

دراسة انتقال الطور في شبكة مغناطيسية حديدية مربعة مع نموذج Ising ثنائي الأبعاد باستخدام خوارزميات مونت كارلو

د. م. مجد الدين العلي*

م. محمد الشمالي**

(تاريخ الإيداع 14 /10 /2021 . قبل للنشر في 26 /6 /2022)

□ ملخص □

تم استخدام خوارزميات مونت كارلو لدراسة نموذج Ising. هنا سندرس انتقال الطور في نموذج Ising لشبكة مربعة ثنائية الأبعاد مع حقل مغناطيسي صفري من خلال حساب المغنطة لكل دوران، والحرارة المحددة لكل دوران، وقابلية الدوران لكل دوران في نطاق درجات الحرارة. بالنسبة لتلك الملاحظات، فإن السلوك حول درجة الحرارة الحرجة له شكل مميز يتوافق مع النتائج المطبوعة. عندما ننظر إلى تأثير حجم الشبكة على تلك الأشكال، نرى أنها أصبحت أكثر وضوحًا وأكثر حدة لأحجام أكبر للشبكات والتي تتفق مع توقع أن أحجام الشبكة الأكبر تقترب من حد الديناميكا الحرارية. تم العثور على قيمة لدرجة الحرارة الحرجة = 2.23 والتي تتفق مع النتيجة التحليلية.

كلمات مفتاحية: خوارزميات مونت كارلو، نموذج Ising، المغنطة، الحرارة المحددة، قابلية الدوران، درجة الحرارة الحرجة.

* أستاذ مساعد في جامعة البعث – كلية الهندسة الميكانيكية والكهربائية – قسم الهندسة الالكترونية والاتصالات.
** طالب دكتوراه في جامعة البعث – كلية الهندسة الميكانيكية والكهربائية – قسم الهندسة الالكترونية والاتصالات.

Studying the Phase Transition in the Ferromagnetic Square-Lattice 2D Ising Model using Monte Carlo Algorithms

Dr. Eng. Majd al-Din al-Ali *
Eng. Mohammed Al Shamali **

(Received 14/10/ 2021 . Accepted 26/6/ 2022)

□ ABSTRACT □

Monte Carlo algorithms are used to study the Ising model. Here we look at the phase transition in the ferromagnetic zero field 2D square lattice Ising model by calculating the magnetization per spin, the specific heat per spin and the susceptibility per spin at a range of temperatures. For those observables the behavior around the critical temperature has a distinct shape that agrees with results from literature. When we look at the effect the lattice size on those shapes we see that they become sharper and more defined for bigger lattice sizes which agrees with the expectation that bigger lattice sizes approach the thermodynamics limit. A value for the critical temperature of $T_C = 2.23$ was found which agrees with the analytical result.

Keywords: Monte Carlo algorithms, Ising model, magnetization, specific heat, susceptibility, critical temperature.

* Assistant Professor at Al-Baath University - Faculty of Mechanical and Electrical Engineering - Department of Electronics and Communications Engineering.

** PhD student at Al-Baath University - Faculty of Mechanical and Electrical Engineering - Department of Electronics and Communications Engineering.

1- مقدمة:

في هذا البحث قمنا بدراسة انتقال الطور في شبكة مغناطيسية حديدية مربعة مع نموذج Ising ثنائي الأبعاد باستخدام خوارزميات مونت كارلو. في عام 2017 تمت دراسة الخصائص المغناطيسية والمغناطيسية الحرارية لبنى DyNi4Si النانوية باستخدام طرائق مونت كارلو وبينت أن تحسين الخصائص المغناطيسية والمغناطيسية الحرارية ينتج عن طريق تقليل كل من البعد والحجم [3]، كما تمت دراسة مخططات الطور والخصائص المغناطيسية لطبقة واحدة من الجرافين النانوية وبينت قدرة الجرافين النانوي أن يظهر طور عالي النفاذية محصور بين الطور المضاد للمغناطيسية والنفاذية العالية [4]، تم أيضا دراسة السلوك المغناطيسي والديناميكي الحراري لنفاذية الجزر النانوية حيث بينت تأثير الحقول البلورية، وصلات التبادل والحقل المغناطيسي الخارجي على السلوك المغناطيسي والديناميكي الحراري للنظام [5]، في عام 2020 استخدمت محاكاة مونت كارلو لدراسة هضاب المغنطة والخصائص الديناميكية الحرارية لبنى الجرافين النانوي مع دوران مختلط $-3/2$ و $-5/2$ في حقل مغناطيسي طولي وبينت النتائج أن الطاقة الداخلية للنظام يمكن أن تتخفض بانقاص تباينات الخواص وزيادة اقتران التبادل بين الطبقات بالإضافة للحقل المغناطيسي الطولي [6]. يعد نموذج Ising أحد أبسط الأنظمة التي توضح انتقال الطور. يتكون هذا النظام من N دوران بقيمة -1 أو 1 مرتبة على بعض الشبكات ولها انتقال طوري عند درجة حرارة محددة. في هذا البحث، ننظر إلى انتقال الطور هذا من خلال النظر إلى متوسط المغناطيسية، والسعة الحرارية لكل دوران، وقابلية الدوران في نطاق درجات الحرارة باستخدام خوارزميات مونت كارلو. خوارزميات مونت كارلو هي الطريقة التقليدية لدراسة نموذج Ising حسابيا.

