Die Boltzmann-Verteilung

In der letzten Vorlesung haben wir gesehen, wie wir anhand des Metropolis-Algorithmus eine Markov-Kette von Konfigurationen $\{x_i\}$:

$$x_1 \to x_2 \to x_3 \to \ldots \to x_i \to x_{i+1} \to \ldots$$

so erzeugen können, daß die Konfigurationen einer vorgegebenen Verteilung $p(x)$ entsprechen. Entscheidend war dabei, daß jeder mikroskopische Schritt $x_i \to \tilde{x}_{i+1}$ "detailed balance" erfüllt, was durch die Wahl der Metropolisgewichte für die Übergangswahrscheinlichkeit

$$W(x_i \to \tilde{x}_{i+1}) = \min\left(1, \frac{p(\tilde{x}_{i+1})}{p(x_i)}\right)$$

erfolgt.

Heute wollen wir anhand des Metropolis-Algorithmus Konfigurationen gemäß einer der wichtigsten Verteilungsfunktionen in der Physik – der sogenannten Boltzmann-Verteilung – samplen. Um die Bedeutung der Boltzmann-Verteilung zu schätzen, müssen wir an dieser Stelle eines der Kernresultate der statistischen Physik (mit welcher Sie sich im kommenden Semester ausführlich auseinandersetzen werden) vorwegnehmen:

Wir betrachten dazu ein mechanisches System, welches durch N Variablen $(q_1, q_2, \dots, q_N)$ beschrieben werde, also etwa durch einen Set von Koordinaten + Impulsen oder ähnliches (wie wir heute noch sehen werden).
Dieses System befinde sich in einem thermischen Gleichgewicht mit einem Wärmebad der Temperatur T.

Die Wahrscheinlichkeitsdichte, das System in einem Zustand – beschrieben durch einen fixen Parameterset $(q_1, q_2, \dots, q_N)$ – anzutreffen, ist gegeben durch die Boltzmann-Verteilung

$$p(q_1, q_2, \dots, q_N) = \frac{1}{Z_1} \cdot e^{-H(q_1, q_2, \dots, q_N)/k_B T},$$

wobei $k_B \approx 1.38 \cdot 10^{-23} \frac{J}{K}$ die sogenannte Boltzmann-Konstante, Z_1 eine als Zustandssumme bezeichnete Normierungskonstante, und $H(q_1, q_2, \dots, q_N)$ die Hamiltonfunktion des Systems sei.

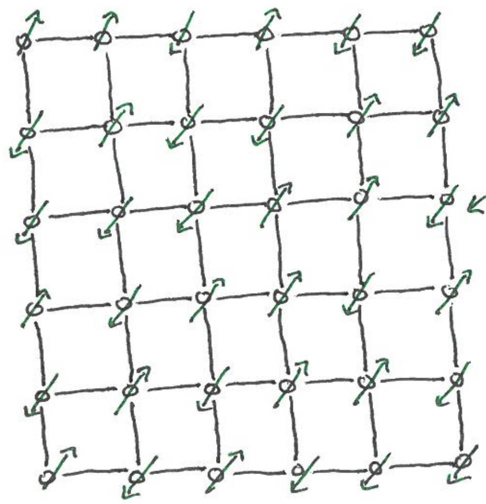
Unser Ziel ist es nun, das (mechanische) System anhand verschiedener Observablen $O(q_1, q_2, \dots q_N)$ zu beschreiben, welche im Allgemeinen ebenfalls von den N Variablen $q_1, q_2, \dots, q_N$ abhängen.
Den Mittelwert dieser Observablen für eine gegebene Temperatur T können wir berechnen als

$$\langle O(T) \rangle = \int dq_1\, dq_2 \dots dq_N\; p(q_1, q_2, \dots, q_N) \cdot O(q_1, q_2, \dots, q_N)$$
$$\approx \frac{1}{M} \cdot \sum_{i=1}^{M} O(q_1^{(i)}, q_2^{(i)}, \dots, q_N^{(i)})$$

wobei wir in der Annäherung die Variablen $(q_1^{(i)}, q_2^{(i)}, \dots, q_N^{(i)})$ gemäß der Boltzmann-Verteilung erzeugen wollen.

