

Tiia Monto  
tiia.monto@jyu.fi  
0407521856

Työ tehty: 19.12.2008

# Fysp240/1 Ising-malli (lyhyt raportti)

Assistentti:

Arvostellaan (joko hyväksytty tai hylätty)

Työ jätetty:

## **Abstract**

I simulated paramagnet, ferromagnet and antiferromagnet in a  $20 \times 20$  spin lattice with a Matlab program. These simulations demonstrated spins' behaviour in different temperatures and magnet fields. It became apparent that entropy grew when a temperature was increased. In these simulation I simulated a hysteresis phenomenon too by changing magnetig field in a lattice near to critical temperature.

# 1 Johdanto

Ising-mallin keksi Wilhelm Lenz, mutta ensimmäisen kerran sen julkaisi Ernest Ising. Ising-mallin [1] ideana on tarkastella spin-hilaa. Suosituin tapa käyttää ising-mallia on simuloida sillä kaksiulotteista ferromagneettista spin-hilaa, jossa jokaisella spinillä on kaksi mahdollista tilaa: ”ylös” ja ”alas”. Spin-hilassa spinit vaikuttavat myös naapurispinien tilaan.

## 2 Teoreettiset lähtökohdat

Ising-mallissa spin-hilan kokonaisenergia mikrotilassa  $r$  määritellään yhtälöllä

$$E_r^{tot} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i^{(r)} S_j^{(r)} - \mu B \sum_{i=1}^N S_i^{(r)}, \quad (1)$$

missä  $N$  on spinien lukumäärä,  $\mu = -9,284764 * 10^{-24} \frac{J}{T}$  ominaismagneettidipoli ja  $S_i^{(r)}$  spinin  $i$  suunta. Yhtälössä lasketaan jokainen lähinaapuripari  $S_i^{(r)} S_j^{(r)}$  kerran.  $J$  on kytkentävakio. Jos  $J = 0$ , niin kyseessä on paramagneetti, spinit eivät siis vuorovaikuta. Jos  $J > 0$ , niin vuorovaikutus on ferromagneettista: spinit pyrkivät osoittamaan samaan suuntaan kuin naapurispin. Jos  $J < 0$ , niin vuorovaikutus on antiferromagneettista: spinit pyrkivät osoittamaan päinvastaiseen suuntaan kuin naapurinsa.

### 2.1 Ideaalinen paramagneetti

Kun  $J = 0$ , niin yhtälön 1 termi  $-J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i^{(r)} S_j^{(r)}$  saa arvon nolla, jolloin kokonaisenergia on muotoa

$$E_r^{tot} = -\mu B \sum_{i=1}^N S_i^{(r)}. \quad (2)$$

Tällöin magneettinen momentti lämpötilan  $T$  suhteen on

$$M = \mu \tanh\left(\frac{\mu B}{k_B T}\right). \quad (3)$$

Ja spiniä kohti oleva energia on

$$E = \frac{E_{tot}}{N} = -\mu B \tanh\left(\frac{\mu B}{k_B T}\right) = -MB. \quad (4)$$

## 2.2 Ferro- ja antiferromagneetti

Kun kyseessä on ferro- tai antiferromagneetti, eli  $J$  saa nollasta poikkeavan arvon, ei voida käyttää yhtälöitä 2-4.

Termodynaamisissa systeemeissä voidaan laskea suureen  $A$  keskiarvo yhtälöillä

$$\langle A \rangle = \frac{1}{Z} \sum_r A_r e^{\frac{-E_r^{tot}}{k_B T}}; \quad Z = \sum_r e^{\frac{-E_r^{tot}}{k_B T}}. \quad (5)$$

Mutta systeemin, jossa on  $20^2$  hilapaikkaa, tietyn suureen keskiarvon laskeminen eo. yhtälöillä tulisi turhan raskaaksi, pitäisi laskea erikseen 400 eri arvoa termille  $e^{\frac{-E_r^{tot}}{k_B T}}$ . Tällaisessa tilanteessa käytämme Monte Carlo -simulointia [2]. Eräs Monte Carlon menetelmistä on Metropolis-algoritmi, joka määrää, miten spinin tila muuttuu systeemin tilan muuttuessa. Tämä voidaan siis suorittaa Matlab-ohjelmalla [3].

