
碩士學位 請求論文

아이싱 모형에 대한 몬테칼로 시뮬레이션

指導教授 姜 永 奉



濟州大學校 教育大學院

物 理 教 育 專 攻

金 秀 宰

1994年 8月

아이싱 모형에 대한 몬테칼로 시뮬레이션

指導教授 姜 永 奉

이 論文을 教育學 碩士學位 論文으로 提出함.

1994年 6月 日

濟州大學校 教育大學院 物理教育專攻

提出者 金 秀 宰



金秀宰의 教育學 碩士學位 論文을 認准함.

1994年 7月 日

審査委員長 **백**
審査委員 **廉**
審査委員 **강**

규은
禎友
영봉

< 초 록 >

아이싱 모형에 대한 몬테칼로 시뮬레이션

金 秀 宰

濟州大學校 教育大學院 物理教育 專攻

指導教授 姜 永 奉

본 논문은 메트로폴리스 알고리즘에 의해 배열되어진 15, 30, 60 사각격자를 다루었다. 계의 내부에너지, 자발적 자기화, 비열 그리고 자기감수율의 수치적 값을 아이싱 모형을 써서 몬테칼로 방법으로 구하였다.

내부에너지는 $\epsilon/k_B T$ 의 증가에 따라 연속적으로 감소하였다. 자발적 자기화의 값은 $\epsilon/k_B T=0.44$ 이하에서는 0이며, 그 이상에서는 온도의 감소에 따라 1로 접근하였다. 비열, 자기감수율에서도 $\epsilon/k_B T=0.44$ 에서 임계점이 나타나며, 격자수가 많을수록 임계점을 명확히 얻을 수 있었다. 이는 이미 알려진 임계점의 값 $\epsilon/k_B T_c=0.4407$ 과 일치한다.

차 례

초 록

I. 서 론	1
II. 아이싱 모형	4
III. 몬테칼로 방법.....	9
IV. 결과 및 논의	18
참고문헌.....	29
Abstract.....	30
부 록.....	31



I. 서론

고체물리에서 흥미있는 부분 중의 하나가 강자성체 문제이다. Fe, Ni, Co 같은 물질들은 이웃 원자들의 자기모멘트가 매우 강하게 결합되어 있기 때문에 한 원자의 방향은 바로 이웃 원자의 방향에 의해 결정된다. "구역(domain)"이라 부르는 거시적 영역에서는 모든 원자의 자기모멘트가 같은 방향으로 정렬되어 있다. 이런 물질들에 외부 자기장을 걸면 매우 강력한 자기화가 이루어진다. 왜냐하면, 구역 전체가 외부 장을 따라서 나란히 서고 이웃 원자들끼리 강력히 결합되어 있어서 구역 내의 자기모멘트가 다른 방향으로 바뀌는 것을 막기 때문이다. 따라서 원자 사이의 강력한 결합으로 각 원자에 매우 큰 "자기적 관성"이 생긴 것과 같아서 열적 교란에 의해 그 방향이 바뀌는 것을 강력히 막게 되는 것이다. 이런 현상이 강자성이다. 이러한 현상은 순수한 양자효과로서 고전물리학으로는 설명할 수 없다. 직관적으로 강자성체의 생성에 대한 문제를 살펴보자.

지금 N 개의 격자점에 자기모멘트 $\vec{\mu}$ 를 갖는 원자가 있다고 하자. 자기모멘트의 크기는 $g\mu_B s$ 로 주어지며 여기서 μ_B 는 보어-마그네톤이다. 자기모멘트의 성분이 $(2s+1)$ 의 이산적인 값을 갖는다면, 모든 격자점에서 자기모멘트의 성분이 주어질 때 계의 상태가 정해지므로 가능한 상태의 총수는 $(2s+1)^N$ 가 된다. 각 상태는 자기모멘트의 상호작용 에너지와 자기모멘트의 합 $\vec{M} = \sum \vec{\mu}_i$ 와 외부 자기장 \vec{B} 에서 얻은 에너지를 합한 에너지를 갖는다. 정준앙상블(cannonical ensemble)에 의한 계산으로 자기화 $\vec{M}(B, T)$ 를 구할 수 있는데 퀴리온도 T_C 보다 작은 온도에서는 자발적 자기화 $\vec{M}(0, T)$ 가 있고, T_C 보다 높은 온도에서는 $\vec{M}(0, T)$ 가 없을 때, 이 계를 강자성체라 한다.

이론과 실험에 의하면 강자성체의 물리적인 성질은 전자의 스핀과 관계되므로 강자성체에 대하여 $\vec{\mu} = 2\mu_b \vec{s}$ 로 하고, 전자의 스핀벡터 \vec{s} 에서 z성분이 $s_z = \frac{1}{2}, s_z = -\frac{1}{2}$ 만을 취하면 계의 상태수는 2^N 개가 된다. 스핀이 평행일 때

의 에너지 $E_{\uparrow\uparrow}$ 과 반평행일 때의 에너지 $E_{\downarrow\uparrow}$ 의 차가

$$E_{\uparrow\uparrow} - E_{\downarrow\uparrow} = -2\varepsilon_{ij} \quad (1-1)$$

로 주어진다.

$\varepsilon_{ij} > 0$ 이면 $\uparrow\uparrow$ 상태의 에너지가 $\downarrow\uparrow$ 상태의 에너지 보다 낮아서 강자성을 나타낼 것이고 $\varepsilon_{ij} < 0$ 이면 반대로 $\downarrow\uparrow$ 상태의 에너지가 낮아서 반강자성을 나타낼 것이다. (1-1)식을 고쳐쓰면

$$E_{ij} = -2\varepsilon_{ij} (\vec{s}_i \cdot \vec{s}_j) \quad (1-2)$$

가 된다. 그리고 격자점에 매여있는 전자의 파동함수가 그 점으로부터의 거리의 증가에 따라 급속히 감소하므로 E_{ij} 는 가장 이웃하는 전자쌍을 제외하고는 무시할 수 있다.

그래서 전체 격자의 상호작용 에너지는

$$E = -2\varepsilon \sum_{ij} (\vec{s}_i \cdot \vec{s}_j) \quad (1-3)$$

로 주어진다. 여기서 합은 가장 이웃하는 스핀들에 대한 것을 의미한다. 강자성체에 대하여 (1-3)식과 같은 모형을 하이젠베르크 모형 (Heisenberg Model)이라 한다.

계에 외부 자기장 \vec{B} 가 걸리면 스핀이 상향 또는 하향되어서 에너지가 $-\mu_b B$ 또는 $+\mu_b B$ 가 가산되어 그 에너지를 $-\mu_b B s_i$ 로 표시할 수 있다. 그래서 계의 해밀토니안은

$$H = -2\varepsilon \sum_{ij} (\vec{s}_i \cdot \vec{s}_j) + 2\mu_b \sum_i \vec{s}_i \cdot \vec{B} \quad (1-4)$$

이 된다.

(1-4)식을 이용하여 고유치를 구한다거나 분배함수 등을 구하기가 어렵기 때문에 \vec{s} 대신에 s_z 만을 취하고 s_x 를 $-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}$ 로 할때, 이 모형은 아이싱 모형 (Ising Model)이 된다¹⁾.

(1-4)식의 해밀토니안을 이용하여 해석적 물리량을 계산하기란 쉽지 않다. 그래서 컴퓨터를 이용한 몬테칼로 방법을 써서 문제들을 해결하고 있다. 몬테칼로 방법은 고차원의 적분을 효율적으로 계산하는 방법이다.

예를 들어, 온도 $k_B T$ 에서 상호작용퍼텐셜 V 를 통하여 상호작용하는 N 개의 원자들로 구성되는 기체에 대한 정준앙상블에서의 분배함수

$$Z = \int d^3r_1 \cdots d^3r_N \exp[-\beta \sum_{i < j} V(r_{ij})] \quad (1-5)$$

는 $3N$ 차원 적분이다. 여기서 β 는 $1/k_B T$ 이다.

이와 같은 적분을 직접 계산하기란 N 이 작은 경우를 제외하고는 쉽지 않다. 그래서 구적계산(quadrature formulas)할 때 많은 구적점들의 모두에서 피적분함수를 계산하는 것이 아니라, 가로좌표에서 대표적이면서 임의적으로 뽑아낸 점들에서만 피적분함수를 계산하여 결과를 얻는다.

이러한 몬테칼로 방법은 통계물리학에서 뿐만 아니라 양자역학의 광범위한 문제들에 대해서도 매우 적절하다고 알려졌고, 이 방법에 의해 아이싱 모형에 대한 문제 뿐만 아니라 많은 물리 문제들이 해결되었으며, 여러분야에서 연구가 진행 중이다.²⁻⁸⁾

Gould 등은²⁾ $8 \times 8, 16 \times 16, 32 \times 32$ 사각격자에 대하여 몬테칼로 시뮬레이션을 하여 온도 변화에 따른 내부에너지, 비열, 자기화, 자기감수율의 수치적 값을 구하였으며, Binder³⁾는 55×55 격자에 대하여, Wong⁷⁾은 60×60 격자에 대하여 위와 같은 물리량을 구하였다. 그리고 이들은 임계값 ($\epsilon/k_B T_C = 0.4407$) 근처에서 그들의 결과를 분석하였다.

본 논문은 $15 \times 15, 30 \times 30, 60 \times 60$ 사각격자에 대한 아이싱 모형을 몬테칼로 시뮬레이션하려 한다.

