

Isingov model

Pavlina, Anamarija

Master's thesis / Diplomski rad

2022

Degree Grantor / Ustanova koja je dodijelila akademski / stručni stupanj: **University of Zagreb, Faculty of Science / Sveučilište u Zagrebu, Prirodoslovno-matematički fakultet**

Permanent link / Trajna poveznica: <https://um.nsk.hr/um:nbn:hr:217:178440>

Rights / Prava: [In copyright](#)/[Zaštićeno autorskim pravom.](#)

Download date / Datum preuzimanja: **2024-12-30**



Repository / Repozitorij:

[Repository of the Faculty of Science - University of Zagreb](#)



SVEUČILIŠTE U ZAGREBU
PRIRODOSLOVNO–MATEMATIČKI FAKULTET
MATEMATIČKI ODSJEK

Anamarija Pavlina

ISINGOV MODEL

Diplomski rad

Voditelj rada:
izv. prof. dr. sc.
Davor Horvatić

Zagreb, 2022.

Ovaj diplomski rad obranjen je dana _____ pred ispitnim povjerenstvom u sastavu:

1. _____, predsjednik
2. _____, član
3. _____, član

Povjerenstvo je rad ocijenilo ocjenom _____.

Potpisi članova povjerenstva:

1. _____
2. _____
3. _____

Rad posvećujem mojim roditeljima Danijeli i Danku te bratu Davidu kao zahvalu za najveću podršku i pomoć tijekom mog školovanja. Neizmjereno sam zahvalna na svemu što ste mi pružili!

Hvala i ostatku obitelji na potpori, posebno cijeloj obitelji Kao. Hvala svim divnim prijateljima na podršci i nezaboravnim studentskim godinama. Na poseban način hvala Juri i Đeki što su bili uz mene, olakšavali mi teške trenutke, poticali me da ostvarim svoje ciljeve i što nikada nisu posumnjali u mene.

Posebno, veliko hvala mentoru izv. prof. dr. sc. Davoru Horvatiću na vodstvu, prenesenom znanju, savjetima te na neizmjernom strpljenju i razumijevanju tijekom izrade ovoga rada i tijekom studiranja.

Sadržaj

Sadržaj	iv
Uvod	1
1 Osnovni koncepti statističke fizike	2
1.1 Uvod u statističku fiziku	2
1.2 Kanonski ansambl	3
1.3 Slobodna energija	9
2 Fazni prijelazi	13
2.1 Uvod u fazne prijelaze	13
2.2 Statistička fizika i fazni prijelazi	15
2.3 Klasifikacija faznih prijelaza	17
3 Jednodimenzionalni Isingov model	19
3.1 Kanonski ansambl sistema s jednim spinom	19
3.2 Izvod jednodimenzionalnog Isingovog modela	21
4 Dvodimenzionalni Isingov model	27
4.1 Fazni prijelaz u dvodimenzionalnom Isingovom modelu	27
4.2 Simulacija dvodimenzionalnog Isingovog modela pomoću programskog jezika Python	30
4.3 Rezultati i diskusija	38
Dodatak	42
A Python kod za simulaciju dvodimenzionalnog Isingovog modela	42
Bibliografija	45

Uvod

Feromagnetizam je pojava snažnog magnetiziranja tvari uslijed međusobno interagirajućih i gusto raspoređenih magnetskih dipolnih momenata. Isingov model jedan je od temeljnih matematičkih modela feromagnetizma u statističkoj fizici. Spinovi u modelu mogu interagirati samo s najbližim susjednim spinovima i mogu biti suprotnih orijentacija, a predstavljeni su kao varijable diskretnih vrijednosti ± 1 . Proučavat ćemo jednodimenzionalni i dvodimenzionalni Isingov model u slučaju kada je vanjsko magnetsko polje odsutno. Feromagnetici u odsutstvu vanjskog magnetskog polja posjeduju tzv. spontanu magnetizaciju. U tom slučaju, na visokim temperaturama toplinski efekti nadjačavaju međusobnu interakciju spinova pa su magnetski efekti slabi, tada kažemo da je feromagnetik u paramagnetskoj fazi. Smanjivanjem temperature feromagnetika ispod kritične temperature T_C dolazi do spontanog poravnavanja susjednih spinova i on postaje magnetiziran. Taj prijelaz iz feromagnetske u paramagnetsku fazu, ili obratno, naziva se fazni prijelaz. Isingov model kao matematički model ima brojne primjene, ali u ovom radu naglasak je stavljen na fiziku faznih prijelaza kod feromagneta.

Ernst Ising je 1925. godine pokazao da fazni prijelaz u jednodimenzionalnom Isingovom modelu ne postoji za temperature različite od apsolutne nule te je analogno zaključio da ne postoji i za više dimenzije. Lars Onsager 1944. godine analitički riješava problem u dvije dimenzije i pokazuje postojanje faznoga prijelaza.

U prvom poglavlju ovog rada dan je pregled osnovnih pojmova statističke fizike. Drugo poglavlje objašnjava fazne prijelaze s naglaskom na njihovu klasifikaciju. U trećem poglavlju navode se pretpostavke i matematički se izvodi zaključak o faznom prijelazu u jednodimenzionalnom Isingovom modelu. U zadnjem poglavlju se na temelju Landauove teorije izvodi zaključak o vrsti faznoga prijelaza u dvodimenzionalnom Isingovom modelu, a dana je i Python implementacija dvodimenzionalnog Isingovog modela za kvadratnu rešetku.

Poglavlje 1

Osnovni koncepti statističke fizike

1.1 Uvod u statističku fiziku

Statistička fizika je dio fizike koji primjenjuje statističke metode i teoriju vjerojatnosti na promatrane fizikalne sustave koji se sastoje od velikoga broja mikroskopskih čestica. Proizašla je iz razvoja termodinamike, discipline koja numerički uspješno karakterizira makroskopska svojstva fizikalnih sistema, ali ne objašnjava uzrok istih. Upravo to je rezultiralo razvojem područja statističke fizike koje korištenjem ansambla kao glavne matematičke konstrukcije daje objašnjenje, odnosno sadržaj termodinamičkim pojavama. Metode statističke fizike primjenjuju se i na druga područja, a jedno od njih je dio elektrodinamike - feromagnetizam [6, 5].

Sistem i njegovi parametri

Riječ sistem obično podrazumijeva promatrani objekt. Ponekad je to jedan elektron, proton ili molekula, ali statistička fizika obično podrazumijeva sistem sastavljen od velikoga broja čestica koje međudjeluju na određeni način. Bitno obilježje sistema je da su njegove interakcije s okolinom slabe i nasumične, odnosno da ga se može izdvojiti iz okoline.

Kako bi se sistem mogao obraditi statistički, potrebno je navesti relevantne makroskopske parametre kao što su temperatura, volumen, ukupna dovedena energija te magnetsko i električno polje u kojima se sistem nalazi. Makroskopske veličine su mjerljive uređajima, jednake su u svakom dijelu sistema i ne mijenjaju se u vremenu. Jedan od parametara koji će se isticati u nastavku je svakako magnetizacija [3, 14, 5].

1.2 Kanonski ansambl

Što je ansambl?

Riječ ansambl statistički predstavlja zamišljeni skup koji se sastoji od sistema istog makroskopskog stanja, ali različitog mikroskopskog stanja [14]. Sljedeći primjer, razjasnit će pojam mikroskopskog i makroskopskoga stanja, kao i koncept samoga ansambla.

Primjer - Sistem paramagnetskih atoma

Sistem se sastoji od 5 fiksiranih paramagnetskih atoma. Svaki od tih atoma ima magnetski dipolni moment različit od nula, iz razloga što svaki paramagnetski atom sadrži po jedan nesparesni elektron. Promatra se osnovno svojstvo svih elementarnih čestica - spin.

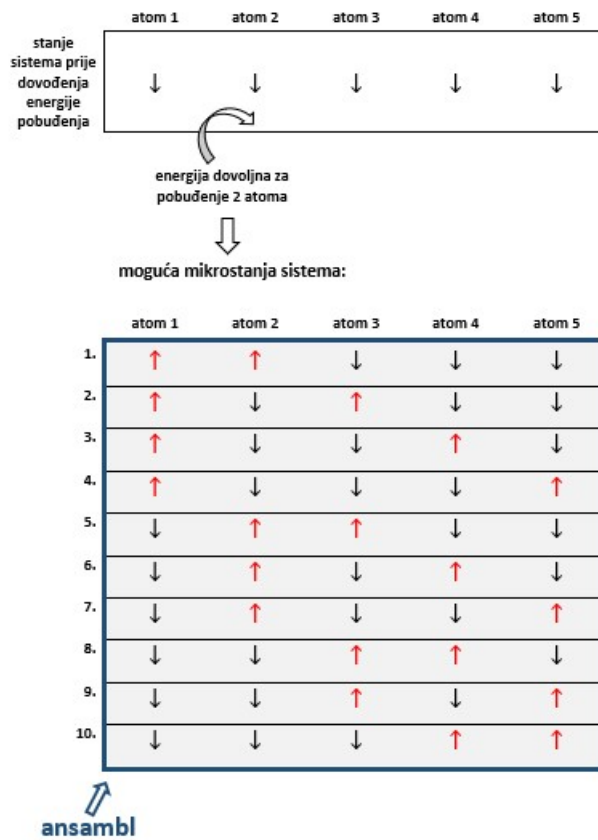
Opisani sistem smješten je u vanjsko magnetsko polje \vec{B} i spin nesparesnog elektrona je paralelan ili antiparalelan magnetskom polju, ovisno kako je usmjeren magnetski dipolni moment. Energija u ta dva spinska stanja je različita.

Ukupna energija sistema odgovara energiji pobuđenja 2 atoma od njih ukupno 5, pri čemu je pobuđenje atoma uzrokovano prijelazom iz jednoga u drugo spinsko stanje. Zada vanjem ukupne energije sistema, određeno je njegovo makroskopsko stanje, a takvo stanje se može realizirati kroz nekoliko različitih mikroskopskih stanja zadanog sistema.

Mikroskopsko stanje sistema odnosi se na konkretnu raspodjelu ukupne energije unutar sistema. U opisanom primjeru, bilo koja 2 atoma od njih 5 mogu biti pobuđena, a da makroskopsko stanje ostane isto. Broj mikroskopskih stanja ili konfiguracija odredi se pomoću kombinatorike, računanjem broja kombinacija drugog razreda u skupu od 5 elemenata:

$$\binom{5}{2} = \frac{5!}{3! \cdot 2!} = 10.$$

Zaključuje se da zadanom makroskopskom stanju odgovara 10 mikroskopskih stanja koja čine jedan ansambl prikazan na slici 1.1. Statistički pristup nužan je prilikom rada s mikroskopskim stanjima, posebno kod sustava s velikim brojem čestica [14].



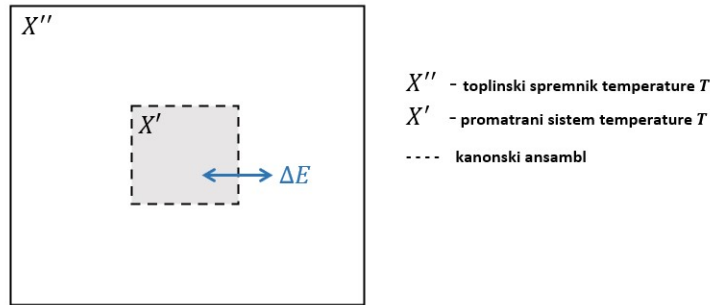
Slika 1.1: Ansambl za sistem od 5 paramagnetskih atoma kao skup 10 mikroskopskih stanja koja odgovaraju makroskopskom stanju s ukupnom energijom jednakom energiji pobuđenja za 2 atoma.

Kanonski ansambl i particijska funkcija

Kanonski ansambl

Kanonski ansambl je statistički ansambl s pretpostavkom temperaturne jednakosti svih njegovih članova.

Kako bi se fiksirala temperatura T , potrebno je poslužiti se konceptualnim trikom. Promatra se makroskopski sistem X' (broj čestica u sistemu je proizvoljan - u sistemu se može nalaziti i samo jedna čestica) koji se nalazi u toplinskom kontaktu s puno većim sistemom X'' kao na slici 1.2. Smisao toplinskog spremnika, odnosno sistema X'' , je fiksiranje temperature T i dopuštanje energetske fluktuacije sistema X' oko srednje vrijednosti. Detalji toplinskog spremnika nisu važni sve dok je spremnik dovoljno velik da se prilikom postiza-

Slika 1.2: Kanonski ansambl - Sistem X' u kontaktu s toplinskim spremnikom X'' .

nja ravnoteže temperatura T ne promijeni. Kako je toplinski spremnik samo konceptualni trik, on nije nužna pretpostavka za postojanje kanonskog ansambla [15]. Opisani sistemi međusobno mogu izmjenjivati energiju, ali ne i čestice. Postavlja se pitanje:

Kolika je vjerojatnost da promatrani sistem X' ima određeno mikroskopsko stanje k energije E_k ?

Vjerojatnost da sistem X' bude u bilo kojem od mikroskopskih stanja energije E' dana je relacijom

$$P(E') = \frac{\Omega'(E') \cdot \Omega''(E - E')}{\Omega(E)}, \quad (1.1)$$

pri čemu Ω predstavlja broj konfiguracija sistema pri određenoj energiji. Budući da promatrani sistem X' i toplinski spremnik X'' čine zatvoreni sistem, njihova ukupna energija $E = E' + E''$ je fiksna.

