

1D ISINGOV MODEL I MATRICA TRANSFERA

Glumac, Margareta

Undergraduate thesis / Završni rad

2020

Degree Grantor / Ustanova koja je dodijelila akademski / stručni stupanj: **Josip Juraj Strossmayer University of Osijek, Department of Physics / Sveučilište Josipa Jurja Strossmayera u Osijeku, Odjel za fiziku**

Permanent link / Trajna poveznica: <https://um.nsk.hr/um:nbn:hr:160:682876>

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

Download date / Datum preuzimanja: **2024-11-30**



Repository / Repozitorij:

[Repository of Department of Physics in Osijek](#)



SVEUČILIŠTE JOSIPA JURJA STROSSMAYERA U OSIJEKU
ODJEL ZA FIZIKU



Margareta Glumac

1D Isingov model i matrica transfera

Završni rad

Osijek, 2020.

SVEUČILIŠTE JOSIPA JURJA STROSSMAYERA U OSIJEKU
ODJEL ZA FIZIKU



Margareta Glumac

1D Isingov model i matrica transfera

Završni rad

Predložen Odjelu za fiziku Sveučilišta Josipa Jurja Strossmayera u Osijeku
radi stjecanja zvanja prvostupnice fizike

Osijek, 2020.

Ovaj završni rad je izrađen u Osijeku pod vodstvom doc. dr. sc. Denisa Stanića u sklopu Sveučilišnog preddiplomskog studija fizike na Odjelu za fiziku Sveučilišta Josipa Jurja Strossmayera u Osijeku.

1D Isingov model i matrica transfera

Margareta Glumac

Sažetak

Isingov jednodimenzijski model je model čiji su sastavni elementi magnetski momenti spina $\pm 1/2$. Spinovi međudjeluju silama kratkog dosega ograničenog samo na prve susjede. Particijska funkcija ovog modela računa se pomoću matrice transfera (odjeljak 4.1). Iz poznate particijske funkcije lako se računa slobodna energija, magnetizacija i ostale termodinamičke funkcije. Za magnetizaciju se pokazuje da je analitička funkcija temperature za sve $T > 0$, što ukazuje da u ovom Isingovom modelu ne postoji fazni prijelaz za $T > 0$.

Rad je pohranjen u knjižnici Odjela za fiziku

Ključne riječi: Isingov model / matrica transfera / particijska funkcija / fazni prijelazi

Mentor: doc. dr. sc. Denis Stanić

Ocjenjivači:

Rad prihvaćen:

1D Ising model and transfer matrix

Margareta Glumac

Abstract

Ising's one-dimensional model is a model whose constituent elements are magnetic moments of spin $\pm 1/2$. Spins interact with short-range forces limited only to the first neighbours. The partition function of this model is easy to calculate using transfer matrix (section 4.1). From the known partition function, free energy, magnetization and other thermodynamic functions can be easily obtained. It shows that the magnetization is analytical function of the temperature for all $T > 0$, which shows that in this Ising model, there is no phase transition for $T > 0$.

Thesis deposited in Department of Physics library

Keywords: Ising model / transfer matrix / partition function / phase transitions

Supervisor: Denis Stanić, Ph.D.

Reviewers:

Thesis accepted:

Sadržaj

1	Uvod	5
2	Particijska funkcija i slobodna energija	6
2.1	Lagrangeovi množitelji	7
2.2	Sačuvane veličine	8
2.3	Statistički ansambl	8
2.4	Particijska funkcija	8
2.5	Termodinamički potencijali	9
3	Fazni prijelazi	10
3.1	Fazni prijelazi prvog i drugog reda	10
3.2	Korelacijska duljina	11
3.3	Kritični eksponenti	12
4	Definicija Isingovog modela	13
4.1	1D Isingov model - egzaktni izvod pomoću matrice transfera	13
4.2	Slobodna energija i magnetizacija	16
4.3	Korelacijska funkcija	17
5	Zaključak	20
6	Popis literature	21

Popis slika

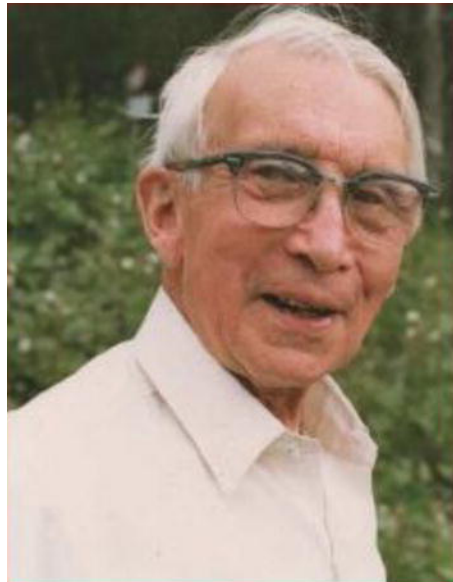
1	Ernst (Ernest) Ising (10. svibnja, 1900. - 11. svibnja, 1998.) [2]	5
2	Nasumično okretanje magnetskih momenata u 1D sustavu. [2]	5
3	Razvrstavanje N_s sustava u q stanja. [1]	6
4	Lagrangeov množitelj. [1]	7
5	Spinsko uređenje. [1]	10
6	Ponašanje F , M i χ_T u blizini kritične točke T_c ovisno o H . [1]	10
7	Ponašanje H , M i χ_T u blizini kritične točke T_c ovisno o T . [1]	11
8	Važnost predznaka konstante vezanja J . [1]	13
9	1D Isingov model; periodični rubni uvjeti $S_0 = S_N$. [1]	14
10	Graf magnetizacije m u ovisnosti o magnetskom polju h za različite vrijednosti temperature T (lijevo) [5] i za različite vrijednosti umnoška βJ (desno) [4].	17
11	Korelacijska funkcija u ovisnosti o razmaku r uz $\beta J = 1$. [4]	19
12	Korelacijska duljina kao funkcija T/J . [4]	19

Popis tablica

1	Kritični eksponenti za različite modele.	12
---	--	----

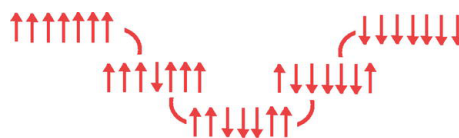
1 Uvod

Ernest Ising (slika 1.) rođen je 10. svibnja 1900. godine, osnovnu školu je započeo 1907., a gimnaziju završio 1918. godine. Nakon kratkog odlaska na vojnu obuku, nastavio je školovanje na Sveučilištu u Göttingenu gdje je studirao fiziku i matematiku. Uz preporuku i mentorstvo profesora W. Lenza, počeo je proučavati feromagnetizam 1922. godine, a već 1925. je objavio i doktorski rad u kojem je egzaktno izračunao particijsku funkciju za jednodimenzijski lanac spinova. Ising je prvi pokazao na primjeru 1D modela da se fazni



Slika 1: Ernst (Ernest) Ising (10. svibnja, 1900. - 11. svibnja, 1998.) [2]

prijelaz u feromagnetsko uređeno stanje *ne* događa u jednoj dimenziji za $T > 0$. Objašnjenje za to je sljedeće: pretpostavimo da ako jedan od magnetskih momenata u cijelom nizu momenata, promjeni svoj smjer u neki nasumični zbog termalnog pobuđenja, a pošto nema raspoložive sile koja može zaustaviti susjedne spinove da se okreću u istom smjeru, taj proces će ići dalje i dalje (slika 2.), i potpuno uređeno stanje neće ostati stabilno na konačnoj temperaturi: stoga se pri konačnoj temperaturi neće ni dogoditi fazni prijelaz. U idealnom slučaju, bilo koje uređeno stanje uvijek će ostati poput metastabilnog stanja na konačnoj temperaturi i ništa više. Molekularno gibanje se ukoči na temperaturi apsolutne nule pa se stoga može očekivati da se pri apsolutnoj nuli ne mogu pojaviti fluktuacije spinova. Tada je stabilno uređeno stanje prirodni ishod pri $T = 0K$. Ali, ne može se reći da je to i kritična temperatura u pravom smislu. Postojanje faznog prijelaza pri ovoj temperaturi nema fizičko značenje budući da se radi o apsolutnoj nuli.