이 시뮬레이션을 통하여 내부에너지, 자기화, 비열 그리고 자기감수율의 수치적 계산 결과가 얻어지며, 각각의 물리량은 $\varepsilon/k_B T$ 가 0.2에서 0.7까지 변할 때의 값으로 구하려 한다. 그리고 2차원 아이싱 모형에 대한 해석적인 결과에 의하면 $\varepsilon/k_B T$ 가 0.4407일 때 임계온도 T_C 를 가지므로 임계온도 근처에서의 열물리량들의 변화를 보기 위하여 0.4 ~ 0.5 사이의 $\varepsilon/k_B T$ 을 세분하여 시뮬레이션하려 한다. 이를 위하여 제 II장에서는 아이싱 모형을 보다 상세히 다루고, III장에서는 아이싱 모형을 사용할 때의 몬테칼로 방법을 소개하겠으며, 끝으로 IV장에서는 그 결과에 대한 분석을 다룬다.



II. 아이싱 모형

아이싱 모형은 강자성을 이해하기 위해 소개되었다. 강자성체는 외부 자기장이 없어도 자기모멘트가 존재한다. 거시적으로 볼때 자기화의 강도는 자발적 자기모멘트에 의해 측정되어진다. 그리고 그것은 퀴리온도 T_c 까지 온도가 증가함에 따라 천천히 감소한다. 이런 물질의 자기적 성질을 이해하기 위한 간단한 모형은 공간에 위치해 있는 모든 원자들을 고려하는 것이다. 여기서는 편의상 사각격자 (square lattice) ($N \times N$)의 형태와 2차원 모형을 다룬다.

사각격자에 대하여 기호 J_{ij} 는 격자점 (i, j) 에서의 원자 스핀 J 의 값을 표현한다. 문제를 간단히 하기 위해 J_{ij} 는 상향 스핀에서 +1, 하향 스핀에서 -1의 값을 갖도록 한다. 이때 (1-4)식은 다음과 같은 헤밀토니안으로 고쳐 쓸 수 있으며 (1-1)식을 만족시킨다.

$$H = -\varepsilon \sum_{ij} \sum_{i'j'} J_{ij} J_{i'j'} \quad (2-1)$$

이 모형에서 허용된 내부 상호작용은 그림 1에서와 같이 두개의 가장 이웃하는 스핀 J_{ij} 와 $J_{i'j'}$ 사이의 상호작용이다. 여기서 $(i', j') = (i+1, j), (i-1, j)$ 또는 $(i', j') = (i, j+1), (i, j-1)$ 이다. 그리고 이들은 강도 ε 를 가지고 상호작용한다. 여기서 매개변수 ε 가 양수일때 스핀이 그것의 이웃과 같은 방향으로 있으며 에너지는 더 낮고(강자성), 반면에 ε 가 음수일때 스핀은 그것의 이웃들과 반대 방향으로 정렬되려는 경향이 있을 것이다(반강자성).

만약에 외부 자기장이 걸려 있는 경우에 스핀과 외부 자기장이 상호작용하는 경우를 헤밀토니안에 포함시켜야 한다. 외부 자기장은 모든 스핀을 똑같은 방향으로 정렬시키려는 경향이 있다.

이때 헤밀토니안은 다음과 같이 고쳐 쓸 수 있다.

$$H = -\varepsilon \sum_{ij} \sum_{i'j'} J_{ij} J_{i'j'} - b \sum_{ij} J_{ij} \quad (2-2)$$

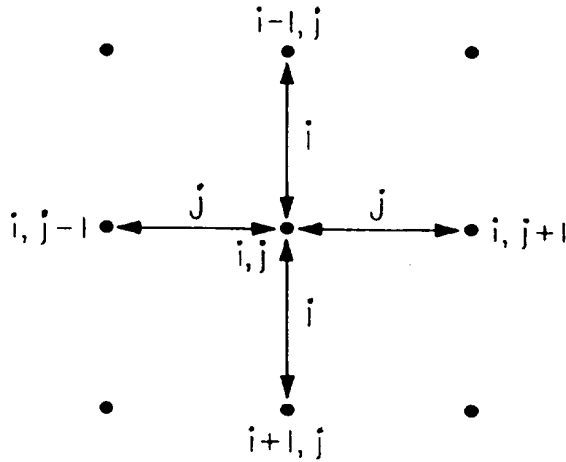


그림1. 2차원 아이싱 모형의 구조

여기서 ε 와 $b (= \mu_b B)$ 는 에너지 차원이다. $(N \times N)$ 스핀에 대한 계의 에너지는

$$E = -\varepsilon \sum_{ij} \sum_{i',j'} J_{ii'} J_{jj'} - b \sum_{ij} J_{ij} \quad (2-3)$$

로 주어진다. 그래서 에너지는 그 배열에 있는 각 스핀들의 회전에 관계되는 함수이다. 각 스핀들은 두 개의 가능한 회전을 갖고 있기 때문에 배열의 수는 $2^{N \times N}$ 이다. $2^{N \times N}$ 배열은 정준앙상블을 이루며, 주어진 배열 s 인 계에 대한 확률 $P(s)$ 는

$$P(s) = \frac{1}{Z(\varepsilon, B)} e^{-E_s/k_B T} \quad (2-4)$$

로 주어진다. 여기서 $e^{-E_s/k_B T}$ 는 볼츠만 인자이며, E_s 는 s 배열에서의 에너지이다. 그리고 k_B 는 볼츠만상수이다.

그리고 $Z(\varepsilon, B)$ 는 계의 분배함수이며 다음과 같이 주어진다.

$$Z(\varepsilon, B) = \sum_s e^{-E_s/k_B T} \quad (2-5)$$

(2-3)식을 (2-5)식에 대입하면 분배함수를 구할 수 있고 분배함수로 부터 계의 열역학적 물리량등을 구할 수 있다. 이 논문에서 관심을 갖고 있는 물리량은 내부에너지

$$\begin{aligned} E &= \sum_s P(s) E_s \\ &= k_B T^2 \frac{\partial}{\partial T} \ln Z(\varepsilon, B) \end{aligned} \quad (2-6)$$

자기화

$$M = \sum_s P(s) \left(\sum_{ij} J_{ij} \right) = k_B T \frac{\partial}{\partial B} \ln Z(\varepsilon, B), \quad (2-7)$$

자기 감수율

$$X_m = \sum_s P(s) \left(\sum_{ij} J_{ij} \right)^2 - M^2 = k_B T \frac{\partial M}{\partial B}, \quad (2-8)$$

그리고 일정한 장에서의 비열

$$C_B = \frac{\partial E}{\partial T} = \frac{1}{k_B T^2} \left(\sum_s P(s) E_s^2 - E^2 \right) \quad (2-9)$$

이다.

무한히 큰 격자 ($N \rightarrow \infty$)에서는 이차원 아이싱 모형을 풀 수 있는데, 모든 열역학적 함수에서 결과들은 다음과 같이 주어지는 임계온도 T_c 에서 특이점이 있음을 보여준다.

$$2 \tanh^2 \frac{2\varepsilon}{k_B T_c} = 1 \quad (2-10)$$

$$z = e^{-2\varepsilon/k_B T_c} = \sqrt{2}-1$$

(2-10)식의 결과는

$$\frac{\varepsilon}{k_B T_C} = 0.4406868$$

로 고쳐쓸 수 있다. 외부 자기장이 없을 때 물리량들은 간단히 표현할 수 있는데, 내부에너지는

$$\frac{E}{N^2} = -\varepsilon \coth \frac{2\varepsilon}{k_B T} \left[1 + \frac{2}{\pi} K_1(\xi) \left(2 \tanh^2 \frac{2\varepsilon}{k_B T} - 1 \right) \right] \quad (2-11)$$

이다. 여기서

$$\xi = \frac{2 \sinh \frac{2\varepsilon}{k_B T}}{\cosh^2 \frac{2\varepsilon}{k_B T}}$$

그리고 $K_1(\xi)$ 는 다음과 같은 제 1 종 완전 타원 적분이다.

$$K_1(\xi) = \int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{d\phi}{1 - \xi^2 \sin^2 \phi}$$

온도 $T \approx T_C$ 에서 비열은  제주대학교 중앙도서관 JEJU NATIONAL UNIVERSITY LIBRARY

$$\frac{C_B}{N^2} \approx \frac{2k}{\pi} \left(\frac{2\varepsilon}{k_B T} \right)^2 \left[-\ln \left| 1 - \frac{T}{T_C} \right| + \ln \left(\frac{k_B T_C}{2\varepsilon} \right) - \left(1 + \frac{\pi}{4} \right) \right] \quad (2-12)$$

의 형태이며 스핀당 자발적 자기화 는

$$\frac{M}{N^2} = \begin{cases} \frac{(1+z^2)^{1/4} (1-6z^2+z^4)^{1/8}}{\sqrt{1-z^2}} & (T < T_C) \\ 0 & (T > T_C) \end{cases} \quad (2-13)$$

로 주어진다^{9,10)}.

