

Міністерство освіти і науки України
Харківський національний університет імені В. Н. Каразіна
Фізичний факультет
Кафедра теоретичної фізики імені академіка І. М. Ліфшиця

«Допущено до захисту»
Зав. кафедрою теоретичної фізики
імені академіка І. М. Ліфшиця
_____ доц. Рашба Г. І.
«_____» грудня 2024 р.

Оцінка «_____»
Голова ЕК _____
проф. Шевченко С. І.
«_____» грудня 2024 р.

Удовенко Марина Анатоліївна

**ОДНОВИМІРНА МОДЕЛЬ ІЗІНГА:
ТЕОРІЯ ТА ПРАКТИЧНІ ЗАВДАННЯ З СПЕЦКУРСУ
«КВАНТОВА ТЕОРІЯ МАГНЕТИЗМУ»**

Кваліфікаційна робота на здобуття
освітньо-кваліфікаційного рівня
«Магістр» за спеціальністю
104 – фізика та астрономія, освітньо-
професійна програма «Фізика та
астрономія в закладах освіти»

Науковий керівник – доцент кафедри
теоретичної фізики імені академіка
І. М. Ліфшиця, канд. фіз.-мат. н.,
доц. О. В. Єзерська

Харків 2024

Анотація

Удовенко М. А. Одновимірний модель Ізінга: теорія та практичні завдання з спецкурсу «Квантова теорія магнетизму». – Рукопис.

Дипломна робота на здобуття освітньо-кваліфікаційного рівня “Магістр” за спеціальністю 104 – “фізика та астрономія”, освітня програма «Фізика та астрономія в закладах освіти (освітньо–професійна програма)». – Харків: Харківський національний університет імені В. Н. Каразіна, 2024. – 83 с., рис. 21, табл. 1.

Запропоновано використання одновимірної моделі Ізінга у спеціальному курсі «Квантова теорія магнетизму», що викладається на кафедрі теоретичної фізики імені академіка І. М. Ліфшиця фізичного факультету Харківського національного університету імені В. Н. Каразіна. Детально розглянуті термодинамічні властивості одновимірної моделі Ізінга. Проведено моделювання основних фізичних величин для ланцюжків із різною геометрією. Обговорено важливість використання одновимірної моделі Ізінга для викладення теоретичних положень спеціального курсу, так і для формулювання відповідних практичних завдань.

Ключові слова: одновимірний модель Ізінга, квантова механіка, квантова теорія магнетизму, спеціальний курс, особливості викладання.

Annotation

Udovenko M. A. 1-D Ising Model: Theory and Practical Issues for Special Course «Quantum Theory of Magnetism». – Manuscript, p. 83, f. 21, t. 1.

Diploma work on assignment of “Master” qualification on speciality 104 – physics and astronomy, educational professional program “physics and astronomy in educational institutions”. – Kharkiv, 2024.

The one-dimensional Ising model is proposed to use in the special course "Quantum Theory of Magnetism", which is taught at the I. M. Lifshyts Department of the Theoretical Physics of the School of Physics of V. N. Karazin Kharkiv National University. The thermodynamic properties of the one-dimensional Ising model are considered in detail. The basic physical quantities are simulated for chains with different geometries. The importance of using the one-dimensional Ising model for the presentation of the theoretical provisions of the special course, as well as for the formulation of relevant practical tasks, are discussed.

Key words: one-dimensional Ising model, quantum mechanics, quantum theory of magnetism, special course, teaching features.

ЗМІСТ

ВСТУП	6
РОЗДІЛ 1. ТЕОРЕТИЧНИЙ ОГЛЯД.....	10
1.1. Коротка історична довідка з теорії магнетизму.....	10
1.2. Основні поняття класичної теорії магнетизму.....	12
1.3. Основні ідеї квантової механіки.....	23
1.4. Основні ідеї квантової теорії магнетизму	40
1.5. Спецкурс «Квантова теорія магнетизму».....	42
1.6. Висновки до розділу 1	43
РОЗДІЛ 2: ОДНОВИМІРНА МОДЕЛЬ ІЗІНГА В СПЕЦКУРСІ «КВАНТОВА ТЕОРІЯ МАГНЕТИЗМУ».....	45
2.1. Основні відомості про модель Ізінга	45
2.2. Термодинамічні характеристики квантово-механічної системи	48
2.3. Гамільтоніан та статистична сума в одновимірній моделі Ізінга	50
2.3.1. Зв'язок гамільтоніана Ізінга з матрицями Паулі	50
2.3.2. Зв'язок гамільтоніана Ізінга з оператором напівцілого спіну.....	51
2.3.3. Однорідний «замкнений» ланцюг Ізінга з взаємодіями найближчих сусідів без зовнішнього магнітного поля	51
2.3.4. Однорідний «розімкнений» ланцюжок Ізінга з взаємодіями найближчих сусідів без зовнішнього магнітного поля.....	53
2.3.5. «Замкнений» скінченний ланцюжок Ізінга з випадковими взаємодіями в поздовжньому зовнішньому магнітному полі	55
2.3.6. Однорідний «замкнений» скінченний ланцюжок Ізінга із взаємодіями між сусідніми елементами в поздовжньому зовнішньому магнітному полі.....	57

2.2.7. Однорідний «замкнений» некінченний ланцюжок Ізінга із взаємодіями між сусідніми елементами в поздовжньому зовнішньому магнітному полі.....	58
2.2.8. Однорідний «розімкнений» скінченний ланцюжок Ізінга із взаємодіями між сусідніми елементами в поздовжньому зовнішньому магнітному полі.....	58
2.4. Оцінка термодинамічних характеристик для одновимірної моделі Ізінга	61
2.4.1. Намагніченість і магнітна сприйнятливість для однорідного «замкненого» нескінченного ланцюжка Ізінга із взаємодіями між сусідніми елементами в поздовжньому зовнішньому магнітному полі	61
2.4.2. Намагніченість і магнітна сприйнятливість для однорідного ланцюга Ізінга із взаємодіями між сусідніми елементами в поздовжньому зовнішньому магнітному полі	64
2.4.3. Теплоємність для однорідного ланцюжка Ізінга із взаємодіями між сусідніми елементами в поздовжньому зовнішньому магнітному полі	66
2.4.4. Температурні залежності намагніченості та магнітної сприйнятливості для однорідного ланцюжка Ізінга із взаємодіями між сусідніми елементами в поздовжньому зовнішньому магнітному полі	68
2.4.5. Вільна енергія, внутрішня енергія та теплоємність для однорідного ланцюжка Ізінга із взаємодіями між сусідніми елементами у відсутності зовнішнього магнітного поля	70
2.5. Одновимірна модель Ізінга та практичні заняття.....	73
2.6. Висновки до розділу 2	75
ВИСНОВКИ	78
СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ.....	80

ВСТУП

Із часу створення квантової механіки (1900 – 1930 рр.) як нової революційної фізичної теорії мікросвіту (див., наприклад, [1]) пройшло майже сто років. За цей час квантова механіка пройшла великий і складний шлях від маловідомої теорії, зрозумілої лише вузькому колу спеціалістів світового рівня, до теорії, що є міцною теоретичною основою потужних сучасних технологій, що вже приносять реальні та корисні практичні результати (див., наприклад, [2]). Революційний підхід квантової механіки поширився як і на інші галузі самої фізики (наприклад, квантова теорія поля [3], квантова електродинаміка [4], квантова радіофізика [5], квантова хромодинаміка [6], квантова теорія гравітації [7], квантова теорія суперструн [8], квантова теорія магнетизму [9], квантова електроніка [10, 11] і т. і.), так і на інші природничі науки (наприклад, квантові обчислення та телекомунікації [12], квантова інформатика [12, 13], квантова криптографія [14], квантова спектроскопія [15], квантова хімія [15], квантова біофізика [16], квантова біологія [17], квантова генетика [18] і навіть квантова психологія [19]).

У якості добре відомих прикладів практичної користі від використання квантової механіки у сучасних технологій можна навести, наприклад, різноманітні лазери (газові, рідинні, твердотільні, напівпровідникові) (див., наприклад, [20]), флуоресцентні лампи (див., наприклад, [10, 11]), різноманітні напівпровідникові елементи (див., наприклад, [21]), що використовуються, зокрема, в комп'ютерах, світлодіодних лампи, телевізорах, мобільних телефонах і смарт-пристроях, магнітно-резонансні томографи (див., наприклад, [22]), атомні годинники (див., наприклад, [23]) і багато іншого.

На теперішній час у провідних університетах світу студентам пропонується величезна кількість курсів, що тим або іншим чином пов'язані як із безпосередньо квантовою механікою, так і з її практичними втіленнями та застосуваннями.

На кафедрі теоретичної фізики імені академіка І. М. Ліфшиця фізичного факультету Харківського національного університету імені В. Н. Каразіна, де протягом багатьох десятиріч успішно викладається загальний курс «Квантова механіка» для студентів факультетів фізичного профіля у межах їх фахової підготовки з теоретичної фізики, існують також низка спеціальних курсів. У багатьох із них пропонуються різноманітні варіанти розширення та поглиблення теоретичних знань і практичних навичок з квантово-механічної теорії та її застосувань для студентів 3 – 6 курсів (бакалаврів 3 – 4 років підготовки та магістрів 1 – 2 років підготовки), що безпосередньо обрали саме кафедру теоретичної фізики імені академіка І. М. Ліфшиця. Важливе місце серед них посідає спецкурс «Квантова теорія магнетизму».

Однією з багатьох новаторських ідей, що у різні роки з'явилися у квантовій механіці та виявилися корисними для квантової теорії магнетизму, є так звана модель Ізінга (див., наприклад, [24]). Хоча вона й була створена вже біля століття тому виключно для пояснення механізму феромагнетизму, модель Ізінга й її різноманітні модифікації продовжують активно застосовуватися й у теперішній час як власне у фізиці (див., наприклад, [25]), так і в інших галузях науки, наприклад, у фізичній хімії [26], математиці [27], комп'ютерних науках [28], обробці зображень [29] або навіть в екофізиці [30] та соціофізиці [31]. Важливо, що застосування моделі Ізінга поширилося на описання поведінки великого різноманіття взаємодіючих систем багатьох тіл [32].

Натомість основною складністю, що завжди виникає перед викладачем у галузі квантової механіки, є зрозуміле студентам тлумачення отриманих фізичних результатів. З одного боку, сам інструментарій квантової механіки базується, в першу чергу, на високоабстрактних ідеях лінійної алгебри (див., наприклад, [33]), теорії ймовірностей та математичної статистики (див., наприклад, [34]), які приблизно к середині третього курсу студенти вже достатньо вивчили, зрозуміли й операціоналізували. З іншого боку, кожен вивчений новий теоретичний результат, кожен розв'язаний новий завдання з галузі

квантової теорії магнетизму не можна залишати тільки на рівні усвідомлення математичних «правил гри», як це майже завжди робиться протягом викладання курсів циклу математичної підготовки. Можливо, так доцільно робити при підготовці студентів-математиків, але це точно є недостатнім для студентів-фізиків. Дуже важливим є зрозуміле й ясне фізичне тлумачення результатів, отриманих потужними формальними математичними методами, як це робиться у квантовій механіці, а отже, й у квантовій теорії магнетизму.

Саме тому докладний і ґрунтовний розгляд і дослідження сутності й особливостей використання найпростішого варіанта моделі Ізінга, одновимірної моделі Ізінга, при викладанні спецкурсу «Квантова теорія магнетизма» виглядає *актуальним* та на часі.

Об'єктом дослідження в роботі є використання одновимірної моделі Ізінга у квантовій теорії магнетизму, а *предметом* – особливості застосування одновимірної моделі Ізінга у спецкурсі «Квантова теорія магнетизму».

Мета роботи – дослідження особливостей застосування одновимірної моделі Ізінга у спецкурсі «Квантова теорія магнетизму» при викладенні його теоретичних положень і формулюванні практичних завдань.

Задачі, розв'язання яких повинно привести до досягнення поставленої мети:

1) Викладення основ класичної та квантової теорій магнетизму, також розгляд особливостей спецкурсу «Квантова теорія магнетизму».

2) Аналіз та стисле викладення сутності моделі Ізінга та її одновимірного варіанту.

3) Формулювання особливостей використання одновимірної моделі Ізінга при викладенні теоретичних положень спецкурсу «Квантова теорія магнетизму».

4) Виявлення особливостей використання одновимірної моделі Ізінга при створенні практичних завдань для спецкурсу «Квантова теорія магнетизму».

Структура роботи. Робота складається зі Вступу, двох Розділів, Висновків та Списку використаних джерел.

Перший розділ є теоретичним оглядом. У ньому стисло розглянуто основні ідеї підходу квантової механіки до описанні мікросвіту, основні положення класичної та квантової теорій магнетизму, дана стисла характеристика курсу «Квантова теорія магнетизму» .

Другий розділ містить власне розгляд особливостей використання одновимірної моделі Ізінга в спецкурсі «Квантова теорія магнетизму» при викладанні його теоретичної та практичної частин.

У *Висновках* наведено основні результати роботи.

РОЗДІЛ 1.

ТЕОРЕТИЧНИЙ ОГЛЯД

Оскільки у даній роботі основний наголос робиться на надання студентам чіткої та зрозумілої трактовки застосування одновимірної моделі Ізінга при викладанні курсу «Квантова теорія магнетизму», необхідно спочатку розглянути основні поняття класичної теорії магнетизму, квантової механіки, квантової теорії магнетизму, а також дати стислу характеристику власне курсові «Квантова теорія магнетизму».

1.1. Коротка історична довідка з теорії магнетизму

Розглянемо основні відомості з історії створення теорії магнетизму (див., наприклад, [35]).

Багато істориків науки вважають, що компас, який використовує *магнітну стрілку*, використовувався в Китаї ще в 13 столітті до нашої ери, його винахід був арабського або індійського походження.

Ранні греки знали про магнетизм ще за 800 років до нашої ери. Вони виявили, що камінь магнетит (Fe_3O_4) притягує шматки заліза. Легенда приписує назву *магнетиту* пастуху Магнесу, цвяхи черевиків і кінчик палиці якого міцно прилипали до шматків магнетиту, коли він пас отари.

У 1269 р. П'єр де Марікур (Pierre de Maricourt) (Франція) виявив, що напрямки стрілки поблизу сферичного природного магніту утворюють лінії, які оточують сферу і проходять через дві точки, діаметрально протилежні одна одній, які він назвав *полюсами магніту*. Подальші експерименти показали, що кожен магніт, незалежно від його форми, має два полюси, які називаються *північним* (N) і *південним* (S) полюсами. Вони діють на інші магнітні полюси так само, як електричні заряди діють один на одного. Тобто *однакові* полюси (N–N або S–S) *відштовхуються* один від одного, а *протилежні* полюси (N–S) *притягуються* один до одного.

Полюси отримали свої назви через те, як саме магніт, наприклад, у компасі поводить себе в присутності магнітного поля Землі. Якщо стрижневий магніт підвішено за його середину так, що він може вільно обертатися в горизонтальній площині, то він обертатиметься, доки його північний полюс не вкаже на географічний Північний полюс Землі, а південний полюс — на географічний Південний полюс Землі. Слід зауважити, що географічний Північний полюс Землі є магнітним південним полюсом, тоді як географічний Південний полюс Землі є магнітним північним полюсом. Оскільки *протилежні* магнітні полюси притягуються один до одного, полюс магніту, який притягується до географічного Північного полюса Землі, є північним полюсом магніту, а полюс, який притягується до географічного Південного полюса Землі, є південним полюсом магніту.

У 1600 р. Вільям Гілберт (William Gilbert) (1540–1603) поширив експерименти де Марікура на різні матеріали. Він знав, що стрілка компаса орієнтується у певних виділених напрямках, тому припустив, що сама Земля є великим постійним магнітом. У 1750 р. експериментатори використали крутильні ваги, щоб показати, що магнітні полюси діють один на одного силами тяжіння або відштовхування і що ці сили змінюються як обернений квадрат відстані між взаємодіючими полюсами. Хоча сила взаємодії між двома магнітними полюсами здається подібною до сили, що діє між двома електричними зарядами, електричні заряди можуть бути ізольовані один від одного (наприклад, електрон і протон в атомі водню), тоді як один магнітний полюс ніколи не вдавалося ізольовати. Тобто магнітні полюси завжди перебувають парами. Усі спроби виявити ізольований магнітний полюс (тобто знайти магніт лише з одним полюсом – так званий *магнітний монополь*) були безуспішними. Скільки б разів постійний магніт не розрізали надвоє, кожен шматок завжди має північний і південний полюси. Натомість слід зауважити, що існують деякі теоретичні підвалини для припущень, що магнітні монополі — ізольовані північний або південний полюси — можуть існувати в природі.

Тому й не дивно, що спроби їх виявлення й досі є активною експериментальною областю досліджень.

Взаємозв'язок між магнетизмом і електрикою було виявлено в 1819 р., коли під час лекційної демонстрації видатний датський фізик Ганс Крістіан Ерстед (Hans Christian Oersted) (1777–1851) виявив, що електричний струм у дроті відхиляє стрілку компаса, що знаходиться поруч. Цікаво, що про таке ж саме відкриття повідомив у 1802 р. італійський юрист Джан Доменіко Романьйози (Gian Domenico Romagnosi), але, ймовірно, його не помітили, оскільки це повідомлення було опубліковано в незрозумілому журналі.

У 1820-х рр. подальші зв'язки між електрикою та магнетизмом були незалежно продемонстровані Майклом Фарадеєм (Michael Faraday) (1791 – 1867) та Джозефом Генрі (Joseph Henry) (1797–1878). Вони показали, що електричний струм може виникати в електричному колі у результаті руху магніту поблизу кола або через зміну струму в сусідньому колі (*закон електромагнітної індукції*). Отже, змінне у часі магнітне поле створює електричне поле. Згодом у теоретичній роботі Джеймса Клерка Максвелла (James Clerk Maxwell) (1831 – 1879) було показала, що вірно й зворотне: змінне електричне поле створює магнітне поле.

1.2. Основні поняття класичної теорії магнетизму

Розглянемо основні поняття класичної теорії магнітного поля (див., наприклад, [35 – 37]).

Магнітне поле – це особливий вид матерії, що оточує *електричні струми*, тобто будь-які *рухомі* електричні заряди. Воно також оточує магнітну речовину, яка утворює будь-який *постійний магніт*.

В якості фізичної величини, що кількісно описує магнітне поле у вакуумі, використовується *індукція магнітного поля* \vec{B} . Часто її також називають «магнітною індукцією». За напрямком вектору індукції магнітного

поля \vec{B} у довільній точці простору береться напрямок, у якому вказує стрілка компаса у цій точці.

Для графічного зображення магнітного поля прийнято використовувати так звані *лінії індукції магнітного поля*. Ці лінії є замкненими та гладкими, а також завжди мають власну завдану спрямованість. Дотична до лінії індукції магнітного поля у будь-якій точці визначає напрямок вектору \vec{B} у цій точці, а щільність ліній пропорційна величині $|\vec{B}|$. Приклад ліній індукції магнітного поля, створеного постійним стрижневим магнітом, наведено на рис. 1.1.

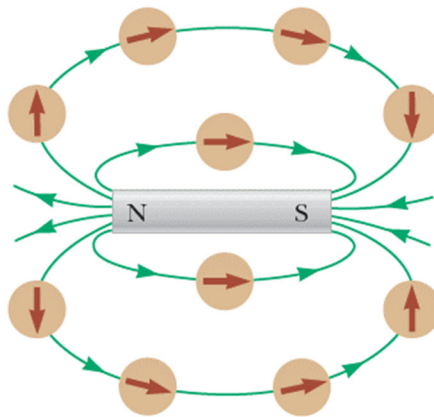


Рисунок 1.1 – Лінії індукції магнітного поля, створеного постійним стрижневим магнітом [35].

Для магнітного поля, як і для електричного поля, в широкому діапазоні величин \vec{B} справедливий *принцип суперпозиції*:

$$\vec{B} = \sum_{i=1}^n \vec{B}_i, \quad (1.1)$$

тобто результуюча індукція магнітного поля, створеного магнітними полями $\vec{B}_1, \vec{B}_2, \dots, \vec{B}_n$, дорівнює векторній сумі індукцій цих полів.

Індукцію магнітного поля, створеного будь-яким просторовим розподілом струмів у завданій точці простору, можна визначити з використанням *закону Біо – Савара – Лапласа*, відкритого в 1820 р. Ж. Біо і

Ф. Саваром (Франція) експериментально, а згодом математично обґрунтованого П. Лапласом (Німеччина).

В інтегральній формі для струму I , що тече у замкненому контурі L , закон Біо – Савара – Лапласа має вигляд:

$$\vec{B} = \int d\vec{B} = \frac{\mu_0}{4\pi} \oint_L \frac{I}{r^3} [d\vec{l} \times \vec{r}], \quad (1.2)$$

де $I d\vec{l}$ – елемент струму, $d\vec{l} = \vec{\tau} dl$, $\vec{\tau}$ – орт дотичної до напрямку протікання струму, dl – елемент довжини дуги, $\mu_0 = 4\pi \cdot 10^{-7}$ Гн/м – магнітна стала. Взаємне просторове розташування векторів, що містяться у (1.2), продемонстровано на рис. 1.2.

