

FAZNI PRIJELAZI U BLUME-CAPEL MODELU

Mikulec, Magdalena

Undergraduate thesis / Završni rad

2023

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:160:823840>

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

Download date / Datum preuzimanja: **2024-11-26**



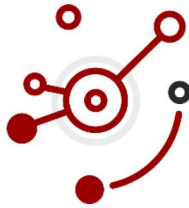
Repository / Repozitorij:

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



SVEUČILIŠTE JOSIPA JURJA STROSSMAYERA U OSIJEKU

ODJEL ZA FIZIKU



Magdalena Mikulec

FAZNI PRIJELAZI U BLUME-CAPEL MODELU

Završni rad

Osijek, 2023.

SVEUČILIŠTE JOSIPA JURJA STROSSMAYERA U OSIJEKU

ODJEL ZA FIZIKU



Magdalena Mikulec

FAZNI PRIJELAZI U BLUME-CAPEL MODELU

Završni rad

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

Osijek, 2023.

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

Osijek, 2023.

Fazni prijelazi u Blume-Capel modelu

Magdalena Mikulec

Sažetak

Blume-Capel model verzija je Isingova modela magneta, a koristi se za opisivanje magnetskih krutina koje u sebi sadrže šupljine ili kao model za proučavanje razdvajanja faza u mješavinama ^4He i ^3He . U odsustvu vanjskog magnetskog polja, Blume-Capel spin-1 model pokazuje postojanje faznog prijelaza. Ovaj rad započinje opisom nekih fizičkih pojmova koji će imati veliki značaj u daljnjoj razradi, a potom se opisuju Isingov i Blume-Capel model. Postoji nekoliko načina rješavanja Blume-Capel modela, a u ovom se radu koristi jedna od metoda koja nosi naziv metoda matrice transfera. Pomoću nje ćemo izračunati slobodnu energiju i korelacijsku funkciju za nekoliko parametara ovog modela.

(21 stranica, 1 tablica, 10 slika)

Rad je pohranjen u knjižnici Odjela za fiziku.

Ključne riječi: Isingov model / Blume-Capel model / particijska funkcija / Helmholtzova slobodna energija / fazni prijelazi / korelacijska funkcija / matrica transfera

Mentor: doc. dr. sc. Zvonko Glumac

Ocjenjivači:

Rad prihvaćen:

Phase transition in Blume-Capel model

Magdalena Mikulec

Abstract

The Blume-Capel model is a version of the Ising model for magnetic materials, and it is used to describe magnetic solids that contain cavities or as a model for studying phase separation in ^4He and ^3He mixtures. In the absence of an external magnetic field, the Blume-Capel model shows the existence of a phase transition. This paper begins with a description of some physical concepts that will be of great importance in further elaboration, followed by a description of the Ising and Blume-Capel models. There are several ways to solve the Blume-Capel model, and this paper provides the description of a method named the transfer matrix method. With its help, we will calculate the free energy and the correlation function for several parameters of this model.

(21 pages, 1 table, 10 figures)

Thesis is deposited in Department of Physics' library.

Keywords: Ising model / Blume-Capel model / partition function / Helmholtz free energy / phase transitions / correlation function / transfer matrix

Supervisor: doc. dr. sc. Zvonko Glumac

Reviewers:

Thesis accepted:

Sadržaj

1. Uvod.....	1
2. Važni pojmovi iz područja klasične i statističke fizike	2
2.1. Statistički ansambl.....	2
2.2. Particijska funkcija	2
2.3. Unutarnja energija	2
2.4. Slobodna energija	3
2.5. Magnetizacija	3
2.6. Fazni prijelazi.....	4
2.6.1. Fazni prijelaz prvog reda	5
2.6.2. Fazni prijelaz drugog reda	6
2.7. Korelacijska funkcija i korelacijska dužina.....	6
2.8. Kritični eksponenti	7
3. Isingov model.....	8
3.1. 1D Isingov model i matrica transfera	9
4. Blume-Capel model.....	10
4.1. Metoda matrice transfera.....	10
4.2. Analiza korelacijske dužine <i>scalingom</i> konačne dužine	13
5. Rješenja 1D Blume-Capel modela	17
5.1. Matrica transfera 1D BC modela.....	17
5.2. Slobodna energija 1D BC modela	18
5.3. Korelacijska funkcija 1D BC modela.....	20
6. Zaključak.....	21
7. Literatura	22
8. Životopis.....	23

Popis slika

Slika 1: Fazni dijagram vode – prikaz kritične točke [vlastita izrada]	4
Slika 2: Utjecaj spinskog uređenja na magnetizaciju sustava [vlastita izrada]	5
Slika 3: Magnetizacija M i magnetska susceptibilnost χ kao funkcije temperature [vlastita izrada].....	6
Slika 4: Slobodni i periodični rubni uvjeti 1D Isingova modela [vlastita izrada]	9
Slika 5: Korak pri množenju vektora matricom transfera [8].....	12
Slika 6: Fazni dijagram 2D BC modela [11].....	14
Slika 7: Analiza <i>scalinga</i> konačne dužine za korelacijsku dužinu [11].....	15
Slika 8: Razine slobodne energije duž prijelaza prvog reda [11]	16
Slika 9: Temperaturna ovisnost slobodne energije za 1D BC model [vlastita izrada]	19
Slika 10: Korelacijska funkcija 1D BC modela [vlastita izrada].....	20

Popis tablica

Tablica 1: Numeričke vrijednosti kritičnih eksponenata nekih modela [5].....	7
--	---

1. Uvod

Feromagnetski spin-1 sustav s kristalnim poljem, poznat kao Blume-Capel (BC) model, proširenje je tzv. Isingova modela, a svoj je naziv dobio prema prvim fizičarima koji su ga neovisno proučavali, M. Blume¹ i H. W. Capel². Ovaj model opisuje ponašanje magnetskih sustava koji mogu sadržavati šupljine, te stoga članovi-spinovi takvih sustava mogu poprimiti vrijednosti $-1, 0, 1$. Primjenjiv je na trakaste (eng. *strip*) sustave te pretpostavlja njihovu beskonačnu duljinu i konačnu širinu.

Rješenja jednodimenzijskog BC modela mogu se dobiti korištenjem npr. Monte Carlo ili Wang-Landau metode, no u ovom ćemo radu objasniti i koristiti metodu matrice transfera, koja se temelji na traženju svojstvenih vrijednosti jedne velike matrice. Fazni se prijelazi obično identificiraju diskontinuitetima u određenim funkcijama, a jedna takva funkcija jest slobodna energija, koja je određena poznavanjem particijske funkcije sustava. Pokazat će se da u ovom modelu postoji fazni prijelaz iz visokotemperaturne, neuređene paramagnetske faze u niskotemperaturnu, uređenu feromagnetsku fazu, pri određenoj temperaturi ovisno o jakosti kristalnog polja.

¹ Martin Blume (1932. – 2021.), američki fizičar.

² Hans Willem Capel (1936. – 2023.), nizozemski fizičar.

2. Važni pojmovi iz područja klasične i statističke fizike

U ovom će se odjeljku izložiti pregled nekoliko važnih pojmova iz domene klasične i statističke fizike koji će imati velik značaj u ostatku rada.

2.1. Statistički ansambl

Započinjemo pojmom statističkog ansambla, koji se odnosi na vrlo velik broj identičnih (pod)sustava koji se međusobno razlikuju samo po početnim uvjetima – to su različite mikroskopske konfiguracije sustava koje rezultiraju istim makroskopskim stanjem tog sustava. Temeljna je pretpostavka statističke mehanike da su, za izolirani sustav u ravnoteži, sva dostupna mikroskopska stanja jednako vjerojatna.