III. 몬테칼로 방법

아이싱 모형에 대한 컴퓨터 시뮬레이션을 수행하는 이점은 복잡한 헤밀토니안들에 대해서도 일반화할 수 있고 상대적으로 쉽게 3차원적으로 확장할 수 있는 점이다. 단점은 유한계를 다룬다는 것인데, 비록 $N = 10$ 개를 다룬다할지라도 가능한 배열의 수는 $2^{N \times N} = 2^{100} \approx 10^{30}$ 정도로 매우 큰 수이다. 그렇지만 몬테칼로 방법을 사용하여 모든 구성원에 대하여 평균을 취하여 계산하는 데는 큰 어려움이 없다. 이런 이유로하여 몬테칼로 방법이 아이싱 모형이나 이와 관련된 모형에 많이 유용하게 사용되고 있다. ($N \times N$)스핀에 대하여 각각의 배열은 $J_{ij} = \pm 1$ 에 의하여 특징지어지므로 N^2 무작위 수를 앙상블의 구성원으로 만들어야 한다. 그 앙상블의 특정한 배열에서 통계적인 무게 함수(weight function)는 앞에서의 확률에 의해 주어진다. 이를 위해서는 모든 가능한 배열에서 상대적으로 작은 수의 표본만을 택하게 되는데 이를 위한 가장 편리한 방법이 메트로폴리스 알고리즘(Metropolis algorithm)이다¹¹⁾. [부록 참조]

이 논문에서는 메트로폴리스 알고리즘을 이용하여 확률 $P(s)$ 를 갖는 스핀 배열 s 를 생성하고나서 이들 배위에 대해 원하는 열물리량들을 평균한다. 메트로폴리스 알고리즘을 수행하기 위해서는 스핀 모두를 임의적으로 변화시켜 s 부터 시행 배열 s_i 까지의 이동을 본다. 그러나 이것은 s 와는 매우 다른 배열을 만들어 낼 것이고 따라서 허용이 안될 확률이 높을 것이다. 그러므로 더 작은 걸음들을 취하는 것이 더 낫고 방금 전 배열로부터 스핀 한 개만 뒤집어진 시행 배열을 사용한다. 이것은 격자를 따라 체계적으로 쓸어 나가면서 그리고 한 번에 한 개씩 반전 여부를 고려하면서 수행되어진다.

(2-3)식을 이용하면 원래의 스핀 J_{ij} 의 반전에 의해 달라지는 에너지는 다음과 같이 쓸 수 있다.

$$\Delta E = -2J_{ij} (\varepsilon(J_{i-1,j} + J_{i+1,j} + J_{i,j-1} + J_{i,j+1}) + b) \quad (3-1)$$

여기서 매개변수 ε 를 포함하는 첫째 항은 4개의 이웃하는 스핀과의 상호작용에 의한 에너지 변환이며 매개변수 b 와 관련되는 둘째 항은 외부 자기장과의 상호작용에 기인하는 에너지 변화이다.

예를 들어 그림 2 와 같은 스핀들이 있을 때

$J_{ij} = -1, J_{i-1,j} = -1, J_{i+1,j} = 1, J_{i,j-1} = 1, J_{i,j+1} = 1$ 의 값을 갖는다.

에너지 변화는 (3-1)식에 의해 $\Delta E = 4\varepsilon + 2b$ 가 된다.

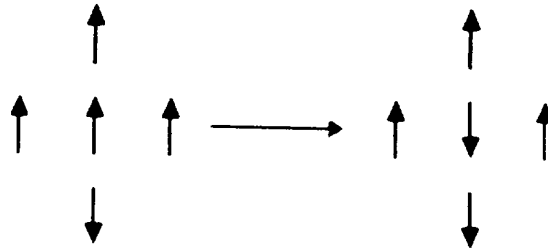


그림 2. 중심 스핀의 반전에 의한 에너지 변화 ($\Delta E = 4\varepsilon + 2b$)

메트로폴리스 알고리즘에서 시행 배열 s_i 가 허용될 것인지 금지될 것인지는 다음과 같은 두 배열 s_i 와 s 을 갖는 확률에 관계되는 γ 의 비율에 의해 결정된다.

$$\begin{aligned} \gamma &= \frac{P(s_i)}{P(s)} \\ &= \frac{e^{-E_i/k_B T}}{e^{-E_s/k_B T}} \\ &= e^{-\Delta E/k_B T} \end{aligned} \quad (3-2)$$

구체적으로 $\gamma > 1$ 이면 스핀 J_{ij} 는 반전되며 $\gamma \leq 1$ 일때는 0과 1사이에 일정하게 분포된 무작위 수 x 를 생성하게 하고 이때 $x \leq \gamma$ 이면 스핀을 변하게 되고, $x > \gamma$ 이면 시행 배열은 금지된다. 즉 $x > \gamma$ 일때 J_{ij} 는 변하지 않는다. (3-1)식의 ΔE 의 첫항은 반전된 스핀과 이웃하는 4개의 스핀들의 합이다.

그림 3 에서와 같이 이들은 단지 5개의 다른 값들 0, ± 2 , ± 4 중에서 하나만을 택할 수 있다. 그리고 J_{ij} 는 두개의 다른 값을 가지므로 γ 는 단지 ($2 \times 5 = 10$)개의 다른 값만 갖게된다. 이들은 이와 같은 지시들을 반복적으로 계산할 필요가 없도록, 본 계산이 시작되기 전에 미리 계산해서 한 표에 편리하게 저장해 놓을 수 있다. 이런 (2×5)행렬을 decision행렬이라 하자⁷⁾.

한 배열 s_n 에서 다른 새로운 배열 s_{n+1} 를 구하기 위해서는 모든 ($N \times N$)스핀들에 걸쳐서 스핀들의 반전 여부를 확인해야 한다. 이런 계산을 하기 위해서는 많은 시간이 요구되는데 이미 저장된 decision행렬을 쓰면 계산 속도에서 많은 개선이 된다.

새로운 배열을 구하기 위해서는 두 가지의 기술적인 점이 요구되는데 첫번째로 메트로폴리스 알고리즘에 의해 생성된 각 무작위 배열이 앞선 배열과 강하게 관련을 짓는다는 것이다. 이는 바람직하지 못하다. 이런 상호관계를 최소화하기 위해서 구성원으로 허용된 둘 사이의 배열을 몇 개 버린다.

즉 출발점과 종속적인 관계를 제거시키기 위해 진짜 표본이 추출되기 전에 혼돈 상태로 접어드는 과정을 고려해야한다. 왜냐하면 출발점에서의 배열은 평형상태가 아닐 것이기 때문이다.

두 번째점은 실제 계산에 사용될 작은 수 N 때문에 생기는 유한 크기의 효과와 관련된다. 이런 제한을 보상해주기 위해서 주기적인 경계조건을 사용한다.

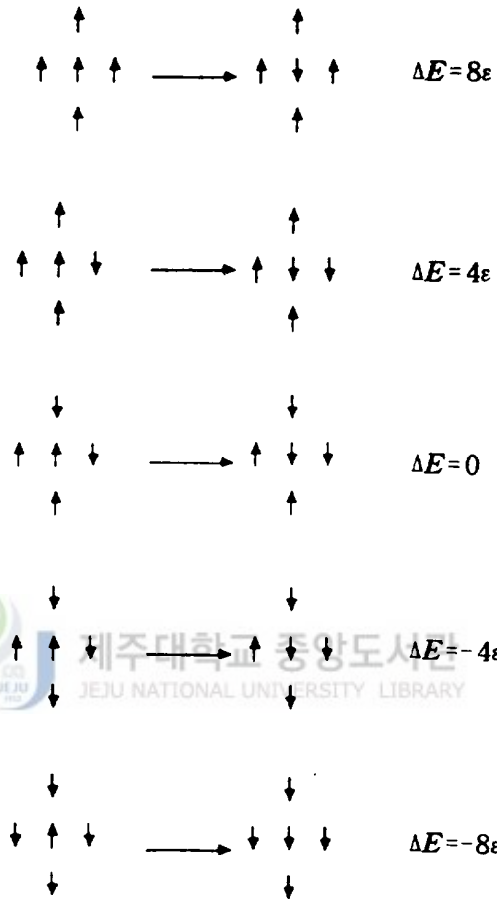


그림 3. 사각격자에서 5개의 가능한 전이. 에너지 변화는 8ε , 4ε , 0 , -4ε , -8ε 의 값을 갖는다.

즉 여기서 사용한 사각격자는 공간에 있는 동일한 사각격자들 중 하나이다. 이들 격자의 꼭대기 격자는 다른 사각격자의 바닥과 연결되어 있다고 보고 왼쪽에 있는 격자들은 다른 사각격자의 오른쪽과 접촉하고 있다고 본다. 이런 경계조건은 다음과 같은 관계를 준다.

$$i = 1, \quad J_{i-1,j} \rightarrow J_{N,j}$$

$$i = N, \quad J_{i-1,j} \rightarrow J_{1,j}$$

$$j = 1, \quad J_{i,j-1} \rightarrow J_{i,N}$$

$$j = N, \quad J_{i,j-1} \rightarrow J_{i,1}$$

그리고 그림 4는 (10×10) 사각격자의 경계조건을 나타낸 그림이며 화살표로 된 실선이 스핀들이 서로 이웃하는 관계를 나타낸 것이다.

그림 5는 $N=16$ 일 때 계에 허용되는 2^{16} 개의 가능한 배열 중의 하나로 경계조건을 나타낸 그림이다.

양상블의 배열이 확률 (2-4)식에 의해 선택되었기 때문에 물리량의 양상블 평균은 선택된 배열의 합에 대한 평균과 동일하다. 그래서 내부에너지는 (2-6)식에 의해

$$E = \sum_s P(s) E_s \rightarrow \frac{1}{N_m} \sum_s E_s \quad (3-3)$$

으로 주어진다. 여기서 N_m 은 표본된 배열의 수이다.