Kako detalji toplinskog spremnika nisu važni, umjesto funkcije $\Omega''(E - E')$ u relaciji (1.1) može se napisati izraz koji ovisi samo o temperaturi toplinskog spremnika T :

$$P(E') = \frac{\Omega''(E)}{\Omega(E)} \cdot \Omega'(E') \cdot e^{-E'/k_B T}, \quad (1.2)$$

pri čemu je k_b Boltzmannova konstanta, a razlomak $\frac{\Omega''(E)}{\Omega(E)}$ je također konstanta, u oznaci C , jer je ukupna energija E fiksna. Time se dobije vjerojatnost da sistem X' bude u bilo kojem od mikroskopskih stanja s energijom E' :

$$P(E') = C \cdot \Omega'(E') \cdot e^{-E'/k_B T}. \quad (1.3)$$

Izvod relacije (1.2) nalazi se u [14].

Vjerojatnost P_k da promatrani sistem X' ima određeno mikroskopsko stanje k energije E_k , dobije se dijeljenjem relacije (1.3) s brojem konfiguracija sistema X' pri energiji E_k :

$$P_k = \frac{P(E_k)}{\Omega'(E_k)} = \frac{C \cdot \Omega'(E_k) \cdot e^{-E_k/k_B T}}{\Omega'(E_k)} = C \cdot e^{-E_k/k_B T}. \quad (1.4)$$

Uočava se da tražena vjerojatnost eksponencijalno opada s E_k i da je ona najveća za osnovno stanje sistema X' kada je $E_k = 0$, odnosno kada nema pobuđenja.

Kako bi se odredila konstanta C izražena preko energije E_k promatranoga sistema X' i temperature T , zamijetimo da se sistem nužno mora nalaziti u nekom stanju i da zato vrijedi:

$$\sum_k P_k = 1. \quad (1.5)$$

Uvrsti li se izraz (1.4) u prethodnu normalizaciju dobiva se konstanta C :

$$\sum_k C \cdot e^{-E_k/k_B T} = 1 \implies C = \frac{1}{\sum_k e^{-E_k/k_B T}}. \quad (1.6)$$

Konačno, za traženu vjerojatnost vrijedi:

$$P_k = \frac{e^{-E_k/k_B T}}{\sum_k e^{-E_k/k_B T}}. \quad (1.7)$$

U prethodnoj relaciji više nije riječ o dostupnim mikroskopskim stanjima točno određene energije kao u primjeru na stranici 3. Nego, budući da toplinski spremnik i promatrani sistem međusobno izmjenjuju energiju na konstantnoj temperaturi T , ovdje se razmatraju mikroskopska stanja različitih energija [14].

Particijska funkcija

U nazivniku relacije (1.7) uvodi se oznaka:

$$Z = \sum_k e^{-E_k/k_B T}, \quad (1.8)$$

istaknuta suma naziva se **particijska funkcija** ili statistička suma po stanjima sistema. Particijska funkcija sadrži sve bitne informacije o sistemu koji se razmatra, ona ovisi o veličini samoga sistema kao i o broju stupnjeva slobode za svaku pojedinu česticu sistema [12]. Kroz ostala poglavlja će se zbog pojednostavljivanja koristiti sljedeći zapis:

$$Z = \sum_k e^{-\beta E_k}, \quad (1.9)$$

pri čemu je $\beta = 1/k_B T$.

Prosječna energija

Koristeći vjerojatnosni račun, prosječna energija može se izračunati pomoću izraza (1.7) za vjerojatnost pojavljivanja sistema određene energije E_k :

$$\langle E \rangle = \sum_k E_k P_k. \quad (1.10)$$

Uvrštavanjem se dobije:

$$\langle E \rangle = \frac{\sum_k E_k e^{-\beta E_k}}{\sum_k e^{-\beta E_k}}. \quad (1.11)$$

Brojnik prethodne relacije je negativna derivacija particijske funkcije (1.9) po β :

$$\frac{\partial Z}{\partial \beta} = \frac{\partial}{\partial \beta} \sum_k e^{-\beta E_k} = \sum_k \frac{\partial}{\partial \beta} e^{-\beta E_k} = \sum_k -E_k e^{-\beta E_k} = - \sum_k E_k e^{-\beta E_k}.$$

Dobivamo:

$$-\frac{\partial Z}{\partial \beta} = \sum_k E_k e^{-\beta E_k}. \quad (1.12)$$

Uvrštavanjem relacija (1.9) i (1.12) u izraz (1.11), dobivamo izraz za prosječnu energiju sistema X' :

$$\langle E \rangle = -\frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \beta} = -\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta}. \quad (1.13)$$

Dobiveni izraz koristit će se u jednodimenzionalnom Isingovom modelu za računanje prosječne energije [14].

Toplinski kapacitet

Toplinski kapacitet C karakterizira odnos energije pohranjene u promatrani sistem i njegove temperature. Definiira se kao:

$$C = \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial T}. \quad (1.14)$$

i pokazuje koliko će energije $\Delta \bar{E}$ sistem primiti kada mu se temperatura promijeni za iznos ΔT . Toplinski kapacitet ovisi o izboru parametara koji se drže konstantnima pri izmjeni energije, a u našem slučaju to je volumen.

U simulaciji dvodimenzionalnog Isingovog modela računat ćemo specifični toplinski kapacitet koristeći formulu koja će biti izvedena u nastavku. Kako je $\beta = 1/k_B T$, vrijedi:

$$C = \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial T} = \frac{\partial \beta}{\partial T} \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial \beta} = -\frac{1}{k_B T^2} \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial \beta} = -k_B \beta^2 \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial \beta}. \quad (1.15)$$

Uvrštavanjem izraza (1.9) za particijsku funkciju u izraz (1.11) za prosječnu energiju dobivamo:

$$\langle E \rangle = \frac{\sum_k E_k e^{-\beta E_k}}{Z}. \quad (1.16)$$

Parcijalna derivacija prosječne energije po β sada je:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial \beta} &= \frac{\partial}{\partial \beta} \left(\frac{1}{Z} \sum_k E_k e^{-\beta E_k} \right) \\ &= \frac{\partial}{\partial \beta} \frac{1}{Z} \cdot \sum_k E_k e^{-\beta E_k} + \frac{1}{Z} \frac{\partial}{\partial \beta} \sum_k E_k e^{-\beta E_k} \\ &= -\frac{1}{Z^2} \cdot \frac{\partial Z}{\partial \beta} \cdot \sum_k E_k e^{-\beta E_k} + \frac{1}{Z} \sum_k E_k \cdot (-1) \cdot E_k \cdot e^{-\beta E_k} \\ &= -\frac{1}{Z^2} \cdot \frac{\partial Z}{\partial \beta} \cdot \sum_k E_k e^{-\beta E_k} - \sum_k E_k^2 \cdot \frac{e^{-\beta E_k}}{Z} \end{aligned}$$

Prethodni izraz može se pojednostavniti:

- Iz jednaždbe (1.13) vrijedi: $\frac{\partial Z}{\partial \beta} = -Z \cdot \langle E \rangle$
- Iz jednadžbe (1.16) vrijedi: $\sum_k E_k e^{-\beta E_k} = Z \cdot \langle E \rangle$
- Uvrštavanjem oznake za particijsku funkciju Z u izraz (1.7) dobivamo: $P_k = \frac{e^{-\beta E_k}}{Z}$

Uvrštavanjem prethodna tri izraza možemo pojednostavniti izraz dobiven za parcijalnu derivaciju prosječne energije po β . Vrijedi:

$$\begin{aligned}\frac{\partial \langle E \rangle}{\partial \beta} &= -\frac{1}{Z^2} \cdot (-Z \cdot \langle E \rangle) \cdot Z \cdot \langle E \rangle - \sum_k E_k^2 \cdot P_k \\ &= \langle E \rangle^2 - \langle E^2 \rangle\end{aligned}$$

Uvrštavanjem prethodno dobivene parcijalne derivacije u izraz za toplinski kapacitet (1.15), dobivamo traženu formulu:

$$C = -k_B \beta^2 (\langle E \rangle^2 - \langle E^2 \rangle). \quad (1.17)$$

1.3 Slobodna energija

Termodinamika je grana fizike koja opisuje vezu između makroskopskih varijabli sistema (tlak, temperatura, volumen, entropija,...) i način na koji se one mijenjaju.

Termodinamički potencijal je skalarna funkcija koja opisuje termodinamičko stanje sistema preko makroskopskih termodinamičkih varijabli. Ovisno o promatranoj situaciji bira se potencijal koji se koristi za opis sistema. Proučavanje faznih prijelaza u dvodimenzionalnom Isingovom modelu zahtjeva poznavanje slobodne energije ili tzv. Hemholtzove slobodne energije.

Slobodna energija definirana je kao Legendreov transformat unutarnje energije U :

$$F = U - TS, \quad (1.18)$$

pri čemu je T temperatura, a S entropija sistema. Potpuni diferencijal unutarnje energije dan je sljedećom relacijom:

$$dU = TdS - pdV + \mu dN. \quad (1.19)$$

Unutarnja energija je termodinamički potencijal čije su prirodne varijable entropija, volumen i broj čestica sistema. Poznavanje unutarnje energije kao funkcije u ovisnosti o prirodnim varijablama $U(S, V, N)$ omogućava poznavanje ostalih termodinamičkih parametara - temperature, tlaka i kemijskoga potencijala. Vrijedi:

$$T = \left. \frac{\partial U}{\partial S} \right|_{V,N}, \quad -p = \left. \frac{\partial U}{\partial V} \right|_{S,N}, \quad \mu = \left. \frac{\partial U}{\partial N} \right|_{S,V}. \quad (1.20)$$

Poznavanjem jednadžbi stanja sistema (1.20), moguće je odrediti funkciju unutarnje energije u ovisnosti o njezinim prirodnim varijablama.

Uvrštavanjem potpunog diferencijala unutarnje energije (1.19) u izraz za potpuni diferencijal slobodne energije, dobiva se:

$$\begin{aligned} dF &= dU - SdT - TdS \\ &= TdS - pdV + \mu dN - SdT - TdS \\ &= -SdT - pdV + \mu dN \end{aligned}$$

Potpuni diferencijal slobodne energije sada je:

$$dF = -SdT - pdV + \mu dN. \quad (1.21)$$

Poznavanje funkcije slobodne energije $F(T, V, N)$ u ovisnosti o njezinim prirodnim varijablama (temperaturi, volumenu i broju čestica) daje potpuno jednaku informaciju o sistemu kao i poznavanje funkcije unutarnje energije. Vrijedi:

$$-S = \left. \frac{\partial F}{\partial T} \right|_{V,N}, \quad -p = \left. \frac{\partial F}{\partial V} \right|_{T,N}, \quad \mu = \left. \frac{\partial F}{\partial N} \right|_{T,V}. \quad (1.22)$$

Važnost slobodne energije objašnjena je u sljedećem primjeru [7].

Primjer - Sistem u kontaktu s toplinskim spremnikom

Zamislimo neizolirani sistem X' u kontaktu s velikim toplinskim spremnikom X'' temperature T , kao na slici 1.2. Ukupni sistem, kojega čine promatrani sistem X' i toplinski spremnik X'' , je izoliran. Budući da za izolirane sisteme vrijedi drugi zakon termodinamike, zadani ukupni sistem teži stanju ravnoteže koje je okarakterizirano maksimalnom entropijom.

Sve dok sistem ne dođe u stanje ravnoteže s maksimalnom entropijom, odvijaju se ireverzibilni procesi i prema drugom zakonu termodinamike vrijedi:

$$dS_{uk} = dS_{X'} + dS_{X''} \geq 0, \quad (1.23)$$

pri čemu je dS_{uk} entropija ukupnog sistema, $dS_{X'}$ entropija promatranoga sistema i $dS_{X''}$ entropija toplinskoga spremnika.

Kako sistem i toplinski spremnik mogu izmjenjivati toplinu i rad, prema prvom zakonu termodinamike vrijedi:

$$dU_{X'} = \delta Q_{X'} + \delta W_{X'}, \quad (1.24)$$

$$dU_{X''} = \delta Q_{X''} + \delta W_{X''}. \quad (1.25)$$

Kod reverzibilnih procesa vrijedi jednakost

$$dU_{X'} = T dS_{X'} + \delta W_{X'}^{\text{rev}}. \quad (1.26)$$

Rad u ireverzibilnom procesu veći je od odgovarajućega rada u reverzibilnom procesu, stoga iz prethodne relacije dobivamo:

$$dU_{X'} - T dS_{X'} = \delta W_{X'}^{\text{ir}} \leq \delta W_{X'}^{\text{rev}}. \quad (1.27)$$

Budući je promatrani sistem X' na konstantnoj temperaturi T , promjena temperature sistema $dT_{X'}$ je nula. Korištenjem potpunog diferencijala slobodne energije i prethodne nejednakosti vrijedi sljedeće:

$$dF_{X'} = d(U_{X'} - TS_{X'}) = dU_{X'} - T dS_{X'} \leq \delta W_{X'}^{\text{ir}}. \quad (1.28)$$

Promjena entropije ukupnog izoliranoga sistema jednaka je nula kod reverzibilnih procesa, iz relacije (1.23) dobivamo:

$$dS_{X''} = -dS_{X'} = -\frac{\delta Q_{X'}}{T}. \quad (1.29)$$

Uvrštavanjem relacije (1.24) u prethodnu jednakost za reverzibilne procese dobivamo:

$$dS_{X''} = -\frac{1}{T} (dU_{X'} - \delta W_{X'}^{\text{rev}}). \quad (1.30)$$

Iz prethodne relacije i relacije (1.23) slijedi:

$$\begin{aligned} dS_{uk} &= dS_{X'} - \frac{1}{T} (dU_{X'} - \delta W_{X'}^{\text{rev}}) \\ T dS_{uk} &= \underbrace{T dS_{X'} - dU_{X'}}_{-dF_{X'}} + \delta W_{X'}^{\text{rev}} \end{aligned}$$

Odakle dobivamo da za reverzibilne procese vrijedi:

$$TdS_{uk} = -dF_{X'} + \delta W_{X'}^{\text{rev}} = 0, \quad (1.31)$$

dok za ireverzibilne procese, zbog $W_{X'}^{\text{rev}} \leq W_{X'}^{\text{ir}}$, vrijedi:

$$TdS_{uk} = -dF_{X'} + \delta W_{X'}^{\text{ir}} \geq 0. \quad (1.32)$$

Prethodno dobivena relacija ukazuje na važnost entropije pri izotermalnim procesima. Postavimo li da je rad promatranoga sistema $W_{X'}^{\text{ir}}$ jednak nula, dobivamo sljedeće:

$$TdS_{uk} = -dF_{X'} \geq 0. \quad (1.33)$$

Dolazimo do zaključka: Kako je ukupan sistem temperature T izoliran i vrijedi drugi zakon termodinamke, onda znamo da čitav sistem teži ravnoteži i stanju maksimalne entropije. Istovremeno, promatrani sistem konstante temperature, teži smanjenju slobodne energije. Kada ukupan sistem postigne maksimalnu entropiju spontanom, odnosno ireverzibilnim procesima, promatrani sistem X' postiže minimalnu slobodnu energiju. Dakle, ireverzibilni izotermalni procesi se događaju spontano sve dok promatrani sistem X' ne postigne minimalnu Hemholtzovu slobodnu energiju:

$$dF = 0, \quad F = F_{\text{min}}. \quad (1.34)$$

Poglavlje 2

Fazni prijelazi

2.1 Uvod u fazne prijelaze

U prirodi se tvari nalaze u različitim stanjima, a promjena vanjskih uvjeta (npr. temperature, tlaka, magnetskog polja) može izazvati prijelaz iz jednog stanja sistema u drugo stanje. Stanja u kojima se tvari nalaze nazivaju se faznim stanjima, a ponekad se prijelazi između njih nazivaju faznim prijelazima. Do faznoga prijelaza dolazi ukoliko mala promjena jednoga od parametara sistema uzrokuje veliku promjenu nekog drugog parametra [9].

