

Isingov model feromagnetizma

Janez Ivan Pavlič^{a,b}, Aleš Igljč^b

^a Zdravstvena fakulteta, Poljanska cesta 26a, 1000 Ljubljana, Slovenija

^b Fakulteta za elektrotehniko, Tržaška 25, 1000 Ljubljana, Slovenija

e-mail: ales.iglic@fe.uni-lj.si

Povzetek. Obravnavamo posplošen Isingov mrežni model feromagnetizma; posplošen tako, da lahko model uporabimo za 1-D, 2-D in 3-D problem. Za izračun temperature nad kritično temperaturo T_C smo uporabili približek za razvoj v vrsto. Pri notranji energiji obravnavanega sistema (interakcije med spini) smo za povprečno orientacijo sosednjih spinov uporabili model povprečnega polja.

Ključne besede: Isingov model, feromagnetizem, teorija povprečnega polja

The Ising model of ferromagnetism

Extended abstract. The paper deals with the generalized Ising model of ferromagnetism. Being generalized means that the model can be used for solving the 1D, 2D and 3D problems. The spins were divided into a mesh-lattice model. To calculate the temperature above transition temperature T_C , we used series expansion approximation, for spin-to-spin interaction the mean field theory, enabling us to calculate the average orientation of neighboring spins, and to calculate for high temperatures approximation.

Key words: Ising mesh lattice model, ferromagnetism, mean field theory

1 Uvod

Isingov model je dobil ime po fiziku Ernstu Isingu, ki se je rodil leta 1900 v Nemčiji in umrl leta 1998 v ZDA. Je osnova nekaterih statistično-mehanskih teoretičnih modelov, ki se uporabljajo za opis feromagnetizma. Med feromagnete uvrščamo železo (Fe), kobalt (Co), nikelj (Ni), magnetit (Fe_3O_4) in druge.

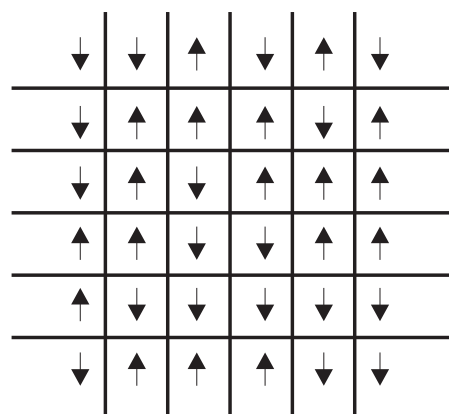
Na kratko ponovimo, kar smo se naučili o magnetnem polju [1]. K celotnemu magnetnemu polju v snovi B_{tot} pripomore zunanje magnetno polje (B) in magnetno polje, ki ga povzročajo gradniki snovi, atomi (molekule) (B_m): $B_{tot} = B + B_m$. Magnetno polje v snovi B_m je sorazmerno magnetizaciji: $B_m = \mu_0 M$, ki je definirana kot $M = n \langle p_m \rangle = \frac{N}{V} \langle p_m \rangle$, kjer je $\langle p_m \rangle$ povprečna vrednost komponente magnetnega dipolnega momenta molekule v smeri magnetnega polja, $n = N/V$ označuje število molekul na enoto volumna in μ_0 indukcijska konstanta vakuumu. Magnetizacija je sorazmerna jakosti ma-

gnetnega polja H : $M = \chi H$, kjer je χ susceptibilnost. Torej:

$$\begin{aligned} B_{tot} &= B + B_m = B + \mu_0 \chi H = \mu_0 H + \mu_0 \chi H = \\ &= \mu_0 (1 + \chi) H = \mu_0 \mu H, \end{aligned} \quad (1)$$

kjer je permeabilnost μ enaka $\mu = 1 + \chi$.

V nadaljevanju se omejimo na obravnavo 3 dimenzionalnega (3-D) Isingovega modela feromagnetizma v okviru mrežnega modela, ki je shematsko prikazan na sliki 1.



