

Układy magnetyczne

Jacek Jurkowski, Fizyka Statystyczna

Instytut Fizyki

2015

- Opisać własności **paramagnetyczne** (magnesowanie się substancji w polu magnetycznym) i **ferromagnetyczne** (trwałe namagnesowanie nawet w nieobecności pola) substancji.

- Opisać własności **paramagnetyczne** (magnesowanie się substancji w polu magnetycznym) i **ferromagnetyczne** (trwałe namagnesowanie nawet w nieobecności pola) substancji.
- Zidentyfikować niezbędne warunki potrzebne by wystąpiło zjawisko ferromagnetyzmu.

- Opisać własności **paramagnetyczne** (magnesowanie się substancji w polu magnetycznym) i **ferromagnetyczne** (trwałe namagnesowanie nawet w nieobecności pola) substancji.
- Zidentyfikować niezbędne warunki potrzebne by wystąpiło zjawisko ferromagnetyzmu.
- Własności magnetyczne substancji opisuje **magnetyzacja** (namagnesowanie)

$$m(T, B) = - \frac{\partial f(T, B)}{\partial B}$$

- Opisać własności **paramagnetyczne** (magnesowanie się substancji w polu magnetycznym) i **ferromagnetyczne** (trwałe namagnesowanie nawet w nieobecności pola) substancji.
- Zidentyfikować niezbędne warunki potrzebne by wystąpiło zjawisko ferromagnetyzmu.
- Własności magnetyczne substancji opisuje **magnetyzacja** (namagnesowanie)

$$m(T, B) = - \frac{\partial f(T, B)}{\partial B}$$

- Własności ferromagnetyczne w temperaturze T zależą (w uproszczeniu) od tego, czy $m(T, 0) \neq 0$.

- Niech w objętości V próbki substancji będzie rozmieszczonych N momentów magnetycznych opisanych wektorami $\vec{\mu}$ o tej samej długości, ale różnej orientacji.

Paramagnetyzm

- Niech w objętości V próbki substancji będzie rozmieszczonych N momentów magnetycznych opisanych wektorami $\vec{\mu}$ o tej samej długości, ale różnej orientacji.
- Przy braku zewnętrznego pola magnetycznego momenty magnetyczne ustawione są w sposób nieuporządkowany i średnie pole magnetyczne wynosi 0.

- Niech w objętości V próbki substancji będzie rozmieszczonych N momentów magnetycznych opisanych wektorami $\vec{\mu}$ o tej samej długości, ale różnej orientacji.
- Przy braku zewnętrznego pola magnetycznego momenty magnetyczne ustawione są w sposób nieuporządkowany i średnie pole magnetyczne wynosi 0.
- Wiadomo, że w zewnętrznym polu magnetycznym o indukcji \vec{B} momenty magnetyczne porządkują się.

- Niech w objętości V próbki substancji będzie rozmieszczonych N momentów magnetycznych opisanych wektorami $\vec{\mu}$ o tej samej długości, ale różnej orientacji.
- Przy braku zewnętrznego pola magnetycznego momenty magnetyczne ustawione są w sposób nieuporządkowany i średnie pole magnetyczne wynosi 0.
- Wiadomo, że w zewnętrznym polu magnetycznym o indukcji \vec{B} momenty magnetyczne porządkują się.
- Energia oddziaływania momentu magnetycznego z polem magnetycznym wynosi

$$E = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} = -\mu B \cos \vartheta ,$$

Paramagnetyzm

- Niech w objętości V próbki substancji będzie rozmieszczonych N momentów magnetycznych opisanych wektorami $\vec{\mu}$ o tej samej długości, ale różnej orientacji.
- Przy braku zewnętrznego pola magnetycznego momenty magnetyczne ustawione są w sposób nieuporządkowany i średnie pole magnetyczne wynosi 0.
- Wiadomo, że w zewnętrznym polu magnetycznym o indukcji \vec{B} momenty magnetyczne porządkują się.
- Energia oddziaływania momentu magnetycznego z polem magnetycznym wynosi

$$E = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} = -\mu B \cos \vartheta ,$$

- W stanie równowagi prawdopodobieństwo tego, że energia oddziaływania momentu magnetycznego z polem magnetycznym przyjmuje wartość z przedziału $(E, E + dE)$ dane jest przez rozkład kanoniczny

$$p(E) = C e^{-\beta E} dE$$

dla $-\mu B \leq E \leq \mu B$, gdzie

$$C^{-1} = \int_{-\mu B}^{\mu B} e^{-\beta E} dE = \frac{2}{\beta} \sinh(\beta \mu B) .$$

Magnetyzacja próbki

Magnetyzacja próbki

$$\text{magnetyzacja} = \frac{\text{średni moment magnetyczny}}{\text{objętość}}$$

Magnetyzacja próbki

$$\text{magnetyzacja} = \frac{\text{średni moment magnetyczny}}{\text{objętość}}$$

$$M = \frac{N}{V} \mu \langle \cos \vartheta \rangle = -\frac{N}{V} \frac{\langle E \rangle}{B}.$$

Magnetyzacja próbki

$$\text{magnetyzacja} = \frac{\text{średni moment magnetyczny}}{\text{objętość}}$$

$$M = \frac{N}{V} \mu \langle \cos \vartheta \rangle = -\frac{N}{V} \frac{\langle E \rangle}{B}.$$

- Ponieważ

$$\langle E \rangle = \int_{-\mu B}^{\mu B} E p(E) dE = \mu B \left(\frac{1}{\beta \mu B} - \text{ctgh}(\beta \mu B) \right),$$

Magnetyzacja próbki

$$\text{magnetyzacja} = \frac{\text{średni moment magnetyczny}}{\text{objętość}}$$

$$M = \frac{N}{V} \mu \langle \cos \vartheta \rangle = -\frac{N}{V} \frac{\langle E \rangle}{B}.$$

