2024 OPhO 실험 문제: 강자성의 이징 모형

8월 30일 - 9월 1일

서론

상자성 물질 속 원자는 영구 자기 쌍극자를 가지며, 외부 자기장에 의해 정렬되지 않으면 무작위 방향을 향한다. 강자성 물질에서는 자기 쌍극자가 이웃 쌍극자와 나란히 정렬되므로 외부 자기장이 없어도 큰 자화가 생길 수 있다.

철은 실온에서 강자성을 띠는 대표적인 물질이다. 다른 물질은 온도가 높으면 상자성을 띠다가, 특정 온도인 퀴리 온도 T_c 아래에서는 강자성을 띠는 상전이를 겪는다.

이 실험에서는 이징 모형과 몬테카를로 시뮬레이션을 이용해 이 상전이의 특성을 계산하고 살펴본다.

이징 모형은 강자성의 간단한 근사 모형이다. 원자가 이루는 이차원 격자에서 각 쌍극자는 같은 축을 따라 위쪽($s_i = 1$) 또는 아래쪽($s_i = -1$)을 향한다고 가정한다. 다음 알고리즘으로 몬테카를로 시뮬레이션을 실행한다.

1. 크기가 $L \times L$인 이차원 격자로 시작한다. 각 격자점의 스핀은 $+1$ 또는 -1이며, 처음 배치는 무작위로 정한다.

2. 에너지 계산: 각 위치 (i, j)의 스핀이 뒤집힐 때 에너지 변화량 ΔE를 구한다. 각 스핀과 가장 가까운 이웃 스핀 사이의 상호작용을 고려한다. 외부 자기장이 없을 때 에너지 변화량 ΔE는 다음과 같다.

$$\Delta E = 2J \times \text{spin} \times \left(\sum_{\text{neighbors}} \text{spin} \right)$$

   여기서 J는 상호작용의 세기다.

3. 몬테카를로 단계마다 다음과 같이 한다.
   - 격자에서 스핀 하나를 무작위로 고른다.
   - 이 스핀을 뒤집을 때 에너지 변화량 ΔE를 구한다.
   - $\Delta E < 0$이면 스핀을 뒤집는다.
   - $\Delta E \geq 0$이면 확률 $e^{-\Delta E / k_B T}$로 스핀을 뒤집는다. 여기서 T는 온도, k_B는 볼츠만 상수다.

4. 계가 평형에 도달하도록 정해진 횟수만큼 스핀 뒤집기 과정을 반복한다.

5. 시뮬레이션을 마친 뒤 최종 격자 배치는 온도 T에서 계의 상태를 나타낸다.

상전이 [25점]

다음 문항에 답할 때 해당되는 경우 불확실성을 포함한 수치와 함께 그 근거와 사용한 그래프를 제시하라.

a) T_c의 값을 구하고 어떤 기준을 사용했는지 설명하라. [6점]