Kun lämpötila ylittää kriittisen lämpötilan  $T_c$ , aine ei enää magnetisoidu spontaanisti. Kriittisen lämpötilan määrittämiseksi voidaan käyttää yhtälöä

$$\sinh\left(\frac{2J}{k_B T_c}\right) = 1; \quad T_c \approx 2,2692 \frac{J}{k_B}. \quad (6)$$

## 3 Mittauslaitteisto ja kokeelliset menetelmät

Työssä käytin Matlab 7.6.0 -ohjelmistoa ja valmiiksi saatuja Matlab-tiedostoja [4]. Aluksi testasin ohjelman toimivuuden antamalla ohjelmalle komennolla `ising(1.0,20,100,30,0.1,0.1,50,0,0,1,1,0,1)` ja totesin ohjelman toimivan niin kuin pitikin, sain kuvan hilasysteemistä.

Ensimmäinen varsinainen tehtävä oli tarkastella ideaalista paramagneettia  $J = 0$ . Piirsin Matlabilla kuvaajat magneettisesta momentista funktion 3 mukaisesti (kuva 1) ja energiasta spiniä kohti funktion 4 mukaisesti (kuva 2). Muuttujana käytin  $x = \frac{\mu B}{k_B T}$ , jossa  $x$  muuttui välillä 0...4.

Seuraavaksi määräsin hilasysteemin ferromagneettiseksi laittamalla  $J$ :n arvoksi 1 ja magneettikentän laitoin nolaksi  $B = 0$ . Matlab-ohjelmalla laskin magneettisen momentin itseisarvon  $|M|$  muuttujan  $y = \frac{k_B T}{J}$  funktiona ja piirsin Matlabilla kuvaajan 3. Koska ohjelmaan on asetettu arvot  $k_B = 1$  ja  $J = 1$ , niin voidaan merkitä muuttujaksi  $y = \frac{T}{J}$ , kuten kuvassakin vaaka-akselilla lukee.

Sitten määritin ferromagneettiselle hilalle magneettikentän nolaa suuremmaksi  $B > 0$ . Ajoin Matlabilla `ising.m`-tiedoston arvoilla  $J = 1$  ja  $B = 1$  sekä  $B = 2$ . Plottasin Matlabilla magneettisten momenttien kuvaajat, kuten edellä,  $\frac{T}{J}$ :n funktiona ja yhdistin kuvaajat, kuten kuvasta 4 näkee.

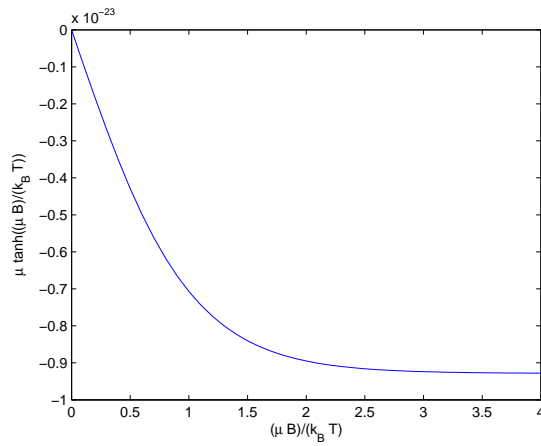
Antiferromagneettista hilaa simuloitin Ising-ohjelmalla määrittelemällä  $J = -1$  ja  $B = 0$ . Tällä kertaa ajoin ohjelman useasti eri lämpötiloilla tallentaen hilatilojen kuvat 5-10 eri

lämpötiloissa.

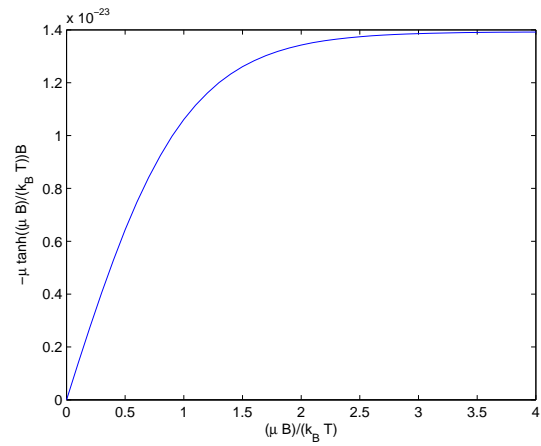
Viimeisimmäksi simuloin hysteresis-ilmiötä. Valitsin lämpötilan arvoksi  $T = 2$  ja kytkentävakioksi  $J = 1$  ja piirsin Matlabilla magneettisen momentin  $M$  kuvaajan magneettikentän  $B$  funktiona. Ensiksi ajoin ohjelman siten, että  $B$  menee arvosta  $-1$  arvoon  $1$ , sitten ajoin  $B$ :n liikkussa arvosta  $1$  arvoon  $-1$  ja lopuksi ajoin siten, että  $B$  liikkui  $0$ :sta  $1$ :een.