Na primjer, ako se temperatura vode promjeni s $99\text{ }^{\circ}\text{C}$ na $101\text{ }^{\circ}\text{C}$ istovremeno će se skokovito i značajno promijeniti i gustoća vode. Dakle, došlo je do faznog prijelaza.

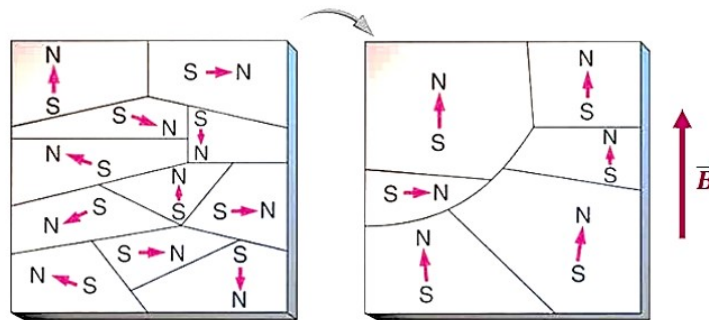
Navest ćemo još jedan primjer faznoga prijelaza. Stavi li se željezna šipka u vanjsko magnetsko polje \vec{B} , magnetski dipolni momenti pojedinih atoma nastojat će se orijentirati u smjeru toga polja kao na slici 2.1. Takav proces naziva se magnetizacija materijala.

Željezna šipka je gotovo potpuno magnetizirana stavljanjem u vanjsko magnetsko polje. Smanjenjem vanjskoga polja na nulu, magnetizacija šipke se smanjuje, ali ne na nulu. Kaže se da šipka ima spontanu magnetizaciju, iznosa M_0 .

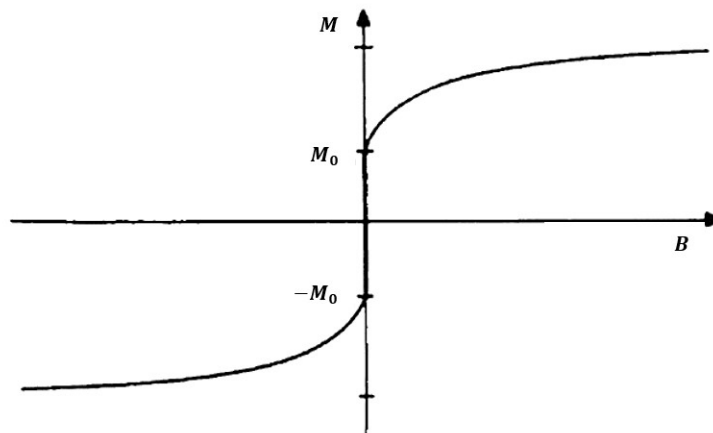
Očekuje se da će okretanje vanjskog magnetskog polja \vec{B} , okrenuti i vektor magnetizacije, stoga funkcija ovisnosti iznosa magnetizacije o vanjskom magnetskom polju mora biti neparna funkcija. Graf ovisnosti magnetizacije o vanjskom magnetskom polju $M(B)$ prikazan je na slici 2.2.

Funkcija M ima prekid prve vrste u točki $B = 0$ jer jednostrani limesi funkcije u nuli postoje, ali nisu jednaki:

$$\lim_{B \rightarrow 0^+} M(B) \neq \lim_{B \rightarrow 0^-} M(B).$$



Slika 2.1: Shematski prikaz domena i smjera magnetizacije unutar feromagneta prije i nakon stavljanja u vanjsko magnetsko polje \vec{B} . Preuzeto iz [13] i doručeno.



Slika 2.2: Graf ovisnosti magnetizacije o vanjskom magnetskom polju $M(B)$. Preuzeto iz [17] i promijenjene oznake.

Zaključujemo da se kod željezne šipke radi o faznom prijelazu pri $B = 0$ jer se događa velika i skokovita promjena iz negativne u pozitivnu magnetizaciju i obratno. Dakle, malom promjenom vanjskog magnetskog polja događa se velika promjena magnetizacije materijala. U stvarnim eksperimentima kada uvjeti nisu idealni, javlja se histereza [17].

Postavlja se pitanje postojanja faznoga prijelaza pri različitim temperaturama. Osim željeza, materijali poput nikla i kobalta također posjeduju magnetizaciju i kada vanjsko magnetsko polje nije prisutno. Takvi materijali nazivaju se feromagnetici. Do spontane magnetizacije dolazi jer su magnetski dipolni momenti unutar određene domene u mate-

rijalu poredani paralelno jedan s drugim. Budući da visoke temperature uništavaju poravnanje magnetskih momenata, oni ostaju paralelni sve dok temperatura sistema ne postane previsoka. Granična temperatura zove se Curiejeva temperatura T_C i pri njoj materijali gube svojstvo magnetizacije. Na primjer, Curiejeva temperatura za željezo iznosi 770°C te je ispod te temperature željezo u uređenoj feromagnetskoj fazi, a iznad te temperature je u neuređenoj paramagnetskoj fazi. Dakle, pri Curiejevoj temperaturi došlo je do nagle promjene u svojstvu tvari, nije bilo postupnog prijelaza iz feromagnetskog u paramagnetsko ponašanje. Ovom vrstom faznoga prijelaza baviti ćemo se u nastavku rada korištenjem Isingovog modela[4].

2.2 Statistička fizika i fazni prijelazi

Fazni prijelazi javljaju se između ravnotežnih stanja sistema kao funkcije temperature, tlaka, magnetskog polja i ostalih parametara koji mogu utjecati na sistem. U nastavku ćemo ih promatrati isključivo kao funkcije temperature. Do faznoga prijelaza dolazi uslijed kvalitativne promjene ravnotežnog stanja sistema pri promjeni izvana nametnutih uvjeta. U svakom faznom prijelazu postoji veličina sistema koja prolazi kroz kvalitativnu promjenu. Takva veličina naziva se parametar uređenja i on se različito definira za različite vrste fizikalnih sistema.

Mnogi fazni prijelazi mogu se opisati Landauovom teorijom faznih prijelaza, razvijenom 1937. godine. Teorija sadrži niz pretpostavki kako bi se aproksimirala slobodna energija sistema. Prvi korak je određivanje parametra uređenja za promatrani sistem. Parametar uređenja mora biti veličina koja je nula u neuređenom stanju sistema, odnosno na temperaturama iznad temperature prijelaza T_C , a različita od nula u uređenom stanju sistema na temperaturama nižim od temperature prijelaza T_C . On je isti u cijelom sistemu, odnosno ne ovisi o prostoru. Posljednji primjer prethodnoga poglavlja ukazuje na to da je magnetizacija veličina koja postaje nula za temperature iznad Curiejeve temperature T_C , a inače je različita od nula. Dakle, za feromagnetske sisteme parametar uređenja je magnetizacija, odnosno spontana magnetizacija:

$$M = \frac{1}{N} \sum_i \langle \sigma_i \rangle, \quad (2.1)$$

pri čemu je $\langle \sigma_i \rangle$ prosjek po svim spinovima u ravnotežnom stanju sistema pri određenim uvjetima.

Budući da sistem prolazi kroz kvalitativnu promjenu pri faznom prijelazu, slobodna energija kao funkcija npr. temperature nije analitička funkcija, derivacije određenoga reda ne postoje u pojedinim točkama, singularitetima. Takve točke u parametarskom prostoru

su fazni prijelazi. Dakle, funkcija slobodne energije ne ponaša se glatko dok prolazi kroz fazni prijelaz.

Statističke informacije o sistemu sadržane su u particijskoj funkciji (1.9), a Boltzmann je dokazao da za slobodnu energiju vrijedi sljedeće:

$$F = -k_B T \ln Z. \quad (2.2)$$

Odredimo li funkciju slobodne energije, možemo odrediti sve termodinamičke veličine koje opisuju sistem koristeći relacije (1.22), ali možemo odrediti i moguće singularitete te saznati više o faznim prijelazima sistema. Funkciju slobodne energije sistema nije jednostavno odrediti i upravo time se bavi Landauova teorija faznih prijelaza [16].

2.3 Klasifikacija faznih prijelaza

U uvodu faznih prijelaza vidjeli smo da postoje razne vrste faznih prijelaza, nakon toga smo naveli da se fazni prijelazi javljaju u singularitetima slobodne energije, a sada ćemo navesti općenitu i jedinstvenu klasifikaciju faznih prijelaza.

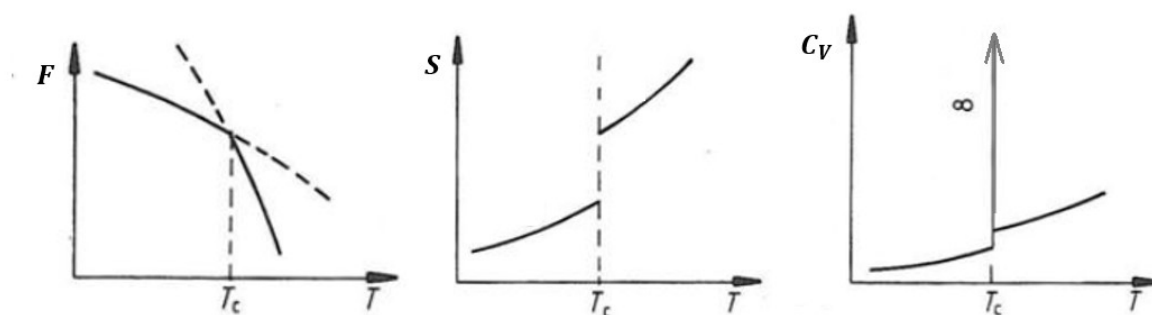
Općenito se fazni prijelazi dijele na fazne prijelaze prvoga i fazne prijelaze drugoga reda (tzv. kontinuirane fazne prijelaze). Kod faznih prijelaza prvoga reda postoji prekid u prvoj derivaciji slobodne energije, a kod faznih prijelaza drugoga reda prva derivacija je neprekidna funkcija, ali postoji prekid u višim derivacijama slobodne energije [16, 7].

Fazni prijelaz prvoga reda

Ako promatramo fazne prijelaze u ovisnosti o temperaturi, za fazne prijelaze prvoga reda, derivacija slobodne energije po temperaturi mora imati prekid u prijelaznoj temperaturi T_C , a prema jednadžbi (1.22) to znači da funkcija entropije u ovisnosti o temperaturi ima prekid prve vrste u točki T_C kao na slici 2.3. Tada druga derivacija slobodne energije,

$$C_V = T \left. \frac{\partial S}{\partial T} \right|_V = -T \left. \frac{\partial^2 F}{\partial T^2} \right|_V, \quad (2.3)$$

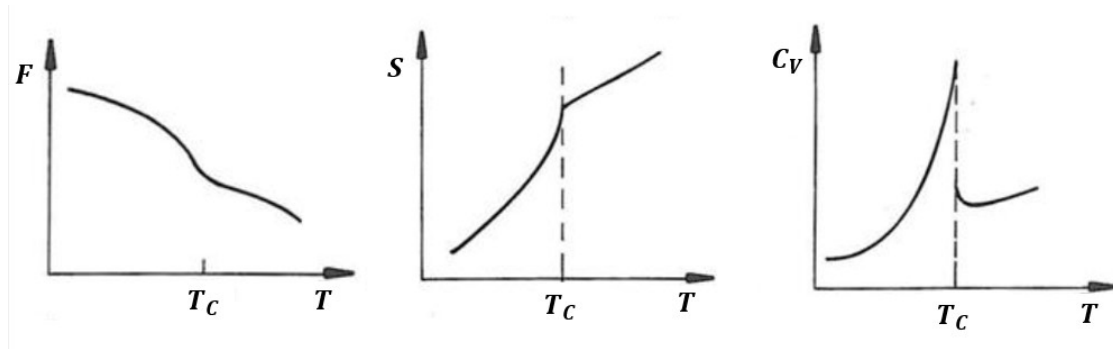
odnosno toplinski kapacitet, divergira u točki T_C .