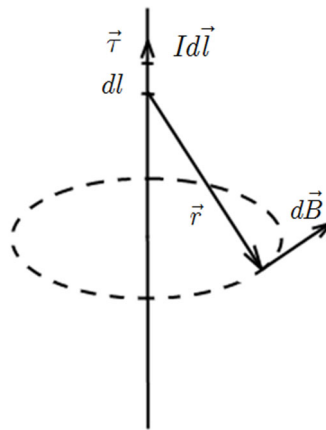


Рисунок 1.2 – Взаємне просторове розташування векторів, що містяться у співвідношенні (1.2).

Інтегральна форма закону (1.2) отримується із диференціальної форми з використанням узагальнення принципу суперпозиції (1.1) для безперервного розподілу джерел магнітного поля.

Існує також інтегральна форма Біо – Савара – Лапласа для безперервного просторового розподілу електричних струмів:

$$\vec{B} = \int d\vec{B} = \frac{\mu_0}{4\pi} \int_V \frac{[\vec{j} \times \vec{r}]}{r^3} dV, \quad (1.3)$$

де елемент струму $I d\vec{l}$ перетворено на $\vec{j}dV$, де $\vec{j} = \vec{j}(\vec{r})$ – густина струму, наступним чином (рис. 1.3):

$$I d\vec{l} = j S d\vec{l} = j \vec{\tau} S dl = \vec{j} dV, \quad (1.4)$$

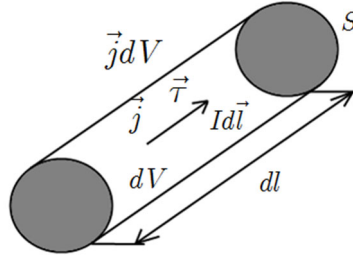


Рисунок 1.3 – Геометрична інтерпретація зв'язку елементів зі струмом $I d\vec{l}$ та $\vec{j}dV$ у співвідношенні (1.4).

Інтегрування у співвідношенні (1.3) ведеться по об'єму V , де розташовано струми $\vec{j}(\vec{r})$.

Магнітне поле діє на будь-який *рухомий електричний заряд*, що потрапляю до нього. Відповідна сила відома як *сила Лоренца*. Вона задається співвідношенням:

$$\vec{F} = q [\vec{v} \times \vec{B}], \quad (1.5)$$

\vec{B} – індукція магнітного поля, \vec{v} – швидкість руху заряду q відносно магнітного поля \vec{B} .

Якщо у просторі, де у магнітному полі рухається електричний заряд, існує тож електричне поле, то говорять про *узагальнену силу Лоренца*:

$$\vec{F} = q\vec{E} + q[\vec{v} \times \vec{B}] \quad (1.6)$$

де \vec{E} – напруженість електричного поля. У співвідношенні (1.6) перший доданок описує силу, що діє з боку електричного поля, другий – з боку магнітного поля. Слід зауважити, що інколи може виникнути плутанина, бо під силою Лоренца у деяких літературних джерелах розуміють величину, що задається співвідношенням (1.6), а не (1.5).

Добре відомо, що електричний струм (струм провідності, струм зсуву або конвекційний струм) є впорядкованим рухом електричних зарядів. Тому оскільки магнітне поле діє на поодинокий рухомий заряд, то воно здатне діяти й на будь-який провідник з струмом, що до нього внесено. Силу, з якою діє магнітне в такому випадку, називають *силою Ампера*.

Сила Ампера $d\vec{F}$, що діє з боку зовнішнього магнітного поля \vec{B} на лінійний елемент струму $I d\vec{l}$, що проходить через поперечний переріз провідника S , задається співвідношенням:

$$d\vec{F} = I [d\vec{l} \times \vec{B}], \quad (1.7)$$

яке виражає закон Ампера для лінійного елемента струму.

Сила Ампера, що діє на провідник скінченної довжини L , визначається інтегруванням (1.7) по всій довжині провідника, тобто обчисленням контурного інтеграла вздовж кривої L :

$$\vec{F} = \int_L I [d\vec{l} \times \vec{B}]$$

Це є законом Ампера для провідника скінченної довжини.

Важливою фізичною величиною в теорії магнітного поля є *потік вектору індукції магнітного поля*, який часто називають просто «магнітний потік».

Повний магнітний потік вектору \vec{B} через поверхню S визначається співвідношенням:

$$\Phi_m = \int d\Phi_m = \int_S \vec{B} d\vec{S},$$

де формальний вектор $d\vec{S}$ визначається як $d\vec{S} = \vec{n} dS$, де \vec{n} – зовнішня нормаль к елементу поверхні dS . Поверхневий інтеграл обчислюється по поверхні S , крізь яку й обчислюється магнітний потік.

Для магнітного поля є справедливою теорема Остроградського – Гауса. Її прийнято записувати в інтегральній формі:

$$\oint_S \vec{B} d\vec{S} = 0,$$

де поверхневий інтеграл обчислюється по замкненій поверхні, і в диференціальній формі:

$$\operatorname{div} \vec{B} = 0,$$

що має локальний характер, тобто дивергенція вектору індукції магнітного поля розглядається у заданій точці простору.

Важливим наслідком теореми Остроградського – Гауса є наступне. Векторне поле, дивергенція якого всюди обертається на нуль, називається *соленоїдальним*. Магнітне поле є соленоїдальним. Його джерелом є електричні струми. Силкові лінії магнітного поля *замкнені*, оскільки *магнітних зарядів* в природі *не існує*.

Іншою важливою для теорії магнітного поля фізичною величиною є *циркуляція* вектору індукції магнітного поля за замкненим контуром.

Циркуляцією вектору індукції магнітного поля називається контурний інтеграл по замкнутому контуру:

$$\Gamma = \oint_L \vec{B} d\vec{l},$$

де $d\vec{l}$ – елементарне переміщення уздовж кривої L задається співвідношенням $d\vec{l} = \vec{\tau} dl$, $\vec{\tau}$ – орт дотичної до кривої в даній точці, dl – елемент довжини дуги.

Для циркуляції вектору індукції магнітного поля існує наступна важлива теорема.

Теорема: циркуляція вектору індукції магнітного поля постійних струмів дорівнює сумі сил струмів I_i , що пронизують контур циркуляції:

$$\oint_L \vec{B} d\vec{l} = \mu_0 \sum_i I_i.$$

Це *інтегральна форма* даної теореми. Її також можна переписати для безперервного розподілу струмів $\vec{j}(\vec{r})$, що перетинають поверхню S , обмежену замкненим контуром L :

$$\oint_L \vec{B} d\vec{l} = \mu_0 \int_S \vec{j} d\vec{S}.$$

Використовуючи теорему Стокса, теорему про циркуляцію вектору \vec{B} можна переписати в *диференціальній формі*:

$$\text{rot } \vec{B} = \mu_0 \vec{j}.$$

Слід відзначити, що векторне поле, ротор якого не дорівнює нулю, називається *вихровим*. Магнітне поле є вихровим там, де тече електричний струм, і невихровим – де його немає.

Магнітне поле може існувати не лише у вакуумі. Встановлено, що деякі середовища при зануренні їх до магнітного поля здатні *намагнічуватися*, тобто зберігати власне магнітне поле після зникнення зовнішнього поля.

Магнетиком називають речовину, здатну намагнічуватися в зовнішньому магнітному полі. Цей процес можна пояснити наступним чином.

У всіх речовинах існують дрібні (мікроскопічні) електричні струми, що замикаються в межах кожного атома, молекули або іона. Ці струми прийнято називати *молекулярними струмами*. Якщо магнетик не намагнічений, то він не створює магнітного поля, оскільки просторова орієнтація різних молекулярних струмів в ньому є безладною та створюване ними сумарне магнітне поле дорівнює нулю. При намагнічуванні магнетика розташування молекулярних струмів стає частково або навіть повністю впорядкованим, через що виникає внутрішнє магнітне поле, яке можна розуміти як суму найдрібніших магнітних полів, створюваних молекулярними струмами.

Кількісно магнітна дія замкнутого струму характеризується його *магнітним моментом* \vec{p}_m :

$$\vec{p}_m = IS\vec{n},$$

де I – сила струму, S – площа, що охоплюється струмом, \vec{n} – орт нормалі до площини витка зі струмом, напрямок якого визначається правилом свердлика відносно напрямку, куди тече струм (нагадаємо, що за напрямком електричного струму береться напрямок руху позитивних зарядів).

Магнітний стан середовища можна повністю описати, задавши магнітний момент кожної одиниці об'єму. Для цього використовується наступна фізична величина.

Вектор намагніченості середовища \vec{J} – це магнітний момент одиниці об'єму середовища:

$$\vec{J} = \lim_{V \rightarrow 0} \frac{1}{V} \sum_{i=1}^N \vec{p}_{mi}, \quad (1.8)$$

де N – число частинок (атомів, молекул, іонів) в об'ємі V , \vec{p}_{mi} – магнітний момент i -ої частинки.

На базі вектору намагніченості середовища замість індукції магнітного поля \vec{B} , що описувала його поведінку у вакуумі, вводиться інша фізична величина – *напруженість магнітного поля \vec{H}* , що гратиме аналогічну роль для магнітного поля у речовині:

$$\vec{H} = \frac{\vec{B}}{\mu_0} - \vec{J}. \quad (1.9)$$

Зрозуміло, що інформація про реакцію середовища на появу в ньому зовнішнього магнітного поля міститься у векторі намагніченості середовища \vec{J} .

Між вектором намагніченості \vec{J} і вектором напруженості магнітного поля \vec{H} в більшості середовищ існує зв'язок:

$$\vec{J} = \hat{\chi}(\vec{H})\vec{H}, \quad (1.10)$$

де $\hat{\chi}(\vec{H})$ – *тензор магнітної сприйнятливості середовища*.

У випадку слабких полів в ізотропних середовищах співвідношення (1.10) спрощується:

$$\vec{J} = \chi \vec{H}, \quad (1.11)$$

де величина χ є просто числом і називається *магнітною сприйнятливістю середовища*.

З урахуванням співвідношень (1.9) і (1.11) отримують, що

$$\vec{B} = \mu_0 \mu \vec{H}, \quad (1.12)$$

де величина $\mu = 1 + \chi$ іменується *магнітною проникністю середовища*. Фізичний сенс величини μ полягає у тому, що вона показує, у скільки разів індукція магнітного поля в речовині більше, ніж у вакуумі. Для вакууму $\mu = 1$ і $\chi = 0$.

У загальному ж випадку є справедливими відповідні тензорні співвідношення:

$$\begin{aligned} \vec{B} &= \mu_0 \hat{\mu}(\vec{H}) \vec{H}, \\ \hat{\mu}(\vec{H}) &= \hat{1} + \hat{\chi}(\vec{H}), \end{aligned}$$

де $\hat{\mu}(\vec{H})$ – *тензор магнітної проникності середовища*.

Співвідношення, записані раніше для вектору \vec{B} , що описує магнітне поле у вакуумі, у випадку слабких полів в ізотропних середовищах можна переписати для вектору \vec{H} :

$$\begin{aligned} \oint_S \vec{H} d\vec{S} &= 0, \quad \text{div } \vec{H} = 0, \\ \oint_L \vec{H} d\vec{l} &= \sum_i I_i \quad \text{або} \quad \oint_L \vec{H} d\vec{l} = \int_S \vec{j} d\vec{S}, \quad \text{rot } \vec{H} = \vec{j}. \end{aligned}$$

Звідси стає зрозумілою перевага введення вектору \vec{H} для магнітного поля в середовищі: у правій частині теореми Остроградського – Гауса стоять лише *зовнішні* струми, оскільки реакція самого магнетика на появу в ньому магнітного поля вже прихована у векторі \vec{H} .

Отже, процес намагнічування макроскопічного об'єму речовини є *колективним ефектом*, в створенні якого бере участь велика кількість атомів або молекул. Встановлено, що всі магнетики діляться на три класи: діамагнетики, парамагнетики та феромагнетики.

Діамагнетиком називається речовина, що має $\chi < 0$, $0 < \mu < 1$. У діамагнетику магнітне поле послаблюється. Діамагнетиками є речовини, у яких атоми та молекули мають повністю заповнені електронні оболонки, наприклад, інертні гази, молекулярні водень, азот, золото, кремній і т. і. Магнітна сприйнятливість χ для діамагнетиків не залежить ані від температури, ані від величини зовнішнього магнітного поля.

Парамагнетиком називається речовина, що має $\chi > 0$, $\mu > 1$. До парамагнетиків належать всі речовини, магнітний момент молекул яких не дорівнює нулю. Парамагнетиками є речовини, у яких атоми або молекули мають непарну кількість електронів, наприклад, елементи перехідної групи, рідкоземельні елементи, молекулярний кисень і т. і. Діелектрична сприйнятливість χ для парамагнетика залежить від температури T у відповідності до *закону Кюрі*:

$$\chi = \frac{C}{T},$$

де C – стала Кюрі.

Феромагнетиком називається речовина, що має $\mu \gg 1$. Феромагнетики мають *спонтанну намагніченість*. До феромагнетиків належать, наприклад, залізо, нікель, кобальт тощо. Спонтанна намагніченість істотно залежить від температури та деформації тіла. Важливо, що залежність між \vec{J} і \vec{H} має *нелінійний характер* і залежить від попередньої історії намагнічуватися тіла (так зване явище *магнітного гістерезису*). Для феромагнетику на площині змінних J і H виникає так звана *петля гістерезису* (рис. 1.4).

Класична теорія магнетизму дає наступне пояснення виникнення явища гістерезису. У феромагнетику є велика кількість макроскопічних областей зі

спонтанною намагніченістю – магнітних доменів. Нехай спочатку ферромагнетик буде ненамагніченим. На рис. 1.4 цьому відповідає початок координат – точка O . Домени є орієнтованими хаотичним чином, а тому векторна сума їх векторів намагніченостей виявляється рівною нулю. Однак

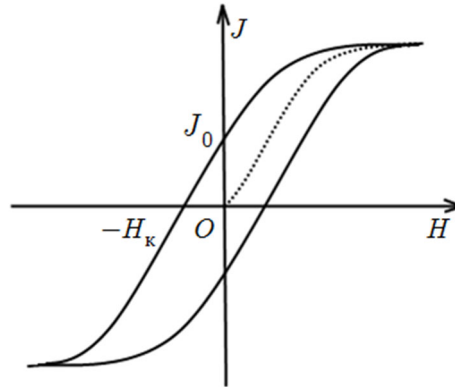


Рисунок 1.4 – Петля гістерезису.

з появою зовнішнього магнітного поля \vec{H} , домени під його впливом починають орієнтуватися. Отже зі зростанням величини H починає зростати й величина J . Разом з тим, кількість доменів в тілі є обмеженою. У результаті, поступово зростання величини J зі збільшенням величини H починає уповільнюватися, поки не переходить в *режим насичення*, коли всі домени вже повністю вишикувалися по полю. Тепер починаємо зменшувати величину H . Зрозуміло, що й величина J теж буде зменшуватися. Але коли зовнішнє поле зникне, то з'ясується, що не всі домени повернулися до початкового хаотичного стану. Саме цим і пояснюється наявність *залишкової намагніченості* J_0 . Отже, щоб повністю розмагнітити тіло, необхідно створити зовнішнє поле, спрямоване в протилежну сторону відносно вихідного поля. Коли це зовнішнє поле досягне величини H_k , званої *коерцитивною силою*, намагніченість стане рівною нулю. Видно, що петля гістерезису є симетричною відносно початку координат. Отже, не має жодного значення, в який бік буде спочатку спрямовано зовнішнє поле.

Варто також зауважити, що крім магнетиків, класифікація яких наведена вище, існують також *ідеальні діамагнетики* та *немагнітні речовини*. Для

ідеальних магнетиків спостерігається повне екранування зовнішнього поля ($\mu = 0$, $\chi = -1$), а в немагнітній речовині взагалі не відбувається її намагнічування ($\mu = 1$, $\chi = 0$).

Таким чином, ми розглянули основні поняття класичної теорії магнетизму, розуміння яких є важливим для даної роботи.

Натомість як показав досвід ХХ сторіччя, магнітні явища виявилися значно багатшими і складнішими, ніж це була в змозі пояснити класична теорія магнетизму. Тому наступним кроком розвитку теорії магнетизму став відхід від класичної теорії та перехід «на колію» квантової механіки.

Зауважимо, що насправді магнетизм є суто квантовим явищем, а будь-яка «класична теорія» містить в собі штучні припущення, які дозволяють описувати магнітні явища «класично». Теорема Бора – ван Льовен (1911) стверджує: при будь-якій скінченній температурі та в будь-яких скінченних прикладених електричних або магнітних полях сумарна намагніченість сукупності нерелятивістських електронів у стані теплової рівноваги тотожно дорівнює нулю. Для появи магнетизму потрібно квантування енергій та скінченність швидкості світла.

1.3. Основні ідеї квантової механіки

Розглянемо основні ідеї квантової механіки (див., наприклад, [35 – 37]), що лежать у підґрунті *квантової теорії магнетизму*, обговоренню особливостей якої присвячено підрозділ 1.4.

Квантова механіка – це теорія фізичних явищ і процесів мікросвіту. Під *мікросвітом* розуміють сукупність матеріальних об'єктів, лінійні розміри яких є порядку $10^{-6} - 10^{-13}$ см.

Квантова механіка описує властивості атомів і молекул, механізми випромінювання і поглинання електромагнітних хвиль, природу періодичного закону, рух частинок у зовнішніх полях тощо.

Поява, розвиток і становлення квантової механіки відбувалися у 1900 – 1929 рр. завдяки зусиллям великої кількості видатних вчених світового рівня, таких як, зокрема, Макс Планк (Max Planck, 1858 – 1947, Німеччина), Ернст Резерфорд (Ernest Rutherford; 1871 – 1937, Великобританія), Альберт Ейнштейн (Albert Einstein, 1879 – 1955, Німеччина, США), Нільс Бор (Niels Bohr, 1885 – 1962, Данія), Луї де Бройль (Louis de Broglie; 1892 – 1987, Франція), Макс Борн (Max Born, 1882 – 1970, Німеччина), Ервін Шредингер (Erwin Schrödinger; 1887 – 1961, Австрія), Вернер Гейзенберг (Werner Heisenberg, 1901 – 1976, Німеччина), Вольфганг Паулі (Wolfgang Pauli, 1900 – 1958, Австрія); Поль Дірак (Paul Dirac, 1902 – 1984, Великобританія) та інші.

Основною причиною виникнення квантової механіки як фізичної теорії мікросвіту стало те, що на рубежі XIX і XX сторіччя накопичилося досить багато експериментальних фактів, коректно пояснити які традиційна класична теорія вже була не в змозі. У першу чергу, це стосувалося оптики (теплове випромінювання, спектри поглинання та випромінювання атомів і молекул), а також теорії будови атома.

У результаті експериментального відкриття законів теплового випромінювання (закон Кірхгофа, закон зміщення Віна, закон Стефана – Больцмана) з'явилася потреба у побудові відповідної теорії теплового випромінювання. Базуючись на уявленнях про атоми як про класичні гармонічні осцилятори, що безперервно випромінюють і поглинають електромагнітні хвилі, було отримано так звану *формулу Релея – Джинса*.

$$r(\nu, T) = \frac{2\pi\nu^2}{c^2} kT, \quad (1.13)$$

де $r(\nu, T)$ – універсальна функція Кірхгофа, що є спектральною густиною енергетичної світності абсолютно чорного тіла, ν – частота, T – температура, k – стала Больцмана, c – швидкість світла у вакуумі.

Хоча формула Релея – Джинса й повністю відповідала всім положенням класичної фізики та вперше пропонувала аналітичний вигляд універсальної функції Кірхгофа, існування якої встановлювалося законом Кірхгофа, спроби

вивести з неї закони зміщення Віна та Стефана – Больцмана зазнали невдачу. Більш того, інтегрування спектральної густини енергетичної світності абсолютно чорного тіла за частотою призвело взагалі до розбігання інтегралу у високочастотній («ультрафіолетовій» частині спектру). Фізично це означало, що нібито абсолютно чорне тіло за сталої температури за одиницю часу випромінює або поглинає нескінченну кількість енергії, що є, безперечно, фізичним абсурдом. Ця подія отримала назву «ультрафіолетової катастрофи». Назва повністю відповідала характерові того, що трапилося, оскільки дотолі бездоганна класична фізична теорія з використанням формально вірних математичних перетворень призвела до повністю безглузлого результату.

Вихід з цього становища запропонував М. Планк, коли 14 грудня 1900 р. на засіданні Німецької фізичного товариства він запропонував *квантову гіпотезу*. Саме цей день і вважають днем народження *квантової механіки*.

Квантова гіпотеза: атомні осцилятори випромінюють енергію не безперервно, а порціями – квантами. Енергія кванта становить:

$$E = h\nu,$$

де h – стала Планка, яка дорівнює $h = 6,625 \cdot 10^{-34}$ Дж · с . Величину $\hbar = h / 2\pi$ називають *сталю Дірака*.

