이 문제를 시작하기 전에 공통 지시 사항을 읽어라.

역사적 배경

물질의 자기 현상을 연구하는 중요한 모형 중 하나가 이징 모형이다. 빌헬름 렌츠가 1920년에 제안했으며 에른스트 이징이 1925년에 1차원 경우를 완전히 풀었다. 이 모형에서는 임의의 차원에서 일정한 기하 구조로 배치된 이산 스핀들의 에너지를 두 가지 방향만 가능한 스핀 쌍 사이의 상호작용과 각 스핀의 외부 자기장과의 상호작용으로 나타낸다. 이징의 해에서는 강자성체가 어떤 임계 온도 이상에서 상자성체로 변하는 상전이가 예측되지 않았다. 이는 1944년 라르스 온사게르가 자기장이 없는 2차원 모형을 풀었을 때 비로소 나타났다. 따라서 이 모형으로 상전이 근처의 자화와 열용량 등 물질의 성질을 연구할 수 있다. 또한 단순함과 성공에 힘입어 쌍 상호작용이 집단 효과를 만드는 다른 현상에도 응용되었다.

이징 모형

이 실험에서는 $N \times N$ 정사각 격자의 2차원 이징 모형을 모의실험한다. 각 칸의 스핀은 위 또는 아래를 향하는 자기 모멘트를 나타내며 값은 각각 $+1$, -1이다. 각 스핀은 외부에서 가한 자기장 및 이웃 스핀과만 상호작용한다. 정사각 격자에서는 가장 가까운 네 스핀이 이웃이다. 또한 주기적 경계 조건을 사용하므로 경계의 각 스핀은 반대쪽 경계의 스핀과 상호작용한다 [1].

외부 자기장에 대한 물질의 반응에서는 상자성체와 강자성체가 구분된다. 둘 다 외부 자기장 방향으로 스핀이 정렬되지만 강자성체만 자기장을 없앤 뒤에도 자화를 유지할 수 있다. 이는 강자성체에만 자기 구역을 만드는 스핀 사이의 유의미한 상호작용이 있기 때문이다. 이징 모형에서는 상자성체의 이웃 상호작용 항을 무시하여 이를 반영한다. 온도는 계의 질서를 흐트러뜨리며 임계 온도보다 높으면 강자성 계도 상자성체처럼 거동한다.

시뮬레이터 안내

OIbF 2021 학술위원회가 만든 스핀 시뮬레이터는 `https://app.graxaim.org/oibf/2021/page/slsim_r/1?title=` 에 있다. 컴퓨터, 스마트폰, 태블릿의 웹 브라우저에서 실행된다. 이 절에서는 2차원 이징 격자에서 상자성체와 강자성체를 모의실험하는 매개변수를 소개한다. 프로그램 이름은 SLSIM(`Spin Lattice Simulator`, 스핀 격자 시뮬레이터)이며 화면은 그림 1과 같다.

화면에서 사용할 항목은 다음과 같다:

A) 계의 종류: 상자성체 또는 강자성체 모의실험을 선택한다.

B) 초기 상태: 무작위(random), 모든 스핀이 위(up), 모든 스핀이 아래(down)의 세 상태가 가능하다.

C) 크기(size): 격자의 크기를 고른다. 정수 N만 입력할 수 있다.

D) 재초기화(Reinitialize): 마지막 시행 결과를 지우고 계를 초기화한다. 스핀 격자 크기를 바꿀 때마다 사용해야 한다.

[1] 위/아래 및 왼쪽/오른쪽 경계에 적용한다.