Kada promatramo sustave s velikim brojem čestica ($\sim 10^{23}$), veličine koje se proučavaju ne odnose se na svaku pojedinu česticu, već su dane kao prosječne vrijednosti nekog svojstva sustava kao cjeline. Klasična mehanika proučava vremensku ovisnost gibanja pojedine čestice sustava, dok statistička fizika obraća pažnju samo na određena makroskopska svojstva sustava, koja se dobivaju odgovarajućim *usrednjavanjem* preko mikroskopskih konfiguracija. [1]

2.2. Particijska funkcija

Particijska funkcija (*Zustandsumme* ili statistički zbroj), Z , definira se kao:

$$Z \equiv \sum_n e^{-\beta E_n}, \quad \beta \equiv \frac{1}{k_B T}, \quad (1)$$

pri čemu je E_n energija mikroskopskog stanja n , a $k_B = 1.38065 \cdot 10^{-23}$ [JK⁻¹] Boltzmannova konstanta. Particijska funkcija veza je između mikroskopske i makroskopske slike tvari. Uvodi se kao normalizacijski faktor, a u sebi sadrži sve bitne informacije o sustavu koji se promatra.

2.3. Unutarnja energija

Unutarnja energija U jest termodinamički potencijal čije su prirodne varijable entropija S , volumen V te broj čestica sustava N . Potpuni diferencijal unutarnje energije dan je relacijom:

$$dU = TdS - pdV + \mu dN. \quad (2)$$

Poznavanjem unutarnje energije sustava moguće je odrediti ostale termodinamičke parametre, poput temperature T , tlaka p i kemijskog potencijala μ .

2.4. Slobodna energija

Helmholtzova³ slobodna energija F termodinamički je potencijal koji se definira kao Legendreova preobrazba unutarnje energije U po entropiji S sustava:

$$F(T, V, N) = U - TS = U - \left(\frac{\partial U}{\partial S} \right)_{V, N} \cdot S, \quad (3)$$

pri čemu je T temperatura sustava. Poznavanje funkcije slobodne energije $F = F(T, V, N)$ daje potpuno jednaku informaciju o sustavu kao i poznavanje funkcije unutarnje energije.

Slobodna energija mjeri koristan rad koji se može dobiti iz zatvorenog termodinamičkog sustava pri konstantnoj temperaturi. Naziv *slobodna* potječe od činjenice da je pri izotermnim reverzibilnim procesima promjena rada jednaka promjeni slobodne energije, pa ona predstavlja svu *energiju slobodnu za rad* na nekoj konačnoj temperaturi. Sustav koji, pri fiksnim vrijednostima temperature i tlaka, ima dva različita ravnotežna stanja, odabrat će ono stanje koje minimizira slobodnu energiju. Osim relacijom (3), slobodna se energija može izraziti na još jedan, nama prikladniji način, a to je preko particijske funkcije, izrazom:

$$F = -k_B T \ln(Z). \quad (4)$$

Prethodna relacija predstavlja temelju vezu između mikroskopske i makroskopske fizike.

2.5. Magnetizacija

Magnetizacija M makroskopska je veličina koja opisuje poravnavanje magnetskih momenata čestica u nekom određenom, preferiranom smjeru. Prosječna magnetizacija sustava sastavljenog od N čestica označenih indeksima i dana je relacijom:

$$\langle M \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \langle s_i \rangle, \quad (5)$$

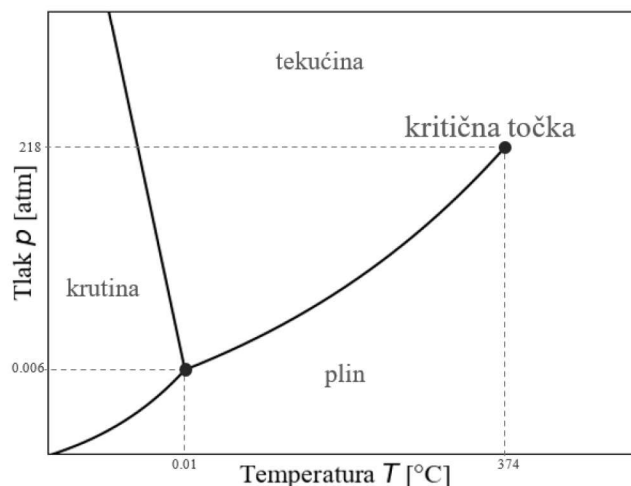
pri čemu je $\langle s_i \rangle$ prosjek po svim spinovima u ravnotežnom stanju sustava pri određenim uvjetima. Kada se magnetski momenti sustava poravnaju tako da je srednja magnetizacija sustava makroskopskog reda veličine, kaže se da je sustav feromagnetski. [1],[2]

³ Herman Ludwig Ferdinand von Helmholtz (1821. – 1894.), njemački fizičar.

2.6. Fazni prijelazi

Općenito se stvari u prirodi nalaze u različitim faznim stanjima koja su karakterizirana različitim makroskopskim svojstvima. Primjerice, voda se može naći u krutom (led), tekućem (voda) i plinovitom (vodena para) stanju. Promjene vanjskih uvjeta, poput tlaka p , temperature T , magnetskog polja \vec{h} i sl., mogu izazvati prijelaz sustava iz jednog faznog stanja u drugo, a sami proces naziva se *fazni prijelaz* (primjerice, prijelaz stvari iz tekućeg u plinovito stanje, iz feromagnetskog u paramagnetsko, itd.). Oni predstavljaju nagle, diskontinuirane promjene nekih mjerljivih parametara sustava sastavljenog od više čestica. [3]

U sustavu će doći do faznog prijelaza ukoliko mala promjena jednog od njegovih parametara uzrokuje značajnu promjenu nekog drugog njegovog parametra. Stanja stvari dolaze s odgovarajućim područjima stabilnosti. Na primjer, kod poznatog faznog prijelaza vode iz tekućine u plin, gustoća ρ ima diskontinuirani skok pri atmosferskom tlaku, no linija ovog prijelaza, definirana povećanjem tlaka, završava u tzv. kritičnoj točki T_c (slika 1).



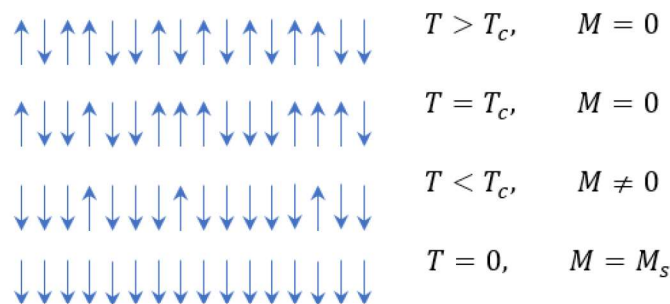
Slika 1: Fazni dijagram vode – prikaz kritične točke [vlastita izrada]

Fazne prijelaze možemo mjeriti u terminima tzv. parametra reda m , veličine koja se uvodi tako da joj je vrijednost nula u neuređenoj fazi, a prijelazom u uređenu fazu ima vrijednost m_0 iz intervala $\langle 0, 1 \rangle$:

$$m = \begin{cases} 0, & T \geq T_c \\ m_0 > 0, & T < T_c \end{cases} \quad (6)$$

gdje je T_c kritična temperatura na kojoj dolazi do promjene faza. U slučaju faznog prijelaza tekućina-plin za vodu, gustoća ρ ima ulogu parametra reda. U magnetskim sustavima, koji su nama od interesa, njegovu ulogu igra magnetizacija $M = M(T)$. [1]