2- هدف البحث:

الهدف من البحث دراسة المغنطة ودرجة الحرارة المحددة والحساسية كتابع لدرجة الحرارة من أجل نظام مع 128×128 دوران ومقارنتها مع أنظمة ذات دورانات أقل، والتأكد من مطابقة النتائج التجريبية للنتائج التحليلية من أجل استخدام هذه الخوارزمية لدراسة نفس البارامترات من أجل مواد نانوية، حيث لا توجد نتائج تحليلية موثقة من أجل هذه المواد. وهنا تكمن أهمية البحث بالتأكد من قدرة الخوارزمية على دراسة خواص المواد النانوية دون الحاجة لإجراء تجارب عليها باستخدام أجهزة مكلفة داخل مخبر مخصص لمثل هذه المواد، وبالتالي التقليل من الضياعات في التجارب المخبرية.

3- مواد وطرائق البحث:

يعتمد هذا البحث على المنهج العلمي التجريبي، ويقوم بتطبيق نموذج Ising وطرائق حساب مونت كارلو على شبكة مغناطيسية ثنائية الأبعاد. أما أدوات البحث هي أدوات برمجية حيث تم استخدام بيئة البرمجة Python.

3-1- نموذج Ising:

يصف نموذج Ising ثنائي الأبعاد المغناطيس الحديدي على أنه شبكة مربعة $N \times N$ ، حيث يمثل كل عنصر إلكترونًا مع دوران معين. سنفترض أن الدوران يمكن أن يكون فقط "لأعلى" أو "لأسفل". إذن، دوران العنصر i ، $S_i = \pm 1$.

يتم إعطاء طاقة ترتيب معين من خلال معادلة هاميلتون لنموذج Ising بواسطة:

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j + h \sum_i S_i \dots \dots \dots (1)$$

حيث:

J ثابت اقتران .

 S_i قيمة الدوران في الموقع i. $\sum_{\langle i,j \rangle}$ مجموع أقرب الجيران.

h مطال الحقل المغناطيسي الخارجي.

من أجل تقليل تعقيد انتقال الطور، ننظر إلى حالة الحقل الصفري حيث $h = 0$ بحيث يصبح

Hamiltonian:

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j \dots \dots \dots (2)$$

حيث عندما $0 < J$ تفضل الأنظمة المغناطيسية الحديدية وعندما $0 < J$ مضادة للمغناطيسية الحديدية.

يتميز نموذج Ising بانتقال طور عند درجة حرارة محدودة. من الناحية التحليلية، يمكن العثور على أن درجة

الحرارة الحرجة هي عند

$$k_B T_C / J = \frac{2}{\ln(1+\sqrt{2})} \cong 2.2691 [7].$$

3-2- خوارزميات مونتي كارلو:

طريقة مونت كارلو هي فئة من الخوارزميات الحاسوبية والتي يمكن تطبيقها على نطاقات واسعة من المشاكل، هي ليست أداة إحصائية ولكنها تعتمد على أخذ عينات عشوائية متكررة، وتقدم حلول تقريبية بشكل عام. تُستخدم في الحالات التي لا توجد فيها تحليلات أو حلول عددية أو الحالات التي يصعب تنفيذها. هي طريقة بسيطة لكنها قوية لمحاكاة مثل هذا النظام باستخدام العشوائية.