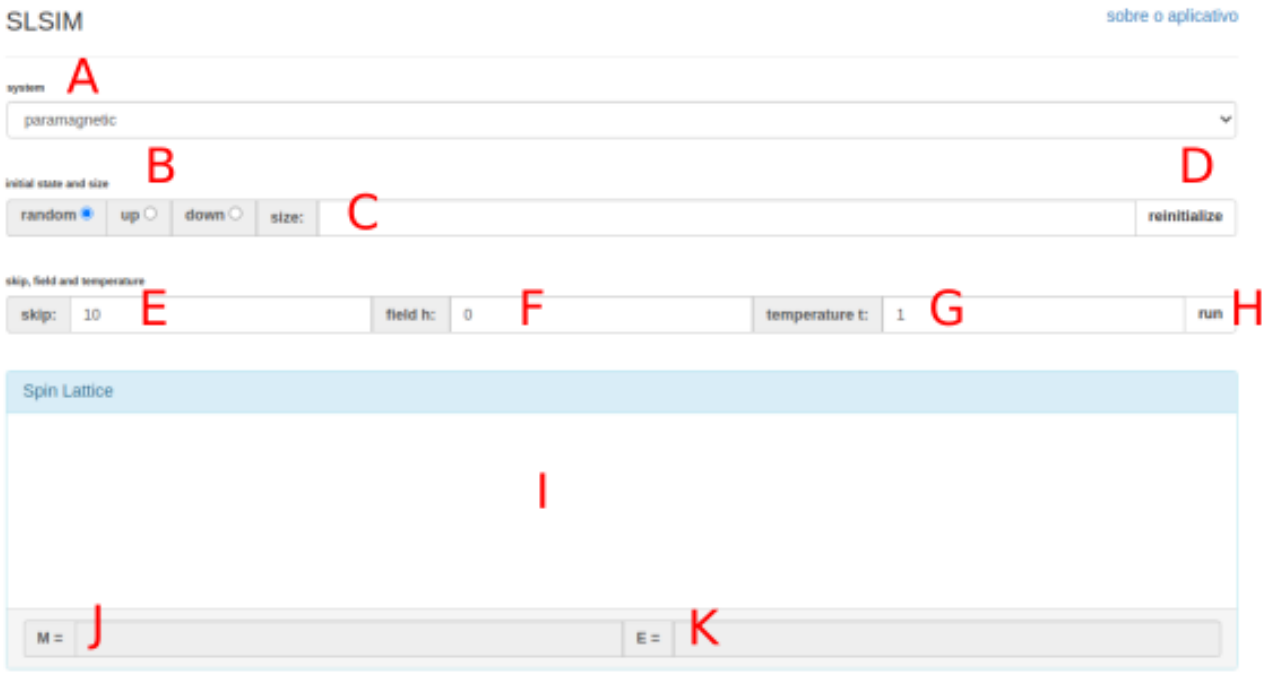


그림 1: 정사각 스핀 격자 시뮬레이터의 화면.

E) skip: 계의 시간 매개변수이며 항상 정수여야 한다. skip = T이면 시뮬레이터는 TN^2회의 스핀 뒤집기를 시도한다. 계를 평형에 접근시키기 위해 run을 여러 번 누를 필요를 줄여 준다.

F) Field H: 자기장의 세기를 나타내는 무차원 매개변수로 양수와 음수인 실수를 입력할 수 있다. 양수는 위쪽 방향에 해당한다.

G) Temperature t: 온도의 효과를 나타내는 무차원 매개변수로 0보다 큰 실수를 입력할 수 있다.

H) run: 설정된 매개변수에 따라 결정 격자 스핀의 뒤집기를 시도한다. skip=10으로 run을 한 번 누르는 것은 skip=1로 열 번 누르는 것과 통계적으로 같다.

I) 마지막으로 모의실험한 스핀 격자: 파란 원은 위쪽 스핀, 빨간 원은 아래쪽 스핀이다.

J) 격자의 총 자화: 전자의 자기 모멘트의 배수로 표시한다. 위쪽 스핀 수 N_+에서 아래쪽 스핀 수 N_-를 뺀 값으로 $M = N_+ - N_-$이다.

K) 마지막으로 모의실험한 스핀 배치로부터 계산한 총 에너지.

정사각 격자 $N \times N$의 크기는 1×1 ($N^2 = 1$칸)에서 64×64 ($N^2 = 4096$칸)까지 바꿀 수 있다. 격자가 클수록 계산 시간이 늘어난다. 총 자화 M과 총 에너지 E는 격자 크기에 따라 달라지지만, 칸당 자화 $m = M/N^2$와 칸당 에너지 $e = E/N^2$는 격자 크기에 무관하다.

