2024 OPhO 실험 시험: 강자성의 이징 모형 (Ising Model of Ferromagnetism)

8월 30일 – 9월 1일

서론 (Introduction)

상자성(paramagnetic) 물질은 영구 자기 쌍극자(permanent magnetic dipole)를 가진 원자들로 이루어져 있으나, 외부 자기장에 의해 정렬되지 않는 한 그 방향이 무작위로 향한다. 반면, 강자성(ferromagnetic) 물질의 자기 쌍극자는 이웃한 쌍극자들과 정렬되며, 외부 자기장이 없어도 상당한 자화(magnetization)를 가질 수 있다.

철(iron)은 상온에서 강자성을 띠는 흔한 물질의 한 예이다. 다른 물질들은 상전이(phase transition)를 겪는데, 높은 온도에서는 상자성이지만 특정 온도(큐리 온도, Curie temperature, T_c) 이하에서는 강자성으로 바뀐다.

이 실험에서는 이징 모형(Ising Model)과 몬테카를로 시뮬레이션(Monte Carlo simulation)을 사용하여 이 상전이의 성질을 계산하고 살펴본다.

이징 모형은 강자성을 나타내는 단순한 근사 모형이다. 원자들의 2차원 격자(2D lattice)를 잡고, 각 쌍극자가 같은 축을 따라 위($s_i = 1$) 또는 아래($s_i = -1$) 중 하나를 가리킨다고 가정한다. 그런 다음 아래 알고리즘을 사용하는 몬테카를로 시뮬레이션을 수행한다:

1. 크기가 $L \times L$인 2차원 격자에서 시작하며, 각 자리(site)는 $+1$ 또는 -1 둘 중 하나가 될 수 있는 스핀(spin)을 나타낸다. 초기 배치는 무작위로 할당된다.
2. **에너지 계산(Energy Calculation):** 위치 (i, j)의 각 스핀에 대해, 그 스핀이 뒤집혔을 때의 에너지 변화 ΔE를 계산한다. 이는 해당 스핀과 가장 가까운 이웃(nearest neighbors)들 사이의 상호작용을 고려하여 이루어진다. (외부 자기장이 없을 때) 에너지 변화 ΔE는 다음과 같이 주어진다:

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

   여기서 J는 상호작용 세기(interaction strength)이다.
3. 각 몬테카를로 단계(Monte Carlo step)마다:
   - 격자에서 스핀 하나를 무작위로 선택한다.
   - 이 스핀이 뒤집힐 경우의 에너지 변화 ΔE를 계산한다.
   - $\Delta E < 0$이면 스핀을 뒤집는다.
   - $\Delta E \geq 0$이면 확률 $e^{-\Delta E / k_B T}$로 스핀을 뒤집는다. 여기서 T는 온도, k_B는 볼츠만 상수(Boltzmann constant)이다.
4. 시스템이 평형(equilibrium)에 도달하도록 정해진 횟수만큼 스핀 뒤집기 과정을 반복한다.
5. 시뮬레이션 후 격자의 최종 배치는 온도 T에서 시스템의 상태를 나타낸다.

프로그램 접속 (Accessing the Program)

파이썬 노트북(Python notebook)에 접속하려면 이 링크를 따라가 자신의 구글 드라이브(Google Drive)로 사본을 만든다. 아무것도 다운로드할 필요 없이 모든 코드를 온라인에서 실행할 수 있다.

코드 개요 (Overview of Code)

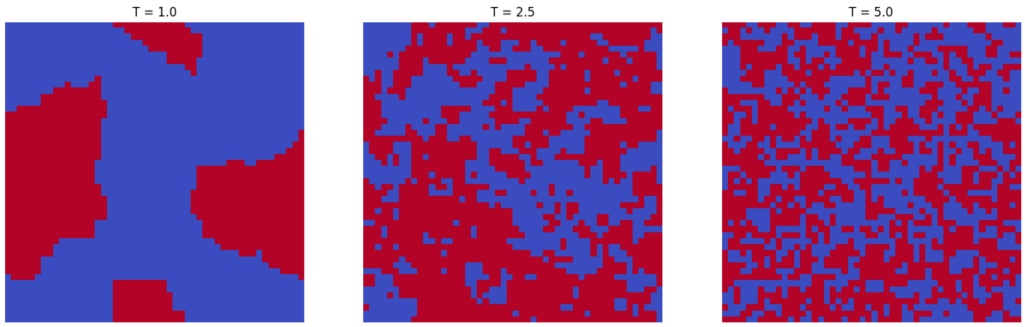
실험을 수행하는 셀(cell)은 세 개이다:

1. 모든 시뮬레이션 온도를 담고 있는 `T_list`를 통해 온도를 변화시킨다.
2. 모든 시뮬레이션 외부 자기장을 담고 있는 `B_list`를 통해 외부 자기장을 변화시킨다.
3. 둘 다 변화시킨다.