Slika 1. Prikazan je presek usmeritve magnetnih dipolnih momentov molekul v 3-D Isingovem modelu. Magnetni dipolni momenti so razporejeni v kvadratni mreži in imajo lahko samo dve orientaciji; gor (↑) in dol (↓).

Figure 1. Magnetic dipole moments placed in a square mesh lattice block and having two orientations, i. e. pointing up (↑) or down (↓). The figure shows just a cut through the 3D mesh block.

2 Model

Prosto energijo (F) modelnega sistema, ki je prikazan na sliki 1, zapišemo v obliki:

$$F = E - TS, \quad (2)$$

kjer je E notranja energija sistema, ki zajema povprečno energijo lastnih in medsebojnih interakcijskih energij vseh molekul v sistemu, S je entropija sistema, T pa absolutna temperatura.

V modelu smo uporabili teorijo povprečnega polja (mean field theory), kar je pozneje razvidno iz enačb (8 - 13). Ko imamo sistem z veliko delci, ki interagirajo med seboj, se je smiselno zateči k teoriji povprečnega polja in si tako olajšati delo pri iskanju rešitve sistema. Tako sistem z N delci prevedemo v sistem interakcije enega delca s povprečnim, efektivnim (zunanjim) poljem. Povprečno polje je zamenjava interakcij med izbranim delcem v sistemu in drugimi delci tega sistema. Tako nam povprečno polje odraža efektivno interakcijo med delci v sistemu. To je razvidno iz enačbe (8), ko izračunamo povprečno orientacijo sosedov in ne računamo orientacije sosedov za vsak delec posebj.

Najprej bomo izračunali entropijo sistema (S), ki nastopa v enačbi (2). V našem primeru 3-D Isingovega modela feromagnetizma obravnavamo N molekul v mrežni kocki z N mesti. Posamezna molekula je lahko v dveh stanjih glede na usmeritev njenega magnetnega dipolnega momenta, ki lahko kaže samo gor (+) (tj. v smeri magnetnega polja) ali dol (-); slika 1.

Izračunajmo konfiguracijsko entropijo sistema. Število mogočih prostorskih razporeditev za prvo molekulo, ki jo postavimo v prazno 3-D mrežo z N mesti, je N , za drugo molekulo ($N - 1$), za tretjo molekulo ($N - 2$) in tako naprej. Vseh mogočih razporeditev je tako $N(N - 1)(N - 2) \cdots 1 = N!$. Pri tem smo upoštevali, da so vse molekule med seboj razločljive. V resnici pa molekul, ki imajo magnetni dipolni moment obrnjen navzgor (označimo njihovo število z N_+), med seboj ne moremo razločevati. Prav tako ne moremo razločevati med molekulami, ki imajo magnetne dipolne momente obrnjene navzdol (označimo njihovo število z N_-). Tako, da celotno število možnih razporeditev N molekul na N mrežnih mest ni $N!$, temveč W :

$$W = \frac{N!}{N_+!N_-!}. \quad (3)$$

Za sistem, ki je v termičnem ravnovesju, zapišemo konfiguracijsko entropijo v 3-D Isingovem mrežnem modelu [2], [3] kot:

$$\begin{aligned} S &= k \ln W = k \ln \left[\frac{N!}{N_+!N_-!} \right] = \\ &= k [\ln N! - \ln N_+! - \ln N_-!], \end{aligned} \quad (4)$$

kjer predpostavimo samo dve mogoči orientaciji magnetnih dipolnih momentov (\uparrow in \downarrow) posamezne molekule v sistemu. Pri računanju konfiguracijske entropije (S) privzamemo, da je verjetnost za orientacijo posameznega spina neodvisna od orientacij sosednjih spinov.