Za sustav kažemo da je feromagnetski ako su spinovi svih njegovih čestica međusobno paralelni i jednako orijentirani. U ovisnosti o temperaturi, orijentacija ovih spinova se mijenja, mijenjajući na taj način i ukupnu magnetizaciju sustava (slika 2). Pri visokim temperaturama iznad kritične, $T > T_c$, svi su spinovi nasumično orijentirani i stoga je ukupna magnetizacija sustava jednaka nuli. Smanjivanjem temperature do kritične, $T = T_c$, povećava se korelacija spinova, no ukupna magnetizacija i dalje ostaje jednaka nuli. Daljnjim smanjenjem temperature, $T < T_c$, pojavit će se dominantan smjer koreliranih spinova te dolazi do pojave *spontane* magnetizacije različite od nule. Na temperaturi apsolutne nule, $T = 0$, svi će spinovi biti jednako orijentirani, što minimizira energiju sustava. [5]



Slika 2: Utjecaj spinskog uređenja na magnetizaciju sustava [vlastita izrada]

Svojstva nekog mikroskopskog stanja po definiciji se mijenjaju na faznoj granici. Slobodna energija, kao funkcija temperature, nije analitička u slučajevima kada dolazi do faznog prijelaza. To znači da derivacije određenoga reda slobodne energije ne postoje u pojedinim točkama, koje se nazivaju singulariteti. Ova promjena svojstava stanja bit će

$$\left. \begin{array}{l} \text{diskontinuirana} \\ \text{kontinuirana} \end{array} \right\} \text{ za fazni prijelaz } \left\{ \begin{array}{l} \text{prvog reda} \\ \text{drugog reda} \end{array} \right\}.$$

Općenito, najniži red derivacije slobodne energije koja pokazuje diskontinuitet nakon prelaska krivulje koegzistencije faza ujedno predstavlja i red faznog prijelaza. [4]

2.6.1. Fazni prijelaz prvog reda

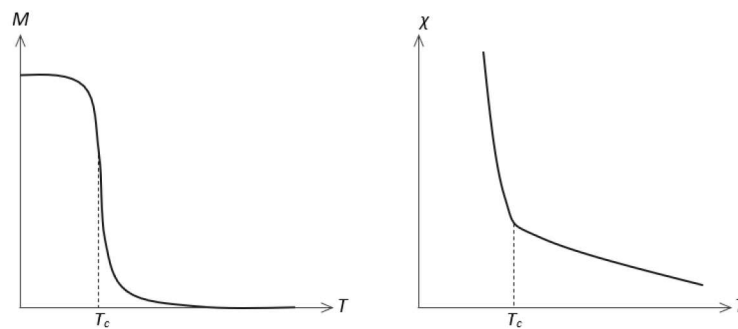
Fazni prijelaz prvog reda događa se kada je funkcija Helmholtzove slobodne energije F kontinuirana, no njene prve derivacije *nisu* kontinuirane funkcije.

Kao što je ranije spomenuto, fazne prijelaze često povezujemo s parametrom reda. Na faznoj granici dolazi do nagle promjene iz neuređenog u uređeno stanje te stoga fazne prijelaze prvog reda povezujemo s naglim skokom u parametru reda. Obično se prijelazi ovoga reda povezuju sa diskontinuitetom u entropiji S . [3]

2.6.2. Fazni prijelaz drugog reda

Fazni prijelaz drugog reda događa se kada je funkcija slobodne energije F kontinuirana funkcija, takve su i njene prve derivacije, no njene druge derivacije su diskontinuirane funkcije.

Za magnetski sustav to znači da je magnetizacija, kao prva derivacija slobodne energije u odnosu na primijenjenu jakost magnetskog polja, kontinuirana funkcija temperature koja kontinuirano raste sa snižavanjem temperature ispod kritične, tzv. Curijeve⁴ temperature. No, magnetska susceptibilnost, koja je prva derivacija magnetizacije, a time druga derivacija slobodne energije s obzirom na magnetsko polje, pokazuje diskontinuitet u T_c (slika 3). [5]



Slika 3: Magnetizacija M i magnetska susceptibilnost χ kao funkcije temperature [vlastita izrada]

2.7. Korelacijska funkcija i korelacijska dužina

Korelacijske funkcije služe statističkom opisivanju vremenske evolucije varijabli za ansambl u toplinskoj ravnoteži. Spin-spin korelacijska funkcija (kovarijanca) između dvaju spinova s_i i s_j koji se nalaze na položajima \vec{r}_i , odnosno \vec{r}_j u kristalnoj rešetci, definira se kao:

$$C(\vec{r}_i, \vec{r}_j) = \langle (s_i - \langle s_i \rangle) \cdot (s_j - \langle s_j \rangle) \rangle, \quad (7)$$

pri čemu $\langle \dots \rangle$ označava prosječnu vrijednost ansambla. Ona opisuje koliko dugo traje neko dano svojstvo sustava, prije nego se usrednji mikroskopskim gibanjima sustava, odnosno kako i kada iščezava statistički odnos dviju varijabli. Ukoliko je sustav translacijski invarijantan, tako da je $\langle s_i \rangle = \langle s_j \rangle \equiv \langle s \rangle$, tada C ovisi samo o udaljenosti dvaju spinova, \vec{r} , pa iz (7) slijedi:

$$C(\vec{r}) = C(\vec{r}_i - \vec{r}_j) = \langle s_i \cdot s_j \rangle - \langle s \rangle^2. \quad (8)$$

Ako su čestice u čvorovima \vec{r}_i i \vec{r}_j statistički nezavisne, $\langle s_i \cdot s_j \rangle = \langle s_i \rangle \cdot \langle s_j \rangle = \langle s \rangle^2$, tada korelacijska funkcija očito iščezava. U svim ostalim slučajevima, pa i u neuređenoj fazi, čestice na različitim čvorovima su korelirane, što čini korelacijsku funkciju pozitivnom.

⁴ Pierre Curie (1859. – 1906.), francuski fizičar.

Na visokim temperaturama daleko od kritične T_c , korelacijska je dužina $\xi = \xi(T)$ konačna, a korelacijska funkcija eksponencijalno opada:

$$C(r, T) \approx \frac{e^{-\frac{r}{\xi(T)}}}{r^{d-2+\eta}} \sim e^{-\frac{r}{\xi(T)}}, \quad (9)$$

gdje je $r \equiv \|\vec{r}\|$, d označava prostornu dimenziju sustava, a η je tzv. kritični eksponent. On ovisi o raznim svojstvima sustava, a služi definiranju korelacijske funkcije na kritičnoj temperaturi T_c na kojoj korelacijska dužina ξ divergira. Za sustave s konačnim brojem čestica N definira se korelacijska dužina ξ_N kao drugi moment korelacijske funkcije $C(r, N)$:

$$\xi_N^2 \equiv \langle r^2 \rangle = \frac{\sum_r r^2 C(r, N)}{\sum_r C(r, N)}, \quad (10)$$

koja se može računati i preko dviju najvećih svojstvenih vrijednosti Λ_0 i Λ_1 matrice transfera \mathbb{T} (odjeljci 3.1 i 4.1), pri čemu je $\Lambda_1 > \Lambda_0$, kao:

$$\xi_L^{-1} = \ln \left[\frac{\Lambda_1(L, T)}{\Lambda_0(L, T)} \right]. \quad (11)$$

