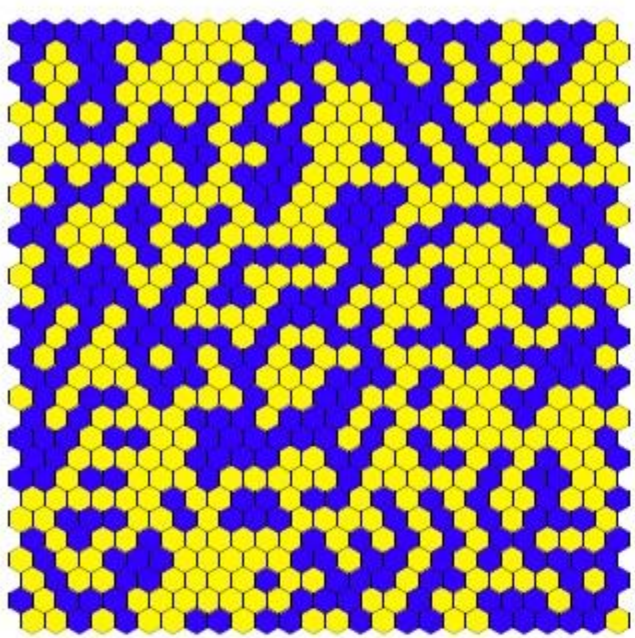
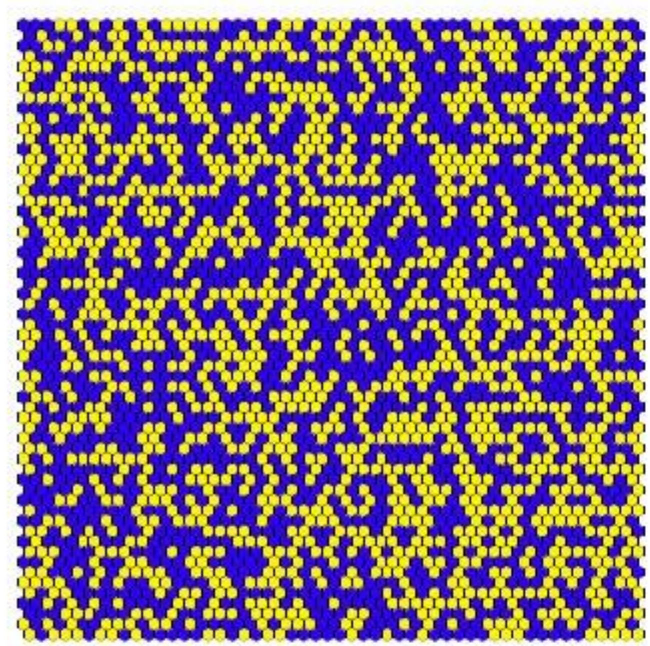
Модель Изинга.
Приложение к физике магнитных явлений