- Ponieważ

$$\langle E \rangle = \int_{-\mu B}^{\mu B} E p(E) dE = \mu B \left(\frac{1}{\beta \mu B} - \text{ctgh}(\beta \mu B) \right),$$

- to

$$M(T, B) = \frac{N}{V} \mu \left[\text{ctgh} \left(\frac{\mu B}{kT} \right) - \frac{kT}{\mu B} \right].$$

Prawo Curie i obszar nasycenia

Prawo Curie i obszar nasycenia

W zachowaniu się magnetyzacji w funkcji pola magnetycznego B można wyróżnić trzy obszary:

- obszar niewielkich pól: $\mu B \ll kT$, wówczas $\text{ctgh}(x) - \frac{1}{x} \sim \frac{1}{3}x$

Prawo Curie i obszar nasycenia

W zachowaniu się magnetyzacji w funkcji pola magnetycznego B można wyróżnić trzy obszary:

- obszar niewielkich pól: $\mu B \ll kT$, wówczas $\text{ctgh}(x) - \frac{1}{x} \sim \frac{1}{3}x$

Prawo P. Curie

Magnetyzacja jest wprost proporcjonalna do indukcji pola magnetycznego

$$M(T, B) = \frac{N\mu^2}{3kTV} B,$$

współczynnik proporcjonalności (**podatność magnetyczna**) jest odwrotnie proporcjonalny do temperatury T .

Prawo Curie i obszar nasycenia

W zachowaniu się magnetyzacji w funkcji pola magnetycznego B można wyróżnić trzy obszary:

- obszar niewielkich pól: $\mu B \ll kT$, wówczas $\operatorname{ctgh}(x) - \frac{1}{x} \sim \frac{1}{3}x$

Prawo P. Curie

Magnetyzacja jest wprost proporcjonalna do indukcji pola magnetycznego

$$M(T, B) = \frac{N\mu^2}{3kTV} B,$$

współczynnik proporcjonalności (**podatność magnetyczna**) jest odwrotnie proporcjonalny do temperatury T .

- obszar przejściowy
- obszar nasycenia: $\mu B \gg kT$, wówczas $\operatorname{ctgh}(x) - \frac{1}{x} \sim 1$, magnetyzacja nie zależy praktycznie od pola magnetycznego

$$M = \frac{N}{V}\mu$$

W tym obszarze praktycznie wszystkie momenty magnetyczne w próbce są ustawione zgodnie z zewnętrznym polem magnetycznym

- Zlokalizowane momenty magnetyczne (**spiny**) na d -wymiarowej sieci

- Zlokalizowane momenty magnetyczne (**spiny**) na d -wymiarowej sieci
- N momentów magnetycznych opisujemy przy pomocy skalarnych wielkości $s_i = \pm 1$, $i = 1, \dots, N$, a ich położenie przez wektory położenia \vec{r}_i .
Konfigurację spinową sieci określa wówczas wielkość $\underline{s} = (s_1, \dots, s_N)$

- Zlokalizowane momenty magnetyczne (**spiny**) na d -wymiarowej sieci
- N momentów magnetycznych opisujemy przy pomocy skalarnych wielkości $s_i = \pm 1$, $i = 1, \dots, N$, a ich położenie przez wektory położenia \vec{r}_i . Konfigurację spinową sieci określa wówczas wielkość $\underline{s} = (s_1, \dots, s_N)$
- Spiny oddziałują ze sobą za pomocą potencjału $\mathcal{V}(r_{ij})$, gdzie $r_{ij} = |\vec{r}_i - \vec{r}_j|$,

$$\mathcal{V}(r_{ij}) = \begin{cases} + & \text{oddziaływanie antyferromagnetyczne} \\ - & \text{oddziaływanie ferromagnetyczne} \end{cases}$$

- Zlokalizowane momenty magnetyczne (**spiny**) na d -wymiarowej sieci
- N momentów magnetycznych opisujemy przy pomocy skalarnych wielkości $s_i = \pm 1$, $i = 1, \dots, N$, a ich położenie przez wektory położenia \vec{r}_i . Konfigurację spinową sieci określa wówczas wielkość $\underline{s} = (s_1, \dots, s_N)$
- Spiny oddziałują ze sobą za pomocą potencjału $\mathcal{V}(r_{ij})$, gdzie $r_{ij} = |\vec{r}_i - \vec{r}_j|$,

$$\mathcal{V}(r_{ij}) = \begin{cases} + & \text{oddziaływanie antyferromagnetyczne} \\ - & \text{oddziaływanie ferromagnetyczne} \end{cases}$$

- Spiny mogą oddziaływać także z zewnętrznym polem magnetycznym o indukcji \vec{B}

- Hamiltonian układu spinowego ma postać

$$H(\underline{s}, B) = \sum_{1 \leq i < j}^N \mathcal{V}(r_{ij}) s_i s_j \quad - \quad B \sum_{i=1}^N s_i$$

oddziaływanie pomiędzy spinami oddziaływanie z polem

- Hamiltonian układu spinowego ma postać

$$H(\underline{s}, B) = \sum_{1=i<j}^N \mathcal{V}(r_{ij}) s_i s_j - B \sum_{i=1}^N s_i$$

oddziaływanie pomiędzy spinami oddziaływanie z polem

- Możliwy jest ogólniejszy Hamiltonian

$$\hat{H}(\underline{s}, B) = \sum_{1=i<j}^N \mathcal{V}(r_{ij}) \hat{s}_i \cdot \hat{s}_j - B \sum_{i=1}^N \hat{s}_i$$

gdzie \hat{s}_i są operatorami opisującymi momenty magnetyczne (ale w tym wypadku konieczny jest **opis kwantowy**)

