



## دراسة الخواص المغناطيسية لشبكة مغناطيسية حديدية باستخدام نموذج Ising

محمد هيثم الشمالي<sup>1\*</sup>، مجد الدين العلي<sup>2</sup>

<sup>1</sup> قسم الهندسة الالكترونية والاتصالات، كلية الهندسة الميكانيكية والكهربائية، جامعة البعث، سوريا

<sup>2</sup> قسم الهندسة الالكترونية والاتصالات، كلية الهندسة الميكانيكية والكهربائية، جامعة البعث، سوريا، majd\_ali@hotmail.com

\* الباحث الممثل: محمد الشمالي، engms989@gmail.com

نشر في: 30 ايلول 2024

**الخلاصة-** تم في هذا البحث دراسة نظام (Ising) ثنائي الأبعاد باستخدام محاكاة مونت كارلو بناء على خوارزمية (Metropolis). تمت محاكاة نظام مكون من 2500 دوران في شبكة مربعة الشكل بدرجات حرارة متفاوتة ومجالات مغناطيسية للحصول على درجة الحرارة الحرجة. علاوة على ذلك، تم تحديد المغناطيسية والطاقة لكل دوران والحرارة النوعية والقابلية المغناطيسية كتابع لدرجة الحرارة. أخيراً، تمت دراسة تأثير المجال المغناطيسي على مغنطة النظام. بلغ زمن ارتباط المغنطة ذروته بين 2.2 و 2.6، ومن المتوقع أن يستغرق النظام وقتاً أطول حتى يصبح غير مرتبط في درجات الحرارة هذه. أثبتت النتائج أنه من أجل درجات حرارة T منخفضة، فإن المتوسط المطلق للمغنطة لكل لفة يقترب من 1، بينما من أجل T مرتفعة، ينخفض إلى الصفر. كما أن الانخفاض المفاجئ للغاية يحدث بالقرب من درجة الحرارة الحرجة. أما بالنسبة لمتوسط الطاقة لكل دوران، فإن الطاقة تبدأ منخفضة عند انخفاض T وتزداد مع T. تظهر الحساسية المغناطيسية والحرارة النوعية أنماطاً متشابهة مع قيم صغيرة إلى حد ما وموحدة بعيدة عن  $T_c$ ، مع ارتفاع كبير في  $T_c$  وحولها.

**الكلمات الرئيسية-** "نموذج (Ising)، محاكاة مونت كارلو، خوارزمية (Metropolis)، الحرارة النوعية، القابلية المغناطيسية"

### 1. المقدمة

النظام. تم الحصول على الأقواس المميزة المختلفة للمغنطة، الحساسية، الطاقة الداخلية، الحرارة المحددة، وحلقات التخلفية. تم اكتشاف سلوك تخلفية الحلقة المتعدد. علاوة على ذلك، تم رسم منحني إختلاف المغنطة مع الحقل المغناطيسي الخارجي تحت تأثير البارامترات المختلفة ووجدت أن هضاب المغنطة مستندة على اقتران التبادل، وتباين الخواص، وحالة الدوران [7].

بالنسبة لهذا البحث، استخدمنا طريقة (Markov-Chain Monte Carlo (MCMC) لدراسة فيزياء نموذج (Ising). حيث لا يحتوي نموذج (Ising) ثلاثي الأبعاد على حل تحليلي دقيق حتى الآن، لذا تعد المحاكاة العددية مورداً قيماً. ومع ذلك، لأغراض هذا البحث، نقوم فقط بتحليل النظام ثنائي الأبعاد. تعد أنظمة نموذج (Ising) مفيدة في دراسات المغناطيسية، وهي معقدة بما يكفي لتبرير استخدام طريقة مونت كارلو [8].

### 2. أهداف البحث

النمذجة والمحاكاة ضرورية لعلم المواد النانوية، فالتجارب والأجهزة مكلفة وخطر الفشل كبير ولا يمكن تقليده، كما أن التطبيقات التكنولوجية الهامة للمواد النانوية تكمن في خصائصها المغناطيسية الغير متوقعة. وبالتالي تحديد هذه الخواص باستخدام خوارزمية مونت كارلو يقلل الضياعات (فقد المعلومات) في التجارب المخبرية الناتجة عن التجهيزات المستخدمة، العامل البشري، جودة تحضير العينة المدروسة، مما يساهم في تطوير التطبيقات التكنولوجية المعتمدة على المواد النانوية المدروسة.

يهدف البحث إلى دراسة الخواص المغناطيسية لشبكة مغناطيسية حديدية بالاعتماد على نظام (Ising) ثنائي الأبعاد باستخدام محاكاة مونت كارلو بناء على خوارزمية (Metropolis).

تجارب مونت كارلو هي مجموعة عامة من الأساليب الحسابية التي تعتمد على أخذ عينات عشوائية لنماذج معقدة بشكل خاص لتوليد نتائج رقمية مفيدة. لها تطبيقات واسعة في الفيزياء وغالباً ما تكون حلاً لنمذجة أنظمة معقدة للغاية. على وجه الخصوص، تعد هذه الطرق مفيدة في الأنظمة أو النماذج التي يمكن وصفها احتمالياً، خاصة عندما تحتوي هذه الأنظمة على العديد من البارامترات التي قد تقترب قيمها بطريقة ما.

في عام 2021 قامت دراسة بحساب طاقة النظام (Hamiltonian) بالاعتماد على الكثافة المضبوطة للحالات عن طريق البرمجة الديناميكية (density of states obtained by dynamic programming) في إطار نموذج (Ising) الذي أخذ في الحسبان التفاعلات قصيرة المدى (J) وبعيدة المدى (G) إضافة لتأثيرات السطح (L). وقد حللت الدراسة سلوك انتقال دوران ثنائي الأبعاد للمركبات تحت درجة الحرارة والضغط [6].

في عام 2021 تم استخدام محاكاة مونت كارلو المعتمدة على خوارزمية متروبوليس مع نموذج (Ising) لدراسة تأثير بارامترات طاقة النظام (Hamiltonian) على المغناطيسية والخصائص الديناميكية الحرارية ومخططات طور دوران مختلط 1- ودوران 1/2- لتركييب مغناطيسي حديدي ذو شبكة مربعة. وأظهرت النتائج أن النظام يظهر انتقال إلى طور المغناطيسية من المرتبة الثانية [9].

