

# Ising modell: termodinamika

Kormányos Andor

Komplex Rendszerek Fizikája Tanszék

2022 november 29.

**Megfigyelés:** ha növeljük a külső hőmérsékletet, a minta mágnesezettsége csökken és a  $T_c$  Curie hőmérséklet felett eltűnik

Mit lehet megérteni az Ising modell segítségével?

- az 1D Ising lánc alkalmas bizonyos termodinamikai mennyiségek viselkedésének tanulmányozására, mint pl belső energia vagy hőkapacitás
- de nem alkalmas a hőmérséklet növelése miatt bekövetkező fázisátalakulás szimulálására
- a 2D és 3D Ising modell már alkalmas a hőmérséklet növelése miatt bekövetkező fázisátalakulás szimulálására

Feltevések:

- a tanulmányozott rendszer hőmérséklete, térfogata, részecskeszáma állandó
- de ezen belül különböző  $|\alpha_j\rangle$  állapotok lehetségesek

Termodinamikai egyensúly:

- a rendszer teljes energiája egy átlagos érték körül fluktuál a környezettel való energiacsere miatt

- a vizsgált rendszer energiát tud cserélni a környezetével
- ezért egy bizonyos  $P(E_{\alpha_j}, T)$  valószínűséggel találjuk az  $E_{\alpha_j}$  energiájú  $|\alpha_j\rangle$  állapotban

Ezt  $P(E_{\alpha_j}, T)$  valószínűséget az ún Boltzmann eloszlás adja meg:

$$P(E_{\alpha_j}, T) = \frac{e^{-E_{\alpha_j}/k_B T}}{Z(T)}, \quad Z(T) = \sum_{\alpha_j} e^{-E_{\alpha_j}/k_B T}$$

- $k_B$  az ún Boltzmann állandó
- $T$  hőmérséklet
- $Z(T)$  ún partíciós függvény
  - ez egy normálási faktor
  - látható, hogy  $\sum_{\alpha_j} P(E_{\alpha_j}, T) = 1$
  - általában nehéz számolni, de az általunk tekintett problémában nem lesz rá explicit szükség

Mit jelent ez?

- a rendszer egy adott  $T$  hőmérsékleten nem biztos, hogy minden pillanatban a legalacsonyabb energiájú állapotban van
- de a magasabb energiájú állapotok előfordulásának valószínűsége kisebb
- a  $T \rightarrow 0$  esetben csak a legalacsonyabb energiájú állapot fog előfordulni
- a rendszer teljes energiája egy hőmérséklettől függő egyensúlyi energia körül fluktuál