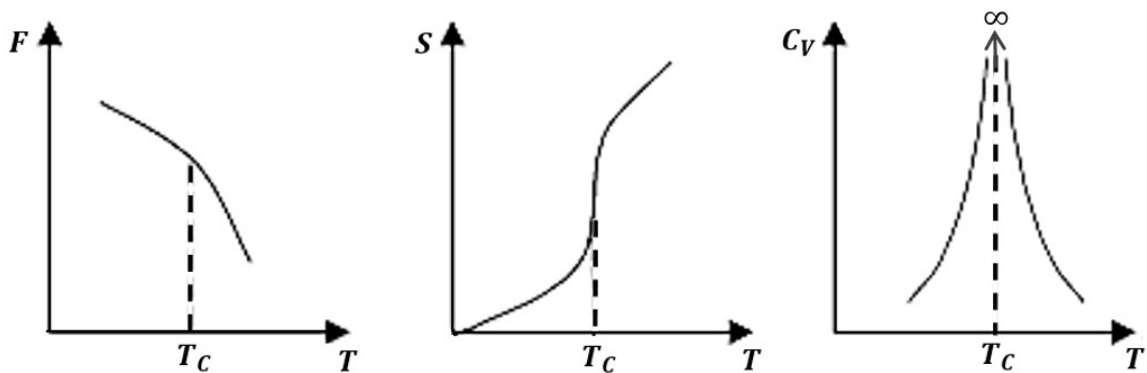
Slika 2.3: Fazni prijelaz prvoga reda pri temperaturi T_C - Slobodna energija F , entropija S i specifični toplinski kapacitet C_V kao funkcije temperature. Preuzeto iz [10] i doradeno.

Fazni prijelaz drugoga reda

Promatramo slobodnu energiju u ovisnosti o temperaturi. Za fazne prijelaze drugoga reda, prva derivacija slobodne energije, odnosno funkcija entropije je neprekidna. U točki T_C faznoga prijelaza, funkcija entropije može imati "špic" kao na slici 2.4 ili vertikalnu tangentu kao na slici 2.5. Dakle, u oba slučaja funkcija entropije je neprekidna, ali nije derivabilna u točki T_C jer u prvom slučaju limes koji definira derivaciju s lijeva nije jednak onome s desna, a u drugome slučaju taj limes je beskonačan. Druga derivacija slobodne energije, odnosno toplinski kapacitet u prvom slučaju ima prekid prve vrste 2.4, a u drugom slučaju divergira 2.5. Graf toplinskog kapaciteta u drugom slučaju podsjeća na malo grčko slovo λ , stoga se takvi fazni prijelazi nazivaju λ - prijelazi.



Slika 2.4: Fazni prijelaz drugoga reda pri temperaturi T_C - Slobodna energija F , entropija S i specifični toplinski kapacitet C_V kao funkcije temperature. Preuzeto iz [10] i doručeno.



Slika 2.5: λ - prijelaz pri temperaturi T_C - Slobodna energija F , entropija S i specifični toplinski kapacitet C_V kao funkcije temperature. Preuzeto iz [11] i doručeno.

Poglavlje 3

Jednodimenzionalni Isingov model

3.1 Kanonski ansambl sistema s jednim spinom

Prije postavljanja uvjeta i razmatranja postojanja faznoga prijelaza u jednodimenzionalnom Isingovom modelu, razmotrit ćemo jednostavniji problem.

Potrebno je zamisliti niz spinova u vanjskom magnetskom polju \vec{B} , koji dolaze od neparnih elektrona u atomima. Uvodimo varijablu σ koja poprima vrijednosti ± 1 ovisno o orijentaciji spina, ako je spin usmjeren prema gore $\sigma = +1$, a ako je spin usmjeren prema dolje $\sigma = -1$. Budući da svaki spin djeluje poput maloga magneta s njegovim pripadnim magnetskim dipolnim momentom, vrijedi relacija $E = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}$ za energiju magnetskog dipolnog momenta. Korištenjem prethodno definirane varijable σ i postavljenoga problema u kojemu magnetski moment može biti usmjeren samo prema gore ($\sigma = +1$) ili samo prema dolje ($\sigma = -1$), umjesto skalarnog umnoška možemo pisati sljedeći izraz za energiju pojedinoga spina u našem modelu:

$$E = -\mu \cdot B \cdot \sigma. \quad (3.1)$$

Umjesto umnoška $\mu \cdot B$ uvodimo oznaku J . Prethodna jednadžba sada poprima sljedeći oblik:

$$E = -J \cdot \sigma. \quad (3.2)$$

Konstanta J je pozitivna ako je vanjsko magnetsko polje usmjereno prema gore, a negativna ako je vanjsko magnetsko polje usmjereno prema dolje.

Unutar zamišljenoga niza spinova sada se fokusiramo na samo jedan spin i njega promatramo kao sistem. Sistem se nalazi u toplinskom kontaktu i u toplinskoj je ravnoteži sa sistemom koji je puno veći od njega, stoga je riječ o kanonskom ansamblu.

Za promatrani sistem sastavljen od jednoga spina, sada je moguće napisati particijsku funkciju uvrštavanjem izraza za energiju (3.2) u izraz za particijsku funkciju (1.9):

$$Z = \sum_{\pm 1} e^{\beta J \sigma}. \quad (3.3)$$

Particijska funkcija je suma po svim stanjima, a promatrani sistem se sastoji od samo jednoga spina koji može biti u jednome od dva moguća stanja različitih energija.

Korištenjem definicije kosinusa hiperbolnog, dobivamo:

$$Z = \sum_{\pm 1} e^{\beta J \sigma} = e^{\beta J} + e^{-\beta J} = 2 \cosh \beta J. \quad (3.4)$$

Kada bismo razmišljali o čitavom nizu od N spinova koji su međusobno nezavisni, particijska funkcija imala bi sljedeći oblik:

$$Z = (2 \cosh \beta J)^N. \quad (3.5)$$

Korištenjem relacije (1.13) izračunat ćemo prosječnu energiju promatranoga sistema s jednim spinom:

$$\langle E \rangle = -\frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \beta} = -\frac{2 \cdot J \cdot \sinh \beta J}{2 \cdot \cosh \beta J} = -J \tanh \beta J. \quad (3.6)$$

Prosječna energija promatranoga sistema sada je dana izrazom:

$$\langle E \rangle = -J \tanh \beta J. \quad (3.7)$$

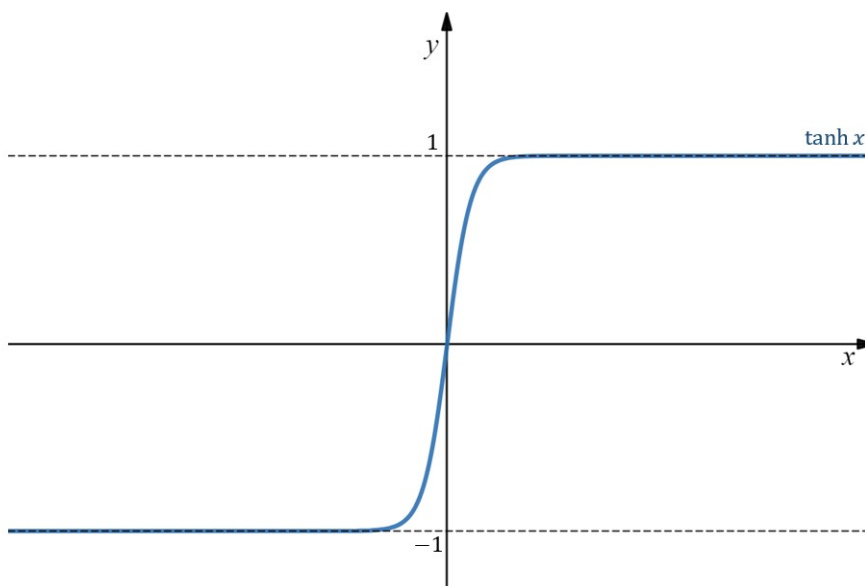
Postavlja se pitanje: Koliki je prosječan spin?

Usporedbom relacija za energiju spina (3.2) i prosječnu energiju spina (3.7) dobije se da je prosječni spin

$$\langle \sigma \rangle = \tanh \beta J. \quad (3.8)$$

Graf funkcije tangensa hiperbolnog prikazan je na slici 3.1. U našem slučaju x je jednak βJ , a na ordinati očitavamo vrijednosti prosječnoga spina $\langle \sigma \rangle$.

Iz grafa na slici 3.1 može se očitati kako za jako velike β vrijednosti, prosječan spin se asimptotski približava jedinici. Uočimo, velike vrijednosti za β se postižu pri niskim temperaturama T jer je β obrnuto proporcionalno temperaturi, $\beta = 1/k_B T$. To nam govori da će pri apsolutnoj nuli, kada β teži u beskonačnost, prosječan spin u limesu biti jednak

Slika 3.1: Graf funkcije $f(x) = \tanh(x)$.

jedan. Zaključujemo da će pri niskim temperaturama promatrani spin s velikom vjerojatnošću biti usmjeren prema gore ($\sigma = +1$) ili prema dolje ($\sigma = -1$) ako je konstanta J negativna. Također, pri visokim temperaturama vrijednost od β teži prema nuli, kada i prosječan spin teži vrijednosti nula, a to znači da temperatura samo nadmašuje bilo kakvu pristranost prema tome hoće li spin biti usmjeren prema gore ili prema dolje, tako da je prosjek jednostavno nula.

3.2 Izvod jednodimenzionalnog Isingovog modela

Kao i u prethodnom primjeru, jednodimenzionalni Isingov model zadan je nizom spinova, gdje diskretne vrijednosti $+1$ i -1 predstavljaju dva stanja magnetskog dipola - jedno stanje je kada je spin usmjeren prema gore ($+1$), a drugo kada je spin usmjeren prema dolje (-1). Dakle,

$$\sigma_i = \pm 1,$$

pri čemu indeks i označava poziciju spina u nizu. Nadalje, uvest ćemo iste pretpostavke u model koje je uveo i Ising 1924. godine:

1. Nema vanjskog magnetskog polja \vec{B}
2. Svaki spin može interagirati samo sa najbližim susjedima

	↑	↓	↑	↑	...	↓
i	1	2	3	4	...	N
σ_i	1	-1	1	1	...	-1

Slika 3.2: Jednodimenzionalni Isingov model – Sistem s N spinova.

Novost naspram prethodnoga primjera je da promatrani sistem čine svi spinovi u nizu i da ukupna energija sistema sada ovisi o vezi između susjednih spinova, a ne o energiji svakoga pojedinoga spina. Dakle, u modelu se postavlja da je ukupna energija sistema jednaka

$$E = -J \sum_i \sigma_i \sigma_{i+1}, \quad (3.9)$$

pri čemu je $J > 0$ numerička konstanta koja karakterizira jačinu interakcije između spinova.

Uočimo, ovako definirana energija sistema postavlja da je njegova minimalna energija upravo kada su svi spinovi međusobno paralelni, odnosno ako su svi spinovi usmjereni prema gore ili prema dolje ($1 \cdot 1 = 1$ i $(-1) \cdot (-1) = 1$). Dakle, postoje dva osnovna stanja sistema - svi spinovi usmjereni gore i svi spinovi usmjereni dolje. Kod feromagneta su upravo to osnovna stanja. Postoje i sistemi kod kojih je za osnovno stanje (stanje minimalne energije) karakteristično da su spinovi međusobno antiparalelni, ali tada se drugačije definira ukupna energija sistema.

Particijska funkcija ili suma po svim stanjima jednodimenzionalnog Isingovog modela ima sljedeći oblik:

$$Z = \sum_{\{\sigma\}} e^{-J\beta \sum_i \sigma_i \sigma_{i+1}}. \quad (3.10)$$

Prethodni izraz ćemo pojednostavniti uvođenjem nove varijable

$$\mu_i = \sigma_i \cdot \sigma_{i+1}. \quad (3.11)$$

Ovako definirana nova varijabla upućuje nas da ćemo se fokusirati na veze između spinova umjesto na vrijednosti svakoga pojedinoga spina. Drugim riječima, varijabla μ opisuje jesu li dva susjedna spina paralelna ili antiparalelna, ako su spinovi paralelni tada je $\mu = +1$, a ako su antiparalelni $\mu = -1$.

Uvođenjem nove varijable, ukupna energija sistema postaje

$$E = -J \sum_i \mu_i, \quad (3.12)$$

a particijska funkcija sada ima oblik

$$Z = 2 \sum_{\{\mu\}} e^{-J\beta \sum_{i=1}^{N-1} \mu_i}. \quad (3.13)$$

Uočimo, u particijskoj funkciji se pojavljuje faktor 2, on dolazi od toga što postoje dvije moguće konfiguracije za prvi spin u nizu. Naime, μ_1 nam ne govori ništa o stanju svakog pojedinog spina, nego samo o tome jesu li prvi i drugi spin paralelni ili antiparalelni. Također, ukoliko u nizu postoji N spinova, tada je broj veza između tih spinova za 1 manji.