من أجل محاكاة النظام عند درجة حرارة معينة، ننظر إلى خوارزميات مونتي كارلو، خوارزمية متروبوليس وخوارزمية مسار الحرارة. في خوارزمية متروبوليس، ينقلب الدوران العشوائي ويتم تقييم التغير في الطاقة الذي قد يسببه الانقلاب. إذا كان هذا التغير سالبًا يكون مقبول على الفور، إذا كان إيجابيًا، يتم قبوله باحتمالية:

$$P = \exp(-\beta \Delta H) \dots \dots \dots (1)$$

حيث:

$$\beta = \frac{1}{k_B T}$$

 k_B ثابت بولتزمان.

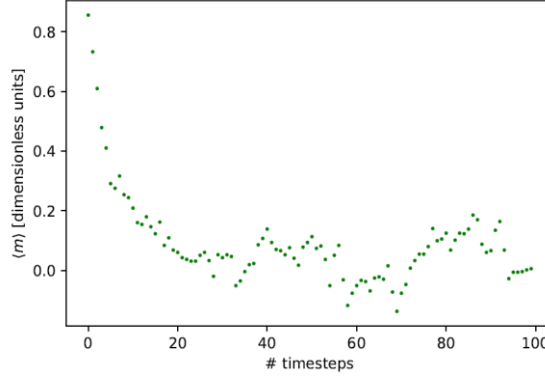
T درجة الحرارة.

 ΔH التغير في الطاقة.

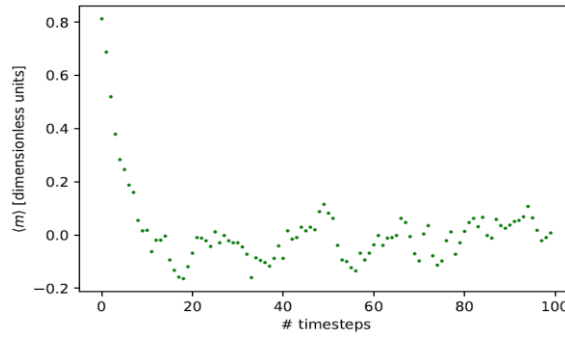
أما في خوارزمية مسار الحرارة يتم قلب الدوران العشوائي ويتم قبوله باحتمال P يعطى بوساطة:

$$P = \frac{1}{1 + \exp(\beta \Delta H)} \dots \dots \dots (2)$$

من أجل حساب الملاحظات من النظام يجب السماح له بالتوازن. من أجل تقييم وقت الموازنة، نقوم بمحاكاة النظام وحساب المغنطة في كل خطوة. في هذا السياق، نستخدم حجم خطوة من N انقلاب. عندما ننظر إلى موازنة خوارزمية متروبوليس الشكل (1b)، يمكننا أن نرى أنه بعد 20 خطوة، تنتقل المغنطة حول نفس القيمة. عندما نقوم بنفس الخطوات مع خوارزمية مسار الحرارة الشكل (1a)، نرى أن الأمر يتطلب 40 خطوة تقريباً لخوارزمية مسار الحرارة لكل عملية موازنة. لذلك يتم استخدام خوارزمية متروبوليس لحساب ما يمكن ملاحظته.



(a): Heat bath algorithm



(b): Metropolis algorithm

الشكل (1): المغنطة مقابل عدد الخطوات لشبكة 32×32 باستخدام خوارزمية متروبوليس وخوارزمية مسار الحرارة عند $\frac{k_B}{J} T = 3.6$. كل خطوة تتضمن 1024 قلب دوران.

بعد أن يصل النظام إلى الموازنة، يمكننا البدء في أخذ عينات النظام من أجل حساب الملاحظات. يتم أخذ عينات من النظام في كل خطوة زمنية، حيث يتم تعريف الخطوة الزمنية الواحدة على أنها N محاولات انقلاب. من هذه العينات، يتم تحديد المغنطيسية لكل دوران m بوساطة

$$\langle m \rangle = \frac{1}{N} \left\langle \sum_i s_i \right\rangle \dots \dots \dots (3)$$

حيث:

$\langle \dots \rangle$ تستخدم للدلالة على حساب متوسط المجموع

N عدد الدورات

S_i الدوران في الموقع i .