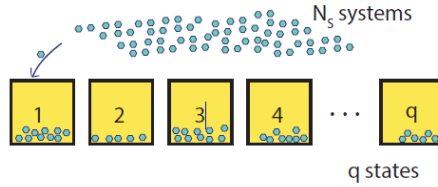


Slika 2: Nasumično okretanje magnetskih momenata u 1D sustavu. [2]

Kako je Wilhelm Lenz bio Isingov mentor, često se Isingov model može naći i pod naslovom Lenz - Isingov model. Lenz je predložio da se dipolarni atomi u kristalima mogu slobodno okretati na kvantizirani način te je zagovarao kvantni pristup dipolskim orijentacijama, iako je Ising u klasičnoj verziji razmatrao samo dva stanja, tj. $S = \pm 1/2$. Ising je o svojim rezultatima razgovarao s profesorom Lenzom i dr. Wolfgangom Paulijem, koji je u to vrijeme predavao u Hamburgu. Isingove radove prvi je citirao Heisenberg koji je među prvima shvatio što bi još trebalo doraditi kada je u pitanju Lenz - Isingov model. Kako bi objasnio feromagnetizam, razvio je vlastitu teoriju, koristeći složene interakcije spinova. Na popisu ima još znanstvenika čiji doprinos Isingovu modelu ovdje treba navesti zbog njihove povijesne važnosti; oni su uvelike obogatili i pridonijeli ovom novom modelu. Na takvom popisu nalaze se znanstvenici poput Gorsky (1928), RH Fowler (1930), Bragg i Williams (1934), R. Peierls (1936), JG Krikwood (1938), Hens Bethe (1939), Kramers i Wannier (1941) i Onsager (1942). Oni su još više proširili Isingov model na novu klasu problema i zapravo pokazali važnost njegova rada. [2]

2 Particijska funkcija i slobodna energija

Temelj statističke fizike leži na pretpostavci da entropija, veličina koja predstavlja nedostatak informacija o ansamblu čestica, mora biti maksimizirana. Promotrimo veliki broj sustava N_s , gdje $N_s \rightarrow \infty$ (termodinamička granica). Svaki od tih sustava može biti u određenom stanju i , a n_i broji koliko je sustava u tom nekom stanju i od mogućih q stanja (slika 3.). Ako bi postojalo samo jedno stanje, onda bi imali sve moguće



Slika 3: Razvrstavanje N_s sustava u q stanja. [1]

informacije i sve bismo znali o sustavu; ako postoji više mogućih stanja, onda moramo mjeriti stupanj našeg 'neznanja' o sustavu, I . I je broj načina na koji možemo preraspodjeliti N_s sustava podijeljeno sa brojem načina na koji možemo preraspodjeliti sustave jednakih stanja (permutacije s ponavljanjem):

$$I \equiv \frac{N_s!}{n_1!n_2!\dots n_q!}. \quad (1)$$

Cilj je naći brojeve n_i takve da je maksimiziran I ili bilo koja monotono rastuća funkcija od I . Umjesto I , iz činjenice da je lakše derivirati zbroj nego umnožak funkcije, zgodno je koristiti entropiju S koja je definirana preko prirodnog logaritma kao:

$$S \sim \frac{1}{N_s} \ln I. \quad (2)$$

U gornjem izrazu koristimo izraz za proporcionalnost, a ne jednakost, da bismo naglasili da postoji sloboda u izboru konstante proporcionalnosti te da je najbitnije uvidjeti da je S rastuća funkcija od I . Izraz (2) je zgodan jer za velike N_s i n_i , možemo iskoristiti Stirlingovu formulu kako bismo prešli sa diskretnih faktoriijela na kontinuirane funkcije:

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \ln N! \approx N \ln N - N. \quad (3)$$

Iskoristimo li sada izraze (1) i (3), entropiju možemo napisati kao:

$$\begin{aligned} S &\sim \frac{1}{N_s} \ln \left(\frac{N_s!}{n_1!n_2!\dots n_q!} \right) \sim \frac{1}{N_s} \left(\ln N_s! - \sum_i \ln n_i! \right) \\ &\sim \frac{1}{N_s} \left(N_s \ln N_s - N_s - \sum_i n_i \ln n_i + \sum_i n_i \right). \end{aligned} \quad (4)$$

Iskoristimo li još i $p_i \equiv n_i/N_s$ odnosno izraz koji nam govori kolika je vjerojatnost da se dani sustav nalazi u stanju i i činjenicu da se sustav mora nalaziti u nekom od tih stanja, $\sum_i p_i = 1$, izraz (4) možemo kraće zapisati kao:

$$\begin{aligned} S &\sim \ln N_s - 1 - \frac{1}{N_s} \sum_i n_i \ln n_i + \frac{1}{N_s} \sum_i n_i \\ &\sim \ln N_s - 1 - \frac{1}{N_s} N_s \sum_i p_i \ln (p_i N_s) + \frac{1}{N_s} N_s \sum_i p_i \\ &\sim \ln N_s - 1 - \sum_i p_i \ln p_i - \sum_i p_i \ln N_s + \sum_i p_i \\ &\sim \ln N_s (1 - \sum_i p_i) - 1 + \sum_i p_i - \sum_i p_i \ln p_i \\ &\sim - \sum_i p_i \ln p_i. \end{aligned} \quad (5)$$

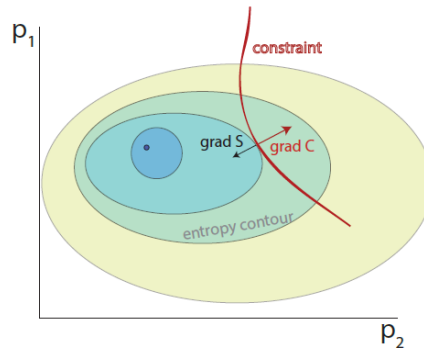
Proporcionalnost nam daje izbor da odaberemo konstantu koju želimo, a za fizikalne sustave ta će konstanta biti $k_B = 1.3806 \cdot 10^{-23} \text{ JK}^{-1}$, tj. Boltzmannova konstanta koja je stavljena u ovu definiciju zato jer entropija mora imati dimenziju energije podijelenu s temperaturom:

$$S = -k_B \sum_i p_i \ln p_i. \quad (6)$$

Ono što se još treba naglasiti promatrajući jednadžbu (4) je sljedeće: ako postoji samo jedno moguće stanje, n_1 , onda $n_1 = N_s$ i entropija S iščezava. Za slučajeve sa više zaposjednutih stanja, $0 \leq p_i < 1, \forall i$ pa slijedi da je entropija uvijek pozitivna. [1]

2.1 Lagrangeovi množitelji

Pojam Lagrangeovih množitelja uvodimo iz razloga što se maksimiziranje entropije najčešće provodi uz određen broj ograničenja. Npr. entropija u jednadžbi (4) je višedimenzijska funkcija vrijednosti p_i . U 2D, njena vrijednost se može vizualizirati kao površina, a gradijent ∇S je vektor koji pokazuje u smjeru najvećeg nagiba vrijednosti entropije (slika 4.). Bilo koje ograničenje, $C(p_1, p_2, \dots) = 0$, je isto tako funkcija od p_i . Maksimiziranje S u odnosu na C znači traženje vrijednosti p_i gdje se gradijenti ∇S i ∇C poklapaju, odnosno: $\nabla S = \lambda \nabla C$; gradijenti se mogu razlikovati za konstantu λ , koju zovemo Lagrangeov množitelj [1]. Možemo gornji izraz i drugačije napisati tako što ćemo ograničenje napisati analogno gradijentu:



Slika 4: Lagrangeov množitelj. [1]

$$\frac{\partial}{\partial \lambda} (S - \lambda C) = 0.$$

Iz takvog izraza, Lagrangeov množitelj λ može se shvatiti i kao dodatna dimenzija sustava. Dodajući tu dimenziju, problem se zapravo pretvara u maksimizacijski problem *bez* ograničenja. U praksi, jedno osnovno ograničenje je uvijek prisutno: ono da svaki sustav mora biti u jednom od dostupnih stanja, tj. ukupna vjerojatnost nalaženja sustava u nekom stanju mora biti jednaka 1:

$$\sum_j p_j = 1 \Rightarrow \sum_j p_j - 1 = 0. \quad (7)$$

U tom slučaju, problem se svodi na deriviranje po stupnjevima slobode sustava sa ubačenim ograničenjem (7):

$$\frac{\partial}{\partial p_i} k_B \left(- \sum_j p_j \ln p_j - \lambda \left[\sum_j p_j - 1 \right] \right) = 0,$$

Gornje jednadžbe daju izraz

$$\ln p_i = -1 - \lambda \Rightarrow p_i = \exp(-1 - \lambda), \quad (8)$$

koji predstavlja jednoliku raspodjelu vjerojatnosti, tj. predstavlja činjenicu da su sva stanja jednako vjerojatna (ako nema još nekakvih dodatnih ograničenja).