- Suma statystyczna w ramach formalizmu kanonicznego ma postać

$$Z_N(\beta, B) = \text{Tr} e^{-\beta H} = \sum_{\{\underline{s}\}} e^{-\beta H(\underline{s}, B)}$$

gdzie suma rozciąga się na wszystkie możliwe konfiguracje spinowe \underline{s}

- Kluczowy jest wybór potencjału oddziaływania pomiędzy spinami $\mathcal{V}(r_{ij})$

- Kluczowy jest wybór potencjału oddziaływania pomiędzy spinami $\mathcal{V}(r_{ij})$

Modele magnetyczne

- Kluczowy jest wybór potencjału oddziaływania pomiędzy spinami $\mathcal{V}(r_{ij})$

Modele magnetyczne

- 1 model najbliższych sąsiadów (Isinga)

$$H(\underline{s}, B) = -J \sum_{(i,j)} s_i s_j - B \sum_{i=1}^N s_i$$

gdzie sumowanie rozciąga się na pary najbliższych sąsiadów (i, j)

- Kluczowy jest wybór potencjału oddziaływania pomiędzy spinami $\mathcal{V}(r_{ij})$

Modele magnetyczne

- 1 model najbliższych sąsiadów (Isinga)

$$H(\underline{s}, B) = -J \sum_{(i,j)} s_i s_j - B \sum_{i=1}^N s_i$$

gdzie sumowanie rozciąga się na pary najbliższych sąsiadów (i, j)

- 2 model pola średniego (Curie-Weissa-Kaca)

$$H(\underline{s}, B) = -J' \sum_{i=1}^N s_i \langle s \rangle - B \sum_{i=1}^N s_i$$

gdzie

$$\langle s \rangle = \frac{1}{N-1} \sum_{i \neq j=1}^{N-1} s_j$$

Jednowymiarowy model Isinga na okręgu (Onsager)

- Hamiltonian można zapisać w postaci

$$H(\underline{s}, B) = -J \sum_{i=1}^N s_i s_{i+1} - \frac{B}{2} \sum_{i=1}^N (s_i + s_{i+1})$$

Jednowymiarowy model Isinga na okręgu (Onsager)

- Hamiltonian można zapisać w postaci

$$H(\underline{s}, B) = -J \sum_{i=1}^N s_i s_{i+1} - \frac{B}{2} \sum_{i=1}^N (s_i + s_{i+1})$$

- Policzenie sumy statystycznej prowadzi do . . .

Jednowymiarowy model Isinga na okręgu (Onsager)

- Hamiltonian można zapisać w postaci

$$H(\underline{s}, B) = -J \sum_{i=1}^N s_i s_{i+1} - \frac{B}{2} \sum_{i=1}^N (s_i + s_{i+1})$$

- Policzenie sumy statystycznej prowadzi do . . .

$$Z_N = \text{Tr}(P^N) = \lambda_+^N + \lambda_-^N$$

gdzie λ_+ oraz λ_- są wartościami własnymi macierzy

$$P = \begin{pmatrix} e^{\beta(J-B)} & e^{-\beta J} \\ e^{-\beta J} & e^{\beta(J+B)} \end{pmatrix}$$

Jednowymiarowy model Isinga na okręgu (Onsager)

- Wartości własne zależą od β oraz B

$$\lambda_{\pm}(\beta, B) = e^{\beta J} \left[\cosh(\beta B) \pm \sqrt{\sinh^2(\beta B) + e^{-4\beta J}} \right]$$

Jednowymiarowy model Isinga na okręgu (Onsager)

- Wartości własne zależą od β oraz B

$$\lambda_{\pm}(\beta, B) = e^{\beta J} \left[\cosh(\beta B) \pm \sqrt{\sinh^2(\beta B) + e^{-4\beta J}} \right]$$

- Energia swobodna $F(T, B, N) = -kT \ln Z_N(T, B)$

- Przejście graniczne $N \rightarrow \infty$ na poziomie energii swobodnej

- Przejście graniczne $N \rightarrow \infty$ na poziomie energii swobodnej
- Energia swobodna na jeden spin w granicy termodynamicznej

$$f(T, B) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} F(T, B, N)$$

- Przejście graniczne $N \rightarrow \infty$ na poziomie energii swobodnej
- Energia swobodna na jeden spin w granicy termodynamicznej

$$f(T, B) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} F(T, B, N)$$

$$-\frac{1}{kT} f(T, B) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln Z_N(T, B)$$

Energia swobodna modelu Isinga w granicy termodynamicznej

Energia swobodna modelu Isinga w granicy termodynamicznej

- Łatwo pokazać, że . . .

Energia swobodna modelu Isinga w granicy termodynamicznej

- Łatwo pokazać, że ...

$$f(T, B) = -J - kT \ln \left[\cosh \left(\frac{B}{kT} \right) + \sqrt{\sinh^2 \left(\frac{B}{kT} \right) + e^{-4J/(kT)}} \right]$$

Energia swobodna modelu Isinga w granicy termodynamicznej

- Łatwo pokazać, że ...

$$f(T, B) = -J - kT \ln \left[\cosh \left(\frac{B}{kT} \right) + \sqrt{\sinh^2 \left(\frac{B}{kT} \right) + e^{-4J/(kT)}} \right]$$

- **Magnetyzacja** na jeden spin w granicy termodynamicznej

$$m(T, B) = -\frac{\partial f}{\partial B} = \frac{\sinh(B/kT)}{\sqrt{\sinh^2(B/kT) + e^{-4J/kT}}}$$

Energia swobodna modelu Isinga w granicy termodynamicznej

- Łatwo pokazać, że ...