من هذه المغنطة، يتم تحديد الحساسية لكل دوران χ بوساطة:

$$\chi = \beta N (\langle m^2 \rangle - \langle m \rangle^2) \dots \dots \dots (4)$$

حيث: $\langle m^2 \rangle - \langle m \rangle^2$ يمكن أن يحسب تباين المغنطة.

الملاحظة الثالثة المحسوبة التي يمكن ملاحظتها هي الحرارة النوعية لكل دوران c معرّف بوساطة:

$$c = \frac{k_B \beta^2}{N} (\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2) \dots \dots \dots (5)$$

حيث: $\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2$ تباين الطاقة.

4- التطبيق العملي:

4-1- إعداد محاكاة متروبوليس:

من أجل جعل القيم الرقمية في المحاكاة أكثر قابلية للإدارة، نحدد الوحدات الخالية من الأبعاد الواردة في الجدول (1).

الجدول (1): تعريف الوحدات الخالية من الأبعاد المستخدمة في المحاكاة

Natural Units	$\tilde{T} = \frac{k_B}{J} T$
	$\tilde{C} = \frac{1}{k_B} C$

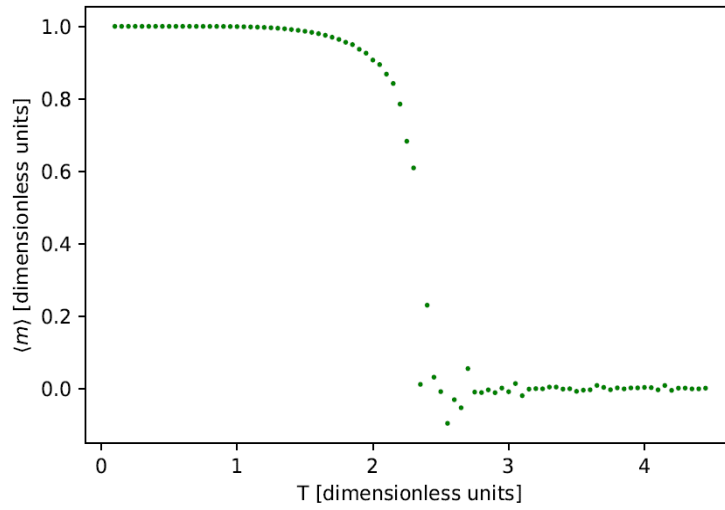
بدأ النظام مع قيم دورانات مساوية للواحد.

نريد القضاء على تأثيرات الحافة لذلك نستخدم شروط الحدود الدورية. نحسب الملاحظات عن طريق أخذ عينات من نظامنا n مرة واستبدال متوسط المجموعة بمتوسطات الوقت. لحساب الأخطاء لهذه الملاحظات يتم استخدام bootstrapping. يقوم Bootstrapping بإعادة العينات مع الاستبدال من خلال عينات مأخوذة من النظام ويتم حساب العناصر القابلة للملاحظة لكل خطوة من هذه الخطوات. تكررت هذه العملية $N_{bootstrap}$ مرة واستخدمت $N_{bootstrap}$ قيمة التي تم العثور عليها لملاحظة الخطأ σ_0 للملاحظات O التي تم حسابها باستخدام:

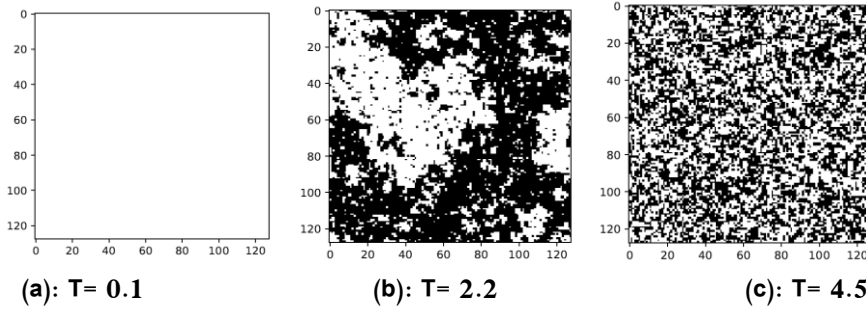
$$\sigma_0 = \sqrt{\langle O^2 \rangle - \langle O \rangle^2}$$

4-2- التحقق:

من أجل التحقق من صحة المحاكاة، ننظر إلى المغنطة. من أجل J موجبة، نتوقع سلوكاً مغناطيسياً حديدياً حيث تذهب المغنطة عند درجة حرارة منخفضة إلى $1 \pm$ وعند درجة حرارة عالية تذهب إلى الصفر. يمكننا أن نرى في الشكلين (2، 3) أن المحاكاة تفي بفحص الصلاحية هذا.



