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

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

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

Monte Carlo simulace (MC simulace) je blablabla

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.

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.