Klasičan primjer ovakvih prostornih korelacija su fero- i antiferomagnetski materijali, u kojima se spinovi orijentiraju paralelno ili antiparalelno sa svojim najbližim susjedima. [1],[5]

2.8. Kritični eksponenti

Kao što je navedeno ranije, u kritičnim točkama postoje singulariteti nekih fizičkih veličina, a oni su izraženi kao zakon potencije, kojeg karakterizira skup kritičnih eksponenata koji određuju kvalitativnu prirodu kritičnog ponašanja promatranog sustava. Vjeruje se (iako nije dokazano) da su kritični eksponenti univerzalni, odnosno da ne ovise o detaljima pojedinog sustava, već samo o nekim njegovim općim svojstvima. Primjerice, za feromagnetski sustav oni ovise samo o dimenziji sustava, dosegu međudjelovanja čestica i dimenziji spina. Numeričke vrijednosti kritičnih eksponenata nekih modela dane su u Tablici 1, pri čemu je d prostorna dimenzija, a n dimenzija parametra reda. [5]

Tablica 1: Numeričke vrijednosti kritičnih eksponenata nekih modela [5]

	Klasa univerzalnosti	α	β	γ	δ	ν	η
$d = 3$	$n = 2$ Ising	0.10	0.33	1.24	4.80	0.63	0.04
	$n = 3$ Heisenberg	-0.12	0.36	1.39	4.80	0.71	0.04
$d = 2$	$n = 2$ Ising	0.00	1/8	7/4	15.00	1.00	1/4
	$n = q$ Potts	1/3	1/9	13/9	14.00	5/6	4/15

3. Isingov model

Isingov⁵ (ili Ising-Lenzov⁶) model jedan je od najjednostavnijih, ali ujedno i najčešće proučavanih matematičkih modela feromagnetizma u statističkoj fizici. Model pretpostavlja da se element metala sastoji od d -dimenzijske pravilne kristalne rešetke atoma, gdje je po jedna varijabla smještena na svakom mjestu u rešetci, a čija magnetska svojstva proizlaze iz nuklearnog magnetskog momenta. Uzrok pojave magnetskih dipola u atomima su spinovi čestica, koji u Isingovom modelu imaju isti smjer, ali ne nužno istu orijentaciju, tako da mogu imati vrijednosti $+1$ (\uparrow) ili -1 (\downarrow). [5]

Ising je proučavao jednodimenzijski (1D) model, čije je rješenje pronašao računanjem izraza za ponašanje vezanog skupa spinova iz particijske funkcije, što mu je omogućilo određivanje spin-spin korelacijske funkcije i slobodne energije. Pokazao je da u 1D modelu s kratkodosežnim međudjelovanjem ne postoji fazni prijelaz, dok se u dvije dimenzije (2D) može uočiti fazni prijelaz iz paramagnetskog (neuređeni spinovi, bez magnetizacije) u feromagnetsko (uređeni spinovi, trajna magnetizacija) stanje na temperaturama ispod kritične temperature T_c . No, međudjelovanja u 2D modelu suviše su složena da bi se mogla analitički riješiti s bilo kakvom lakoćom.

Glavna pretpostavka ovog modela sastoji se u tome da međudjelovanje između magnetskih iona, koji opisuju ukupno magnetsko ponašanje tvari, mora biti iznimno kratkog dosega, tj. spinovi mogu međudjelovati samo s najbližim susjedima. Stanje varijabli određuje hamiltonijan H , koji općenito predstavlja ukupnu energiju sustava kojoj doprinose pojedinačna spin-spin međudjelovanja čestica sustava. Hamiltonijan Isingovog modela oblika je:

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j - h \sum_i s_i, \quad (12)$$

pri čemu s_i označava spin na mjestu i u rešetci, koji može poprimiti vrijednosti ± 1 , prvi zbroj po $\langle i,j \rangle$ označava međudjelovanje parova najbližih susjeda, dok drugi zbroj predstavlja energiju međudjelovanja između magnetskih momenata spinova i vanjskog magnetskog polja konstantne jakosti h . Za konstantu vezanja J susjednih mjesta u rešetci vrijedi:

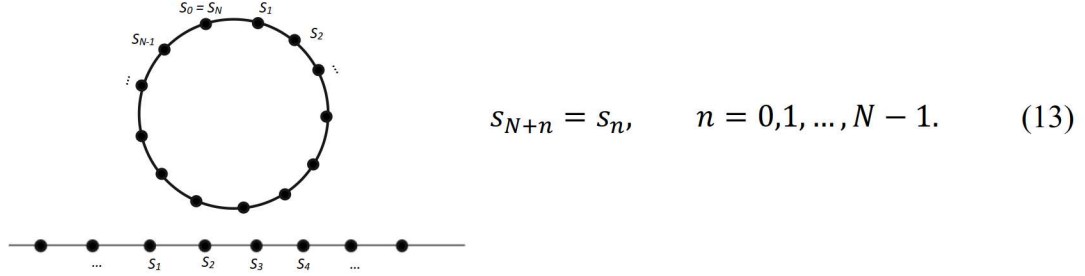
- ♦ $J > 0 \Rightarrow$ stanje najniže energije je feromagnetsko, svi spinovi su paralelni;
- ♦ $J < 0 \Rightarrow$ stanje najniže energije je antiferomagnetsko, svi spinovi su antiparalelni. [6]

⁵ Ernst Ising (1900. – 1998.), njemački fizičar.

⁶ Wilhelm Lenz (1888. – 1957.), njemački fizičar i Isingov mentor.

3.1. 1D Isingov model i matrica transfera

Promatramo sustav od N čestica-spinova s_i koje su raspoređene po x -osi (slobodni rubni uvjeti, FBC) ili po kružnici (periodični rubni uvjeti, PBC), kao na slici 4, tako da je:



Slika 4: Slobodni i periodični rubni uvjeti 1D Isingova modela [vlastita izrada]

Prema (1), particijska funkcija Isingovog modela bez magnetskog polja s periodičnim rubnim uvjetom je:

$$\begin{aligned} Z &= \sum_{s_1=\pm 1} \sum_{s_2=\pm 1} \dots \sum_{s_N=\pm 1} e^{-\beta H} \\ &= \sum_{s_1=\pm 1} \sum_{s_2=\pm 1} \dots \sum_{s_N=\pm 1} e^{Ks_1s_2} e^{Ks_2s_3} e^{Ks_3s_4} \dots e^{Ks_Ns_1}, \quad K \equiv \frac{J_0}{k_B T}. \end{aligned} \quad (14)$$

Ideja je uvesti matricu transfera \mathbb{T} , definirajući njene matrice elemente $T(s_i, s_j)$ kao:

$$T(s_i, s_j) = e^{Ks_i s_j}, \quad (15)$$

jer se, uz ovako definiranu matricu, particijska funkcija iščitava kao trag umnoška N matrica transfera (prisjetimo se, trag matrice predstavlja zbroj njenih dijagonalnih elemenata):

$$Z = \sum_{s_1=\pm 1} \sum_{s_2=\pm 1} \dots \sum_{s_N=\pm 1} T(s_1, s_2)T(s_2, s_3)T(s_3, s_4) \dots T(s_N, s_1) \equiv \text{Tr}(\mathbb{T}^N). \quad (16)$$