الشكل(2): المغنطة مقابل الحرارة لنظام مع 32×32 دوران و $J > 0$. البارامترات كما في الجدول (2). عند درجات حرارة منخفضة تذهب المغنطة للواحد، وعند درجات حرارة عالية تذهب المغنطة للصفر.



الشكل (3): تشكيلات نموذج Ising عند ثلاث درجات حرارة تحت، حول وفوق درجة الحرارة الحرجة بالترتيب. حجم النظام 128×128 دوران.

تحت درجة الحرارة الحرجة كل الدورانات تكون مرتبة، فوق درجة الحرارة الحرجة تكون الدورانات عشوائية والذي يعطي دوران شبكة صفري.

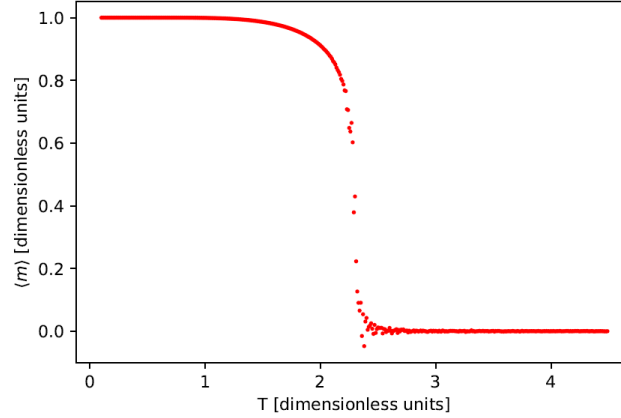
3-4- المغنطة ودرجة الحرارة المحددة والحساسية بالنسبة لدرجة الحرارة:

بالنسبة للتناجح، تم إجراء الخوارزمية كما هو موضح في القسم 2 والقسم 3، تم أخذ عينات من النظام وتم حساب العناصر المرصودة باستخدام المعلمات الواردة في الجدول (2).

الجدول (2): البارامترات المستخدمة في عمليات المحاكاة المستخدمة في إنشاء المخططات.

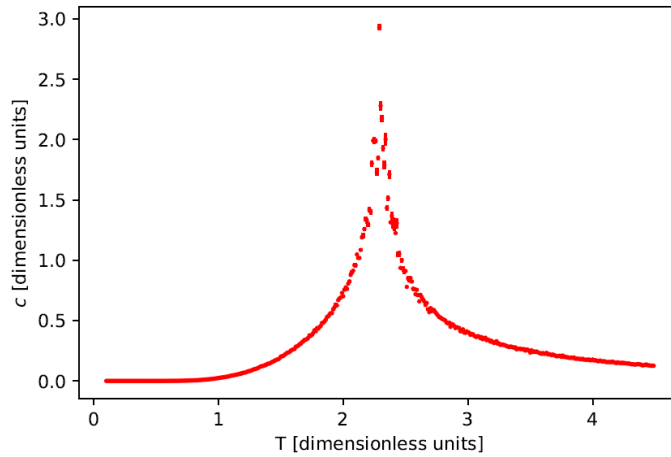
Parameter:	Value:
n	10000
$N_{bootstrap}$	10
ΔT	0.1

تم تشغيل عمليات المحاكاة مع $J > 0$ لذلك نتوقع سلوكًا مغناطيسيًا حديديًا أعلى وأدنى درجة الحرارة الحرجة. بالنسبة للمغنته في كل دوران، نتوقع أن تصل إلى $1 \pm$ في درجات حرارة منخفضة وإلى 0 لدرجات حرارة عالية. في الشكل 4 نرى أن المحاكاة تتصرف كما هو متوقع.