$$f(T, B) = -J - kT \ln \left[\cosh \left(\frac{B}{kT} \right) + \sqrt{\sinh^2 \left(\frac{B}{kT} \right) + e^{-4J/(kT)}} \right]$$

- **Magnetyzacja** na jeden spin w granicy termodynamicznej

$$m(T, B) = -\frac{\partial f}{\partial B} = \frac{\sinh(B/kT)}{\sqrt{\sinh^2(B/kT) + e^{-4J/kT}}}$$

- $m(T, 0) = 0$ nie ma ferromagnetyzmu

Energia swobodna modelu Isinga w granicy termodynamicznej

- Łatwo pokazać, że ...

$$f(T, B) = -J - kT \ln \left[\cosh \left(\frac{B}{kT} \right) + \sqrt{\sinh^2 \left(\frac{B}{kT} \right) + e^{-4J/(kT)}} \right]$$

- **Magnetyzacja** na jeden spin w granicy termodynamicznej

$$m(T, B) = -\frac{\partial f}{\partial B} = \frac{\sinh(B/kT)}{\sqrt{\sinh^2(B/kT) + e^{-4J/kT}}}$$

- $m(T, 0) = 0$ nie ma ferromagnetyzmu
- Przy $J = 0$

$$m_{J=0}(T, B) = \operatorname{tgh} \left(\frac{B}{kT} \right) \quad \text{jak dla paramagnetyków}$$

- Do podobnych wniosków prowadzi obliczenie funkcji korelacji dla tego modelu

$$\langle s_1 s_{r+1} \rangle = Z_N^{-1}(\beta, B) \sum_{\{s\}} s_1 s_{r+1} e^{-\beta H}.$$

W poszukiwaniu ferromagnetyzmu!

W poszukiwaniu ferromagnetyzmu!

- Model Curie-Weissa-Kaca (model średniopolowy)

W poszukiwaniu ferromagnetyzmu!

- Model Curie-Weissa-Kaca (model średniopolowy)
- Hamiltonian

$$H(\underline{s}, B) = -J' \sum_{i=1}^N s_i \langle s \rangle - B \sum_{i=1}^N s_i \cong -\frac{J}{N} \sum_{1=i < j}^N s_i s_j - B \sum_{i=1}^N s_i$$

W poszukiwaniu ferromagnetyzmu!

- Model Curie-Weissa-Kaca (model średniopolowy)
- Hamiltonian

$$H(\underline{s}, B) = -J' \sum_{i=1}^N s_i \langle s \rangle - B \sum_{i=1}^N s_i \cong -\frac{J}{N} \sum_{1=i < j}^N s_i s_j - B \sum_{i=1}^N s_i$$

- Suma statystyczna

$$Z_N(\beta, B) = \sum_{\{\underline{s}\}} e^{-\beta H(\underline{s}, B)}$$

W poszukiwaniu ferromagnetyzmu!

- Model Curie-Weissa-Kaca (model średniopolowy)
- Hamiltonian

$$H(\underline{s}, B) = -J' \sum_{i=1}^N s_i \langle s \rangle - B \sum_{i=1}^N s_i \cong -\frac{J}{N} \sum_{1=i < j}^N s_i s_j - B \sum_{i=1}^N s_i$$

- Suma statystyczna

$$Z_N(\beta, B) = \sum_{\{\underline{s}\}} e^{-\beta H(\underline{s}, B)}$$

- Można pokazać (nie będziemy tego liczyć), że

$$Z_N(\beta, B) = 2^N \left(\frac{\beta J N}{2\pi} \right)^{1/2} e^{-\frac{1}{2}\beta J} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-Nc(x)} dx$$

gdzie $c(x) = \frac{1}{2}\beta J x^2 - \ln \cosh(\beta J x + \beta B)$.

Lemat

Niech

$$I_N = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-Nf(x)} dx$$

gdzie $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}_+$ jest analityczną funkcją. Przez x_0 oznaczmy punkt, w którym funkcja f osiąga globalne minimum, tzn. $f''(x_0) > 0$. Wówczas

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln I_N = -f(x_0)$$

- Stosując metodę punktu siodłowego otrzymamy: . . .

- Stosując metodę punktu siodłowego otrzymamy: . . .

$$-\beta f(\beta, B) = \ln 2 - c(x_0)$$

gdzie x_0 jest punktem, w którym $c(x)$ osiąga minimum, tzn.

- Stosując metodę punktu siodłowego otrzymamy: ...

$$-\beta f(\beta, B) = \ln 2 - c(x_0)$$

gdzie x_0 jest punktem, w którym $c(x)$ osiąga minimum, tzn.

$$\boxed{x_0 = \operatorname{tgh}(\beta J x_0 + \beta B)} \quad \text{równanie pola średniego}$$

Model Curie-Weissa-Kaca

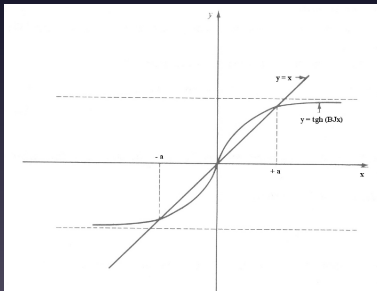
- Stosując metodę punktu siodłowego otrzymamy: . . .

$$-\beta f(\beta, B) = \ln 2 - c(x_0)$$

gdzie x_0 jest punktem, w którym $c(x)$ osiąga minimum, tzn.

$$x_0 = \operatorname{tgh}(\beta J x_0 + \beta B) \quad \text{równanie pola średniego}$$

- Niech $B = 0$. Niezerowe rozwiązania równania pola średniego pojawiają się, gdy $\beta > \beta_c = 1/J$



- Energia swobodna przyjmuje postać . . .

- Energia swobodna przyjmuje postać . . .