Budući da je trag matrice invarijantan na izbor baze, prikladno nam je odabrati upravo bazu svojstvenih vektora u kojoj je matrica \mathbb{T} dijagonalna, jer je tada trag N -te potencije jednostavno zbroj N -tih potencija svojstvenih vrijednosti λ_n matrice \mathbb{T} . Drugim riječima, račun particijske funkcije Z svodi se na dijagonalizaciju matrice transfera:

$$Z = \lambda_1^N + \lambda_2^N. \quad (17)$$

Uz $\lambda_1 > \lambda_2$, termodinamičkoj granici $N \rightarrow \infty$ dobiva se:

$$Z = \lambda_1^N \left[1 + \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right)^N \right] \approx \lambda_1^N. \quad (18)$$

4. Blume-Capel model

Blume-Capel (BC) model verzija je Isingovog modela, uz uključivanje u hamiltonijan člana kristalnog polja. Dodatak kristalnog polja značajno mijenja kritično ponašanje sustava. Hamiltonijan BC modela oblika je:

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j - \Delta \sum_i s_i^2 = E_p, \quad (19)$$

pri čemu je s_i spin na i -tom mjestu kristalne rešetke, koji sada može poprimiti vrijednosti $s_i \in \{-1, 0, +1\}$, prvi se zbroj vrši preko svih parova $\langle i, j \rangle$ najbližih susjeda rešetke, a drugi zbroj ide po svim mjestima rešetke. Konstanta J , kao i ranije, označava jakost uparivanja spinova, dok Δ predstavlja konstantu jakost kristalnog polja. [9]

BC model koristi se za opis magnetskih krutina koje u sebi sadrže vakancije (šupljine, za koje je $s = 0$) te za opis razdvajanja faza u mješavinama ^4He i ^3He . U odsustvu vanjskog magnetskog polja h , BC model obično pokazuje postojanje trikritične točke⁷ koja povezuje fazne prijelaze prvog reda, koji se pojavljuju u području nižih temperatura (jačih kristalnih polja), s prijelazima drugog reda, koji se javljaju u suprotnom području faznog dijagrama.

Kažemo da je i -to mjesto rešetke popunjeno ako je $s_i = \pm 1$, odnosno da je prazno ako je $s_i = 0$. Konstantu Δ identificiramo kao energiju stvaranja šupljina (gdje je $s_i = 0$) te ona može biti i pozitivna i negativna, ovisno o tome jesu li šupljine poželjne u sustavu ili ne. [10]

4.1. Metoda matrice transfera

Metoda matrice transfera među prvima se koristila za istraživanje faznog dijagrama feromagnetskog BC modela u 2D prostoru. To je egzaktna i deterministička metoda koja pruža direktne numeričke vrijednosti potrebne za izračunavanje slobodne energije spin-modela kristalne rešetke s vrlo velikom točnošću. Matrica transfera analogon je operatoru vremenske evolucije u kvantnoj mehanici; to je operator koji djeluje na dimenziju koja je za jedan niža od dimenzije originalnog sustava.

Promatramo 2D kvadratnu kristalnu rešetku $L \times M$ trakaste geometrije, sastavljenu od M povezanih lanaca spinova sa L mjesta. Pretpostavlja se da su spinovi u gornjem retku rešetke povezani s odgovarajućim spinovima u donjem retku, te slično za lijeve i desne stupce čvorova.

⁷ Trikritična točka odnosi se na točku susreta krivulja faznog prijelaza drugog i prvog reda. Prvi primjer trikritične točke pokazao je R. B. Griffiths u mješavinama ^3He i ^4He .

Metoda matrice transfera omogućuje izravan izračun slobodne energije modela definiranog na traci konačne širine i beskonačne duljine u smislu najveće svojstvene vrijednosti te matrice – u termodinamičkoj granici kada $M \rightarrow \infty$, najveće svojstvene vrijednosti matrice transfera \mathbb{T} bitno određuju svojstva sustava. [11]

Pod periodičnim rubnim uvjetima koji povezuju obje strane trake, tako da je $s_{1,j} \equiv s_{M+1,j}$ (zgodno je zamisliti da je traka omotana oko cilindra), hamiltonijan (19) može se napisati u simetričnom obliku kao:

$$H = \sum_{j=1}^M \left(\frac{1}{2} V_j + W_{j,j+1} + \frac{1}{2} V_{j+1} \right), \quad (20)$$

gdje su V i W dijelovi unutar i između lanaca spinova dani s:

$$V_j = -J \sum_{i=1}^L s_{i,j} s_{i+1,j} + \Delta s_{i,j}^2, \quad (21)$$

$$W_{j,j+1} = -J \sum_{i=1}^L s_{i,j} s_{i,j+1}.$$

Matrica transfera predstavlja doprinos Boltzmannovom faktoru dvaju susjednih redaka rešetke – ona djeluje duž osi cilindra, a redovi su okomiti na smjer njenog djelovanja. Moguća stanja redaka su indeksi matrice transfera. Konfiguraciju retka j predočavamo stanjem $|s_j\rangle$:

$$|s_j\rangle = |s_{1,j} s_{2,j} \dots s_{M,j}\rangle = |s_{1,j}\rangle \otimes |s_{2,j}\rangle \otimes \dots \otimes |s_{M,j}\rangle, \quad (22)$$

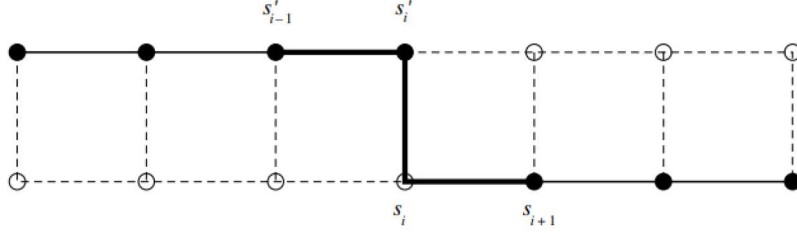
(\otimes je Kroneckerov produkt dviju matrica proizvoljnih veličina koji rezultira blok matricom).

Matrica transfera za retke j i $j + 1$ nalazi se iz $\langle s_j | \mathbb{T} | s_{j+1} \rangle$. Njene svojstvene vrijednosti mogu se odrediti numeričkom dijagonalizacijom \mathbb{T} – najveća (po apsolutnoj vrijednosti) svojstvena vrijednost λ_1 matrice \mathbb{T} određuje slobodnu energiju i korelacijsku funkciju modela.

Matrica transfera \mathbb{T} može se dalje faktorizirati na produkt tzv. rijetkih matrica:

$$\mathbb{T} = \mathbb{T}_M \mathbb{T}_{M-1} \dots \mathbb{T}_1,$$

gdje su \mathbb{T}_i njene podmatrice povezane s i -tim mjestom rešetke. Da bismo shvatili njihov eksplicitni oblik, korisno je pogledati sliku 5.



Slika 5: Korak pri množenju vektora matricom transfera [8]

Nazovimo ϕ stanje s matričnim elementima koji odgovaraju donjem retku na slici. Ako konfiguracije donjeg retka nazovemo $|s\rangle$, a gornjeg retka $|s'\rangle$, želimo izračunati elemente vektora $|\psi\rangle = \mathbb{T}|\phi\rangle$:

$$\langle s'|\psi\rangle = \langle s'|\mathbb{T}|\phi\rangle = \sum_s \langle s'|\mathbb{T}|s\rangle \langle s|\phi\rangle \quad (23)$$

za svaku konfiguraciju s' gornjeg retka. Puna matrica \mathbb{T} sadrži elemente vezanja unutar dva horizontalna retka i na vertikalnoj vezi između tih redaka. Podmatrice \mathbb{T}_i sadrže samo spojnice na podebljanim linijama na prethodnoj slici. Zbog toga možemo reći da djelovanje matrice \mathbb{T}_i zamjenjuje donji spin s_i gornjim spinom s'_i , ostavljajući preostale spinove nepromijenjenima.