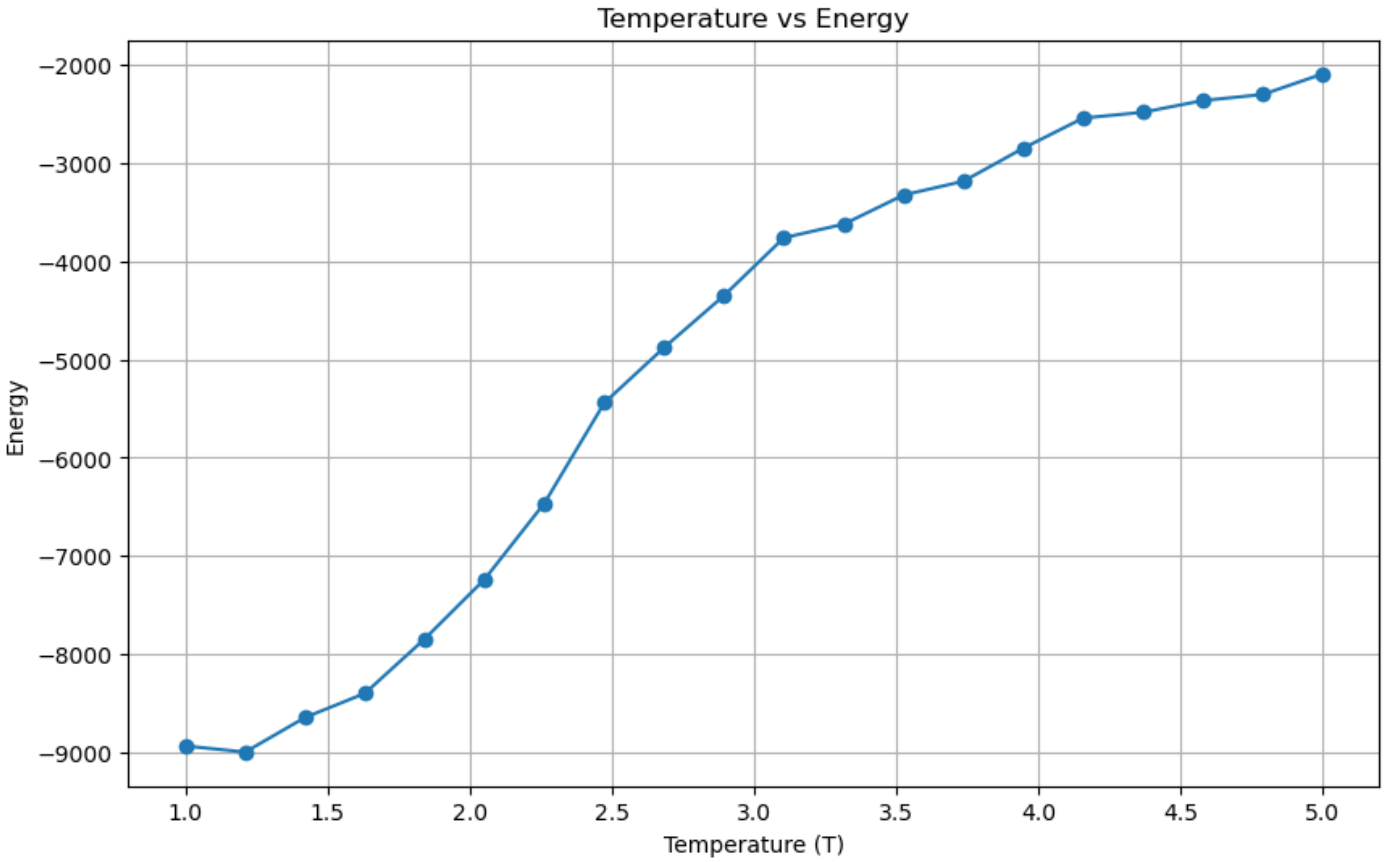
채점 기준:

1. [2점] $B = 0$으로 두고 T를 바꾸면서 측정량의 그래프를 그린다.
2. [3점] 강자성에서 상자성으로 바뀌는 기준:
   (a) -1과 1 사이에서 진동하던 평균 자화가 0으로 수렴한다.
   (b) 자화 절댓값의 변곡점.
   (c) 에너지가 ~ 0인 구간에서 증가하는 구간으로 바뀐다.
3. [1점] 최종 답: $T_c \in [2.269 \pm 0.5]$. **그리고** 위 기준 중 하나를 충족해야 한다.

b) 외부 자기장을 일정하게 유지하고 계의 에너지 E를 온도의 함수로 그려라. [4점]

채점 기준:

