

Vi ser at ligningen har nøyaktig en løsning dersom $\beta \leq 1$, dvs. dersom temperaturen T er over den kritiske temperaturen

$$T_c = Jn \ .$$

Dersom temperaturen er lavere, og dessuten det ytre magnetfeltet h ligger innenfor et visst intervall omkring $h = 0$, så finnes det tre løsninger $m_1 < m_2 < m_3$.

Ligningen $\alpha + \beta m = \operatorname{arctanh} m$, med $\alpha = h/T$, er invariant under et samtidig fortegnskifte av m og h. Derfor gjelder for $h = 0$ at $m_2 = 0$ og $m_1 = -m_3$. Og derfor er intervallet i h der det finnes tre løsninger, symmetrisk om $h = 0$, dvs. at det er av formen $-h_0 < h < h_0$. For $h = h_0$ eller $h = -h_0$ finnes det to løsninger, idet den rette linjen $y = \alpha + \beta m$ akkurat tangerer kurven $y = \operatorname{arctanh} m$. I tangeringspunktet må den rette linjen og den krumme kurven ha samme derivert, dvs. at

$$\beta = \frac{1}{1-m^2} \ ,$$

eller $m = \pm m_0$ med

$$m_0 = \sqrt{\frac{\beta - 1}{\beta}} = \sqrt{\frac{Jn - T}{Jn}}\ .$$

Den kritiske verdien av h er derfor

$$h_0 = Jnm_0 - T \operatorname{arctanh} m_0\ .$$

Når temperaturen er under den kritiske temperaturen T_c, vil vi få hysterese dersom vi varierer det ytre magnetfeltet h. Gjør vi f.eks. h stor og positiv, har vi en entydig løsning med positiv magnetisering. Når vi reduserer det ytre feltet ned til området med tre løsninger, vil magnetiseringen variere kontinuerlig, og derfor vil vi hele tiden ha en positiv magnetisering m_3, helt ned til $h = -h_0$, der denne løsningen plutselig forsvinner og magnetiseringen hopper diskoninuerlig ned til en negativ verdi. Når vi etterpå øker h igjen, vil vi beholde den negative magnetiseringen m_1 helt til vi har $h = h_0$, der magnetiseringen igjen hopper diskontinuterlig til en positiv verdi.

Når det finnes tre løsninger, vil den mest stabile av dem være den som har lavest energi. I følge middelfeltapproksimasjonen er energien

$$E = -(h + Jnm) \sum_{j=1}^{N} S_j = -(h + Jnm)Nm\ .$$

Ser vi spesielt på tilfellet $h = 0$, altså ikke noe ytre magnetfelt, så er $E = -Jnm^2$, og vi ser at de to løsningene med positiv eller negativ magnetisering har lavere energi enn løsningen med null magnetisering. Det betyr at under den kritiske temperaturen T_c vil systemet være spontant magnetisert, selv uten noe ytre magnetfelt.

Med middelfeltapproksimasjonen kan vi selvfølgelig bare få en tilnærmet verdi for den kritiske temperaturen T_c. Spørsmålet er om de kvalitative konklusjonene om hysterese og spontan magnetisering er gyldige også utover middelfeltapproksimasjonen.

Den endimensjonale Ising-modellen kan løses eksakt, og partisjonsfunksjonen (med periodiske randkrav for N spinn, dvs. N spinn fordelt rundt en sirkel) er

$$Z = \lambda_+^N + \lambda_-^N\ ,$$

med

$$\lambda_\pm = \mathrm{e}^{\frac{2J}{T}} \cosh\left(\frac{h}{T}\right) \pm \sqrt{\mathrm{e}^{\frac{4J}{T}} \sinh^2\left(\frac{h}{T}\right) + \mathrm{e}^{-\frac{4J}{T}}}\ .$$

I grensen $N \to \infty$ kan vi neglisjere λ_-^N sammenlignet med λ_+^N, og vi får at

$$\langle m \rangle = \frac{T}{N} \frac{\partial(\ln Z)}{\partial h} = T \frac{\partial(\ln \lambda_+)}{\partial h} = \frac{\sinh\left(\frac{h}{T}\right)}{\sqrt{\sinh^2\left(\frac{h}{T}\right) + \mathrm{e}^{-\frac{8J}{T}}}}\ .$$

Den eksakte løsningen i en dimensjon gir ingen kritisk temperatur, ingen spontan magnetisering og ingen hysterese! Ising publiserte denne konklusjonen i 1925, og var uforsiktig nok til å påstå at det samme gjaldt i tre dimensjoner.