2.2 Sačuvane veličine

U prošlom potpoglavlju susreli smo jednu sačuvanu veličinu, ukupnu vjerojatnost, koja govori da svaki sustav mora biti u jednom od dostupnih stanja. Međutim, u velikom broju fizikalnih problema, neke druge veličine mogu biti također sačuvane [1]. Promotrimo ukupnu energiju sustava, E , i dozvolimo svakom mogućem stanju i da poprimi određenu energiju ϵ_i ; tada ograničenje na ukupnu energiju izgleda kao:

$$\sum_j p_j \epsilon_j - E = 0. \quad (9)$$

To dodatno ograničenje sada zahtijeva i jedan dodatni Lagrangeov množitelj, β , pa kompletna jednačba koju trebamo riješiti postaje:

$$\frac{\partial}{\partial p_i} k_B \left(-\sum_j p_j \ln p_j - \lambda \left[\sum_j p_j - 1 \right] - \beta \left[\sum_j p_j \epsilon_j - E \right] \right) = 0.$$

Rješavanje gornje jednačbe daje vjerojatnosti:

$$p_i = \exp(-1 - \lambda - \beta \epsilon_i) \sim \exp(-\beta \epsilon_i). \quad (10)$$

Stoga, vjerojatnost da neko stanje bude okupirano sada eksponencijalno ovisi o energiji tog stanja (Boltzmannova raspodjela). Međutim, novi se množitelj β mora podesiti tako da osigura da ukupna energija sustava bude upravo jednaka E . β često zovemo inverzna temperatura jer se definira kao $\beta = 1/k_B T$. Ako sada kažemo da je i ukupan broj čestica također sačuvan i prateći dosadašnji tok razmišljanja, uvodimo još jedan Lagrangeov množitelj, α , pa i vjerojatnosti iz izraza (10) dobivaju još jedan dodatni član:

$$p_i = \exp(-1 - \lambda - \beta \epsilon_i - \alpha N_i) \sim \exp(-\beta \epsilon_i - \alpha N_i), \quad (11)$$

gdje su N_i brojevi čestica u različitim stanjima i . Za praktične slučajeve, α se često izražava kao $\alpha = -\mu/k_B T$, gdje je μ kemijski potencijal, a T temperatura.

2.3 Statistički ansambl

Ovisno o tome koje fizikalne veličine smijemo varirati, statistička mehanika razlikuje više vrsta statističkih ansambla [1]. Mikrokanonski ansambl podrazumijeva da su i energija sustava i broj čestica fiksirani. Pod fiksirani, mislimo na to da sustav ima specifičnu vrijednost energije i broja čestica, bez ikakvih fluktuacija. Ovakav ansambl podrazumijeva da svako stanje i ima istu energiju i vjerojatnost. Kada gledamo praktično, mikrokanonski ansambl nije veoma realističan zato jer bi skoro svaki eksperimentalni sustav dozvolio nekakvu nesigurnost vezanu uz fluktuacije u energiji. Stoga se težište prebacuje na kanonski ansambl; on dozvoljava da stanja i imaju različite vrijednosti energije, ali zahtijeva da ukupna energija bude jednaka nekoj prosječnoj (očekivanoj) vrijednosti energije, E . Mikrostanja su, u ovakvom ansamblu, okupirana statistički, maksimiziranjem entropije uz ograničenje na ukupnu energiju, kao što smo u prethodnim potpoglavljima raspravljali. Postoji još jedna opcija, a to je velekanonski ansambl, koji ne zahtijeva fiksni broj čestica u svakom stanju, ali uzima u obzir ukupan broj čestica, N , koji se uzima kao dodatno ograničenje.

2.4 Particijska funkcija

Sa vjerojatnostima proporcionalnima $\exp(-\beta \epsilon_i - \alpha N_i)$ i ograničenjem (7), normalizacijska konstanta Z može se definirati na sljedeći način [1]:

$$Z \equiv \sum_i \exp(-\beta \epsilon_i - \alpha N_i), \quad (12)$$

pa su i vjerojatnosti p_i jednake

$$p_i = \frac{1}{Z} \exp(-\beta \epsilon_i - \alpha N_i). \quad (13)$$

Učestaliji naziv za normalizacijsku konstantu Z jest particijska funkcija i ona je jedna od temeljnih funkcija u statističkoj fizici jer povezuje mikroskopski svijet sa makroskopskim opservablama koje možemo eksperimentalno mjeriti. Npr. izračunamo li particijsku funkciju za neki dani problem, možemo izračunati i prosječnu energiju pomoću same definicije za prosječnu vrijednost neke veličine:

$$\langle E \rangle = \frac{\sum_i \epsilon_i \exp(-\beta \epsilon_i - \alpha N_i)}{Z} = -\frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \beta} = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z = k_B T^2 \frac{\partial}{\partial T} \ln Z = F - T \frac{\partial F}{\partial T} \quad (14)$$

ili ukupan broj čestica:

$$\langle N \rangle = \frac{\sum_i N_i \exp(-\beta \epsilon_i - \alpha N_i)}{Z} = -\frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \alpha} = -\frac{\partial}{\partial \alpha} \ln Z = k_B T \frac{\partial}{\partial \mu} \ln Z. \quad (15)$$

U prethodne dvije jednadžbe valja primjetiti da su α i β fiksirani tokom deriviranja. Za očekivati je da je particijska funkcija povezana i sa entropijom; ubacimo li u izraz (6) izraz (13) koji smo logaritmirali, dobivamo:

$$\begin{aligned} S &= -k_B \sum_i p_i \ln p_i = k_B \sum_i p_i (\ln Z + \beta \epsilon_i + \alpha N_i) \\ &= k_B \ln Z \sum_i p_i + k_B \beta \sum_i p_i \epsilon_i + k_B \alpha \sum_i p_i N_i \\ &= k_B \ln Z + \langle E \rangle / T - \mu \langle N \rangle / T. \end{aligned} \quad (16)$$

2.5 Termodinamički potencijali

Logaritmi particijskih funkcija često se zovu termodinamički potencijali ili slobodne energije [1]. Kada je dozvoljena promjena i broja čestica i energije, pripadni potencijal zove se velekanonski (*eng. grand canonical*) potencijal i on se dobije tako što izraz (16) pomnožimo s obje strane sa T :

$$\Omega_{GC} \equiv k_B T \ln Z_{GC} = TS - \langle E \rangle + \mu \langle N \rangle. \quad (17)$$

U kanonskom ansamblu, gdje samo gledamo stanja sa istim brojem čestica, član $\mu \langle N \rangle$ izostaje, a pripadni potencijal zove se Helmholtzova slobodna energija,

$$F \equiv -k_B T \ln Z_C = \langle E \rangle - TS. \quad (18)$$

U mikrokanonskom ansamblu, potencijal je jednostavno entropija, S . Jednom kada znamo particijsku funkciju, opservable možemo računati uzimajući prigodne derivacije, npr. toplinski kapacitet možemo dobiti iz sljedećeg izraza:

$$C_\gamma \equiv \left(\frac{\partial \langle E \rangle}{\partial T} \right)_\gamma = \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial \beta} \frac{d\beta}{dT} = -\frac{1}{k_B T^2} \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial \beta} = \frac{1}{k_B T^2} \frac{\partial^2 \ln Z}{\partial \beta^2}, \quad (19)$$

gdje je γ neka veličina koju držimo konstantnom. Jednom kada znamo slobodnu energiju napisanu u izrazu (18), možemo taj izraz napisati u diferencijalnom obliku i dobiti veličine kao što su npr. entropija ili tlak:

$$\begin{aligned} dF &= d\langle E \rangle - TdS - SdT \\ dF &= TdS - pdV - TdS - SdT \\ dF &= -pdV - SdT \\ S &= -\left(\frac{\partial F}{\partial T} \right)_V, \quad p = -\left(\frac{\partial F}{\partial V} \right)_T. \end{aligned} \quad (20)$$

U izrazima vezanim za magnetizaciju, smatra se da energija ima dodatni član $-MH$ uz one unutarnje stupnjeve slobode, gdje je M magnetizacija, a H je vanjsko magnetsko polje i na njega se gleda kao na generaliziranu silu, dok magnetizacija M djeluje kao generalizirani pomak. Taj član u energiji možemo usporediti sa uobičajenim članom $-pV$, gdje je tlak p generalizirana sila, a volumen V generalizirani pomak. Magnetizaciju, dakle, možemo dobiti zamjenimo li u gornjim izrazima $-pdV$ sa $-MdH$:

$$\begin{aligned} dF &= -MdH - SdT \\ M &= -\left(\frac{\partial F}{\partial H} \right)_T, \quad S = -\left(\frac{\partial F}{\partial T} \right)_H \end{aligned} \quad (21)$$

Izotermalna susceptibilnost definira se kao derivacija magnetizacije po vanjskom magnetskom polju uz konstantnu temperaturu:

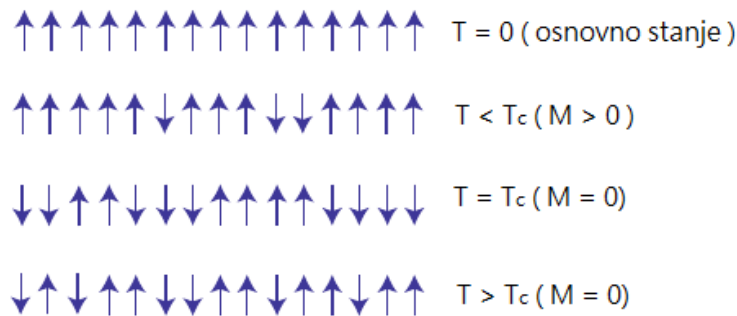
$$\chi_T = \left(\frac{\partial M}{\partial H} \right)_T = -\left(\frac{\partial^2 F}{\partial H^2} \right)_T. \quad (22)$$

