

## Модель Ізінга для опису магнітних властивостей речовини

З квантової теорії магнетизму відомо, що орієнтація магнітних моментів не може бути довільною. Якщо спін кожної частинки рівний  $1/2$ , то при накладанні зовнішнього магнітного поля магнітні моменти частинок можуть орієнтуватися лише у двох напрямках: вздовж або проти силових ліній магнітного поля. Для деяких класів речовин суттєвим може бути вплив і сусідніх магнітних моментів: для діа- та парамагнетиків парними взаємодіями з сусідніми частинками можна знехтувати, а для феромагнетиків вплив оточення є важливим і є причиною утворення доменної структури.

Розглянемо модель системи, частинки якої мають спіновий магнітний момент  $\mu = \frac{e\hbar}{2m_e}$  (магнетон Бора).

Якщо на систему накласти магнітне поле з індукцією  $B$ , то магнітні моменти можуть орієнтуватись лише за полем з результируючою намагніченістю  $+\mu_B$  або проти поля (відповідно  $-\mu_B$ ). Тоді енергія взаємодії магнітного моменту  $\mu$  із зовнішнім полем складатиме  $U = -\mu_B B \cos \varphi$ , тобто орієнтація вздовж поля енергетично вигідніша за орієнтацію проти поля на величину  $2\mu_B B$ . Для нашого випадку спін може мати лише дві проекції, тому маємо  $U = \mp \mu_B B$ . При відсутності теплового хаотичного руху всі магнітні моменти, очевидно, повинні орієнтуватися вздовж поля. Підвищення температури призводить до часткової розорієнтації магнітних моментів. Цей процес є стохастичним і тому повинен моделюватись з допомогою генератора випадкових чисел із урахуванням розподілу імовірностей. Імовірність певного стану виражається формулою Больцмана  $p = \frac{1}{C} e^{-\frac{U}{kT}}$ . Оскільки вибір орієнтації у певному напрямку автоматично виключає вибір протилежної орієнтації, то імовірності цих подій додаються, причому їх сума рівна одиниці. З цієї умови нормування і визначається константа  $C$ . Тому при  $\xi = \mu_B \frac{B}{kT}$

– для атомів, магнітні моменти яких орієнтуються за полем:

$$p(\uparrow) = \frac{e^{\xi}}{e^{\xi} + e^{-\xi}}, \quad (1a)$$

– для атомів магнітні моменти яких орієнтуються проти поля:

$$p(\downarrow) = \frac{e^{-\xi}}{e^{\xi} + e^{-\xi}}. \quad (1b)$$

Розглянемо модель системи, що складається з частинок, кожна з яких характеризується двома станами – спіновий момент за полем ( $\uparrow$ ) або спіновий момент проти поля ( $\downarrow$ ). Для спрощення виберемо двовимірний випадок, припустивши, що частинки розташовані у вузлах квадратної плоскої ґратки (рис. 1). Кожен вузол з координатами  $i, j$  має певну ознаку, яка є елементом двовимірного масиву  $S_{i,j}$ .

Позначимо спіновий момент за полем як  $+1$ , а проти поля як  $-1$  (ці ознаки і будуть значеннями елементів масиву  $S$  в алгоритмі **A1**). При цьому результируючу намагніченість системи  $M_p$  у полі з магнітною індукцією  $B$  при температурі  $T$  можна обрахувати за формулою:

$$M_p = (N_1 - N_2) \mu_B, \quad (2)$$

де  $N_1$  і  $N_2$  – кількість частинок, магнітні моменти яких орієнтуються за і проти зовнішнього поля відповідно (див. алгоритм **A2** – позначення спінів дозволяють автоматично враховувати їх внесок у результируючу намагніченість).