같은 매개변수에서도 run으로 여러 번 시행하면 스핀 배치가 평균값 주위에서 변한다. 모의실험이 확률적이기 때문이다. 예를 들어 자기장 $2H_0$과 온도 매개변수 아래의 64×64 격자의 총 자화 M을

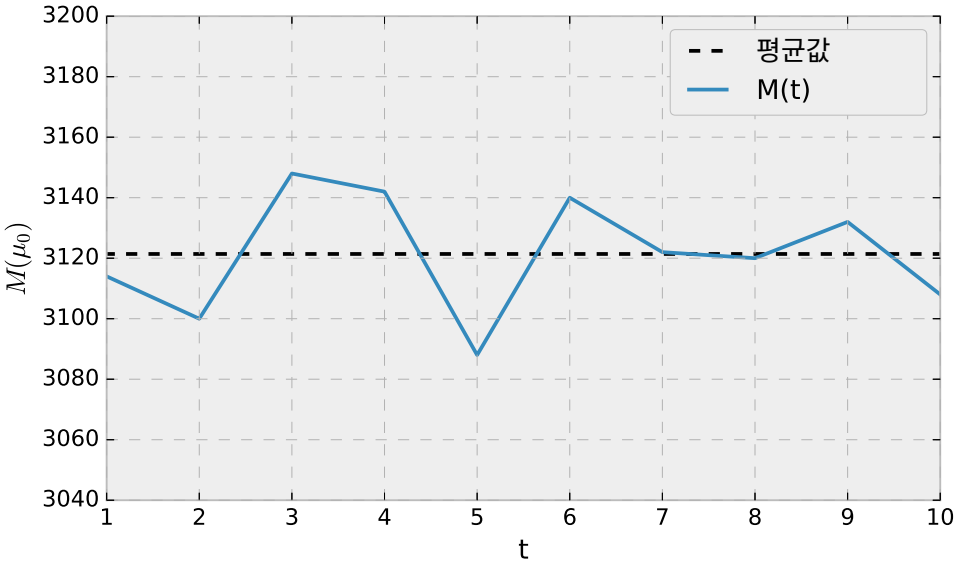


그림 2: 자기장 $2H_0$, 온도 매개변수 $T = 2T_0$에서 64×64 격자의 시행별 자화(실선). 점선은 열 번 시행한 평균이다.

$T = 2T_0$에서 여러 번 시행한 결과가 그림 2에 있다. 시행마다 얻은 값의 퍼짐으로 측정 불확도를 평가하여라.

주의: 측정을 요구할 때마다 **적어도 열 번 시행**해야 한다. **항상 평균값과 추정 불확도를 함께** 제시하여라. 이후 모든 실험 결과에는 측정 오차의 추정이 필요하다. 단, 제2부의 A1과 B에서는 오차 분석을 하지 않아도 된다.

상자성체 연구 (7점)

A부 — 자유 스핀 (2,0점)

먼저 자기장 H가 없는 이상적인 상자성체의 스핀을 살펴본다. 이때 각 스핀이 위 또는 아래를 향할 확률은 각각 50%이다.

자화 M은 위쪽 스핀 수 N_+와 아래쪽 스핀 수 N_-의 차이이다. 격자 크기 $N \times N$에 의존하므로 칸당 자화 $m = M/N^2$를 조사한다.

이후 측정을 요구할 때마다 평균값과 추정 불확도를 함께 제시하여라.

A.1 여러 번 시행하여 계의 총 자화 M을 관찰하여라. 자화가 항상 0인가? 관찰한 결과를 간단히 논하여라. 0,5점

A.2 자기장이 없는 상자성체의 m을 측정하여라. 각 시행의 결과, 평균, 추정 불확도를 표에 적어라. 1,0점

A.3 계의 크기 $N \times N$이 커질 때 측정 불확도가 어떻게 달라지는지 조사하여라. 0,5점

B부 — 자기 감수율 측정 (5,0점)

선형 계에서 물질의 자기 감수율 χ_m^0은 다음 관계로 정의한다:

$$\vec{M} = \chi_m^0 \vec{H}. \tag{1}$$

실제 물질에서는 이 선형 관계가 항상 성립하지 않는다. 이 경우 미분 자기 감수율 $\chi_m(H)$를 다음과 같이 정의할 수 있다:

$$\chi_m(H) = \lim_{\Delta H \to 0} \frac{\Delta M}{\Delta H}, \tag{2}$$

기하학적으로는 H에 대한 M(또는 m) 그래프의 접선 기울기로 해석할 수 있다.