## 4 Havainnot ja laskut

### 4.1 Ideaalinen paramagneetti



Kuva 1: Magneettinen momentti



Kuva 2: Energia spiniä kohti

Ideaalisen paramagneetin tapauksessa näytti siltä, että lämpötilan kasvaessa magneettinen momentti laskee ja energia spiniä kohti suurenee. Eli mitä suurempi lämpötila, sitä vähemmän systeemissä on järjestäytymistä, siis sitä satunnaisemmin hilan spinit asetautuvat.

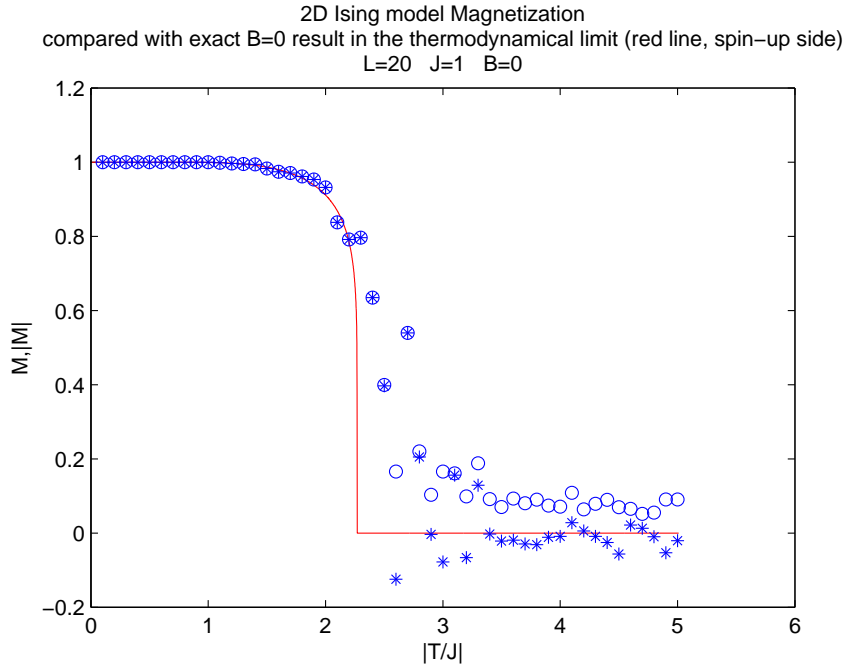
### 4.2 Ferromagneetti, $B = 0$

Kun lämpötila ylittää kriittisen lämpötilan  $T_c$ , niin magneettinen momentti laskee yht'äkkiä nopeasti alas ja saa lähes nollaa olevia hajanaisia arvoja, kuten kuvasta 3 näkyy, tällöin spinit ovat epäjärjestäytyneet. Magneettisen momentin pysyessä arvossa 1 hilan spinit ovat järjestäytyneet.

Kuvasta 3 voidaan määritellä silmämääräisesti kriittiseksi lämpötilaksi  $T_c$  noin  $2,2$  K. Teoreettisen arvon tälle voidaan laskea yhtälön 7 mukaan ja huomataan, että arvioitu arvo  $T_c$ :lle on hieman teoreettista arvoa pienempi.

$$T_c \approx 2,2692 \frac{J}{k_B} = 2,2692 K. \quad (7)$$

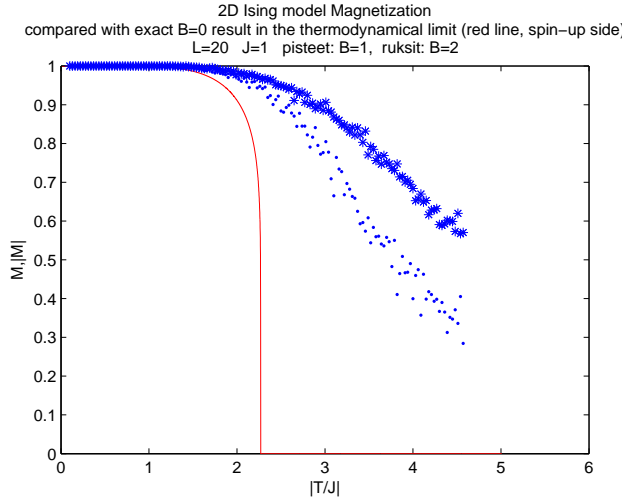
Raudan kriittinen lämpötila on  $T_c = 1043$  K [5, sivu 697]. Tällöin voidaan saada raudan  $J$ :n arvo yhtälöllä 6 seuraavasti:



