Vysoká škola chemicko-technologická, Praha
Fakulta chemického inženýrství
Ústav fyzikální chemie (403)

Isingův model ve 3D

P02-ISING

Jakub Vencel

Semestrální práce
Počítačová chemie (B403011)

Praha 2026
vedoucí práce: prof. RNDr. Jiří Kolafa, CSc.

1 Úvod

1.1 Isingův model

Předpokládejme kubickou mřížku $\mathbb{Z}^3$ o velikosti $L \times L \times L$. V takové mřížce se nachází $N = L^3$ prvků, které mají spin $\sigma = \{-1; +1\}$ (Viswanathan et al., 2022). Pro tuto mřížku můžeme definovat Hemiltonián $H(\sigma)$ (platí pro případ, kdy je nulové vnější magnetické pole)

$$H(\sigma) = -J \sum_{<ij>} (\sigma_i \sigma_j), \tag{1}$$

kde J je interakční energie, která nabývá hodnot $J > 0$ pro feromagnety a $J < 0$ pro antiferomagnety.

Pro feromagnetické látky musí platit, že konfigurace spinů je taková, aby vznikl nenulový magnetický moment M, který lze vypočítat jako součet všech spinů v mřížce

$$M(\sigma) = \sum_{i=1}^{N} \sigma_i. \tag{2}$$

Obdobně lze vypočítat energii spinové konfigurace mřížky E (Fitzpatrick, 2006)

$$e_i = -\frac{J}{2} \sum_{<ij>} (\sigma_i \sigma_j), \tag{3}$$

$$E(\sigma) = \sum_{i=1}^{N} e_i. \tag{4}$$

Spiny v mřížce mají uspořádání dané Boltzmannovou distribucí (University of Cambridge, 2024)

$$p(\boldsymbol{\sigma}|T) = \exp\left(\frac{E(\sigma)}{\mathbf{k_B} T}\right), \tag{5}$$

kde $\mathbf{k_B}$ je Boltzmannova konstanta a T je teplota. Do kritické teploty T_c (někdy zvané i jako Curieova teplota) jsou spiny v dostatečném uspořádání, aby magnetický moment $M(\sigma)$ měl nenulovou hodnotu. V T_c dochází k fázové přeměně druhého druhu a v teplotách $T > T_c$ se moment ztrácí (Hasenbusch et al., 1998). Pro 3D Isingův model byla inverzní kritická teplota numericky vypočtena s výsledkem $\beta_c = (0{,}221\,659\,5 \pm 0{,}000\,002\,6)\,\mathrm{K}^{-1}$ (Ferrenberg et al., 1991).

1.2 Monte Carlo

Jelikož neexistuje analytické řešení Isingova modelu pro 3D mřížku, přichází na pomoc numerická simulace Monte Carlo (MC simulace).

1.2.1 Ukázka důkazu MC

1.2.2 Okrajové podmínky

1.2.3 Typy algoritmů

2 Program

2.1 Simulace

2.2 Uživatelské rozhraní

3 Výsledky

3.1 Konstantní teplota

3.2 Teplotní cykly

3.3 Antiferomagnet

3.4 Hystereze – vliv počátečních podmínek na průběh simulace

Obsah

Reference

FERRENBERG, Alan M.; LANDAU, D. P., 1991. Critical behavior of the three-dimensional Ising model: A high-resolution Monte Carlo study. *Phys. Rev. B*. Roč. 44, s. 5081–5091. Dostupné z DOI: `10.1103/PhysRevB.44.5081`.

FITZPATRICK, Richard, 2006. *Computational Physics: The Ising Model* [`https://farside.ph.utexas.edu/teaching/329/lectures/node105.html`].

HASENBUSCH, M; PINN, K, 1998. , , , and from 3D Ising energy and specific heat. *Journal of Physics A: Mathematical and General*. Roč. 31, č. 29, s. 6157. Dostupné z DOI: `10.1088/0305-4470/31/29/007`.

UNIVERSITY OF CAMBRIDGE, 2024. *Computational Projects, Part II: 11.2 The Ising Model*. Tech. zpr. Faculty of Mathematics. Dostupné také z: `https://www.maths.cam.ac.uk/undergrad/catam/II/11pt2.pdf`. Mathematical Tripos, Undergraduate Manual.

VISWANATHAN, Gandhimohan M.; PORTILLO, Marco Aurelio G.; RAPOSO, Ernesto P.; LUZ, Marcos G. E. da, 2022. What Does It Take to Solve the 3D Ising Model? Minimal Necessary Conditions for a Valid Solution. *Entropy*. Roč. 24, č. 11. ISSN 1099-4300. Dostupné z DOI: `10.3390/e24111665`.