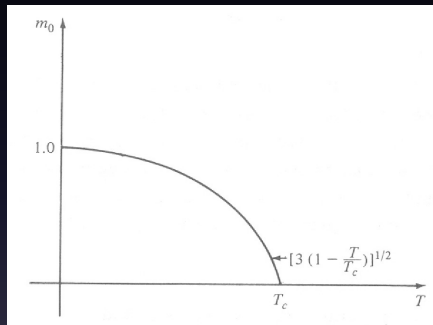
$$f(T, 0) = \begin{cases} -kT \ln 2 & \text{dla } T \geq T_c \\ -kT \ln 2 + kT c(a(T)) & \text{dla } T < T_c \end{cases}$$

gdzie $a(T)$ jest rozwiązaniem równania pola średniego w temperaturze T

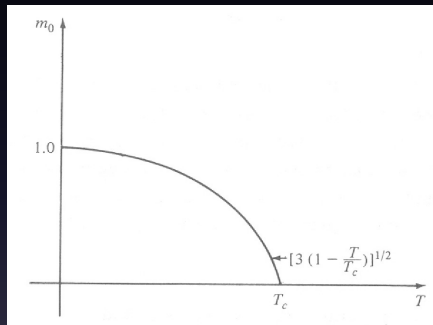
- Magnetyzacja przyjmuje postać:

$$m(T, 0) = \begin{cases} 0 & \text{dla } T \geq T_c \\ a(T) & \text{dla } T < T_c \end{cases}$$

Rozwinięcie magnetyzacji



Rozwinięcie magnetyzacji



Można pokazać, że w pobliżu T_c : $a(T) \approx \sqrt{3\left(\frac{T_c}{T} - 1\right)}$

- Oznacza to, że w temperaturze krytycznej $T_c = J/k$ następuje przejście fazowe porządkujące ustawienie momentów magnetycznych

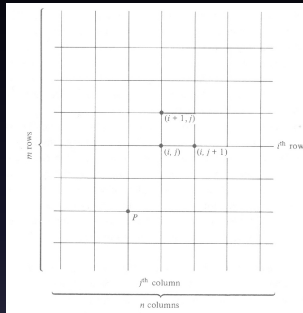
- Oznacza to, że w **temperaturze krytycznej** $T_c = J/k$ następuje **przejście fazowe** porządkujące ustawienie momentów magnetycznych
- Oddziaływanie typu pola średniego w 1D jest na tyle silne, że w odpowiednio niskiej temperaturze, doprowadza do uporządkowania spinów.

- Oznacza to, że w **temperaturze krytycznej** $T_c = J/k$ następuje **przejście fazowe** porządkujące ustawienie momentów magnetycznych
- Oddziaływanie typu pola średniego w 1D jest na tyle silne, że w odpowiednio niskiej temperaturze, doprowadza do uporządkowania spinów.
- Oddziaływanie najbliższych sąsiadów w 1D jest zbyt słabe (za mało sąsiadów!).
Może wystarczy sąsiadów w sieciach o większej liczbie wymiarów?

Model Isinga dla sieci o wymiarze $d = 2$

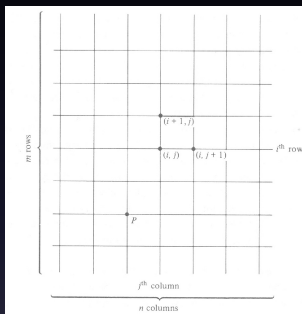
Model Isinga dla sieci o wymiarze $d = 2$

- Rozwiązanie Onsagera w przypadku $B = 0$ oraz sieci prostokątnej na torusie



Model Isinga dla sieci o wymiarze $d = 2$

- Rozwiązanie Onsagera w przypadku $B = 0$ oraz sieci prostokątnej na torusie



- Hamiltonian 2-wymiarowego modelu Isinga przyjmuje się w postaci

$$H(\underline{s}) = - \sum_{m,n=1}^N s_{m,n} (J_1 s_{m+1,n} + J_2 s_{m,n+1})$$

gdzie $s_{m,n}$ jest macierzą konfiguracji spinowej wymiaru $N \times N$, J_1 i J_2 są stałymi oddziaływania w dwóch kierunkach

Model Isinga dla sieci o wymiarze $d = 2$

Model Isinga dla sieci o wymiarze $d = 2$

Można pokazać (ale nie będziemy tego robili), że ...

Model Isinga dla sieci o wymiarze $d = 2$

Można pokazać (ale nie będziemy tego robili), że ...

- 1 suma statystyczna

$$Z_{N \times N}(\beta, 0) = \sum_{\{\underline{s}\}} e^{-\beta H(\underline{s})} = \text{Tr } P^N$$

gdzie P jest pewną macierzą wymiaru $2^N \times 2^N$

Model Isinga dla sieci o wymiarze $d = 2$

Można pokazać (ale nie będziemy tego robili), że ...

- 1 suma statystyczna

$$Z_{N \times N}(\beta, 0) = \sum_{\{\underline{s}\}} e^{-\beta H(\underline{s})} = \text{Tr } P^N$$

gdzie P jest pewną macierzą wymiaru $2^N \times 2^N$

- 2 $Z_{N \times N} = \sum_{j=1}^{2^N} \lambda_j^N$, $\lambda_1, \dots, \lambda_{2^N}$ są wartościami własnymi macierzy P

Model Isinga dla sieci o wymiarze $d = 2$

Można pokazać (ale nie będziemy tego robili), że ...