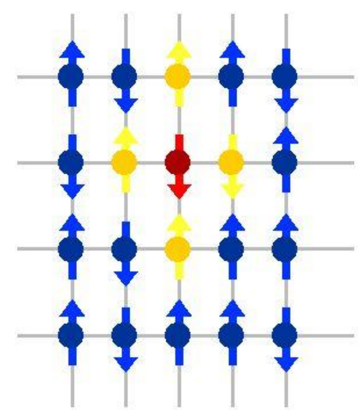


Модель Изинга

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

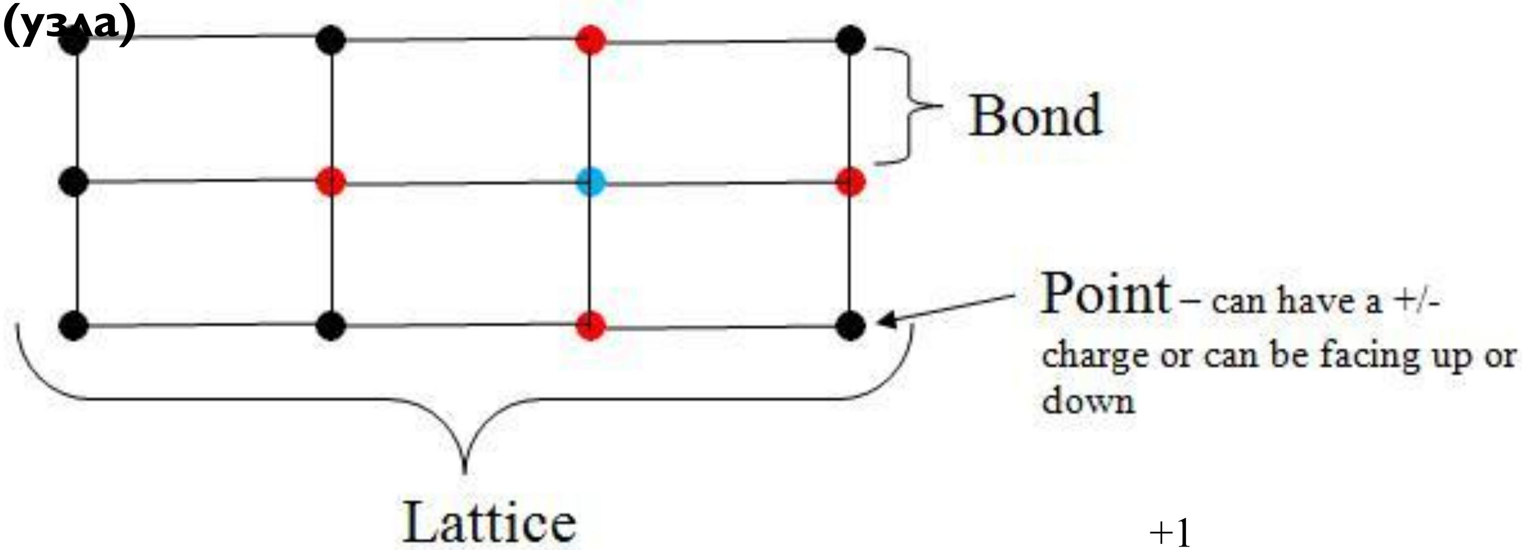
J<0 – антиферромагнитный обмен

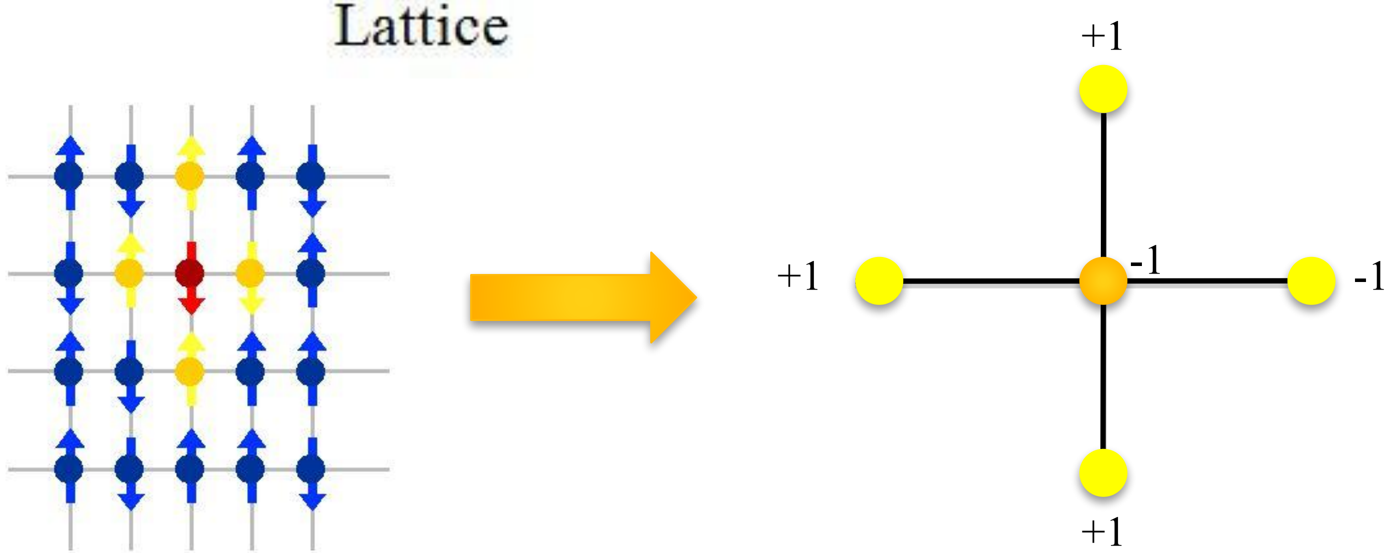