Отже, класичний осцилятор було замінено на квантовий осцилятор, а на зміну формулі Релея – Джинса (1.13) прийшла формула Планка:

$$r(\nu, T) = \frac{2\pi h\nu^3}{c^2} \frac{1}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1}. \quad (1.14)$$

Важливо, що універсальна функція Кірхгофа вигляду (1.14) дозволила отримати вірні теоретичні вирази для всіх експериментально встановлених законів теплового випромінювання, а отже, й подолати «ультрафіолетову катастрофу».

Нова теорія світла, започаткована М. Планком (згодом – *квантова оптика*), дозволила теоретично пояснити цілу низку експериментальних результатів, що дотолі були, у певному сенсі, артефактами.

Так, спираючись на гіпотезу Планка, А. Ейнштейн у 1905 р. створив *теорію фотоефекта*, що змогла нарешті пояснити наявні тоді експериментальні дані з зовнішнього фотоефекту. Як відомо, *зовнішнім фотоефектом* називають явище виривання електронів під дією світла.

Гіпотеза Планка також допомогла у поясненні ефекту, відкритого Артуром Комптоном (Arthur Compton, 1892–1962, США) в 1922 р., а в 1923 р. інтерпретований А. Комптоном і незалежно від нього Петером Дебаєм (Peter Debye, 1884–1966, Нідерланди, США). *Ефектом Комптона* називається явище зміни довжини хвилі короткохвильового електромагнітного випромінювання (рентгенівського і гамма-діапазонів) при розсіянні на вільних або слабо пов'язаних електронах речовини. Ефект Комптона експериментально доводить існування кванта електромагнітного випромінювання – фотона, постульованого А. Ейнштейном в 1905 р.

Також гіпотеза Планка дозволила пояснити експериментальні дані з *тиску світла*. Гіпотеза про тиск світла була висловлена 1619 р. Іоганном Кеплером (Johannes Kepler, 1571 – 1630, Німеччина). Теоретично існування тиску світла передбачено в 1873 р. Джеймсом Максвеллом (James Maxwell, 1831 – 1879, Шотландія). Експериментально існування тиску світла підтверджено в 1899 р. П. Н. Лебедєвим.

Другим важливим джерелом появи квантової механіки є дослідження будови атома.

До кінця XIX століття, було відомо, що всі тіла складаються з атомів і молекул. Гіпотеза про існування атома як найменшої неподільної частинки була висловлена ще давньогрецьким філософом Демокритом (Δημόκριτος, приблизно 460—370 роки до н. е.). Однак будова самого атома залишалася невідомою.

У 1887 р. Джозеф Томсон (Joseph Thomson, 1856–1940, Великобританія) відкриває електрон як частинку з найменшим неподільним негативним електричним зарядом. При цьому тоді було добре відомо, що *атом є електрично нейтральним*. Тобто якщо він містить електрони, то повинна бути і якась позитивно заряджена субстанція. Але чим вона є та де вона розташовується, було невідомо. У 1898 р. Дж. Томсон припустив, що атоми є однорідними кулями з позитивно зарядженої речовини, в якій вмуровано електрони, подібно до родзинок у пудингу. При цьому алгебраїчна сума зарядів в атомі дорівнює нулю й атом є електрично нейтральним. Ця модель, що базувалася виключно на положеннях класичної фізиці, отримала назву *«пудинг з родзинками»*.

Але у 1911 р. Е. Резерфорд провів досліди, які повністю спровергли цю модель і призвели до появи нової моделі – *ядерної (планетарної) моделі атома Резерфорда*. У відповідності до неї, атом має маленьке, але дуже масивне позитивно заряджене ядро, навколо якого, як планети навколо Сонця, обертаються електрони. Хоча ця модель і добре пояснювала експериментальні результати Резерфорда, згодом з'ясувалося, що вона теж не вільна від ряду істотних недоліків. По-перше, з неї не зрозуміло, чому електрон, рухаючись по орбіті, не випромінює, хоча і рухається з доцентровим прискоренням. Це суперечить класичній електромагнітній теорії. По-друге, випромінюючи, електрон мав би витратити свою енергію вже за 10^{-16} с і впасти на ядро, а спектр випромінювання зобов'язаний бути безперервним. Але це зовсім не так, бо атом є дуже стабільною системою, а експериментально досліджені спектри випромінювання атомів є лінійчастими, а зовсім не безперервними.

Щоб усунути ці протиріччя, а також пояснити встановлений М. Планком квантовий характер випромінювання і поглинання атомом електромагнітних хвиль, Н. Бор в 1913 р сформулював припущення, які суперечать як класичній механіці, так і класичній електродинаміки. Тепер вони добре відомі як *постулати Бора*.

1. *Постулат стаціонарних станів.* Атом (і будь-яка атомна система) може перебувати не в усіх станах, що допускаються класичною механікою, а тільки в деяких обраних (квантових) станах, що характеризуються певними дискретними значеннями енергії. У цих станах, всупереч класичної електродинаміки, атом не випромінює. Тому вони називаються *стаціонарними станами*.

2. *Правило частот.* При переході з одного стаціонарного стану з номером n до іншого з номером k атом випромінює або поглинає один фотон, енергія якого визначається з умови:

$$h\nu = E_n - E_k.$$

При $E_n > E_k$ фотон випромінюється, при $E_n < E_k$ – поглинається.

З першого постулату випливає *правило квантування Бора*: електрони в атомах рухаються по певних орбітах, для яких виконується умова *квантування моменту імпульсу*:

$$M \equiv M_n = n\hbar, n \in \mathbb{N}.$$

Оскільки модуль моменту імпульсу електрона M пов'язаний з масою електрона m_e , його швидкістю v і радіусом орбіти r співвідношенням:

$$M = m_e vr,$$

впливає, що

$$n = \frac{2\pi r}{\frac{h}{m_e v}} = \frac{l}{\lambda_{дб}}.$$

Таким чином, *головне квантове число* n , що набуває лише значень з множини натуральних чисел, дорівнює кількості довжин хвиль де Бройля електрона $\lambda_{дб}$, які точно вміщуються на довжині його колової орбіти l . (Про хвилю де Бройля йдеться трошки нижче).

Стан з $n = 1$ називається *основним* або *нормальним* (незбудженим) станом атома. Важливо, що енергія електрона тут є мінімальною, а час життя

– необмеженим. Стани з $n > 1$ називаються *збудженими*, час життя атома в таких станах виявляється вкрай обмеженим (в середньому $\sim 10^{-8}$ с). При $n \rightarrow \infty$ $E_n \rightarrow 0$, що відповідає відриву електрона від атома.

Величину

$$|E_n| = \left| \frac{R}{n^2} \right|$$

називають *енергією зв'язку* електрона в стані зі значенням головного квантового числа n . Тут $R = 3,29 \cdot 10^{15} \text{ с}^{-1}$ – стала Ридберга для атому водню.

Радіуси стаціонарних орбіт електрона в атомі водню визначаються співвідношенням:

$$r \equiv r_n = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{m_e e^2} n^2 = \frac{\epsilon_0 h^2}{\pi m_e e^2} n^2.$$

ϵ_0 – електрична стала, e – заряд електрона.

Необхідно зауважити, що модель Бора придатна не лише для опису атому водню, а й для так званих *воднеподібних систем*: He^+ , Li^{++} і т. і., в яких заряд ядра є різним, але є тільки один електрон, як це є в атомі водню.

Модель атома Бора, яку часто називають також *напівквантовою моделлю атома Бора*, відіграла велику роль у становленні квантової механіки, оскільки дозволила: пояснити механізм виникнення та структуру лінійчатих спектрів випромінювання атома водню та воднеподібних систем, для воднеподібних систем отримати досить точний збіг ліній спектра випромінювання, отриманих теоретично й експериментально, пояснити результати дослідів Франка – Герца, пояснити характер рентгенівських спектрів, пояснити ефект Зеємана, обчислити теоретичне значення сталої Ридберга.

Натомість модель атома Бора мала й суттєві вади. Зокрема, вона не дає можливості пояснити залежності інтенсивності спектральних ліній від частоти, не пояснює поляризованості та дисперсії випромінювання атома, є

непридатною для багатоелектронних систем, є внутрішньо суперечливою та непослідовною, оскільки одночасно застосовуються як квантові, так і класичні уявлення, що перебувають в принциповому протиріччі одні з одними.

Ще одною визначною ідеєю квантової механіки є так звана *гіпотеза де Бройля*. У 1924 р було відомо, що світло має властивість *корпускулярно-хвильового дуалізму*, тобто в одних умовах воно веде себе як хвиля (інтерференція, дифракція), а в інших - як частинка (випромінювання, поглинання, тиск світла). Тобто фотон одночасно є і хвилею, і частинкою.

Л. де Бройль у 1924 р. висунув гіпотезу про універсальність корпускулярно – хвильового дуалізму. Він стверджував, що всі частинки матерії разом з корпускулярним властивостями мають також і хвильові властивості. Згідно де Бройлю енергія E та імпульс p частинки (корпускулярні характеристики) пов'язані з частотою ν та довжиною хвилі λ (хвильові характеристики) співвідношеннями:

$$E = h\nu, \quad p = \frac{h}{\lambda}, \quad \vec{p} = \hbar\vec{k},$$

де \vec{k} – хвильовий вектор.

Формула хвилі де Бройля, що описує вільний рух матеріальної частинки, має вигляд:

$$\Psi(\vec{r}, t) = A e^{i(\vec{k}\vec{r} - \omega t)}, \quad (1.15)$$

де A – амплітуда плоскої монохроматичної хвилі, $i = \sqrt{-1}$ – уявна одиниця, \vec{r} – радіус-вектор частинки, t – змінна часу, $\omega = 2\pi\nu$ – колова частота.

Довжина хвилі частинки з масою m , що рухається зі швидкістю v , дорівнює:

$$\lambda_{дб} = \frac{h}{mv}. \quad (1.16)$$

Часто довжину хвилі, яка визначається формулою (1.16), називають *довжиною хвилі де Бройля*. Для звичайних макроскопічних тіл довжина хвилі

де Бройля виявляється дуже малою, а тому прояв хвильових властивостей – неістотним.

Виходячи з гіпотези де Бройля, квантова механіка приймає без доказу той факт, що динамічні стани фізичної системи визначаються функцією, яка описує поширення відповідної хвилі речовини в просторі з плином часу. Цю функцію прийнято називати амплітудою ймовірності або *хвильовою функцією*. Вона була введена у 1926 р. німецьким фізиком М. Борном з метою відповісти на питання про *фізичну природу* хвиль де Бройля. Хвиля де Бройля (1.15) є хвильовою функцією *вільної частинки в нерелятивістському наближенні*. Вона описує вільний рівномірний рух частинки в певному напрямку і з певним імпульсом \vec{p} .

У загальному випадку вид хвильової функції $\Psi(\vec{r}, t)$ відрізняється від хвилі де Бройля (1.15) і визначається характером взаємодії частинки з полем або іншими частками. Еволюція хвильової функції $\Psi(\vec{r}, t)$ в часі описується *хвильовим рівнянням*. Важливо, що хвильова функція $\Psi(\vec{r}, t)$ є *аналогом траєкторії* в класичній механіці. У термінах хвильової функції можна говорити лише про *ймовірність* знайти частинку в деякій області простору координат та імпульсів. Необхідність саме *імовірнісного підходу* до опису мікрочастинок є *найважливішою відмінною рисою квантової теорії* від класичної.

Важливо пам'ятати, що сама хвильова функція $\Psi(\vec{r}, t)$ фізичного сенсу не має. Натомість має *фізичний сенс* квадрат модуля хвильової функції $|\Psi(\vec{r}, t)|^2$. Він дорівнює є ймовірністю знайти частинку в момент часу t в області простору з $[x, x + dx]$, $[y, y + dy]$, $[z, z + dz]$. Інакше кажучи, квадрат модуля хвильової функції $|\Psi(\vec{r}, t)|^2$ є ні чим іншим, як функцією густини розподілу ймовірності частинки в просторі в момент часу t .

Із цього постає, що ймовірність W знайти частку в деякому об'ємі простору V в момент часу t дорівнює:

$$W = \iiint_V dW = \iiint_V |\Psi(\vec{r}, t)|^2 dV.$$

Важливо зазначити, що для хвильової функції існує *принцип суперпозиції*.

Принцип суперпозиції: якщо квантова система може перебувати в станах, що описуються хвильовими функціями $\Psi_1, \Psi_2, \dots, \Psi_n$, то вона може перебувати і в стані, описуваному лінійною комбінацією цих функцій:

$$\Psi = \sum_{i=1}^n C_i \Psi_i,$$

де $n \in \mathbb{N}$, C_i – довільні числа. Тут слід підкреслити, що на відміну від класичної статистичної теорії, де для попарно несумісних подій справедлива теорема додавання ймовірностей:

$$P\left(\sum_n A_n\right) = \sum_n P(A_n),$$

в квантовій механіці додаються саме хвильові функції, а не самі ймовірності. Зрозуміло, що ймовірність є пропорційною квадратові хвильової функції.

Основна задача квантової механіки полягає в тому, щоб за заданою в початковий момент часу t_0 хвильовою функцією $\Psi(\vec{r}, t_0)$ визначити її значення $\Psi(\vec{r}, t)$ в будь-який інший момент часу $t > t_0$.

Еволюція хвильової функції $\Psi(\vec{r}, t)$ описується диференціальним рівнянням у частинних похідних, яке було запропоновано у 1926 р. Е. Шредінгером:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi + U(\vec{r}, t) \Psi(\vec{r}, t) = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}, \quad (1.17)$$

де \hbar – стала Дірака, m – маса квантової частинки, Δ – оператор Лапласа, $U(\vec{r}, t)$ – функція, що описує силове поле, в якому рухається квантова частинка. Рівняння Шредінгера є справедливим для частинки з *нульовим*

спіном і нерелятивістською швидкістю ($v \ll c$). Рівняння (1.17) називають *нестационарним рівнянням Шредінгера*.

Важливо зазначити, що квантова механіка у якості власного математичного інструментарію обрала не лише згаданий вище теоретико-ймовірнісний підхід, а й запозичила з лінійної алгебри теорію лінійних функціональних просторів та теорію лінійних операторів, зокрема, *спектральну теорію лінійного оператора*. Основна ідея так званого *операторного підходу* полягає в тому, що кожній фізичній величині певним чином ставиться у відповідність *лінійний оператор*, для якого з відповідного *спектрального рівняння* можна визначити його *власні числа*, що утворюють його так званий *спектр*, й відповідні власним числам *власні функції*. Саме в термінах таких лінійних операторів та їх спектральних характеристик проводиться описання квантово-механічних систем. Слід зауважити, що нелінійні оператори у квантовій механіці не використовують, оскільки саме їх нелінійність призводить до порушення згаданого вище принципу суперпозиції.

Основним оператором в квантовій механіці є оператор Гамільтона (його також часто називають просто «гамільтоніан»):

$$\hat{\mathcal{H}} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U(\vec{r}, t). \quad (1.18)$$

Із його використання можна записати *нестационарне рівняння Шредінгера в операторній формі*:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{\mathcal{H}}\Psi. \quad (1.19)$$

Якщо функція $U(\vec{r}, t)$ не залежить від часу t , то вона має фізичний сенс *потенціальної енергії* $U(\vec{r}) = U(x, y, z)$. Для цього випадку хвильову функцію можна записати у вигляді:

$$\Psi(\vec{r}, t) = \psi(\vec{r})e^{-i\frac{E}{\hbar}t}, \quad (1.20)$$

де E – повна енергія частинки, яка залишається незмінною у часі у випадку стаціонарного поля. Якщо вираз (1.20) підставити до (1.17), то отримуємо *стаціонарне рівняння Шредінгера*:

$$\Delta\psi + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U(\vec{r}))\psi(\vec{r}) = 0. \quad (1.21)$$

Підставляючи до (1.21) оператор Гамільтона (1.18), отримуємо *стаціонарне рівняння Шредінгера в операторній формі*:

$$\hat{\mathcal{H}}\psi = E\psi. \quad (1.22)$$

Вкрай важливим є те, що вираз (1.22) повністю збігається із спектральним рівнянням для оператора Гамільтона $\hat{\mathcal{H}}$. Це означає, що енергія частинки E виявляється власним числом оператора Гамільтона, а хвильова функція $\psi(\vec{r})$ – його власною функцією. Отже, знаючи гамільтоніан квантово-механічної системи (1.18), з рівняння (1.22) автоматично можна отримати інформацію про її енергетичний спектр (дозволені значення енергії E) та про її просторову конфігурацію (густину розподілу ймовірності $|\psi(\vec{r})|^2$, яка, як вже було сказано вище, є аналогом траєкторії частинки у класичній механіці). Із точки зору математики це вимагає вміння розв'язувати задачі математичної фізики для диференціальних рівнянь у частинних похідних. Тому третьою математичною підвалиною квантової механіки (поряд із теорією ймовірності та лінійною алгеброю) є *математична фізика*.

Слід також відзначити, що заміна $|\Psi(\vec{r}, t)|^2$ на $|\psi(\vec{r})|^2$ у розмірковуваннях про фізичний сенс $|\psi(\vec{r})|^2$ є цілком коректною, оскільки з використанням (1.20) легко показати, що:

$$|\Psi(\vec{r}, t)|^2 = \left| \psi(\vec{r}) e^{-i\frac{E}{\hbar}t} \right|^2 = |\psi(\vec{r})|^2 \left| e^{-i\frac{E}{\hbar}t} \right|^2 = |\psi(\vec{r})|^2,$$

оскільки

$$\left| e^{-i\frac{E}{\hbar}t} \right|^2 = 1^2 = 1.$$

Важливо зазначити, що рівняння (1.22) використовують у випадку існування потенціальної енергії для описуваного виду взаємодії (наприклад, гравітаційна взаємодія або електростатична взаємодія). Натомість рівняння (1.19) є вірним й для такої взаємодії, коли потенціальної енергії не існує (наприклад, магнітна взаємодія).

Для будь-яких фізичних величин $F(x, p)$, що є функціями координат x та імпульсів p , є справедливим співвідношення:

$$\langle F(x, p) \rangle = \int \Psi^*(x) F(\hat{x}, \hat{p}) \Psi(x) dx, \quad (1.23)$$

де $\langle \rangle$ – операція усереднення, $F(x, p)$ – ціла раціональна функція координат та імпульсів, як вона визначається у класичній теорії, $F(\hat{x}, \hat{p})$ – відповідний оператор, "*" – операція комплексного спряження, $\Psi(x)$ – хвильова функція, що задовольняє рівнянню (1.19). Інтегрування ведеться по області існування хвильової функції $\Psi(x)$. Зрозуміло, що будь-який оператор діє лише на ті функції, що стоять після нього. Для хвильової функції $\Psi(x)$ є справедливою умова нормування:

$$\int \Psi^*(x) \Psi(x) dx = 1. \quad (1.24)$$

Оператор координати є фактично оператором множення на координату: $\hat{x} = x$, а оператор імпульсу \hat{p} (точніше оператор проєкції імпульсу \hat{p}_x) має вигляд:

$$\hat{p} \equiv \hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}. \quad (1.25)$$

Оскільки хвильова функція $\Psi(x)$ повністю описує певний стан, і якому перебуває квантово-механічна система, то й середні значення всіх фізичних величин, що характеризують цю систему, також повинні залежати від хвильової функції, і це підтверджується співвідношенням (1.23).

Більш того, хвильова функція також може залежати від змінної часу t , тобто $\Psi = \Psi(x, t)$. Це означає, що стан системи розглядається у певний фіксований момент часу t , тому формально у відповідних співвідношеннях (наприклад, (1.23), (1.24)) величина t вважається сталим параметром, а тому на обчислення інтегралу впливу не має.

Прикладом вдалого розв'язання стаціонарного рівняння Шредінгера (1.22) є *квантово-механічна модель воднеподібного атома*. Її сутність полягає у наступному.

На відміну від напівквантової моделі атома Бора квантово-механічна модель воднеподібного атома не використовує жодних припущень. Потенціальна енергія електрона в центральній-симетричному полі ядра визначається співвідношенням:

$$U(\vec{r}) = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{ze^2}{r},$$

де z – заряд ядра (для атому водню $z = 1$). Тут знак « \leftarrow » означає, що електрон перебуває у *потенціальній ямі*, тобто у зв'язаному з ядром стані.

Тоді відповідне стаціонарне рівняння Шредінгера має вигляд:

$$\Delta\psi(\vec{r}) + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{ze^2}{r} \right) \psi(\vec{r}) = 0, \quad (1.23)$$

що можна переписати наступним чином:

$$-\left(\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{ze^2}{r} \right) \psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}),$$

звідки гамільтоніан системи дорівнює:

$$\hat{\mathcal{H}} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{ze^2}{r}. \quad (1.24)$$

Виходячи з наявної властивості центральної симетрії, розв'язок рівняння (1.23) шукається у сферичній системі координат (ρ, φ, θ)

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{ze^2}{r} \right) \psi(\vec{r}) = 0.$$

методом розділення змінних, запропонованим у математичній фізиці видатним математиком Жаном Батистом Фур'є (Jean Baptiste Fourier, 1768 – 1830, Франція):

$$\psi(\vec{r}) = \psi(\rho, \varphi, \theta) = R(r)\Theta(\theta)\Phi(\varphi).$$

Важливо, що отриманий точний розв'язок, який у загальному випадку є дуже громіздким, залежить від трьох цілочислових параметрів n , l і m , тобто $\psi(\rho, \varphi, \theta) = \psi_{n,l,m}(\rho, \varphi, \theta)$. Ці параметри отримали назву *квантових чисел*. Трактовку фізичного сенсу цих квантових чисел прийнято давати з використанням напівквантової моделі Бора.