3 Fazni prijelazi

Fazni prijelazi su singulariteti u slobodnoj energiji ili u nekoj od njenih derivacija [1], na primjer: prijelaz iz tekućine u plin, prijelaz iz vodiča u supravodič, prijelaz iz paramagneta u feromagnet i sl. Fazni prijelaz se može mjeriti u terminima parametra reda, koji se mijenja kako se mijenja faza. U magnetskim sustavima, takav parametar je magnetizacija $M(T)$. U poglavlju (4) analizirat ćemo Isingov model kao jedan od mogućih opisa magnetizma. Isingov hamiltonijan ovdje ćemo samo zapisati kao:

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j - h \sum_i s_i, \quad (23)$$

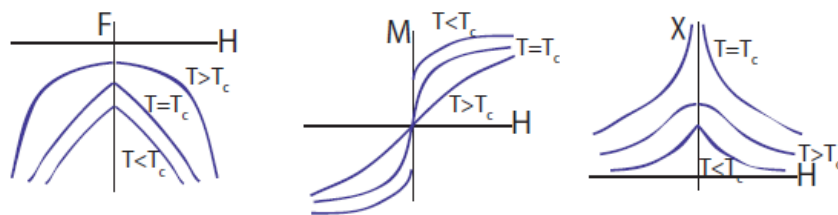
gdje je s_i spin na mjestu i u rešetci i može poprimiti vrijednosti ± 1 , oznaka $\langle ij \rangle$ kaže da suma ide po svim parovima susjeda na mjestima i i j , veličina h predstavlja vanjsko magnetsko polje koje interagira sa spinom s_i , a J je parametar vezanja između susjednih mjesta u rešetci. Za feromagnet, $J > 0$, tj. energija je minimalna kad su svi spinovi okrenuti u istom smjeru. Pogledamo поближе par graničnih slučajeva temperature (slika 5.): za vrlo visoke temperature, spinovi su nasumično orijentirani te ne postoji ukupna magnetizacija. Smanjivanjem temperature, duljina korelacija se povećava sve do neke kritične temperature, $T = T_c$, gdje korelacijska duljina "divergira", tj. postoje "slojevi" koreliranih spinova svih veličina, no i dalje nema ukupne magnetizacije. Smanjimo li temperaturu ispod kritične, $T < T_c$, magnetizacija različita od nule se pojavljuje *spontano*, tj. dolazi do slamanja simetrije koja je bila određena brojem pozitivno i negativno orijentiranih spinova te sada dolazi do toga da postoji dominantni smjer. Na $T = 0$, svi spinovi su okrenuti u istom smjeru što je, za feromagnete, zapravo osnovno stanje.



Slika 5: Spinsko uređenje. [1]

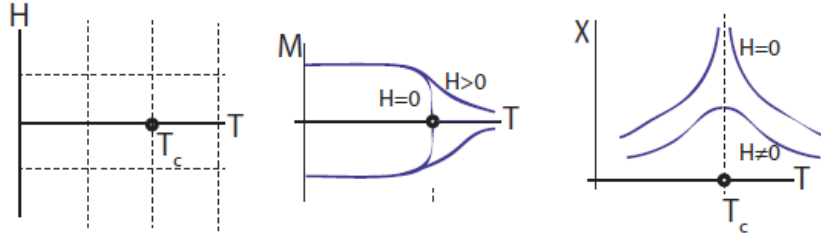
3.1 Fazni prijelazi prvog i drugog reda

Fazni prijelaz prvog reda neke fizikalne veličine prisutan je kada derivacija termodinamičkog potencijala ima konačan diskontinuitet. U slučaju našeg promatranog magnetskog sustava, slobodna energija je pogodni termodinamički potencijal. Za $T < T_c$, postoji cijela linija prijelaza prvog reda pri $H = 0$ gdje slobodna energija pokazuje skok, što ukazuje da magnetizacija nije kontinuirana. Za $T > T_c$, slobodna energija je glatka funkcija od H i magnetizacija se mijenja kontinuirano. Kada je $T = T_c$, magnetizacija se kontinuirano mijenja, stoga prijelaz nije prvoga reda. Međutim, nagib u $H = 0$ je beskonačan, što signalizira divergenciju u derivaciji $\partial M / \partial H|_T$ odnosno izotermalna susceptibilnost je beskonačna u $T = T_c$. Stoga je prijelaz u ovome slučaju drugog reda tj. kontinuirani fazni prijelaz. Grafički prikaz ovisnosti slobodne energije, magnetizacije i izotermalne susceptibilnosti o vanjskom magnetskom polju H , može se vidjeti na slici 6.



Slika 6: Ponašanje F , M i χ_T u blizini kritične točke T_c ovisno o H . [1]

Može se još dodatno nacrtati graf magnetizacije i susceptibilnosti u ovisnosti o temperaturi, što je prikazano na slici 7.



Slika 7: Ponašanje H , M i χ_T u blizini kritične točke T_c ovisno o T . [1]

3.2 Korelacijska duljina

Znamo da su fazni prijelazi povezani sa makroskopskim svojstvima sustava, no ono na što treba obratiti pozornost jest to da je većina makroskopskih svojstava usko povezana sa mikroskopskim konfiguracijama promatranog sustava. Spin-spin korelacijska funkcija je jedna od takvih vrlo važnih veličina koja opisuje mikroskopsko stanje, a definirana je kao:

$$\Gamma(\vec{r}_i, \vec{r}_j) = \langle (s_i - \langle s_i \rangle)(s_j - \langle s_j \rangle) \rangle, \quad (24)$$

gdje je s_i vrijednost spina na položaju \vec{r}_i u rešetci, a $\langle \dots \rangle$ označava prosjek ansambla. Za translacijski invarijantne sustave, $\langle s_i \rangle = \langle s_j \rangle \equiv \langle s \rangle$ pa korelacijska funkcija ovisi samo o vektoru udaljenosti između dva spina. Izraz (24) se, u tom slučaju, pojednostavljuje:

$$\Gamma(\vec{r}_i - \vec{r}_j) \equiv \Gamma_{ij} = \langle s_i s_j \rangle - \langle s \rangle^2.$$

Daleko od kritične temperature T_c , spinovi imaju tendenciju biti nekorelirani pa korelacijska funkcija ima oblik:

$$\Gamma(\vec{r}) \sim r^{-\tau} e^{-r/\xi} \quad (25)$$

gdje je τ broj povezan sa kritičnim eksponentom η , a ξ je korelacijska duljina. Dakle, daleko od kritične temperature, korelacijska duljina ξ je konačna i korelacija između spinova opada eksponencijalno. Međutim, kako se približavamo T_c , korelacijska duljina ξ divergira, tj. $\xi \rightarrow \infty$, pa $\exp(-r/\xi) \rightarrow 1 = \text{const}$. Isto, eksperimenti kao i neki egzaktno rješivi modeli pokazuju da kako se temperatura približava kritičnoj, $T \rightarrow T_c$, vrijednost korelacijske funkcije sa udaljenosti pada kao:

$$\Gamma(\vec{r}) \sim \frac{1}{r^{d-2+\eta}}. \quad (26)$$

U tom izrazu, η ovisi o raznim svojstvima sustava i primjer je onoga što se zove kritični eksponent, a d je dimenzija sustava. Možemo povezati spin-spin korelacijsku funkciju sa magnetskom susceptibilnošću ako se prisjetimo izraza (22) i općenitih definicija za srednju vrijednost neke veličine, u ovom slučaju, magnetizacije:

$$\begin{aligned} \chi_T &= - \left(\frac{\partial^2 F}{\partial H^2} \right)_T = k_B T \frac{\partial^2}{\partial H^2} \ln Z = k_B T \frac{\partial^2}{\partial H^2} \ln \left(\sum_i e^{-\beta(\epsilon_i - HM_i)} \right) \\ &= k_B T \frac{\partial}{\partial H} \left(\frac{\beta \sum_i M_i e^{-\beta(\epsilon_i - HM_i)}}{Z} \right) = k_B T \frac{Z \beta^2 \sum_i M_i^2 e^{-\beta(\epsilon_i - HM_i)} - (\beta \sum_i M_i e^{-\beta(\epsilon_i - HM_i)})^2}{Z^2} \\ &= k_B T \frac{1}{(k_B T)^2} \left[\frac{1}{Z} \sum_i M_i^2 e^{-\beta(\epsilon_i - HM_i)} - \left(\frac{\sum_i M_i e^{-\beta(\epsilon_i - HM_i)}}{Z} \right)^2 \right] \\ &= \frac{1}{k_B T} (\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2) = \frac{1}{k_B T} \langle (M - \langle M \rangle)^2 \rangle \\ &= \frac{1}{k_B T} \left[\sum_i (s_i - \langle s_i \rangle) \sum_j (s_j - \langle s_j \rangle) \right] = \frac{1}{k_B T} \sum_{ij} \Gamma_{ij}, \end{aligned} \quad (27)$$

gdje je u predzadnjem koraku ukupna magnetizacija M napisana kao suma preko svih spinova $M = \sum_i s_i$. Za translacijski invarijantnu rešetku, $\sum_{ij} \Gamma_{ij} = N \sum_j \Gamma_{0j}$, što možemo aproksimirati integralom blizu kritične vrijednosti, napisanom u poopćenom sfernom koordinatnom sustavu, gdje struktura rešetke više nije bitna:

$$N \sum_j \Gamma_{0j} \sim N \int d^d r \Gamma(r) \sim N \int r^{d-1} dr \Gamma(r) \int d\Omega_{d-1} \sim N \int dr \Gamma(r) r^{d-1} \sim \chi_T. \quad (28)$$