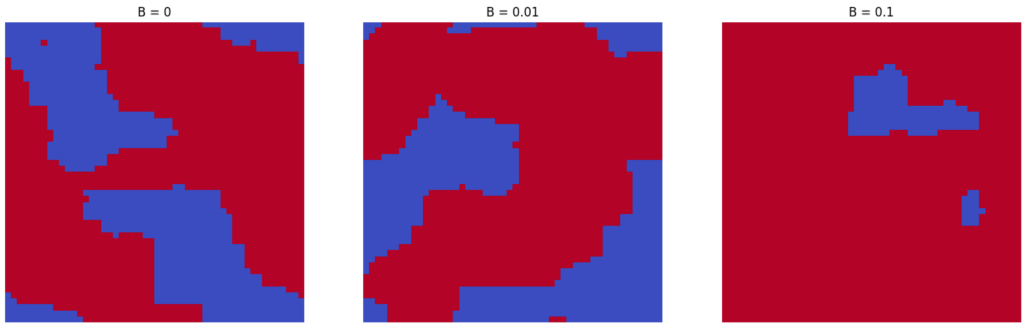
시뮬레이션 사용 안내 (Instructions for Using the Simulation)

- 이 시뮬레이션은 원자들의 2차원 격자를 나타내기 위해 50×50 격자를 사용한다. 이 격자는 주기적(periodic)이어서 가장자리에서 둘러 감기며, 연속적인 경계 조건(continuous boundary conditions)을 허용한다.
- (원하는 실험에 따라) 코드의 `T_list` 또는 `B_list` 변수를 조정하여 서로 다른 온도에서 시스템을 시뮬레이션할 수 있다. 기본으로 제공되는 온도는 1.0, 2.5, 5.0이다.
- 몬테카를로 단계 수는 `n_steps` 변수를 바꿔 수정할 수 있다. 기본값은 100,000단계로 설정되어 있으나, 필요에 따라 늘리거나 줄일 수 있다.
- 상호작용 세기(J)와 볼츠만 상수(k_B)는 기본값으로 1.0으로 설정되어 있다. 이 값들은 모형의 정확성을 유지하는 데 매우 중요하므로 바꾸지 않는 것을 권장한다.
- 매개변수를 조정한 후, 노트북의 셀들을 실행하여 선택한 온도에서 이징 모형을 시뮬레이션한다. 결과는 시각화되어 각 온도에서 격자의 스핀 배치를 보여준다.

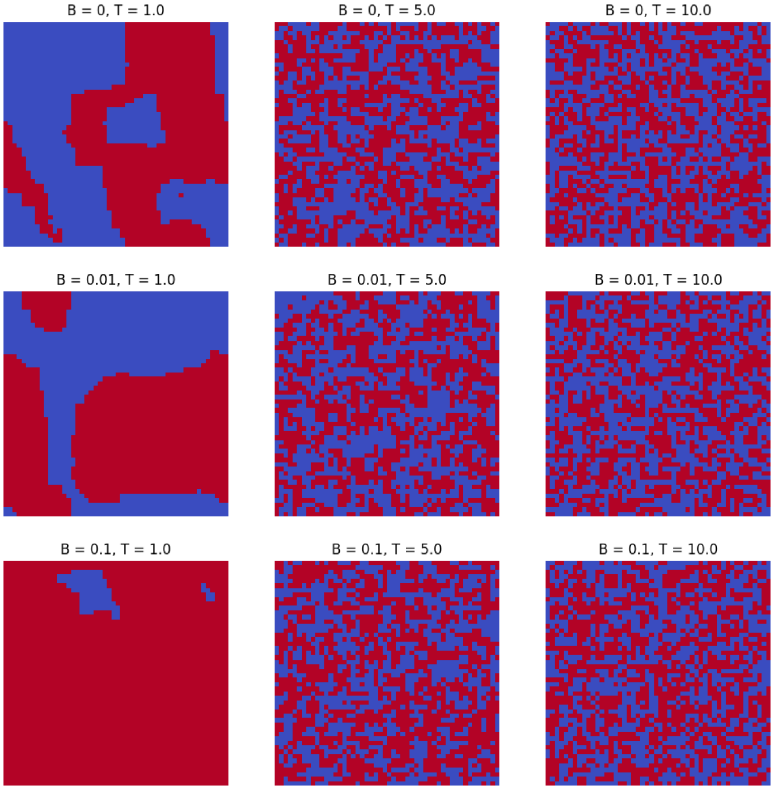
첫 번째 셀의 초기 시뮬레이션이 어떻게 보여야 하는지에 대한 이미지는 아래와 같다:



두 번째 셀의 경우:


B = 0
B = 0.01
B = 0.1

세 번째 셀의 경우:


B = 0, T = 1.0
B = 0, T = 5.0
B = 0, T = 10.0
B = 0.01, T = 1.0
B = 0.01, T = 5.0
B = 0.01, T = 10.0
B = 0.1, T = 1.0
B = 0.1, T = 5.0
B = 0.1, T = 10.0

상전이 (Phase Transition)

다음 문제들에 대해, 해당된다면 불확실도(uncertainty)를 포함한 수치, 추론 과정, 그리고 사용한 그래프가 있다면 함께 제시하라.

a) T_c의 값을 구하고, 어떤 기준(criteria)을 사용했는지 설명하라.

b) 외부 자기장을 일정하게 유지하면서, 시스템의 에너지 E를 온도의 함수로 그려라.

c) 시스템의 열용량(heat capacity) C를 온도의 함수로 그려라. 그 최댓값과 최솟값은 얼마인가?

상전이는 에너지가 불연속이면 온도에 대해 1차(first order), 에너지는 연속이지만 그 1계 도함수가 불연속이면 2차(second order)이며, 이런 식으로 이어진다. 여기서 일어나는 상전이의 차수(order)는 무엇인가?

시스템의 알짜 자화(net magnetization) $M = \mu \sum_{i=1}^{N} s_i$를 고려하자.

d) T_c보다 약간 낮은 온도에서 M은 $M = \alpha |T_c - T|^{\beta}$로 근사할 수 있다. α와 β의 값을 구하라.

e) $T = T_c$로 설정하라. B가 변할 때 알짜 자화가 어떻게 반응하는지 그려라. 정성적으로(qualitatively) 무엇을 관찰하는가? $T < T_c$이면 어떤 일이 일어나는가?