J=0 – обмен отсутствует

Модель Изинга

2D - модель

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





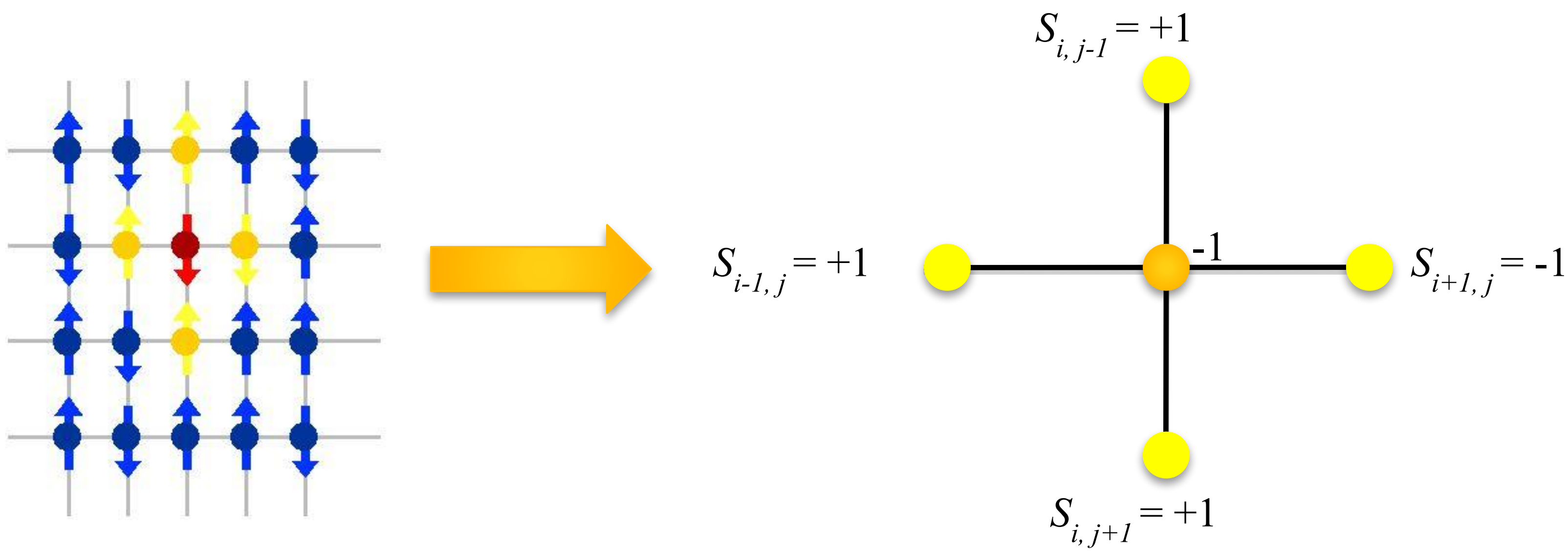
Модель Изинга

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

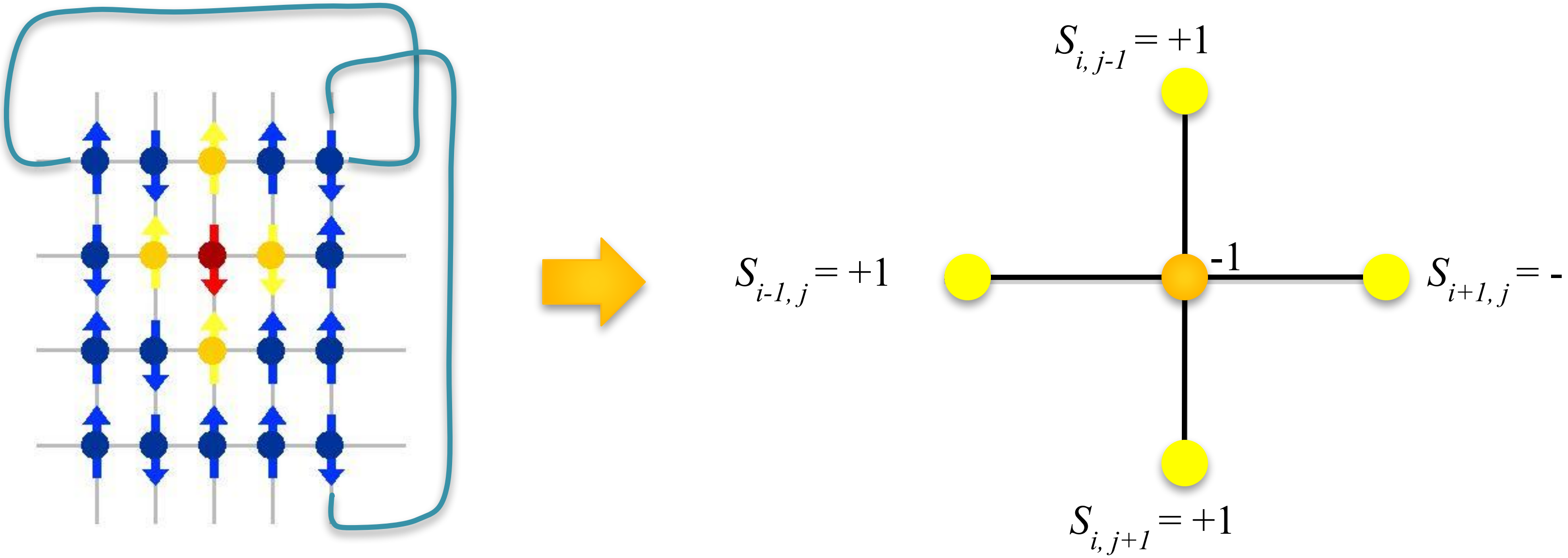
на получившихся конфигурациях рассматривается распределение Гиббса: вероятность конфигурации полагается пропорциональной $e^{-\beta E(S)}$, и исследуется поведение такого распределения при очень большом числе атомов *N*.