I 1944 løste Lars Onsager den todimensjonale Ising-modellen eksakt, uten ytre magnetfelt. Han fant at den gir spontan magnetisering under en gitt kritisk temperatur. Det er rimelig nok at middelfeltapproksimasjonen virker bedre i høyere dimensjoner, der antallet naboer til hvert spinn er større.

Strogatz, oppgave 4.1.8

Ligningen $-\mathrm{d}V/\mathrm{d}\theta = f(\theta)$ har løsningen

$$V(\theta) = -\int \mathrm{d}\theta\ f(\theta)\ .$$

Integrasjonskonstanten er uinteressant.
Hvis $f(\theta) = \cos\theta$, er $V(\theta) = -\sin\theta$, som er en entydig funksjon på sirkelen.
Hvis $f(\theta) = 1$, er $V(\theta) = -\theta$, men dette er ikke en entydig funksjon på sirkelen.
Den generelle betingelsen for entydighet er at

$$V(2\pi) - V(0) = -\int_0^{2\pi} \mathrm{d}\theta\ f(\theta) = 0\ .$$

Strogatz, oppgave 4.6.1

Vi antar at bevegelsesligningen (på dimensjonsløs form) er

$$\dot{\phi} = \frac{I}{I_c} - \sin\phi\ .$$

Dette er altså den overdempete grensen (svært stor dempning). La oss definere $\mu = I/I_c$ for å forenkle notasjonen. Vi kan da skrive ligningen slik:

$$\mathrm{d}t = \frac{\mathrm{d}\phi}{\mu - \sin\phi}\ .$$

Strengt tatt er her t den tidsvariabelen som er skalert slik at den er dimensjonsløs, men dette poenget spiller liten rolle for vårt resonnement.

Hvis $\mu >> 1$, har vi at

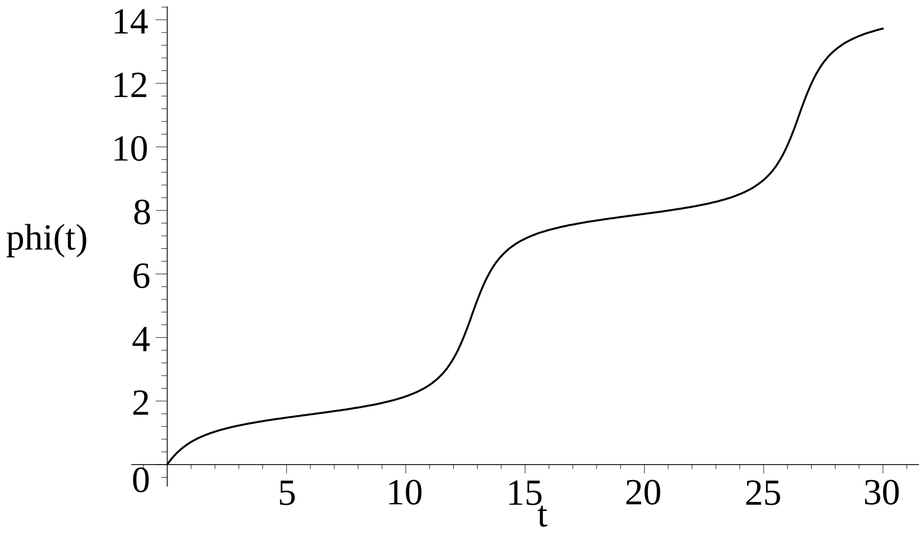
$$\mathrm{d}t \approx \frac{\mathrm{d}\phi}{\mu}\ ,$$

dvs. at fasen ϕ øker praktisk talt lineært med tiden t. Da er "superstrømmen" $I_c \sin\phi$ praktisk talt en ren sinus-svingning som funksjon av tiden. Spenningen er proporsjonal med den tidsderiverte $\dot{\phi} = \mu - \sin\phi$. Den er tilnærmet konstant, men svinger omkring den konstante verdien som en tilnærmet ren sinus-svingning, 90 grader faseforskjøvet i forhold til strømmen.