합에 대한 프라임은 배열이 적절한 무거운자 $P(s)$ 에 의해 선택되었음을 나타낸다

	1.10	2.10	3.10	4.10	5.10	6.10	7.10	8.10	9.10	10.10	
10.1	1.1	2.1	3.1	4.1	5.1	6.1	7.1	8.1	9.1	10.1	1.1
10.2	1.2	2.2	3.2	4.2	5.2	6.2	7.2	8.2	9.2	10.2	1.2
10.3	1.3	2.3	3.3	4.3	5.3	6.3	7.3	8.3	9.3	10.3	1.3
10.4	1.4	2.4	3.4	4.4	5.4	6.4	7.4	8.4	9.4	10.4	1.4
10.5	1.5	2.5	3.5	4.5	5.5	6.5	7.5	8.5	9.5	10.5	1.5
10.6	1.6	2.6	3.6	4.6	5.6	6.6	7.6	8.6	9.6	10.6	1.6
10.7	1.7	2.7	3.7	4.7	5.7	6.7	7.7	8.7	9.7	10.7	1.7
10.8	1.8	2.8	3.8	4.8	5.8	6.8	7.8	8.8	9.8	10.8	1.8
10.9	1.9	2.9	3.9	4.9	5.9	6.9	7.9	8.9	9.9	10.9	1.9
10.10	1.10	2.10	3.10	4.10	5.10	6.10	7.10	8.10	9.10	10.10	1.10
	1.1	2.1	3.1	4.1	5.1	6.1	7.1	8.1	9.1	10.1	

그림 4. (10×10) 사각격자의 경계조건

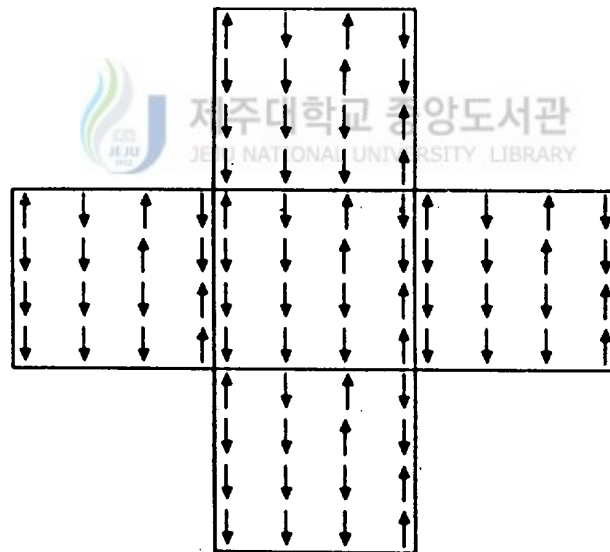


그림 5. N=16일때의 주기적인 경계조건

양상블의 각 구성원들에 대한 열물리량은 다음의 두 항에 의해 유도되어진다.

$$f(s) = \sum_{ij} J_{ij} (J_{i-1,j} + J_{i,j-1} + J_{i,j+1} + J_{i+1,j}), \quad (3-4)$$

$$g(s) = \sum_{ij} J_{ij}. \quad (3-5)$$

여기서 $f(s)$ 는 스핀과 스핀 사이의 상호작용에 의한 항이며 $g(s)$ 는 스핀과 외부 자기장의 상호작용에 의한 항이다. 각 배열에 대한 두 항의 값에 의한 (2-6)식에서 (2-9)식까지의 E, C_B, M, X_m 의 양상블 평균은

$$E = \frac{1}{N_m} \sum_s' (-\varepsilon f(s) - b g(s)), \quad (3-6)$$

$$C_B = \frac{1}{k_B T^2 N_m} \sum_s' (-\varepsilon f(s) - b g(s) - E)^2, \quad (3-7)$$

$$M = \frac{1}{N_m} \sum_s' g(s), \quad (3-8)$$

$$X_m = \frac{1}{N_m} \sum_s' (g(s) - M)^2 \quad (3-9)$$

로 주어진다.



여기서 몬테칼로 방법에 대한 이해를 돕기 위하여 (2×2) 스핀격자에 대한 문제에 관심을 갖자. 이때 정준양상블에서, $\varepsilon = \frac{1}{2}$ 일 때 (2×2) 격자의 아이싱 모형에 대한 정확한 수치적 계산은 다음과 같다.

그림 6은 16개의 허용된 상태중에 2개의 배열에 대한 에너지를 계산한 것이며, 스핀 $\uparrow\uparrow, \downarrow\downarrow$ 일 때 에너지는 $-\varepsilon$ 의 값을 가지며 $\uparrow\downarrow, \downarrow\uparrow$ 일 때 에너지는 $+\varepsilon$ 의 값을 이용하여 계산하였다.

표 1 은 모든 허용된 상태에 대하여 에너지와 자기화를 나타낸 것이다. 표 1 을 사용하여 관심을 갖는 물리량을 계산할 수 있다.

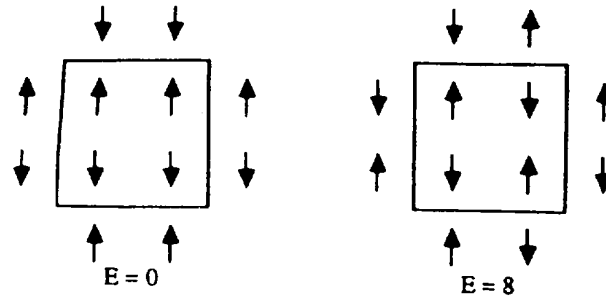


그림 6. $\varepsilon = \frac{1}{2}$ 일 때 (2×2) 사각격자를 주기적인
경계조건을 사용하여 나타낸 아이싱 배열의 예

표1. (2×2) 사각격자에서 자기장이 없을 때 2^4 상태의 에너지와 자기화

스핀 위의 수	축퇴	에너지	자기화
4	1	-8	4
3	4	0	2
2	4	0	0
2	2	8	0
1	4	0	-2
0	1	-8	-4

계의 분배함수는 (2-5)식을 이용하면

$$Z = 2\exp(8/k_B T) + 12 + 2\exp(-8/k_B T) \quad (3-10)$$

로 주어진다.

그리고 평균 내부에너지는 (2-5)식과 (2-6)식을 쓰면

$$\langle E \rangle = \frac{-[2(8) \exp(8/k_B T) + 2(-8) \exp(-8/k_B T)]}{Z} \quad (3-11)$$

로 계산되며,

자기화의 평균은 (2-7)식을 사용하여 계산하면

$$\langle M \rangle = \frac{(0)}{Z} \quad (3-12)$$

이 된다. 이외에도 C_B 와 X_m 의 값은 (2-8)식과 (2-9)식을 사용하면 얻을 수 있다. 다음 장에서는 $N=15, 30, 60$ 일 때 내부에너지, 비열, 자기화, 자기 감수율에 대한 몬테칼로 계산 결과를 논의하겠다.

IV. 결과 및 논의

아이싱 모형에서의 내부에너지, 자기화, 비열, 자기감수율을 수치적으로 구하기 위해 몬테칼로 방법을 이용하였으며, 임의로 주어지는 확률분포를 갖는 확률 변수들을 생성하기 위한, 유용한 방법의 한가지인 메트로폴리스 알고리즘을 택하였다. 각 물리량의 결과들은 $N=15, 30, 60$ 사각격자에서 계산되었다. 그 결과는 20개 앙상블의 평균값이며, 각 앙상블에는 500개의 사각격자가 있다. 앙상블 구성원 사이의 관련을 줄이기 위하여 구성원 사이에 10개의 구성원을 버렸다. 그리고 자발적 자기화의 상황을 보기 위하여 외부 자기장 B 가 없는 경우의 아이싱 모형에 대하여 계산하였으며, 이 결과는 이미 계산된 2차원 무한 격자의 정확한 해와 비교할 수 있다.

물리량들을 $\varepsilon/k_B T$ 의 함수로 구하였다. $\varepsilon/k_B T$ 의 값은 0.2에서 0.7까지로 한정하였으며, 0.4~0.5 사이의 값을 세분하여 시뮬레이션하였다. 왜냐하면, 중요한것은 $\varepsilon/k_B T$ 가 0.44 근처에서 물리량들이 임계값을 갖기 때문이다.

표 2 는 $N=15, 30, 60$ 일 때 $\varepsilon/k_B T$ 의 변화에 따른 스핀 당 내부에너지의 평균값이다. 여기에서 +-을 포함하는 숫자는 표준편차를 나타낸다. 그림 7은 $\varepsilon/k_B T$ 와 음의 부호를 갖는 내부에너지($-E/N^2 k_B T$)의 관계를 나타내는 그림이다. 음의 부호를 갖는 내부에너지는 $\varepsilon/k_B T$ 의 증가(온도의 감소)에 따라 연속적으로 변함을 알 수 있으며, $N=15, 30, 60$ 에서의 내부에너지는 거의 같은 값을 나타내고 있다. 앙상블들 사이에서 에너지 값의 요동은 아주 작아서 나타나지 않는다.