B.1 온도 $t = 2$에서 외부 자기장 H에 따른 칸당 자화 m의 그래프를 그려라. 열 개 이상의 서로 다른 자기장 값을 사용하고, 격자는 15×15, $skip = 20$으로 하여라. 2,5점

B.2 어떤 조건에서 상자성체를 선형으로 볼 수 있는가? 0,5점

B.3 자기장이 없고($H = 0$) 온도 $t = 2$일 때 자기 감수율 χ_m^0을 구하여라. 2,0점

강자성체 연구 (13점)

강자성체를 모형화하려면 가까운 스핀 사이의 상호작용을 고려해야 한다. 단순화한 이 모형에서는 최근접 이웃만 상호작용한다. 각 스핀은 정사각 격자의 네 이웃과만 상호작용하며, 계산은 시뮬레이터가 수행한다.

C부 — 온도가 계의 자화에 미치는 영향 (5,0점)

C.1 처음에 모든 스핀을 위로 놓고 온도를 $t = 0,1$로 맞춰라. 계를 시간에 따라 변화시켜 자기장이 없어도 자화가 유지됨을 확인하여라. 결론을 위한 과정과 수집한 데이터를 설명하여라. 격자는 16×16, $skip = 10$으로 하여라. 0,5점

C.2 자기장 $h = 0,5$를 일정하게 하고 처음 모든 스핀을 위로 놓은 뒤, 온도를 서서히 높이며 계를 변화시켜라. 물질이 $t = 1,8$에서 보인 영구 자화를 항상 유지하는가? 결과를 논하여라. 격자는 16×16, $skip = 1000$으로 하여라. 1,0점

C.3 앞 문항의 최종 설정으로 상자성 계를 사용하여라. 온도를 적고 자화 M과 총 에너지 E를 측정하여라. 격자 크기, skip, 외부 자기장, 온도는 앞 문항과 같게 하여라. 1,5점

C.4 앞의 계를 상자성에서 강자성으로 바꾸면 이웃 스핀의 상호작용을 포함하여 에너지가 자동으로 다시 계산된다. 앞에서 측정한 총 에너지에 대한 상호작용의 기여 E_{in}과 외부 자기장의 기여 E_{ext}를 각각의 불확도와 함께 제시하여라. 2,0점

D부 — 자기 이력 연구 (3,0점)

자성 물질에는 흔히 자기 이력 현상이 나타난다. 이는 철과 같은 물질이 강한 자기장으로 자화된 뒤 자기장을 없애도 자화가 남는 까닭을 설명한다.

이 경우 자기장 H와 자화 M 사이에 명확한 일대일 관계를 정할 수 없다. 순간 자화 $M(t)$는 현재의 $H(t)$뿐 아니라 $t' < t$인 과거의 $H(t')$에도 의존한다. 그림 3은 실험으로 얻은 이력 곡선이다.

이력 곡선의 점 1에서는 대부분의 스핀이 위를 향하고, 점 2에서는 반대로 대부분 아래를 향한다.

그림처럼 경로 $1 \to 2$의 자화 $M_{12}(H)$는 경로 $2 \to 1$의 $M_{21}(H)$와 같지 않다. 강자성체에 시간에 따라 달라지는 여러 자기장 $H(t)$를 가하면 다른 (H, M) 쌍도 얻을 수 있다.

