

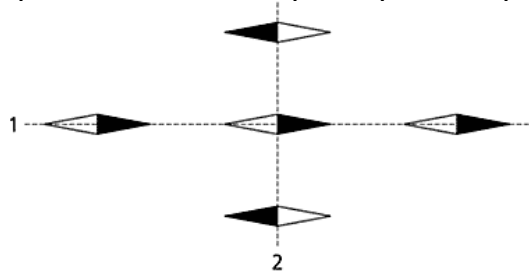
## ПРО МОДЕЛЬ ІЗІНГА

### Теоретичні основи моделі Ізінга

Магнетизм різних тіл пов'язаний з магнітними властивостями атомів, з якого складається дане тіло. Ці властивості, у свою чергу, обумовлені магнітними характеристиками електронів, що входять до складу атомів. Так само як найважливішим пунктом „електричного паспорта” електрона є його електричний заряд, „візитною карткою” його магнітних якостей слугує власний магнітний момент (спін). На відміну від заряду, магнітний момент характеризується не тільки величиною, але й напрямком (тобто є вектором). Звичайно магнітні моменти електронів спрямовані в різні сторони, так що їхня сума (векторна) практично дорівнює нулю. Однак у деяких випадках магнітні моменти значної частини електронів стають паралельними один одному. Тоді й виникає сильний магнетизм, або, як його звичайно називають – феромагнетизм (від лат. *ferrum* – залізо).

Причина такого вибудовування магнітних моментів електронів – їх взаємодія один з одним. Така взаємодія може бути прямим (без усяких „посередників”) і непрямим (через „посередників”, у якості яких можуть виступати інші електрони, вільні або ті, що входять до складу атомів).

До чого приводить пряма взаємодія, можна зрозуміти за допомогою простих експериментів з магнітними стрілками – чутливими елементами приладу для визначення напрямку магнітного поля Землі (компаса). Відносно магнітних властивостей такі стрілки дуже схожі на електрони: вони мають власний магнітний момент (спрямованим уздовж осі стрілки від „південного” полюса до „північного”), орієнтація в просторі якого міняється при обертанні стрілки навколо голки.



*Анізотропна взаємодія магнітних стрілок*

Якщо дві стрілки помістити близько одну біля одної, то їх взаємодія стає дуже сильною і впливом магнітного поля Землі можна знехтувати. Закріпимо одну зі стрілок, наприклад, знявши її з осі й приклеївши до поверхні столу (фіксовану орієнтацію цієї стрілки будемо далі називати виділеним напрямком). На цій поверхні намалюємо дві прямі лінії, що проходять через центр закріпленої стрілки: одну – уздовж виділеного напрямку (лінія 1), а іншу – перпендикулярно йому (лінія 2). Будемо тепер наближати до нерухомої стрілки іншу магнітну стрілку, здатну обертатися навколо голки. Якщо в процесі цього наближення центр другої стрілки увесь час залишається на лінії 1, то (незалежно від початкової орієнтації) ця стрілка рано або пізно стане так, що магнітні моменти обох стрілок будуть паралельними. Якщо ж у процесі наближення другої стрілки її центр увесь час залишається на лінії 2, то вона зрештою орієнтується так, що магнітні моменти обох стрілок стануть антипаралельними. Ці експерименти показують, що на відміну від електричної (кулонівської) взаємодії між електричними зарядами, що залежить тільки від знаків цих зарядів і відстані між ними, пряма взаємодія магнітних моментів залежить ще й від кута з виділеним напрямком.

Уявимо, що магнітні стрілки (які моделюють магнітні моменти електронів) розташовані у вузлах регулярної ґратки. Оскільки взаємодія швидко спадає зі збільшенням відстані, можна обмежитися взаємодією тільки сусідніх магнітних моментів. Відповідно до прийнятого припущення, така взаємодія сприяє вибудовуванню сусідніх магнітних моментів уздовж деякого виділеного напрямку й тим самим знижує енергію системи, вносячи у неї негативний внесок  $-J$ . Навпаки, антипаралельна орієнтація сусідніх моментів енергетично не вигідна й приводить до збільшення енергії на величину  $J$ . Це і є модель Ізінга, у яку, однак, необхідно внести ще один елемент – теплові флуктуації.