Фізичний сенс *головного квантового числа* n вже обговорювався під час описання власне моделі Бора. Воно може приймати лише натуральні значення та відповідає за квантування енергії електрона в атомі:

$$E_n = -\frac{m_e z^2 e^4}{8\epsilon_0^2 \hbar^2} \frac{1}{n^2}.$$

Друге квантове число, квантове число l , називають *орбітальним (азимутним) квантовим числом*. Воно відповідає за квантування моменту імпульсу електрона в атомі:

$$M = \hbar \sqrt{l(l+1)}$$

та приймає цілі значення: $l = 0, 1, 2, \dots, (n-1)$.

Третє квантове число, квантове число m , називають *магнітним квантовим числом*. Воно відповідає за квантування проекції моменту імпульсу електрона на заданий напрямок в просторі (зазвичай на напрямок зовнішнього електричного або магнітного поля):

$$M_z = \hbar m$$

та набуває значення $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$.

За завданого значення n орбітальне квантове число l може приймати n різних значень, а магнітне квантове число – $(2l + 1)$ різних значень. Отже, атом водню, маючи одне й те саме значення енергії, може перебувати в різних станах, що відповідають різним комбінаціям l і m . Стани з однаковою енергією називаються *виродженими*, а число різних станів з якимось одним фіксованим значенням енергії – *кратністю виродження* енергетичного рівня. Встановлено, що кратність виродження рівнів атома водню становить:

$$\sum_{l=0}^{n-1} (2l + 1) = n^2 .$$

Отже, квантово-механічна модель атома водню є на сьогодні найбільш універсальною моделлю. Натомість лише у воднеподібних системах міститься лише один електрон. В інших атомах електронів значно більше. Тому й квантово-механічні моделі, що використовуються у цих випадках, є складнішими.

Так, у результаті досліджень мультиплетної структури оптичних спектрів та аномального ефекту Зеємана, в 1925 р. Самуель Аврам Гаудсміт (Samuel Abraham Goudsmit, 1902 – 1978, Нідерланди, США) та Джордж Юджин Уленбек (George Eugene Uhlenbeck, 1900 – 1988, Боулдер, Нідерланди, США) висунули гіпотезу про те, що електрон має власний момент імпульсу M_s , який не пов'язаний з рухом електрона у просторі. Цей власний момент було названо *спіном*. Спочатку у рамках моделі Бора існування спіну пояснювалося обертанням електрона навколо власної осі (на кшталт дзиги). Натомість потім від такої трактовки відмовилися, бо з'ясувалося, що результат експериментального вимірювання відношення власних магнітного та механічного моментів електрона чомусь вдвічі відрізняється від теоретично обґрунтованого. Оскільки наявність цієї відмінності не вдалося пояснити задовільним чином, на сьогодні вважається, що спін є *внутрішньою*

властивістю електрона подібно до його заряду або маси. Згодом також з'ясувалося, що спін є й у інших елементарних частинок.

Саме із існуванням спіну пов'язано існування четвертого квантового числа – так званого *спінового квантового числа*. Важливо, що його наявність не впливає з рівняння Шредінгера. Спінове квантове число s відповідає за квантування власний моменту імпульсу електрона M_s :

$$M_s = \hbar\sqrt{s(s+1)},$$

де $s = 1/2$. Його часто називають *спіновим кутовим квантовим числом* або інколи просто «*спіном*» (що породжує певний безлад, оскільки «спіном» називають також і власний момент імпульсу M_s).

Також квантується й проекція власного моменту імпульсу електрона на заданий напрямок в просторі:

$$M_{sz} = \hbar m_s$$

де $m_s = \pm s = \pm 1/2$. Величину m_s називають *спіновим магнітним квантовим числом* або зазвичай просто «*спіновим квантовим числом*».

Саме з використанням набору з чотирьох квантових чисел для електрона в атомі, а також *принципу Паулі*, вдається добре пояснити наявні експериментальні факти, наприклад, існування періодичної системи елементів, магнітомеханічних явищ і т. і.

Принцип Паулі, сформульований В. Паулі у 1925 р., стверджує, що у багаточастинковій квантово-механічній системі невзаємодіючих ферміонів жодні дві частинки не можуть описуватися хвильовими функціями з однаковим набором усіх квантових чисел. *Ферміонами* називають елементарні частинки, що підпорядковуються статистиці Фермі – Дірака. На відміну від *бозонів*, що описуються статистикою Бозе – Ейнштейна та є «колективістами», ферміони є «індивідуалістами», на що власне й вказує принцип Паулі.

Таким чином, важливо пам'ятати, що електрон, як і будь-яка інша квантова частинка, не має траєкторії в атомі, а лише у даний фіксований

момент часу з певною ймовірністю є якось розподілений у просторі, формуючи так звану електронну хмаринку. Просторова конфігурація такої хмаринки визначається набором квантових чисел, що відповідають даному станові електрона.

1.4. Основні ідеї квантової теорії магнетизму

Розглянемо основні ідеї сучасної квантової теорії магнетизму (див., наприклад, [9, 37, 38]). Це дозволить краще зрозуміти місце моделі Ізінга, зокрема, одновимірної моделі Ізінга, серед сучасних квантових уявлень в теорії магнетизму.

Квантова теорія магнетизму зародилася разом із квантовою механікою на початку ХХ сторіччя. Скоріш за все, між ними не можна провести чіткого кордону, оскільки відповідні дослідження проводилися паралельно, збагачуючи одне одне. На сьогодні точно відомо, що у магнітних явищах беруть участь два класи квантових елементарних частинок – бозони та фотони.

Як було вже показано у підрозділі 1.2, відгук матеріального середовища на потрапляння до нього магнітного поля описується тензором магнітної сприйнятливості середовища $\hat{\chi}(\vec{H})$, що визначається співвідношенням (1.10) та встановлює зв'язок між вектором намагніченості \vec{J} і вектором напруженості магнітного поля \vec{H} . Слід зазначити, що у випадку врахування інерційності реакції середовища на потрапляння до нього магнітного поля залежність між \vec{J} і \vec{H} стає ще більш складною, але в межах даної роботи така можливість не враховується.

Якщо координатну залежність прикладеного магнітного поля \vec{H} характеризувати вектором \vec{q} , частоту – частотою ω , також вважати, що вектор намагніченості \vec{J} середовища є функцією лише цих змінних, тобто $\vec{J} = \vec{J}(\vec{q}, \omega)$, то у випадку слабкого поля (коли не виникає нелінійних ефектів)

виходячи з (1.8), можна отримати магнітну сприйнятливість середовища $\hat{\chi}(\vec{q}, \omega)$.

Зважаючи на визначення (1.8), вектор намагніченості \vec{J} середовища залежить від середнього значення магнітних моментів мікроскопічних струмів. Усереднення проводиться по області простору достатньо великою, щоб статистично операція усереднення мала б сенс, але малою порівняно із просторовими неоднорідностями системи, що розглядається. Для виконання усереднення треба знати розподіл іонних струмів, який у загальному випадкові є невідомим. У цьому саме й полягає *основна складність* теорії магнетизму. У реальній системі рух заряду в певній області простору визначається зарядами та струмами всієї системи. У результаті дослідник стикається із *задачею багатьох тіл*, що досі є нерозв'язаною навіть у випадку трьох тіл. У теорії магнетизму існують два підходи для виходу з цього становища: метод локалізованих моментів і метод делокалізованих моментів. Вибір на користь одного з них робиться залежно від природи речовини і сам по собі є складною задачею.

Повернемося до середнього значення магнітних моментів мікроскопічних струмів. Воно залежить від функції розподілу системи за можливими станами, що у рамках квантової теорії магнетизму описується вже з позицій квантової механіки.

Встановлено, що дана функція розподілу залежить від повної енергії, яка визначається за допомогою гамільтоніана системи $\hat{\mathcal{H}}$. Зрозуміло, що сам гамільтоніан $\hat{\mathcal{H}}$ має задовольняти нестационарному рівнянню Шредінгера (1.19).

У деяких випадках (у рамках методу локалізованих моментів) функція розподілу струму є локалізованою всередині комірки кристалічної ґратки. При цьому іонний магнітний момент є відносно добре визначеною величиною, а тому взаємодія із зовнішніми зарядами та струмами може бути виражена саме через цей момент. Такій підхід приводить до поняття *спінового гамільтоніана*.

Для реального твердого тіла із ґраткою спінів вводиться так званий *гамільтоніан Гейзенберга*:

$$\hat{\mathcal{H}} = -\sum_{i \neq j} J_{ij} \vec{S}_i \vec{S}_j - \vec{H} \sum_i \vec{S}_i, \quad (1.25)$$

де J_{ij} – обмінний інтеграл, що описує взаємодію між i -ою та j -ою частинками, \vec{S}_i – спін (власний магнітний момент) i -ої частинки, \vec{H} – напруженість зовнішнього магнітного поля, в якому перебуває система, умова $i \neq j$ відображає той факт, що частинка не може взаємодіяти сама із собою. У гамільтоніані Гейзенберга (1.25) враховано взаємодію системи із зовнішнім полем, а відлік енергії відбувається від тієї її частини, яка не залежить від орієнтації спінів та не впливає на магнітне впорядкування системи. При $J_{ij} > 0$ гамільтоніан (1.25) описує феромагнітну модель Гейзенберга, а при $J_{ij} < 0$ – антиферомагнітну модель Гейзенберга. У моделі Гейзенберга (1.25) орієнтація спінів може бути *будь-якою*.

Для нас важливо, що модель Ізінга, про яку йдеться у Розділі 2 даної роботи, фактично є частковим випадком моделі Гейзенберга (1.25).

1.5. Спецкурс «Квантова теорія магнетизму»

На кафедрі теоретичної фізики імені академіка І. М. Ліфшиця фізичного факультету Харківського національного університету імені В. Н. Каразіна спецкурс «Квантова теорія магнетизму» в різні роки читався (та читається) для студентів, що проходять підготовку за спеціальністю 104 – фізика та астрономія, як окремо, так і у якості невід’ємної складової частини спецкурсів, зокрема, «Теорія низьковимірних систем» [39] (бакалаврський рівень підготовки) та «Низьковимірний магнетизм» [40] (магістерський рівень підготовки).

Спецкурс «Квантова теорія магнетизму» є вкрай важливим для підготовки студентів-фізиків за спеціалізацією «теоретична фізика», оскільки

допомагає поглибленню знань і вмій із загальних і спеціальних курсів, присвячених квантовій механіці та її теоретичним і прикладним аспектам і об'єднаних поняттям «теоретична фізика», а також власне сприяє вивченню квантової теорії магнетизму як невід'ємної складової такого важливого напрямку у сучасній фізиці, як фізика твердого тіла.

Оскільки у всіх вказаних спецкурсах згідно із відповідним навчальним планом [41 – 43] є як лекції, так і практичні (семінарські) заняття, то проводиться як вивчення теоретичного матеріалу, так і розв'язання задач. Тому виявляється доцільним розділити результати розгляду використання одновимірної моделі Ізінга у спецкурсі «Квантова теорія магнетизму» також на дві частини: фізичне тлумачення теоретичних результатів її застосування та розв'язання задач на практичних заняттях з її використанням.

1.6. Висновки до розділу 1

1. Продемонстровано, що у межах класичної теорії магнетизму властивості речовини, що потрапила до зовнішнього магнітного поля, характеризуються у загальному випадку тензором магнітної сприйнятливості середовища $\hat{\chi}(\vec{H})$. Для його визначення треба знати вектори намагніченості \vec{J} і вектором напруженості магнітного поля \vec{H} , які у загальному випадку є функціями координати \vec{r} та часу t , тобто $\vec{J} = \vec{J}(\vec{r}, t)$ і $\vec{H} = \vec{H}(\vec{r}, t)$. У випадку слабких полів, коли нелінійними ефектами можна знехтувати, магнітна сприйнятливість є також функцією координати \vec{r} та часу t , тобто $\hat{\chi} = \hat{\chi}(\vec{r}, t)$.

2. Показано, що у квантовій механіці основним методом описання фізичної системи є її гамільтоніан \hat{H} . Його власні значення описують дозволені для даної системи значення енергії E , а відповідні власні функції (хвильові функції $\Psi(\vec{r}, t)$) – відповідні просторові конфігурації часток системи та часову еволюцію цих конфігурацій. Більш того, наявні хвильові функції

$\Psi(\vec{r}, t)$ дозволяють отримати середнє значення будь-яких фізичних параметрів, пов'язаних із описанням даної квантово-механічної системи.

3. У рамках квантової теорії магнетизму продемонстровано, що магнетизм – за власною суттю є виключно квантовим явищем. Вектор намагніченості середовища \vec{J} , потрібний для визначення тензору магнітної сприйнятливості цього середовища $\hat{\chi}$, визначається як усереднення магнітних моментів мікроскопічних струмів з використанням власних функцій $\Psi(\vec{r}, t)$ гамільтоніана $\hat{\mathcal{H}}$ системи, що розглядається. Задаючи різні гамільтоніани $\hat{\mathcal{H}}$ досліджуваної системи, можна створювати ті чи інші її моделі, що відрізняються одна від одною ступенем складності та набором врахованих факторів.

4. Показано, що під час описання обмінної взаємодії у рамках спінових моделей використовується гамільтоніан Гейзенберга, що є основою феромагнітної та антиферомагнітної моделей Гейзенберга. Модель Ізінга є частковим випадком моделі Гейзенберга.

5. Продемонстровано, що використання моделі Ізінга як особливого випадку більш загальної моделі Гейзенберга є важливою складовою спецкурсу «Квантова теорія магнетизму», що багато років викладається на кафедрі теоретичної фізики імені академіка І. М. Ліфшиця фізичного факультету Харківського національного університету імені В. Н. Каразіна.

РОЗДІЛ 2: ОДНОВИМІРНА МОДЕЛЬ ІЗІНГА В СПЕЦКУРСІ «КВАНТОВА ТЕОРІЯ МАГНЕТИЗМУ»

2.1. Основні відомості про модель Ізінга

Модель Ізінга – це спрощена модель магнетика у вигляді системи магнітних диполів (спінів), які розташовуються у вузлах кристалічної ґратки (див., наприклад, [24, 25, 44, 45]).

Дану модель було запропоновано фізиком Вільгельмом Ленцем (Wilhelm Lenz, 1888 – 1957, Німеччина) у 1920 р. для описання [46]. У 1924 р. аспірант В. Ленца Ернст Ізінг (Ernst Ising, 1900 – 1998, Німеччина, США) дослідив її для одновимірного випадку (див., наприклад, [47]), а у 1944 р. Ларс Онсагер (Lars Onsager, 1903 – 1976, Норвегія, США) – для двовимірного випадку [48].

Хоча модель Ізінга спочатку була створена виключно для пояснення механізму ферромагнетизму, на сьогодні вона є однією з найвідоміших моделей статистичної фізики. Вона та її численні модифікації продовжують активно застосовуватися й у теперішній час як власне у фізиці (див., наприклад, [25]), так і в інших галузях науки, наприклад, у фізичній хімії [26], математиці [27], комп'ютерних науках [28], обробці зображень [29] або навіть в екофізиці [30] та соціофізиці [31]. І взагалі, модель Ізінга успішно застосовується тоді, коли потрібно описати поведінку взаємодіючих систем, складених із багатьох підсистем [32, 44].

Оскільки модель Ізінга є частковим випадком більш загальної моделі Гейзенберга (1.25), то гамільтоніан для неї, званий *гамільтоніаном Ізінга*, можна отримати з неї з наступних міркувань (див., наприклад, [24, 25, 44, 45, 50]).

Оскільки в реальному анізотропному кристалі обмінний інтеграл J_{ij} може бути різним для різних напрямків (J_{ij}^x , J_{ij}^y , J_{ij}^z є різними), то гамільтоніан Гейзенберга (1.25) можна переписати у вигляді:

$$\hat{\mathcal{H}} = -\sum_{i \neq j} \left(J_{ij}^x S_i^x S_j^x + J_{ij}^y S_i^y S_j^y + J_{ij}^z S_i^z S_j^z \right) - \vec{H} \sum_i \vec{S}_i, \quad (2.1)$$

де S_i^x , S_i^y , S_i^z – проекції вектору \vec{S}_i на осі декартової системи координат у просторі.

Гамільтоніан (2.1) можна спростити, якщо припустити, що максимальна взаємодія частинок відбувається у напрямку, який задається вектором напруженості зовнішнього магнітного поля \vec{H} , а рештою напрямків можна просто знехтувати. Тоді позначивши відповідні величини обмінних інтегралів і спінів відповідно через J_{ij} та S_i , можна записати:

$$\hat{\mathcal{H}} = -\sum_{i \neq j} J_{ij} S_i S_j - H \sum_i S_i. \quad (2.2)$$

Зручно переобзначити величини наступним чином: $S_i = \mu_i \sigma_i$, μ_i – магнетон i -ої частинки, $\sigma_i = \pm 1$, $h_i = \mu_i H$, $\tilde{J}_{ij} = J_{ij} \mu_i \mu_j$ – енергії обмінної взаємодії між i -ою та j -ою частинками. Далі в усіх формулах з \tilde{J}_{ij} символ « \sim » будемо опускати, маючи на увазі під J_{ij} саме енергію взаємодії. Тоді формула (2.2) набуває наступного вигляду:

$$\hat{\mathcal{H}} = -\sum_{i \neq j} J_{ij} \sigma_i \sigma_j - \sum_i h_i \sigma_i. \quad (2.3)$$

Саме формула (2.3) і визначає гамільтоніан Ізінга. Як і в моделі Гейзенберга, умова $J_{ij} > 0$ відповідає феромагнітному типу взаємодії, а умова $J_{ij} < 0$ – антиферомагнітному типові взаємодії. Важливо, що спін частинки у такій моделі може бути спрямований або «вверх» ($\sigma_i = 1$), тобто уздовж напрямку магнітного поля, або «вниз» ($\sigma_i = -1$), тобто проти напрямку магнітного поля.

Фізичний сенс співвідношення (2.3) полягає у тому, що енергія мікроскопічного стану системи є сумою енергії обмінної взаємодії між спінами, що перебувають у вузлах кристалічної ґратки, та енергії взаємодії

спінів із зовнішнім магнітним полем. Зрозуміло, що у випадку відсутності зовнішнього магнітного поля ($h_i = 0 \quad \forall i = \overline{1, N}$, де N – кількість вузлів кристалічної ґратки), енергетичні рівні такої системи виявляються двічі виродженими, оскільки енергія взаємодії не змінюється під час одночасної зміни знаку на протилежний всіх $\sigma_i \quad \forall i = \overline{1, N}$.

Існує низка різновидів моделі Ізінга (див., наприклад, [24, 25, 44, 45, 50]). Найбільш відомою є модель, в якій враховується взаємодія лише між найближчими сусідами, тобто $J_{ij} \neq 0$ лише у випадку, коли вузли i та j з'єднані ребром ґратки. Існує декілька варіантів такої моделі.

- 1) *Однорідний анізотропний* варіант. У ньому величини J_{ij} не змінюються при трансляції ребра (i, j) на довільний вектор ґратки та залежать лише від просторової орієнтації ребра (i, j) .
- 2) *Однорідний ізотропний* варіант. У ньому величини J_{ij} є однаковими на всіх ребрах ґратки, тобто $J_{ij} = J$.
- 3) *Феромагнітний* варіант. У ньому оскільки величини $J_{ij} > 0$, то в основному стані (стані з найменшої енергією) всі спіни є орієнтованими однаково.
- 4) *Антиферомагнітний* варіант. У ньому величини $J_{ij} < 0$, а також вважається, що ґратку можна розділити на дві підґратки. В основному стані всі спіни однієї підґратки орієнтовані однаково та протилежно спінам іншої підґратки.
- 5) *Фрустрований* варіант. На відміну від антиферомагнітного варіанту розділити ґратку на дві підґратки принципово неможливо. Таке буває, наприклад, на плоскій трикутній ґратці. Основний стан такої системи є сильно виродженим.

Зауважимо, що основний стан моделі Ізінга співпадає із основним станом моделі Гейзенберга за нульової температури, коли спіни «заморожені» та орієнтовані або уздовж поля, або проти нього.

Добре відомо, що модель Ізінга спочатку була створена для описання магнітних фазових переходів (див., наприклад, [24, 25, 44, 45, 50]). Фазові переходи у моделі Ізінга пов'язані зі спонтанним порушенням симетрії. У феромагнітному варіанті моделі Ізінга параметром порядку є середня намагніченість, у антиферомагнітному варіанті – різниця намагніченостей підграток.

У одновимірній моделі Ізінга всі термодинамічні величини системи є аналітичними функціями температури T та напруженості зовнішнього магнітного поля H . Фазовий перехід у такій моделі *відсутній*. Це буде показано нижче.