표 2. $N=15, 30, 60$ 일 때의 스핀 당 내부에너지의 평균값 ($E/N^2k_B T$)

$\epsilon/k_B T$	스핀의 수		
	15 x 15	30 x 30	60 x 60
0.2	-0.0858 +- 0.00213	-0.0857 +- 0.00123	-0.0857 +- 0.000359
0.3	-0.212 +- 0.00349	-0.212 +- 0.00120	-0.211 +- 0.000637
0.4	-0.456 +- 0.00823	-0.443 +- 0.00398	-0.443 +- 0.00191
0.41	-0.496 +- 0.00123	-0.479 +- 0.00421	-0.477 +- 0.00299
0.42	-0.541 +- 0.00823	-0.522 +- 0.00756	-0.515 +- 0.00385
0.43	-0.591 +- 0.0127	-0.572 +- 0.0133	-0.562 +- 0.00783
0.44	-0.639 +- 0.0141	-0.629 +- 0.0082	-0.624 +- 0.00750
0.45	-0.684 +- 0.0101	-0.681 +- 0.0152	-0.680 +- 0.00384
0.46	-0.729 +- 0.0110	-0.728 +- 0.00664	-0.727 +- 0.00367
0.47	-0.768 +- 0.00898	-0.768 +- 0.00343	-0.768 +- 0.00367
0.48	-0.805 +- 0.00739	-0.805 +- 0.00419	-0.805 +- 0.00448
0.49	-0.8402 +- 0.00753	-0.840 +- 0.00240	-0.840 +- 0.00270
0.5	-0.872 +- 0.00643	-0.873 +- 0.00268	-0.873 +- 0.002108
0.6	-1.15 +- 0.00394	-1.15 +- 0.00130	-1.15 +- 0.000833
0.7	-1.37 +- 0.00167	-1.37 +- 0.0338	-1.37 +- 0.00143

$-E/N^2k_B T$

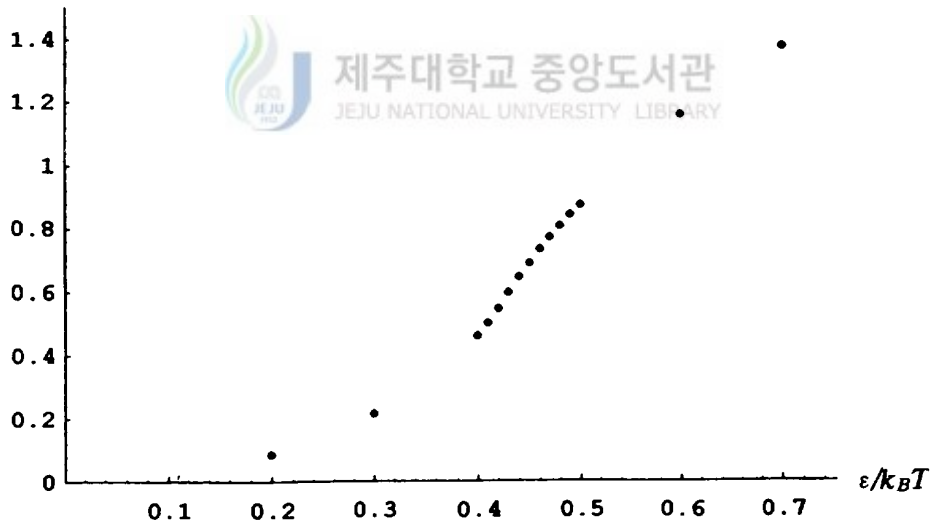


그림7-a. $N=15$ 일 때의 $\epsilon/k_B T$ 에 대한 스핀당 내부에너지

$-E/N^2 k_B T$

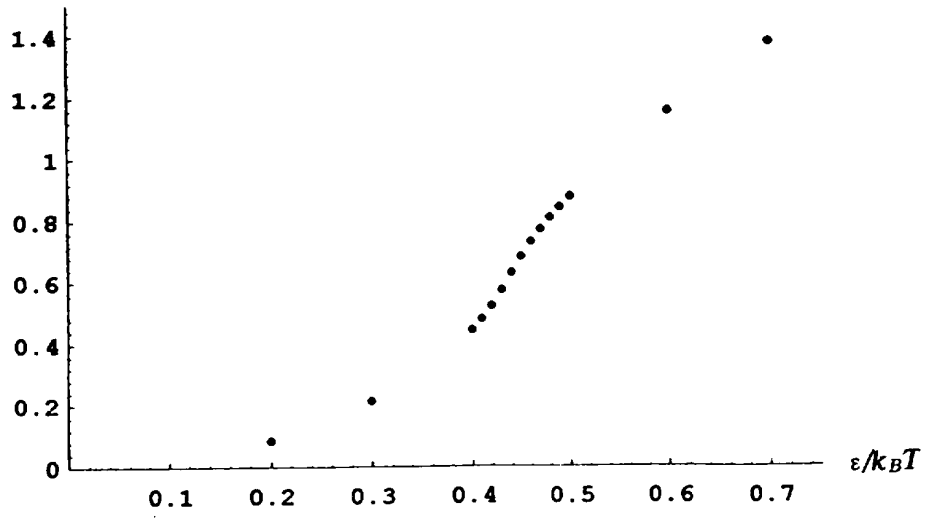


그림7-b. $N=30$ 일 때의 $\epsilon/k_B T$ 에 대한 스핀당 내부에너지

$-E/N^2 k_B T$

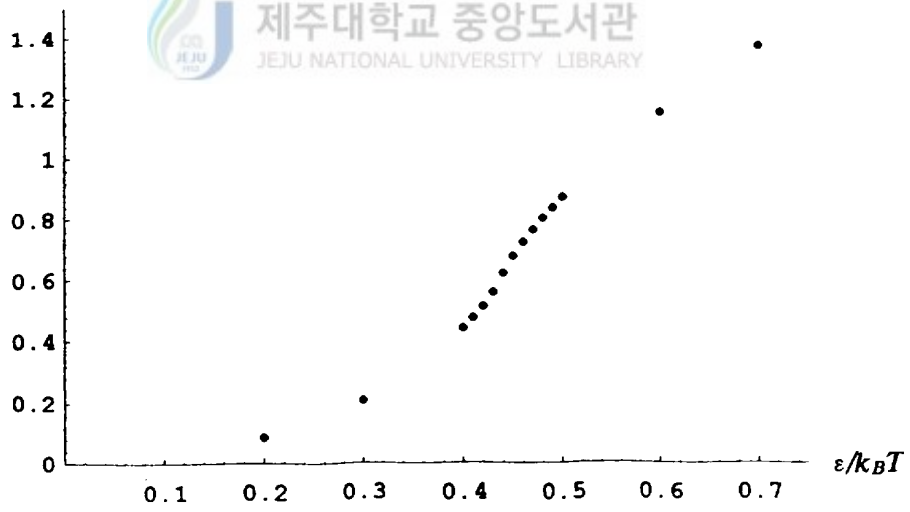


그림7-c. $N=60$ 일 때의 $\epsilon/k_B T$ 에 대한 스핀당 내부에너지

표 3 은 스핀 당 자기화를 $N=15, 30, 60$ 일 때 $\varepsilon/k_B T$ 의 변화에 따라 나타낸 값이고, 그림 8 은 그 관계를 나타낸다. 자기화 값은 $\varepsilon/k_B T = 0.44$ 이하에서 거의 영에 가깝고, 이 임계점 이상에서는 온도의 감소에 따라 M 은 연속적으로 증가해서 1 로 접근함을 알 수 있다. M 값의 요동은 앙상블들 사이의 표준편차인데 임계점 근처에서 크게 나타나고 있다. 이는 외부 자기장이 없으므로 해서 각 스핀과 관련되는 자기쌍극자 모멘트가 정렬해야하는 기준 방향이 없기 때문이다. 그리고 임계온도 이하에서는 자발적 자기화기 기준방향을 주기 때문에 요동은 더욱 작은 값을 갖는다. 유한개 격자를 사용함에도 불구하고 제 2차 상전이 현상을 표 3 과 그림 8 로 부터 확인할 수 있다.

표 3. $N = 15, 30, 60$ 일 때 스핀 당 자기화의 값(M/N^2)

$\varepsilon/k_B T$	스핀의 수		
	15 x 15	30 x 30	60 x 60
0.2	0.000913 +- 0.00446	0.000346+- 0.00234	0.0000823+- 0.00101
0.3	0.000228 +- 0.00080	0.000314+- 0.00515	0.000139 +- 0.00240
0.4	0.00457 +- 0.0324	0.00200 +- 0.0213	0.00364 +- 0.0108
0.41	0.000549 +- 0.0492	0.0165 +- 0.0328	0.000608 +- 0.0197
0.42	0.00252 +- 0.0943	0.0157 +- 0.0762	0.00481 +- 0.0425
0.43	0.0535 +- 0.132	0.0212 +- 0.155	0.0428 +- 0.115
0.44	0.0559 +- 0.229	0.0475 +- 0.386	0.417 +- 0.336
0.45	0.606 +- 0.303	0.341 +- 0.554	0.745 +- 0.0146
0.46	0.647 +- 0.143	0.273 +- 0.7493	0.814 +- 0.00297
0.47	0.736 +- 0.0251	0.852 +- 0.00267	0.850 +- 0.00676
0.48	0.879 +- 0.00854	0.877 +- 0.00238	0.877 +- 0.00232
0.49	0.898 +- 0.00124	0.897 +- 0.00187	0.895 +- 0.00481
0.5	0.911 +- 0.00240	0.911 +- 0.00151	0.911 +- 0.00377
0.6	0.974 +- 0.00118	0.973 +- 0.00519	0.984 +- 0.0252
0.7	0.990 +- 0.00048	0.989 +- 0.00341	0.970 +- 0.115

