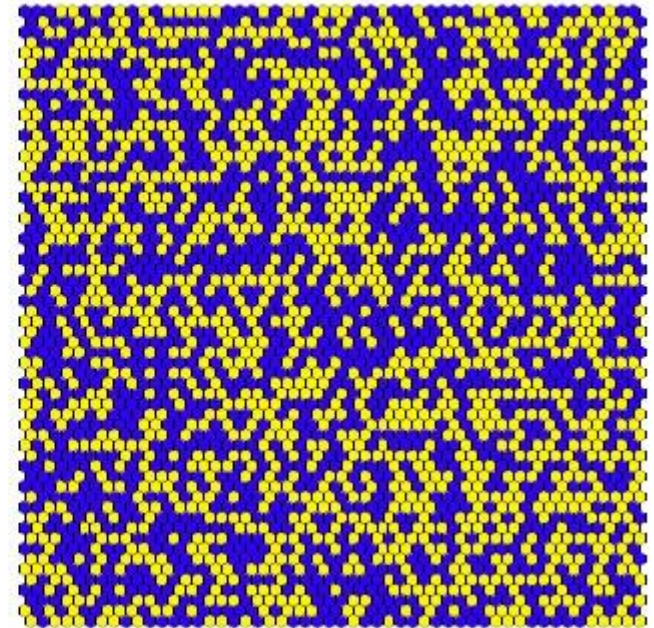
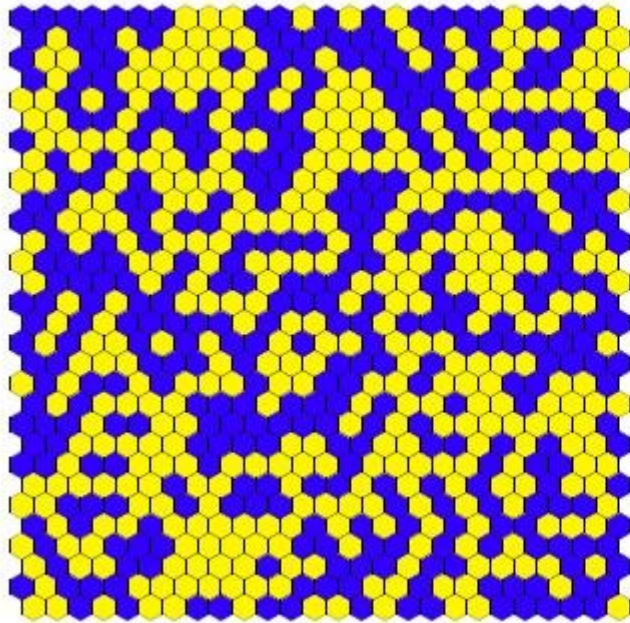


Модель Изинга.
Приложение к физике магнитных
явлений



Модель Изинга

Модель Изинга — математическая модель статистической физики, предназначенная для описания намагничивания материала.

Каждой вершине кристаллической решётки (рассматриваются не только трёхмерные, но и одно- и двумерные случаи) сопоставляется число, называемое *спином* и равное $+1$ или -1 («поле вверх»/«поле вниз»).

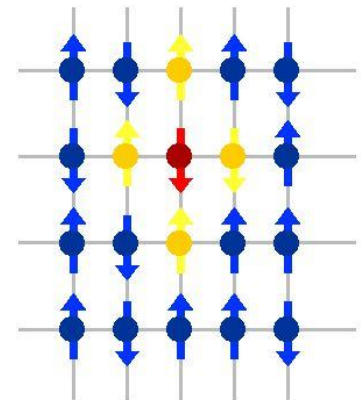
Каждому из возможных вариантов расположения спинов (где N — число атомов решётки) приписывается энергия, получающаяся из попарного взаимодействия спинов соседних атомов:

$$E(S) = -J \sum_{i \sim j} S_i S_j,$$

$J > 0$ – ферромагнитный обмен

$J < 0$ – антиферромагнитный обмен

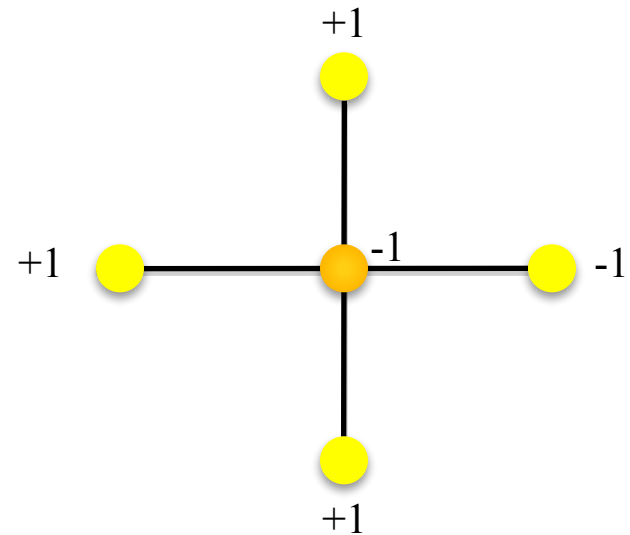
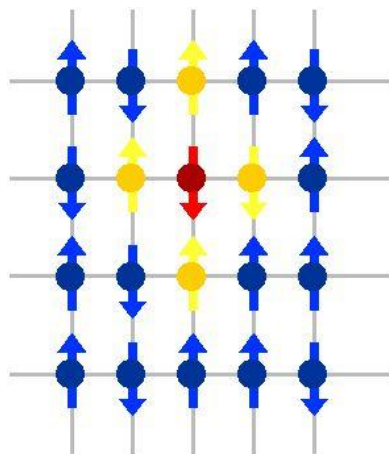
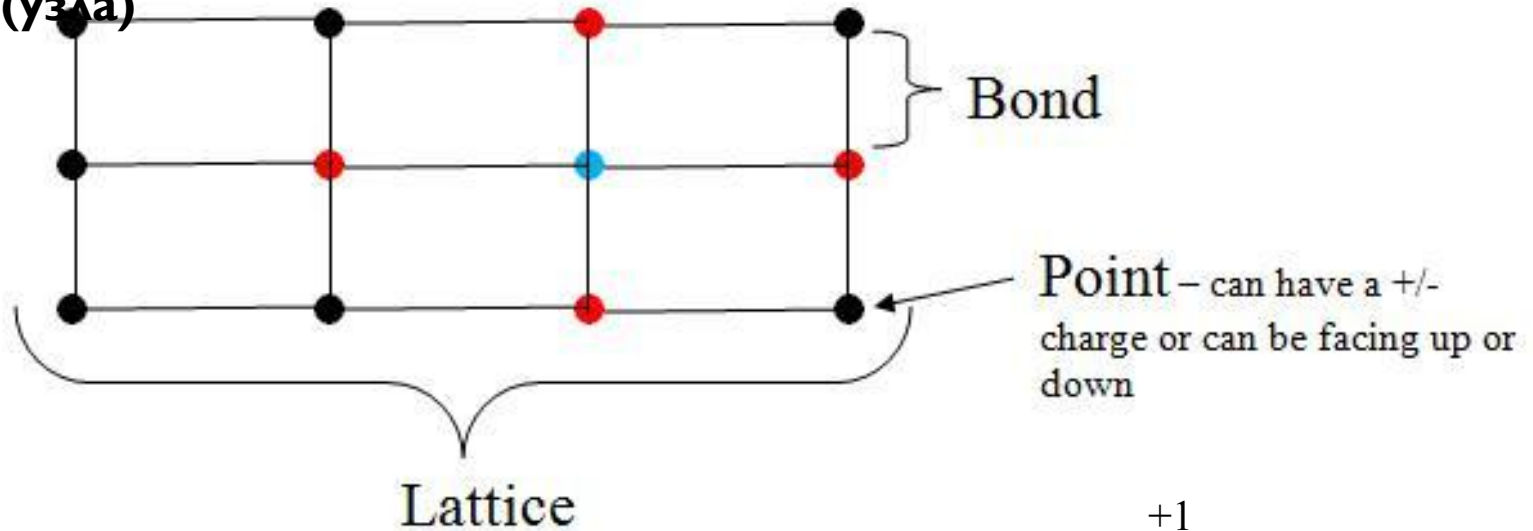
$J = 0$ – обмен отсутствует