Stoga, da bi korelacije ostale prisutne, mora vrijediti da je $\eta < 2$. Sve u svemu, divergentna susceptibilnost (makroskopska veličina) implicira također divergenciju u fluktuaciji magnetizacije (mikroskopska veličina). [1]

3.3 Kritični eksponenti

Da bismo izmjerili odstupanje od kritične temperature, zgodno je uvesti sljedeću bezdimenzionalnu veličinu:

$$t \equiv \frac{T - T_c}{T_c} \quad (29)$$

preko koje se onda generalno kritični eksponent definira kao limes:

$$\lambda = \lim_{t \rightarrow 0} \frac{\ln |F(t)|}{\ln |t|}, \quad (30)$$

ili ekvivalentno $F(t) \sim |t|^\lambda$. Kritični eksponenti koji se najčešće koriste su sljedeći [1]:

$C_H \sim t ^{-\alpha}$	toplinski kapacitet uz $H = 0$
$M \sim (-t)^\beta$	magnetizacija uz $H = 0$
$\chi_T \sim t ^{-\gamma}$	izotermalna susceptibilnost uz $H = 0$
$H \sim M ^\delta \text{sgn}(M)$	kritična izoterma ($t=0$)
$\xi \sim t ^{-\nu}$	korelacijska duljina
$\Gamma(\vec{r}) \sim \frac{1}{r^{d-2+\eta}}$	korelacijska funkcija na T_c

Kritični eksponenti uglavnom su dosta univerzalni, što znači da ovise samo o nekoliko osnovnih parametara kao što su dimenzionalnost prostora i simetrija parametra reda. U tablici 1. nalazi se popis nekih modela skupa sa njihovim kritičnim eksponentima. Valja uočiti da se kritični eksponenti, za klasu gdje se koristi model srednjeg polja, mogu promatrati kao da odgovaraju četverodimenzionalnom prostoru, tj. kada su eksponenti za niže dimenzije poznati, eksponenti za srednje polje su u nekom smislu ekstrapolacija na sljedeću dimenziju. U stvari, u 4D su kritični eksponenti srednjeg polja egzaktni pa se $d = 4$ ponekad naziva i gornja kritična dimenzija. Pristup preko srednjeg polja ne uzima u obzir dimenzionalnost problema, već samo koordinacijski broj rešetke tj. broj najbližih susjeda. Pretpostavka srednjeg polja podrazumijeva da su susjedni spinovi nekorelirani; ta pretpostavka postaje sve više opravdana kako se broj susjeda povećava sa dimenzionalnošću problema. Stoga izgleda intuitivno da se većina kritičnih eksponenata u 3D Isingovom modelu (numeričko rješenje) slaže bolje sa eksponentima srednjeg polja nego sa onima u 2D Isingovom modelu.

Klasa univerzalnosti	simetrija	α	β	γ	δ	ν	η
2D Ising	dvokomponentni skalar	0	1/8	7/4	15	1	1/4
3D Ising	dvokomponentni skalar	0.10	0.33	1.24	4.8	0.63	0.04
3D XY	dvodimenzionalni vektor	0.01	0.34	1.3	4.8	0.66	0.04
3D Heisenberg	trodimenzionalni vektor	-0.12	0.36	1.39	4.8	0.71	0.04
MF		0	1/2	1	3	1/2	0
2D Potts,q=3	q-komponentni skalar	1/3	1/9	13/9	14	5/6	4/15

Tablica 1: Kritični eksponenti za različite modele.

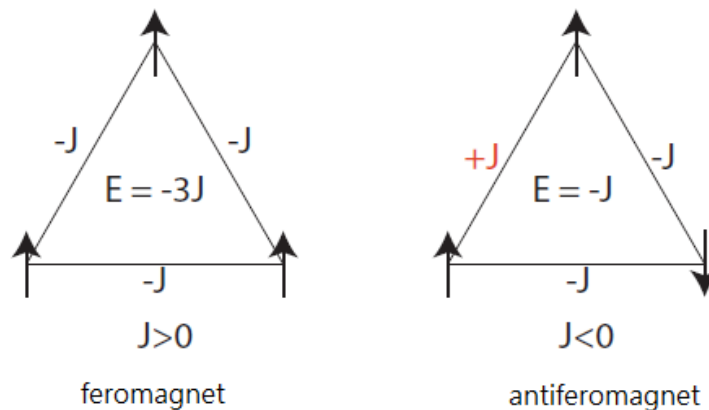
4 Definicija Isingovog modela

Isingov model predstavlja jedan od primjera modela kristalne rešetke, gdje je jedna varijabla smještena na svakom mjestu u rešetci. Stanje varijabli određeno je hamiltonijanom. Takvi modeli vrlo su uspješni kada je u pitanju opis kritičnih pojava, (kvantni) magnetizam i modeli visokotemperaturnih supravodiča kao i kod opisa faznih dijagrama i ne-ravnotežnih sustava. Zbog njegove jednostavnosti, Isingov model je jedan od najviše proučavanih modela vezanih uz kristalnu rešetku u fizici.

Isingov model obuhvaća rešetku sa N mjesta označenih sa i gdje se na svakom tom mjestu nalazi spin s_i koji može poprimiti vrijednosti ± 1 . Hamiltonijan Isingovog modela smo već napisali (23), no radi potpunosti, napisati ćemo ga ponovo, imajući na umu da smo već definirali što znači koja veličina u hamiltonijanu:

$$\mathcal{H} \equiv -J \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j - h \sum_i s_i . \quad (31)$$

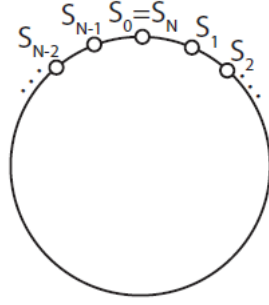
Treba naglasiti da predznak konstante vezanja J igra vrlo važnu ulogu u određivanju reda sustava. Za $J > 0$, energija je minimizirana ako su svi spinovi okrenuti u istom smjeru, tj. susjedni spinovi s_i i s_j imaju isti predznak. Takvo međudjelovanje se naziva feromagnetsko međudjelovanje i pri niskim temperaturama, takvo magnetsko uređenje je i za očekivati. Ako $J < 0$, susjedni spinovi su okrenuti u suprotnim smjerovima kako bi minimizirali energiju. Ovisno o geometriji rešetke, na niskim temperaturama, može se stvoriti uzorak šahovnice, a pojava koja opisuje takvo ponašanje se onda naziva antiferomagnetizam. Kada rešetka nije dvostrana, tj. u slučajevima kada dva mjesta u rešetci mogu imati zajedničkog najbližeg susjeda, antiferomagnetsko vezanje ($J < 0$) može prouzrokovati efekt nereda, poznat kao frustracija. Takav efekt se može najlakše objasniti primjerom trokuta u kojem je u svakom od vrhova po jedan spin (slika 8.). Za $J > 0$, svi spinovi su okrenuti u istom smjeru i $E = -3J$ za osnovno stanje. Postojat će dvije konfiguracije osnovnog stanja; svi spinovi okrenuti 'prema gore' i svi spinovi okrenuti 'prema dolje'. Za $J < 0$, situacija je malo kompliciranija. Od tri moguće veze u trokutu, uvijek će jedna imati zadaću da spinove okrene u istom smjeru, tj. da poveća energiju te veze do $+J$, što onda daje za energiju osnovnog stanja $E = -J$. Lako je za provjeriti da je osnovno stanje takvih sustava daleko od jedinstvenog te da broj stanja raste povećanjem veličine promatranog sustava. Drugim riječima, entropija osnovnog stanja po mjestu u rešetci (F/N) je konačna za antiferomagnetsku trokutastu rešetku, a jednaka je nuli za feromagnetski slučaj; to je primjer entropije osnovnog stanja. Na visokim temperaturama, spinovi termalno fluktuiraju i bilo kakav red u sustavu je uništen. Također, makroskopski magnetski moment će nestati. Takva faza se naziva paramagnetska faza. [1]



Slika 8: Važnost predznaka konstante vezanja J . [1]

4.1 1D Isingov model - egzaktni izvod pomoću matrice transfera

Ising je, kao što smo već spomenuli, uspješno riješio model u 1D i uvidio da 1D verzija modela ne pokazuje nikakav fazni prijelaz (osim, striktno govoreći, u $T = 0$). U jednoj dimenziji, Isingov model može se egzaktno riješiti metodom matrice transfera uz ograničenje na međudjelovanja prvih susjeda. Radi jednostavnosti, promotrimo periodičnu 1D rešetku sa N mjesta [1] (kao na slici 9.).



