

강자성 상전이: 이징 모형

(Ferromagnetic phase transition: the Ising model)

물리계에 부과되는 외부 매개변수에 따라, 그 성질은 극적으로 달라질 수 있다. 일상적인 온도와 압력에서의 물을 떠올리기만 해도, 약 100 K의 온도 범위 안에서 물이 어떻게 고체에서 액체로, 마지막으로 기체로 변하는지 알 수 있다. 이 세 가지 서로 다른 상태는 더 일반적으로 물질의 상 (phase of matter) 이라 불리는 것의 예이다. 물질의 서로 다른 상태는 서로 다른 물리적 성질로 특징지어지며, 이 성질들은 상전이 (phase transition) 에서 급격한 변화를 겪는다. 상전이는 그것이 일어날 수 있는 외부 온도와 압력으로 특징지어진다. 상전이는 창발 현상 (emergent phenomena) 임에 유의하라. 즉, 상전이는 매우 많은 수의 미시적 자유도를 나타내는 열역학적 계에 고유한 현상이다. 계의 구성 요소 수를 줄이면, 전이는 매끄럽게 완화된다는. 그러한 경우에는 물질의 영역 (regime) 과 그 크로스오버 (crossover) 에 대해 이야기하는 편이 낫다.

상전이의 개념은 고체, 액체, 기체 상태에 국한되지 않는다. 고려하는 물리적 성질에 따라, 더 많은 물질의 상태를 구별할 수 있다. 더 일반적으로, 우리는 계의 “질서 (order)” 의 갑작스러운 변화를 수반하는 임의의 과정에 상전이를 연관 지을 수 있다. 그러한 질서는 잘 선택된 계의 매개변수로 특징지어질 수 있으며, 이는 질서 있는 상과 질서 없는 상을 구별할 수 있게 한다.

예를 들어, 물질의 자기적 상태도 상전이를 겪는다. 어떤 물질이 외부 자기장이 없는 상태에서도 크고 0이 아닌 자화 (magnetization) 를 나타낼 때, 그 물질은 강자성 (ferromagnetic) 상태에 있다. 예를 들어, 상온의 철은 강자성 상태에 있다. 반대로, 외부 자기장이 없을 때 0의 알짜 자화를 나타내고, 외부 자기장을 가하면 (작은) 동일선상의 0이 아닌 자화가 생기는 물질은 상자성 (paramagnetic) 상태에 있다. 이는 이 경우 계의 자화가 상전이를 기술하는 가능한 질서 매개변수 (order parameter) 임을 정당화한다.

더 나아가기 전에, 상온의 대부분의 고체는 몇 가지 예외를 제외하면 상자성임에 유의해야 한다. 또한 반자성 (diamagnetic) 이라 불리는 세 번째 종류의 물질도 구별되는데, 이들 역시 외부 자기장이 없을 때 알짜 자화가 0이며, 가해진 외부 자기장에 반대되는 자화로 반응한다. 이 문제에서는 강자성과 상자성 상태 사이의 전이만 고려한다.

주어진 온도에서 대부분의 물질은 강자성 또는 상자성 상태 중 하나에 있게 된다. 매우 낮은 온도에서 물질은 항상 강자성이며, 퀴리 온도 (Curie temperature) 라 불리는 어떤 온도 T_c 이상에서는 갑자기 자화를 잃고 상자성 상태로 전이한다. 이 문제에서 우리는 강자성의 이징 모형 (Ising model) 을 탐구한다. 이 모형으로 기술되는 계는 물리적 상황에 대한 직관을 줄 만큼 단순하면서도, 실제 강자성체의 많은 정성적 특징을 끌어낼 만큼 강력하다. 더욱이, 이 모형은 상전이에 대한 구성 요소 수의 영향을 탐구할 수 있게 한다.

이징 모형에서 우리는 각각 위 또는 아래를 향할 수 있는 스핀 (spin) 들의 2차원 $L \times L$ 격자를 고려한다. 격자의 위치 (i, j) 에 있는 스핀의 상태는 다음과 같이 수 σ_{ij} 로 부호화된다.

$$\sigma_{ij} = \begin{cases} +1 & \text{스핀}(i, j) \text{가 위를 향하면} \\ -1 & \text{스핀}(i, j) \text{가 아래를 향하면} \end{cases} \quad (1)$$

이 모형의 주요 가정은 격자에서 이웃한 스핀들이 교환 상호작용 (exchange interaction) 이라 불리는 메커니즘으로 상호작용한다는 것이다. 강자성체에 대한 교환 상호작용을 기술하는 매개변수는 $J > 0$ 로 표기한다. 이웃한 두 스핀이 같은 방향 (둘 다 위 또는 둘 다 아래) 을 향하면, 그 상태는 에너지적으로 유리하며 계의 에너지에 $-J$ 를 기여한다. 이웃한 두 스핀이 반대 방향을 향하면, 그 상태는 에너지적으로 불리하며 계에 $+J$ 의 에너지를 기여한다. 더 나아가, 단순화를 위해 주기적 경계 조건 (periodic boundary conditions) 을 가정한다: 행 L 의 스핀들은 행 1의 스핀들과 이웃하는 것으로 간주한다 (열 L 의 스핀들이 열 1의 스핀들과 이웃하는 것도 마찬가지다). 그러면 주어진 스핀 계의 총 에너지는 다음과 같다.