Зауважимо, що у двовимірній і тривимірній моделях Ізінга фазові переходи є можливими, але це описання цього виходить за рамки даної роботи.

2.2. Термодинамічні характеристики квантово-механічної системи

Розглянемо, які саме термодинамічні характеристики прийнято використовувати для описання властивостей квантово-механічної системи (див., наприклад, [9, 37, 38, 50]).

Як відомо зі статистичної механіки (див., наприклад, [9, 37, 38, 50]), однією з важливих характеристик системи є так звана *статистична сума*.

Статистична сума описує статистичні властивості системи, що перебуває у стані термодинамічної рівноваги. У випадку дискретної квантової системи канонічна статистична сума задається у вигляді:

$$Z_N = \text{Tr} \left[\exp \left(-\beta \hat{\mathcal{H}} \right) \right], \quad \beta = \frac{1}{k_B T}, \quad (2.4)$$

де T – термодинамічна температура системи, β – так звана *термодинамічна бета*, k_B – стала Больцмана. Видно, що часткова функція Z_N є безрозмірною.

Нагадаємо, що *слідом матриці* називають суму елементів головної діагоналі матриці. Слід матриці \hat{A} прийнято позначати як $\text{Tr } \hat{A}$ (від англійського «Trace») або $\text{Sp } \hat{A}$ (від німецького «Spur»).

На базі статистичної суми можна обчислити наступні термодинамічні характеристики (див., наприклад, [9, 37, 38, 50]).

1) *Вільна енергія* (або *енергія Гельмгольца*). Вона є термодинамічним потенціалом, що визначає рівноважні термодинамічні характеристики системи в залежності від об'єму та температури. Відомо, що рівноважний стан системи багатьох частинок за відомого об'єму та сталої температури визначається мінімумом вільної енергії.

Вільна енергія $f(T)$, що припадає на один елемент системи, пов'язана із статистичною сумою Z_N співвідношенням:

$$f(T) = -\frac{1}{N} T \ln Z_N. \quad (2.5)$$

2) *Намагніченість*. На відміну від класичної теорії магнетизму, де вектор намагніченості позначався через \vec{J} , тут прийнято використовувати інше позначення. Намагніченість пов'язана із вільною енергією Гельмгольца співвідношенням:

$$m = -\frac{\partial f}{\partial H}. \quad (2.6)$$

3) *Магнітна сприйнятливості*. Вона пов'язана із намагніченістю співвідношенням:

$$\chi = \frac{\partial m}{\partial H}. \quad (2.7)$$

4) *Внутрішня енергія*, що припадає на один елемент системи. Її можна визначити з використанням наступного співвідношення:

$$E = f - T \frac{\partial S}{\partial T} = -T^2 \frac{\partial}{\partial T} \left(\frac{f}{T} \right). \quad (2.8)$$

5) *Теплоємність*. Її обчислюють з використанням співвідношення:

$$C = \frac{\partial E}{\partial T}. \quad (2.9)$$

Таким чином, із співвідношень (2.5) – (2.9) видно, що вказаний набір термодинамічних параметрів легко обчислюється, коли відома статистична сума Z_N . Вона, у свою чергу, пов'язана із гамільтоніаном системи $\hat{\mathcal{H}}$.

Варто відзначити, що з методичної точки зору дуже важливим є розуміння студентами того, яким чином із достатньо формальної характеристики квантово-механічної системи, якою є гамільтоніан $\hat{\mathcal{H}}$, можна отримати набір термодинамічних характеристик, що мають чіткий фізичний сенс.

2.3. Гамільтоніан та статистична сума в одновимірній моделі Ізінга

2.3.1. Зв'язок гамільтоніана Ізінга з матрицями Паулі

Для описання спіну електрона в квантовій механіці В. Паулі в 1927 р. запропонував так звані *матриці Паулі* (див., наприклад, [9, 37, 38, 50]).

Матриці Паулі – це набір із трьох ермітових матриць розмірності 2×2 , який утворює базис у просторі ермітових 2×2 матриць із нульовим слідом:

$$\hat{\sigma}^x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}^y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}^z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (2.10)$$

$$\hat{\vec{\sigma}} = (\hat{\sigma}^x, \hat{\sigma}^y, \hat{\sigma}^z). \quad (2.11)$$

Важливо, власними числами всіх трьох матриць Паулі ($\hat{\sigma}^\alpha$, $\alpha = x, y, z$) є величини $\sigma = \pm 1$.

Зауважимо, що матриці Паулі разом з одиничною матрицею

$$\hat{1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

утворюють базис у просторі всіх ермітових 2×2 матриць, а не лише із нульовим слідом.

Із використанням матриць Паулі (2.10) гамільтоніан Ізінга (2.3) можна переписати у вигляді:

$$\hat{\mathcal{H}} = -\sum_{i \neq j} J_{ij} \hat{\sigma}_i^z \hat{\sigma}_j^z - \sum_i h_i \hat{\sigma}_i^z, \quad (2.12)$$

де напрямок вектору напруженості зовнішнього магнітного поля \vec{H} співпадає із додатним напрямком осі Oz .

Зважаючи на те, що матриці Паулі є дуже відомим інструментом у квантовій теорії взагалі, вміння переписати гамільтоніан Ізінга у формі (2.12) є важливим при підготовці студента-фізика.

2.3.2. Зв'язок гамільтоніана Ізінга з оператором напівцілого спіну

Іншою корисну форму запису гамільтоніана Ізінга (2.3) можна отримати з використанням оператора напівцілого спіну (див., наприклад, [9, 38, 50]).

Оператор напівцілого спіну \hat{S} задається з використанням матриць Паулі у векторному вигляді (2.5):

$$\hat{S} = \frac{1}{2} \hat{\vec{\sigma}} = \frac{1}{2} (\hat{\sigma}^x, \hat{\sigma}^y, \hat{\sigma}^z). \quad (2.13)$$

Тоді із використанням (2.13) гамільтоніан Ізінга (2.3) можна переписати у наступному вигляді:

$$\hat{\mathcal{H}} = -4 \sum_{i \neq j} J_{ij} \hat{S}_i^z \hat{S}_j^z - 2 \sum_i h_i \hat{S}_i^z. \quad (2.14)$$

Оскільки елементарні часинки із напівцілими спінами відіграють визначну роль у квантовій теорії взагалі, розуміння як саме можна переписати гамільтоніан Ізінга з використанням оператора напівцілого спіна є важливим при формуванні фахівця-фізика.

2.3.3. Однорідний «замкнений» ланцюг Ізінга з взаємодіями найближчих сусідів без зовнішнього магнітного поля

Розглянемо одновимірну модель Ізінга для однорідного «замкненого» ланцюга Ізінга з урахуванням взаємодії лише між найближчими сусідами у відсутності зовнішнього магнітного поля (див., наприклад, [9, 37, 38, 50]).

Оскільки використовується однорідний ізотропний варіант моделі Ізінга, всі величини J_{ij} є однаковими, тобто $J_{ij} = J \quad \forall i, j = \overline{1, N}, i \neq j$, де N – кількість елементів у ланцюгу, а подвійна сума в (2.3) перетворюється на одинарну із зміненою верхньою межею. Далі, ланцюг є «замкненим» у кільце, отже перший елемент має своїм «сусідом» елемент з номером N , тому доданок, що описує в (2.3) їх взаємодію, слід відокремити. Відсутність зовнішнього магнітного поля означає, що $h_i = 0 \quad \forall i = \overline{1, N}$. Наявна тут періодичність граничних умов означає, що $\sigma_{N+1} = \sigma_1$. Отже, гамільтоніан Ізінга (2.3) набуває наступного вигляду:

$$\hat{\mathcal{H}} = -J \left(\sum_{i=1}^{N-1} \sigma_i \sigma_{i+1} + \sigma_N \sigma_1 \right). \quad (2.15)$$

Зважаючи на те, що $\sigma_i \sigma_{i+1} = \pm 1$, зручно ввести позначення $\tau_i = \sigma_i \sigma_{i+1} = \pm 1$, з використанням якого співвідношення (2.15) можна переписати у вигляді:

$$\hat{\mathcal{H}} = -J \left(\sum_{i=1}^{N-1} \sigma_i \sigma_{i+1} + \sigma_N \sigma_1 \right) = -J \sum_{i=1}^N \tau_i. \quad (2.16)$$

Натомість тепер прийшов час отримати фізичні характеристики, що описують стан досліджуваної квантової системи та які обчислюються на основі гамільтоніана.

Використовуючи визначення сліду матриці та гамільтоніан Ізінга (2.16), можна отримати, що статистична сума Z_N системи, що розглядається у даному пункті, має вигляд:

$$\begin{aligned} Z_N &= \sum_{\tau_1=\pm 1} \sum_{\tau_2=\pm 1} \dots \sum_{\tau_N=\pm 1} \exp(\beta J \tau_n) = \\ &= \prod_{n=1}^N (e^{\beta J} + e^{-\beta J}) = \prod_{n=1}^N 2 \operatorname{ch}(\beta J) = [2 \operatorname{ch}(\beta J)]^N. \end{aligned} \quad (2.17)$$

Зі співвідношення (2.17) видно, що $Z_N = Z_N(\beta J) = Z_N(J / k_B T)$.

Корисно розглянути деякі граничні випадки.

При $\beta J \ll 1$ $\text{ch}(\beta J) \approx 1 + (\beta J)^2 / 2$, $Z_N(0) = 2^N$, а тому $Z_N(\beta J) \approx Z_N(0) \left(1 + (\beta J)^2 / 2\right)$, тобто спостерігається дуже повільне зростання $Z_N = Z_N(\beta J)$. Зрозуміло, що це відбувається, коли $J \ll k_B T$, тобто якщо енергія теплового руху значно переважає енергію взаємодії елементів у ланцюгу.

Натомість в протилежному випадку маємо $\beta J \gg 1$, $J \gg k_B T$, $\text{ch}(\beta J) \approx e^{\beta J} / 2$, $Z_N(\beta J) \approx Z_N(0) e^{\beta J} / 2$. Отже, якщо енергія взаємодії елементів у ланцюгу значно переважає енергію теплового руху, спостерігається швидке експоненціальне зростання $Z_N = Z_N(\beta J)$.

2.2.4. Однорідний «розімкнений» ланцюжок Ізінга з взаємодіями найближчих сусідів без зовнішнього магнітного поля

Відмінність від моделі, розглянутої у пункті 2.3.3, полягає у тому, що ланцюг є розімкненим (див., наприклад, [9, 37, 38, 50]). Це означає, що у першого та N -го елементів немає другого сусіда, а тому виконуються «відкриті» граничні умови, тобто $\sigma_{N+1} = \sigma_0 = 0$. Отже, гамільтоніан Ізінга (2.15) у даному випадку дещо спрощується, оскільки відсутня взаємодія першого та N -го елементів:

$$\hat{\mathcal{H}} = -J \sum_{i=1}^{N-1} \sigma_i \sigma_{i+1}. \quad (2.18)$$

Відповідна статистична сума Z_N системи, що розглядається у даному пункті, має вигляд:

$$\begin{aligned} Z_N &= \sum_{\tau_1=\pm 1} \sum_{\tau_2=\pm 1} \dots \sum_{\tau_{N-1}=\pm 1} \exp(\beta J \tau_n) = \\ &= \sum_{\tau_1=\pm 1} \sum_{\tau_2=\pm 1} \dots \sum_{\tau_{N-2}=\pm 1} \exp(\beta J \tau_n) \cdot \sum_{\sigma_N=\pm 1} \exp(\beta J \sigma_{N-1} \sigma_N) = \\ &= Z_{N-1} \left(e^{\beta J} + e^{-\beta J} \right) = 2 \text{ch}(\beta J) Z_{N-1}. \end{aligned} \quad (2.19)$$

Отже, для статистичної суми виникло рекурсивне співвідношення. Із виразу (2.17) випливає, що:

$$\begin{aligned} Z_N &= 2 \operatorname{ch}(\beta J) Z_{N-1} = [2 \operatorname{ch}(\beta J)]^2 Z_{N-2} = [2 \operatorname{ch}(\beta J)]^3 Z_{N-3} = \dots \\ &= [2 \operatorname{ch}(\beta J)]^{N-2} \cdot Z_2 = [2 \operatorname{ch}(\beta J)]^{N-2} \cdot 4 \operatorname{ch}(\beta J) = 2^N [\operatorname{ch}(\beta J)]^{N-1}. \end{aligned}$$

Таким чином:

$$Z_N = 2^N [\operatorname{ch}(\beta J)]^{N-1}. \quad (2.20)$$

Отриманий вираз (2.18) цікаво порівняти із виразом (2.17). Позначимо статистичну суму з виразу (2.17) як $Z_{N \text{ close}}$, а з (2.18) – як $Z_{N \text{ open}}$. Видно, що

$$K = \frac{Z_{N \text{ close}}}{Z_{N \text{ open}}} = \frac{2^N [\operatorname{ch}(\beta J)]^N}{2^N [\operatorname{ch}(\beta J)]^{N-1}} = \operatorname{ch}(\beta J) \quad (2.21)$$

З аналізу виразу (2.21) випливають цікаві висновки. Якщо $\beta J \ll 1$, що відповідає випадкові, коли енергія теплового руху значно переважає енергію взаємодії елементів у ланцюгу, $\operatorname{ch}(\beta J) \approx 1$, а тому $K \approx 1$. Це означає, що за високих температур (порівняно з енергією взаємодії елементів ланцюга) немає різниці, чи є ланцюг замкненим, чи ні. Натомість при $\beta J \gg 1$ маємо $K \gg 1$, тобто різниця стає дуже великою й істотною. До того ж важливо, що $Z_{N \text{ close}} / Z_{N \text{ open}} \geq 1$, тобто статистична сума для розімкненого ланцюга у жодному разі (зрозуміло, що за фізичним сенсом $\beta J \geq 0$) не може перевищити статистична сума такого самого замкненого ланцюга.

Останній результат має важливий методичний сенс, оскільки на досить простому прикладі демонструє, що у квантово-механічній системі одна невеличка зміна у її конфігурації за одних умов може виявитися істотною, а за інших – ні.

Також з використанням даної моделі однорідного розімкненого ланцюжка Ізінга можна оцінити вільну енергію $f(T)$, що припадає на один

елемент ланцюга у термодинамічній границі, тобто коли ланцюг стає нескінченним ($N \rightarrow \infty$) (див., наприклад, [9, 37, 38, 50]).

Підставивши до (2.6) співвідношення (2.20), отримуємо:

$$\begin{aligned}
 f(T) &= -T \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{\ln \left(2^N [\operatorname{ch}(\beta J)]^{N-1} \right)}{N} = \\
 &= -T \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{N \ln 2 + (N-1) \ln (\operatorname{ch}(\beta J))}{N} = \\
 &= -T \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{N (\ln 2 + \ln [\operatorname{ch}(\beta J)]) - \ln [\operatorname{ch}(\beta J)]}{N} = -T \ln [2 \operatorname{ch}(\beta J)], \\
 f(T) &= -T \ln [2 \operatorname{ch}(\beta J)]. \tag{2.22}
 \end{aligned}$$

Останній результат є важливим, оскільки його фізичний сенс полягає у тому, що оскільки для всіх $T > 0$ функція $f(T)$ є аналітичною, то в моделі однорідного «відкритого» нескінченного ланцюга Ізінга з взаємодіями найближчих сусідів без зовнішнього магнітного поля *фазові переходи відсутні*.

Варто зауважити, що для вільної енергії $f(T)$ в моделі однорідного «замкненого» нескінченного ланцюга Ізінга з взаємодіями найближчих сусідів без зовнішнього магнітного поля отримуємо той самий результат (2.16). Це не є дивним, оскільки нескінченний ланцюг залишається нескінченним незалежно від його замкненості аналогічно тому, що коло нескінченного радіусу у граничному випадку є прямою.

2.2.5. «Замкнений» скінченний ланцюжок Ізінга з випадковими взаємодіями в поздовжньому зовнішньому магнітному полі

У задачах, які розглядалися у пунктах 2.3.3 і 2.3.4, зовнішнє магнітне поле було відсутнім. Цікаво зрозуміти, а що зміниться у випадку, коли воно з'явиться (див., наприклад, [9, 37, 38, 50]).

Розглянемо більш складну модифікацію задачі, викладеної у пункті 2.3.3. Нехай взаємодії між елементами із детермінованих стануть випадковими, а сама система перебуватиме у поздовжньому зовнішньому магнітному полі.

Таблиця 2.1. Матричні елементи V_n	
$\sigma_n = +1; \sigma_{n+1} = +1$	$\sigma_n = +1; \sigma_{n+1} = -1$
$V_{11} = \exp\left[\frac{1}{2}\beta(h_n + h_{n+1}) + \beta J_n\right]$	$V_{12} = \exp\left[\frac{1}{2}\beta(h_n - h_{n+1}) - \beta J_n\right]$
$V_{21} = \exp\left[-\frac{1}{2}\beta(h_n - h_{n+1}) - \beta J_n\right]$	$V_{22} = \exp\left[-\frac{1}{2}\beta(h_n + h_{n+1}) + \beta J_n\right]$
$\sigma_n = -1; \sigma_{n+1} = +1$	$\sigma_n = -1; \sigma_{n+1} = -1$

У такому випадку гамільтоніан системи (2.3) набуває вигляду:

$$\hat{\mathcal{H}} = -\sum_{n=1}^N J_n \sigma_n \sigma_{n+1} - \sum_{n=1}^N h_n \sigma_n. \quad (2.23)$$

Для дано випадку статистичну суму доведеться обчислювати більш складним чином – *методом трансфер-матриці*.

Щоб ввести множники Больцмана, вираз для гамільтоніана (2.23) треба записати у вигляді:

$$\hat{\mathcal{H}} = -\sum_{n=1}^N \left[\frac{1}{2} (h_n \sigma_n + h_{n+1} \sigma_{n+1}) + J_n \sigma_n \sigma_{n+1} \right],$$

звідки

$$V_n = \exp\left[\frac{1}{2} \beta (h_n \sigma_n + h_{n+1} \sigma_{n+1}) + \beta J_n \sigma_n \sigma_{n+1} \right],$$

Тоді множники Больцмана можна розглядати як 2×2 матриці V_n :

$$V_n \rightarrow V(\sigma_n; \sigma_{n+1}).$$

Матричні елементи V_n містяться у табл. 2.1. У ній σ_n пов'язані із номером рядку, а σ_{n+1} – із номером стовбця 2×2 матриці.

Статистична сума Z_N та матричні елементи V_n має вигляд:

$$Z_N = \text{Tr} \{ \hat{V}_1 \cdot \hat{V}_2 \dots \hat{V}_n \cdot \hat{V}_{n+1} \dots \hat{V}_N \} = \text{Tr} \{ \hat{U}(\sigma_1; \sigma_N) \}, \quad (2.24)$$

$$V(\sigma_n; \sigma_{n+1}) = \begin{pmatrix} \exp \left[\beta \left(J_n + \frac{h_n + h_{n+1}}{2} \right) \right] & \exp \left[\beta \left(-J_n + \frac{h_n - h_{n+1}}{2} \right) \right] \\ \exp \left[\beta \left(-J_n + \frac{-h_n + h_{n+1}}{2} \right) \right] & \exp \left[\beta \left(J_n - \frac{h_n + h_{n+1}}{2} \right) \right] \end{pmatrix} \quad (2.25)$$

Трансфер-матриця $\hat{U}(\sigma_1; \sigma_N)$ є матрицею 2×2 . Щоб обчислити її слід, який потрібен для оцінювання статистичної суми з використанням співвідношення (2.24), необхідно отримати власні величини $\hat{U}(\sigma_1; \sigma_N)$. Відомо, що діагональні елементи діагональної матриці й є власними числами матриці.

Вирази (2.24) і (2.25) є досить складними, то для отримання аналітичних виразів для статистичної суми Z_N треба спростувати саму задачу.

2.2.6. Однорідний «замкнений» скінченний ланцюжок Ізінга із взаємодіями між сусідніми елементами в поздовжньому зовнішньому магнітному полі

Дещо спростимо задачу (див., наприклад, [9, 37, 38, 50]), розібрану у пункті 2.3.5, вважаючи наявний «замкнений» ланцюг однорідним. У такому випадку для нього маємо $h_n = h$, $J_n = J$, $n = \overline{1, N}$.