Prema tome, matrica \mathbb{T} djeluje između dva stanja koja se na neki način nalaze između stanja s i s' : stanje Σ' na lijevoj strani \mathbb{T}_i predstavlja spinove $s'_1, s'_2, \dots, s'_i, s_{i+1}, \dots, s_M$, dok stanje Σ na desnoj strani \mathbb{T} predstavlja spinove $s'_1, s'_2, \dots, s'_{i-1}, s_i, \dots, s_M$. U terminima ovih stanja, koja imaju elemente redom σ_j i σ'_j (komponente Paulijevih matrica), dobivamo:

$$\begin{aligned} \langle \Sigma'|\mathbb{T}_i|\Sigma\rangle &= \langle \sigma'_1 \dots \sigma'_{i-1} \sigma'_i \sigma'_{i+1} \dots \sigma'_M | \mathbb{T}_i | \sigma_1 \dots \sigma_{i-1} \sigma_i \sigma_{i+1} \dots \sigma_M \rangle \\ &= e^{\beta J} \left[\frac{1}{2} (\sigma_i \sigma_{i+1} + \sigma'_i \sigma'_{i-1}) + \sigma_i \sigma'_i \right] \times \delta_{\sigma_1 \sigma'_1} \delta_{\sigma_2 \sigma'_2} \dots \delta_{\sigma_{i-1} \sigma'_{i-1}} \delta_{\sigma_{i+1} \sigma'_{i+1}} \dots \delta_{\sigma_M \sigma'_M}, \end{aligned} \quad (24)$$

gdje je $\delta_{i,j}$ Kroneckerov simbol. Horizontalni spojevi sadrže faktor $\frac{1}{2}$ jer se uzimaju u obzir dva puta: jednom kada matrica transfera veže prethodni redak s trenutnim, i drugi put kada veže trenutni redak sa sljedećim. Izraz (24) nije ispravan za $i = 1$ i $i = M$, jer za $i = 1$ prvi novi spin s'_1 još uvijek nema svog lijevog susjeda. Prema tome, u matrici \mathbb{T}_1 se izraz $\beta J \sigma'_1 \sigma'_M / 2$ zamjenjuje s $\beta J \sigma_1 \sigma_M / 2$. Slično, za $i = M$ vezanje $\beta J \sigma_M \sigma_1 / 2$ zamjenjujemo s $\beta J \sigma'_M \sigma'_1 / 2$. [8]

Gustoća slobodne energije f_L može se procijeniti u terminima λ_1 kao:

$$f_L(T, \Delta) = -\frac{T}{L} \ln[\lambda_1(T, \Delta)]. \quad (25)$$

U skladu s (14) i gornjim razmatranjem, particijska se funkcija može napisati kao:

$$Z = \sum_{\{s\}} \prod_{j=1}^M e^{-\frac{\beta}{2} V_j} e^{-\beta W_{j,j+1}} e^{-\frac{\beta}{2} V_{j+1}} \equiv \text{Tr} [\mathbb{T}^M]. \quad (26)$$

[11]

4.2. Analiza korelacijske dužine *scalingom* konačne dužine

Korelacijska dužina oblika (11),

$$\xi_L \equiv \frac{1}{\ln\left(\frac{\lambda_1}{\lambda_2}\right)}, \quad (27)$$

divergira u kritičnoj točki, što se uočava kao asimptotska degeneracija između dviju najvećih svojstvenih vrijednosti matrice \mathbb{T} , λ_1 i λ_2 , te označava postojanje faznih prijelaza.

U trikritičnim sustavima, treća najveća svojstvena vrijednost λ_3 također ima važnu ulogu u trikritičnoj točki, kao i u točkama faznog prijelaza prvog reda, u kojima su sve tri najveće svojstvene vrijednosti \mathbb{T} degenerirane. Veličina

$$\tilde{\xi}_L = \frac{1}{\ln\left(\frac{\lambda_1}{\lambda_3}\right)}, \quad (28)$$

koja se često naziva drugom korelacijom ili dužinom perzistencije, a uvedena je primarno upravo iz razloga dohvaćanja ovih degeneracija svojstvenih vrijednosti. Tumači se kao *scaling* duljine domene neuređene faze duž beskonačne trake, čije je *scaling* ponašanje povezano s površinskom napetošću na vezama. Ideja (*Ansatz*) *scalinga* konačne dužine sastoji se u pretpostavci homogene ovisnosti različitih fizičkih veličina o konačnoj veličini modela – ponašanje konačnog sustava u blizini kritične temperature T_c beskonačnog sustava, dominantno je određeno omjerom $L/\xi(T)$, pri čemu je L konačna dužina sustava, a $\xi(T)$ korelacijska dužina beskonačnog sustava.

Kada korelacijska dužina divergira, u blizini faznog prijelaza drugog reda dolazi do pojave velikih fluktuacija parametra reda, čija je maksimalna linearna duljina reda korelacijske dužine. Ako je najveća veličina fluktuacija manja od L , efekti konačnosti neće se opaziti ($T > T_c$), no približavanjem kritičnoj temperaturi, fluktuacije postaju sve veće i reda $\sim L$ pa se ponašanje konačnog sustava počinje bitno razlikovati od ponašanja beskonačnog sustava. [1]

Korelacijska dužina obično se na temperaturnoj osi zapisuje kao:

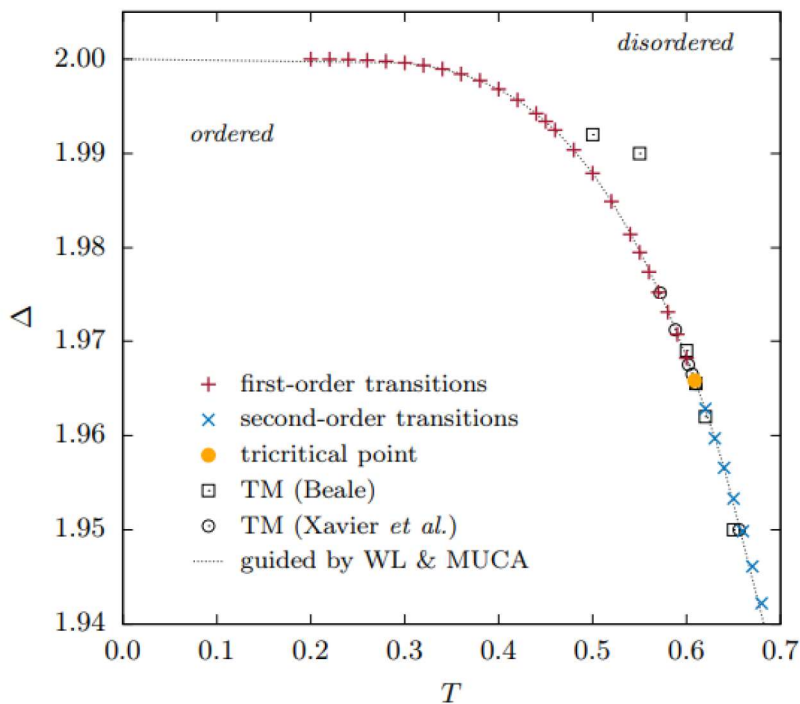
$$\xi_L \approx LQ(tL^yt), \quad (29)$$

gdje varijabla *scalinga*

$$t \equiv \frac{T - T_c}{T_c} \quad (30)$$

ima značenje odstupanja od kritične linije, a Q je univerzalna funkcija.