Das Ising Modell

Wir wollen uns diese statistische Beschreibung eines Systems mit mehreren Freiheitsgraden an einem der zentralen Modelle der statistischen Physik – dem sogenannten Ising-Modell – näher anschauen.
Der 1910 in Köln geborene Ernst Ising hat das nach ihm benannte Modell ursprünglich zur Beschreibung des Ferromagnetismus, also der makroskopischen magnetischen Eigenschaften eines Festkörpers, entwickelt. Dazu hat er eine große Zahl elementarer magnetischer Momente – sogenannter Spins – und deren gegenseitige Wechselwirkung betrachtet:



$\sigma_i = \nearrow \swarrow$
$+1 \quad -1$

Die elementaren Spins können dabei in eine von zwei Richtungen zeigen. Die Wechselwirkung zwischen den Spins werde durch den folgenden Hamiltonian modelliert

Wechselwirkungsstärke

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j$$

Summe über nächste Nachbarn im Gitter

Für $J>0$ erkennen wir, daß zwei parallele Spins $\sigma_i = \sigma_j$ eine Energie von $-J$ besitzen, wohingegen zwei antiparallele Spins $\sigma_i = -\sigma_j$ eine höhere Energie von $+J$ besitzen. Deswegen wird der Fall $J>0$ als ferromagnetische Kopplung bezeichnet. Umgekehrt bedeutet $J<0$ eine antiferromagnetische Kopplung.

Das Ising-Modell spielt vor allem deshalb eine zentrale Rolle in der statistischen Physik, weil es einfaches und zugleich paradigmatisches Modell für einen sogenannten Phasenübergang ist.

Um dies zu verstehen, wollen wir uns der statistischen Beschreibung des Ising-Modells anhand der Boltzmann-Verteilung zuwenden. Die N Variablen, welche nunmehr unser System beschreiben, sind die Ausrichtungen $\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N$ der elementaren Spins, so daß wir die folgende Verteilung betrachten

$$p(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N) = \frac{1}{Z} \cdot e^{-\mathcal{H}(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N)/k_B T}$$

wobei die Hamilton-Funktion wie oben gegeben sei.

Betrachten wir nun für den ferromagnetischen Fall $J > 0$, welche Spinzustände im Grenzfall $T \to 0$ das größte Gewicht erhalten. Dies sind genau jene, welche die Energie

$$E(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N) = \mathcal{H}(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N)$$

minimieren. Die kollektive Energie wird genau dann minimal, wenn alle Spins in die gleiche Richtung zeigen. Derlei Zustände gibt es genau zwei: alle Spins sind +1 oder alle Spins sind -1. Auf dem Quadratgitter gibt es 2N Paare von nächsten Nachbarn, so daß die Energie der beiden Zustände $E_{min}(T \to 0) = -2N$ beträgt. Das System bildet also bei $T \to 0$ einen Ferromagneten mit maximaler Magnetisierung $M = \sum_i \sigma_i = \pm N$.