Kuva 3: Magneettisen momentin itseisarvo

$$T_c \approx 2,2692 \frac{J}{k_B} \Rightarrow J \approx \frac{T_c}{2,2692} = \frac{1043}{2,2692} eV \approx 459,6 eV \quad (8)$$

### 4.3 Ferromagneetti, $B > 0$

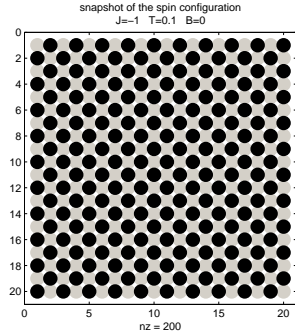


Kuva 4: Magneettinen momentti, kun  $B = 1$  ja kun  $B = 2$

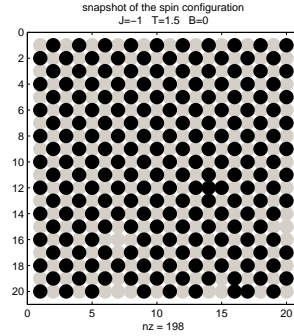
Kuvaajat näyttävät loivemmilta kuin aikaisemmassa tapauksessa (kuva 3), jossa magneettikentän arvo oli nolla. Kriittiseksi lämpötilaksi tässä tapauksessa silmämääräisesti määrittelin  $T_c = 2,4$  K, kun  $B = 1$  ja  $T_c = 2,5$  K, kun  $B = 2$ . Lämpötilan ylitettyä tämä määrittelemäni kriittinen lämpötila magneettiset momentin arvot eivät ole lähellä nollaa ja hajanaisia toisistaan, kuten aikaisemmassa tapauksessa, vaan ne pienenevät hitaammin lämpötilnan muutoksen suhteen.

## 4.4 Antiferromagneetti, $B = 0$

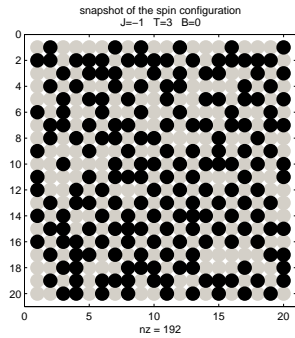
Antiferromagneettitapauksessa hilakuviot tuntuivat muuttuvan nopeammin pienillä lämpötiloilla, kuten kuvista 5-10 ilmenee. Pienimmällä lämpötilalla  $T = 0,1$  K hilassa oli symmetrisesti joka toinen spin eri suuntaan siten, ettei yhdenkaan spinin suunta ollut sama kuin lähinaapurin. Jo muutaman kelvinin lämpötilassa spinit alkoivat sekottua ja ”shakkiruudukko”-kuvio hilassa hävitä. Tämä ilmiö johtuu kriittisen lämpötilan ylittymisestä.



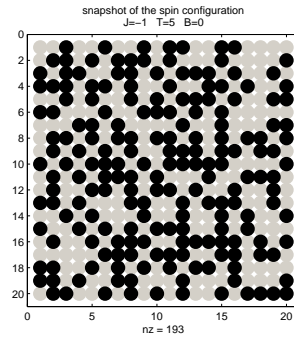
Kuva 5: Hilasynteesin tila, kun  $T=0,1$ K



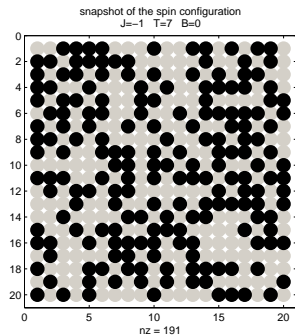
Kuva 6: Hilasynteesin tila, kun  $T=1,5$ K



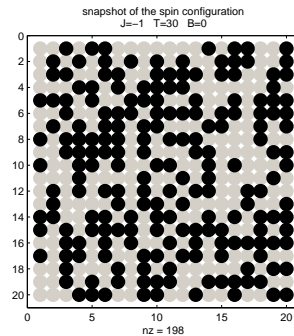
Kuva 7: Hilasynteesin tila, kun  $T=3$ K