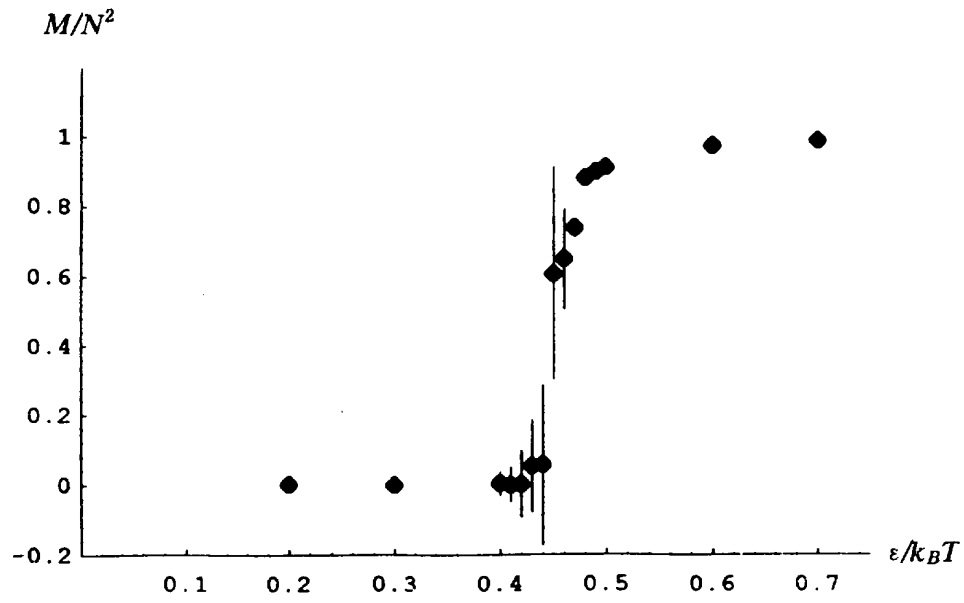


그림 8-a. $N=15$ 일 때의 $\epsilon/k_B T$ 에 대한 스핀당 자기화

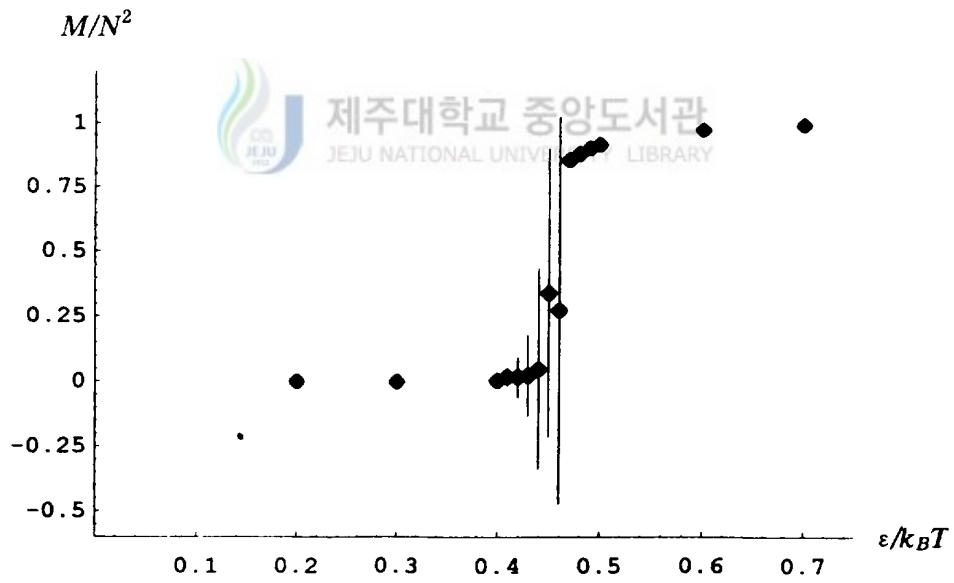


그림 8-b. $N=30$ 일 때의 $\epsilon/k_B T$ 에 대한 스핀당 자기화

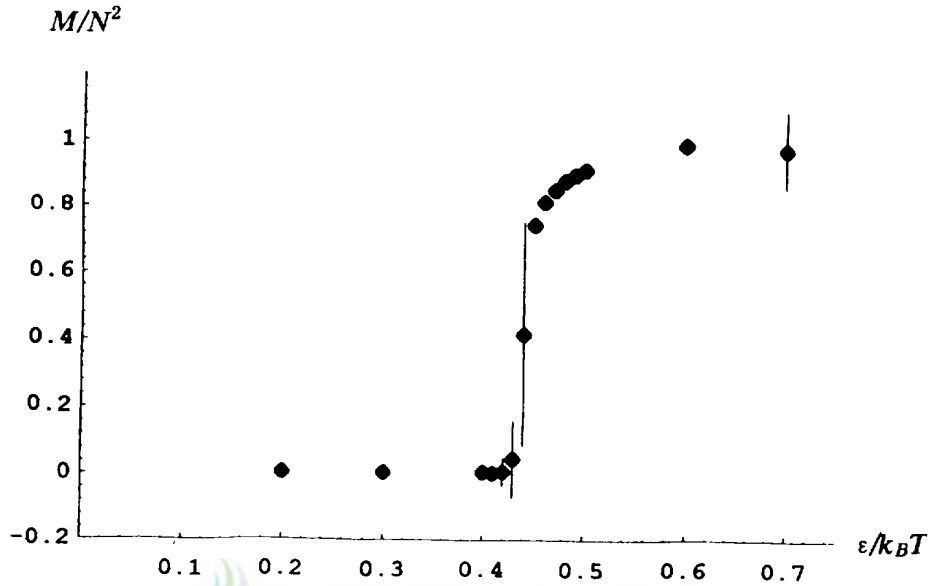


그림 8-c. $N=60$ 일 때의 M/N^2 에 대한 $\epsilon/k_B T$ 에 대한 스핀당 자기화

표 4 는 $N = 15, 30, 60$ 일 때 $\epsilon/k_B T$ 에 따르는 스핀 당 비열의 값이고, 그림 9 는 그 관계를 나타내고 있다. 비열은 내부에너지의 제곱의 함수로 주어진다. 그래서 비열은 어떤 앙상블과 다른 앙상블에서의 비열의 값은 크게 나타나고 있다. 마찬가지로 비열에서도 요동은 큰 값을 가지나 임계점의 존재를 보여주고 있으며, 격자수가 많을수록 임계점을 명확히 얻을 수 있다.

표 4. $N = 15, 30, 60$ 일 때 스핀 당 비열의 값 (C_B/N^2)

$\epsilon/k_B T$	스핀의 수		
	15 x 15	30 x 30	60 x 60
0.2	0.0980 +- 0.00683	0.0988 +- 0.00587	0.0968 +- 0.00421
0.3	0.2291 +- 0.0177	0.288 +- 0.0207	0.289 +- 0.0211
0.4	1.09 +- 0.0587	0.809 +- 0.0503	0.877 +- 0.0533
0.41	1.10 +- 0.0698	1.08 +- 0.0898	0.987 +- 0.0585
0.42	1.45 +- 0.0673	1.44 +- 0.0897	1.19 +- 0.0804
0.43	1.50 +- 0.0681	1.76 +- 0.102	1.71 +- 0.145
0.44	1.40 +- 0.0799	1.80 +- 0.135	2.11 +- 0.177
0.45	1.38 +- 0.102	1.58 +- 0.132	1.66 +- 0.174
0.46	1.21 +- 0.119	1.21 +- 0.0710	1.23 +- 0.100
0.47	1.05 +- 0.0663	1.03 +- 0.0615	1.06 +- 0.156
0.48	0.902 +- 0.0766	0.926 +- 0.0629	0.931 +- 0.0801
0.49	0.804 +- 0.0687	0.803 +- 0.0424	0.840 +- 0.120
0.5	0.743 +- 0.0451	0.721 +- 0.0418	0.741 +- 0.108
0.6	0.314 +- 0.0274	0.313 +- 0.0231	0.314 +- 0.0257
0.7	0.154 +- 0.00861	0.181 +- 0.0893	0.286 +- 0.558