Zapis particijske funkcije iz jednadžbe (3.13) još se može pojednostavniti:

$$\begin{aligned} Z &= 2 \cdot \sum_{\{\mu\}} e^{-J\beta \sum_{i=1}^{N-1} \mu_i} \\ &= 2 \cdot \sum_{\mu_1=\pm 1} \sum_{\mu_2=\pm 1} \dots \sum_{\mu_{N-1}=\pm 1} e^{-\beta J(\mu_1+\mu_2+\dots+\mu_{N-1})} \\ &= 2 \cdot \sum_{\mu_1=\pm 1} \sum_{\mu_2=\pm 1} \dots \sum_{\mu_{N-2}=\pm 1} e^{-\beta J(\mu_1+\mu_2+\dots+\mu_{N-2})} \cdot \sum_{\mu_{N-1}=\pm 1} e^{-\beta J\mu_{N-1}} \end{aligned}$$

Raspisivanjem i korištenjem definicije kosinusa hiperbolnog, za posljednju sumu u gornjem umnošku vrijedi:

$$\begin{aligned} \sum_{\mu_{N-1}=\pm 1} e^{-\beta J\mu_{N-1}} &= e^{\beta J} + e^{-\beta J} \\ &= 2 \cosh \beta J \end{aligned}$$

Napravimo li analogno za sve ostale sume po vezama između susjednih spinova, slijedi da je particijska funkcija sljedećega oblika:

$$\begin{aligned} Z &= 2 \cdot \sum_{\mu_1=\pm 1} \sum_{\mu_2=\pm 1} \dots \sum_{\mu_{N-2}=\pm 1} e^{-\beta J(\mu_1+\mu_2+\dots+\mu_{N-2})} \cdot \sum_{\mu_{N-1}=\pm 1} e^{-\beta J\mu_{N-1}} \\ &= 2 \cdot (2 \cdot \cosh \beta J)^{N-1} \end{aligned}$$

Konačno, particijska funkcija jednodimenzionalnog Isingovog modela postavljenoga na početku poglavlja ima sljedeći oblik:

$$Z = 2 \cdot (2 \cosh \beta J)^{N-1}. \quad (3.14)$$

Uočimo, reducirali smo jednodimenzionalni Isingov model u kojemu spinovi interagiraju s najbližim susjedima na prethodni jednostavniji problem u kojemu smo promatrali sistem nezavisnih spinova. Javlja se dualnost između dva različita sistema, a jedina razlika je u broju stupnjeva slobode, odnosno u broju parametara koji opisuju sistem.

Odredit ćemo sada prosječnu energiju sistema opisanoga particijskom funkcijom (3.14):

$$\begin{aligned} \langle E \rangle &= -\frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \beta} \\ &= -\frac{2 \cdot (N-1) \cdot (2 \cosh \beta J)^{N-2} \cdot 2 \cdot \sinh \beta J \cdot J}{2 \cdot (2 \cosh \beta J)^{N-1}} \\ &= -\frac{J \cdot (N-1) \cdot (2 \cosh \beta J)^{N-2}}{(2 \cosh \beta J)^{N-2}} \cdot \frac{2 \cdot \sinh \beta J}{2 \cdot \cosh \beta J} \\ &= -J \cdot (N-1) \cdot \tanh \beta J \end{aligned}$$

Prosječna energija jednodimenzionalnog Isingovog modela dana je izrazom

$$\langle E \rangle = -J \cdot (N-1) \cdot \tanh \beta J. \quad (3.15)$$

Usporedbom prethodnog izraza za prosječnu energiju i izraza za ukupnu energiju sistema (3.12), dobivamo prosječnu vrijednost za i -tu vezu od $N-1$ veza između susjednih spinova:

$$\langle \mu_i \rangle = \langle \sigma_i \sigma_{i+1} \rangle = \tanh \beta J. \quad (3.16)$$

Pri niskim temperaturama $\langle \mu_i \rangle$ je različit od nula i zaključujemo da postoji tendencija da se susjedni spinovi usmjere paralelno (u istome smjeru), ali sada se postavlja pitanje:

Utječe li spin σ_i i na spin σ_{i+n} koji je za n udaljen od njega?

Pitanje je usko vezano uz razmatranje postojanja faznoga prijelaza u jednodimenzionalnom Isingovom modelu. Ono je ekvivalentno razmatranju prosjeka $\langle \sigma_i \sigma_{i+n} \rangle$. Dobijemo li da je navedeni prosjek jednak jedan, tada postoji tendencija prema paralelnom usmjeravanju udaljenih spinova i tada kažemo da postoji dugodosežno uređenje.

Prosječnu vrijednost od $\langle \sigma_i \sigma_{i+n} \rangle$ možemo nadopuniti i zapisati kao

$$\langle \sigma_i \sigma_{i+n} \rangle = \langle \sigma_i \underbrace{\sigma_{i+1} \sigma_{i+1}}_1 \underbrace{\sigma_{i+2} \sigma_{i+2}}_1 \dots \sigma_{i+n} \rangle, \quad (3.17)$$

jer je umnožak spina sa samim sobom jednak jedan.

Prema definiciji (3.11) varijable μ_i dobivamo sljedeću jednakost:

$$\langle \underbrace{\sigma_i \sigma_{i+1}}_{\mu_i} \underbrace{\sigma_{i+1} \sigma_{i+2}}_{\mu_{i+1}} \sigma_{i+2} \dots \sigma_{i+n} \rangle = \langle \mu_i \mu_{i+1} \mu_{i+2} \dots \mu_{i+n-1} \rangle. \quad (3.18)$$

Iz relacije (3.16) i nezavisnosti veza između spinova, dobivamo:

$$\langle \mu_i \mu_{i+1} \mu_{i+2} \dots \mu_{i+n-1} \rangle = (\tanh \beta J)^{n-1}. \quad (3.19)$$

Iz tranzitivnosti jednakosti dobivamo:

$$\langle \sigma_i \sigma_{i+n} \rangle = (\tanh \beta J)^{n-1}. \quad (3.20)$$

Uočimo, u prethodnoj relaciji, argument funkcije tangensa hiperbolnog je nenegativan broj jer ni β ni konstanta J ne mogu poprimiti negativne vrijednosti. Budući da vrijedi

$$0 \leq \tanh x < 1, \forall x \geq 0,$$

zaključujemo da je korelacija između dva spina dana eksponencijalnom funkcijom s bazom većom od nula i manjom od jedan. Dakle, riječ je o padajućoj eksponencijalnoj funkciji, čija vrijednost opada s povećanjem n -a [1]. Time smo dobili da korelacija između dva spina opada eksponencijalno s njihovom udaljenošću pri određenoj temperaturi.

Fizikalna interpretacija i zaključak

Iz izraza (3.20) dobivamo da se na temperaturama različitim od apsolutne nule s povećanjem udaljenosti između dva spina, odnosno povećanjem n -a, gubi međusobni utjecaj spinova. To znači da malom promjenom temperature, a time i malom promjenom energije sistema koja uzrokuje promjenu smjera određenog broja spinova, ne dolazi do velike promjene u magnetizaciji sistema jer je utjecaj jednoga spina na ostale jako mali pri svim konačnim temperaturama. Zato kažemo da u jednodimenzionalnom Isingovom modelu nema faznog prijelaza pri konačnim temperaturama, temperaturama različitim od apsolutne nule.

Jedino pri apsolutnoj nuli, iz relacije (3.20), dobivamo da je $\langle \sigma_i \sigma_{i+n} \rangle = 1$, odnosno međusobni utjecaj spinova na svim udaljenostima je jako velik pa pri promjeni temperature na apsolutnu nulu dolazi do velike promjene u magnetizaciji jer se svi spinovi nastoje spontano usmjeriti. Dakle, jedino pri apsolutnoj nuli se javlja fazni prijelaz u jednodimenzionalnom Isingovom modelu.

Do istoga zaključka došao je i Ernst Ising 1925. godine te je nakon toga pogrešno zaključio da se ni na višim dimenzijama ne javljaju fazni prijelazi. U sljedećem poglavlju nastavit ćemo s razmatranjem faznoga prijelaza u dvodimenzionalnom Isingovom modelu.

Poglavlje 4

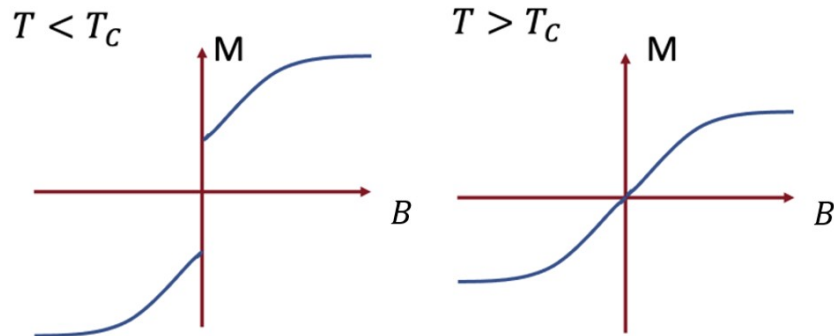
Dvodimenzionalni Isingov model

4.1 Fazni prijelaz u dvodimenzionalnom Isingovom modelu

U posljednjem primjeru uvodnog poglavlja o faznim prijelazima 2.1 navedeno je da željezo nakon što se magnetizira u magnetskom polju, posjeduje spontanu magnetizaciju koju naglo gubi zagrijavanjem iznad Curiejeve temperature T_C . Na temperaturama višim od temperature prijelaza T_C sistem je u paramagnetskoj fazi jer spinovi imaju nasumičan smjer pa je magnetizacija sistema jednaka nuli, a na temperaturama manjim od T_C magnetizacija postaje različita od nule (pozitivna ili negativna ovisno o smjeru u kojemu su okrenuti spinovi) i kažemo da se sistem nalazi u stanju razbijene simetrije, odnosno u feromagnetnoj fazi. Dakle, prijelazom preko kritične temperature značajno se mijenja magnetizacija i dolazi do faznoga prijelaza (na slici 4.1 pogledati magnetizaciju u točki kada je vanjsko magnetsko polje jednako nula).

Isingov model je matematički model feromagnetizma u statističkoj fizici. Dvodimenzionalni Isingov model sastoji se od spinova koji su ograničeni na određena mjesta u rešetci te mogu poprimiti diskretne vrijednosti $+1$ ili -1 . Spinovi mogu međudjelovati samo sa svojim najbližim susjedima u rešetci, s konstantom interakcije J , dok se interakcije sa spinovima na većim udaljenostima zanemaruju. Za razliku od jednodimenzionalnog Isingovog modela, u dvodimenzionalnom Isingovom modelu postoji fazni prijelaz na temperaturi T_C različitoj od apsolutne nule. Vrstu faznoga prijelaza možemo odrediti iz Landauove teorije.

U Landauovoj teoriji faznih prijelaza slobodna energija sistema ovisi o parametru uređenja. U Isingovom modelu parametar uređenja je magnetizacija M i dana je izrazom (2.1). Za temperature oko faznog prijelaza pretpostavlja se da je parametar uređenja mali i slobodna energija se razvija u Taylorov red po parametru uređenja. Iz Landauove teorije proizlazi



Slika 4.1: Magnetizacija feromagnetskih materijala u ovisnosti o vanjskom magnetskom polju pri temperaturama manjim (slika lijevo) i većim (slika desno) od Curiejeve prijelazne temperature. Preuzeto iz [1] i promijenjena je oznaka.

sljedeći izraz za slobodnu energiju Isingovog modela po jedinici volumena:

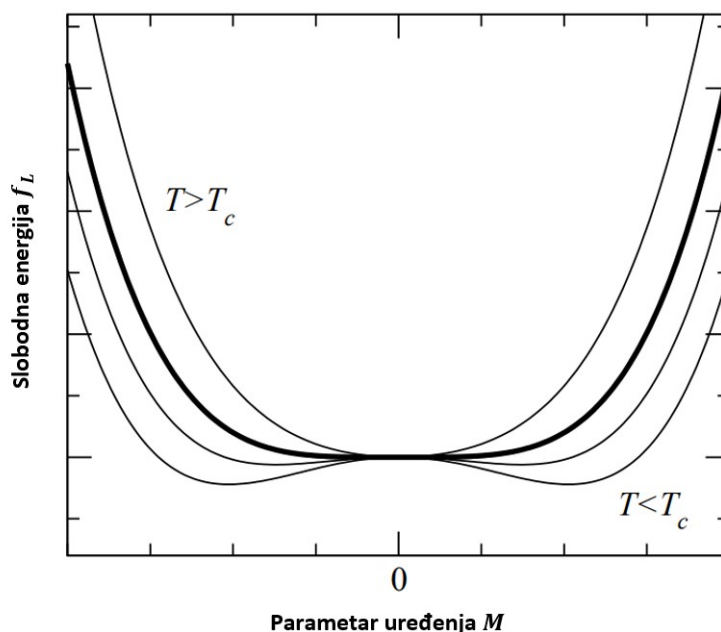
$$f_L = \frac{1}{2}a(T - T_C)M^2 + \frac{1}{4}cM^4 + \dots \quad (4.1)$$

Kako je čitavi sistem u Isingovom modelu invarijantan na rotaciju, odnosno slobodna energija u odsutnosti magnetskoga polja treba biti nepromijenjena ako se M zamijeni sa $-M$, u prethodnom izrazu za slobodnu energiju svi neparni članovi u Taylorovom razvoju su jednaki nuli. Također, viši članovi razvoja mogu se zanemariti pri promatranju faznih prijelaza.

Na slici 4.2 prikazani su grafovi slobodne energije f_L u ovisnosti o magnetizaciji M za Isingov model pri većim i manjim temperaturama T od temperature prijelaza T_C . Uočavamo na dobivenim grafovima da na temperaturama većim od temperature prijelaza T_C postoji jedan minimum slobodne energije, dok na temperaturama nižim od temperature prijelaza T_C postoje dva minimuma slobodne energije. Kako promatrani sistem opisan dvodimenzionalnim Isingovim modelom prolazi spontano kroz ireverzibilne izotermalne procese sve dok ne dođe u stanje ravnoteže u kojemu je Hemholtzova slobodna energija minimalna, tako na temperaturama nižim od temperature prijelaza sistem može spontano završiti u jednome od dva stanja koja odgovaraju minimalnim slobodnim energijama.

Odredimo sada koliko iznosi magnetizacija u ravnotežnom stanju sistema, u stanju minimalne slobodne energije. Deriviranjem desne strane relacije (4.1) po magnetizaciji i njezinim izjednačavanjem s nulom dobivamo:

$$\begin{aligned} a(T - T_C)M + cM^3 &= 0 \\ M(a(T - T_C) + cM^2) &= 0 \end{aligned}$$



Slika 4.2: Slobodna energija f_L dobivena Landauovom teorijom faznih prijelaza u ovisnosti o magnetizaciji M za Isingov model pri većim i manjim temperaturama T od temperature prijelaza T_C . Preuzeto iz [16] i prevedeno.