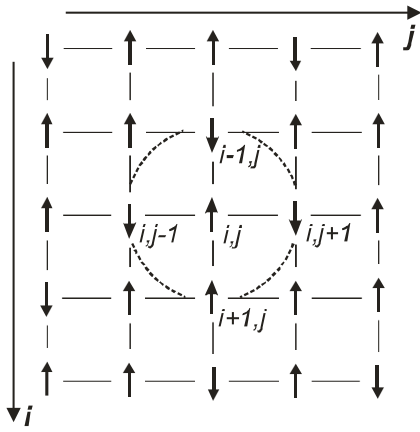


Рис. 1. Двовимірний квадратна ґратка. Пунктиром виділений окіл, що містить найближчих сусідів вузла з координатами  $i, j$

Сусідні частинки можуть впливати одна на одну. Ця взаємодія має чисто квантовий характер (обмінна взаємодія), тому її можна враховувати формально через обмінний інтеграл  $J$ . Тоді для визначення енергії взаємодії двох сусідніх частинок можна ввести наступну залежність:

$$U = \begin{cases} -J, & \text{якщо } \uparrow\uparrow \\ +J & \text{якщо } \uparrow\downarrow \end{cases} \quad (3)$$

У наближенні двох можливих орієнтацій спінових моментів  $+1$  та  $-1$  (відповідно двох напрямів елементарного магнітного моменту) енергія взаємодії частинки з координатами  $(i, j)$  з найближчими чотирма сусідами (перша координаційна сфера, рис. 1) визначається за формулою:

$$U_{i,j}^I = -J \cdot S_{i-1,j} (S_{i-1,j} + S_{i+1,j} + S_{i,j-1} + S_{i,j+1}). \quad (4)$$

Для крайніх частинок з першого та останнього стовпчика та рядка виникає проблема вибору сусідів, тому необхідно використати процедуру граничних умов Борна-Кармана.

Отже, енергія, яку вносить кожна частинка у загальну енергію системи ( $\frac{1}{2}$  виникає через подвійне врахування кожного зв'язку), з урахуванням обмінної взаємодії визначається за формулою:

$$U^I = -\frac{1}{2} J \cdot S_{i,j} (S_{i-1,j} + S_{i+1,j} + S_{i,j-1} + S_{i,j+1}). \quad (5)$$

Відповідно, повна енергія системи є сумою таких взаємодій:

$$U^{full} = \sum_i \sum_j U_{i,j}^I. \quad (6)$$

З формули (3) зрозуміло, що однаково орієнтовані спіни зменшують загальну енергію системи. Намагання системи зменшити загальну енергію повинно призводити до прилаштування спінів до сусідів. Тобто, якщо дозволити спінам перевертатися, то через певну кількість спроб вони „домовляться” про спільний напрям. Зрозуміло, що у залежності від локального початкового розкиду для невеликих областей системи домінуючим може бути той чи інший напрям. Це призводить до утворення доменів (областей з однаковою орієнтацією спінів) та границь між ними (для невеликої системи з періодичними граничними умовами утворюється один або два домени). Імовірність перевертання спіну залежить від енергії конфігурації, яка визначається за формулою (5), і визначається відповідно до (1).

Утворення доменів для системи з урахуванням обмінної взаємодії при заданому початковому розкиді спінів при температурі  $T$  та вектором магнітної індукції  $B$  описано в алгоритмі **A3**. Перехід від одного мікростану системи до іншого, тобто вибір частинки для розігрування зміни орієнтації, здійснюється за методом Монте-Карло – випадковим чином обирається будь-який елемент масиву за допомогою генератора випадкових чисел:

$$\begin{aligned} i &= \text{random}(N) + 1; \\ j &= \text{random}(N) + 1' \end{aligned} \quad (7)$$

де  $N$  – кількість елементів вздовж однієї осі.