في عام 2023 وباستخدام محاكاة مونت كارلو مع خوارزمية متروبوليس، تم تحليل الخصائص المغناطيسية للجزيئات النانوية المشكلة سداسياً مع دوران مختلط (1, 3/2) تحت حقل مغناطيسي مطبق. تمت دراسة تأثير اقتران التبادل وتباين الخواص على المغناطيسية والخواص الترموديناميكية

وبالمثل، يمكن الحصول على متوسط الطاقة لكل لفة من هاملتونيان. كما يمكن استخدام متوسط إجمالي المغنطة والطاقة لحساب القابلية المغناطيسية والحرارة النوعية [12].  
تعطى القابلية المغناطيسية بالمعادلة (4):

$$\chi M = \frac{\beta}{N^2} (\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2) \quad (4)$$

$\chi M$  القابلية المغناطيسية،  $\beta$  درجة الحرارة العكسية، و  $M$  المغنطة الكلية. تشير الأقواس إلى المعدل الزمني.

يتم إعطاء الحرارة النوعية بواسطة المعادلة (5) كالتالي:

$$C_v = \frac{1}{N^2 k_B T^2} (\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2) \quad (5)$$

حيث  $C_v$  هي الحرارة النوعية،  $T$  هي درجة الحرارة و  $E$  هي الطاقة الكلية للنظام [13].

### 5. الطرق والأساليب

#### 5.1 تكامل مونت كارلو

لمحاكاة نموذج (Ising) يتم استخدام تكامل مونت كارلو. هذا التكامل مفيد عند دراسة الآليات الإحصائية للنظام، والتي تتطلب بالضرورة حساب التكاملات عالية الأبعاد. بعبارة أخرى، تكامل مونت كارلو  $\int_a^b f(x) dx$  يعمل على حساب القيمة المتوقعة لـ  $f$  من أجل توزيع احتمالي معطى  $p(x)$ . وهنا يتم تلخيص  $f$  من أجل عدد  $N$  من الحالات  $x_i$  التي يتم أخذ عينات منها عشوائياً وفقاً لـ  $p(x)$  [5].

في حالة التوزيع الاحتمالي الموحد،  $p(x) = 1/(b - a)$ .

حيث:  $a, b$  هي عبارة عن ثوابت تعبر عن حدود التكامل (أي القيمة العظمى والقيمة الصغرى للمجال المطلوب حساب الاحتمال ضمنه)،  $p(x)$  هو قيمة الاحتمال من أجل الحالة  $x$  وهو قيمة ثابتة.

يبدو هذا في المعادلة (6) على النحو التالي:

$$\begin{aligned} \int_a^b f(x) dx &= (b - a) \int_a^b \frac{1}{b - a} f(x) dx \\ &= (b - a) \int_a^b p(x) f(x) dx = \\ &\approx \frac{b - a}{N} \sum_{i=1}^N f(x_i) \end{aligned} \quad (6)$$

يفضل هذا عن طرق التكامل العددي "الأبسط" (مثل طريقة المستطيل)، لأن الخطأ في التقدير لا يقاس مع أبعاد النظام.

بالنسبة لتكامل مونت كارلو (MC) يتم قياس الخطأ على أنه  $1/\sqrt{N}$  فقط، بينما في طريقة المستطيل (وطرق أخرى مماثلة) مقياس الخطأ تكون  $1/N^{k/d}$ ، حيث:  $d$  هو بُعد النظام حيث يساوي 1 من أجل الأنظمة أحادية البعد ويساوي 2 من أجل الأنظمة ثنائية البعد وهكذا،  $N$  هو عدد خطوات خوارزمية مونت كارلو و  $k$  ثابت يعبر عن عدد المستطيلات التي يتم تقسيم مجال التكامل إليها لتسهيل الحساب. مما يجعل تكامل مونت كارلو متفوقاً على الأنظمة التي تتمتع بدرجات عديدة من الحرية.

### 3. منهجية البحث

تم تصميم مراحل الخوارزمية المقترحة باستخدام لغة (python) وذلك بالاعتماد على برنامج (PyCharm) وهو برنامج تطوري يدعم لغة (python)، ومن ثم تم تطبيق الخوارزمية على شبكة مغناطيسية حديدية ودراسة خواصها المغناطيسية.

### 4. الجانب النظري

#### 4.1 نموذج (Ising)

نموذج (Ising) هو نموذج بسيط لدراسة المغناطيسية. يتكون النموذج من نظام دورانات يمكن أن يشير إما للأعلى أو للأسفل. توجد بين دورانين متجاورين، طاقة تفاعلية وتكتسب الدورات أيضاً طاقة مغناطيسية في وجود مجال مغناطيسي. تم وصف طاقة النظام من قبل هاميلتوني  $H$  الذي يعطى بالمعادلة (1) كالتالي:

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j - H \sum_i s_i \quad (1)$$

حيث  $J$  هي طاقة التفاعل بين دورانين متجاورين  $(s_i, s_j)$  و  $H$  هو المجال المغناطيسي. نظراً لأن الدورانات تدور فقط للأعلى أو للأسفل:  $s_i \in \{-1, 1\}$ . إذا كانت قيمة طاقة التفاعل موجبة  $J > 0$  سيصبح النظام مغناطيسياً حديدياً وستتم محاذاة جميع الدورات عند درجات حرارة منخفضة. بالنسبة لتكوين بدء عشوائي، فإن كلا الاتجاهين الذين يمكن أن تتماشى فيه الدورانات (لأعلى أو لأسفل) يكونان متساويين في الاحتمالية في حالة عدم وجود مجال مغناطيسي. إذا كان هناك مجال مغناطيسي، فإن الدورانات تدور مع اتجاه المجال المغناطيسي [1].

في كلتا الحالتين، يحتوي نموذج (Ising) على مرحلة انتقالية لبعدين أو أعلى. عند درجة الحرارة الحرجة، سينتقل النظام من نظام مغناطيسي حديدي مرتب إلى نظام مضطرب بدون مغنطة [2].