Модель Изинга

2D - модель

Все красные атомы (узлы) – ближайшие соседи синего атома (узла)



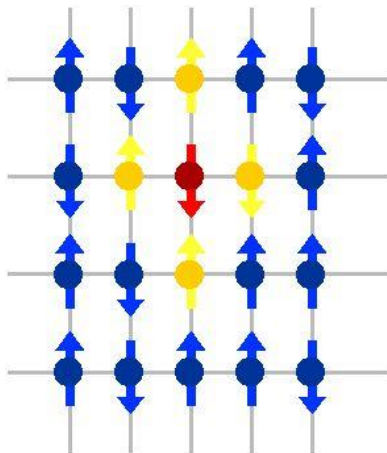
Модель Изинга

Для заданной обратной температуры $\beta = 1/k_B T$

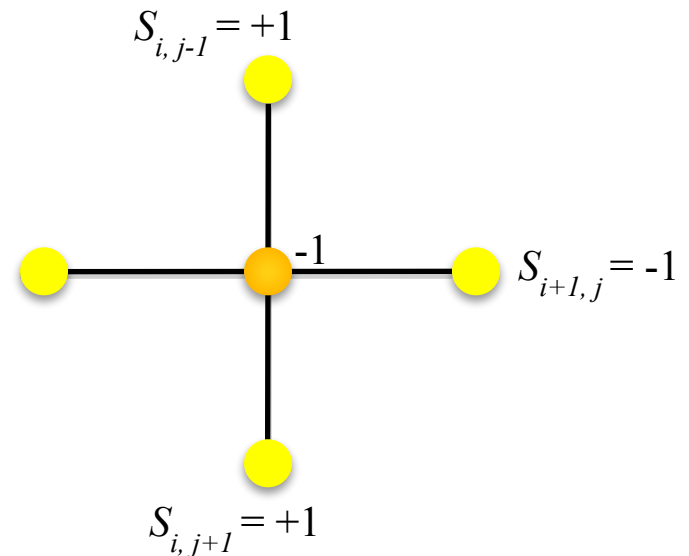
на получившихся конфигурациях рассматривается распределение Гиббса: вероятность конфигурации полагается пропорциональной $e^{-\beta E(S)}$ и исследуется поведение такого распределения при очень большом числе атомов N .