Slika 9: 1D Isingov model; periodični rubni uvjeti $S_0 = S_N$. [1]

Odgovarajući hamiltonijan je:

$$\mathcal{H}_N = -J \sum_{i=0}^{N-1} s_i s_{i+1} - h \sum_{i=0}^{N-1} s_i, \quad (32)$$

gdje su periodični rubni uvjeti uključeni sa $s_N = s_0$. Particijska funkcija za N mjesta u rešetci se može napisati kao:

$$Z_N = \sum_{\{s\}} \exp(-\beta \mathcal{H}_N) = \sum_{\{s\}} \exp[\beta J(s_0 s_1 + s_1 s_2 + \dots + s_{N-1} s_0) + \beta h(s_0 + s_1 + \dots + s_{N-1})], \quad (33)$$

gdje oznaka $\{s\}$ znači da se zbraja po svim konfiguracijama različitih s_i , J je, kao i prije, konstanta vezanja prvih susjeda, a h je vanjsko magnetsko polje. Ideja je prvo odvojiti dijelove sa i bez polja pa potom napisati particijsku funkciju pomoću parova koji se sastoje od susjednih spinova:

$$\begin{aligned} Z_N &= \sum_{\{s\}} \exp\left(\beta J s_0 s_1 + \beta J s_1 s_2 + \dots + \frac{\beta h}{2} s_0 + \frac{\beta h}{2} s_0 + \frac{\beta h}{2} s_1 + \frac{\beta h}{2} s_1 + \dots\right) \\ &= \sum_{\{s\}} \exp\left(\beta J s_0 s_1 + \beta h \frac{s_0 + s_1}{2}\right) \cdot \exp\left(\beta J s_1 s_2 + \beta h \frac{s_1 + s_2}{2}\right) \cdot \dots \cdot \exp\left(\beta J s_{N-1} s_0 + \beta h \frac{s_{N-1} + s_0}{2}\right). \end{aligned} \quad (34)$$

Definiramo li sada funkciju $V(s_i, s_{i+1})$ kao [4]:

$$V(s_i, s_{i+1}) \equiv \exp\left(\beta J s_i s_{i+1} + \frac{\beta h}{2} (s_i + s_{i+1})\right), \quad (35)$$

particijsku funkciju (34) možemo jednostavnije zapisati:

$$Z_N = \sum_{s_0} \sum_{s_1} \dots \sum_{s_{N-1}} V(s_0, s_1) V(s_1, s_2) \cdot \dots \cdot V(s_{N-1}, s_0) \quad (36)$$

gdje svaka sumacija ide po svim mogućim stanjima spina. Promotrimo sada 2×2 matricu V gdje su sve moguće spinske konfiguracije od $V(s_i, s_{i+1})$ prikazane kao elementi te matrice:

$$V = \begin{pmatrix} V(+, +) & V(+, -) \\ V(-, +) & V(-, -) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{\beta(J+h)} & e^{-\beta(J)} \\ e^{-\beta(J)} & e^{\beta(J-h)} \end{pmatrix}. \quad (37)$$

Da bismo razumjeli poantu metode matrice transfera, ključno je sada dobro razumjeti što je zapravo trag neke matrice i povezati ga sa particijskom funkcijom iz izraza (36). Ako imamo neku matricu A , trag je suma njenih dijagonalnih elemenata:

$$\text{Tr}(A) = \sum_i A_{i,i}.$$

Trag od matrice A^2 je:

$$\text{Tr}(A^2) = \sum_i (A^2)_{i,i} = \sum_{i,j} A_{i,j} A_{j,i},$$

od matrice A^3

$$\text{Tr}(A^3) = \sum_{i,j,k} A_{i,j} A_{j,k} A_{k,i}$$

itd.. Sada vidimo da je to upravo ono što se događa u našem izrazu za particijsku funkciju, ako svaki $V(s_i, s_j)$ interpretiramo kao matrice elemente od V :

$$Z_N = \text{Tr}(V^N). \quad (38)$$

Dakle, to je upravo i ideja matrice transfera: matrica V prenosi rješenje od jednog mjesta do drugog, a particijska funkcija je samo trag produkta tih V -ova. Pošto je V realna i simetrična matrica, ona se može dijagonalizirati [3]:

$$V = PDP^{-1} \quad (39)$$

gdje je D dijagonalna matrica sa svojstvenim vrijednostima λ_1 i λ_2 na dijagonali

$$D = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{pmatrix},$$

a P je matrica koja sadržava svojstvene vektore od V : $P = (\vec{x}_1, \vec{x}_2)$. Imajući na umu izraz (39), V^N postaje:

$$V^N = PDP^{-1}PDP^{-1} \dots PDP^{-1} = PD^N P^{-1},$$

a Z_N iz izraza (38):

$$Z_N = \text{Tr}(V^N) = \text{Tr}(PD^N P^{-1}) = \text{Tr}(D^N) = \lambda_1^N + \lambda_2^N = \lambda_1^N \left[1 + \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right)^N \right] \quad (40)$$

pa naš problem sada postaje traženje tih svojstvenih vrijednosti, odnosno rješavanje jednadžbe $\det(V - \lambda \mathbb{1}) = 0$, što daje

$$\begin{aligned} (e^{\beta(J+h)} - \lambda)(e^{\beta(J-h)} - \lambda) - e^{-2\beta J} &= 0 \\ \lambda^2 - (e^{\beta(J+h)} + e^{\beta(J-h)})\lambda + (e^{2\beta J} - e^{-2\beta J}) &= 0 \end{aligned}$$

odnosno

$$\begin{aligned} \lambda_{1,2} &= \frac{1}{2} \left[e^{\beta J} (e^{\beta h} + e^{-\beta h}) \pm \sqrt{e^{2\beta(J+h)} + e^{2\beta(J-h)} + e^{2\beta J} - 4e^{2\beta J} + 4e^{-2\beta J}} \right] \\ \lambda_{1,2} &= \frac{1}{2} \left[e^{\beta J} 2 \cosh(\beta h) \pm \sqrt{e^{2\beta J} (e^{\beta h} + e^{-\beta h})^2 - 4(e^{2\beta J} - e^{-2\beta J})} \right] \\ \lambda_{1,2} &= \frac{1}{2} \left[e^{\beta J} 2 \cosh(\beta h) \pm \sqrt{e^{2\beta J} 4 \cosh^2(\beta h) - 4(e^{2\beta J} - e^{-2\beta J})} \right]. \end{aligned}$$

Iskoristimo li još jednu od trigonometrijskih relacija vezanih uz hiperbolne funkcije, točnije: $\cosh^2(x) - 1 = \sinh^2(x)$, konačno dobivamo:

$$\lambda_{1,2} = e^{\beta J} \cosh(\beta h) \pm \sqrt{e^{2\beta J} \sinh^2(\beta h) + e^{-2\beta J}}. \quad (41)$$

Možemo još dodatno izračunati i svojstvene vektore matrice transfera [5]: recimo da su $|v_1\rangle$ i $|v_2\rangle$ dva ortogonalna svojstvena vektora promatrane matrice. Ako je to istina onda vrijedi $\langle v_1|v_2\rangle = 0$ i $\langle v_1|v_1\rangle = \langle v_2|v_2\rangle = 1$. Neka

$$|v_1\rangle = \begin{pmatrix} \alpha_+ \\ \alpha_- \end{pmatrix} \text{ i } |v_2\rangle = \begin{pmatrix} \alpha_- \\ -\alpha_+ \end{pmatrix} \text{ tako da vrijedi } \alpha_+^2 + \alpha_-^2 = 1.$$

Iz svojstvene jednadžbe $V|v_1\rangle = \lambda_1|v_1\rangle$ slijedi:

$$\begin{pmatrix} V_{11} - \lambda_1 & V_{12} \\ V_{12} & V_{22} - \lambda_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_+ \\ \alpha_- \end{pmatrix} = 0.$$

Kao rješenje dobije se:

$$(V_{11} - \lambda_1)\alpha_+ + V_{12}\alpha_- = 0$$

$$V_{12}\alpha_+ + (V_{22} - \lambda_1)\alpha_- = 0$$

iz obje jednadžbe izrazimo α_+/α_- i pomnožimo ih:

$$\frac{\alpha_+}{\alpha_-} = \frac{-V_{12}}{V_{11} - \lambda_1}, \quad \frac{\alpha_+}{\alpha_-} = \frac{-(V_{22} - \lambda_1)}{V_{12}}$$

$$\frac{\alpha_+^2}{\alpha_-^2} = \frac{V_{22} - \lambda_1}{V_{11} - \lambda_1},$$

a pošto vrijedi $\alpha_+^2 + \alpha_-^2 = 1$ dobivamo:

$$\alpha_{\pm} = \frac{1}{2} \left(1 \pm \frac{e^{\beta J} \sinh(\beta h)}{\sqrt{e^{2\beta J} \sinh^2(\beta h) + e^{-2\beta J}}} \right) \quad (42)$$