Odakle slijedi da slobodna energija sistema ima minimume za magnetizaciju sistema danu sljedećim izrazom:

$$M = \begin{cases} 0, & T > T_C \\ \pm \sqrt{\frac{a(T_C - T)}{c}}, & T < T_C \end{cases} \quad (4.2)$$

U izrazu (4.2) je magnetizacija za $T < T_C$ dana kao funkcija temperature T . Vidimo da magnetizacija kontruirano pada kako se temperatura T povećava prema temperaturi prijelaza T_C , a za sve veće temperature od temperature prijelaza T_C ona ima vrijednost nula.

Uvrštavanjem dobivenoga izraza za magnetizaciju u relaciju (4.1), odredimo funkciju slobodne energije u ovisnosti o temperaturi za ravnotežna stanja sistema:

$$F = \begin{cases} F_0(T), & T > T_C \\ F_0(T) - V \frac{1}{2} \frac{a|T_C - T|^2}{c}, & T < T_C \end{cases} \quad (4.3)$$

pri čemu je V volumen, a $F_0(T)$ dio slobodne energije koji ne ovisi o parametru uređenja uvedenom Landauovom teorijom faznih prijelaza, odnosno $F_0(T)$ je dio slobodne energije koji ne ovisi o magnetizaciji.

Budući da je prva derivacija po temperaturi prethodno dobivene funkcije slobodne energije F neprekidna funkcija, a funkcija druge derivacije ima prekid, zaključujemo da je u dvodimenzionalnom Isingovom modelu riječ o faznom prijelazu drugoga reda [16].

Postojanje i vrstu faznoga prijelaza u dvodimenzionalnom Isingovom modelu ispitat ćemo i pomoću numeričke simulacije u Python-u.

4.2 Simulacija dvodimenzionalnog Isingovog modela pomoću programskog jezika Python

Dvodimenzionalni Isingov model postavlja da je ukupna energija sistema dana relacijom:

$$E = -J \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j, \quad (4.4)$$

pri čemu izraz $\langle ij \rangle$ označava da interagiraju samo najbliži susjedi, a σ poprima vrijednosti ± 1 . Dana relacija vrijedi u slučaju kada nema vanjskoga magnetskog polja \vec{B} .

Prosječna magnetizacija dvodimenzionalnog Isingovog modela dana je izrazom:

$$M = \frac{1}{N} \sum_i \sigma_i, \quad (4.5)$$

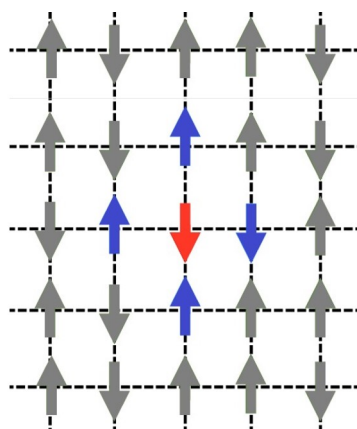
pri čemu je N broj spinova u rešetci. Postoje različite vrste rešetki, a u nastavku će biti generirane kvadratne rešetke dimenzija $n \times n$. Primjer kvadratne rešetke dimenzije 5×5 dan je na slici 4.3. Nakon što se dvodimenzionalni spinski sistem simulira na različitim temperaturama, cilj je istražiti njegova svojstva te određivanjem prosječne energije, magnetizacije i toplinskoga kapaciteta po spinu odrediti prolazi li sistem kroz fazni prijelaz i ako prolazi o kojem redu faznoga prijelaza je riječ. U nastavku poglavlja bit će prikazana implementacija u Python-u.

Dijelovi Python koda

Postavljanje parametara i generiranje dvodimenzionalnih spinskih sistema

Prije početka izvršavanja programa potrebno je postaviti parametre u sljedećem dijelu koda:

```
n = 20
brPozivaMC_ZaRavnotezu = 500
```



Slika 4.3: Shematski prikaz kvadratne rešetke dimenzija 5×5 s naznačenim najbližim susjedima promatranoga, crveno označenoga, spina. Preuzeto iz [2] i doručeno.

```
brPozivaMC_ZaRacun = 1500
```

```
brTempTocaka = 30
pocetnaTemp = 1.5
konacnaTemp = 3.25
```

Parametar n određuje dimenziju rešetke, $brTempTocaka$ određuje na koliko će različitih temperatura biti postavljen sistem. Najniža temperatura sistema bit će jednaka onoj temperaturi postavljenoj parametrom $pocetnaTemp$, a najviša temperatura na koju će biti postavljen sistem je određena parametrom $konacnaTemp$.

Nakon postavljanja parametara, konstruiraju se četiri NumPy liste:

```
temperaturneTocke = np.linspace(pocetnaTemp, konacnaTemp,
    brTempTocaka)
```

```
E = np.zeros(brTempTocaka)
M = np.zeros(brTempTocaka)
C = np.zeros(brTempTocaka)
```

Lista `temperaturneTocke` sadrži temperature na kojima ćemo promatrati sistem. Konstruira se tako da su prvi i posljednji element redom jednaki vrijednostima parametara $pocetnaTemp$ i $konacnaTemp$. Unutar toga intervala funkcija `np.linspace` daje ravnomjerno raspoređene brojeve tipa `float` i stavlja ih u listu.

Liste `E`, `M` i `C` imaju jednaki broj elemenata kao i prethodna lista, ali su im svi elementi inicijalizirani na nulu. Liste će biti popunjene na kraju izvršavanja programa, a u njima će

se nalaziti vrijednosti prosječne energije, magnetizacije i toplinskog kapaciteta sistema po spinu pri temperaturama generiranim u listi `temperaturneTocke`.

Generiranje dvodimenzionalnih spinskih sistema

Za simuliranje dvodimenzionalnog spinskog sistema kvadratnom rešetkom na određenoj temperaturi `T[i]` koristi se Monte Carlo simulacija prikazana u sljedećem dijelu koda:

```
konfiguracija = inicializirajKonfiguraciju(n)
```

```
beta = 1.0/temperaturneTocke[i]
```

```
for j in range(brPozivaMC_ZaRavnotezu):
    MonteCarlo(konfiguracija, beta)
```

Pri čemu su korištene funkcije sljedećeg oblika:

```
def inicializirajKonfiguraciju(n):
```

```
    konfiguracija = 2 * np.random.randint(2, size=(n,n)) - 1
    return konfiguracija
```

```
def MonteCarlo(konfiguracija, beta):
```

```
    for i in range(n):
```

```
        for j in range(n):
```

```
            x = np.random.randint(0, n)
```

```
            y = np.random.randint(0, n)
```

```
            trenutniSpin = konfiguracija[x, y]
```

```
            susjedniSpinovi = konfiguracija[(x+1)%n,y] +
                konfiguracija[x,(y+1)%n] + konfiguracija
                [(x-1)%n,y] + konfiguracija[x,(y-1)%n]
```

```
            promjenaEnergije = 2*trenutniSpin*
                susjedniSpinovi
```

```
            if promjenaEnergije < 0:
                trenutniSpin *= -1
```

```
            elif rand() < np.exp(-promjenaEnergije*beta):
                trenutniSpin *= -1
```

```
            konfiguracija[x, y] = trenutniSpin
```

```
    return konfiguracija
```

Za implementaciju je korišten Metropolis algoritam, u čiju matematičku pozadinu nećemo ulaziti, ali ćemo navesti osnovne korake nužne za simuliranje dvodimenzionalnog Isingovog modela.

Prvi korak algoritma je stvaranje nasumične kvadratne rešetke dimenzija $n \times n$, odnosno kvadratne matrice reda n popunjene s elementima vrijednosti 1 i -1 . Taj korak obavlja funkcija `inicializirajKonfiguraciju` stvarajući dvodimenzionalnu NumPy listu.

Nakon toga se poziva funkcija `MonteCarlo` za određenu temperaturu $T[i]$. Broj poziva funkcije u `for` petlji određen je parametrom `brPozivaMC_ZaRavnotezu` postavljenim prije izvršavanja programa. Nakon `for` petlje dobivena konfiguracija predstavlja sistem u stanju ravnoteže.

Funkcija nasumično odabire jedan element matrice `konfiguracija[x,y]` i potom računa promjenu energije koja bi se dogodila da se odabrani spin okrene u suprotnom smjeru. Budući da je energija u dvodimenzionalnom Isingovom modelu dana relacijom (4.4) i ovisi samo o vezi između najbližih susjeda, promjena energije računa se kao umnožak odabranoga spina i zbroja susjednih spinova.

Preostalo je još odrediti uvjete u kojima se odabrani spin okreće. Vjerojatnost okretanja odabranoga spina dana je relacijom (relacija je izvedena u nastavku):

$$p = \begin{cases} 1, & \Delta E \leq 0 \\ e^{-\beta\Delta E}, & \Delta E > 0 \end{cases} \quad (4.6)$$

Prethodna vjerojatnost implementirana je u "if-then" grananju. Spin se okreće ako je promjena energije manja od nule - množi se s -1 , inače ako je promjena energije veća od nule generira se random broj u intervalu $\langle 0, 1 \rangle$ i ako je on manji od $e^{-\beta\Delta E}$ spin se okreće. Uočimo, vjerojatnost da će izgenerirani random broj biti manji upravo je jednaka $e^{-\beta\Delta E}$, jer je $0 < e^{-\beta\Delta E} < 1$, za svaki $\Delta E > 0$.

Nakon što je element matrice `konfiguracija[x, y]` poprimio novu vrijednost ili zadržao staru, nasumično se bira novi spin i svi koraci algoritma se ponavljaju.

Vjerojatnost okretanja spina

Izvod relacije (4.6) temelji se na vremenski nepromijenjenoj vjerojatnosti da sistem u stanju termodinamičke ravnoteže ima određenu konfiguraciju r , odnosno vrijedi [12]:

$$\frac{\partial P_r(t)}{\partial t} = 0. \quad (4.7)$$

Općenito, za lijevu stranu jednadžbe vrijedi jednakost:

$$\frac{\partial P_r(t)}{\partial t} = - \sum_{r \neq k} [P_r(t)W_{r \rightarrow k} - P_k(t)W_{k \rightarrow r}], \quad (4.8)$$

pri čemu je $W_{k \rightarrow r}$ uvjetna vjerojatnost koja se interpretira kao vjerojatnost da sistem prijeđe iz stanja k u stanje r , obratno vrijedi za vjerojatnost $W_{r \rightarrow k}$. Izvod prethodne relacije dan je u literaturi [12] u poglavlju 2.2.4 i u njegovu matematičku pozadinu nećemo ulaziti. Izjednačavanjem desnih strana relacija (4.7) i (4.8), dobivamo:

$$P_r(t)W_{r \rightarrow k} = P_k(t)W_{k \rightarrow r}. \quad (4.9)$$

Odakle slijedi jednakost:

$$\frac{W_{k \rightarrow r}}{W_{r \rightarrow k}} = \frac{P_r(t)}{P_k(t)}. \quad (4.10)$$

Vjerojatnost da će se sistem naći u određenoj konfiguraciji pri temperaturi T dana je relacijom (1.7) u uvodnom poglavlju. Vjerojatnosti da će se sistem naći u konfiguracijama r i k redom su:

$$P_r(t) = \frac{e^{-\beta E_r}}{Z}, \quad P_k(t) = \frac{e^{-\beta E_k}}{Z}.$$

Uvrštavanjem prethodnih vjerojatnosti u izraz (4.10), dobivamo:

$$\frac{W_{k \rightarrow r}}{W_{r \rightarrow k}} = \frac{\frac{e^{-\beta E_r}}{Z}}{\frac{e^{-\beta E_k}}{Z}} = \frac{e^{-\beta E_r}}{e^{-\beta E_k}} = e^{-\beta(E_r - E_k)}.$$

U posljednje dobivenom izrazu javlja se razlika energija između dva stanja sistema:

$$\Delta E = E_r - E_k. \quad (4.11)$$

Vjerojatnost da će sistem prijeći iz stanja k u stanje r dana je relacijom:

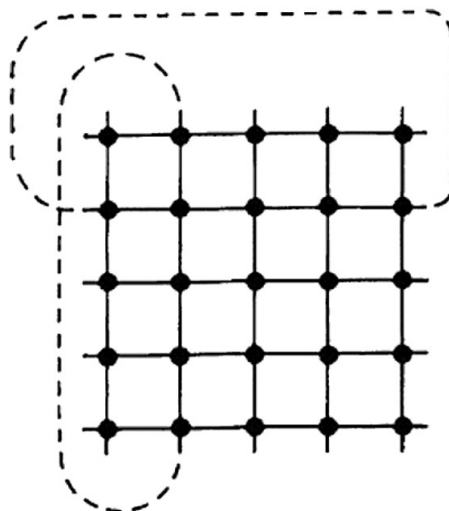
$$W_{k \rightarrow r} = W_{r \rightarrow k} \cdot e^{-\beta \Delta E}. \quad (4.12)$$

Uzmemo li da je $W_{r \rightarrow k} = 1$ dobivamo relaciju (4.6) o vjerojatnosti prelaska sistema iz jednoga stanja u drugo (iz stanja k u stanje r):

$$W_{k \rightarrow r} = \begin{cases} 1, & \Delta E \leq 0 \\ e^{-\beta \Delta E}, & \Delta E > 0 \end{cases} \quad (4.13)$$

Rubni uvjet

Simulacija se izvodi na konačnim sustavima, stoga se postavlja pitanje kako su tretirani rubovi, odnosno granice rešetke. Iz računanja varijable susjedni spinovi vidljivo je da se rub eliminira omatanjem dvodimenzionalne kvadratne rešetke u torus. Prvi spinovi u redcima rešetke su nablizi susjedi sa zadnjim spinovima u redcima i obratno, a isto vrijedi i za prve i posljednje spinove u stupcima. Takav rubni uvjet naziva se periodični rubni uvjet i prikazan je na slici 4.4 za kvadratnu rešetku. Budući da je rešetka i dalje konačna, dimenzije $n \times n$, rezultirajuća svojstva sistema razlikuju se od onih odgovarajuće beskonačne rešetke [12].