Кількість випробувань  $L$  залежить від розміру зразка  $L(N^2) = \text{Steps} \cdot N^2$ . Нагадаємо, що у Монте-Карло методі вводиться поняття Монте-Карло кроку. У моделі Ізінга претендентами на випробування є всі частинки системи –  $N \times N$ . Отже,  $\text{Steps}$  відповідає кількості Монте-Карло кроків. Оскільки частинки вибираються в середньому один раз, то існує можливість вибрати одну частинку декілька разів або не вибрати зовсім. Тому значення  $\text{Steps}$  повинно значно перевищувати одиницю.

Щоб алгоритм зробити автономною програмою для дослідження утворення доменної структури (алгоритм **A4**), необхідно спочатку використати підпрограму **A1**, а потім підпрограму **A3**. Відмітимо, що при  $B = 1$  здійснюється для одиничної магнітної індукції зовнішнього поля, щоб остання не впливала на початковий розкид спінів.

Якщо задавати інший вектор магнітної індукції, то при обрахунку енергії слід враховувати вплив зовнішнього магнітного поля – формула для обрахунку набуде вигляду:

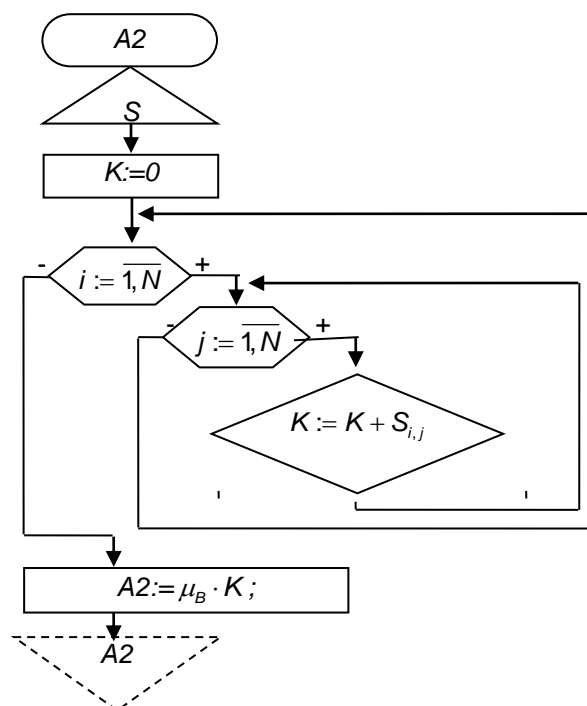
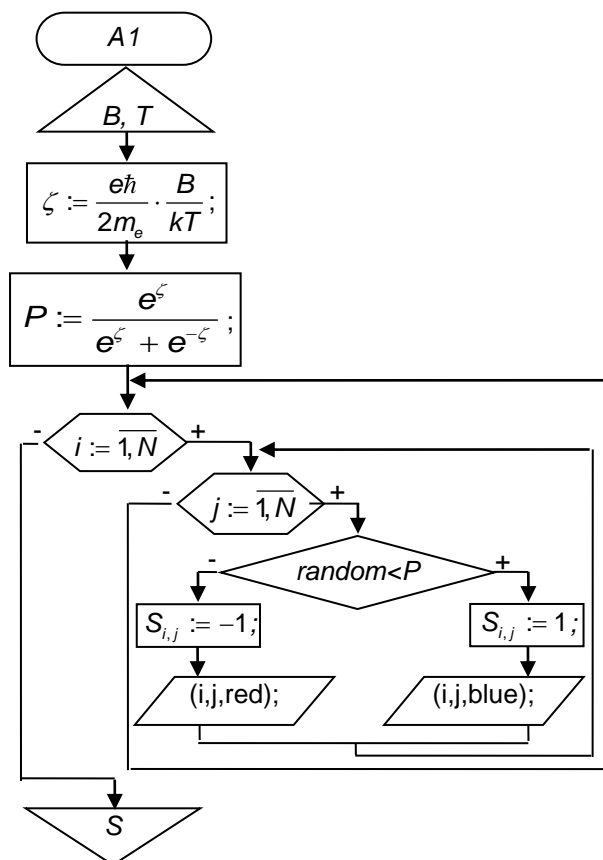
$$U = -\mu_B B \cdot S_{i,j} - \frac{1}{2} J \cdot S_{i,j} (S_{i-1,j} + S_{i+1,j} + S_{i,j-1} + S_{i,j+1}). \quad (7)$$