U $T - \Delta$ ravnini, kritična točka $\Delta_c(T)$ može se odrediti pronalaskom točke križanja krivulja ξ_L/L za različite vrijednosti L . Na slici 6 prikazan je fazni dijagram 2D BC modela u blizini trikritične točke. Točke na dijagramu dobivene su analizom korelacijske dužine *scalingom* konačne dužine, a krivulja fazne koegzistencije u području faznog prijelaza prvoga reda za $T \leq 0.5$ (simboli $+$ na slici) određena je prazninom koja se smanjuje između najvećih svojstvenih vrijednosti matrice \mathbb{T} . Simboli \times označavaju područje kontinuiranog faznog prijelaza drugog reda. Prazni simboli predstavljaju procjene prijelaznih točaka dobivene u ranijim radovima metodom matrice transfera (TM), dok je isprekidana linija vođena skupom podataka prikupljenih drugim metodama, poput Monte Carla i drugih. [11]



Slika 6: Fazni dijagram 2D BC modela [11]

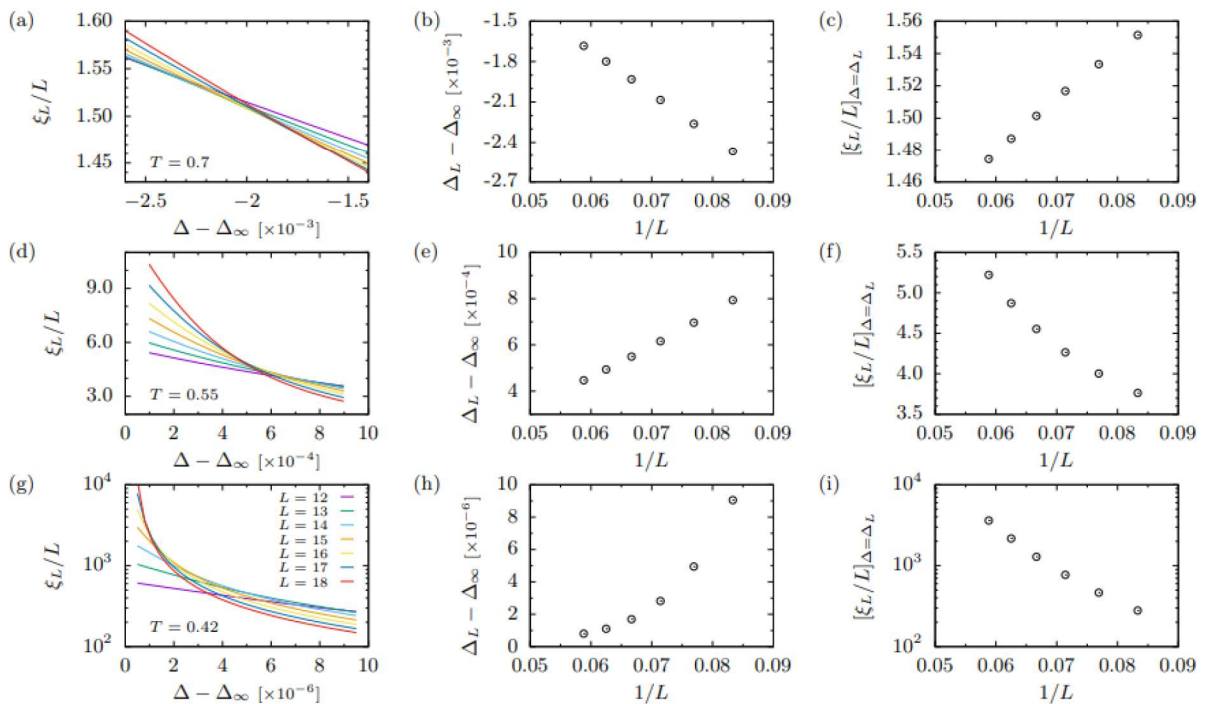
U praksi, za konačne sustave s trakama malih širina koje su dostupne u izračunima matrice transfera, križanje krivulja ne događa se egzaktno u jednoj zajedničkoj točki, što je posljedica jake korekcije *scalinga* konačne dužine. Ovaj se problem obično rješava izvođenjem ekstrapolacije zakona potencije kako bi se pronašla kritična točka u termodinamičkoj granici.

Za danu temperaturu T , točka križanja $\Delta_{L,L'}$ može se odrediti između dviju krivulja različitih širina trake L i L' rješavanjem jednakosti:

$$\frac{\xi_L(\Delta_{L,L'})}{L} = \frac{\xi_{L'}(\Delta_{L,L'})}{L'}. \quad (31)$$

Niz dobivenih $\Delta_{L,L'}$ asimptotski se približava vrijednosti Δ_∞ , koja postaje kritična točka Δ_c u granici kada $L, L' \rightarrow \infty$. Ova analiza korelacijske dužine *scalingom* konačne dužine pretpostavlja kritičnost faznog prijelaza i načelno nije primjenjiva na fazne prijelaze prvog reda, gdje takav *Ansatz* ne vrijedi. No, u praktičnim situacijama s malim sustavima, pronalaženje točke križanja često se primjenjuje na područje u blizini trikritične točke, u kojemu je utjecaj prvog reda relativno slab.

Slika 7 prikazuje razliku u ponašanju *scalinga* konačne dužine za ξ_L/L između prijelaza drugog i prvog reda za odabrane temperature $T = 0.7$ [(a) do (c)], $T = 0.55$ [(d) do (f)] i $T = 0.42$ [(g) do (i)]. Prijelaz drugog reda javlja se pri $T = 0.7$, a ξ_L/L konvergira do određene konačne vrijednosti, kao što je i pretpostavljeno u *Ansatzu*. Prijelazi prvog reda javljaju se pri $T = 0.55$ i $T = 0.42$, a veličina ξ_L/L divergira u termodinamičkoj granici.



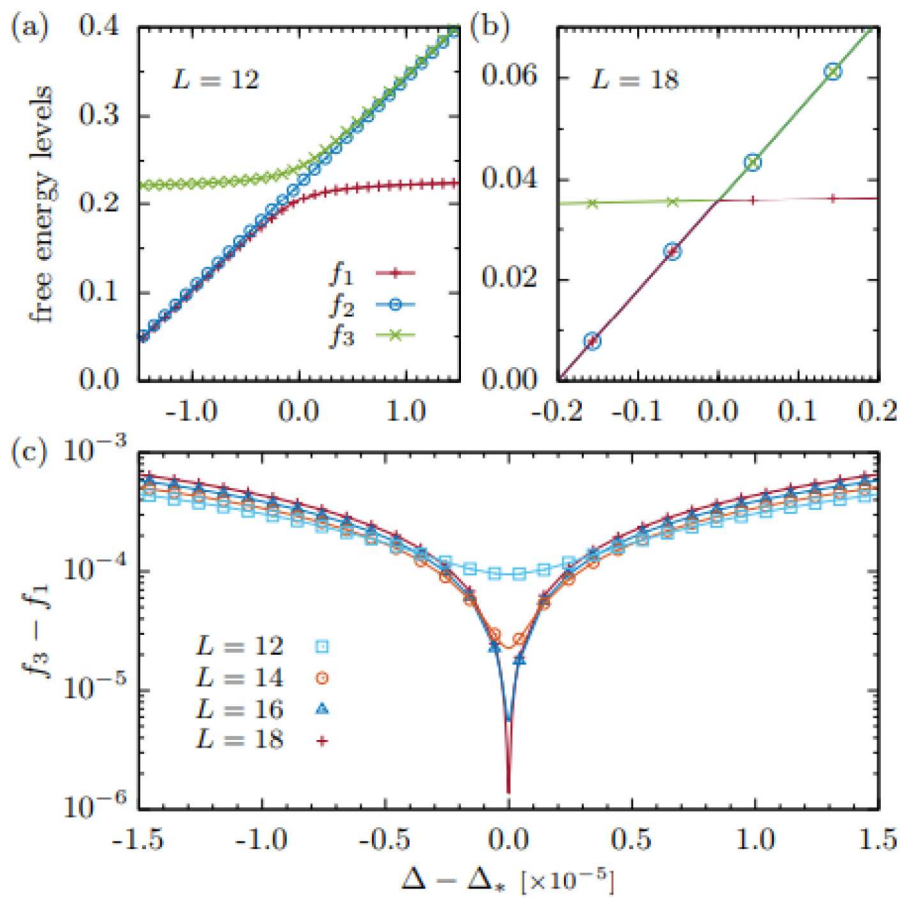
Slika 7: Analiza *scalinga* konačne dužine za korelacijsku dužinu [11]