- 1 suma statystyczna

$$Z_{N \times N}(\beta, 0) = \sum_{\{\underline{s}\}} e^{-\beta H(\underline{s})} = \text{Tr } P^N$$

gdzie P jest pewną macierzą wymiaru $2^N \times 2^N$

- 2 $Z_{N \times N} = \sum_{j=1}^{2^N} \lambda_j^N$, $\lambda_1, \dots, \lambda_{2^N}$ są wartościami własnymi macierzy P
- 3 $\lambda_{\max}^N \leq Z_{N \times N} \leq 2^N \lambda_{\max}^N$, gdzie λ_{\max} jest największą wartością własną

Model Isinga dla sieci o wymiarze $d = 2$

Można pokazać (ale nie będziemy tego robili), że ...

- 1 suma statystyczna

$$Z_{N \times N}(\beta, 0) = \sum_{\{\underline{s}\}} e^{-\beta H(\underline{s})} = \text{Tr } P^N$$

gdzie P jest pewną macierzą wymiaru $2^N \times 2^N$

- 2 $Z_{N \times N} = \sum_{j=1}^{2^N} \lambda_j^N$, $\lambda_1, \dots, \lambda_{2^N}$ są wartościami własnymi macierzy P
- 3 $\lambda_{\max}^N \leq Z_{N \times N} \leq 2^N \lambda_{\max}^N$, gdzie λ_{\max} jest największą wartością własną
- 4 energia swobodna na jeden spin w granicy termodynamicznej

$$-\beta f(\beta, 0) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln \lambda_{\max}$$

Model Isinga dla sieci o wymiarze $d = 2$

Można pokazać (ale nie będziemy tego robili), że ...

- 1 suma statystyczna

$$Z_{N \times N}(\beta, 0) = \sum_{\{\underline{s}\}} e^{-\beta H(\underline{s})} = \text{Tr } P^N$$

gdzie P jest pewną macierzą wymiaru $2^N \times 2^N$

- 2 $Z_{N \times N} = \sum_{j=1}^{2^N} \lambda_j^N$, $\lambda_1, \dots, \lambda_{2^N}$ są wartościami własnymi macierzy P
- 3 $\lambda_{\max}^N \leq Z_{N \times N} \leq 2^N \lambda_{\max}^N$, gdzie λ_{\max} jest największą wartością własną
- 4 energia swobodna na jeden spin w granicy termodynamicznej

$$-\beta f(\beta, 0) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln \lambda_{\max}$$

- 5 O wszystkim decyduje największa wartość własna!

Model Isinga dla sieci o wymiarze $d = 2$

Model Isinga dla sieci o wymiarze $d = 2$

- 6 istnieje przejście fazowe w temperaturze

$$T_c = \frac{2J}{k \ln(1 + \sqrt{2})}$$

Model Isinga dla sieci o wymiarze $d = 2$

- 6 istnieje przejście fazowe w temperaturze

$$T_c = \frac{2J}{k \ln(1 + \sqrt{2})}$$

- 7 ciepło właściwe ma **rozbieżność logarytmiczną**, tzn.

$$c_w \sim \ln \left| 1 - \frac{T}{T_c} \right|$$

Model Isinga dla sieci o wymiarze $d = 2$

- 6 istnieje przejście fazowe w temperaturze

$$T_c = \frac{2J}{k \ln(1 + \sqrt{2})}$$

- 7 ciepło właściwe ma **rozbieżność logarytmiczną**, tzn.

$$c_w \sim \ln \left| 1 - \frac{T}{T_c} \right|$$

- 8 magnetyzacja ma indeks krytyczny $1/8$, tzn.

$$m \sim \left(1 - \frac{T}{T_c} \right)^{1/8}, \quad \text{dla } T < T_c$$

Model Isinga dla sieci o wymiarze $d = 2$

- 6 istnieje przejście fazowe w temperaturze

$$T_c = \frac{2J}{k \ln(1 + \sqrt{2})}$$

- 7 ciepło właściwe ma **rozbieżność logarytmiczną**, tzn.

$$c_w \sim \ln \left| 1 - \frac{T}{T_c} \right|$$

- 8 magnetyzacja ma indeks krytyczny $1/8$, tzn.

$$m \sim \left(1 - \frac{T}{T_c} \right)^{1/8}, \quad \text{dla } T < T_c$$

- 9 dla $d \geq 5$ ciepło właściwe ma skończony skok w T_c , a magnetyzacja ma wykładnik krytyczny $1/2$

Model Isinga dla sieci o wymiarze $d = 2$

- 6 istnieje przejście fazowe w temperaturze

$$T_c = \frac{2J}{k \ln(1 + \sqrt{2})}$$

- 7 ciepło właściwe ma **rozbieżność logarytmiczną**, tzn.

$$c_w \sim \ln \left| 1 - \frac{T}{T_c} \right|$$

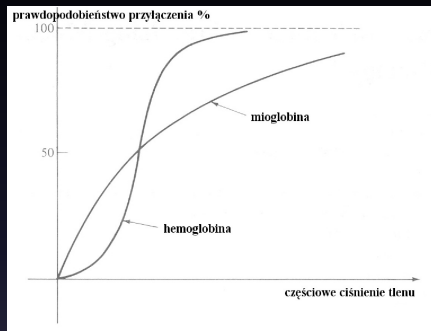
- 8 magnetyzacja ma indeks krytyczny $1/8$, tzn.

$$m \sim \left(1 - \frac{T}{T_c} \right)^{1/8}, \quad \text{dla } T < T_c$$

- 9 dla $d \geq 5$ ciepło właściwe ma skończony skok w T_c , a magnetyzacja ma wykładnik krytyczny $1/2$
- 10 model 3-wymiarowy jest **nadal nierozwiązany!**