Очевидно, що при зроблених припущеннях найменшій енергії системи відповідає стан, у якому всі магнітні стрілки паралельні один одному. Однак уявімо, що стіл, на якому розміщені всі ці стрілки, безладно трясеться (наприклад, під час землетрусу). Ясно, що якщо така тряска стане досить сильною, орієнтаційний порядок серед магнітних моментів стрілок зникне. Дійсні ж магнітні моменти окремих електронів настільки малі, що не мають потреби в землетрусі: для них досить завжди існуючої теплової “тряски” ґратки. Якщо енергія  $\sim k$ , отримана від ґратки, порівняння з енергією взаємодії  $J$ , то в рівноважному стані повної орієнтації магнітних моментів не буде. Навіть невідомо, чи збережеться хоча б переважна орієнтація цих моментів.

Для відповіді на це питання й була запропонована модель, що називають **моделлю Ізінга**. У ній магнітні моменти-спіни, що розташовуються у вузлах регулярної ґратки, можуть бути орієнтовані тільки уздовж (або проти) деякого виділеного напрямку. Ураховується лише взаємодія сусідніх спінів, енергія якого приймає (залежно від їхньої взаємної орієнтації) значення  $\pm J$ .

Концепція мікроскопічної моделі магнітної системи, що складає з елементарних магнітних моментів із двома можливими орієнтаціями „вгору” й „униз”, була запропонована **Вільгельмом Ленцем**. Він уперше використав цю модель для пояснення парамагнітних властивостей твердих тіл. Наприкінці своєї статті він наступними словами сформулював ідею взаємодії: *„Припущення про те, що потенціальна енергія взаємодії атома (елементарного магніту) у феромагнетика з його сусідами в положенні “0” відрізняється від такої в положенні “p”, приводить до висновку про природну орієнтацію атомів і виникненню спонтанної намагніченості... Можна сподіватися, що в такий спосіб вдасться пояснити властивості феромагнетиків”*.

У своїй дисертації Ізінг розглянув окремий випадок лінійного ланцюжка магнітних моментів, зв'язаних взаємодією з найближчими сусідами. Він показав, що спонтанну намагніченість не можна пояснити в рамках такої одновимірної моделі. У статті, написаної за матеріалами дисертації, він помилково узагальнив отриманий результат і на тривимірний випадок.

Найбільш вражаючий успіх моделі Ізінга пов'язаний з дослідженням фазового переходу між феромагнітним і парамагнітним станами. Справжній прорив відбувся, коли різні автори виявили, що проблему можна сформулювати в матричному поданні, у якому властивості системи пов'язані з так званими власними значеннями деякої матриці.

Термін „модель Ізінга” увів, очевидно, Рудольф Пайерлс у своїй статті 1936 року, яка називалася “Про моделі феромагнетизму Ізінга”. Натомість сам Ізінг дивувався щораз, коли в публікаціях згадувалася його ім'я, але будучи людиною скромною, завжди відзначав внесок свого керівника. В одному з листів він писав: *“Я хочу звернути увагу, що ця модель повинна насправді називатися моделлю Ленца-Ізінга. Ідея належала моєму наставникові докторові Вільгельму Ленцу, що запропонував мені досліджувати її математично в моїй дисертації... ”*.



Ернст Ізінг народився 10 травня 1900 р. у Кельні (Німеччина) З 1919 р. Ізінг почав вивчати математику й фізику в Геттингенському університеті, потім продовжив навчання в Бонні й, починаючи з 1922 р. – у Гамбурзі (у 20-і роки минулого століття Гамбург був одним із центрів у розвитку світової фізичної науки, тут займалися дослідженнями багатьох видатних учених).

Під час навчання в Гамбурзі Ізінг познайомився зі своїм ровесником Вольфгангом Паулі (1900-1958), що тільки що почав працювати в тім же університеті на посаді асистента-професора теоретичної фізики. У березні 1924 р. Паулі опублікував статтю, де був сформульований один з найважливіших принципів сучасної теоретичної фізики (в 1945 р. він одержав Нобелівську премію “за відкриття принципу заборони, що називають принципом Паулі”).