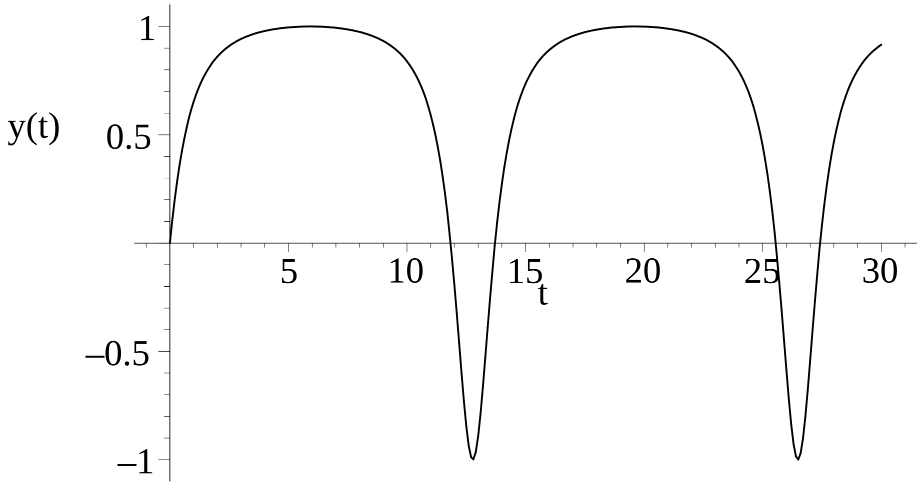
Det mest interessante tilfellet er når μ er bare litt større enn 1. Da ser vi at t øker raskt som funksjon av ϕ hver gang $\sin\phi \approx 1$, dvs. at når superstrømmen $I_c \sin\phi$ har noe nær sin maksimale verdi I_c, varierer den svært sakte som funksjon av t. Samtidig blir spenningen nesten lik null. Når $I_c \sin\phi \approx -I_c$, vil fasen ϕ variere raskest, og da er spenningen størst.

Strogatz, oppgave 4.6.2

Her er et par figurer produsert med Maple, for parameterverdien $\mu = I/I_c = 1,1$. Det mest interessante tilfellet er jo når μ er nær 1.



Figur 1: ϕ som funksjon av t, for $\mu = 1,1$.



Figur 2: $\sin(\phi)$ som funksjon av t, for $\mu = 1,1$.

Og her er Maple-programmet som produserer figurene ovenfor (pluss en tredje figur med $\mu = 10$):

```
> with(DEtools):

> mu := 1.1:
> DEplot(
> diff(phi(t),t)=mu-sin(phi(t))
> ,phi(t),t=0..30
> ,stepsize=0.1
> ,[[phi(0)=0]]
> ,scene=[t,phi(t)]
> ,arrows=none
> ,linecolor=black
> ,axesfont=[TIMES,ROMAN,18]
> ,labelfont=[TIMES,ROMAN,18]
> );

> mu := 1.1:
> DEplot(
> [diff(phi(t),t)=mu-sin(phi(t))
> ,diff(y(t),t)=diff(sin(phi(t)),t)]
> ,[phi(t),y(t)],t=0..30
> ,stepsize=0.1
> ,[[phi(0)=0,y(0)=0]]
> ,scene=[t,y(t)]
> ,arrows=none
> ,linecolor=black
> ,axesfont=[TIMES,ROMAN,18]
> ,labelfont=[TIMES,ROMAN,18]
> );

> mu := 10.0:
> DEplot(
> [diff(phi(t),t)=mu-sin(phi(t))
> ,diff(y(t),t)=diff(sin(phi(t)),t)]
> ,[phi(t),y(t)],t=0..3
> ,stepsize=0.02
> ,[[phi(0)=0,y(0)=0]]
> ,scene=[t,y(t)]
> ,arrows=none
> ,linecolor=black
> ,axesfont=[TIMES,ROMAN,18]
> ,labelfont=[TIMES,ROMAN,18]
> );
```