Im anderen Grenzfall $T \to \infty$ gewichtet die Boltzmann-Verteilung

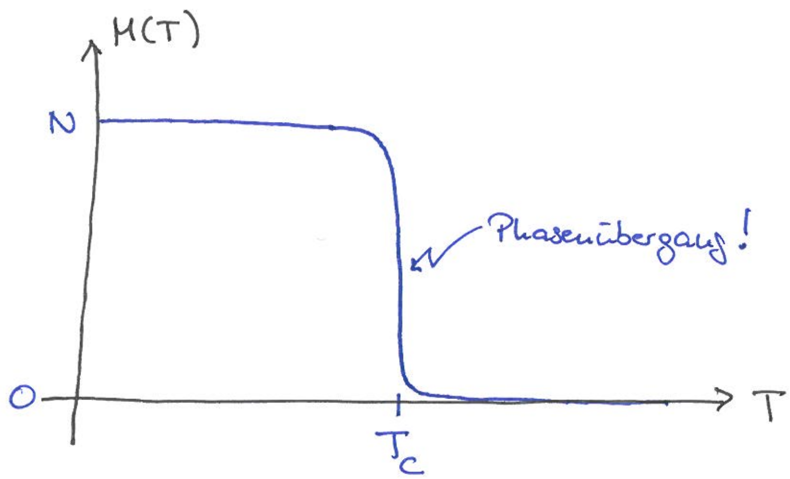
$$p(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N) = \frac{1}{Z} e^{-\mathcal{H}(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N)/k_B T} \xrightarrow{T\to\infty} \frac{1}{Z}$$

alle Konfigurationen gleich. Das System ist damit ein sogenanntes Paramagnet, ein ungeordnetes Zustand mit durchschnittlicher Magnetisierung $\langle M \rangle = 0$.

Es stellt sich heraus, daß dieses Übergang von einem Ferromagneten zu einem Paramagneten nicht schleichend mit Erhöhung der Temperatur vor sich geht, sondern bei einer ganz bestimmten endlichen Temperatur, der sogenannten kritischen Temperatur T_c, welche analytisch exakt bekannt ist $T_c = \frac{2}{\ln(1+\sqrt{2})} \cdot J \approx 2{,}27$ (für $J=1$), von statten geht.

Onsager - Lösung

Wenn wir für ein endliches System die Magnetisierung messen, indem wir das System von $T=0$ aufheizen, so erhalten wir



Metropolis-Algorithmus für das Ising-Modell

Um genau dieses Verhalten und das Phänomen eines thermischen Phasenübergangs numerisch zu simulieren, wollen wir nun den Metropolis-Algorithmus anwenden, um Spin-Konfigurationen gemäß der Boltzmann-Verteilung zu erzeugen.

Dazu gehen wir wie folgt vor: Wir generieren ausgehend von einer ersten Spinkonfiguration $\underline{\sigma}^0 = \sigma_1^{(0)}, \sigma_2^{(0)}, \ldots, \sigma_N^{(0)}$ eine Markov-Kette von Spinkonfigurationen

$$\underline{\sigma}^0 \to \underline{\sigma}^1 \to \underline{\sigma}^2 \to \ldots \to \underline{\sigma}^i \to \underline{\sigma}^{i+1} \to \ldots$$

Ein elementarer Schritt sieht dabei wie folgt aus:

- ausgehend von einer Konfiguration $\underline{\sigma}^i$ schlage vor, einen elementaren Spin zu flippen, was Konfiguration $\underline{\tilde{\sigma}}$ erzeugt

- berechne die Energiedifferenz zwischen den beiden Konfigurationen

$$\Delta E = E(\underline{\tilde{\sigma}}) - E(\underline{\sigma}^i) = \mathcal{H}(\underline{\tilde{\sigma}}) - \mathcal{H}(\underline{\sigma}^i)$$

- wenn $\Delta E < 0$ ist, sei die nächste Konfiguration $\underline{\sigma}^{i+1} = \underline{\tilde{\sigma}}$

- wenn $\Delta E > 0$ ist, sei die nächste Konfiguration $\underline{\sigma}^{i+1} = \underline{\tilde{\sigma}}$ mit Wahrscheinlichkeit $e^{-\Delta E/k_B T}$, sonst sei $\underline{\sigma}^{i+1} = \underline{\sigma}^i$

  → Letzteres erreichen wir, indem wir eine gleichverteilte Zufallszahl u im Intervall $[0,1)$ erzeugen und mit $e^{-\Delta E/k_B T}$ vergleichen.

- messe Observablen von Interesse in der neuen Konfiguration $\underline{\sigma}_{i+1}^{i+1}$

Der Algorithmus erzeugt Spinkonfigurationen gemäß der Boltzmann-Verteilung, erfüllt detailed balance, und ist ergodisch.