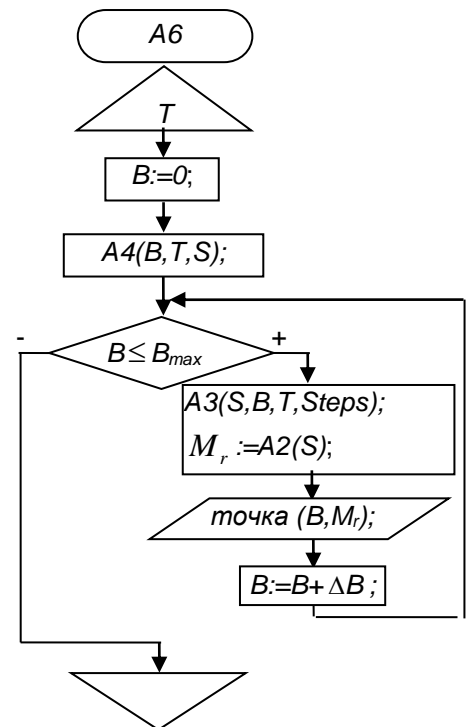
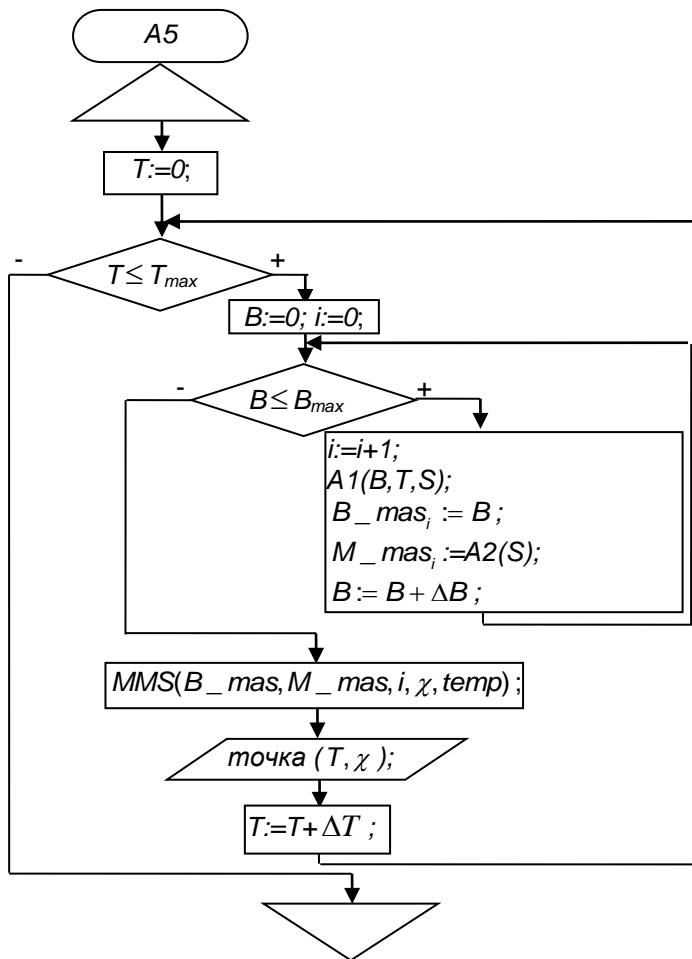
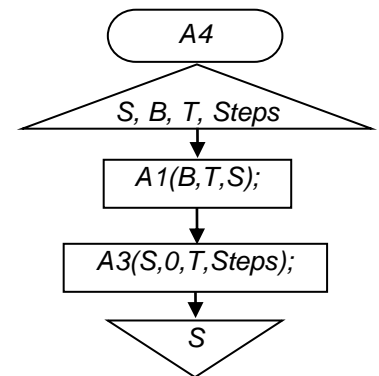
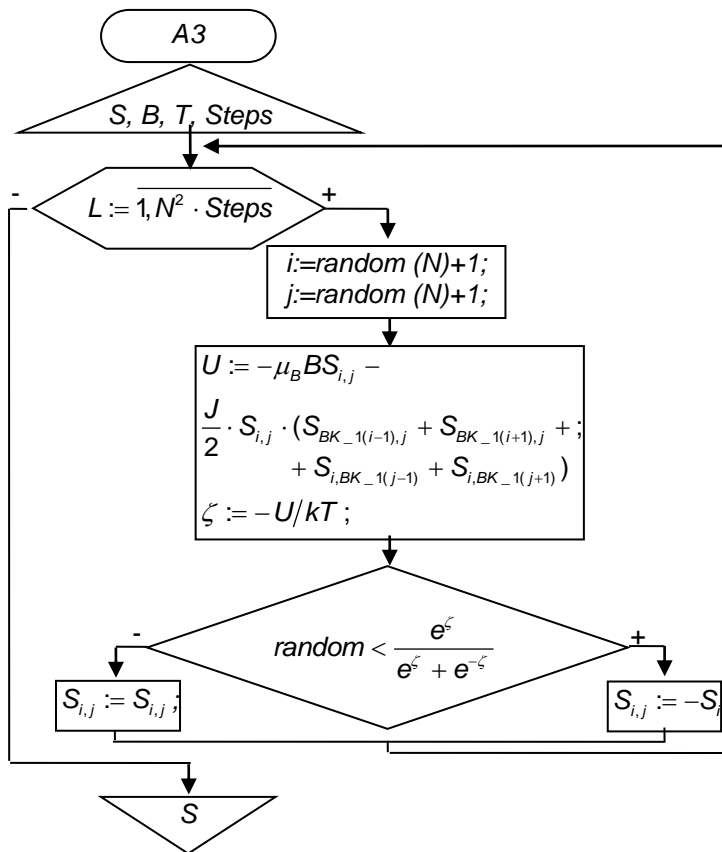
Така модель описує феромагнітні речовини, для яких суттєвим є і вплив зовнішнього магнітного поля, і вплив сусідніх спінів.