$$E = -\frac{J}{2} \sum_u \sum_{v \in u \text{의 이웃}} \sigma_u \sigma_v \quad (2)$$

그러한 계에서 강자성 상태와 상자성 상태의 구별은 단위 스핀당 자화 M 을 질서 매개변수로 선택함으

로써 할 수 있다. 그 정의는

$$M = \frac{1}{L^2} \sum_{(i,j)} \sigma_{ij} \quad (3)$$

M 의 절댓값은 강자성 상에서는 1에 매우 가깝고, 상자성 상에서는 거의 0이다.

이징 모형의 열적 기술은 볼츠만 통계 (Boltzmann statistics)에 의존한다. 이 기술에서, 온도 T 의 주어진 계의 두 상태 α 와 β 가 에너지 E_α 와 E_β 를 가질 때, 각각 확률 p_α 와 p_β 로 나타나며 그 비는

$$\frac{p_\alpha}{p_\beta} = \exp\left(-\frac{E_\alpha - E_\beta}{k_B T}\right) \quad (4)$$

이징 모형에서 열역학적 매개변수의 기댓값을 계산하려면, 가능한 모든 스핀 배치를 고려하고, 그에 연관된 확률을 계산한 다음, 모든 서로 다른 상태에 대해 해당 확률로 평균을 내야 한다. $L \times L$ 스핀 격자의 가능한 배치가 2^{L^2} 개임을 고려하면, N 이 10 정도로 작아도 이미 엄청난 작업이 된다.

이러한 한계는, 이들 상태 대부분이 기댓값에 무시할 만한 기여만 한다는 점에 주목함으로써 완화할 수 있다. 실제로, 가장 가능성 높은 몇몇 상태만이 유의미한 기여를 한다. 그러나 관련 있는 상태를 선택하는 것 또한 사소하지 않은 작업이다. 이 경우 우리가 택하는 해법은 몬테카를로 시뮬레이션 (Monte Carlo simulation)이다. 이 접근법은 볼츠만 통계를 따르는, 현명하게 선택된 확률 분포에 따라 상태를 무작위 표본추출하는 데 의존한다. 무작위로 선택된 초기 상태에서 시작하여, 볼츠만 통계로 선택된 확률로 일어나는 무작위 스핀 뒤집기를 통해 상태를 진화시킨다. 일정한 단계 수 N_{eq} 이후, 계는 평형에 도달했다고 간주할 수 있으며, 이는 앞서 언급한 가장 가능성 높은 상태들 사이에서만 진화함을 의미한다. 그 후 계는 동일한 무작위 절차에 따라 추가로 N_{MC} 단계만큼 계속 진화한다. 그러면 열역학적 매개변수의 기댓값은 몬테카를로 절차 동안 얻어진 각 상태에 대해 그 값을 계산하고 얻어진 모든 값에 대해 평균을 냄으로써 얻어진다.

우리는 위 몬테카를로 알고리즘의 구현을 제공한다. 조절 가능한 매개변수는 격자 크기 L , 교환 상수 J , 계의 온도 T , 그리고 몬테카를로 절차의 단계 수 N_{MC} 이다. 평형 단계 수는 항상 $N_{eq} = N_{MC}/10$ 으로 선택된다. 알고리즘은 스핀당 평균 자화의 기댓값을 그 오차 막대 (error bar)와 함께 반환하며, 이는 알고리즘으로부터 얻어진다. 알고리즘은 또한 시각화 목적으로, 스핀의 열평형 배치에 대한 그래픽 표현을 생성할 수도 있다. 이 문제의 목적은 세 가지 조절 가능한 매개변수가 변할 때 평균 자화 M 의 거동을 탐구하는 것이다.

알고리즘이 생성하는 결과는 점근적으로만, 즉 매우 큰 스핀 계를 매우 많은 몬테카를로 단계로 고려할 때에만 열역학적 극한 (thermodynamic limit)에 해당함에 유의하라. 실제로 알고리즘은 여전히 상당히 시간이 많이 걸리며, 한 번 실행에 수 분이 걸릴 수 있다. 따라서 시간 효율을 위해, 스핀 수와 반복 횟수를 제한해야 한다. 그렇게 할 때, 다음의 절충 (trade-off)에 주의해야 한다: 이 값들을 너무 많이 줄이면 관련 없는 열역학을 얻게 되어, 요구되는 상전이를 관측하지 못할 수도 있다! 우리가 제안하는 전략은 다음과 같다: 먼저, 연구해야 할 문제들의 감을 잡기 위해 문제 전체를 읽어라. 그런 다음, 잠시 알고리즘을 다뤄 보며 전형적인 실행 시간의 감을 잡아라. 작은 격자와 적은 몬테카를로 단계 수로 시작하여, 합리적인 실행 시간 안에 명확한 상전이를 얻을 때까지 값을 꾸준히 늘려라. 답안지에 항상 사용한 격자 크기와 단계 수를 명시하라.