درجة الحرارة الحرجة بالضبط تعطى بالمعادلة (2) كالتالي:

$$\frac{k_B T_c}{J} = \frac{2}{\ln(1 + \sqrt{2})} \approx 2.269 \quad (2)$$

بحيث:

$T_c$  هي درجة الحرارة الحرجة،  $k_B$  ثابت بولتزمان. (تم التعبير عن درجة الحرارة ككمية لا بعدية - بدون وحدات- من خلال  $\frac{k_B T_c}{J}$ ).  
يمكن تحديد العديد من المتغيرات المثيرة للاهتمام لنموذج (Ising). الأول هو متوسط المغناطيسية لكل دورة والذي يعطى بالمعادلة (3):

$$m = \frac{1}{N^2} \sum_i s_i \quad (3)$$

حيث  $m$  هي المغنطة،  $N$  هو عدد الدورات و  $s_i$  هي قيمة الدوران.

يعبر  $s_i$  عن الرقم الكومومي المغناطيسي  $m$  الذي يشير إلى الاتجاه الفضائي لمدار الإلكترون حول النواة في الذرة. ويمكن أن يأخذ القيم الصحيحة والنصفية. وتعني القيمة الصحيحة 1- أن الإلكترون يدور في مدار حول النواة في اتجاه معاكس لاتجاه مجال مغناطيسي خارجي، في حين يشير الرقم 1/2- إلى أن الإلكترون يدور في مدار بزاوية 45 درجة بين الاتجاه المعاكس للمجال المغناطيسي والاتجاه العمودي على المجال المغناطيسي.

$$w_{xx'} = \begin{cases} 1/N^2 & \text{مختلفين بدوران واحد} \\ 0 & \text{ما عدا ذلك} \end{cases} \quad (13)$$

في الكود المستخدم بالنظام ، يتم تنفيذ هذا ضمناً بطريقتين. أولاً ، عن طريق الاختيار العشوائي (من توزيع منتظم) الأحداثيات  $(i, j)$  للدوران الفردي المراد قلبه للحالة المحتملة التالية. ثانياً ، يتم التأكد من أنه في كل خطوة زمنية يتم اتخاذها ، يتم اختبار  $N^2$  من الحالات الجديدة الممكنة من خلال السلسلة ، والتي تمثل "مسحاً" كاملاً للمصفوفة وتقليب كل دوران مرة واحدة ، وسطياً.

يمكن تحديد احتمالية القبول في المعادلة (14) على النحو التالي:

$$A_{xx'} = \begin{cases} 1 & \text{if } p(x') \geq p(x) \\ p(x')/p(x) & \text{if } p(x') < p(x) \end{cases} \quad (14)$$

هناك تفسير مادي إضافي لهذه النتيجة. في سياق الفيزياء الإحصائية مع العلم أن:

$$p(x) \propto e^{-\beta H(x)} \quad (15)$$

حيث  $H$  هو نظام هاميلتوني.

هذا يعني أنه بالنسبة لدرجة حرارة معينة ، يمكن بدلاً من ذلك مقارنة طاقات الأنظمة للعثور على  $A$  المعادلة (16):

$$A_{xx'} = \begin{cases} 1 & \text{if } H(x') \leq H(x) \\ e^{-\beta \Delta E} & \text{if } H(x') > H(x) \end{cases} \quad (16)$$

بمعنى ، إذا كانت طاقة الحالة الجديدة المقترحة أقل من طاقة الحالة الحالية ، فسيحدث الانتقال. إذا كان أكبر ، فقد يحدث الانتقال اعتماداً على حجم الزيادة ودرجة حرارة النظام. عند  $T$  أعلى ، ترتفع احتمالية الانتقال. يتناسب هذا تماماً مع حدسنا المادي: تميل الأنظمة عموماً إلى حالات الطاقة المنخفضة ، لكن درجات الحرارة المرتفعة يمكن أن تمنعها من القيام بذلك. هذا مهم أيضاً من حيث تنفيذ الكود المستخدم بالنظام. حساب  $\Delta E$  أسهل من مقارنة الاحتمالات. أيضاً باستخدام  $\Delta E$  بدلاً من هاميلتونيان الفردي ، يحفظ الذاكرة ويمنع الفائض عند حساب  $A$  ، حيث:  $\Delta E$  هي الفرق بين طاقة الحالة الجديدة المقترحة وطاقة الحالة الحالية.

بهذا ، تعمل خطوة واحدة من خوارزمية (Metropolis) لنموذج (Ising) المستخدم بالنظام على النحو التالي:

1. إنشاء مجموعة نظام أولية من  $N \times N$  دوران لتكون الحالة الحالية  $x$ . حساب وحفظ طاقتها.

2. اختيار دوران عشوائي للقلب. الحالة القادمة  $x'$  ، هي ببساطة  $x$  ولكن مع هذا الدوران الذي يشير إلى الاتجاه المعاكس.

3. حساب طاقة الحالة المقترحة ، ومقارنة بين طاقات  $x$  و  $x'$  وحساب  $A$  وفقاً للمعادلة 15. قبول أو رفض الانتقال من  $x$  إلى  $x'$  مع الاحتمالات الخاصة  $A$  و  $1 - A$ . إذا تم القبول ، تعيين  $x = x'$ .

4. تكرار الخطوتين 2 و 3 بإجمالي  $N^2$  مرة ، تمثل "عملية مسح" واحدة لمصفوفة النظام.

يتم إجراء ذلك لعدد من الخطوات الزمنية التي يدخلها المستخدم في الكود.

### 5.1.2 الشروط الأولية

عند تحليل نموذج (Ising) المستخدم بالنظام ، يجب التأكد من ذلك فقط بعد وصول النظام إلى حالة التوازن الحراري. من الناحية العملية ، يجب الانتظار

بالطبع ، في حالة الميكانيكا الإحصائية ، تبدو التكمالات التي نتطلع إلى حلها مبنية في المعادلة (7):

$$\int A(x) e^{-\beta H(x)} dx \quad (7)$$

حيث  $\beta = 1/k_B T$  و  $H$  هاميلتوني النظام [10]. والتابع  $A(x) e^{-\beta H(x)}$  بلغ ذروته بشكل حاد للغاية ، مما يجعل أخذ العينات على توزيع منتظم غير فعال للغاية. بدلاً من ذلك ، يتم تحديد التوزيع الاحتمالي ليكون  $p(x) \propto e^{-\beta H(x)}$  ويتم الحل بالمثل. كما هو موضح في المعادلة (8):

$$\int A(x) p(x) dx \approx \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N A(x_i) \quad (8)$$

من الناحية الحسابية ، للتأكد من اختيار توزيع احتمالي مماثل ، يتم تنفيذ تكامل مونت كارلو المستخدم بالنظام باستخدام خوارزمية (Metropolis).