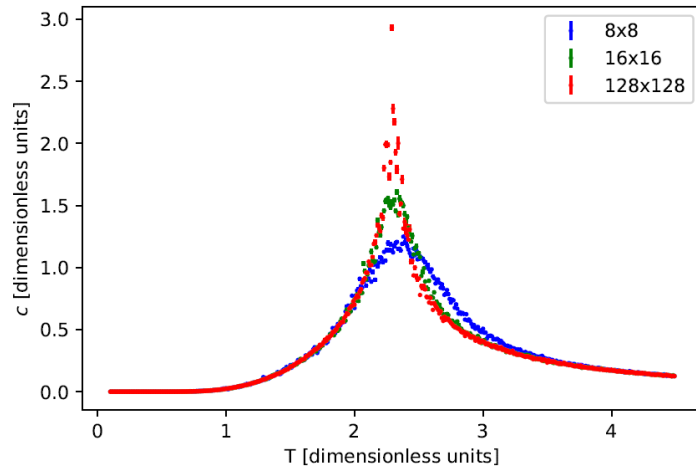


الشكل (4) المغنته لكل دوران مقابل درجة الحرارة لنظام 128×128 دوران و $J > 0$ البارامترات كما في الجدول (2).

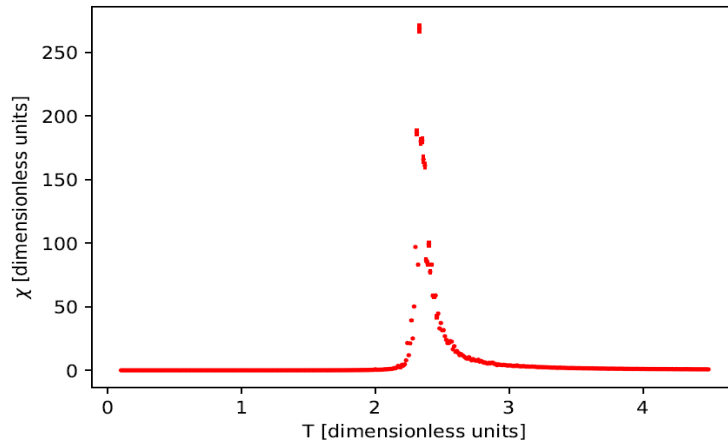
بالنسبة للحرارة المحددة لكل دوران، نتوقع انقطاعًا عند انتقال الطور في الحد الديناميكي الحراري. بالنسبة لنظام الحجم المحدود، نتوقع ذروة عند درجة الحرارة الحرجة التي تصبح أكثر حدة كلما أصبح النظام أكبر. في الشكل 5، نرى أن نظامًا من 128×128 دوران له ذروة حادة عند درجة الحرارة الحرجة. في الشكل 6، نرى أنه بالنسبة للأنظمة الأصغر، تصبح الذروة أقل حدة وأكثر انتشارًا.



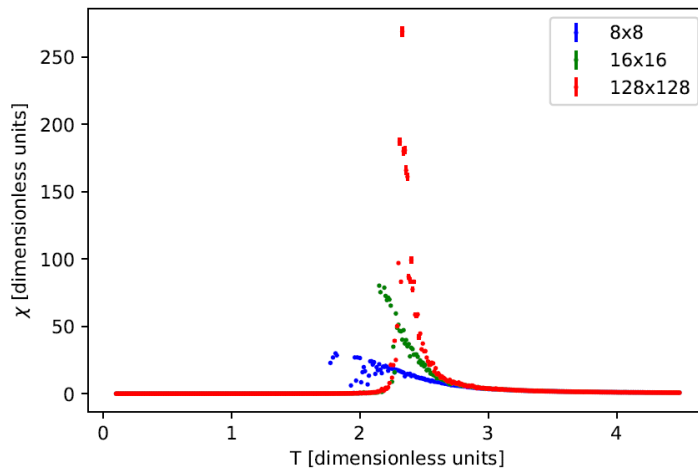
الشكل (5): الحرارة المحددة لكل دوران مقابل درجة الحرارة مع نظام 128×128 دوران و $J > 0$ البارامترات كما في الجدول (2).