여러 그래프와 도표를 만들어야 한다: 컴퓨터에서 원하는 소프트웨어 (예: Excel)를 사용하거나, 제공된 모눈종이 (millimeter paper)를 사용하여 만들 수 있다. 디지털 그래프를 만들면 반드시 저장하여 제출하고, 답안지에 파일 이름을 명시적으로 언급하라. 또한, 폴이의 근거가 되는 모든 데이터 파일을 제출하고, 해당 데이터가 위치한 파일 이름을 항상 언급하라. 그래프와 데이터 파일이 제출되지 않거나 폴이에서 적절히 참조되지 않으면 답안은 채점되지 않는다.

A 상전이와 임계 온도 (Phase transition and the critical temperature)

이 절에서는 격자 크기 $L = 20$ 으로 작업한다. 열역학적 평형에 도달하도록 적절한 반복 횟수를 선택하라.

A.1. (1 점) $J = 1$ 로 두고 애니메이션을 켜라. 온도 $T = 1, T = 2, T = 3, T = 4$ 에서 계를 관찰하라. 결과를 정성적으로 기술하라. 상전이를 관측하는가? 어떤 온도 범위에서인가?

- A.2.** (2 점) $J = 1$ 로 두고 그 결과로 얻어지는 (절댓값) 자화를 온도에 대해 도시하라. 데이터를 표로 제시하라. 상전이 온도의 추정값을 구하라.
- A.3.** (4 점) 여러 J 값에 대해 실험을 반복하라. 임계 온도의 교환 매개변수 J 에 대한 의존성을 도시하고 합리적인 맞춤 (fit) 을 제안하라.
- A.4.** (1 점) 강자성 영역에서, 선호되는 자화 방향이 있는가? 결론을 내리기에 충분한 수의 실험을 수행하라.

B 크로스오버 영역 (The crossover regime)

- B.1.** (3 점) 작은 $L = 10$ 과 $L = 5$ 에 대해 실험을 반복하라. 상전이는 어떻게 변하는가?

C 외부 자기장 속의 격자 (Lattice in an external magnetic field)

여기서는 외부 자기장 H 를 설명하는 추가 항을 에너지에 도입한다. 그 형태는

$$E_H = -H \sum_{(i,j)} \sigma_{ij} \quad (5)$$

다시 격자 크기 $L = 20$ 으로 작업한다. $J = 1$ 의 값으로 고정한다.

- C.1.** (2 점) $H = 0.1$ 과 $H = 1$ 에 대해 실험을 반복하라. 자화 대 온도 곡선을 도시하고, 자기장이 없을 때 얻은 곡선과 비교하라. 외부 자기장이 상전이 온도에 영향을 주는가?
- C.2.** (1 점) 강자성 영역에 주목하라. 이 경우 선호되는 자화 방향이 있는가? $H = 0.1$ 과 $H = 1$ 두 경우를 모두 연구하라.
- C.3.** (2 점) 상자성 영역에 주목하라. 다섯 가지 서로 다른 온도에 대해, 외부 자기장 $0 < H < 2$ 에 대한 자화의 의존성을 도시하라. 이 의존성들을 비교하고 논하라.

충분히 작은 외부 자기장에 대해서는, 자화가 가해진 자기장에 선형으로 반응한다고 가정할 수 있다. 그 경우, 계의 자화율 (susceptibility) 을 다음과 같이 정의할 수 있다.

$$\chi = \frac{M}{H} \quad (6)$$

상자성 물질에 대해, 자화율은 퀴리-바이스 법칙 (Curie-Weiss law) 에 따라 온도에 강하게 의존한다.

$$\chi(T) = \frac{\chi_0}{T - T_c} \quad (7)$$

여기서 χ_0 는 맞춤 상수이고 T_c 는 상전이가 일어나는 퀴리 온도이다.

- C.4.** (2 점) 앞 문제에서 자화율을 계산하고 그 온도 의존성을 조사하라. 퀴리-바이스 법칙과 비교하고 논평하라.

D 반강자성 (Antiferromagnetism)

교환 매개변수에 음의 값 $J < 0$ 을 설정하면 정성적으로 다른 거동이 나타나며, 보통 반강자성 (antiferromagnetism) 이라 불린다.

- D.1.** (1 점) $J = -1$ 로 두고 서로 다른 온도에 대한 결과 상태를 기술하라. 이 계의 상들은 무엇인가?
- D.2.** (1 점) 자화가 더 이상 상전이를 기술하는 적절한 매개변수가 아닌 이유를 설명하라. 대안적인 질서 매개변수를 제안하라.