### 5.1.1 خوارزمية (Metropolis)

تعمل خوارزمية (Metropolis) باستخدام سلسلة Markov لحالات النظام المختلفة الممكنة  $\{x_i\}$  ، حيث احتمالية وجود حالة جديدة  $x'$  تعتمد فقط على الحالة الحالية  $x$ . احتمالية وجود كل حالة في السلسلة عند رقم الخطوة  $i$  يمكن حسابها بالمعادلة (9):

$$p(x, i+1) = p(x, i) - \sum_{i=1}^N p(x, i) T(x \rightarrow x') + \sum_{i=1}^N p(x', i) T(x' \rightarrow x) \quad (9)$$

حيث  $T(x \rightarrow x')$  احتمالية الانتقال من  $x$  إلى الحالة التالية الممكنة المعطاة  $x'$ . في حالة المحاكاة المستخدمة ، ينظر إلى النظام عندما يكون في حالة توازن حراري. في هذه الحالة ، توزيع الاحتمالات لحالة معينة  $x$  يجب أن تكون ثابتة ، لذلك  $p(x, i+1) = p(x, i)$ . في هذه الحالة ، المعادلة (9) تصبح كما هو مبين في المعادلة (10):

$$\sum_{i=1}^N p(x, i) T(x \rightarrow x') = \sum_{i=1}^N p(x', i) T(x' \rightarrow x) \quad (10)$$

للتبسيط وبما أن المجموعين بالنسبة لنفس الحالة فإن حدود كل مجموع تكون متساوية ، نطلب موازنة تفصيلية كما هو مبين في المعادلة (11):

$$p(x, i) T(x \rightarrow x') = p(x', i) T(x' \rightarrow x) \quad (11)$$

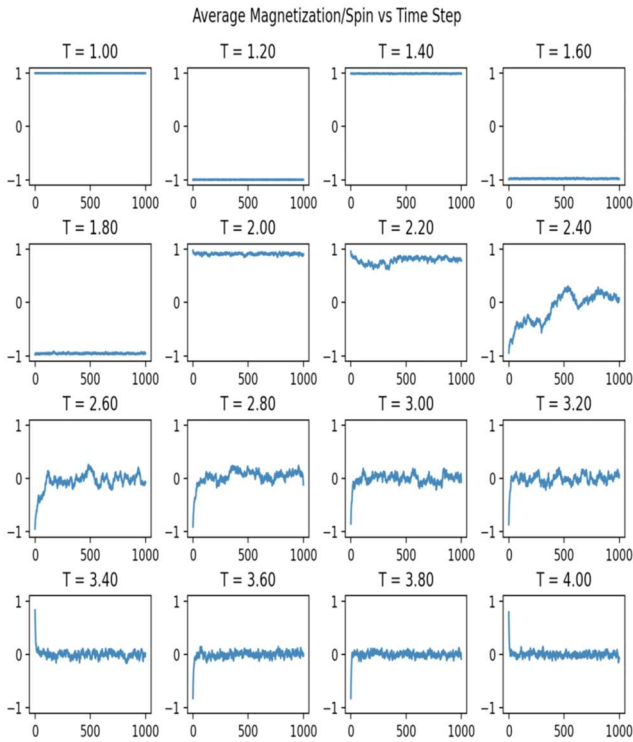
احتمالية الانتقال  $T$  ، هي عبارة عن جداء عاملين المعادلة (12):

$$T(x \rightarrow x') = w_{xx'} \times A_{xx'} \quad (12)$$

$A_{xx'}$  هو احتمالية أن  $x'$  هي "مقبولة" كحالة جديدة ، على أساس  $x$  و  $w_{xx'}$  هو احتمالية أن  $x'$  هي (أو يمكن أن تكون) الحالة المقترحة التالية.

من الضروري أن تكون هذه القيمة متناظرة ، على هذا النحو  $w_{xx'} = w_{x'x}$  . في هذه الحالة ، لتبسيط نموذج (Ising) المستخدم بالنظام ، يتم اختيار فرض أنه لا يمكن أن ينقلب دورانان في نفس الوقت ، لذلك فإن كل حالة نظام ممكنة جديدة هي ببساطة الحالة الحالية مع انعكاس دوران واحد. هذا يعني أن هناك  $N \times N$  من الحالات التالية الصالحة ، لكل منها احتمالية متساوية.

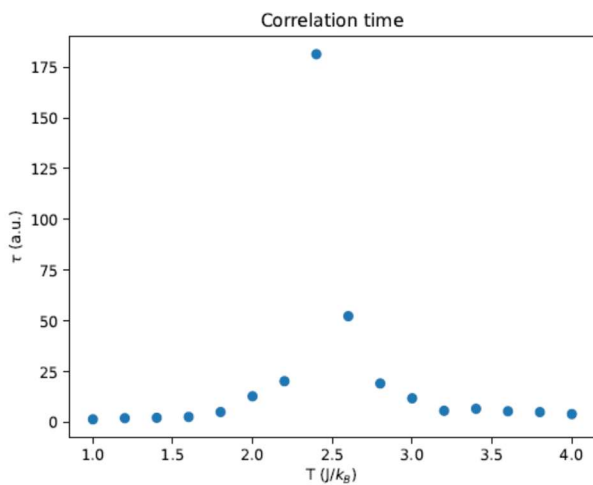
**الشكل 1:** مثال تشغيل لتبرير الإعداد المسبق للشروط الأولية للتوازن الحراري.