الشكل (6): الحرارة المحددة لكل دوران مقابل درجة الحرارة مع أنظمة متعددة الدوران و $J > 0$ البارامترات كما في الجدول (2). نتوقع أن تصل الحرارة المحددة لكل دوران إلى الصفر أعلى بكثير وأدنى من درجة الحرارة الحرجة وأن يكون لها ذروة في انتقال الطور في الحد الديناميكي الحراري. في الشكل 7، نرى الحساسية لنظام يحتوي على 128×128 دوران ونرى أن لديه ذروة عند درجة الحرارة الحرجة. في الشكل 8، نرى أن هذه الذروة تصبح أوسع بالنسبة لأحجام النظام الأصغر.



الشكل (7): الحساسية لكل دوران مقابل درجة الحرارة مع نظام 128×128 دوران و $J > 0$ البارامترات كما في الجدول (2).



الشكل (8): الحساسية لكل دوران مقابل درجة الحرارة مع أنظمة متعددة الدوران و $J > 0$ البارامترات كما في الجدول (2).

5- تقييم النتائج:

استخدمنا خوارزمية متروبوليس لمحاكاة نموذج Ising للمجال المغناطيسي الصفري ثنائي الأبعاد المربع ووجدنا أن سلوك المغنطة في كل دوران يتوافق مع توقع نظام المغناطيسية الحديدية، تكون $I \pm 1$ لدرجات الحرارة المنخفضة وتنتقل إلى 0 في درجات حرارة أعلى مع انتقال طور واضح عند درجة حرارة محدودة. بالنسبة للنظام الذي يمر بمرحلة انتقالية، نتوقع أن تصل الحرارة النوعية إلى ذروتها عند درجة الحرارة الحرجة التي تصبح أكثر حدة عندما نميل نحو الحد الديناميكي الحراري وهو ما وجدناه. أما بالنسبة للنظام المغناطيسي الحديدي، نتوقع أن تصل الحساسية إلى الصفر أعلى وأدنى من درجة الحرارة الحرجة مع ذروة عند هذه الدرجة تصبح أكثر حدة مع اقترابنا من الحد الديناميكي الحراري وهو ما وجدناه. تتفق هذه النتائج أيضاً مع النتائج الموجودة في المواد المطبوعة [1].

باستخدام شبكة التقافية وجدنا قيمة لدرجة الحرارة الحرجة $k_B T_C / J = 2.23$ [2] التي تتفق مع النتيجة التحليلية $k_B T_C / J = \frac{2}{\ln(1+\sqrt{2})} \cong 2.2691$. الشبكة المستخدمة لتحديد درجة الحرارة الحرجة تعطي درجة الحرارة بدقة 25%. كما يؤدي تشغيل الشبكة لمزيد من الخطوات إلى إنتاج دقة أعلى ولكنه يقلل من تعريف انتقال الطور في مصفوفة الوزن للطبقة النهائية. لذلك يجب إنشاء مجموعة بيانات أكبر وإعادة تشغيل الشبكة مرة أخرى. قد ينتج عن هذا قيمة TC مع خطأ أصغر.

6- المراجع:

- [1] L. Onsager, "Crystal statistics. I. A two-dimensional model with an order-disorder transition", Physical Review, Series II. (1944)
- [2] A. Tanaka & A. Tomiya, Detection of Phase Transition via Convolutional Neural Networks, Journal of the Physical Society of Japan 86, 063001. (2017)
- [3] El Mehdi Salmani, Omar Mounkachi, El mostafa Benchafia, Mustapha Dehmani, Hamid Ez- Zahraouy, Abdelilah Benyoussef, The enhanced magnetic and magnetocaloric properties of DyNi4Si nanostructures: First Principle study and Monte-Carlo simulation, 2017.
- [4] A.Feraoun and M.Kerouad, Nano-graphene monolayer with higher-order exchange couplings: Monte Carlo study, Faculty of Sciences, University Moulay Ismail, Morocco. 2017.
- [5] Zhou Peng, Wei Wang, Dan Lv, Rui-jia Liu, Qi Li, Magnetic properties of a cubic nanoisland in the longitudinal magnetic field : A Monte Carlo study, 2017.
- [6] Dan Lv, Ye Ma, Xiao-hong Luo, Wei Jiang, Feng Wang, Qian Li, Monte Carlo study of magnetization plateaus and thermodynamic properties of a nano-graphene with a sandwich-like structure in a longitudinal magnetic field, 2020.
- [7] J.M. Thijssen, Computational Physics, Cambridge University Press, Cambridge, UK. (2013)