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

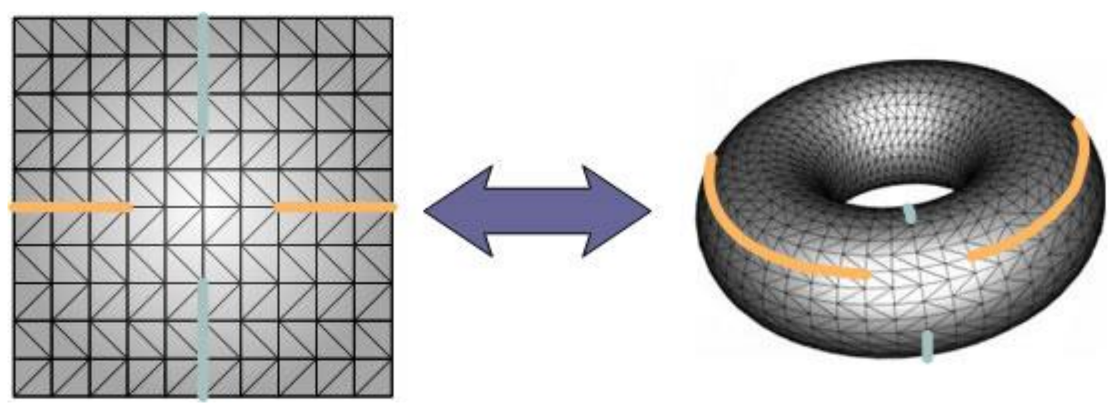
h – внешнее магнитное поле

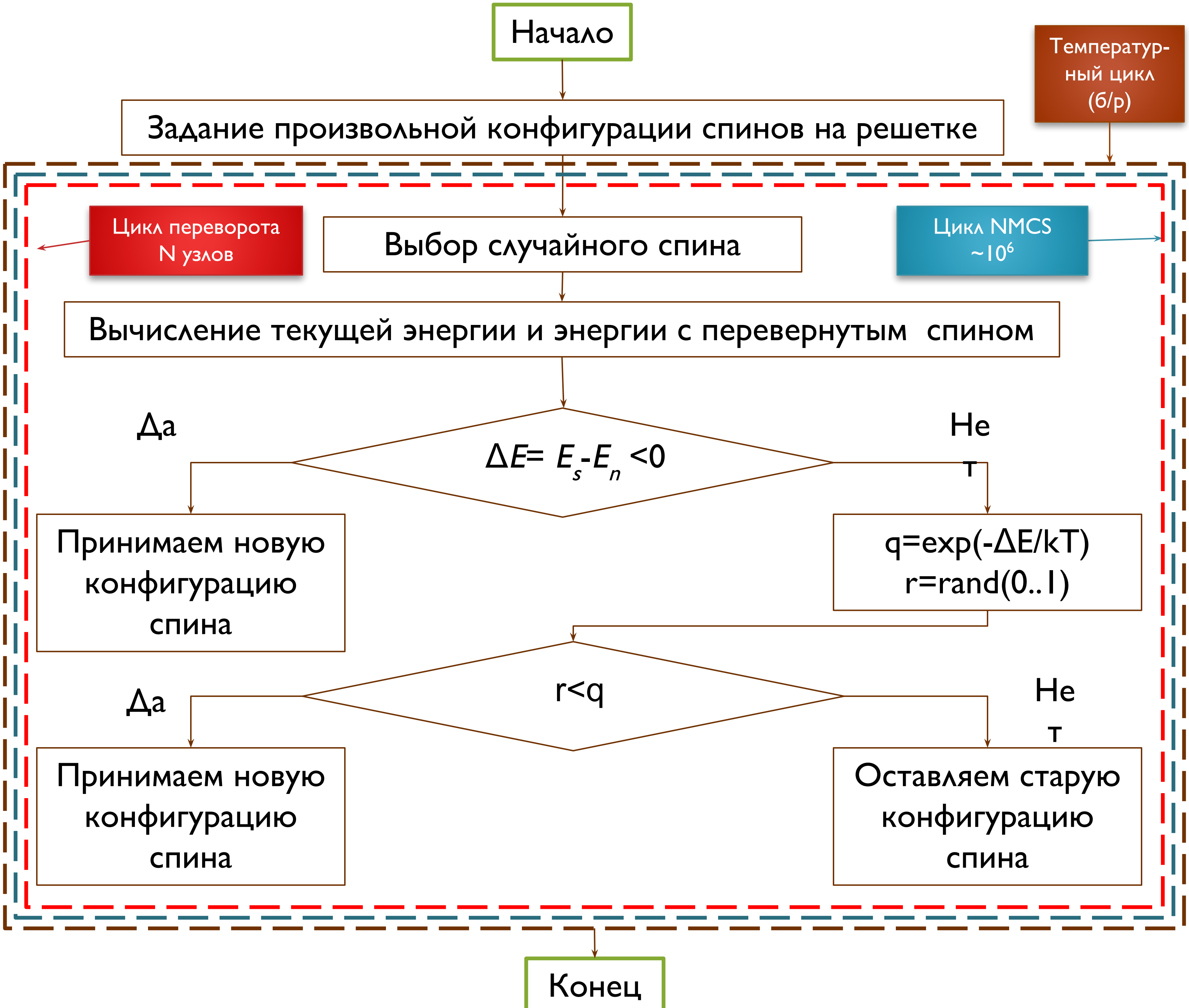


Периодические граничные условия



Геометрическая интерпретация переодических граничных условий




Начало
Задание произвольной конфигурации спинов на решетке
Температурный цикл (б/р)
Цикл переворота N узлов
Выбор случайного спина
Цикл NMCS ~10^6
Вычисление текущей энергии и энергии с перевернутым спином
Да
$\Delta E = E_s - E_n < 0$
Нет
Принимаем новую конфигурацию спина