$$E(S) = -J \sum_{i \sim j} S_i S_j - h \sum_i S_i.$$

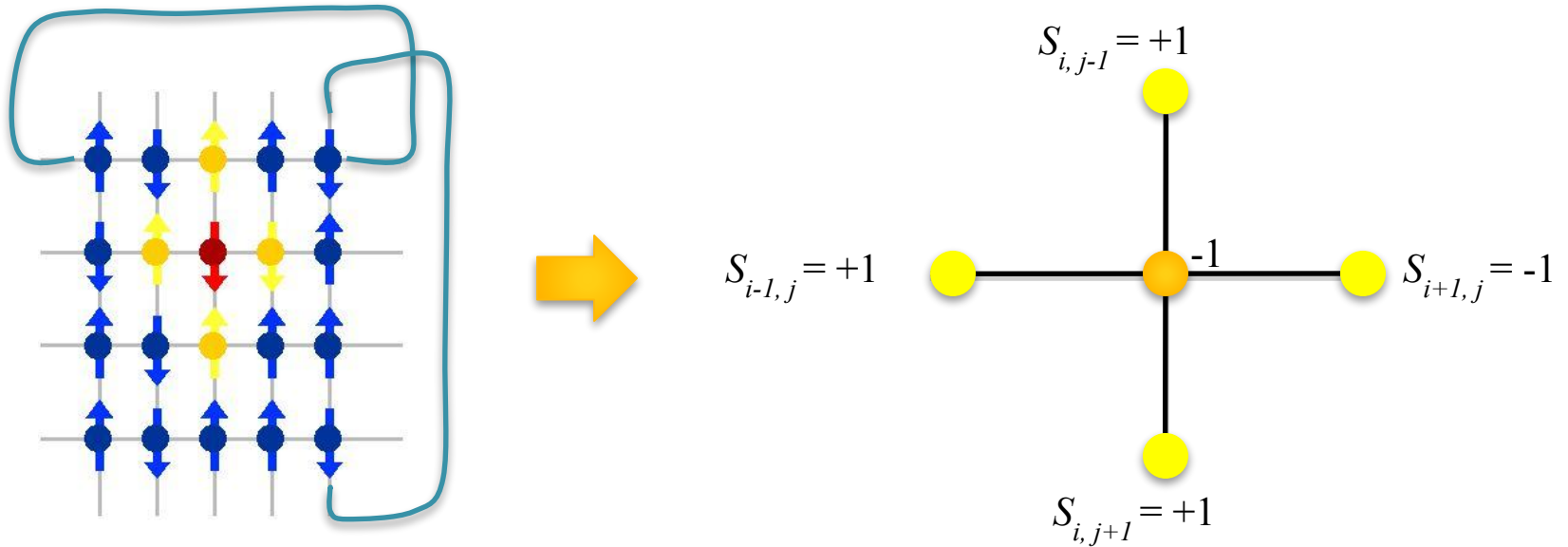
h – внешнее магнитное поле



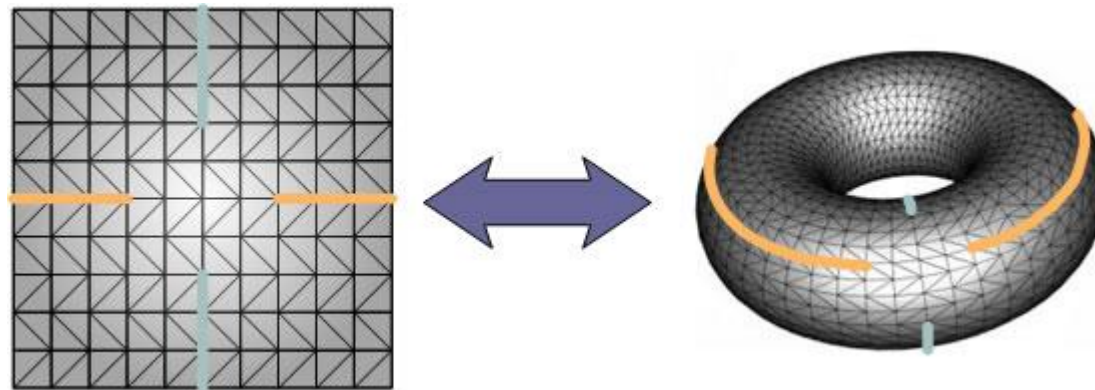
$$S_{i-l,j} = +1$$

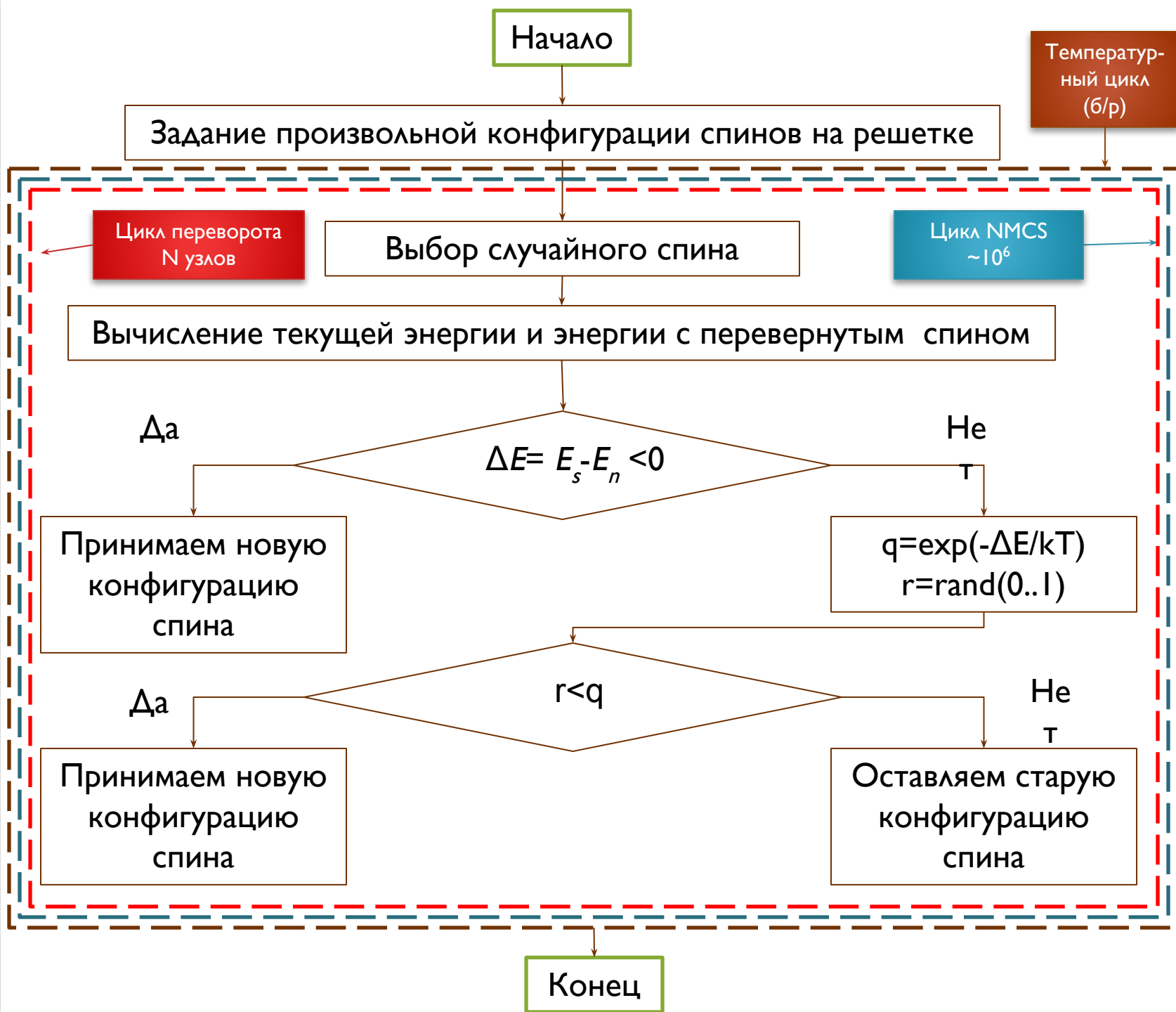


Периодические граничные условия



Геометрическая интерпретация периодических граничных условий





Начало

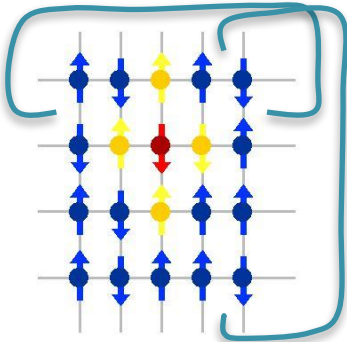
Температурный цикл (б/р)

Первые 500-1000 шагов NMCS отбрасываются (wasteNMCS)

Цикл NMCS
 $\sim 10^6$

Цикл переворота
N узлов

В этом цикле происходят только перевороты спинов



Алгоритм
Метрополиса

Накопление значений величин C, M, E, χ
$$C = C + [\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2] / T$$