Slika 4.4: Periodični rubni uvjet za kvadratnu rešetku Isingovog modela - Prvi spin u drugom retku međudjeluje s posljednjim spinom u retku i obratno, a prvi spin u drugom stupcu međudjeluje s posljednjim spinom u istom stupcu. Analogno vrijedi za ostale retke i stupce. Preuzeto iz [12].

Funkcije računanja energije i magnetizacije sistema

Nakon što je kvadratnom matricom reda n simuliran dvodimenzionalni spinski sistem na određenoj temperaturi, moguće mu je odrediti energiju i magnetizaciju.

Funkcija računanja energije

Energija se određuje pomoću sljedećega koda:

```
def izracunajEnergiju ( konfiguracija ):
    UkupnaEnergijaKonfiguracije = 0
    for i in range ( len ( konfiguracija ) ):
        for j in range ( len ( konfiguracija ) ):
            trenutniSpin = konfiguracija [ i , j ]
            susjedniSpinovi = konfiguracija [ ( i + 1 ) % n , j ] +
                konfiguracija [ i , ( j + 1 ) % n ] + konfiguracija [ ( i
                - 1 ) % n , j ] + konfiguracija [ i , ( j - 1 ) % n ]
            UkupnaEnergijaKonfiguracije += -susjedniSpinovi *
                trenutniSpin
    return UkupnaEnergijaKonfiguracije / 2.
```


Argument funkcije je sistem određene konfiguracije, odnosno kvadratna matrica reda n (dvodimenzionalna NumPy lista), čiju je energiju potrebno odrediti pomoću formule (4.4).

Početno postavljamo ukupnu energiju sistema na nula. Potom je potrebno "protrčati" kroz sve elemente matrice i od svakoga spina uzeti njegov doprinos energiji sadržan u interakciji s najbližim spinovima i pribrojiti ga ukupnoj energiji. Kako je svaka interakcija između dva spina uračunata dva puta, potrebno je dobivenu ukupnu energiju konfiguracije podijeliti s dva. Konačno, funkcija vraća vrijednost ukupne energije dobivene konfiguracije sistema. Usporedi li se funkcija za računanje energije sa formulom (4.4), proizlazi da je vrijednost konstante interakcije $J = 1$ u programu.

Funkcija računanja magnetizacije

Funkcija magnetizacije vraća sumu vrijednosti svih spinova u dvodimenzionalnoj NumPy listi, odnosno sumu svih spinova konfiguracije koju je primila:

```
def izracunajMagnetizaciju ( konfiguracija ) :
```

```
    magnetizacija = np.sum( konfiguracija )
    return magnetizacija
```

Da bismo odredili prosječnu magnetizaciju po spinu određene konfiguracije potrebno je vrijednost koju vrati funkcija izracunajMagnetizaciju podijeliti s ukupnim brojem spinova, odnosno s n^2 .

Računanje prosječne energije, magnetizacije i specifičnog toplinskog kapaciteta

Nakon što je sistem simuliran i postavljen u ravnotežu, cilj je istražiti njegova svojstva te odrediti postoji li fazni prijelaz i koje je on vrste. Simuliranom sistemu na određenoj temperaturi program računa proječnu energiju, magnetizaciju i toplinski kapacitet po spinu. Za njihovo računanje koristi se sljedeći dio koda:

```
    beta = 1.0/ temperaturneTocke [ i ]
    sumaEn = 0
    sumaMag = 0
    sumaKvadratnihEn = 0

    for j in range( brPozivaMC_ZaRacun ) :
        MonteCarlo( konfiguracija , beta )
        trenutnaEn = izracunajEnergiju( konfiguracija )
        trenutnaMag = izracunajMagnetizaciju( konfiguracija )
```

```

sumaEn= sumaEn + trenutnaEn
sumaKvadratnihEn = sumaKvadratnihEn + trenutnaEn*
    trenutnaEn
sumaMag = sumaMag + trenutnaMag

```

```

brojSpinova = n * n
djelitelj1 = 1.0/(brPozivaMC_ZaRacun * brojSpinova)
djelitelj2 = 1.0/(brPozivaMC_ZaRacun *
    brPozivaMC_ZaRacun * brojSpinova)
BetaNaKvadrat = beta * beta

```

```

E[i] = djelitelj1 * sumaEn
M[i] = djelitelj1 * sumaMag
C[i] = BetaNaKvadrat * (djelitelj1 * sumaKvadratnihEn -
    djelitelj2 * sumaEn * sumaEn)

```

Budući da makroskopsko stanje sistema može imati mnoštvo različitih mikroskopskih realizacija, nužan je statistički pristup. Broj iteracija petlje unaprijed je određen parametrom `brPozivaMC_ZaRacun`. Prilikom svake iteracije ponovno se poziva Monte Carlo simulacija koja radi promjenu na sistemu ili ga vraća onakvim kakav je bio prije poziva funkcije. Novodobivenom sistemu u svakom prolasku petljom računa se magnetizacija i energija korištenjem funkcija iz prethodnoga poglavlja. Suma energija, energija na kvadrat i magnetizacije računaju se kumulativno, prije ulaska u petlju inicijaliziramo ih na nulu, a zatim ih povećavamo redom za energiju, energiju na kvadrat i magnetizaciju sistema u trenutnoj iteraciji. Nakon petlje računaju se prosječna energija i magnetizacija po spinu za trenutnu temperaturu $T[i]$, dijeljenjem odgovarajućih suma s brojem prolazaka kroz petlju i brojem spinova u rešetci.

Za računanje toplinskog kapaciteta koristi se relacija (1.17) koju smo izveli u uvodnom poglavlju:

$$C = k_B \cdot \beta^2 \cdot (\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2). \quad (4.14)$$

U poglavlju 2.3 pokazali smo da je toplinski kapacitet, kao druga derivacija slobodne energije, nužan za određivanje faznoga prijelaza. Ukoliko fazni prijelaz postoji, na prijelaznoj temperaturi T_C trebao bi postojati prekid ili bi u toj točki funkcija toplinskog kapaciteta trebala divergirati.

Dobiveni prosjeci po spinu spremaju se u NumPy liste, tako da i -ta energija, magnetizacija ili toplinski kapacitet odgovara i -toj temperaturi iz liste `temperaturneTocke` izgenerirane na početku izvršavanja.

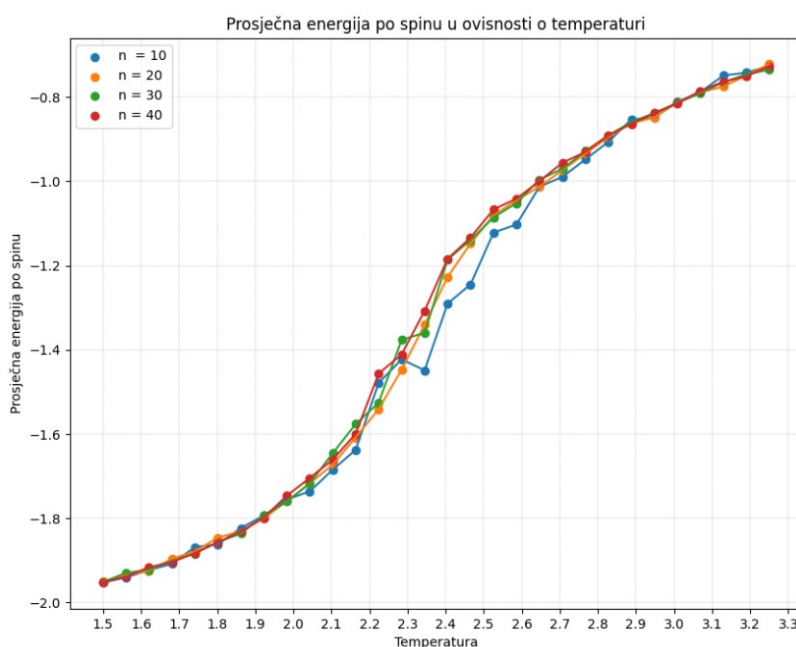
Cijeli Python kod nalazi se u dodatku A.

4.3 Rezultati i diskusija

Za dobivanje rezultata, prije izvršavanja programa, svi parametri su bili postavljeni kao na početku prethodnoga poglavlja i promatrala se ovisnost o dimenzijama rešetke mijenjanjem parametra n .

Prosječna energija

Na slici 4.5 prikazani su rezultati dobiveni simulacijom dvodimenzionalnog Isingovog modela za prosječnu energiju po spinu u ovisnosti o temperaturi.



Slika 4.5: Graf prosječne energije po spinu u ovisnosti o temperaturi za rešetke različitih dimenzija 10×10 , 20×20 , 30×30 i 40×40 u dvodimenzionalnom Isingovom modelu.

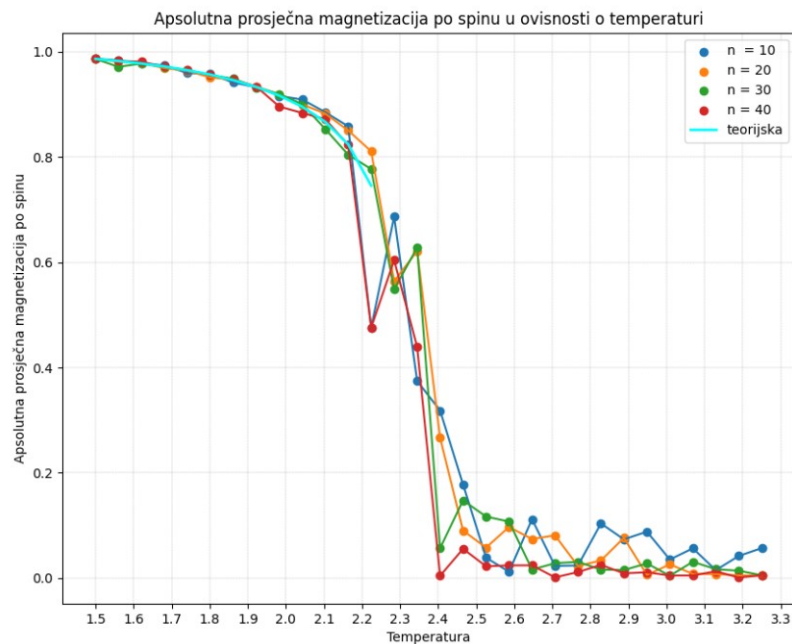
Iz grafova je vidljivo da prosječna energija po spinu pada kako pada i temperatura na koju se postavlja sistem. Uočava se da se smanjenjem temperature prosječna energija približava vrijednosti -2 što je u skladu s relacijom (4.4), gdje minimalna vrijednost prosječne energije po spinu iznosi $\langle E \rangle = -2$ za $J = 1$. Negativna energija spinova javlja se jer se susjedni spinovi nastoje poravnati u istome smjeru. Stoga, negativna prosječna energija implicira da je više susjednih spinova u rešetki usmjereno u istome smjeru nego u suprotnom, a porast prosječne energije s temperaturom označava da je sve manje spinova usmjereno u istome smjeru kao susjedi. Uočavamo da se za različite dimenzije rešetke dobiveni rezul-

tati ne razlikuju značajno jer je prosječna energija po spinu intenzivna veličina i ne ovisi o veličini sistema.

Prosječna magnetizacija

Na slici 4.6 prikazane su dobivene apsolutne prosječne magnetizacije po spinu $|\langle M \rangle|$ u dvodimenzionalnom Isingovom modelu. Također je prikazano i slaganje s analitičkim rješenjem za spontanu magnetizaciju koje je 1949. dobio Lars Onsager za dvodimenzionalni Isingov model, prilagođeno je slučaju kada je konstanta interakcije J jednaka jedan kao i Boltzmannova konstanta k_B [8]:

$$M = \left(1 - \left(\sinh \frac{2}{T} \right)^{-4} \right)^{\frac{1}{8}}. \quad (4.15)$$



Slika 4.6: Graf apsolutne prosječne magnetizacije po spinu u ovisnosti o temperaturi za rešetke različitih dimenzija 10×10 , 20×20 , 30×30 i 40×40 u dvodimenzionalnom Isingovom modelu.

Sistem u termodinamičkoj ravnoteži na niskim temperaturama ima jednaku vjerojatnost magnetiziranja u pozitivnom smjeru M i u negativnom $-M$ (pogledati sliku 4.2). Čitavi sistem u dvodimenzionalnom Isingovom modelu invarijantan je na rotaciju, odnosno zamje-

nom M sa $-M$ slobodna energija ostaje nepromijenjena. Stoga, bez smanjenja općenitosti kao parametar uređenja umjesto $\langle M \rangle$ uzimamo njegovu apsolutnu vrijednost.

Uočavamo značajan pad prosječne magnetizacije po spinu u području temperatura između vrijednosti 2.2 i 2.4. Za temperature nakon toga magnetizacija se približila vrijednosti nula, posebno za rešetke dimenzija 30×30 i 40×40 , a za manje dimenzije se odrazio efekt konačnosti sistema, odnosno većih vjerojatnosti pojavljivanja fluktuacija. Landauovom teorijom parametar uređenja definiran je kao veličina koja je nula u neuređenom stanju sistema na temperaturama iznad temperature prijelaza, a različita od nula u uređenom stanju sistema na temperaturama nižim od temperature prijelaza. Uočeno ukazuje na postojanje faznog prijelaza i prijelazne temperature T_C unutar intervala temperatura $\langle 2.2, 2.4 \rangle$ te na magnetizaciju kao parametar uređenja u dvodimenzionalnom Isingovom modelu.