$q=\exp(-\Delta E/kT)$
$r=rand(0..1)$
Да
$r<q$
Нет
Принимаем новую конфигурацию спина
Оставляем старую конфигурацию спина
Конец

Начало

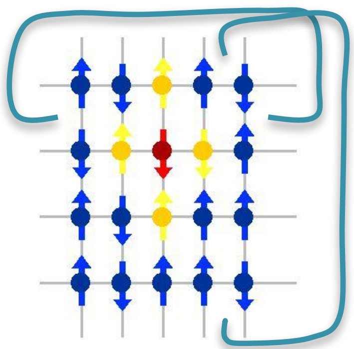
Температур-ный цикл (б/р)

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*)

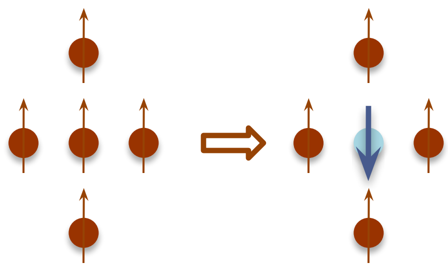
Усреднение величин C, M, E, χ

$C = C/(NMCS - wasteNMCS)/nstep$

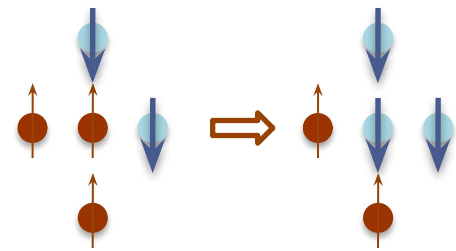
Конец

Вычисление q=exp(-ΔE/kT)

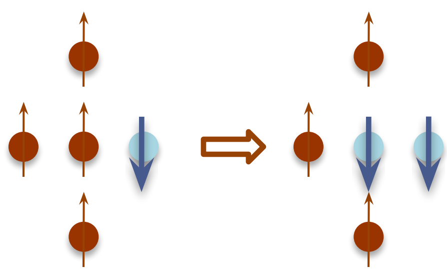
Вычисление *exp* временнозатратно, поэтому *exp* вычисляют 1 раз