Za veliki N uporabimo Stirlingovo aproksimacijo: $\ln N! \approx N \ln N - N$ ter tako iz enačbe (4) dobimo naslednje:

$$\begin{aligned} S &= k[N(\ln N - 1) - N_+(\ln N_+ - 1) - \\ &\quad - N_-(\ln N_- - 1)] = \\ &= k[(N_+ + N_-) \ln N - \\ &\quad - N_+ \ln N_+ - N_- \ln N_-] = \\ &= k[N_+ \ln N + N_- \ln N - \\ &\quad - N_+ \ln N_+ - N_- \ln N_-] \\ S &= k \left[N_+ \ln \frac{N}{N_+} + N_- \ln \frac{N}{N_-} \right] = \\ &= -kN \left[\frac{N_+}{N} \ln \frac{N_+}{N} + \frac{N_-}{N} \ln \frac{N_-}{N} \right] = \\ &= -kN [c_+ \ln c_+ + c_- \ln c_-], \end{aligned} \quad (5)$$

kjer je $c_+ = \frac{N_+}{N}$ verjetnost, da je magnetni dipolni moment molekule obrnjen navzgor, $c_- = \frac{N_-}{N}$ pa verjetnost, da je obrnjen navzdol [4]. Tako sledi, da je $c_+ + c_- = 1$. V nadaljevanju izpeljemo izraz za notranjo energijo sistema, ki jo sestavlja vsota lastnih energij magnetnih dipolnih momentov molekul (2. člen) ter njihove medsebojne interakcijske energije (1. člen) [5, 6]:

$$E = - \sum_{i,k} J_{ik} \sigma_i \sigma_k - p_m B \sum_i \sigma_i, \quad (6)$$

kjer je p_m velikost magnetnega dipolnega momenta ene molekule, B gostota zunanjega magnetnega polja, J_{ik} moč interakcijske energije (tj. moč sklopitve) med i -tim in k -tim sosednjim magnetnim dipolom (pri čemer upoštevamo samo najbližje sosedo), spremenljivka σ_i določa orientacijo posameznega magnetnega dipola (\uparrow pomeni usmeritev v smeri magnetnega polja (σ_\uparrow), \downarrow pa usmeritev v nasprotni smeri (σ_\downarrow)). Poljubno orientacijo magnetnih dipolnih momentov atomov (molekul) smo, tako kot že prej pri izpeljavi entropije sistema, nadomestili z dvema orientacijama \uparrow in \downarrow (slika 1). Pravimo, da obravnavamo orientacijo magnetnega dipolnega momenta molekule v okviru dvostanjskega modela.

V prvem členu enačbe (6), to je v izrazu za interakcijsko energijo magnetnih dipolnih momentov molekul v sistemu, upoštevamo le interakcijske energije najbližjih sosedov, kjer upoštevamo $J_{ik} = J$. Ker pa interakcije med sosednjimi magnetnimi dipolnimi momenti (spini) štejemo dvakrat, moramo dodati faktor $1/2$ (glej enačbo (12)).

Tako lahko prvi člen v enačbi (6) zapišemo v obliki:

$$- J \sum_{i,k} \sigma_i \sigma_k. \quad (7)$$

Energijo sklopitve magnetnih dipolnih momentov $-J \sum_{i,k} \sigma_i \sigma_k$ zapišemo v dveh korakih. Najprej izračunamo povprečno energijo magnetnih dipolov, ki so usmerjeni navzgor (\uparrow):

$$-J(Nc_+) \sigma_{\uparrow} \bar{\sigma}_{sosed} z, \quad (8)$$

kjer je Nc_+ povprečno število magnetnih dipolov v sistemu, ki so usmerjeni navzgor (\uparrow), N je število vseh magnetnih dipolov v sistemu, $\bar{\sigma}_{sosed}$ je povprečna vrednost σ najbližjih sosedov, ki jih je z :

$$\bar{\sigma}_{sosed} = (c_+ - c_-). \quad (9)$$

Kombinacija enačb (8) in (9) nam da:

$$-JNc_+ \sigma_{\uparrow} \bar{\sigma}_{sosed} z = -JNc_+ (c_+ - c_-) z, \quad (10)$$

kjer smo upoštevali $\sigma_{\uparrow} = 1$. Podobno izračunamo še povprečno energijo magnetnih dipolov v sistemu, ki so usmerjeni navzdol (\downarrow):

$$\begin{aligned} -JNc_- \sigma_{\downarrow} \bar{\sigma}_{sosed} z &= -JNc_- (-1) (c_+ - c_-) z = \\ &= -JNc_- (c_- - c_+) z, \end{aligned} \quad (11)$$

kjer je Nc_- povprečno število magnetnih dipolov v sistemu, ki so usmerjeni navzdol (\downarrow), in upoštevali smo, da je $\sigma_{\downarrow} = -1$. Povprečno interakcijsko energijo vseh magnetnih dipolov v sistemu dobimo tako, da seštejemo enačbi (10) in (11):

$$-J \sum_{i,k} \sigma_i \sigma_k = -\frac{1}{2} z N J [c_+ c_+ + c_- c_- - 2c_+ c_-]. \quad (12)$$

Število najbližnjih sosedov (z) okoli izbranega atoma je v našem primeru v 3-D mrežni kocki enako 6, v 1-D mrežnem modelu je $z = 2$, v 2-D mrežnem modelu pa je $z = 4$.

Drugi člen iz enačbe (6), to je $p_m B \sum_i \sigma_i$, ki opisuje energijo magnetnih dipolov v povprečnem magnetnem polju B , izrazimo kot:

$$-p_m B \sum_i \sigma_i = -p_m B N (c_+ - c_-). \quad (13)$$

Celotno povprečno energijo sistema E ob upoštevanju enačb (6), (12) in (13) zapišemo v obliki:

$$E = -\frac{1}{2} z N J [c_+^2 + c_-^2 - 2c_+ c_-] - p_m B N (c_+ - c_-). \quad (14)$$

Vpeljemo novo spremenljivko $x = c_+ - c_-$, od koder sledi:

$$c_+ = \frac{1}{2} (1 + x) \quad \text{in} \quad c_- = \frac{1}{2} (1 - x). \quad (15)$$

Ob upoštevanju izrazov v (15) lahko izraz za energijo E (enačba (14)) zapišemo v obliki:

$$E = N \left\{ -\frac{1}{2} z J x^2 - p_m B x \right\}, \quad (16)$$

izraz za entropijo sistema S (enačba (5)) pa kot:

$$\begin{aligned} S &= -kN \left\{ \frac{1}{2} (1+x) \ln(1+x) + \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{2} (1-x) \ln(1-x) - \ln 2 \right\}. \end{aligned} \quad (17)$$

Prosta energija sistema $F = E - TS$ ima zdaj obliko:

$$\begin{aligned} F &= N \left\{ -\frac{1}{2} z J x^2 - p_m B x + \right. \\ &\quad \left. + \frac{kT}{2} (1+x) \ln(1+x) + \right. \\ &\quad \left. + \frac{kT}{2} (1-x) \ln(1-x) \right\}, \end{aligned} \quad (18)$$

kjer smo izpustili člen $-kTN \ln 2$, ki ni odvisen od x .