**الشكل 2:** مثال تشغيل لاختبار الشروط الأولية ، هذه المرة بدء تشغيل جميع النماذج في حال الكل للأعلى أو للأسفل.

## 6. النتائج

توضح الأشكال التالية نتائج محاكاة 2500 دوران في شبكة مربعة في غياب المجال المغناطيسي. يوضح الشكل (3) أوقات الارتباط لدرجات الحرارة المختلفة (وبما أن الخوارزمية المستخدمة هي خوارزمية إحصائية لذلك فإن الأشكال متقطعة وغير مستمرة). يوضح الرسم البياني قيمة واضحة حول درجة حرارة  $2.4 J/k_B$ .



**الشكل 3:** زمن الارتباط (بوحدة عشوائية) كدالة لدرجة الحرارة

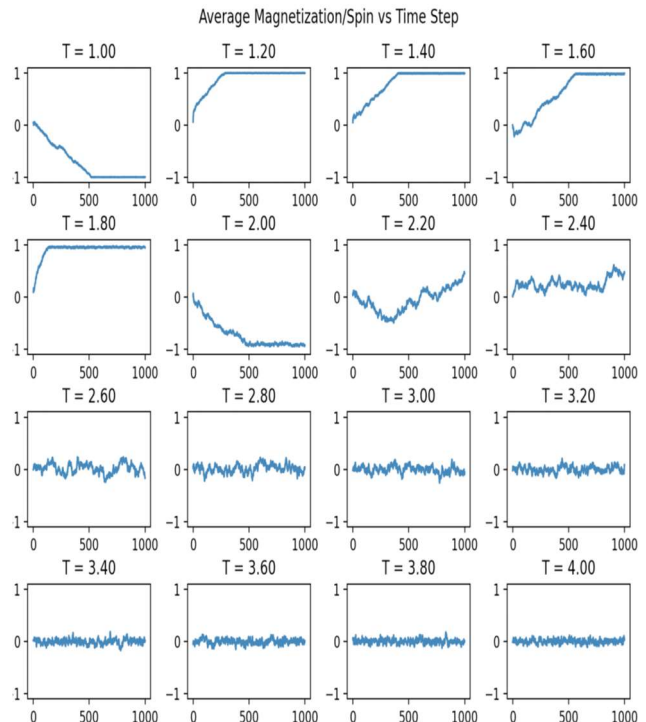
يظهر متوسط المغنطة لكل لفة في الشكل 4. تم أخذ قيمة المغنطة المطلقة، حيث لا يوجد اتجاه مفضل للدورات لتتوافق معه. وبالتالي فإن القيمتين -1

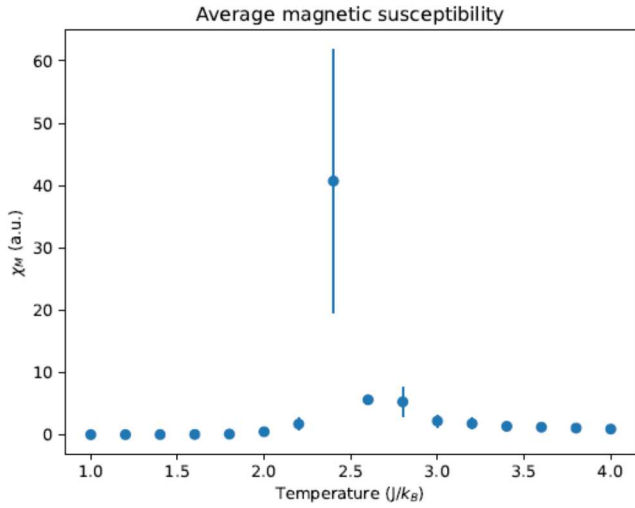
حتى يصل متوسط المغناطيسية لكل دوران (AMS) في النموذج إلى قيمة ثابتة بشكل عام [4]. ومع ذلك، يمكن أيضاً استخدام الحدس المادي (الذي تم تأكيده بالاختبار) لتحديد الشروط الأولية مثل أن يبدأ النموذج في التوازن الحراري. من المعلوم أن نموذج (Ising) يحتوي على درجة حرارة حرجة معينة ( $T_c$ ) حيث يتغير السلوك عند التوازن الحراري. تحت درجة الحرارة الحرجة هذه ، سيميل النموذج نحو الحالة التي تشير فيها جميع الدورات في نفس الاتجاه ( $AMS = 1, -1$ ) فوق درجة الحرارة هذه ، سيميل النموذج إلى حالة عشوائية حيث  $AMS \approx 0$ . وأيضاً من النظرية [1] أنه بالنسبة لنموذج (Ising) ثنائي الأبعاد ، لانهاية الشبكة ،  $T_c \approx 2.269$ . وهذا يعني ، من حيث المبدأ ، إذا بدأت النماذج ب  $T < T_c$  حيث الكل للأعلى أو للأسفل ، والنماذج ذات  $T > T_c$  مع قيم أولية موزعة عشوائياً ، ستبدأ في حالة توازن حراري ، ويمكن إجراء التحليل من البداية.

لاختبار ذلك، يتم تشغيل نماذج (Ising) بشكل متكرر في درجات حرارة مختلفة بشروط أولية عشوائية. عند القيام بذلك ، يكون مقياس الدعم الكلي للنماذج في درجات حرارة أقل من  $T_c$  انتقل بشكل عام إلى 1 أو -1 (الشكل 1). هناك عدد قليل من الحالات التي لا تنقلب فيها نماذج درجات الحرارة المنخفضة سريعاً إلى أعلى أو أسفل، ولكن يمكن تفسير هذه الحالات بالطريقة التي تتقدم بها سلسلة ماركوف عبر الحالات. ومن المتوقع أن يؤدي "السحب" غير المحظوظ للظروف الأولية إلى إظهار هذا السلوك ، خاصة عند درجات الحرارة القريبة من  $T_c$ . يصبح هذا في الواقع دليلاً إضافياً لدعم فرض الظروف الأولية للنظام على التوازن الحراري، حيث قد يستغرق الأمر وقتاً طويلاً للوصول إلى هذه النقطة، ويصبح مضيقاً للوقت والطاقة وقوة الحوسبة.

يمكن تكرار هذا الاختبار من خلال بدء تشغيل جميع النماذج إما في وضع أعلى أو أسفل، ويظهر السلوك المعاكس: تظل جميع نماذج درجات الحرارة المنخفضة تقريباً في نفس مقياس الدعم الكلي AMS، بينما تميل نماذج درجات الحرارة المرتفعة نحو 0 (الشكل 2).