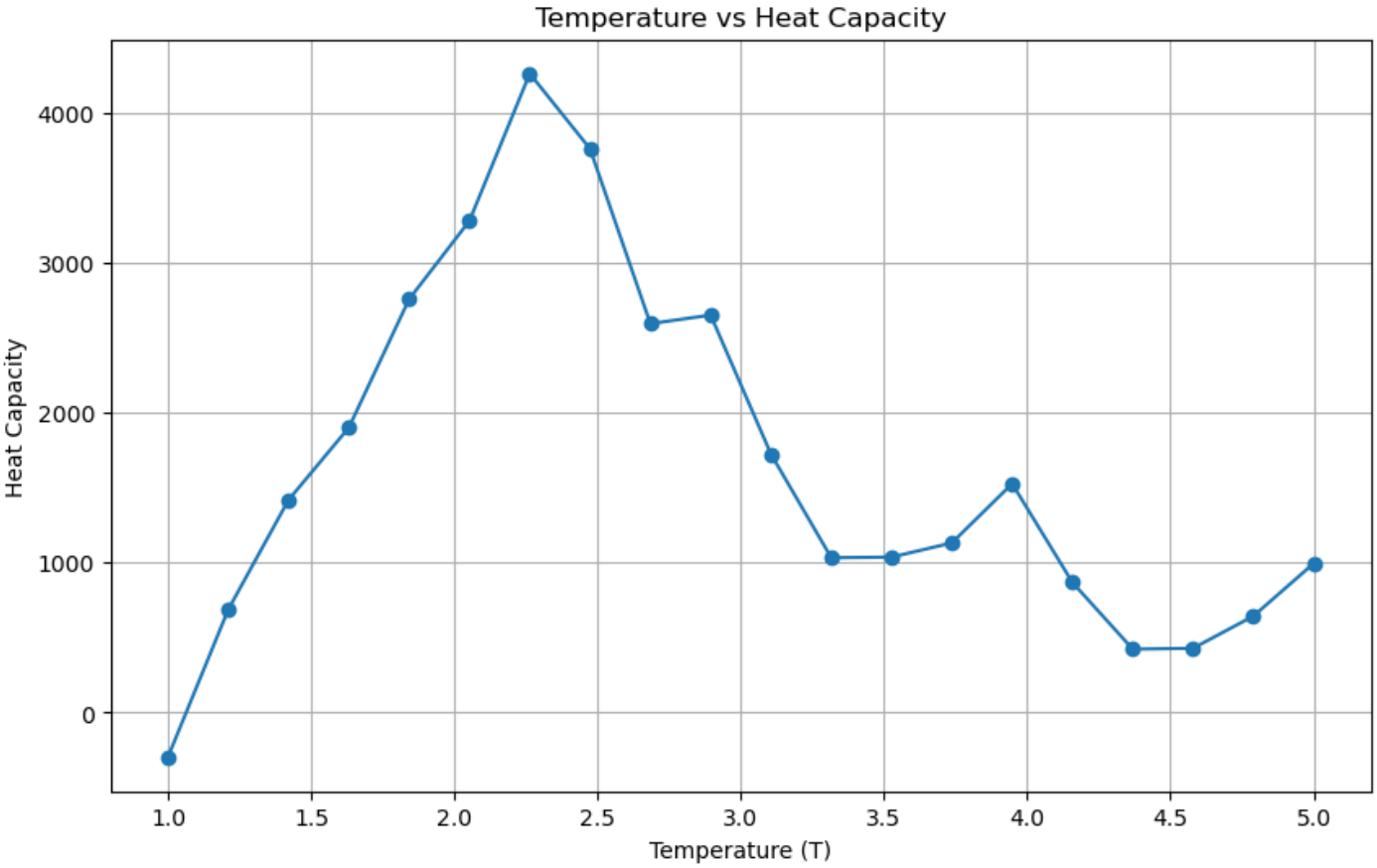
1. [1점] 올바른 에너지 해밀토니안을 쓴다.
2. [2점] 코드를 작성하거나 적절한 방법으로 E를 구한다.
3. [1점] T에 대한 E 그래프를 그린다. 예시는 다음과 같다:



c) 계의 열용량 C를 온도의 함수로 그려라. 최댓값과 최솟값은 얼마인가?
에너지가 불연속이면 온도에 대한 1차 상전이, 에너지는 연속이지만 그 1차 미분이 불연속이면 2차 상전이다. 이 경우 상전이는 몇 차인가? [5점]

채점 기준:

1. [1점] 참고: $C = \frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}t}$.
2. [3점] 코드 등으로 C를 구해 T에 대한 C 그래프를 그린다. 예시는 다음과 같다:



3. [1점] 2차 상전이라고 결론짓는다.

이 계의 알짜 자화는 $M = \mu \sum_{i=1}^{N} s_i$ 이다.

d) T_c보다 약간 낮은 온도에서 M을 $M = \alpha|T_c - T|^{\beta}$로 근사할 수 있다. α와 β를 구하라. [6점]

채점 기준:

1. [3점] $\ln(|T_c - T|)$에 대한 $\ln(M)$ 그래프 또는 이에 상응하는 그래프를 그린다.
2. [2점] 코드나 적절한 맞춤 방법으로 직선을 맞춘다.
3. [1점] 결론은 $\beta \in (\frac{1}{8} \pm 0.05)$이다. **그리고** 위와 같은 절차를 거쳐야 한다.

e) $T = T_c$로 두고 B를 변화시켰을 때 알짜 자화의 반응을 그래프로 그려라. 어떤 특징이 보이는가? $T < T_c$이면 어떻게 되는가? [4점]

채점 기준:

1. [2점] B에 대한 M 그래프를 그리고 관찰한 점을 적는다.
2. [2점] T와 B를 모두 바꾸면서 B에 대한 M 그래프를 그린다. 관찰 결과는 달라질 수 있다.