Уміючи визначати намагніченість системи, можна перевірити закон Кюрі: для слабких полів магнітна сприйнятливість  $\chi = \frac{M_p \mu_0}{B}$  обернено пропорційно залежить від абсолютної температури. Для цього потрібно для різних температур визначити магнітну сприйнятливість шляхом апроксимації методом найменших квадратів залежності результуючої намагніченості від магнітної індукції для кожної конкретної температури (див. алгоритм **A5**). При високих температурах (вище точки Кюрі) ця взаємодія перестає відігравати істотну роль – і речовина набуває парамагнітних властивостей.

Можна дослідити явище залишкової намагніченості, тобто отримати петлю гістерезису. Для цього потрібно дослідити зміну намагніченості системи, коли індукція зовнішнього поля  $B$  спочатку поступово зростає, а потім зменшується до нуля. При цьому слід обрати параметр  $J$  достатньо великим, щоб забезпечити феромагнітний стан системи (температура нижче точки Кюрі) – в алгоритмі **A6** представлено лише частину петлі від  $B=0$  до  $B=B_{\max}$ . Для отримання повної петлі алгоритм слід повторити у двох наступних циклах, спочатку зменшуючи  $B$  до  $-B_{\max}$ , а потім знову збільшуючи до  $B_{\max}$ .

**Тестовий приклад.**  $J=1e-21$





Підпрограму алгоритму MMS (метод найменших квадратів) можна знайти у лабораторній роботі «Провідність металів»