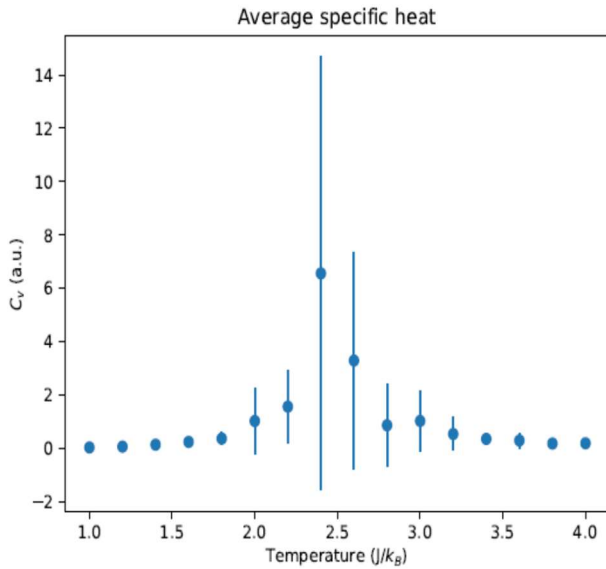
بعد الانتهاء من هذه الاختبارات ، يتم إضافة متغير  $T_{crit}$  في الكود. حيث هي درجة الحرارة الحرجة المتوقعة، والافتراضيات إلى 2.269. بالنسبة لنماذج الإدخال، إذا كانت درجة حرارة النموذج أقل من هذه القيمة، يتم تهيئة المصفوفة على  $\pm 1$ ، إذا كانت أكثر من هذه القيمة، فسيأخذ كل دوران قيمة بشكل عشوائي  $\pm 1$  وفقاً لتوزيع موحد.





الشكل 6: متوسط القابلية المغناطيسية كدالة لدرجة الحرارة.

أخيراً، يوضح الشكل 7 الحرارة النوعية. يوضح هذا الرسم البياني ذروة عند  $T = 2.4 J/k_B$  أيضاً. على غرار الشكل 6، تحتوي نقطة البيانات هذه على خطأ كبير جداً كذلك. هذا يرجع على الأرجح إلى نفس السبب.



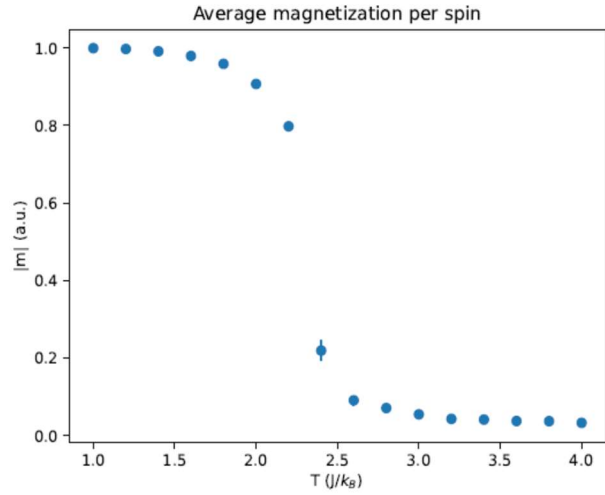
الشكل 7: متوسط الحرارة النوعية كدالة لدرجة الحرارة.

مما سبق يمكن استنتاج أن درجة الحرارة الحرجة تقع بين  $T = 2.2$  و  $T = 2.4 J/k_B$  وهي قريبة من القيمة النظرية لـ 2.269.

### 6.1 تأثير المجال المغناطيسي

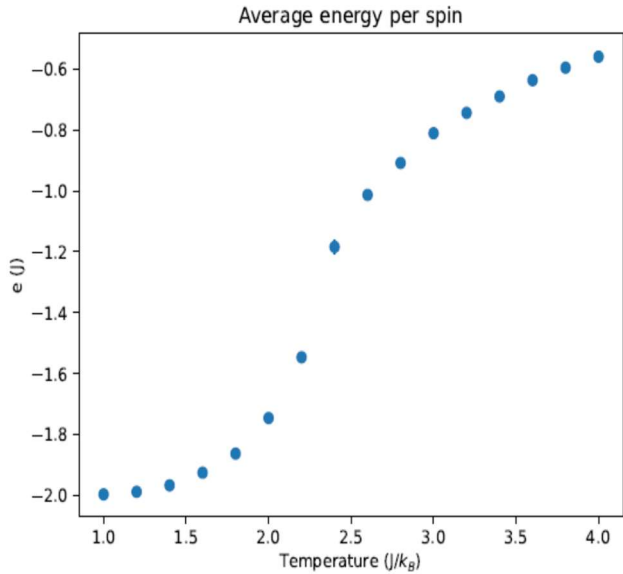
يوضح الشكل 8 مغنطة نظام الدوران لقوى المجال المغناطيسي المختلفة. من الواضح أنه عند شدة المجال المغناطيسي العالية، تتم محاذاة الدورات مع اتجاه الحقل، بغض النظر عن درجة حرارة النظام، كما هو متوقع. حول  $H = 0$ ، اتجاه المجال وبالتالي إشارة المغنطة تتغير. لدرجات حرارة أقل من درجة الحرارة الحرجة، هذا التغيير مفاجئ أكثر من درجات الحرارة فوق درجة الحرارة الحرجة.

و 1 متساويتان. توضح الأشكال أن المغنطة هي 1 لدرجات الحرارة المنخفضة. بعد  $T = 2.2$  المغنطة تنخفض بسرعة إلى 0 كما هو متوقع.



الشكل 4: متوسط المغنطة لكل دوران (بوحدة عشوائية) كدالة لدرجة الحرارة.

في الشكل 5، يظهر متوسط الطاقة لكل دورة. لدرجات الحرارة المنخفضة الطاقة هي -2.0 وهو ما يتوافق مع الحالة التي جميع الدورات مزاحة بنفس الاتجاه. لدرجات الحرارة المرتفعة، تذهب الطاقة إلى -0.6 كما هو متوقع بالنسبة للحالة العشوائية. سننظر بعض الدورات محاذاة، مما يفسر قيمة الطاقة.



