

# Ising modell: bevezetés

Kormányos Andor

Komplex Rendszerek Fizikája Tanszék

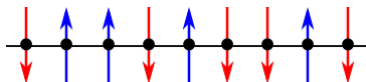
2023 november 28.

- eredetileg a ferromágneses anyagok leírásának egyszerű modelljeként vezették be
- ezek egy anyagspecifikus  $T_c$  Curie hőmérséklet alatt véges mágnesezettséggel rendelkeznek
- de ha növeljük a külső hőmérsékletet, a minta mágnesezettsége csökken és a  $T_c$  felett eltűnik → **fázisátalakulás**

## Általánosabban:

- az Ising modell segítségével sok mindent meg lehet érteni a fázisátalakulásokkal kapcsolatban
- sőt, újabban a kvantumozás számítástechnika egyes eljárásai is ezen alapulnak (pl. adiabatic quantum computing)

Az Ising modell legegyszerűbb változata az egydimenziós Ising lánc:



**Figure:** Ising lánc. Dipól mágneseket rögzítünk egyenlő távolságra egymástól, melyek két különböző irányba mutathatnak.

- dipólmágneseket rögzítünk egyenlő távolságban egy vonal mentén
- ezeket a továbbiakban **spin**-eknek nevezzük
- elmozdulni nem tudnak, legfeljebb az irányuk fordulhat át

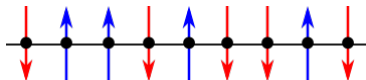


Figure: Ising lánc

Jelölések, konvenciók:

- az  $i$ -ik helyen levő spint  $s_i$ -vel jelöljük, ami felfelé vagy lefelé mutathat:  
 $s_i = \pm 1$
- mivel minden  $s_i$  két állapotban lehet, egy  $N$  hosszú lánc lehetséges állapotainak száma  $2^N$
- $|\alpha_j\rangle$ -vel jelöljük az egy konkrét  $\{s_1, s_2, \dots, s_N\}$  spinsorozattal adott állapotot:

$$|\alpha_j\rangle = |s_1, s_2, \dots, s_N\rangle \quad j = 1, 2, \dots, 2^N$$

- az egyes spinek kölcsönhatnak egymással az ún. dipól-dipól kölcsönhatás által
- az egyes spinek energiája függ az irányuktól:

$$E_i = -J(s_i \cdot s_{i+1}) - g\mu_B(s_i \cdot B_z)$$

- $J$ : kicserélődési energia
  - ha  $J > 0$ : parallel spin beállítás energiája alacsonyabb  $\rightarrow$  mint a ferromágnes anyagokban
  - ha  $J < 0$ : antiparallel spin beállítás energiája alacsonyabb  $\rightarrow$  mint az antiferromágnesekben
- $B_z$ : külső mágneses tér,  $g$ ,  $\mu_B$  konstansok

- az egyes spinek kölcsönhatnak egymással az ún. dipól-dipól kölcsönhatás által
- az egyes spinek energiája függ az irányuktól:

$$E_i = -J(s_i \cdot s_{i+1}) - g\mu_B(s_i \cdot B_z)$$

- $J$ : kicserélődési energia
  - ha  $J > 0$ : parallel spin beállítás energiája alacsonyabb  $\rightarrow$  mint a ferromágnes anyagokban
  - ha  $J < 0$ : antiparallel spin beállítás energiája alacsonyabb  $\rightarrow$  mint az antiferromágnesekben
- $B_z$ : külső mágneses tér,  $g$ ,  $\mu_B$  konstansok

Teljes energia egy  $|\alpha_j\rangle$  állapotban:

$$E_{\alpha_j} = -J \sum_{i=1}^{N-1} s_i s_{i+1} |_{\alpha_j} - g\mu_B B_z \sum_{i=1}^N s_i |_{\alpha_j}$$

## Általánosítási lehetőség:

- távolabbi szomszédok közötti kölcsönhatás
- kétdimenziós, háromdimenziós rendszer

## PI 2D Ising rács:

- a spinek egy  $N = L \times L$  rács pontjaiban ülnek
- legegyszerűbb eset: most is csak a legközelebbi szomszédok hatnak kölcsön
- adott  $|\alpha_j\rangle$  állapot energiája:

$$E_{\alpha_j} = -J \sum_{\langle i,k \rangle} s_i s_k |_{\alpha_j} - g \mu_B B_z \sum_{i=1}^N s_i |_{\alpha_j}$$

- $\langle i, k \rangle$ : összegzés legközelebbi szomszédokra

## 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