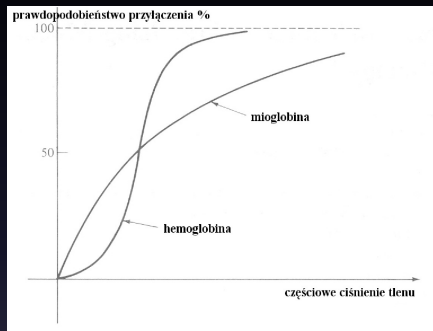
Zastosowanie modelu Isinga: enzymy aktywne

Zastosowanie modelu Isinga: enzymy aktywne



Różne rodzaje aktywności enzymów w zależności od koncentracji nośnika α

Zastosowanie modelu Isinga: enzymy aktywne



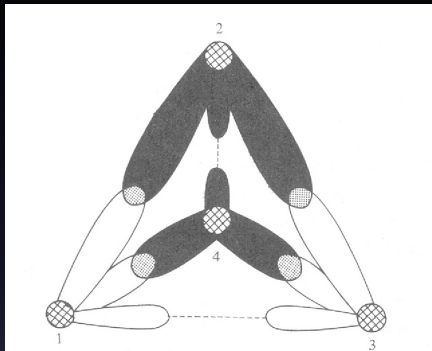
Różne rodzaje aktywności enzymów w zależności od koncentracji nośnika α

- Dla enzymów klasycznych prawdopodobieństwo przyłączenia cząstki aktywnej do centra aktywnego $\langle N \rangle / N$ jest postaci

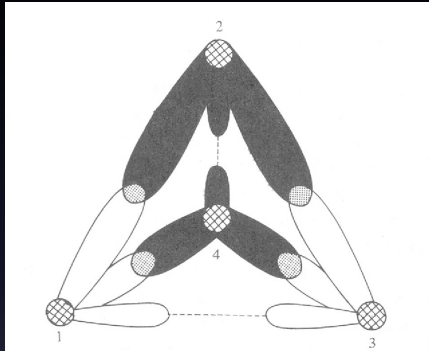
$$\frac{\langle N \rangle}{N} \sim \frac{\alpha}{1 + \alpha}$$

Model hemoglobiny

Model hemoglobiny

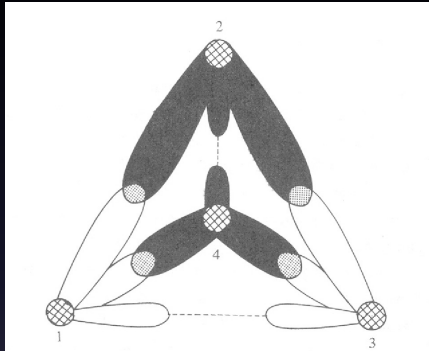


Model hemoglobiny



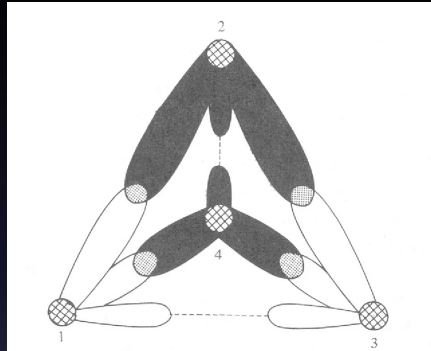
- hemy: miejsca przyłączenia tlenu

Model hemoglobiny



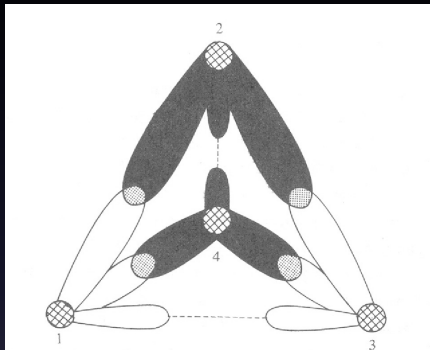
- hemy: miejsca przyłączenia tlenu
- α i β : dwa rodzaje aminokwasów

Model hemoglobiny



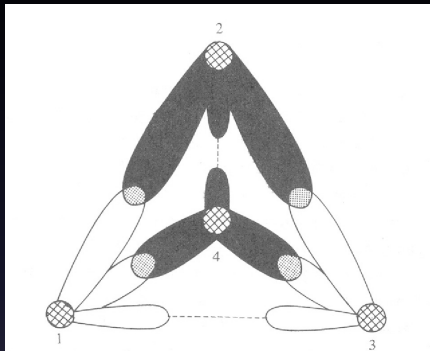
- hemy: miejsca przyłączenia tlenu
- α i β : dwa rodzaje aminokwasów
- Załóżmy, że **hemy oddziałują ze sobą**

Model hemoglobiny



- hemy: miejsca przyłączenia tlenu
- α i β : dwa rodzaje aminokwasów
- Załóżmy, że **hemy oddziałują ze sobą**
- Oddziaływania są przenoszone między hemami α i β , ale nie są przenoszone pomiędzy takimi samymi hemami

Model hemoglobiny



- hemy: miejsca przyłączenia tlenu
- α i β : dwa rodzaje aminokwasów
- Załóżmy, że **hemy oddziałują ze sobą**
- Oddziaływania są przenoszone między hemami α i β , ale nie są przenoszone pomiędzy takimi samymi hemami
- Cztery spiny na okręgu z oddziaływaniem najbliższych sąsiadów

- Mamy enzym z N centrami aktywnymi. Jaka jest średnia liczba zajętych centrów $\langle N \rangle$?