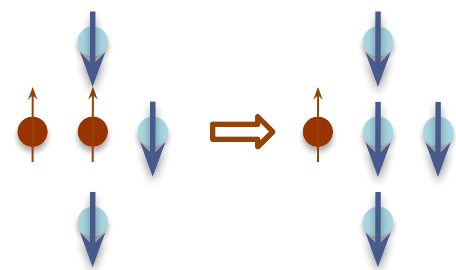
ΔE = 8J



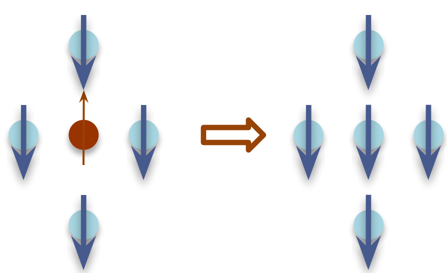
ΔE = 0



ΔE = 4J



ΔE = -4J



ΔE = -8J

Значения сохраняются в локальных переменных и используются в программе

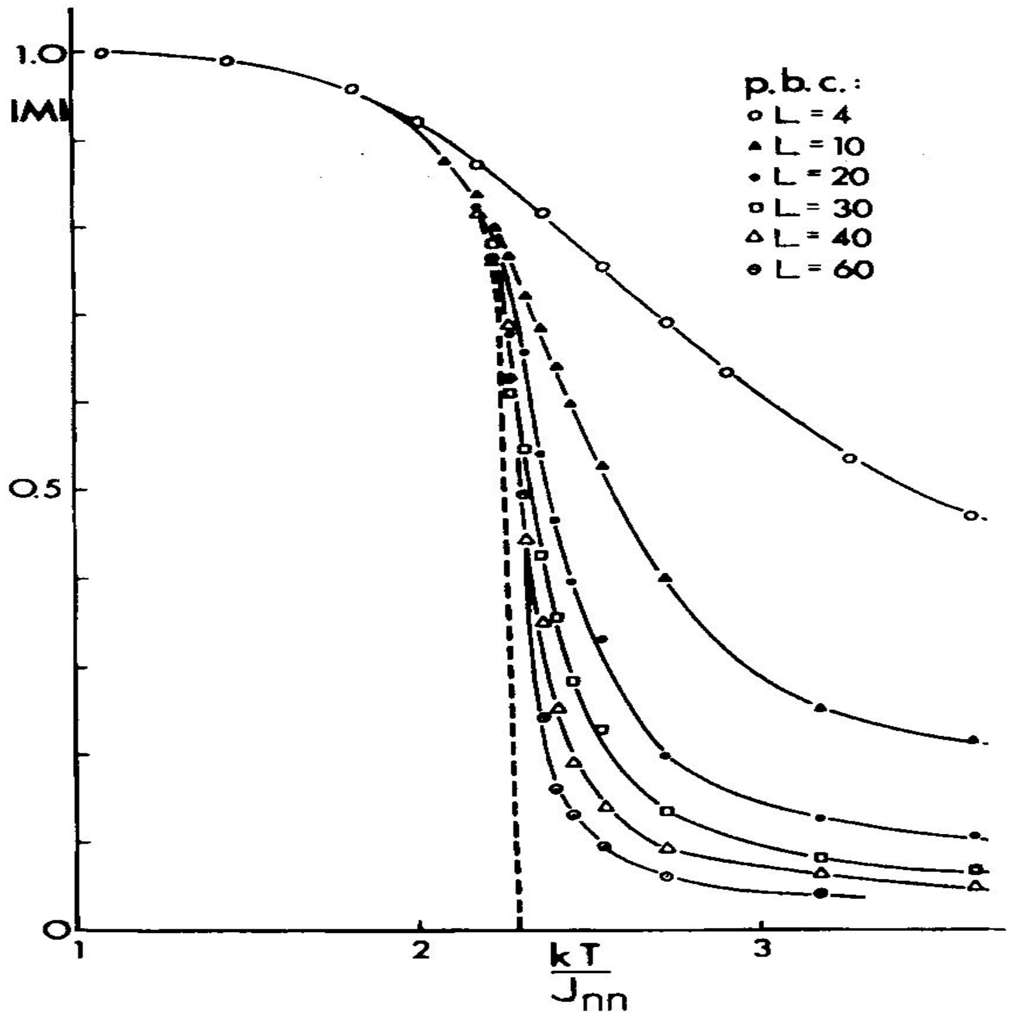
Расчетные величины

- $$C_{mag}(T,H_{ext}) = \frac{1}{k_B T^2}\left[<H^2> - <H>^2\right]$$ - Магнитная теплоемкость
- $$S_{mag}(T,H_{ext}) = \int_{T_1}^{T_2} \frac{C_{mag}(T,H_{ext})}{T} dT$$ - Магнитная энтропия
- $$\chi_{mag}(T,H_{ext}) = \frac{1}{k_B T}\left[<m^2> - <m>^2\right]$$ - 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