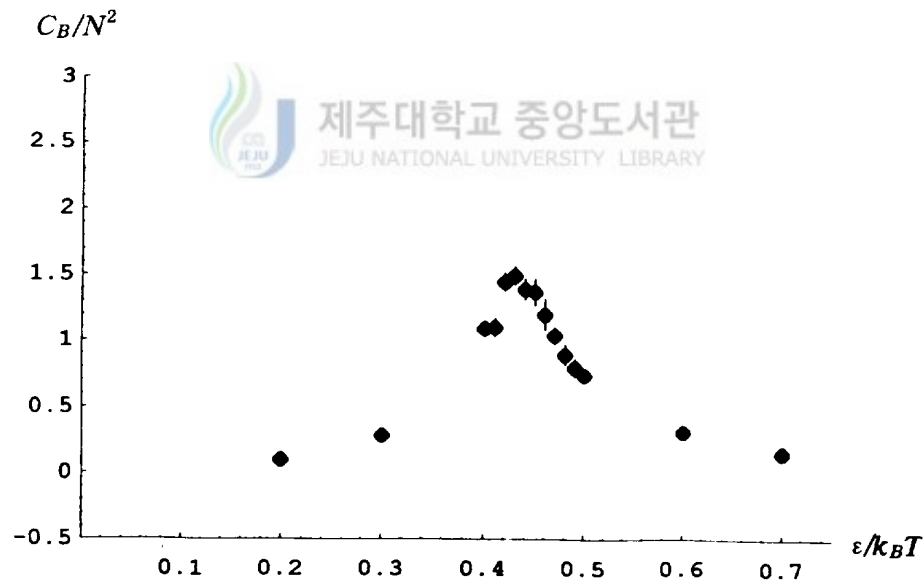


그림 9-a. $N=15$ 일 때의 $\epsilon/k_B T$ 에 대한 스핀당 비열

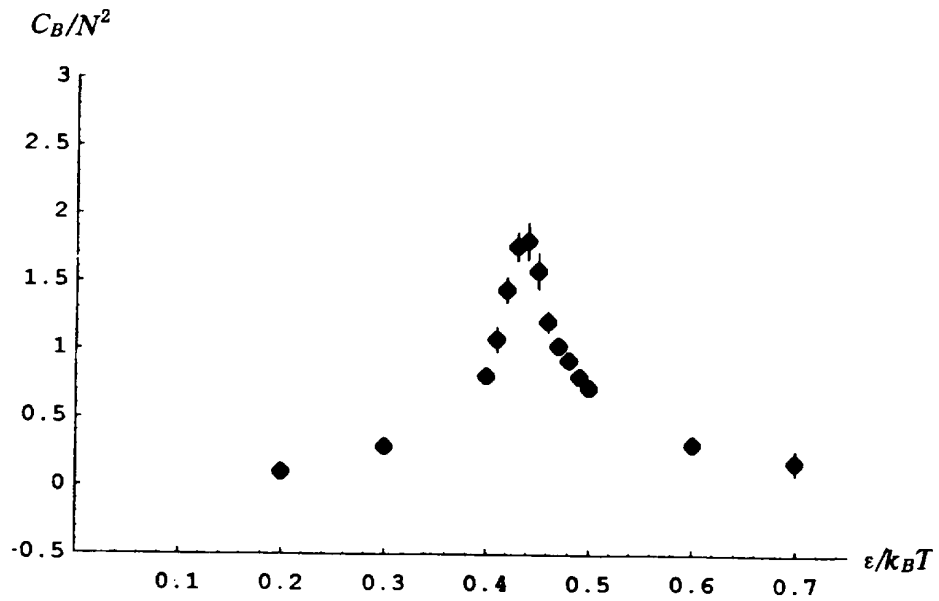


그림 9-b. $N=30$ 일 때의 $\epsilon/k_B T$ 에 대한 스핀당 비열

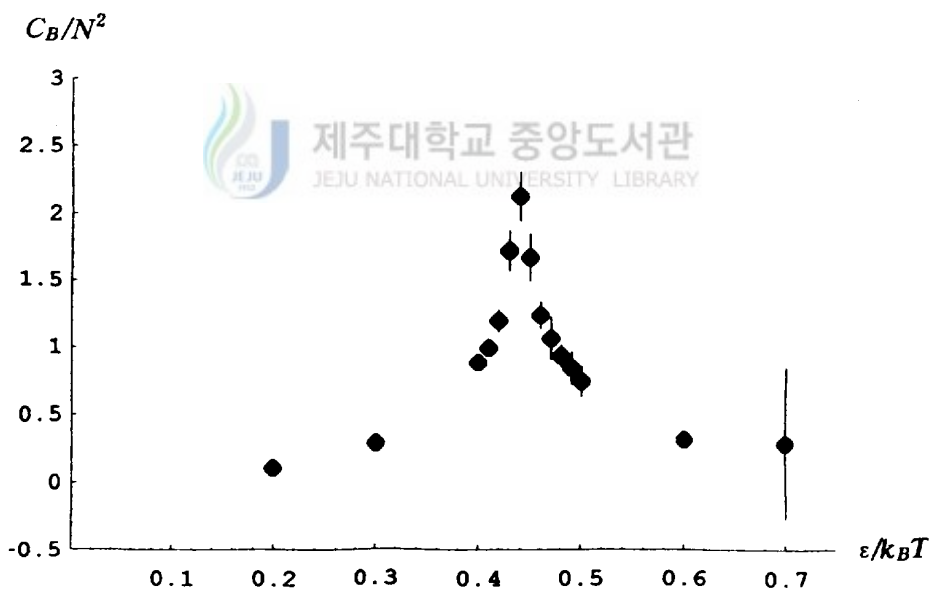


그림 9-c. $N=60$ 일 때의 $\epsilon/k_B T$ 에 대한 스핀당 비열

표 5 는 $N = 15, 30, 60$ 일 때 $\varepsilon/k_B T$ 의 변화에 따른 자기감수율을 시뮬레이션 한 값이고, 그림 10 은 그 관계를 나타낸 그래프이다. 자기감수율은 자기화의 제곱에 비례하므로, 표 4 와 그림 10 에서 $\varepsilon/k_B T = 0.44$ 근처에 임계점이 있음을 알 수 있으며 큰 요동이 임계점 근처에서 나타난다. 그리고 비열에서와 같이 격자수가 많을수록 임계점을 명확히 얻을 수 있다.

표 5. $N = 15, 30, 60$ 일 때 스핀당 자기감수율의 값 (X_m/N^2)

$\varepsilon/k_B T$	스핀의 수					
	15 x 15		30 x 30		60 x 60	
0.2	2.82	+ - 0.238	2.79	+ - 0.187	2.94	+ - 0.204
0.3	7.18	+ - 0.479	7.11	+ - 0.416	7.23	+ - 0.361
0.4	50.3	+ - 2.30	62.3	+ - 4.34	62.4	+ - 5.01
0.41	64.8	+ - 2.88	96.4	+ - 7.12	104	+ - 11.2
0.42	81.1	+ - 4.31	159	+ - 13.0	199	+ - 26.8
0.43	99.9	+ - 5.69	250	+ - 246	460	+ - 104
0.44	112	+ - 11.8	275	+ - 110	345	+ - 458
0.45	120	+ - 24.3	142	+ - 181	27.2	+ - 21.1
0.46	93.8	+ - 53.6	32.5	+ - 121	5.92	+ - 1.27
0.47	43.8	+ - 52.5	2.73	+ - 0.779	5.31	+ - 10.2
0.48	51.2	+ - 68.5	1.69	+ - 0.257	2.55	+ - 3.77
0.49	2.95	+ - 8.35	1.04	+ - 0.116	2.79	+ - 7.29
0.5	0.814	+ - 0.189	0.786	+ - 0.114	2.69	+ - 8.44
0.6	0.0961	+ - 0.0103	0.120	+ - 0.0885	0.263	+ - 0.724
0.7	0.0266	+ - 0.00252	0.597	+ - 2.48	11.4	+ - 49.4