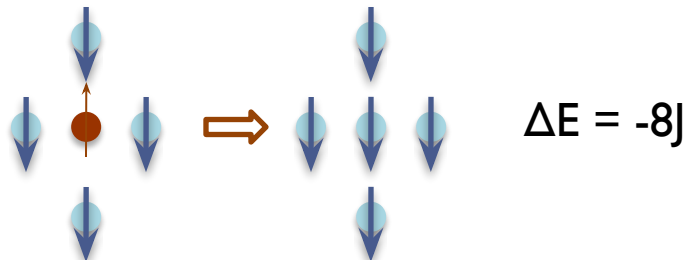
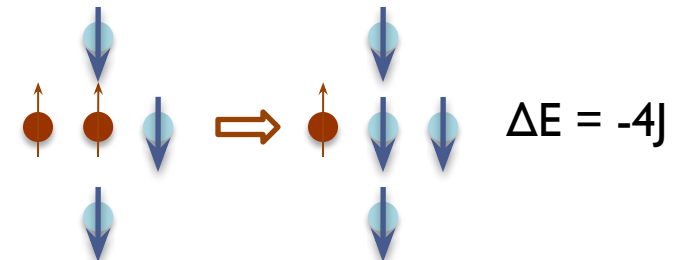
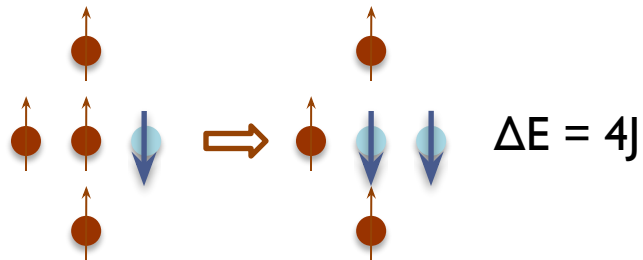
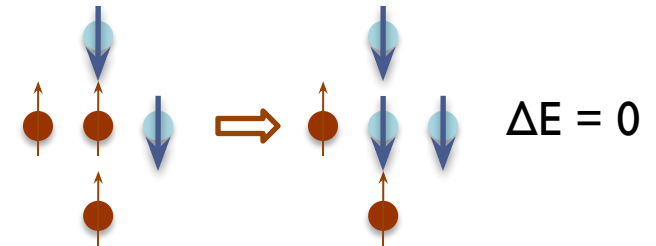
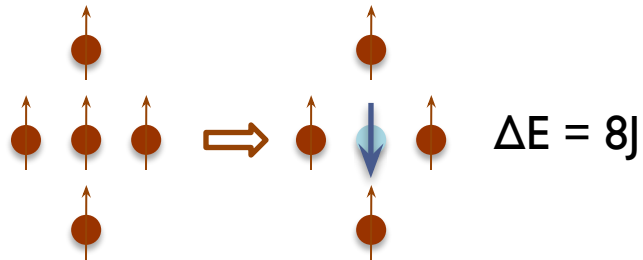
Замер ч/з 100 шагов ($nstep$)