V nadaljevanju poiščemo minimum proste energije sistema F tako, da odvajamo enačbo (18) po spremenljivki x :

$$\begin{aligned} \frac{\partial F}{\partial x} &= -zJx - p_m B + \frac{kT}{2} \left[\ln(1+x) + \frac{(1+x)}{(1+x)} \right] + \\ &\quad + \frac{kT}{2} \left[-\ln(1-x) - \frac{(1-x)}{(1-x)} \right] = \\ &= -zJx - p_m B + \frac{kT}{2} \ln \left[\frac{1+x}{1-x} \right] = 0. \end{aligned} \quad (19)$$

Uvedemo oznako:

$$\alpha = \ln \left[\frac{1+x}{1-x} \right] \implies e^\alpha = \frac{1+x}{1-x}, \quad (20)$$

od koder sledi:

$$x = \frac{e^\alpha - 1}{e^\alpha + 1} = \tanh \frac{\alpha}{2}. \quad (21)$$

Ob upoštevanju definicije α lahko enačbo (19) zapišemo takole:

$$\frac{\alpha}{2} = \frac{p_m B + zJx}{kT}. \quad (22)$$

Iz enačb (21) in (22) pa sledi:

$$x = \tanh \left[\frac{p_m B + zJx}{kT} \right]. \quad (23)$$

V okviru obravnavanega Isingovega modela lahko magnetizacijo sistema M zapišemo takole:

$$M = n \langle p_m \rangle = n (c_+ - c_-) p_m = n x p_m = \frac{N}{V} x p_m. \quad (24)$$

3 Napovedi modela

V nadaljevanju se lotimo reševanja enačbe (23) za več posebnih primerov.

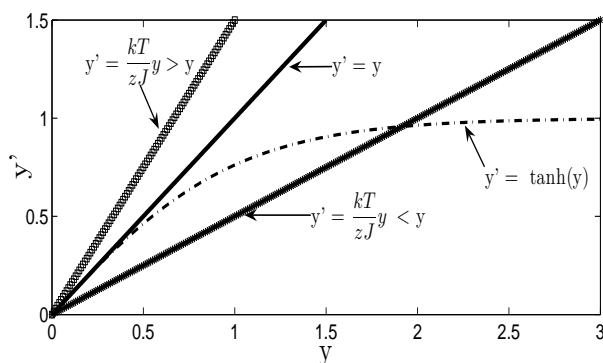
1. Najprej obravnavamo sistem, kjer ni zunanega magnetnega polja ($B = 0$). Enačba (23) se v tem primeru poenostavi takole:

$$x = \tanh \left[\frac{zJx}{kT} \right]. \quad (25)$$

Vpeljemo novo spremenljivko $y = \frac{zJ}{kT} x$ in enačbo (25) zapišemo takole:

$$\frac{kT}{zJ} y = \tanh(y). \quad (26)$$

Rešitev enačbe (26) je pri vrednosti y , kjer se funkciji



Slika 2. K reševanju enačbe (26).
Figure 2. Solving equation (26).

$y' = \frac{kT}{zJ} y$ in $y' = \tanh(y)$ sekata (slika 2). Premica $y' = \frac{kT}{zJ} y$ mora imeti naklonski koeficient $\frac{kT}{zJ}$ manjši od 1, če naj se funkciji $\frac{kT}{zJ} y$ in $\tanh(y)$ sekata. Mejna vrednost $\frac{kT_c}{zJ} = 1$ ustreza temperaturi faznega prehoda:

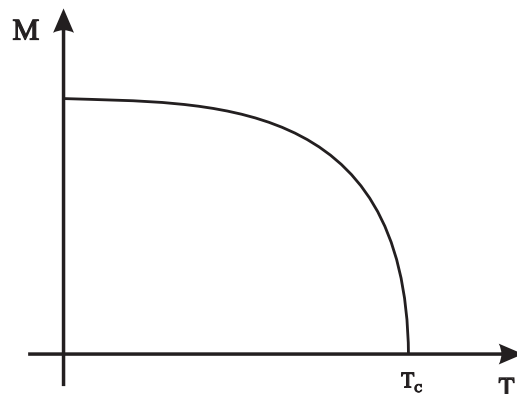
$$T_c = \frac{zJ}{k}, \quad (27)$$

ki ji pravimo kritična ali fazna temperatura, pa tudi Curijeve temperatura. Pri temperaturah pod T_c obstaja v sistemu spontana magnetizacija $M = n x p_m$, ki ustreza neničelni rešitvi enačbe (25) (tj. $x \neq 0$). Nad kritično temperaturo se spontana magnetizacija poruši, enačba (25) takrat nima rešitve za $x \neq 0$. Za ilustracijo slika 3 shematsko prikazuje spontano magnetizacijo kot funkcijo temperature T .