Очевидно, що тоді $\hat{V}_1 = \hat{V}_2 = \dots = \hat{V}_N = \hat{V}$; $\hat{V}_{N+1} = \hat{V}_1$, а тому співвідношення (2.24) істотно спрощується:

$$Z_N = \text{Tr} \{ \hat{U}(\sigma_1; \sigma_N) \} = \text{Tr} \{ \hat{V}_1 \cdot \hat{V}_2 \dots \hat{V}_n \cdot \hat{V}_{n+1} \dots \hat{V}_N \} = \text{Tr} \{ \hat{V}^N \} = \lambda_+^N + \lambda_-^N, \quad (2.26)$$

де λ_+^N і λ_-^N – власні числа матриці \hat{V} . Знайти їх можна зі *спектрального рівняння* для матриці \hat{V} : $\hat{V}f = \lambda f = \hat{1}(\lambda f)$, звідки $(\hat{V} - \hat{1}\lambda)f = 0$. Останнє матричне рівняння має ненульові розв'язки лише у випадку, коли визначник матриці $\hat{V} - \hat{1}\lambda$ дорівнює нулю:

$$\text{Det} \begin{pmatrix} \exp[\beta J + \beta h] - \lambda & \exp[-\beta J] \\ \exp[-\beta J] & \exp[\beta J - \beta h] - \lambda \end{pmatrix} = 0,$$

звідки

$$\lambda^2 - 2(e^{\beta J} \text{ch } \beta h)\lambda + 2 \text{sh}(2\beta J) = 0. \quad (2.27)$$

Корені рівняння (2.27) мають вигляд:

$$\lambda_{\pm} = e^{\beta J} \left[\text{ch } \beta h \pm \sqrt{e^{-4\beta J} + \text{sh}^2 \beta h} \right].$$

2.2.7. Однорідний «замкнений» нескінченний ланцюжок Ізінга із взаємодіями між сусідніми елементами в поздовжньому зовнішньому магнітному полі

Тепер якщо покласти $N \rightarrow \infty$ (кількість елементів у «замкненому» ланцюжку стає нескінченною), то статистична сума (2.20) набуває наступного вигляду (див., наприклад, [9, 37, 38, 50]):

$$Z_N = \lim_{N \rightarrow \infty} (\lambda_+^N + \lambda_-^N) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\lambda_+^N \left[1 + \left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+} \right)^N \right] \right) = \lim_{N \rightarrow \infty} \lambda_+^N. \quad (2.28)$$

оскільки $\lambda_- / \lambda_+ < 1$.

Важливим результатом тут є те, що у даному випадку, як випливає з (2.28), при $N \rightarrow \infty$ статистична сума Z_N визначається лише найбільшим із власних чисел матриці \hat{V} , а саме:

$$\lambda_+ = e^{\beta J} \left[\text{ch } \beta h + \sqrt{e^{-4\beta J} + \text{sh}^2 \beta h} \right].$$

2.2.8. Однорідний «розімкнений» скінченний ланцюжок Ізінга із взаємодіями між сусідніми елементами в поздовжньому зовнішньому магнітному полі

У випадку відсутності зовнішнього магнітного поля дана модель зводиться до моделі, розглянутої у пункті 2.3.3 (див., наприклад, [9, 37, 38, 50])

Гамільтоніан даної системи у випадку наявності магнітного поля задається співвідношенням ($h = \mu H$):

$$\hat{\mathcal{H}} = -J \sum_{i=1}^{N-1} \sigma_i \sigma_{i+1} - \mu H \sum_{i=1}^{N-1} \sigma_i. \quad (2.29)$$

За відсутності зовнішнього магнітного поля ($H = 0$) гамільтоніан (2.23) зводиться до вигляду (2.24).

Статистична сума має вигляд:

$$Z_N = \sum_{\{\sigma_1, \dots, \sigma_{N-1} = \pm 1\}} \exp[-\beta \hat{\mathcal{H}}(\sigma_1, \dots, \sigma_N)].$$

Введемо допоміжну функцію:

$$\zeta_N = \sum_{\{\sigma_1, \dots, \sigma_{N-1} = \pm 1\}} \sigma_N \exp[-\beta \hat{\mathcal{H}}(\sigma_1, \dots, \sigma_N)].$$

та відшукаємо рекурентні співвідношення для Z_N , ζ_N та Z_{N-1} , ζ_{N-1} .

$$Z_N = \sum_{\{\sigma_1, \dots, \sigma_{N-1} = \pm 1\}} \exp[-\beta \hat{\mathcal{H}}(\sigma_1, \dots, \sigma_{N-1})] \sum_{\sigma_N = \pm 1} \exp(\alpha \sigma_{N-1} + \gamma) \sigma_N =$$

$$\sum_{\{\sigma_1, \dots, \sigma_{N-1} = \pm 1\}} \exp[-\beta \hat{\mathcal{H}}(\sigma_1, \dots, \sigma_{N-1})] 2 \operatorname{ch}(\alpha \sigma_{N-1} + \gamma);$$

$$\operatorname{ch}(\alpha \sigma_{N-1} + \gamma) = (\operatorname{ch} \alpha \operatorname{ch} \gamma) + (\operatorname{sh} \alpha \operatorname{sh} \gamma) \cdot \sigma_{N-1};$$

$$Z_N = 2(\operatorname{ch} \alpha \operatorname{ch} \gamma) \cdot Z_{N-1} + 2(\operatorname{sh} \alpha \operatorname{sh} \gamma) \cdot \zeta_{N-1};$$

$$\zeta_N = \sum_{\{\sigma_1, \dots, \sigma_{N-1} = \pm 1\}} \exp[-\beta \hat{\mathcal{H}}(\sigma_1, \dots, \sigma_{N-1})] \sum_{\sigma_N = \pm 1} \sigma_N \exp(\alpha \sigma_{N-1} + \gamma) \sigma_N =$$

$$\sum_{\{\sigma_1, \dots, \sigma_{N-1} = \pm 1\}} \exp[-\beta \hat{\mathcal{H}}(\sigma_1, \dots, \sigma_{N-1})] \sum_{\sigma_N = \pm 1} 2 \operatorname{sh}(\alpha \sigma_{N-1} + \gamma);$$

$$\operatorname{sh}(\alpha \sigma_{N-1} + \gamma) = (\operatorname{sh} \alpha \operatorname{ch} \gamma) \cdot \sigma_{N-1} + (\operatorname{ch} \alpha \operatorname{sh} \gamma);$$

$$\zeta_N = 2(\operatorname{sh} \alpha \operatorname{ch} \gamma) \cdot \zeta_{N-1} + 2(\operatorname{ch} \alpha \operatorname{sh} \gamma) \cdot Z_{N-1}.$$

$$\alpha = \beta J; \quad \gamma = \beta \mu H.$$

У результаті отримуємо систему з двох фінітних різностних рівнянь:

$$\begin{cases} Z_N = 2(\cosh \alpha \cosh \gamma) \cdot Z_{N-1} + 2(\sinh \alpha \sinh \gamma) \cdot \zeta_{N-1}; \\ \zeta_N = 2(\sinh \alpha \cosh \gamma) \cdot \zeta_{N-1} + 2(\cosh \alpha \sinh \gamma) \cdot Z_{N-1} \end{cases} \quad (2.30)$$

із граничними умовами

$$Z_1 = 2 \operatorname{ch} \gamma; \quad \zeta_1 = 2 \operatorname{sh} \gamma. \quad (2.31)$$

Частинний розв'язок системи рівнянь (2.30) можна отримати у формі:

$$Z_N = Ax^N; \quad \zeta_N = Bx^N.$$

Загальний розв'язок системи рівнянь (2.30) є таким:

$$\begin{cases} Z_N = A_1 x_1^N + A_2 x_2^N; \\ \zeta_N = \left(\frac{2 \cosh \alpha \cosh \gamma - x_2}{x_1 - x_2} \right) A_1 x_1^N + \left(\frac{x_1 - 2 \cosh \alpha \cosh \gamma}{x_1 - x_2} \right) A_2 x_2^N. \end{cases}$$

Константи A_1, A_2 визначаються з граничних умов (2.31)

Отже, статистична сума Z_N для однорідного «розімкненого» скінченного ланцюга Ізінга із взаємодіями між сусідніми елементами в поздовжньому зовнішньому магнітному полі має вигляд:

$$Z_N = \left(\operatorname{ch} \gamma + \frac{\operatorname{sh}^2 \gamma + e^{-2\alpha}}{(\operatorname{sh}^2 \gamma + e^{-4\alpha})^{1/2}} \right) x_1^{N-1} + \left(\operatorname{ch} \gamma - \frac{\operatorname{sh}^2 \gamma + e^{-2\alpha}}{(\operatorname{sh}^2 \gamma + e^{-4\alpha})^{1/2}} \right) x_2^{N-1}; \quad (2.32)$$

де

$$x_{1,2} = e^\alpha \left(\cosh \gamma \pm \sqrt{\sinh^2 \gamma + e^{-4\alpha}} \right) \equiv \lambda_{\pm}.$$

Методична важливість отриманих результатів полягає у тому, що студенти мають зрозуміти, що отримати аналітичні вирази для статистичної суми вдається лише у дуже простих випадках, яких вкрай мало. Тому вони й так ціняться. Особливу їх цінність студенти зрозуміють у підрозділі 2.4, де на основі отриманих аналітичних виразів для статистичної функції вдається отримати певну «аналітику» й для термодинамічних характеристик, наявність яких переконливо ілюструє «фізичність» задач, що розглядаються.

2.4. Оцінка термодинамічних характеристик для одновимірної моделі Ізінга

2.4.1. Намагніченість і магнітна сприйнятливність для однорідного «замкненого» нескінченного ланцюжка Ізінга із взаємодіями між сусідніми елементами в поздовжньому зовнішньому магнітному полі

Підставимо вираз (2.28) для статистичної суми однорідного «замкненого» скінченного ланцюга Ізінга із взаємодіями між сусідніми елементами в поздовжньому зовнішньому магнітному полі, отриманий у пункті 2.2.7, до співвідношень (2.5) і (2.6) за умови $N \rightarrow \infty$ (див., наприклад, [9, 37, 38, 50]). Тоді для вільної енергії Гельмгольца $f(T)$ на намагніченості m отримаємо відповідно:

$$f = -T \ln \lambda_+ = -J - T \ln \left[\operatorname{ch} \frac{h}{T} + \sqrt{\operatorname{sh}^2 \frac{h}{T} + e^{-\frac{4J}{T}}} \right]; \quad (2.33)$$

$$h = \mu H;$$

$$m = -\frac{\partial f}{\partial H} = \mu \frac{\operatorname{sh} \frac{\mu H}{T}}{\sqrt{\operatorname{sh}^2 \frac{\mu H}{T} + e^{-\frac{4J}{T}}}}. \quad (2.34)$$

Якщо зовнішнього магнітного поля немає ($H = 0$) та із співвідношення (2.34) постає, що $m = 0$. Фізично це означає, що для однорідного «замкненого» нескінченного ланцюга Ізінга із взаємодіями між сусідніми елементами в поздовжньому зовнішньому магнітному полі спонтанна намагніченість відсутня.

Крім того, вираз (2.34) містить ще одну важливу особливість, що стосується залежності від температури T .

За дуже високих температур ($T \rightarrow \infty$) маємо:

$$\lim_{T \rightarrow \infty} \frac{m}{\mu} = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{\operatorname{sh} \frac{\mu H}{T}}{\sqrt{\operatorname{sh}^2 \frac{\mu H}{T} + e^{-\frac{4J}{T}}}} = 0.$$

Фізично це означає, що тепловий рух повністю хаотизує магнітні моменти елементів системи, в результаті чого намагніченість зникає. Це добре відповідає відомим результатам експериментів.

Розглянемо інший граничний випадок. Нехай тепер $T \rightarrow +0$. Оскільки $\mu H \geq 0$, то результат залежить від знаку J . До речі, у попередніх розрахунках ми ніде спеціально не висували жодних вимог щодо цього.

Отже, при $J > 0$ (ферромагнітна взаємодія) маємо

$$\frac{m}{\mu} = \lim_{T \rightarrow +0} \frac{\operatorname{sh} \frac{\mu H}{T}}{\sqrt{\operatorname{sh}^2 \frac{\mu H}{T} + e^{-\frac{4J}{T}}}} = 1.$$

Отже, при $J < 0$ (антиферромагнітна взаємодія) маємо $J = -|J|$ і

$$\begin{aligned} \frac{m}{\mu} &= \lim_{T \rightarrow +0} \frac{\operatorname{sh} \frac{\mu H}{T}}{\sqrt{\operatorname{sh}^2 \frac{\mu H}{T} + e^{\frac{4|J|}{T}}}} = \lim_{T \rightarrow +0} \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{e^{\frac{4|J|}{T}}}{\operatorname{sh}^2 \frac{\mu H}{T}}}} = \\ &= \lim_{T \rightarrow +0} \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{e^{\frac{4|J|}{T}}}{\frac{1}{4} \left(e^{\frac{\mu H}{T}} - e^{-\frac{\mu H}{T}} \right)^2}}} = \lim_{T \rightarrow +0} \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{4e^{\frac{4|J|}{T}}}{e^{\frac{2\mu H}{T}}}}} = \\ &= \lim_{T \rightarrow +0} \frac{1}{\sqrt{1 + 4e^{-\frac{2(\mu H - 2|J|)}{T}}}}. \end{aligned}$$

Результат обчислення даної границі залежить від знаку величини $(\mu H - 2|J|)$, тобто:

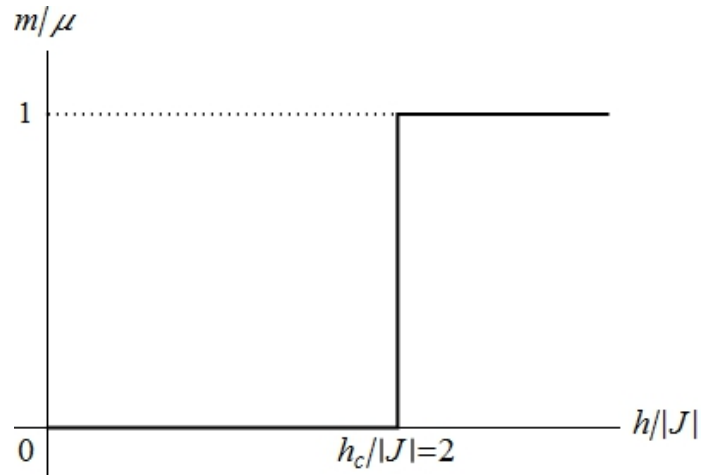


Рисунок 2.1 – Графік залежності $m / \mu = F(h / |J|)$.

$$\frac{m}{\mu} = \eta\left(\frac{h}{|J|} - 2\right) = \begin{cases} 0, & h/|J| < 2; \\ 1, & h/|J| > 2; \end{cases} \quad (2.35)$$

де $\eta(x)$ – функція Хевісайда.

Видно, що при $h > 2 |J|$ результат співпадає з аналогічним, отриманим для феромагнітної взаємодії. Квантовий фазовий перехід (тобто миттєвий скінченний стрибок функції у точці) в залежності (2.35) відбувається за умови $h = h_c = 2 |J|$ (рис. 2.1). Відповідну величину $H \equiv H_c = 2 |J| / \mu$ називають *критичним магнітним полем*.

Використовуючи співвідношення (2.7) за відомою залежністю $m(H)$ виду (2.35) можна отримати величину магнітної сприйнятливості χ для даної системи:

$$\chi = \frac{\partial m}{\partial H} = \frac{\mu^2}{|J|} \frac{\partial(m / \mu)}{\partial(\mu H / |J|)} = \frac{\mu^2}{|J|} \frac{d\eta\left(\frac{h}{|J|} - 2\right)}{d\left(\frac{h}{|J|} - 2\right)} = \frac{\mu^2}{|J|} \delta\left(\frac{h}{|J|} - 2\right), \quad (2.36)$$

де $\delta(x)$ – дельта-функція Дірака, а $d\eta(x) / dx = \delta(x)$ з точки зору теорії узагальнених функцій. Видно, що вона виявляється ненульовою тільки при $h = h_c = 2 |J|$, тобто у тій точці, до відбувається квантовий фазовий перехід.

Отже, співвідношення (2.35) і (2.36) є справедливими при $T \rightarrow +0$ та $N \rightarrow \infty$. А як зміниться результат, якщо при $T \rightarrow +0$ величина N стане скінченною? Про це йтиметься у наступному пункті.

2.4.2. Намагніченість і магнітна сприйнятливість для однорідного ланцюжка Ізінга із взаємодіями між сусідніми елементами в поздовжньому зовнішньому магнітному полі

Оцінимо, наскільки будуть відрізнятися нормовані функції намагніченості $m / \mu = F(h / |J|)$ та магнітної сприйнятливості $\chi |J| / \mu^2 = F(h / |J|)$ від граничних значень (2.35) і (2.36), що є справедливими при $T \rightarrow +0$ та $N \rightarrow \infty$ (див., наприклад, [9, 37, 38, 50]). Тобто важливо зрозуміти, як саме вплинуть скінченність величин температури T та кількості елементів у ланцюгу N . На жаль, отримати аналітичні вирази тут неможливо, тому залишається використовувати числові методи, реалізовані, наприклад, у системах комп'ютерної математики Mathematica або MATLAB. Зрозуміло, що розглядається випадок антиферромагнітної взаємодії ($J = -|J| < 0$).

Отримано числові результати розрахунків залежностей $m / \mu = F(h / |J|)$ при $T / |J| = 0.05$, а також $N = 8$ (рис. 2.2), $N = 9$ (рис. 2.4) і $N = 3$ (рис. 2.5) для «розімкненого» скінченного ланцюга, «замкненого» скінченного ланцюга та нескінченного ланцюга. Для тих самих моделей побудовано залежності $\chi |J| / \mu^2 = F(h / |J|)$ при $T / |J| = 0.05$, а також $N = 8$ (рис. 2.3), $N = 9$ (рис. 2.5) і $N = 3$ (рис. 2.7). Для порівняння на всіх графіках пунктирною лінією наведено результат, отриманий для нескінченного ланцюга за $T \rightarrow +0$ (див. пункт 2.4.1).

Видно, що чим меншою є величина N , тим більше «розмиваються» стрибок функції Хевісайда для $m / \mu = F(h / |J|)$ і сплеск δ -функції Дірака для $\chi |J| / \mu^2 = F(h / |J|)$.

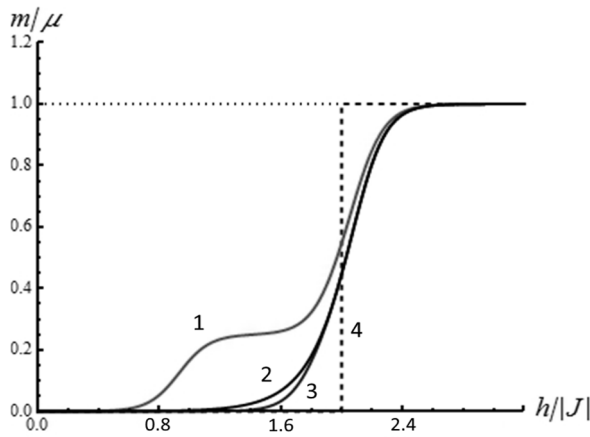


Рисунок 2.2 – Графіки залежностей $m / \mu = F(h / |J|)$ при $T / |J| = 0.05$ і $N = 8$

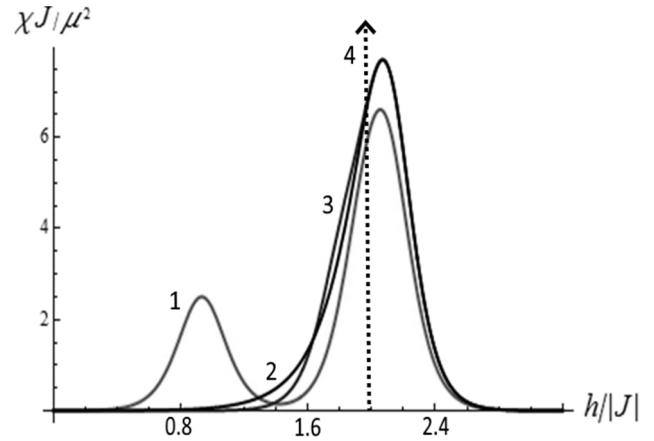


Рисунок 2.3 – Графіки залежностей $\chi |J| / \mu^2 = F(h / |J|)$ при $T / |J| = 0.05$ і $N = 8$

для «розімкненого» скінченного ланцюга (1), «замкненого» скінченного ланцюга (2), нескінченного ланцюга (3) та нескінченного ланцюга за $T \rightarrow +0$ (4).

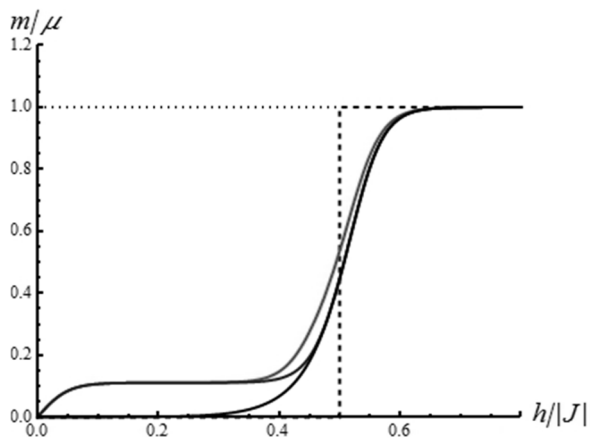


Рисунок 2.4 – Графіки залежностей $m / \mu = F(h / |J|)$ при $T / |J| = 0.05$ і $N = 9$

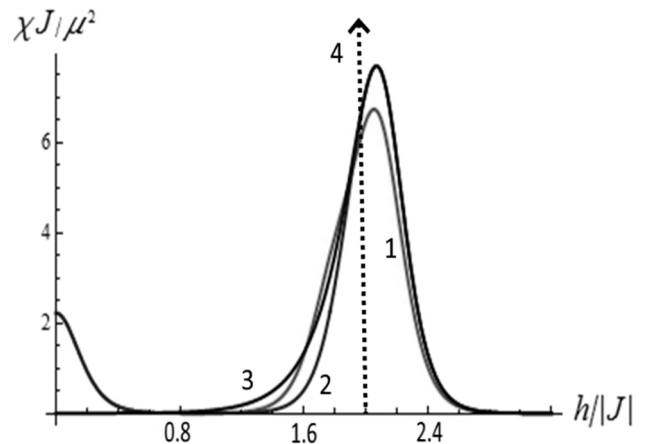


Рисунок 2.5 – Графіки залежностей $\chi |J| / \mu^2 = F(h / |J|)$ при $T / |J| = 0.05$ і $N = 9$

для «розімкненого» скінченного ланцюга (1), «замкненого» скінченного ланцюга (2), нескінченного ланцюга (3) та нескінченного ланцюга за $T \rightarrow +0$ (4).