الشكل 5: متوسط الطاقة لكل دورة (بوحدة J، طاقة التفاعل) كدالة لدرجات الحرارة.

يوضح الشكل 6 القابلية المغناطيسية كدالة لدرجة الحرارة. تظهر الحساسية المغناطيسية أيضاً ذروة عند  $T = 2.4 J/k_B$ . ومع ذلك، يوجد خطأ كبير جداً لنقطة البيانات هذه. من المحتمل أن يكون هذا بسبب حقيقة أن وقت الارتباط يصبح كبيراً جداً لدرجة الحرارة هذه. نتيجة لذلك، هناك عدد قليل من نقاط البيانات التي يجب تجاوزها في المتوسط بالنسبة لدرجة الحرارة هذه، مما يتسبب في تقلبات كبيرة وبالتالي انحراف معياري كبير.

لمقدار طاقة النظام التي يجب زيادتها لتعكس زيادة في درجة الحرارة. يظهر الشكل 5، أنه حول درجة الحرارة الحرجة، يكون التغير في الطاقة لتغير معين في درجة الحرارة أكبر بشكل واضح. يجب أن يشير هذا (ويُفعل) إلى حرارة محددة أعلى لنظام عند درجة الحرارة هذه. بينما تتفق النتائج مع الأبحاث السابقة، فإن أحد العيوب الملحوظة هو الأخطاء الكبيرة في القابلية المغناطيسية والسعة الحرارية بالقرب من النقطة الحرجة. يرجع هذا على الأرجح إلى حقيقة أن زمن الارتباط طويل جداً مقارنة بوقت المحاكاة. لذلك، ستكون الخطوة التالية المفيدة هي جعل الخوارزمية المستخدمة أكثر كفاءة بحيث تكون المحاكاة بخطوات زمنية أكثر دون أن تستغرق الكثير من الوقت.

أخيراً، تم النظر إلى تأثير المجال المغناطيسي على هذا النظام. عند القيام بذلك، تمت مقارنة المغنطة لكل دوران مقابل عدد من شدة المجال المغناطيسي (الشكل 8) لعدد من درجات الحرارة. تظهر المخططات أنه في جميع درجات الحرارة، تتم محاذاة النظام عموماً في اتجاه المجال المغناطيسي. بالنسبة لدرجات الحرارة الصغيرة، تكون هذه المحاذاة قوية حتى عند القيم الصغيرة لـ  $H$ . لدرجات الحرارة المرتفعة تكون منخفضة نسبياً  $\pm 1$ ، قيم  $H$  لا تحفز على محاذاة قوية. هذا متوقع بشكل عام، كما في حالة  $H = 0$ ، حيث عند درجة حرارة مرتفعة ( $T > T_c$ ) لا يتم محاذاة الأنظمة في أي من الاتجاهين. ومع ذلك، فإن تأثير المجال المغناطيسي يؤدي عموماً إلى محاذاة النظام (حتى عند  $T$  أعلى). يمكن تفسير ذلك على أنه زيادة فعالة في درجة الحرارة الحرجة، حيث تُعرف درجة الحرارة الحرجة بدرجات الحرارة التي ينتقل عندها النظام من المحاذاة عند التوازن الحراري إلى كونها عشوائية عند التوازن الحراري. يمكن العثور على نتائج مماثلة في [11].

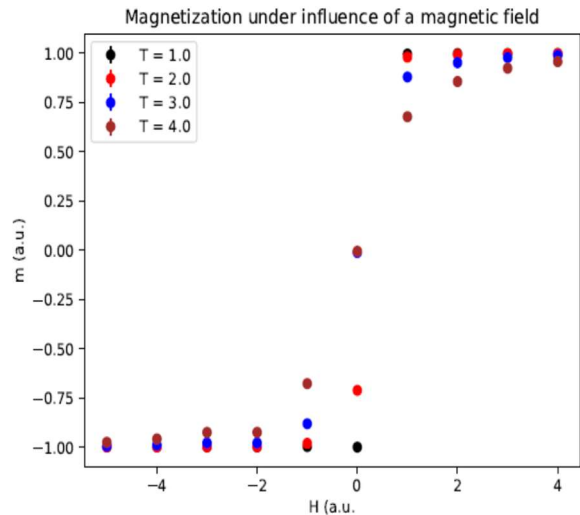
## 7.2 التوصيات

أظهرت النتائج أن زمن الارتباط طويل جداً مقارنة بوقت المحاكاة، لذلك يجب البحث عن خوارزمية أفضل من حيث زمن التنفيذ.

بعد اختبار نتائج هذه الخوارزمية ومقارنتها مع نتائج أبحاث سابقة، من الممكن تطبيق هذه الخوارزمية على المواد النانوية لدراسة خواصها بدلاً من دخولها المخبر.

## المصادر

- [1] Alexandrou, Constantia et al. "The critical temperature of the 2D-Ising model through deep learning autoencoders". In: The European Physical Journal B 93.12 (2020).
- [2] A. Tanaka, A. Tomiya, "Detection of Phase Transition via Convolutional Neural Networks", Journal of the Physical Society of Japan 86, 063001. (2017)
- [3] Cosme, C. Martins. "Monte Carlo methods in critical systems". In: (2014).
- [4] Ferromagnetism Lab Script. Oxford Physics Practical Course, 2018.
- [5] J. Kotze, "Introduction to Monte Carlo methods for an Ising Model of a Ferromagnet". 2008.
- [6] J.Linares, C.Cazelles, P.R.Dahoo, D.Sohier, T.Dufaud, K.Boukheddaden, "Shape, size, pressure and matrix effects on 2D spin crossover nanomaterials studied using density of states obtained by dynamic programming". Computational Materials Science 187 (2021).
- [7] K.L.Shi, Z.Wang, and W.Jiang, "Monte Carlo simulation of magnetic and thermodynamic properties of hexagonal decorated nanoparticle in a magnetic field". J Mater Sci (2023).



الشكل 8: المغنطة لكل دوران ( $m$ ) مرسومة مقابل شدة المجال المغناطيسي ( $H$ ) لدرجات حرارة مختلفة.