У цей же час у Гамбурзі працював Отто Штерн (1888-1969), що став повним професором Гамбурзького університету в 1923 р. і разом з Вальтером Герлахом (1889-1979) проводив свої знамениті експерименти з атомними пучками в неоднорідному магнітному полі. В 1943 р. Отто Штерн був визнаний гідним Нобелівської премії “за внесок у розвиток методу молекулярних пучків і відкриття й вимір магнітного моменту протона”.

Зайнятися теоретичною фізикою запропонував Ізінгу завідувач кафедри теоретичної фізики Гамбурзького університету професор Вільгельм Ленц (1888-1957), помічником якого (з 1922 р.) був Паулі. Під керівництвом Ленца Ізінг в 1922 р. почав досліджувати одну з моделей феромагнетизму, що і стала темою його дисертації, захищеної в липні 1924 р.

У наступні роки Ізінг, переставши займатися науковою роботою, захопився викладанням у відомій школі-інтернаті і, навіть, отримав другу фахову освіту з філософії й педагогіки. У 1934 р. Ізінг знаходить роботу в єврейській школі-інтернаті

в Капут поблизу Потсдама. Ця школа була заснована прогресивним педагогом-теоретиком Гертрудою Файертаг (1890-1943); її ім'я носить зараз одна з вулиць Потсдама); поруч перебував літній будинок Альберта Ейнштейна. Коли Ейнштейн в 1932 р. виїхав у США, школа орендувала цей будинок для додаткових занять. Пізніше Ізінг із задоволенням розповідав, як він купався у ванні Ейнштейна, оскільки в його будинку ванни не було.

Захопленням Ізінга в післявоєнні роки стало викладання. Його учні пам'ятають проведені ним на лекціях ретельні демонстраційні досвіди й властивий лекторові тонкий гумор. Він говорив, що урок не можна вважати успішним, якщо в ході його учні хоча б один раз не розсміялися.

Протягом довгих років Ізінг не приймав ніякої участі в науковому житті й тільки в 1949 р. довідався про широку популярність своєї статті. Він дивувався щораз, коли в публікаціях згадувалася його ім'я, але будучи людиною скромною, завжди відзначав внесок свого керівника. В одному з листів він писав: *“Я хочу звернути увагу, що ця модель повинна насправді називатися моделлю Ленца-Ізінга. Ідея належала моєму наставникові докторові Вільгельму Ленцу, що запропонував мені досліджувати її математично в моїй дисертації...”*.

Ернст Ізінг помер 11 травня 1998 р. у своєму будинку в Пеорії наступного дня після свого 98-го дня народження.

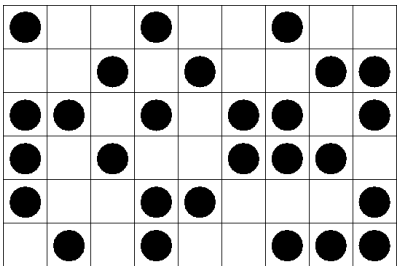
**Інтерпретації моделі Ізінга**

Три види систем можуть бути описані за допомогою моделі, в якій кожен вузол регулярної ґратки може перебувати в одному з двох станів:

- 1) магнетики, коли кожна молекула має спін, який може орієнтуватися за чи проти напрямку зовнішнього магнітного поля;
- 2) суміш двох сортів молекул;
- 3) суміш молекул і дірок (пустих вузлів).

У кожному з цих випадків значення вузлів +1 та -1 визначають стан частинки:

- 1) спін вгору чи вниз;
- 2) сорт молекул А чи В;
- 3) присутня чи відсутня частинка.