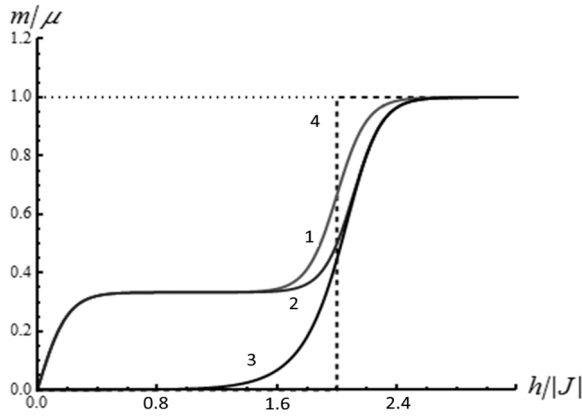


Рисунок 2.6 – Графіки залежностей $m / \mu = F(h / |J|)$ при $T / |J| = 0.05$ і $N = 3$

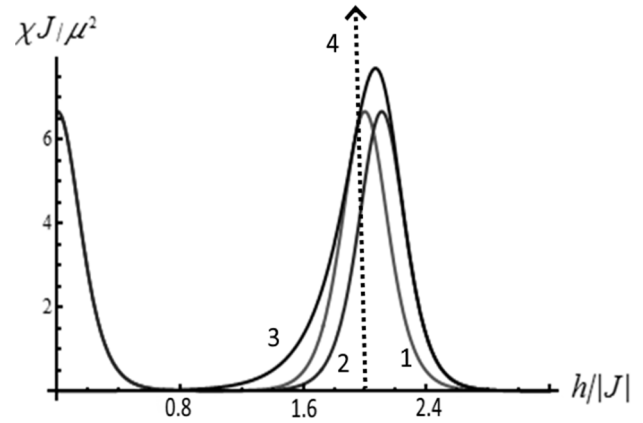


Рисунок 2.7 – Графіки залежностей $\chi |J| / \mu^2 = F(h / |J|)$ при $T / |J| = 0.05$ і $N = 3$

для «розімкненого» скінченного ланцюга (1), «замкненого» скінченного ланцюга (2), нескінченного ланцюга (3) та нескінченного ланцюга за $T \rightarrow +0$ (4).

2.4.3. Теплоємність для однорідного ланцюжка Ізінга із взаємодіями між сусідніми елементами в поздовжньому зовнішньому магнітному полі

Як було показано вище, теплоємність системи C може бути обчислена із використанням співвідношення (2.9). На жаль, це можна зробити лише числовими методами (див., наприклад, [9, 37, 38, 50]).

Обчислення залежностей $C = F(h / |J|)$ при $T / |J| = 0.05$, а також $N = 8$ (рис. 2.8), $N = 9$ (рис. 2.9) і $N = 3$ (рис. 2.10) проведено для моделей «розімкненого» скінченного, «замкненого» скінченного та нескінченного ланцюгів Ізінга.

Із рис. 2.8 – 2.10 видно, що відносно нескінченного ланцюга (3) із зменшенням величини N відбувається погіршення локалізації функції $C = F(h / |J|)$, наявні максимуми зменшуються, натомість поступово виникають нові, що розташовуються ближче до початку координат. До того ж

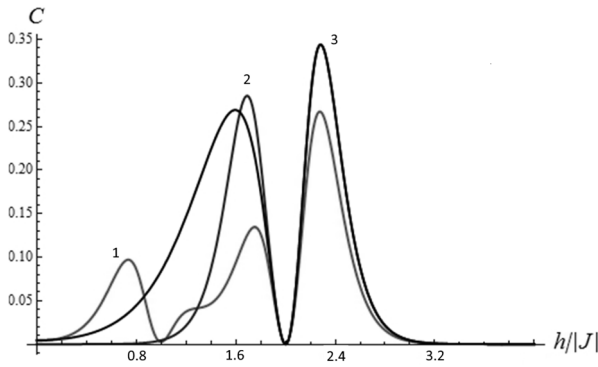


Рисунок 2.8 – Графіки залежностей $C = F(h / |J|)$ при $T / |J| = 0.05$ і $N = 3$ для «розімкненого» скінченного ланцюга (1), «замкненого» скінченного ланцюга (2) та нескінченного ланцюга (3).

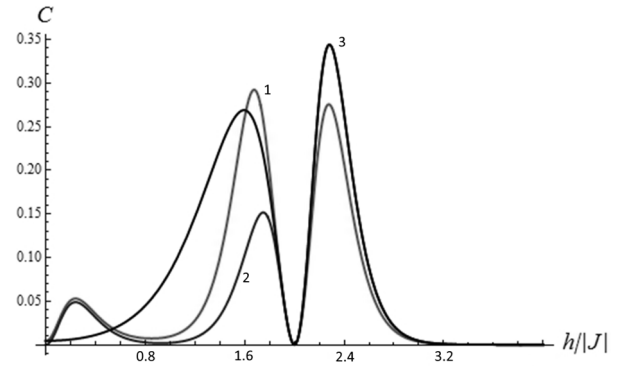


Рисунок 2.9 – Графіки залежностей $C = F(h / |J|)$ при $T / |J| = 0.05$ і $N = 3$ для «розімкненого» скінченного ланцюга (1), «замкненого» скінченного ланцюга (2) та нескінченного ланцюга (3).

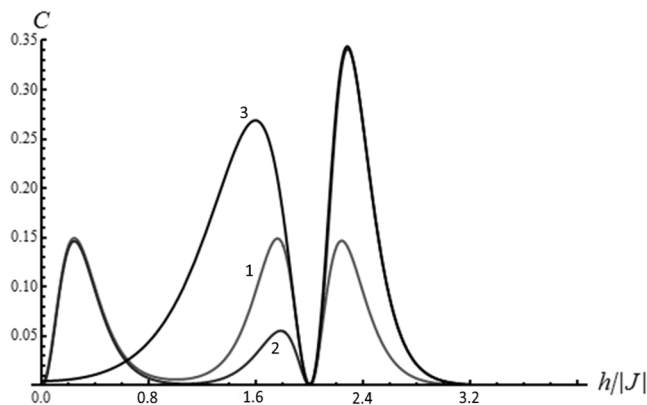


Рисунок 2.10 – Графіки залежностей $C = F(h / |J|)$ при $T / |J| = 0.05$ і $N = 3$ для «розімкненого» скінченного ланцюга (1), «замкненого» скінченного ланцюга (2) та нескінченного ланцюга (3)

за однакового значення N ці процеси активніше відбуваються для моделі «розімкненого» скінченного ланцюга, ніж для моделі «замкненого» скінченного ланцюга.

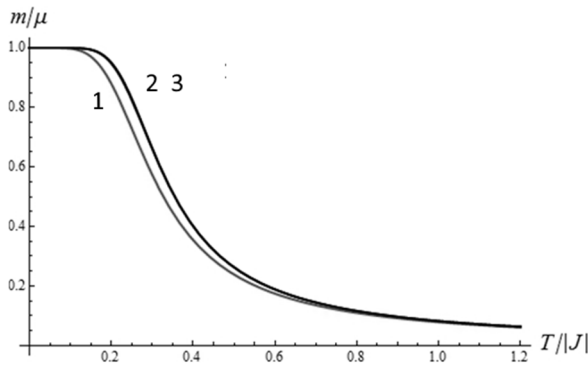


Рисунок 2.11 – Графіки залежностей (феромагнітна взаємодія) $m / \mu = F(T / |J|)$ при $h / |J| = 0.05$ і $N = 12$ для «розімкненого» скінченного ланцюга (1), «замкненого» скінченного ланцюга (2) та нескінченного ланцюга (3).

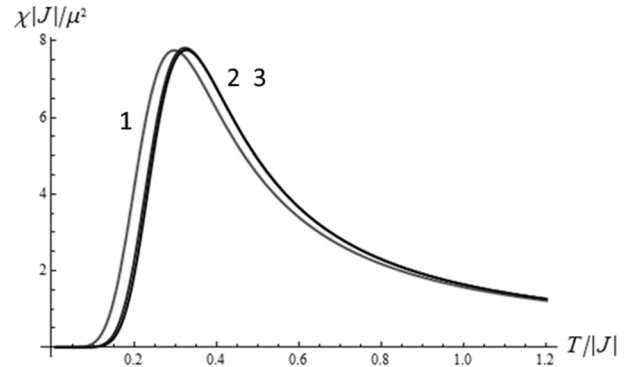


Рисунок 2.12 – Графіки залежностей (феромагнітна взаємодія) $\chi |J| / \mu^2 = F(h / |J|)$ при $h / |J| = 0.05$ і $N = 12$ для «розімкненого» скінченного ланцюга (1), «замкненого» скінченного ланцюга (2) та нескінченного ланцюга (3).

2.4.4. Температурні залежності намагніченості та магнітної сприйнятливості для однорідного ланцюжка Ізінга із взаємодіями між сусідніми елементами в поздовжньому зовнішньому магнітному полі

У пункті 2.4.2 за фіксованої температури було отримано залежності намагніченості m та магнітної сприйнятливості χ від величини напруженості зовнішнього магнітного поля H . Натомість можна зробити навпаки: зафіксувати величину напруженості зовнішнього магнітного поля H та дослідити температурні залежності намагніченості m та магнітної сприйнятливості χ за сталого скінченного значення кількості елементів ланцюга N (див., наприклад, [9, 37, 38, 50]).

Для феромагнітної взаємодії ($J = |J| > 0$) числовими методами побудовано залежності $m / \mu = F(T / |J|)$ (рис. 2.11) та $\chi |J| / \mu^2 = F(h / |J|)$ (рис. 2.12) при невеликому значенні напруженості

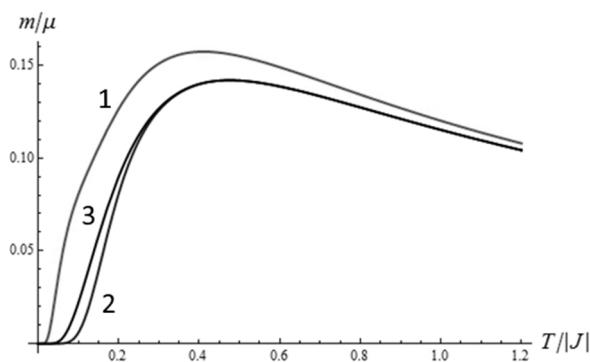


Рисунок 2.13 – Графіки залежностей (антиферромагнітна взаємодія)

$$m / \mu = F(T / |J|) \quad \text{при}$$

$$h / |J| = 0.19 \quad \text{і} \quad N = 12 \quad \text{для}$$

«розімкненого» скінченного ланцюга (1), «замкненого» скінченного ланцюга (2) та нескінченного ланцюга (3).

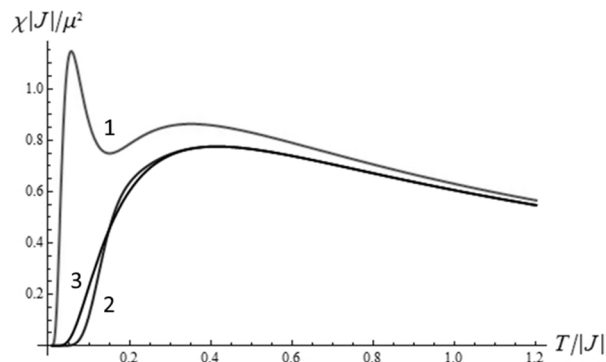


Рисунок 2.14 – Графіки залежностей (антиферромагнітна взаємодія)

$$\chi |J| / \mu^2 = F(h / |J|) \quad \text{при}$$

$$h / |J| = 0.19 \quad \text{і} \quad N = 12 \quad \text{для}$$

«розімкненого» скінченного ланцюга (1), «замкненого» скінченного ланцюга (2) та нескінченного ланцюга (3).

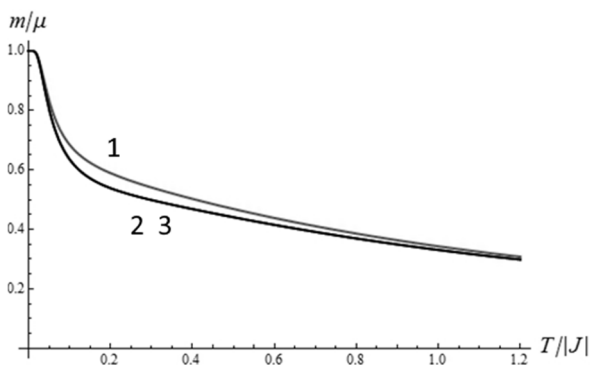


Рисунок 2.15 – Графіки залежностей (антиферромагнітна взаємодія)

$$m / \mu = F(T / |J|) \quad \text{при}$$

$$h / |J| = 0.55 \quad \text{і} \quad N = 12 \quad \text{для}$$

«розімкненого» скінченного ланцюга (1), «замкненого» скінченного ланцюга (2) та нескінченного ланцюга (3).

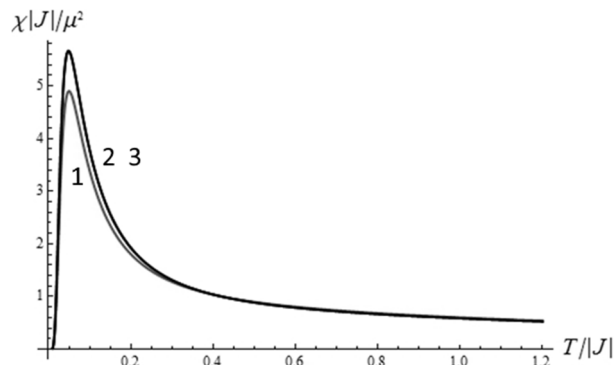


Рисунок 2.16 – Графіки залежностей (антиферромагнітна взаємодія)

$$\chi |J| / \mu^2 = F(h / |J|) \quad \text{при}$$

$$h / |J| = 0.55 \quad \text{і} \quad N = 12 \quad \text{для}$$

«розімкненого» скінченного ланцюга (1), «замкненого» скінченного ланцюга (2) та нескінченного ланцюга (3).

зовнішнього магнітного поля ($h / |J| = 0.05$) за кількості елементів у ланцюгу $N = 12$. для «розімкненого» скінченного ланцюга (1), «замкненого» скінченного ланцюга (2) та нескінченного ланцюга (3).

Для антиферомагнітної взаємодії ($J = -|J| < 0$) числовими методами побудовано залежності $m / \mu = F(T / |J|)$ (рис. 2.13, 2.15) та $\chi |J| / \mu^2 = F(h / |J|)$ (рис. 2.14, 2.16) відповідно для $h / |J| = 0.19$ і $h / |J| = 0.55$ за кількості елементів у ланцюгу $N = 12$. для «розімкненого» скінченного ланцюга (1), «замкненого» скінченного ланцюга (2) та нескінченного ланцюга (3).

Із рис. 2.11, 2.12 видно, що для феромагнітної взаємодії різниця в поведінці обох наборів графіків $m / \mu = F(T / |J|)$ і $\chi |J| / \mu^2 = F(h / |J|)$ при $N = 12$ для «розімкненого» скінченного ланцюга (1), «замкненого» скінченного ланцюга (2) та нескінченного ланцюга (3) є незначною. Аналогічна тенденція прослідковується для цих залежностей й у випадку антиферомагнітної взаємодії, хоча у порівняно малих полях ($h / |J| = 0.19$) поведінка вказаних залежностей для «розімкненого» скінченного ланцюга (1) стає помітно іншою. Так, на рис. 2.14 на залежності $\chi |J| / \mu^2 = F(h / |J|)$ для нього (1) при малих значеннях аргументу існує чіткий вузький максимум, тоді як для решти двох залежностей такого максимуму немає.

2.4.5. Вільна енергія, внутрішня енергія та теплоємність для однорідного ланцюга Ізінга із взаємодіями між сусідніми елементами у відсутності зовнішнього магнітного поля

Ще один можливий варіант отримати певні аналітичні співвідношення для термодинамічних характеристик реалізується для «розімкненого» скінченного ланцюга, «замкненого» скінченного ланцюга та нескінченного ланцюга реалізується у випадку відсутності зовнішнього магнітного поля ($H = 0$) (див., наприклад, [9, 37, 38, 50]).

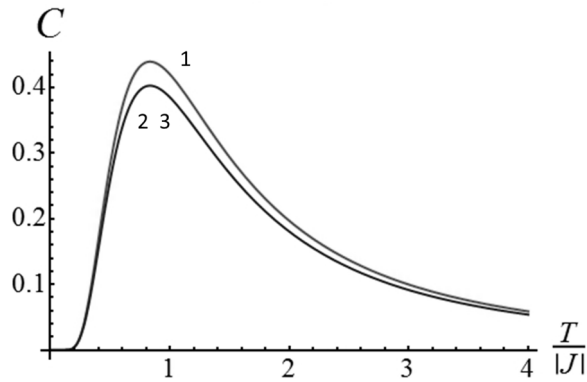


Рисунок 2.17 – Графіки залежностей (антиферромагнітна взаємодія) $C = F(T / |J|)$ при $h / |J| = 0$ і $N = 12$ для «розімкненого» скінченного ланцюга (1), «замкненого» скінченного ланцюжка (2) та нескінченного ланцюжка (3).

Виявляється, що для «замкненого» скінченного ланцюжка (індекс «ring») та нескінченного ланцюжка (індекс «inf») попарно вільні енергії, внутрішні енергії та теплоємності є рівними, а для «розімкненого» скінченного ланцюга (індекс «line») відрізняються на множник $(N - 1) / N$, вплив якого із зростанням N швидко зменшується:

$$\begin{aligned}
 f_{\text{inf}} = f_{\text{ring}} &= -T \ln \left[2 \operatorname{ch} \left(\frac{J}{T} \right) \right]; & f_{\text{line}} &= \left(\frac{N - 1}{N} \right) f_{\text{ring}}; \\
 E_{\text{inf}} = E_{\text{ring}} &= -J \operatorname{th} \left(\frac{J}{T} \right); & E_{\text{line}} &= \left(\frac{N - 1}{N} \right) E_{\text{ring}}; \\
 C_{\text{inf}} = C_{\text{ring}} &= \left(\frac{J}{T} \right)^2 \operatorname{ch}^{-2} \left(\frac{J}{T} \right); & C_{\text{line}} &= \left(\frac{N - 1}{N} \right) C_{\text{ring}}.
 \end{aligned}$$

Графіки залежностей $C = F(T / |J|)$ при $h / |J| = 0$ для «розімкненого» скінченного ланцюга (1), «замкненого» скінченного ланцюга (2) та нескінченного ланцюга (3) наведено на рис. 2.17.

З метою кращого розуміння зв'язків теоретичних результатів, які дозволяє отримати модель Ізінга, вказані залежності $C = F(T / |J|)$ при $h / |J| = 0$ цікаво та корисно порівняти з відомим експериментальним фактом, відомим як *аномалія Шотткі* (див., наприклад, [9, 37, 38, 50]).

Аномалія Шотткі – це спостережуваний ефект у фізиці твердого тіла, коли питома теплоємність твердого тіла за низької температури має пік. Цей ефект йменують аномальним, оскільки зазвичай теплоємність збільшується із зростанням температури або принаймні залишається сталою. Аномалія Шотткі відбувається в системах з обмеженою кількістю енергетичних рівнів, де внутрішня енергія зростає різкими стрибками, по одному для кожного енергетичного рівня, який стає доступним. Оскільки теплоємність C пов'язана із внутрішньою енергією E співвідношенням (2.9), що містить похідну від E по T , то залежність $C = F(T / |J|)$ добре відображає кожен стрибок функції $E = F(T / |J|)$ у вигляді великого піку.