4.2 Slobodna energija i magnetizacija

U termodinamičkoj granici, $N \rightarrow \infty$, slobodnu energiju po jednom mjestu u rešetci $f = F/N$ nije teško za izračunati; pretpostavljajući da su svojstvene vrijednosti poredane opadajuće¹, tj. $\lambda_1 > \lambda_2$, dobivamo za f [1]:

$$\begin{aligned} f &= -k_B T \lim_{N \rightarrow +\infty} \frac{1}{N} \ln Z_N \\ &= -k_B T \lim_{N \rightarrow +\infty} \frac{1}{N} \ln [\lambda_1^N + \lambda_2^N] \\ &= -k_B T \lim_{N \rightarrow +\infty} \frac{1}{N} \ln \left[\lambda_1^N \left(1 + \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right)^N \right) \right]. \end{aligned}$$

U termodinamičkoj granici, omjer $\left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right)^N \rightarrow 0$ pa slobodna energija po jednom mjestu u rešetci izgleda kao:

$$\begin{aligned} f &= -k_B T \ln \lambda_1 \\ &= -k_B T \ln \left[e^{\beta J} \cosh(\beta h) + \sqrt{e^{2\beta J} \sinh^2(\beta h) + e^{-2\beta J}} \right] \end{aligned} \quad (43)$$

gdje smo uvrstili '+' dio iz izraza (41). U limesu niskih temperatura, $\beta \rightarrow \infty$,

$$f \rightarrow -k_B T \ln \left[e^{\beta J} [(\cosh(\beta h) + \sinh(\beta h))] \right] = -J - H,$$

što je upravo osnovno energijsko stanje jednog spina, a u limesu visokih temperatura, $\beta \rightarrow 0$,

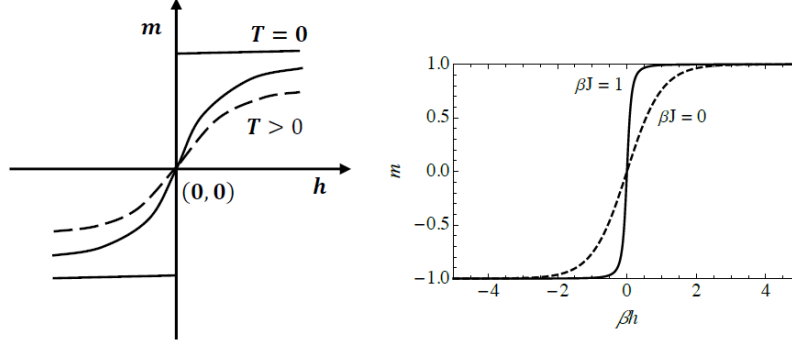
$$f \rightarrow -k_B T \ln 2.$$

Iz poglavlja o termodinamičkim potencijalima, sjetimo li se izraza za magnetizaciju (21) i uvrstimo li u njega izraz (43) dobivamo da je magnetizacija analitička funkcija za bilo koji realni h i za sve $T > 0$ što znači da nema faznih prijelaza za pozitivne temperature, kao što smo i očekivali:

$$\begin{aligned} M &= - \left(\frac{\partial f}{\partial h} \right)_T = k_B T \frac{\partial}{\partial h} \left(\ln \left[e^{\beta J} \cosh(\beta h) + \sqrt{e^{2\beta J} \sinh^2(\beta h) + e^{-2\beta J}} \right] \right) \\ &= \frac{e^{\beta J} \sinh(\beta h)}{\sqrt{e^{2\beta J} \sinh^2(\beta h) + e^{-2\beta J}}}. \end{aligned} \quad (44)$$

Na slici 10. grafički je prikazan rezultat (44) odnosno prikazano je kako se magnetizacija M mijenja sa promjenom vanjskog magnetskog polja h . Ono što valja na slici uočiti su dvije stvari: ako je $h = 0$ i $M = 0$ za bilo koju konačnu temperaturu T , onda to znači da nema spontane magnetizacije kao ni faznog prijelaza na bilo kojoj temperaturi. Ako je $T = 0$, a h vrlo malen, onda $M = \pm 1$. S druge strane, ako $T \rightarrow \infty$ tj. $\beta J \rightarrow 0$, onda je $M = \tanh(\beta h)$ i to odgovara paramagnetskoj fazi. Dakle, postoji fazni prijelaz samo na temperaturi $T = 0$ u slučaju 1D Isingovog modela. [5]

¹Činjenica da su vrijednosti poredane opadajuće proizlazi iz izraza (40) zato jer će u termodinamičkoj granici, izraz u zagradi težiti nuli jer $\lambda_2/\lambda_1 < 1$ pa slijedi da $Z_N = \lambda_1^N = \lambda_{max}^N$. Ovaj zaključak vrijedi za sve probleme koji se rješavaju metodom matrice transfera : particijska funkcija je najveća svojstvena vrijednost te matrice, na N -tu potenciju. [4]



Slika 10: Graf magnetizacije m u ovisnosti o magnetskom polju h za različite vrijednosti temperature T (lijevo) [5] i za različite vrijednosti umnoška βJ (desno) [4].

Možemo, potpunosti radi, izračunati još i izotermalnu susceptibilnost kao i specifični toplinski kapacitet [5]: iz izraza (22) dobivamo:

$$\chi_T = \left(\frac{\partial M}{\partial h} \right)_T = \frac{\beta e^{\beta J} \cosh(\beta h)}{\sqrt{e^{2\beta J} \sinh^2(\beta h) + e^{-2\beta J}}} - \frac{\beta e^{3\beta J} \sinh^2(\beta h) \cosh(\beta h)}{(e^{2\beta J} \sinh^2(\beta h) + e^{-2\beta J})^{3/2}} \quad (45)$$

gdje za $h = 0$ proizlazi:

$$\chi_T = \beta e^{2\beta J} = \frac{1}{k_B T} e^{\frac{2J}{k_B T}}. \quad (46)$$

Specifični toplinski kapacitet može se dobiti uvrstimo li izraz za prosječnu energiju napisan preko slobodne energije (14) u općeniti izraz za toplinski kapacitet (19):

$$c_M = \left(\frac{\partial \langle E \rangle}{\partial T} \right)_M = \frac{\partial}{\partial T} \left(F - T \frac{\partial F}{\partial T} \right)_M = -T \frac{\partial^2 F}{\partial T^2}.$$

Sada možemo obje strane gornjeg izraza podijeliti sa brojem čestica N i uvrstiti $f = -k_B T \ln \lambda_1$:

$$c_M = T \frac{\partial^2}{\partial T^2} (k_B T \ln \lambda_1) = 2k_B T \frac{\partial \ln \lambda_1}{\partial T} + k_B T^2 \frac{\partial^2 \ln \lambda_1}{\partial T^2}.$$

Pošto je $\ln \lambda_1 = \ln \left[e^{\beta J} \cosh(\beta h) + \sqrt{e^{2\beta J} \sinh^2(\beta h) + e^{-2\beta J}} \right]$ onda

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial \ln \lambda_1}{\partial T} \right|_{h=0} &= -\frac{J}{k_B T^2} \tanh(\beta J) \\ \left. \frac{\partial^2 \ln \lambda_1}{\partial T^2} \right|_{h=0} &= \frac{2J}{k_B T^3} \tanh(\beta J) + \frac{J^2}{k_B^2 T^4} \operatorname{sech}^2(\beta J), \end{aligned}$$

za specifični toplinski kapacitet pri $h = 0$ dobivamo izraz

$$c_M(h=0) = \frac{J^2}{k_B T^2} \operatorname{sech}^2(\beta J), \quad (47)$$

koji je glatka funkcija temperature T . Kako $T \rightarrow 0$, $c_M \rightarrow 0$ kao što i treba biti zbog trećeg zakona termodinamike. Dakle, ne postoji nikakva kritična točka na konačnoj temperaturi koja odgovara singularnom ponašanju specifičnog toplinskog kapaciteta c_M .