Kuva 8: Hilasynteesin tila, kun  $T=5$ K

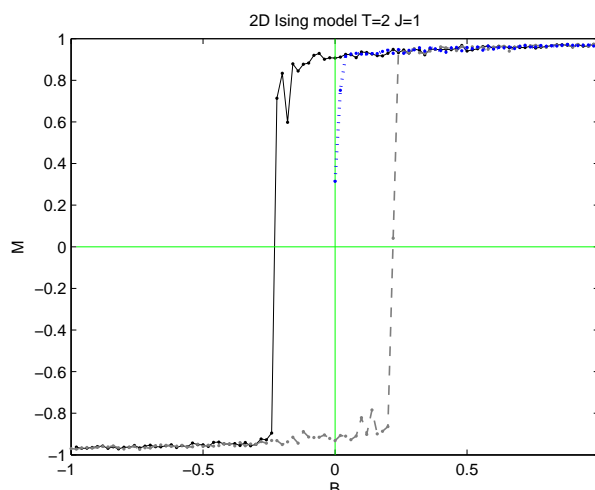


Kuva 9: Hilasynteesin tila, kun  $T=7$ K



Kuva 10: Hilasynteesin tila, kun  $T=30$ K

## 4.5 Hysteresis



Kuva 11: Hysteresis-ilmiö. Katkeamaton viiva:  $B: 1 \rightarrow -1$ , katkoviiva:  $B: -1 \rightarrow 1$  ja pisteviiva:  $B: 0 \rightarrow 1$ .

Tässä simulaatiossa katsoin, miten  $M(B)$ -funktio käyttäytyy, kun magneettikenttää  $B$  kasvattaa ja laskee välillä  $-1 \dots 1$ . Kuten kuvassa 11 ilmenee, nostamalla magneettikentän arvoa välillä  $-1 \dots 1$ , niin magneettinen momentti ylitti nollapisteensä, kun  $B \approx 0,2$  ja välillä  $1 \dots -1$  magneettisen momentin arvo ylitti nollakohtansa jo, kun  $B \approx -0,2$ . Tämä johtuu hysteresis-ilmiöstä [6].

Hysteresis-ilmiö voidaan nähdä niillä lämpötilan arvoilla, jotka ovat lähellä kriittistä lämpötilaa  $T_c$ . Hysteresis-ilmiössä epäreversibelissä prosessissa reaktio kulkee pisteestä A pisteeseen B eri reittiä. Esimerkiksi superjähdytetty neste kiinteytyy jähdytettäessä alemmassa lämpötilassa kuin missä kiinteä neste sulaa, mikä sotii arkijärkeä vastaan.

Hysteresis on jäännemagnetismista. Kun esimerkiksi rauta tuodaan magneettikenttään, sen spinit alkavat osoittamaan kaikki samaan suuntaan. Rauta pysyy magnetoituneena, vaikka se otetaan pois ulkoisesta magneettikentästä. Spinin kääntyvät eri suuntaan vasta, kun joutuvat vastakkaisen suuntaiseen magneettikenttään.

## 5 Johtopäätökset

Järjestelmät pyrkivät minimoimaan Helmholtzin vapaan energian  $F = E - TS$ , missä  $S$  on entropia. Lämpötilan kasvaessa entropia alkaa suurentua. Tämä näkyy ideaalisessa paramagneetissa ja ferromagneetissa siten, että lämpötilan suurentuessa spinien magnetoituma pienenee. Antiferromagneetissa ilmiö näkyy suoraan kuvissa 5-6: mitä suurempi lämpötila, sitä enemmän spinit ovat sekoittuneet ja sitä enemmän siis myös entropia on kasvanut.

Isingmalli on oivallinen väline kuvaamaan systeemeitä, joissa on jaksollisuutta, kuten spinihilaa, jossa on hilakuvioissa toistoa. Tämä malli ei kuitenkaan sovellu imitoimaan äärettömän systeemin sellaisia ominaisuuksia, joilla ei ole jaksollisuutta.

Isingmallissa ja muissa fysikaalisissa malleissa on yhtäläisyys faasimuutosten ilmentämisessä: lähellä kriittistä lämpötilaa eri malleissa näkyy hysteresisilmiö.



## Viitteet

- [1] Ising model. <http://webphysics.davidson.edu/applets/ising/default.html>.
- [2] Lisa Larrimore. Monte carlo simulation of the 2d ising model. <http://www.sccs.swarthmore.edu/lisal/physics/presentations/ising.pdf>.
- [3] Matlab. <http://www.mathworks.com/products/matlab/>.
- [4] Matlab-tiedostot. [http://users.jyu.fi/%7Eveapaja/Ising-simulaatio/ising\\_2006\\_ohjelma.pdf](http://users.jyu.fi/%7Eveapaja/Ising-simulaatio/ising_2006_ohjelma.pdf).
- [5] Ashcroft & Mermin. *Solid State Physics*.
- [6] Hysteresis-ilmiö. <http://hyperphysics.phy-astr.gsu.edu/Hbase/Solids/hyst.html>.