Усреднение величин C, M, E, χ
$$C = C / (NMCS - wasteNMCS) / nstep$$

Конец

Вычисление $q = \exp(-\Delta E/kT)$

Вычисление \exp временнозатратно, поэтому \exp вычисляют 1 раз



Значения сохраняются в локальных переменных и используются в программе

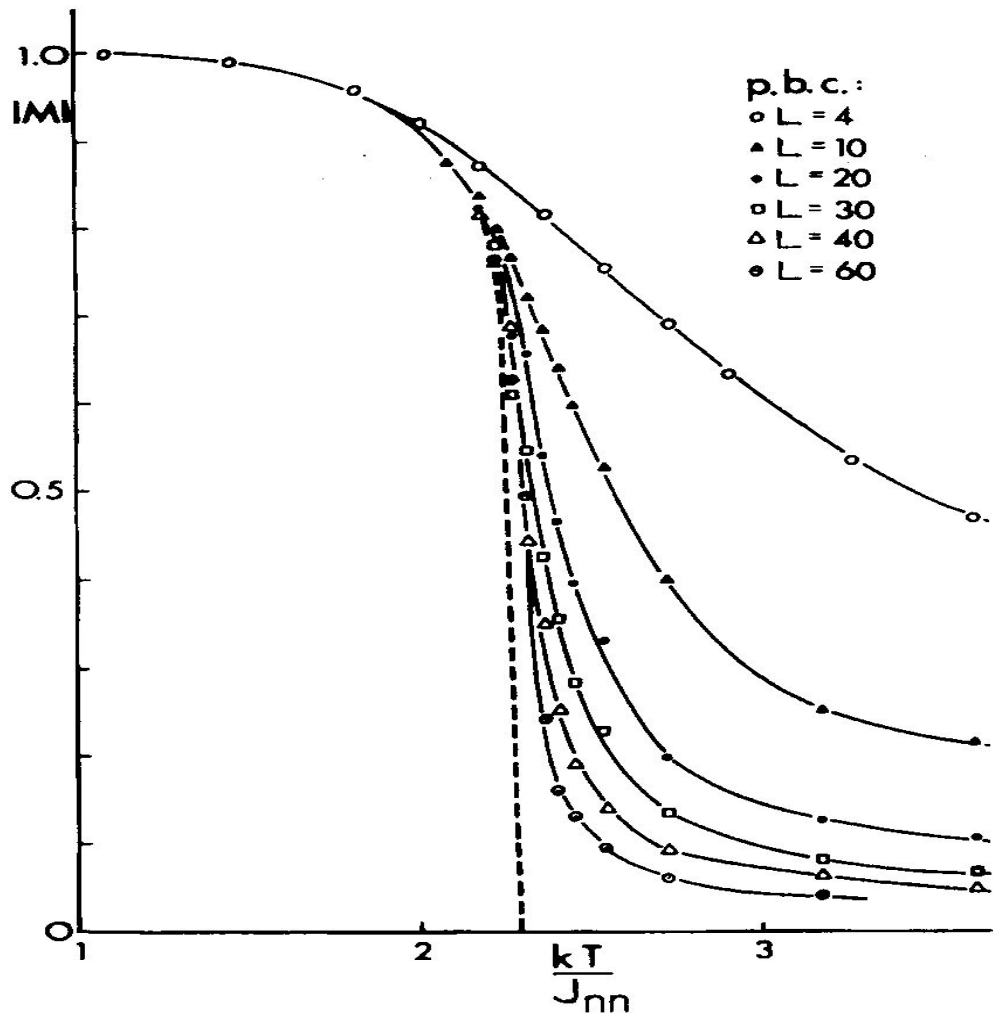
Расчетные величины

- $C_{mag}(T, H_{ext}) = \frac{1}{k_B T^2} [\langle H^2 \rangle - \langle H \rangle^2]$ - Магнитная теплоемкость
- $S_{mag}(T, H_{ext}) = \int_{T_1}^{T_2} \frac{C_{mag}(T, H_{ext})}{T} dT$ - Магнитная энтропия
- $\chi_{mag}(T, H_{ext}) = \frac{1}{k_B T} [\langle m^2 \rangle - \langle m \rangle^2]$ - Магнитная восприимчивость
- $\Delta T_{ad}(T, H_{ext}) = -T \frac{\Delta S_{mag}(T, H_{ext})}{C(T, H_{ext})}$ - Адиабатическое изменение температуры (МКЭ)
- $C_{lat}(T, \Theta_D) = 9RN_i \left\{ 4 \left(\frac{T}{\Theta_D} \right)^3 \int_0^{\Theta_D/T} \frac{x^3}{e^x - 1} dx - \left(\frac{\Theta_D}{T} \right) \frac{1}{e^{\Theta_D/T} - 1} \right\}$ - Решеточная теплоемкость
- $\langle H \rangle = \frac{1}{(N_C - N_0)} \sum_{i > N_0}^{N_C} H_i, \quad \langle H^2 \rangle = \frac{1}{(N_C - N_0)} \sum_{i > N_0}^{N_C} H_i^2$

N_c полное число шагов Монте-Карло, N_0 число шагов Монте-Карло для установления равновесия физических величин, индекс i определяет шаг Монте-Карло

Намагниченность в модели Изинга

- Чем больше система, тем более четкий переход



Result: time series of magnetization