2. Vrnimo se k splošni enačbi (23) za primer $B \neq 0$ in se vprašamo, kaj se dogaja z magnetizacijo pri visokih temperaturah, ki so nad kritično temperaturo T_c .

Pri visokih temperaturah ($T > T_c$) je argument v enačbi (23) majhen. Tako uporabimo samo prvi člen razvoja funkcije $\tanh(x) \approx x$ v vrsto in enačbo (23) zapišemo v obliki:

$$x \approx \left(\frac{p_m B + zJx}{kT} \right) \Rightarrow x \left(1 - \frac{zJ}{kT} \right) = \frac{p_m B}{kT}. \quad (28)$$



Slika 3. Temperaturna odvisnost spontane magnetizacije M , ko je $B = 0$.
Figure 3. Temperature dependence of magnetization M at $B = 0$.

Ob upoštevanju zveze za T_c (enačba (27)), enačbo (28) zapišemo takole:

$$x \left(1 - \frac{T_c}{T} \right) = \frac{p_m B}{kT} \Rightarrow x = \frac{p_m B}{kT} \frac{1}{1 - \frac{T_c}{T}}. \quad (29)$$

Enačbo (29) vstavimo v izraz za magnetizacijo (24) in dobimo:

$$M = \frac{N}{V} p_m x = \frac{N}{V} p_m \frac{p_m B}{kT} \frac{1}{1 - \frac{T_c}{T}} = \frac{N}{V} \frac{p_m^2 B}{k} \frac{1}{T - T_c}. \quad (30)$$

Ob upoštevanju zveze $B = \mu_0 H$ iz enačbe (30) sledi:

$$M = \frac{N}{V} \frac{p_m^2 \mu_0}{k} \frac{H}{T - T_c} \quad (31)$$

oziroma:

$$M = \frac{C}{T - T_c} H = \chi H, \quad (32)$$

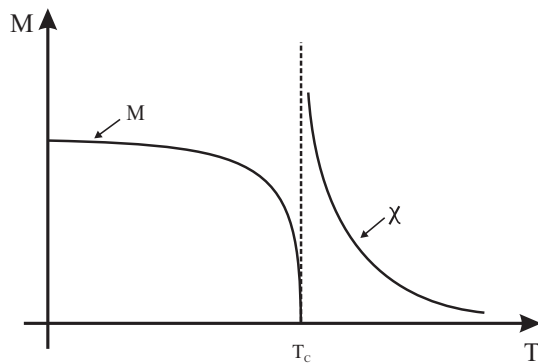
kjer je konstanta C definirana kot:

$$C = \frac{N}{V} \frac{p_m^2 \mu_0}{k}. \quad (33)$$

Slika 4 shematsko prikazuje temperaturno odvisnost spontane magnetizacije M in magnetne susceptibilnosti χ . Kritične temperature T_c (Curijeve temperature) nekaterih feromagnetnih materialov so: za kobalt je $T_c = 1400 \text{ K}$, za železo je $T_c = 1043 \text{ K}$, za nikelj je $T_c = 631 \text{ K}$.

4 Sklep

Isingov model se med drugim uporablja za opis fizikalnih lastnosti dvokomponentnih zlitin, nevronske mreže in feromagnetnih materialov in njihovih faznih prehodov.



Slika 4. Shematski prikaz magnetizacije M in susceptibilnosti χ v odvisnosti od temperature T . Pod temperaturo T_C ima snov feromagnetne lastnosti, nad temperaturo T_C , pa paramagnetne lastnosti.