4.3 Korelacijska funkcija

Da bismo izračunali korelacijsku funkciju, u principu bismo trebali koristiti matricu transfera, za $h = 0$ i za $h \neq 0$. Međutim, za $h = 0$, tj. kad nije prisutno vanjsko magnetsko polje, postoji lakši način da se izračuna

korelacija između dva spina koja su odvojena sa R mjesta u lancu. Uz periodične rubne uvjete, hamiltonijan i kanonska particijska funkcija dani su sa:

$$\mathcal{H} = -J \sum_{k=1}^N s_k s_{k+1}$$

$$Z = \sum_{\{s\}} \prod_k e^{\beta J s_k s_{k+1}} = \left(\sum_{s_k} e^{\beta J s_k s_{k+1}} \right)^N = Z_1^N, \quad (48)$$

a korelacijska funkcija za par spinova s_k i s_{k+R} odvojenih za R dana je sa:

$$\Gamma(R) = \langle s_k s_{k+R} \rangle - \langle s_k \rangle \langle s_{k+R} \rangle. \quad (49)$$

Pošto se ovaj račun provodi za sve konačne temperature $T > 0$, a kritična točka Isingovog modela je u $T = 0$, u slučaju kada nema vanjskog magnetskog polja, neće biti ni magnetizacije tj. $\langle s_k \rangle = \langle s_{k+R} \rangle = 0$ pa korelacijska funkcija (49) poprima sljedeći oblik:

$$\Gamma(R) = \langle s_k s_{k+R} \rangle.$$

Budući da za spinove vrijedi $s_i^2 = 1$, korelacijska se funkcija može napisati kao:

$$\Gamma(R) = \langle s_k s_{k+1} s_{k+1} s_{k+2} \cdots s_{k+R-2} s_{k+R-1} s_{k+R-1} s_{k+R} \rangle. \quad (50)$$

Iskoristimo li općenitu definiciju za prosječnu vrijednost neke veličine dobivamo:

$$\begin{aligned} \Gamma(R) &= \frac{1}{Z} \sum_{\{s\}} (s_k s_{k+1} s_{k+1} s_{k+2} \cdots s_{k+R-2} s_{k+R-1} s_{k+R-1} s_{k+R}) e^{-\beta \mathcal{H}} \\ &= \frac{1}{Z_1^N} \sum_{\{s_1\}} \sum_{\{s_2\}} \cdots \sum_{\{s_N\}} (s_k s_{k+1} s_{k+1} s_{k+2} \cdots s_{k+R-2} s_{k+R-1} s_{k+R-1} s_{k+R}) e^{\beta J s_1 s_2} e^{\beta J s_2 s_3} \cdots e^{\beta J s_N s_1}. \end{aligned}$$

Valja uočiti da se u gornjim izrazima, nasumične varijable s_1, s_2, \dots, s_N , pojavljuju na način da se njihova zajednička vjerojatnost

$$P(s_1, s_2, \dots, s_N) = \frac{1}{Z} e^{\beta J (s_1 s_2 + s_2 s_3 + \dots)}$$

može napisati kao umnožak vjerojatnosti za svaku pojedinu nasumičnu varijablu

$$P(s_1, s_2, \dots, s_N) = P(s_1) P(s_2) \cdots P(s_N)$$

pri čemu je

$$P(s_j) = \frac{1}{Z_1} e^{\beta J s_j s_{j+1}}$$

tj. s_j su statistički nezavisne varijable i zato se korelacijska funkcija iz izraza (50) može napisati kao:

$$\Gamma(R) = \langle s_k s_{k+1} \rangle \langle s_{k+1} s_{k+2} \rangle \cdots \langle s_{k+R-1} s_{k+R} \rangle. \quad (51)$$

Da bismo izračunali korelaciju $\langle s_k s_{k+1} \rangle$ između dva najbliža susjeda, raspíšimo particijsku funkciju Z_1 koju možemo iščitati iz izraza (48):

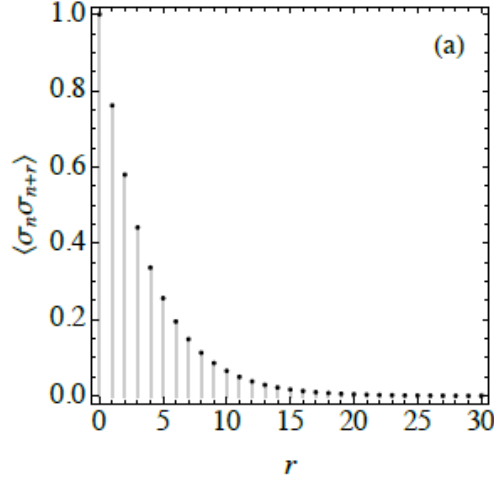
$$Z_1 = \sum_{s_k = \pm 1} e^{\beta J s_k s_{k+1}} = e^{\beta J s_{k+1}} + e^{-\beta J s_{k+1}} = 2 \cosh(\beta J)$$

za $s_{k+1} = \pm 1$. Konačno, za korelaciju dobivamo:

$$\langle s_k s_{k+1} \rangle = \frac{\sum_{\{s\}} s_k s_{k+1} e^{\beta J s_k s_{k+1}}}{Z_1} = \frac{1}{\beta} \frac{\partial \ln Z_1}{\partial J} = \tanh(\beta J),$$

pa je ukupna korelacijska funkcija neovisna o indeksu k i prikazana je na slici 11.

$$\Gamma(R) = \tanh^R(\beta J). \quad (52)$$



Slika 11: Korelacijska funkcija u ovisnosti o razmaku r uz $\beta J = 1$. [4]

Za $T > 0$, korelacijska funkcija Isingovog modela je oblika

$$\Gamma(R) = e^{-R/\xi}. \quad (53)$$

Izjednačimo li gornje dvije jednadžbe, dobivamo:

$$\begin{aligned} \tanh^R(\beta J) &= e^{-R/\xi} \\ R \ln [\tanh(\beta J)] &= -R/\xi \\ \xi^{-1} &= \ln [\coth(\beta J)]. \end{aligned}$$

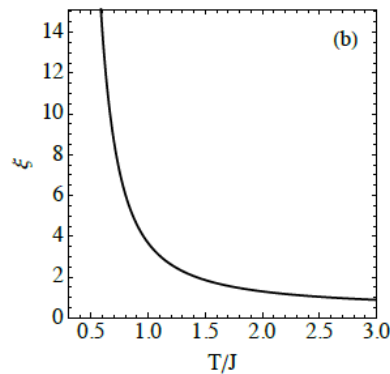
S druge strane,

$$\left. \frac{\lambda_1}{\lambda_2} \right|_{h=0} = \frac{e^{\beta J} + e^{-\beta J}}{e^{\beta J} - e^{-\beta J}} = \coth(\beta J)$$

pa za korelacijsku duljinu dobivamo

$$\xi^{-1} = \ln [\coth(\beta J)] = \ln \left(\frac{\lambda_1}{\lambda_2} \right) \quad (54)$$

što je i prikazano na slici 12. U limesu niskih temperatura $T \rightarrow 0$ ($\beta J \rightarrow \infty$): $\coth(\beta J) \rightarrow 1$ pa $\xi^{-1} \rightarrow 0$ odnosno $\xi \rightarrow \infty$. Dakle, kada temperatura teži kritičnoj temperaturi $T_c = 0$, korelacijska duljina divergira tj. uspostavlja se dugodosežno uređenje. U limesu visokih temperatura $T \rightarrow \infty$ ($\beta J \rightarrow 0$): $\coth(\beta J) \rightarrow \infty$ pa $\xi^{-1} \rightarrow \infty$ odnosno $\xi \rightarrow 0$ i vidimo da na visokim temperaturama nema dugodosežnog uređenja. [5]



Slika 12: Korelacijska duljina kao funkcija T/J . [4]

5 Zaključak

Fazni prijelaz je definiran kao singularitet u Helmholtzovoj slobodnoj energiji ili u nekoj od njenih derivacija; fazni prijelaz prvog reda neke veličine je prisutan kada prva derivacija termodinamičkog potencijala ima konačan diskontinuitet, a fazni prijelaz drugog reda kada se prva derivacija mijenja kontinuirano.

Promatramo li Isingov model tj. model jednodimenzijskog lanca sa N mjesta, koji se nalazi u vanjskom magnetskom polju, onda znamo napisati hamiltonijan, a potom i particijsku funkciju takvog sustava. Particijska funkcija se zapiše preko matrice transfera kao $Z_N = \text{Tr}(V^N)$, a pošto je matrica transfera realna i simetrična, ona se može zapisati preko dijagonalne matrice koja sadrži svojstvene vrijednosti na dijagonali pa se problem svede upravo na traženje tih svojstvenih vrijednosti. Jednom kada se te svojstvene vrijednosti nađu, lako se dobiva slobodna energija, a potom i magnetizacija za koju se pokazuje da je analitička funkcija za sve $T > 0$ što znači da sustav ne pokazuje fazni prijelaz za pozitivne temperature, no za $T = 0$ fazni prijelaz postoji. U tekstu se također računa i korelacijska duljina koja govori da li u sustavu dominira dugodosežno ili kratkodosežno uređenje.

6 Popis literature

Literatura

- [1] Haerter, Jan - Statistical mechanics, the Ising model and critical phenomena - Lecture notes / 2017.
- [2] Pal Singh, Satya - The Ising Model: Brief Introduction and Its Application / 2020. ; URL: <https://www.intechopen.com/books/solid-state-physics-metastable-spintronics-materials-and-mechanics-of-deformable-bodies-recent-progress/the-ising-model-brief-introduction-and-its-application>
- [3] Ridderstolpe, Ludwig - Exact Solutions of the Ising Model , Bachelor Degree Project 15c , Department of Physics and Astronomy, Uppsala University / 2017.
- [4] Landi, Gabriel - University of São Paulo - Courses on Statistical Mechanics - Chapter 3 - Ferromagnetism alla Ising / 2017.
- [5] Santra, Sitangshu - NPTEL - Physics courses - Advanced Statistical Mechanics - Transfer matrix method / 2013. ; URL: <https://nptel.ac.in/courses/115/103/115103028/>