تُظهر منحنيات درجات الحرارة الأقل من درجة الحرارة الحرجة (كما هو موضح في القسم السابق) انتقالاً أكثر حدة عند  $H = 0$  من منحنيات درجات الحرارة فوق درجة الحرارة الحرجة.

## 7. الاستنتاجات والتوصيات

### 7.1 الاستنتاجات

لقد تمت محاكاة نظام نموذج ثنائي الأبعاد بشروط حدية دورية. تعكس النتائج ما هو متوقع بخلاف ذلك من هذا النظام، ومؤشرات درجة الحرارة الحرجة تتماشى مع ما هو موجود في الأدبيات ( $T_c \approx 2.269$ ).

أولاً، يبلغ زمن ارتباط المغنطة (الشكل 3) ذروته بين 2.2 و 2.6. الذروة حادة ومميزة. من المعلوم أنه بالقرب من درجة الحرارة الحرجة، يكون متوسط المغنطة لكل دوران أكثر فوضوية. على هذا النحو، من المتوقع أن يستغرق النظام وقتاً أطول حتى يصبح غير مرتبط في درجات الحرارة هذه.

ثانياً، بالنسبة لمتوسط المغنطة لكل دوران، ومتوسط الطاقة لكل دوران، والحساسية المغناطيسية، والحرارة النوعية، يمكن مقارنة المخططات التي تم الحصول عليها بتلك الموجودة في [3]. في [3] تم رسم هذه القيم باستخدام  $\beta$  على المحور  $X$ ، وليس درجة الحرارة، لذلك تنقلب المخططات مقارنة بمخططات البحث. ومع ذلك، لا يزال من الممكن إجراء المقارنة. تظهر النتائج (الشكل 4) و [3] أنه من أجل  $T$  منخفضة ( $\beta$  مرتفع)، فإن المتوسط المطلق للمغنطة لكل لفة يقترب من 1، بينما من أجل  $T$  مرتفعة، ينخفض إلى الصفر. كما أن الانخفاض مفاجئ للغاية، حيث يحدث بالقرب من درجة الحرارة الحرجة المتوقعة.

بالنسبة لمتوسط الطاقة لكل دوران (الشكل 5)، الطاقة تبدأ منخفضة عند انخفاض  $T$  وتزداد مع  $T$ . بشكل عام، هذا النمط منطقي: في الميكانيكا الإحصائية، من الواضح أنه يتم توقع أنظمة درجات الحرارة المرتفعة بمتوسط طاقة أكبر. الزيادة في متوسط الطاقة ليست خطية، مع التغير في الطاقة لكل دورة تدور حول درجة الحرارة الحرجة. يمكن رؤية الشيء نفسه في [3].

تُظهر الحساسية المغناطيسية (الشكل 6) والحرارة النوعية (الشكل 7) أنماطاً متشابهة مع قيم صغيرة إلى حد ما وموحدة بعيدة عن  $T_c$ ، مع ارتفاع كبير في  $T_c$  وحولها. يتماشى هذا مرة أخرى مع ما وجدناه في [3]. بالإضافة إلى ذلك، فإن النظر إلى مخطط متوسط الطاقة لكل دوران (الشكل 5) يؤكد أن هذا يجب أن يكون ما تم توقعه للحرارة المحددة. الحرارة النوعية هي مقياس

- [10] N. J. Giordano, H. Nakanishi, "Computational Physics". Prentice-Hall, 2006.
- [11] Singh, S. Pal. "First observations of entropy vs free energy for lattice based Ising model for spin coarsening in conserved and non-conserved binary mixtures: a phenomenological study of phase transitions in 2D thin films". In:6.6 (2015).
- [12] S. J. Blundell, K. M. Blundell, "Concepts in Thermal Physics". Oxford Univ. Press, 2010.
- [13] Swendsen, R.H. "An introduction to statistical mechanics and thermodynamics". Oxford University Press, 2012.
- [8] M.A.E.Abdullah, K.Alanazie, H.M.Abo-Diefe, I.B.Mansirf, V.Tirthc, F.Gamaoung, "Applying Bayesian Markov chain Monte Carlo (MCMC) modeling to predict the melting behavior of phase change materials" E Laboratory of Mechanics of Sousse, National Engineering School of Sousse, University of Sousse, Sousse 4054, Tunisia(2021).
- [9] M.Gharaibeh, M.H.A. Badarneh, S.Alqaiem, A.Obeidat, M.Qaseer, "Magnetic properties and phase diagrams of mixed spin-1 and spin-1/2 Ising model on a checkerboard square structure: A Monte Carlo study". Journal of Magnetism and Magnetic Materials 540 (2021).

## Studying the Magnetic properties of Ferromagnetic Lattice using Ising Model

*Mohammad Alshimali<sup>1</sup> \* and Majdeddin Ali<sup>2</sup>*

<sup>1</sup> Department of Electronic and Communications Engineering, Faculty of Mechanical and Electrical Engineering, Al-Baath University, Syria. engms989@gmail.com

<sup>2</sup> Department of Electronic and Communications Engineering ,Faculty of Mechanical and Electrical Engineering ,Al-Baath University, Syria, majd\_ali@hotmail.com

\*Corresponding author: Mohammad Alshimali, engms989@gmail.com

Published online: 30 September 2024

**Abstract:** In this research, the 2-dimensional Ising system was studied using a Monte-Carlo simulation based on the Metropolis Algorithm. A system of 2500 spins in a square lattice was simulated at varying temperatures and magnetic fields to obtain the critical temperature. Furthermore, the magnetisation and energy per spin and specific heat and magnetic susceptibility were determined as function of temperature. Lastly, the effect of a magnetic field on the magnetisation of the system was studied. The magnetisation correlation time peaked between 2.2 and 2.6. The system is expected to take a longer time to become uncorrelated at these temperatures. The results also proved that for low T, the absolute average magnetisation per spin is near 1, while for high T, it drops down to zero. Also, the drop is very abrupt, occurring around the expected critical temperature. For the average energy per spin, we see the energy starts out low for low T and increases with T. The magnetic susceptibility and specific heat show similar patterns with fairly small, uniform values far from T<sub>c</sub>, with a large spike at and around T<sub>c</sub>.

**Abstract- Keywords** — " Ising system - Monte-Carlo simulation - Metropolis Algorithm - specific heat - magnetic susceptibility "