Figure 4. Temperature dependence of magnetization M and susceptibility χ . Properties of the matter below critical temperature T_C are ferromagnetic and above T_C they are paramagnetic.

Najpreprostejši je 1-D Isingov model, ki ga je Ising analitično rešil že leta 1925 [6]. 1-D Isingov model ne napove faznega prehoda v urejeno (feromagnetno) stanje pri končni temperaturi [5].

2-D Isingov model je eksaktno že leta 1944 rešil Onsager (npr. glej pod [7]). Posebne, praktične uporabe nima, saj smo omejeni samo na dve dimenziji. Uporaben bi bil na primer za zelo tanke plasti, pri dopiranju materialov, kjer bi obravnavali zasedenost mest v mreži dopiranega materiala.

V članku smo obravnavali 3-D Isingov mrežni model, ki se lahko uporablja za opis volumskih (bulk) permanentnih feromagnetnih materialov in njihovih kritičnih temperatur. 3D Isingov model nima eksaktne rešitve, dobimo le približek le-te. Mi smo 3-D Isingov model obravnavali s približkom povprečnega polja in ob upoštevanju aproksimacije za razvoj v vrsto za visoke temperature, dobili rešitev za izraz za kritično temperaturo T_C [7], pri kateri se zgodi fazni prehod in s tem prehod iz urejenosti v neurejenost spinov (spontana magnetizacija izgine).

Kot rečeno, feromagnetni materiali se uporabljajo za izdelavo permanentnih magnetov. Feromagnetni materiali (npr. Fe, Co, Ni) imajo visoko remanentno (pre-ostalo) magnetizacijo, tudi ko ni več prisotno zunanje magnetno polje. Ferimagnetni materiali (npr. kombinacija Fe^{2+} in Fe^{3+} ionov) pa imajo le delno urejene spine (magnetizacija je še vedno večja od nič, ko ni zunanjega magnetnega polja). Pri antiferomagnetnih materialih (npr. NiO, FeMn) so si sosednji spini nasprotno obrnjenih ($\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow$ itd.; pri tem je $\sum_i \uparrow_i = \sum_j \downarrow_j$ in $i = j$), pri tem je magnetizacija nič, ko ni zunanjega magnetnega polja.

5 Literatura

[1] Mattis D. C., *The theory of magnetism made simple*, World scientific, 2006.

- [2] Igljč A., Kralj-Igljč V., *Izbrana poglavja iz fizike mehke snovi*, Založba FE in FRI, 2006
- [3] Dill K., *Molecular driving forces*, Garland Science, 2003.
- [4] Wannier G. H., *Statistical physics*, Dover, 1987.
- [5] Vilfan I., Isingov model, *Obzornik za matematiko in fiziko*, letnik 44, številka 4, str. 105, jul. 1997.
- [6] Hladnik M., Binarna zaporedja, prepogibanje papirja in statistična fizika, *Obzornik za matematiko in fiziko*, letnik 44, številka 2, str. 40, mar. 1997.
- [7] Cipra B., An introduction to the Ising model, *American Mathematical Monthly*, vol. 94, iss. 10, p. 937, dec. 1987.

Prof. Aleš Igljč je doktoriral s področja fizike in elektrotehnike, Univerza v Ljubljani. Od leta 2007 je zaposlen kot redni profesor na Fakulteti za elektrotehniko, Univerza v Ljubljani in je vodja Laboratorija za biofiziko. Njegovi področji raziskovanja sta elektrostatika in biomehanika bioloških nanostruktur.

Janez Ivan Pavlič je leta 2005 diplomiral na Fakulteti za elektrotehniko, Univerza v Ljubljani. Trenutno je mladi raziskovalec na Zdravstveni fakulteti, Univerza v Ljubljani. Eksperimentalno delo opravlja v Laboratoriju za fiziko. Njegovo področje dela so biofizika lipidnih membranskih sistemov in njihove interakcije.