- Mamy enzym z N centrami aktywnymi. Jaka jest średnia liczba zajętych centrów $\langle N \rangle$?
- Niech parametr

$$s = \begin{cases} +1 & \text{centrum zajęte} \\ -1 & \text{centrum wolne} \end{cases}$$

$\underline{s} = \{s_1, \dots, s_N\}$ niech oznacza konfigurację miejsc zajętych i wolnych

- Mamy enzym z N centrami aktywnymi. Jaka jest średnia liczba zajętych centrów $\langle N \rangle$?
- Niech parametr

$$s = \begin{cases} +1 & \text{centrum zajęte} \\ -1 & \text{centrum wolne} \end{cases}$$

$\underline{s} = \{s_1, \dots, s_N\}$ niech oznacza konfigurację miejsc zajętych i wolnych

- $N(\underline{s})$ niech oznacza liczbę miejsc zajętych przy danej konfiguracji \underline{s}

$$N(\underline{s}) = \sum_{i=1}^N \frac{1}{2}(1 + s_i)$$

- Mamy enzym z N centrami aktywnymi. Jaka jest średnia liczba zajętych centrów $\langle N \rangle$?
- Niech parametr

$$s = \begin{cases} +1 & \text{centrum zajęte} \\ -1 & \text{centrum wolne} \end{cases}$$

$\underline{s} = \{s_1, \dots, s_N\}$ niech oznacza konfigurację miejsc zajętych i wolnych

- $N(\underline{s})$ niech oznacza liczbę miejsc zajętych przy danej konfiguracji \underline{s}

$$N(\underline{s}) = \sum_{i=1}^N \frac{1}{2}(1 + s_i)$$

- Wówczas

$$\langle N \rangle = \sum_{\{\underline{s}\}} N(\underline{s})p(\underline{s})$$

- $p(\underline{s})$ — rozkład równowagowy z hamiltonianem analogicznym do tego z modelu Isinga

$$p(\underline{s}) = Z^{-1} e^{h(\underline{s})}$$

$$h(\underline{s}) = U \sum_{i=1}^N s_i s_{i+1} + W \sum_{i=1}^N s_i$$

oddziaływanie hemów

białka gotowe do związania

- $p(\underline{s})$ — rozkład równowagowy z hamiltonianem analogicznym do tego z modelu Isinga

$$p(\underline{s}) = Z^{-1} e^{h(\underline{s})}$$

$$h(\underline{s}) = U \sum_{i=1}^N s_i s_{i+1} + W \sum_{i=1}^N s_i$$

oddziaływanie hemów białka gotowe do związania

- Wówczas

$$p(\underline{s}) = Z^{-1} \prod_{i=1}^N e^{U s_i s_{i+1}} e^{W s_i} \quad \text{przy}$$

$$Z(U, W) = \sum_{\{\underline{s}\}} \prod_{i=1}^N e^{U s_i s_{i+1}} e^{W s_i}$$

- $p(\underline{s})$ — rozkład równowagowy z hamiltonianem analogicznym do tego z modelu Isinga

$$p(\underline{s}) = Z^{-1} e^{h(\underline{s})}$$

$$h(\underline{s}) = U \sum_{i=1}^N s_i s_{i+1} + W \sum_{i=1}^N s_i$$

oddziaływanie hemów białka gotowe do związania

- Wówczas

$$p(\underline{s}) = Z^{-1} \prod_{i=1}^N e^{U s_i s_{i+1}} e^{W s_i} \quad \text{przy}$$

$$Z(U, W) = \sum_{\{\underline{s}\}} \prod_{i=1}^N e^{U s_i s_{i+1}} e^{W s_i}$$

- $Z(U, W)$ odpowiada modelowi Isinga z $\beta J \rightarrow U$ oraz $\beta B \rightarrow W$.

- $Z(U, W) = (\lambda_+(U, W))^N + (\lambda_-(U, W))^N = \text{Tr } P^N$, gdzie

$$P = \begin{pmatrix} e^{U+W} & e^{-U} \\ e^{-U} & e^{U-W} \end{pmatrix}$$

oraz $\lambda_{\pm} = e^U \left[\cosh W \pm \sqrt{\sinh^2 W + e^{-4U}} \right]$

- $Z(U, W) = (\lambda_+(U, W))^N + (\lambda_-(U, W))^N = \text{Tr } P^N$, gdzie

$$P = \begin{pmatrix} e^{U+W} & e^{-U} \\ e^{-U} & e^{U-W} \end{pmatrix}$$

oraz $\lambda_{\pm} = e^U \left[\cosh W \pm \sqrt{\sinh^2 W + e^{-4U}} \right]$

- Wówczas

$$\begin{aligned} \langle N \rangle &= \sum_{\{\underline{s}\}} \left[\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N (1 + s_i) \right] p(\underline{s}) = \frac{N}{2} + \frac{1}{2} \frac{\partial \ln Z}{\partial W} \\ &= \frac{N}{2} \left[1 + \frac{\lambda_+^{N-1} \frac{\partial \lambda_+}{\partial W} + \lambda_-^{N-1} \frac{\partial \lambda_-}{\partial W}}{\lambda_+^N + \lambda_-^N} \right] \end{aligned}$$

- Zachowaniu się enzyków klasycznych odpowiada $U = 0$

- Zachowaniu się enzyków klasycznych odpowiada $U = 0$
- Wówczas

$$\frac{\langle N \rangle}{N} = \frac{1}{2}[1 + \operatorname{tgh} W] = \frac{\alpha}{1 + \alpha}$$

- Zachowaniu się enzyków klasycznych odpowiada $U = 0$
- Wówczas

$$\frac{\langle N \rangle}{N} = \frac{1}{2}[1 + \operatorname{tgh} W] = \frac{\alpha}{1 + \alpha}$$

- Oznacza to, że $\alpha = e^{2W}$

- Zachowaniu się enzymów klasycznych odpowiada $U = 0$
- Wówczas

$$\frac{\langle N \rangle}{N} = \frac{1}{2}[1 + \operatorname{tgh} W] = \frac{\alpha}{1 + \alpha}$$

- Oznacza to, że $\alpha = e^{2W}$
- Parametr W związany jest z koncentracją nośnika.