Відомо, що температурна залежність теплоємності для дворівневої системи, де виникає аномалія Шотткі, має вигляд:

$$C_{\text{Schottky}} = R \left(\frac{\Delta}{T} \right)^2 \frac{\exp\left(\frac{\Delta}{T}\right)}{\left[1 + \exp\left(\frac{\Delta}{T}\right)\right]^2} = R \left(\frac{\Delta}{2T} \right)^2 \text{ch}^{-2}\left(\frac{\Delta}{2T}\right); \quad (2.35)$$

де R – стала Ридберга, $\Delta = 2|J|$ – величина стрибка між двома енергетичними рівнями. Важливо відзначити, що вираз (2.35) із точністю до константи співпадає з наведеним вище теплоємностями для «замкненого» скінченного ланцюга (індекс «ring») та нескінченного ланцюга (індекс «inf»)

$$C_{\text{inf}} = C_{\text{ring}} = \left(\frac{J}{T} \right)^2 \text{ch}^{-2}\left(\frac{J}{T}\right).$$

Отже, з цього випливає дуже важливий висновок: модель Ізінга відмінно описує наявність аномалії Шотткі у дворівневій системі. Це є яскравим доказом зв'язку теоретичних результатів квантової теорії магнетизму (зокрема, одновимірної моделі Ізінга) та реальних результатів експериментальних досліджень.

Крім викладеного вище матеріалу, на лекційних заняттях зі спецкурсу «Квантова теорія магнетизму» також розглядаються ефекти скінченності

кількості елементів при обчисленні теплоємності для «розімкненого» скінченного ланцюга, «замкненого» скінченного ланцюга та нескінченного ланцюга у випадку наявності зовнішнього магнітного поля (ферромагнітна та антиферромагнітна взаємодія); задача про одновимірну однорідну модель Ізінга з двома підгратками у випадку наявності зовнішнього магнітного поля, що розв'язується методом трансфер-матриці, оцінку термодинамічних характеристик такої моделі у відсутності та за наявності зовнішнього магнітного поля; задача про трикутний ланцюг Ізінга (гамільтоніан, трансфер-матриця, термодинамічні характеристики) у відсутності та за наявності зовнішнього магнітного поля. Описання теоретичної частини цих задач відсутня у даній роботі через існуючі обмеження щодо дозволеного її обсягу.

Таким чином, увесь згаданий вище матеріал відображає те, яким чином одновимірна модель Ізінга вже багато років успішно використовується для демонстрації теоретичних аспектів сучасної фізики магнітних явищ на лекціях зі спецкурсу «Квантова теорія магнетизму», що читається студентам-фізикам на кафедрі теоретичної фізики імені академіка І. М. Ліфшиця фізичного факультету Харківського національного університету імені В. Н. Каразіна.

2.5. Одновимірна модель Ізінга та практичні заняття

Як було вже сказано у підрозділі 1.5, крім лекційних занять, спецкурс «Квантова теорія магнетизму» також містить низку практичних (семінарських) занять, де традиційно прийнято розв'язувати задачі. Частина цих практичних занять присвячена одновимірній моделі Ізінга. Наведемо приклади задач, які пропонуються студентам.

Задача № 1 (10 балів). Відшукати внутрішню енергію E та теплоємність C для одновимірної моделі Ізінга із взаємодією найближчих сусідів та спіном $S = 1/2$. Дослідити температурну залежність теплоємності $C = C(T)$ за відсутності зовнішнього магнітного поля ($H = 0$).

Оскільки на лекціях (див. підрозділи 2.1 – 2.4) докладно розібрано розв'язання такої задачі для цілого спіну ($S = 1$), студентіві потрібно пройти

аналогічний шлях, модифікуючи наявні вирази для напівцілого спіну ($S = 1/2$). З одного боку, таке завдання не є особливо складним, але з іншого боку, воно дозволяє студентові на власному досвіді самому краще відчувати всі тонкості перетворень, зроблених на лекції.

Задача № 2 (20 балів). Методом трансфер-матриці відшукати статистичну суму Z_N , вільну енергію f , намагніченість m , внутрішню енергію E , теплоємність C для нескінченного ланцюга в моделі Ізінга з двома підрешітками, тобто із двома різними обмінними константами $J_1 \neq J_2$ і магнетонами $\mu_1 \neq \mu_2$. Дослідити поведінку теплоємності $C = C(T)$ за відсутності зовнішнього магнітного поля ($H = 0$).

Ця задача є складнішою за попередню, але також спонукає студента модифікувати результати, отримані на лекції для схожої задачі. Основна складність полягає у потребі докладно розібратися із методом трансфер-матриці та спробувати самостійно його використати.

Задача № 3 (40 балів). Побудувати трансфер-матрицю для подвійного ланцюга (спінових сходів) в моделі Ізінга. На нашу думку, ця задача, у першу чергу, спрямована на «відмінників», оскільки тут потрібно не лише володіння досить складним методом трансфер-матриці, але й потреба «вигадати» власний підхід до «геометрії» задачі, що не розглядалася на лекціях. Це дуже добре, бо на практиці моделює процес реальних досліджень в галузі фізики, коли у переважній більшості випадків вчений не може точно передбачити, що й як саме він робитиме, а тому сподівається на власні знання та власну фізичну інтуїцію.

Наявність в одній темі задач різного рівня є додатковою перевагою спецкурсу. Кількість балів, відведена автором цих задач на кожну з них, добре відображає співвідношення кількостей зусиль, які слід прикласти студентові для успішного розв'язання кожної з цих задач. Отже, кожен студент має змогу обрати собі задачу, яка не тільки виявиться йому «по зубах», але й стане корисною для розвитку його фізичних здібностей та математичної техніки.

Таким чином, *основними* корисними *особливостями* використання одновимірної моделі Ізінга на практичних (семінарських) заняттях зі спецкурсу «Квантова теорія магнетизму» є різноманітність задач, що пропонуються студентів для розв'язання, спрямованість на поступове зростання складності задач у часі: від простої модифікації лекційного матеріалу методом аналогії через практичне оволодіння складним методом (методом трансфер-матриці) до моделювання реального дослідницького процесу, коли потрібно звертатися до літературних джерел, які, в свою чергу, не містять прямої відповіді на поставлене питання.

2.6. Висновки до розділу 2

1. Встановлено, що модель Ізінга взагалі є однією з найвідоміших моделей статистичної фізики, яка успішно застосовується тоді, коли потрібно описати поведінку взаємодіючих систем, складених із багатьох підсистем. У теорії магнетизму модель Ізінга – це спрощена модель магнетика у вигляді системи магнітних диполів (спінів), які розташовуються у вузлах кристалічної ґратки. Модель Ізінга є частковим випадком більш загальної моделі Гейзенберга. Існує багато її модифікацій. Одновимірна модель Ізінга є найпростішим варіантом моделі Ізінга.

2. Виявлено, що основна ідея застосування одновимірної моделі Ізінга у квантовій теорії магнетизму полягає у наступному. Для заданої моделі Ізінга записується гамільтоніан. Оскільки енергія є власним числом гамільтоніана, зі спектрального рівняння для гамільтоніана можна отримати спектр дозволених енергетичних станів, в яких може перебувати описувана квантова система. Також на базі гамільтоніана будується статистична сума. Робиться це у переважній більшості випадків методом трансфер-матриці, хоча інколи вдається зробити це й простіше. На основі побудованої статистичної суми оцінюються термодинамічні характеристики системи, зокрема, вільна енергія, намагніченість, магнітна сприйнятливність, внутрішня енергія, теплоємність. Так встановлюється зв'язок між суто теоретичними квантово-механічними

характеристиками (гамільтоніан, трансфер-матриця, статистична сума) і термодинамічними характеристиками, що реально вимірюються та обчислюються в експериментах. Наявність чіткої схеми застосування одновимірної моделі Ізінга в квантовій теорії магнетизму є першою особливістю її використання у теоретичній частині спецкурсу «Квантова теорія магнетизму».

3. Виявлено, що другою особливістю застосування одновимірної моделі Ізінга у теоретичній частині спецкурсу «Квантова теорія магнетизму» є те, що на лекціях спостерігається чітке слідування сформульованій вище схемі при розгляді низки простих задач, що здебільшого дозволяють отримати результати в аналітичній формі.

4. Продемонстровано, що третьою особливістю застосування одновимірної моделі Ізінга у теоретичній частині спецкурсу «Квантова теорія магнетизму» є те, що для кожної окремої задачі, що розглядається, проводиться ретельний аналіз всіх можливих граничних переходів отриманих термодинамічних параметрів за існуючими параметрами (температурою, напруженістю зовнішнього магнітного поля, обмінним константами, кількістю елементів в ланцюгу Ізінга і т. і.), що призводить до демонстрації цікавих фізичних ефектів, наприклад, відсутності чи наявності за певних умов квантових фазових переходів.

5. Показано, що четвертою особливістю застосування одновимірної моделі Ізінга у теоретичній частині спецкурсу «Квантова теорія магнетизму» є те, що наводяться приклади, що демонструють, як одновимірна модель Ізінга дозволяє описати відомі експериментальні ефекти (наприклад, аномалію Шотткі).

6. Встановлено, що основними корисними особливостями використання одновимірної моделі Ізінга на практичних (семінарських) заняттях зі спецкурсу «Квантова теорія магнетизму» є 1) різноманітність задач, що пропонуються студентів для розв'язання, 2) спрямованість на поступове зростання складності задач у часі: від простої модифікації лекційного

матеріалу методом аналогії до практичного оволодіння складним методом (метод трансфер-матриці), 3) моделювання реального дослідницького процесу, коли потрібно звертатися до літературних джерел, які, в свою чергу, не містять прямої відповіді на поставлене питання.

ВИСНОВКИ

1. Наведено основи класичної та квантової теорій магнетизму, які є суттєвими для розуміння особливостей застосування одновимірної моделі Ізінга в спецкурсі «Квантова теорія магнетизму». Розглянуто особливості спецкурсу «Квантова теорія магнетизму», відзначено його виключну необхідність при підготовці бакалаврів і магістрів за спеціальністю 104 – фізика та астрономія, яка відбувається на кафедрі теоретичної фізики імені академіка І. М. Ліфшиця фізичного факультету Харківського національного університету імені В. Н. Каразіна

2. Проаналізовано та стисло викладено сутність моделі Ізінга й її одновимірний варіант. Показано, що під час описання обмінної взаємодії у рамках спінових моделей використовується гамільтоніан Гейзенберга, що є основою феромагнітної та антиферомагнітної моделей Гейзенберга. Модель Ізінга є частковим випадком моделі Гейзенберга, коли істотними вважаються лише ті напрямки взаємодії між спінами, які перебувають у вузлах кристалічної ґратки, що повністю співпадають із напрямком зовнішнього магнітного поля (або уздовж поля, або проти нього). Основний стан моделі Ізінга співпадає із основним станом моделі Гейзенберга за нульової температури, коли спіни «заморожені» та орієнтовані або уздовж поля, або проти нього.

3. Сформульовано особливості використання одновимірної моделі Ізінга при викладенні теоретичних положень спецкурсу «Квантова теорія магнетизму»: 1) наявність чіткої схеми застосування одновимірної моделі Ізінга: від гамільтоніана через трансфер-матрицю і статистичну суму до термодинамічних характеристик; 2) чітке слідування сформульованій вище схемі при розгляді низки простих задач, що здебільшого дозволяють отримати результати в аналітичній формі; 3) кожній окремій задачі, що розглядається, проводиться ретельний аналіз всіх можливих граничних переходів отриманих термодинамічних параметрів за існуючими параметрами (температурою,

напруженістю зовнішнього магнітного поля, обмінним константами, кількістю елементів в ланцюгу Ізінга і т. і.), що призводить до демонстрації цікавих фізичних ефектів, наприклад, відсутності чи наявності за певних умов квантових фазових переходів; 4) наведення прикладів, що демонструють, як одновимірна модель Ізінга дозволяє описати відомі експериментальні ефекти (наприклад, аномалію Шотткі).

4. Виявлено особливості використання одновимірної моделі Ізінга при створенні практичних завдань для спецкурсу «Квантова теорія магнетизму»:

- 1) різноманітність задач, що пропонуються студентів для розв'язання,
- 2) спрямованість на поступове зростання складності задач у часі: від простої модифікації лекційного матеріалу методом аналогії до практичного оволодіння складним методом (метод трансфер-матриці),
- 3) моделювання реального дослідницького процесу, коли потрібно звертатися до літературних джерел, які, в свою чергу, не містять прямої відповіді на поставлене питання.

СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

1. Dirac P. A. M. *The Principles of Quantum Mechanics*. – Oxford: Clarendon Press, 1958. – 324 p.
2. Ballentine L. E. *Quantum Mechanics. A Modern Development*. – Singapore: World Scientific Publishing, 1998. – 654 p.
3. Breitenlohner P., Maison D., Eds. *Quantum Field Theory*. – Berlin, Heidelberg, New York: Springer-Verlag, 2000. – 323 p.
4. Feynman R. P. *QED: The Strange Theory of Light and Matter*. – Princeton: Princeton University Press, 1985. – 163 p.
5. Черногор Л. Ф. *Нелінійна радіофізика: підручник*. – Х.: ХНУ імені В. Н. Каразіна, 2015. – 204 с.
6. Forshaw J. R., Ross D. A. *Quantum Chromodynamics and the Pomeron*. – Cambridge: Cambridge University Press, 1997. – 248 p.
7. Rovelli C. *Quantum Gravity*. – Cambridge: Cambridge University Press, 2010. – 458 p.
8. Schomerus V. *A Primer of String Theory*. – Cambridge: Cambridge University Press, 2017. – 234 p.
9. Jascur M. *Quantum Theory of Magnetism*. – Kosice: Pavol Jozef Safarik University, 2013. – 65 p.
10. Птащенко О. О. *Основи квантової електроніки: навчальний посібник*. – Одеса: Астропринт, 2010. – 392 с.
11. Yariv A. *Quantum Electronics*. – Chichester: John Wiley & Sons Ltd, 1991. – 704 p.
12. Imre S., Balázs F. *Quantum Computing and Communications. An Engineering Approach*. – Chichester: John Wiley & Sons Ltd, 2005. – 283 p.
13. Chuang I. L., Laflamme R., Shor P. W., Zurek, W. H. *Quantum computers, factoring and decoherence // Science*. – 1995. – Vol. 270. – Pp. 1633 – 1635.

14. Brassard G., Crépeau C. Quantum Cryptography. In: van Tilborg, H.C.A. (eds) Encyclopedia of Cryptography and Security. – Boston: Springer, 2005. – Pp. 495 – 500.
15. Engel T., Reid P. Quantum Chemistry & Spectroscopy. Pearson College Div., 2009. – 100 p.
16. Терещенко М. Ф. Тимчик Г. С., Яковенко І. О. Біофізика: підручник. – Київ: КПІ ім. Ігоря Сікорського, Вид-во «Політехніка», 2019. – 444 с.
17. Fleming G. R., Scholes G. D. Quantum biology: introduction. In: Mohseni M., Omar Y., Engel G. S., Plenio M.B., eds. Quantum Effects in Biology. – Cambridge: Cambridge University Press; 2014. – Pp. 3 – 13.
18. Stcherbic V. V., Buchatsky L. P. Quantum Genetics. – CRC Press, 2007. – 174 p.
19. Wilson R. A. Quantum Psychology: How Brain Software Programs You & Your World. – New Falcon Pubns, 1993. – 202 p.
20. Bass M., Van Stryland E. W., Williams D. R., Wolfe W. L. Handbook of Optics. Volume 1, Fundamentals, Techniques, and Design. – New York: McGraw Hill, 1995. – 1606 p.
21. Sapoval B., Hermann C. Physics of Semiconductors. – New York, Berlin: Springer Verlag, 1995. – 318 p.
22. Ковальський О. В., Мечев Д. С., Данилевич В. П. Радіологія. Променева терапія. Променева діагностика : підручник для студ. вищ. мед. навч. заклад. – Вінниця: Нова Книга, 2013. – 512 с.
23. Hinkley N., Sherman J. A., Phillips N. B., Schioppo M., Lemke N. D., Beloy K., Pizzocaro M., Oates C. W., Ludlow A. D. An Atomic Clock with 10-18 Instability // Science. – 2013. – Vol. 341, No. 6151. – Pp. 1215—1218.
24. Davies P., ed. The New Physics. – Cambridge: Cambridge University Press, 1989. – 516 p.
25. Rosana A. dos Anjos, Viana J. R., Sousa J. R. Phase diagram of the Ising antiferromagnet with nearest-neighbor and next-nearest-neighbor interactions on a square lattice // Physics Letters A. – 2008. – Vol. 372. – P. 1180–1184.

26. Pan A. C., Chandler D. Dynamics of nucleation in the Ising model // The Journal of Physical Chemistry B. – 2004. – Vol. 108. – Pp. 19681 – 19686.
27. Krasnytska M., Berche B., Holovatch Y., Kenna R. Generalized Ising Model on a Scale-Free Network: An Interplay of Power Laws // Entropy. – 2021. – Vol. 23. – P. 1175.
28. Paszkiewicz A. Modeling and Analysis of Anomalies in the Network Infrastructure Based on the Potts Model // Entropy. – 2021. – Vol. 23. – P. 949.
29. Žukovic M., Hristopulos D. T. Ising Model for Interpolation of Spatial Data on Regular Grids // Entropy. – 2021. – Vol. 23. – P. 1270.
30. Valle M. A., Lavín J. F., Magner N. S. Equity Market Description under High and Low Volatility Regimes Using Maximum Entropy Pairwise Distribution // Entropy. – 2021. – Vol. 23. – P. 1307.
31. Dhar D., Bassler K. E., Zia R. K. P. The Many-Agent Limit of the Extreme Introvert-Extrovert Model. In: Abergel F., Aoyama H., Chakrabarti B. K., Chakraborti A., Deo N., Raina D., Vodenska I., Eds. Econophysics and Sociophysics: Recent Progress and Future Directions. – Cham: Springer, 2017. – Pp. 177 – 185.
32. Lipowski A. Ising Model: Recent Developments and Exotic Applications // Entropy. – 2022. – Vol. 24. – P. 1834.
33. Axler S. Linear Algebra Done Right. – New York, Berlin, Heidelberg, Barcelona, Hong Kong, London, Milan, Paris, Singapore, Tokyo: Springer, 1997. – 251 p.
34. James G. Advanced Modern Engineering Mathematics. – Harlow, London, New York, Boston, San Francisco, Toronto, Sydney, Singapore, Hong Kong, Tokyo, Seoul, Taipei, New Delhi, Cape Town, Madrid, Mexico City, Amsterdam, Munich, Paris, Milan: Prentice Hall, 2011. – 1036 p.
35. Serway R. A., Jewett J. W., Jr. Physics for Scientists and Engineers with Modern Physics. – Boston: Brooks/Cole, 2014. – 1484 p.
36. Бушок Г. Ф., Венгер Є. Ф. Курс фізики: У 3 кн. Кн. 2. Електрика і магнетизм: Навч. посіб. – Київ: Вища школа, 2003. – 278 с.

37. Mattis D. C. The Theory of Magnetism Made Simple. An Introduction to Physical Concepts and to Some Useful Mathematical Methods. – New Jersey, London, Singapore, Beijing, Shanghai, Hongkong, Taipei, Chennai: World Scientific, 2006. – 565 p.
38. White R. M. Quantum Theory of Magnetism. – Berlin, Heidelberg, New York: Springer – Verlag, 1983. – 304 p.
39. Філь Д. В., Єзерська О. В. Теорія низьковимірних систем: Робоча програма навчальної дисципліни. – Харків: ХНУ імені В. Н. Каразіна, 2023. – 11 с.
40. Славін В. В. Низьковимірний магнетизм: Робоча програма навчальної дисципліни. – Харків: ХНУ імені В. Н. Каразіна, 2023. – 10 с.
41. https://drive.google.com/drive/folders/1qN0shGyRTd4z5w2ttQz38DgF7UTih3jl?usp=share_link
42. https://drive.google.com/drive/folders/1qN0shGyRTd4z5w2ttQz38DgF7UTih3jl?usp=share_link
43. https://drive.google.com/drive/folders/1qN0shGyRTd4z5w2ttQz38DgF7UTih3jl?usp=share_link
44. Ising T., Folk R., Kennac R., Berche B., Holovatch Y. The Fate of Ernst Ising and the Fate of his Model // <http://arxiv.org/abs/1706.01764v1>.
45. Lenz W. Beitrag zum Verst"andnis der magnetischen Erscheinungen in festen Korpern // Phys. Z. – 1920. – Vol. 21. – P. 613.
46. Heisenberg W. Zur Theorie des Ferromagnetismus // Zeitschrift fur Physik. – 1928. – Vol 49. – Pp. 619 – 636.
47. Ising E. Beitrag zur Theorie des Ferromagnetismus, Zeitschrift für Physik // Zeitschrift fur Physik. – 1925. – Vol. 31. – P. 253 – 258.
48. Onsager L. Crystal Statistics. I. A Two-Dimensional Model with an Order-Disorder Transition // Phys. Rev. – 1944. – Vol. 65. – Pp. 117 – 149.
49. Stepanov I. A. Exact Solutions of the One-Dimensional, Two-Dimensional, and Three-Dimensional Ising Models // Nano Science and Nano Technology: An Indian Journal. – 2012. – Vol. 6, No 3, – Pp. 118 – 122.
50. Pal Singh S. The Ising Model: Brief Introduction and Its Application [Internet]. In: Solid State Physics [Working Title]. – IntechOpen, 2020. – 18 p. DOI: <http://dx.doi.org/10.5772/intechopen.90875>.