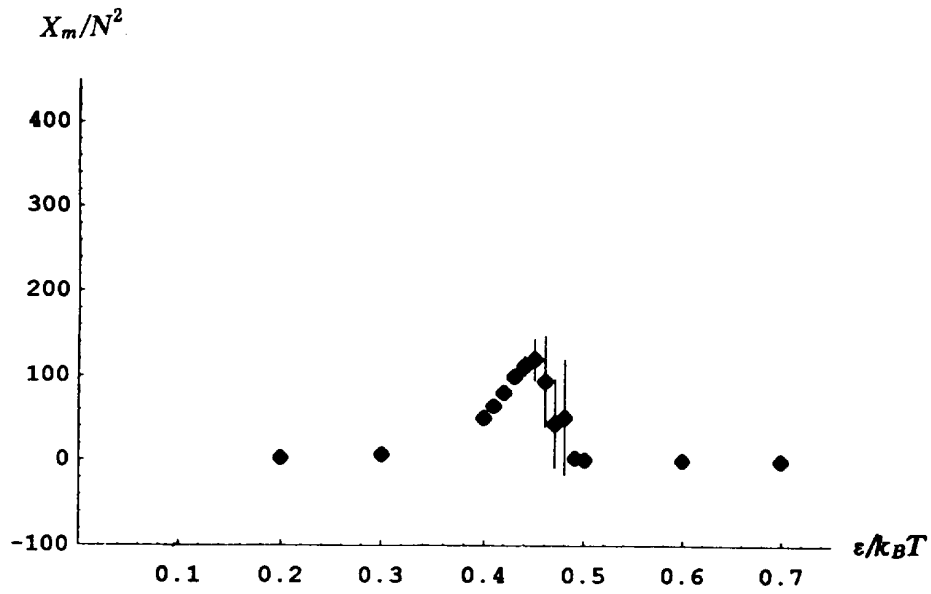


그림 10-a. $N=15$ 일 때의 $\epsilon/k_B T$ 에 대한 스핀당 자기감수율

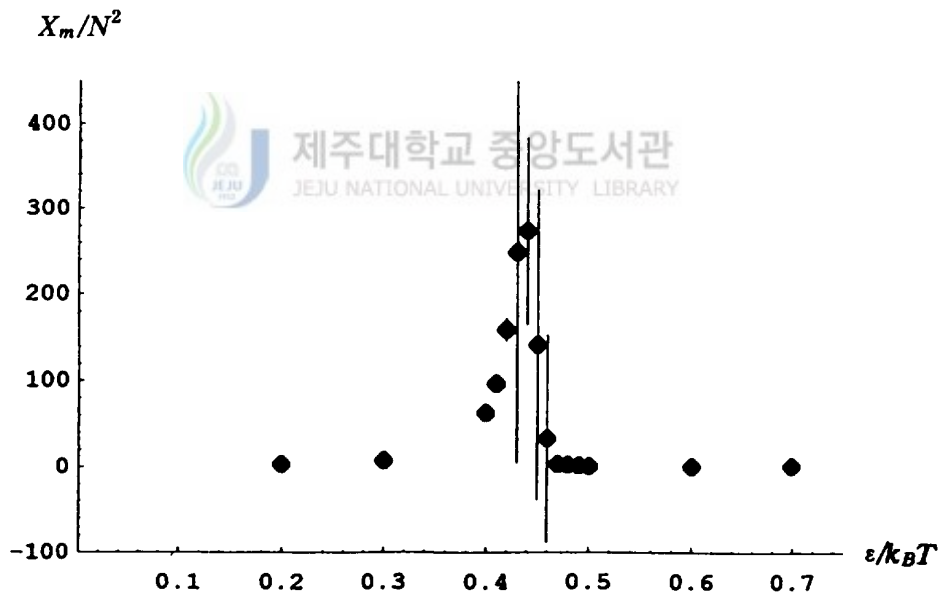


그림 10-b. $N=30$ 일 때의 $\epsilon/k_B T$ 에 대한 스핀당 자기감수율

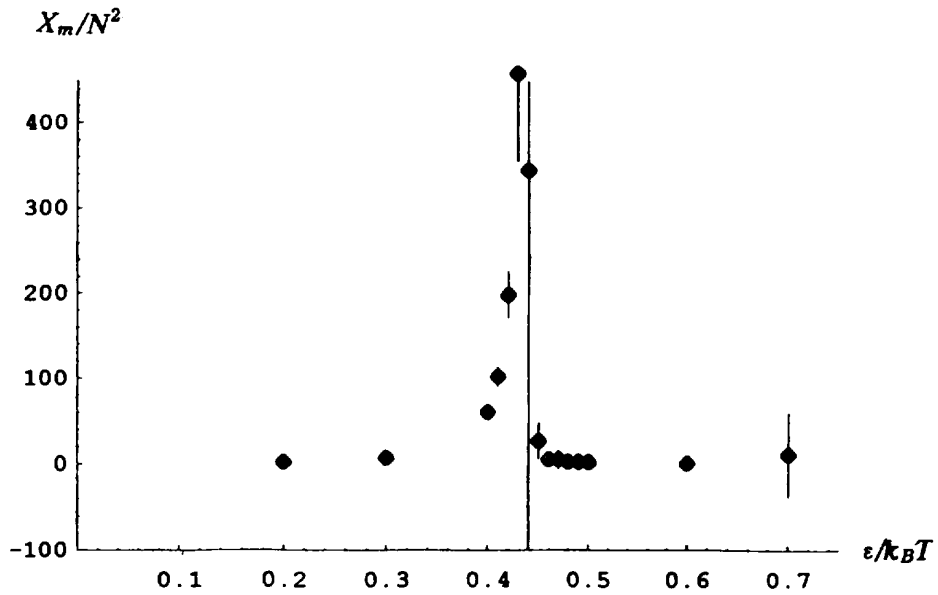


그림 10-c. $N=60$ 일 때의 $\epsilon/k_B T$ 에 대한 스핀당 자기감수율

이상의 결과로 볼 때 내부에너지는 $\epsilon/k_B T$ 의 증가에 따라 연속적으로 감소하며, 임계온도(퀴리온도) 이상에서는 자발적 자기화가 없으며($M=0$) 임계온도 이하에서는 온도의 감소에 따라 M 은 1로 접근한다. 이는 이미 알려진 이론과 일치한다. 그리고 비열, 자기감수율에서도 임계점이 나타나며, 격자수가 많을수록 임계점을 명확히 얻을 수 있었다. 수치적 결과는 이론적인 임계값 $\epsilon/k_B T_c = 0.4407$ 과 일치한다.

참 고 문 헌

- 1) R.K.Pathria, Statistical Mechanics, Pergamon, pp.392~439, (1972)
- 2) H.Gould, J.Tobochnik, An Introduction to Computer Simulation Methods, Part 2, Addison-Wesley, pp.502~579, (1988)
- 3) K.Binder, D.W.Heermann, Monte Carlo Simulation in Statistical Physics, Springer Verlag, pp.97~112, (1988)
- 4) K.Binder, Monte Carlo Method in statistical Physics, Springer Verlag, pp.121~143, (1979)
- 5) S.E.Koonin, D.C.Meredith, Computational Physics, Addison-Wesley, pp.197~220, (1990)
- 6) D.W.Heermann, Computer Simulation Methods in Theoretical Physics, Springer Verlag, pp.62~100, (1990)
- 7) S.S.M.Wong, Computational Methods in Physics and Engineering, Prentice Hall, pp.383~444, (1991)
- 8) Wm.G.Hoover, Computational Statistical Mechanics, Elsevier, pp.80~83, (1991)
- 9) K.Huang, Statistical Mechanics, John Wiley and Sons, pp.329~348, (1963)
- 10) C.N.Yang, Phys.Rev., 85, 809 (1952)
- 11) N.Metropolis, A.W.Rosenbluth, M.N.Rosenbluth, A.H.Teller and E.Teller, J.Chem, Phys., 6, 1087 (1953)

<Abstract>

Monte Carlo Simulation for the Ising Model

Kim, Su-Jae

Physics Education Major

Graduate School of Education, Cheju National University

Cheju, Korea

*Supervised by Professor **Kang, Young-Bong***

This study is on 15,30,60 square lattices arranged by the Metropolis Algorithm. By means of the Ising model the internal energy, spontaneous magnetization, specific heat, and magnetic susceptibility of the system are calculated with the Monte Carlo method.

Internal energy decreases continuously with increasing $\varepsilon/k_B T$. Magnetization is 0 below $\varepsilon/k_B T = 0.44$ and approximates 1 with decreasing temperature above this point. Critical point shows at $\varepsilon/k_B T = 0.44$ on specific heat and magnetic susceptibility. As the lattice number becomes larger, the critical point becomes clear.

This agrees with the value of critical point $\varepsilon/k_B T_C = 0.4407$, which has been the usual value calculated analytically.

* A thesis submitted to the Committee of the Graduate School of Education, Cheju National University in partial fulfillment of the requirements for the degree of Master of Education in August, 1994.

<부 록>

메트로폴리스 알고리즘에 의한 몬테칼로 전략 단계

1. $(N \times N)$ 스핀의 초기 배열을 구성한다.
 - ① 각각의 격자점에 대하여 0과 1사이의 무작위 수 x 생성한다.
 - ② $x > 0.5$ 이면 상향 스핀 ($J = +1$)
 $x \leq 0.5$ 이면 하향 스핀 ($J = -1$)
2. 다음과 같은 주기적인 경계조건을 사용한다.
$$i = 1, \quad J_{i-1, j} \rightarrow J_{N, j}$$
$$i = N, \quad J_{i+1, j} \rightarrow J_{1, j}$$
$$j = 1, \quad J_{i, j-1} \rightarrow J_{i, N}$$
$$j = N, \quad J_{i, j+1} \rightarrow J_{i, 1}$$
3. 다음과 같은 방법으로 혼돈 상태의 배열을 생성한다.
 - ① 초기 배열에서 스핀을 차례로 택해서 반전시켜서 시행배열을 만든다.
 - ② 스핀의 반전 여부를 결정하기 위하여 에너지 변화 ΔE 를 계산한다.
 - ③ $\Delta E < 0$ 이면 시행배열이 허용된다.
 - ④ $\Delta E \geq 0$ 이면 전이 확률 $\gamma = e^{-\Delta E/k_B T}$ 을 계산한다.
 - ⑤ 0 과 1사이의 무작위 수 x 를 다시 생성한다.
 $x \leq \gamma$ 이면 시행배열은 허용된다.
 $x > \gamma$ 이면 시행배열은 금지된다.

- ⑥ 위의 과정을 N^2 번 되풀이 하여 $N \times N$ 스핀 배열을 만든다.
- ⑦ ① ~ ⑥과정을 여러번 되풀이하여 혼돈상태의 배열을 생성하고, 열물리량을 계산한다.
4. 다음 과정을 수행하여 $N \times N$ 스핀 배열들의 모임인 하나의 앙상블을 만든다.
- ① 3-⑦에서 얻은 혼돈상태의 배열로 부터 여러 개의 새로운 배열을 생성한다.
- ② 앙상블 구성원들의 상관 관계를 줄이기 위해 새로 생성된 몇 개의 배열들을 버린 후 새로운 앙상블 구성원을 만든다.
- ③ 생성된 구성원의 물리량을 계산한다.
- ④ 위의 과정을 앙상블 구성원의 수 만큼 반복하여 한 개의 앙상블을 만든다
5. 구성원들에 대한 물리량의 평균 (하나의 앙상블에 대한 물리량)을 계산, 출력한다.
6. 위의 (2, 3, 4, 5)과정을 앙상블의 수 만큼 되풀이하여 앙상블들의 모임을 구성한다.
7. 물리량에 대한 앙상블 평균과 표준편차를 계산, 출력한다.