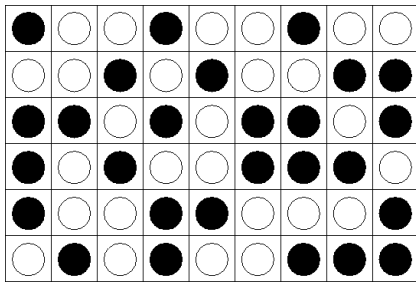
Дійсно, введена для розуміння природи феромагнетизму, модель Ізінга виявилася в центрі різноманітних фізичних теорій, що описують критичні явища у рідинах, розчинах, спінових стеклах, клітинних мембранах, моделюванні імунної системи, різним суспільним явищам тощо. Крім того, ця модель служить полігоном для перевірки методів чисельного моделювання різних фізичних явищ.

*Модель решіткового газу*

Прикладом інтерпретації моделі Ізінга є решітковий газ, у якому стан комірки визначається ознакою „зайнято/пусто”.

*Відповідність між ізінгівським магнетиком і решітковим газом*

Магнетик Ізінга	Газ на ґратах
Канонічний ансамбль	Великий канонічний ансамбль
Взаємодія (константа зв'язку) $J$	Енергія взаємодії $\epsilon$
Зовнішнє поле $H$	Хімпотенціал $\mu$
Намагніченість $M$	Щільність $\rho$
Вільна енергія $A$	$\Omega$ -потенціал
Сприйнятливості $\chi$	Стискальність $\alpha$
Ізотропна фаза	Суперкритична рідина
Анізотропна фаза	Рідина або газ
Точка Кюрі	Критична точка



Модель бінарного сплаву.

Іншим прикладом інтерпретації моделі Ізінга є бінарний сплав, у якому стан комірки визначається ознакою „біла куля/чорна куля”.

*Аналогія між ізінговским магнетиком і бінарним розчином*

Магнетик Ізінга	Бінарний розчин
Канонічний ансамбль	"Напіввеликий" ансамбль
Взаємодія (константа зв'язку) $J$	Енергія взаємодії $2\epsilon$
Зовнішнє поле $H$	Різниця хімпотенціалів компонент $\Delta\mu$
Намагніченність	Composition $\Delta\phi$
Розупорядкована фаза	Фаза розчину
Упорядкована фаза	Фаза розшаровування речовин А и В
Точка Кюрі	Критична точка розшаровування

Якщо вважати що кожен вузол ґратки має декілька станів, то можна описати багатоконпонентну систему, модель Потса для росту зерен, вакансійну дифузію у сплаві тощо.

### **Використання моделі Ізінга для моделювання бінарного сплаву та вакансійного механізму дифузії**

Механізм перевертання спіну є ефективнішим, оскільки завжди „готовий забезпечити систему необхідним матеріалом” (потрібною орієнтацією спіна). Але в такому випадку не забезпечує збереження речовини. Тому для моделі бінарного сплаву (фіксований концентраційний склад) та для моделі дифузії за вакансійним механізмом (фіксована концентрація вакансій) механізм перевертання спіну не годиться. У цьому випадку в нагоді стає обмінний механізм. Відразу зазначимо, що обмінний механізм не годиться для моделі у зовнішньому полі, оскільки, коли відсутня можливість зміну стану вузла, то доданок, що враховує зовнішнє поле, на зміну енергії системи не впливає.

Обмінний механізм можна реалізувати у двох режимах:

- режим „упорядкування/розпад сплаву” – випадковим чином вибираються два сусідні вузли, визначається зміна енергії у результаті їх обміну та згідно з розподілом Больцмана обирається імовірний мікростан (приймається обмін або не приймається);
- режим „вакансійний механізм дифузії” – вводиться третій сорт вузлів (вакансії, для спрощення розглядаємо одну вакансію), на кожному ітераційному кроці випадковим чином вибирається сусід вакансії, визначається зміна енергії у результаті їх обміну та згідно з розподілом Больцмана обирається імовірний мікростан (приймається обмін або не приймається).

Для опису міжатомної взаємодії (замість магнетона Бора) використовується наближення моделі регулярних розчинів і вводяться потенціали парної взаємодії як константи для можливих пар атомів:

для упорядкування

$$F_{AA} = -kT, F_{BB} = -kT, F_{AB} = -5kT;$$

для розпаду

$$F_{AA} = -5kT, F_{BB} = -5kT, F_{AB} = -kT.$$