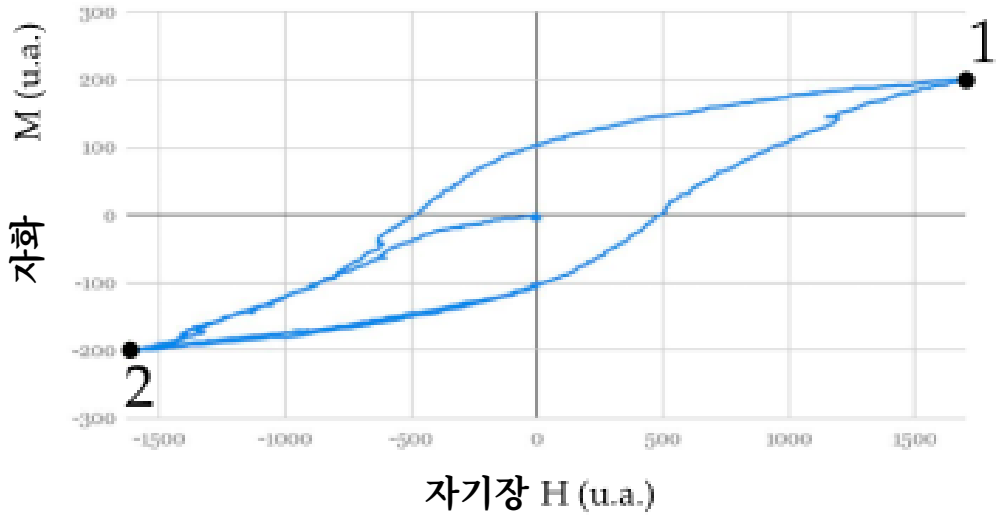


그림 3: 실험실에서 얻은 $M \times H$ 이력 곡선의 예. 축은 임의 단위이다. 점 1, 2는 대부분의 스핀이 각각 위와 아래를 향하는 포화 영역이다.

D.1 온도 $t = 0,5$에서 이력 경로 $1 \to 2 \to 1$의 H에 따른 m 그래프를 그려라. 자기장을 적절히 3,0점
바꿔라. 격자는 16×16, $skip = 1500$으로 하여라. 곡선이 예시와 달리 직사각형 모양이어도
괜찮다.

E부 — 상전이 (5,0점)

계의 상전이를 조사한다. 이론적으로 이 이징 모형은 자화, 자기 감수율, 열용량 등 기본 매개변수가 급격하게 변하는 *2차* 상전이를 보인다. 그러나 이런 급격한 전이는 무한한 계에서만 나타난다. 이 유한한 계에서는 전이가 더 연속적으로 나타난다.

물이 얼음으로 바뀌는 익숙한 상전이처럼 이 전이도 임계 온도 t_C로 나타낸다. 보통 압력에서 물–얼음 전이는 $t_C = 0°\text{C}$이다. 작은 t에서는 스핀들이 거의 같은 방향이고 큰 t에서는 두 방향이 대체로 고르게 분포하므로, 두 경우의 거동만 비교해도 상전이를 예상할 수 있다.

이를 바탕으로 자기장이 없는 $H = 0$에서 온도에 따른 자화를 측정하여 이징 모형의 임계 온도를 구한다.

이 모형은 t_C보다 낮은 온도에서는 대부분의 스핀이 같은 방향인 *질서*를 보이고, t_C보다 높은 온도에서는 스핀들이 두 방향을 취하는 *무질서*를 보인다. 모의실험 화면이나 칸당 자화 크기 $|m(t)|$로 관찰할 수 있다.

이 절에서는 $N = 20$, $skip = 5000$을 사용하여라.

E.1 질서와 무질서의 정성적 설명을 바탕으로 $t_{\min} \le t_C \le t_{\max}$, $t_{\max} - t_{\min} \le 1$을 만족하는 1,5점
$t_{\min}$, $t_{\max}$를 구하여라.

앞에서 구한 온도 범위에서 칸당 자화의 거동을

더 정밀하게 분석한다.

E.2 $t_{\min}$에서 $t_{\max}$까지 온도에 따른 칸당 자화의 크기 $|m(t)|$를 그려라. 2,5점

무한한 계에서는 $|m(t)| = 0$인 가장 낮은 온도 t를 임계 온도 t_C로 구할 수 있다. 그러나 앞 그래프처럼 이 계에서는 칸당 자화의 크기가 0에 도달하지 않는다. 따라서 유한한 계의 임계 온도를 $|m(t)|$ 그래프의 오목한 방향이 바뀌는 온도 t로 정의할 수 있다.

E.3 위의 논의를 바탕으로 임계 온도 t_C를 추정하여라. 1,0점