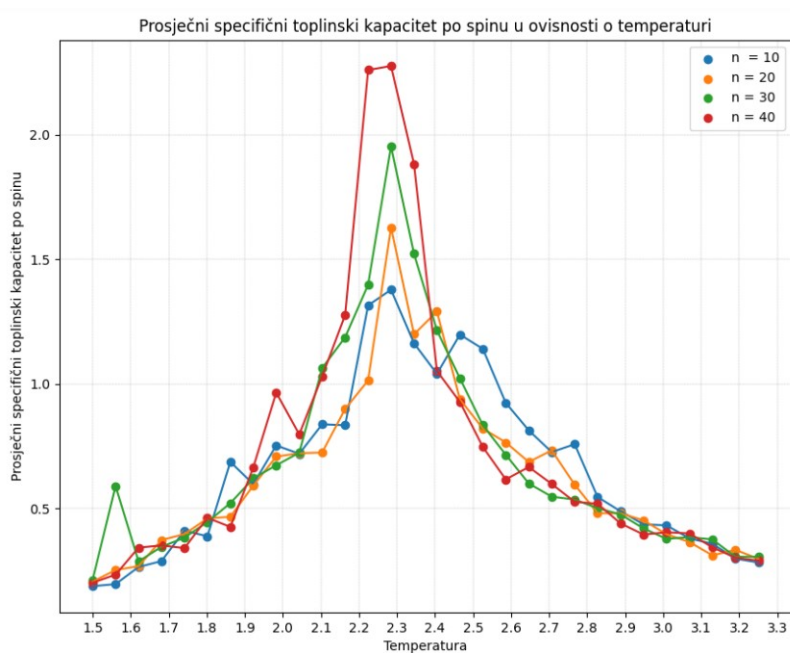
Dakle, u feromagnetskoj fazi magnetizacija se približava vrijednosti jedan, dok se u paramagnetskoj fazi parametar uređenja približava vrijednosti nula. Unutar uočenoga intervala, temperature su u blizini faznoga prijelaza stoga se javljaju velike fluktuacije u magnetizaciji i ona poprima širok raspon vrijednosti. Također se uočava sa slike da kako broj spinova raste, odnosno kako se povećava dimenzija rešetke, nagib magnetizacijske krivulje raste u području gdje se javlja fazni prijelaz.

Prosječni specifični toplinski kapacitet

Na slici 4.7 prikazani su grafovi prosječnog specifičnog toplinskog kapaciteta po spinu u ovisnosti o temperaturi, za različite dimenzije rešetki u dvodimenzionalnom Isingovom modelu.

Budući da je sistem konačan, simulacijom se ne može postići divergencija funkcije toplinskog kapaciteta, ali dobiveni rezultati pokazuju da povećanjem dimenzije rešetke vrh krivulje specifičnog toplinskog kapaciteta postaje sve oštiji unutar intervala $\langle 2.2, 2.3 \rangle$ i vrijednost maksimuma krivulje raste. Ovo nas navodi na postojanje faznoga prijelaza dvodimenzionalnog Isingovog modela unutar toga intervala. Zbog oblika krivulje zaključujemo da je riječ o faznom prijelazu drugoga reda kada funkcija toplinskog kapaciteta divergira u točki faznoga prijelaza kao što je diskutirano u poglavlju 2.3.

Kod grafova za prosječnu magnetizaciju po spinu zaključili smo da se fazni prijelaz dvodimenzionalnog Isingovog modela javlja unutar temperaturnog intervala $\langle 2.2, 2.4 \rangle$, a kod toplinskog kapaciteta dobiven je interval $\langle 2.2, 2.3 \rangle$. Oba rezultata su u skladu s analitičkom temperaturom prijelaza $T_C = 2.2692$ za konstantu interakcije J jednaku 1 [18]. Konačno, iz simulacije zaključujemo da se u dvodimenzionalnom Isingovom modelu javlja fazni prijelaz drugoga reda kako je dobiveno i Landauovom teorijom u poglavlju 4.1.



Slika 4.7: Graf prosječnog specifičnog toplinskog kapaciteta po spinu u ovisnosti o temperaturi za rešetke različitih dimenzija 10×10 , 20×20 , 30×30 i 40×40 u dvodimenzionalnom Isingovom modelu.

Dodatak A

Python kod za simulaciju dvodimenzionalnog Isingovog modela

```
import numpy as np
from numpy.random import rand
import matplotlib.pyplot as plt
from scipy.sparse import spdiags, linalg, eye

def inicializirajKonfiguraciju(n):

    konfiguracija = 2*np.random.randint(2, size=(n,n))-1
    return konfiguracija

def MonteCarlo(konfiguracija, beta):

    for i in range(n):
        for j in range(n):
            x = np.random.randint(0, n)
            y = np.random.randint(0, n)
            trenutniSpin = konfiguracija[x, y]
            susjedniSpinovi = konfiguracija[(x+1)%n,y] +
                konfiguracija[x,(y+1)%n] + konfiguracija
                [(x-1)%n,y] + konfiguracija[x,(y-1)%n]
            promjenaEnergije = 2*trenutniSpin*
                susjedniSpinovi

            if promjenaEnergije < 0:
```

```
        trenutniSpin *= -1
        elif rand() < np.exp(-promjenaEnergije*beta)
        :
            trenutniSpin *= -1
            konfiguracija[x, y] = trenutniSpin
    return konfiguracija

def izracunajEnergiju(konfiguracija):

    UkupnaEnergijaKonfiguracije = 0
    for i in range(len(konfiguracija)):
        for j in range(len(konfiguracija)):
            trenutniSpin = konfiguracija[i, j]
            susjedniSpinovi = konfiguracija[(i+1)%n, j] +
                konfiguracija[i, (j+1)%n] + konfiguracija[(i
                -1)%n, j] + konfiguracija[i, (j-1)%n]
            UkupnaEnergijaKonfiguracije += -susjedniSpinovi*
                trenutniSpin
    return UkupnaEnergijaKonfiguracije/2.

def izracunajMagnetizaciju(konfiguracija):

    magnetizacija = np.sum(konfiguracija)
    return magnetizacija

n = 40
brPozivaMC_ZaRavnotezu = 500
brPozivaMC_ZaRacun = 1500
brTempTocaka = 30
pocetnaTemp = 1.5
konacnaTemp = 3.25
temperaturneTocke = np.linspace(pocetnaTemp, konacnaTemp,
    brTempTocaka)
E = np.zeros(brTempTocaka)
M = np.zeros(brTempTocaka)
C = np.zeros(brTempTocaka)

for i in range(brTempTocaka):
    konfiguracija = inicializirajKonfiguraciju(n)
```



```
beta = 1.0/temperaturneTocke[i]
sumaEn = 0
sumaMag = 0
sumaKvadratnihEn = 0

for j in range(brPozivaMC_ZaRavnotezu):
    MonteCarlo(konfiguracija, beta)

for j in range(brPozivaMC_ZaRacun):
    MonteCarlo(konfiguracija, beta)
    trenutnaEn = izracunajEnergiju(konfiguracija)
    trenutnaMag = izracunajMagnetizaciju(konfiguracija)

    sumaEn = sumaEn + trenutnaEn
    sumaKvadratnihEn = sumaKvadratnihEn + trenutnaEn*
        trenutnaEn
    sumaMag = sumaMag + trenutnaMag

brojSpinova = n * n
djelitelj1 = 1.0/(brPozivaMC_ZaRacun * brojSpinova)
djelitelj2 = 1.0/(brPozivaMC_ZaRacun *
    brojSpinova)
BetaNaKvadrat = beta * beta

E[i] = djelitelj1 * sumaEn
M[i] = djelitelj1 * sumaMag
C[i] = BetaNaKvadrat * (djelitelj1 * sumaKvadratnihEn -
    djelitelj2 * sumaEn * sumaEn)
```

Bibliografija

- [1] A. Kabelac, One- and two-dimensional Ising model, dostupno na https://www.thphys.uni-heidelberg.de/~wolschin/statsem21_3s.pdf (listopad 2022.)
- [2] A. K. Nair, Tuning and control of the magnetic properties of two-dimensional materials, dostupno na https://www.researchgate.net/publication/344882820_TUNING_AND_CONTROL_OF_THE_MAGNETIC_PROPERTIES_OF_TWO-_DIMENSIONAL_MATERIALS (listopad 2022.)
- [3] C. Kittel, Elementary Statistical Physics, Dover publications, New York, 1958.
- [4] D. J. Griffiths, Introduction to electrodynamics, Prentice-Hall, New Jersey, 1999.
- [5] D. K. Sunko, Statistička fizika i termodinamika, dostupno na <http://www.phy.pmf.unizg.hr/dodip/notes/statisticka/statisticka.pdf> (listopad 2022.)
- [6] F. Little, A Brief Introduction to Statistical Mechanics, Research & Reviews: Journal of Pure and Applied Physics, 10 (2022.), 8-9.
- [7] H. St ocker W. Greiner, L. Neise, Thermodynamics and statistical mechanics, Springer, New York, 1995.
- [8] I. Agarwal, Numerical Analysis of 2-D Ising Model, dostupno na https://www.hiskp.uni-bonn.de/uploads/media/ising_II.pdf (studeni 2022.)
- [9] I. Batistić, Topološka stanja i topološki prijelazi, Matematičko-fizički list, LXVII 3 (2016.-2017.), 176-180.
- [10] Introduction to Thermodynamics, dostupno na <https://www.eng.uc.edu/~beaucag/RyanBreese/thermodynamics/Thermo.htm> (listopad 2022.)
- [11] J. C. Strauß, Phase Transitions and Critical Phenomena, dostupno na https://www.thphys.uni-heidelberg.de/~wolschin/statsem20_5s.pdf (listopad 2022.)

- [12] K. Binder D. Landau, A Guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics, Cambridge University Press, United Kingdom, 2000.
- [13] M. Milin, Opća fizika 2: Relativistika i elektromagnetizam, Prirodoslovno-matematički fakultet, Zagreb, 2013.
- [14] M. Milin, Opća fizika 4: Toplina, termodinamika i osnove kvantne fizike, Prirodoslovno-matematički fakultet, Zagreb, 2014.
- [15] M. Schwartz, Lecture 7: Ensembles, dostupno na <https://scholar.harvard.edu/files/schwartz/files/7-ensembles.pdf> (listopad 2022.)
- [16] P. D. Olmsted, Lectures on Landau Theory of Phase Transitions, dostupno na https://site.physics.georgetown.edu/~pdo7/ps_files/landau.pdf (listopad 2022.)
- [17] R. J. Baxter, Exactly solved models in statistical mechanics, Academic press, London, 1982.
- [18] T. Baruah, Numerical Simulations of 2D Ising Model, dostupno na https://web.iisermohali.ac.in/Faculty/anoshjoseph/internships/2021/report_2021_Tushar_Baruah.pdf (studeni 2022.)

Sažetak

Isingov model je matematički model uveden kao pojednostavljeni prikaz feromagnetizma u statističkoj fizici i kao takav bavi se fizikom faznih prijelaza. Model sadrži varijable diskretnih vrijednosti ± 1 , koje predstavljaju magnetske dipolne momente atoma – spinove. Osnovna pretpostavka modela je interakcija spina samo s njegovim najbližim susjedima. U jednodimenzionalnom Isingovom modelu pokazuje se nepostojanje faznoga prijelaza, osim pri temperaturi apsolutne nule. Landauova teorija faznih prijelaza dovodi do zaključka da se u dvodimenzionalnom Isingovom modelu javlja fazni prijelaz drugoga reda pri prelasku sistema iz feromagnetske u paramagnetsku fazu. Monte Carlo simulacijom generira se kvadratna rešetka dvodimenzionalnog Isingovog modela te se računaju termodinamičke veličine prosječne energije, magnetizacije i toplinskog kapaciteta, čija interpretacija dovodi do zaključka o pojavi i vrsti faznoga prijelaza.

Ključne riječi: Isingov model, fazni prijelazi, prijelazna temperatura, Landauova teorija, magnetizacija, Monte Carlo simulacija

Summary

The Ising model is a mathematical model introduced as a simplified representation of ferromagnetism in statistical physics and, as such, is concerned with the physics of phase transitions. The model consists of variables with discrete values ± 1 that represent magnetic dipole moments of atoms - spins. The model assumes that each spin has only nearest-neighbour interaction. Phase transition in the one-dimensional Ising model does not occur except at absolute zero temperature. Landau's theory of phase transitions leads to the conclusion that in the two-dimensional Ising model, a phase transition of the second order occurs during the system's transition from the ferromagnetic to the paramagnetic phase. Monte Carlo simulation generates a square lattice of the two-dimensional Ising model and calculates the thermodynamic quantities of average energy, magnetization and heat capacity, the interpretation of which leads to a conclusion about the occurrence and type of phase transition

Key words: Ising model, phase transitions, transition temperature, Landau theory, magnetization, Monte Carlo simulation

Životopis

Rođena sam 2. travnja 1998. u Novoj Gradiški. Po završetku školovanja u Osnovnoj školi Mato Lovrak u Novoj Gradiški upisujem Gimnaziju Nova Gradiška u kojoj s obrazovanjem završavam 2016. godine. Iste godine na Prirodoslovno-matematičkom fakultetu Sveučilišta u Zagrebu upisujem integrirani preddiplomski i diplomski studij Matematika i fizika; smjer: nastavnički. Tijekom osnovnoškolskog i srednjoškolskog obrazovanja bila sam aktivan član Mažoretkinja grada Nove Gradiške i sudjelovala na državnim i europskim mažoret i twirling prvenstvima. Za vrijeme studija sudjelovala sam na radionici Šarena fizika u sklopu manifestacije Dan i noć na PMF-u. Izvan svoga studijskog programa položila sam četiri računarska kolegija s preddiplomskog sveučilišnog studija Matematike: Programiranje 1, Programiranje 2, Strukture podataka i algoritmi te Računarski praktikum 1. Godine 2022. sudjelovala sam na Summer Campu Ericssona Nikole Tesle gdje sam, radeći na temi „Quantum Tomography of N-Qubit Noninteracting System with Neural Networks“, dobila certifikat.