Razine slobodne energije mogu se definirati kao:

$$f_i = -\ln \lambda_i, \quad (32)$$

što je korisno za ispitivanje kako se ravnotežna i metastabilna faza mijenjaju kroz fazni prijelaz prvog reda. U trikritičnim sustavima, koegzistencija dviju uređenih i jedne neuređene faze može se ilustrirati naglom spektralnom promjenom najvećih svojstvenih vrijednosti, a time i razina slobodne energije.

Slika 8 prikazuje ponašanje tri najniže razine slobodne energije pri $T = 0.4$, izračunatih kao funkcije od Δ , gdje je nagla promjena najniže ravnotežne slobodne energije jasno naznačena pri $\Delta = \Delta^*$. Za neuređenu fazu $\Delta > \Delta^*$, jedna osnovna razina udaljena je od preostale dvije, dok su na $\Delta < \Delta^*$ najniže razine dvostruko degenerirane kao posljedica koegzistencije dvije uređene faze. Pronalaženje takvog Δ^* koji minimizira razmak između f_i omogućuje određivanje točke faznog prijelaza prvog reda. Na slici je dan prikaz za točku prijelaza $\Delta^* = 1.9968$, pri čemu razine f_i odgovaraju svojstvenim vrijednostima $\lambda_1 > \lambda_2 > \lambda_3$. Vrijednosti f_i pomnožene su faktorom 10^3 i prikazana su odstupanja radi optimalne vizualizacije. [11]



Slika 8: Razine slobodne energije duž prijelaza prvog reda [11]

5. Rješenja 1D Blume-Capel modela

U ovom odjeljku izlažemo izračun matrice transfera, Helmholtzove slobodne energije i korelacijske funkcije za jednodimenzijски Blume-Capel model.

5.1. Matrica transfera 1D BC modela

U skladu s (16) i (19), particijska funkcija BC modela za prsten od N mjesta oblika je:

$$Z = \sum_{s_1} \sum_{s_2} \dots \sum_{s_N} e^{\beta J s_1 s_2} e^{\beta J s_2 s_3} \dots e^{\beta J s_N s_1} e^{\beta \Delta s_1^2} e^{\beta \Delta s_2^2} \dots e^{\beta \Delta s_N^2} = \text{Tr}(\mathbb{T}^N), \quad (33)$$

Budući da svaki od indeksa matrice transfera može poprimiti tri vrijednosti, 0 i ± 1 , to će matrica biti dimenzije 3×3 . U bazi u kojoj su stanja spinova prikazana matricama stupcima i matricama redovima,

$$\begin{aligned} | +1 \rangle &= \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}, & | -1 \rangle &= \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}, & | 0 \rangle &= \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \\ \langle +1 | &= [1 \quad 0], & \langle -1 | &= [0 \quad 1], & \langle 0 | &= [0 \quad 0], \end{aligned} \quad (34)$$

matrični elementi $T(s_i, s_j) \equiv \langle s_i | \mathbb{T} | s_j \rangle$ dani su s:

$$T(s_i, s_j) = \begin{cases} e^{\beta \Delta}, & s_i \neq 0 \text{ i } s_j \neq 0 \\ e^{\beta \Delta/2}, & s_i \neq s_j \text{ i } (s_i = 0 \text{ ili } s_j = 0) \\ 1, & s_i = s_j = 0 \\ e^{\beta J}, & s_i = s_j \neq 0 \\ e^{-\beta J}, & s_i \neq s_j \text{ i } (s_i \neq 0 \text{ ili } s_j \neq 0) \end{cases} = e^{\beta J s_i s_j} e^{\frac{\beta \Delta}{2} (s_i^2 + s_j^2)}. \quad (35)$$

Za matricu transfera \mathbb{T} dobivamo:

$$\mathbb{T} = \begin{pmatrix} e^{\beta(\Delta+J)} & e^{\beta \Delta/2} & e^{\beta(\Delta-J)} \\ e^{\beta \Delta/2} & 1 & e^{\beta \Delta/2} \\ e^{\beta(\Delta-J)} & e^{\beta \Delta/2} & e^{\beta(\Delta+J)} \end{pmatrix}. \quad (36)$$

Standardnim postupkom dijagonalizacije, postizemo dijagonalni izgled matrice transfera:

$$\mathbb{T} = \begin{pmatrix} \lambda_0 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_- & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_+ \end{pmatrix}, \quad (37)$$

pri čemu svojstvene vrijednosti λ_0, λ_+ i λ_- matrice transfera imaju oblik:

$$\lambda_0 = e^{\beta\Delta}(e^{\beta J} - e^{-\beta J}) = 2e^{\beta\Delta} \sinh(\beta J), \quad (38)$$

$$\begin{aligned} \lambda_{\pm} &= \frac{1}{2} [e^{\beta\Delta}(e^{\beta J} + e^{-\beta J}) + 1] \pm \sqrt{\left\{ \frac{1}{2} [e^{\beta\Delta}(e^{\beta J} + e^{-\beta J}) - 1] \right\}^2 + 2e^{\beta\Delta}} \\ &= \left[e^{\beta\Delta} \cosh(\beta J) + \frac{1}{2} \right] \pm \sqrt{\left[e^{\beta\Delta} \cosh(\beta J) - \frac{1}{2} \right]^2 + 2e^{\beta\Delta}}. \end{aligned} \quad (39)$$

Primijetimo da je $\lambda_+ > \lambda_0 > 0 > \lambda_-$ te da je λ_+ svojstvena vrijednost najvećeg iznosa.

5.2. Slobodna energija 1D BC modela

Slobodna energija F za prsten sastavljen od N čestica-spinova dobije se pomoću particijske funkcije Z relacijom (4), gdje je Z dana s:

$$Z = \text{Tr}(\mathbb{T}^N) = \lambda_+^N + \lambda_0^N + \lambda_-^N, \quad (40)$$

Pripadne svojstvene vektore tražimo na slijedeći način: treba primijetiti da je

$$\vec{\psi}_0 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix} \quad (41)$$

svojstveni vektor kojemu pripada svojstvena vrijednost $\lambda_0 = 2e^{\beta\Delta} \sinh(\beta J)$. Preostala dva svojstvena vektora moraju biti ortogonalna na $\vec{\psi}_0$ pa će biti oblika:

$$\vec{\psi}_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2 + x_{\pm}^2}} \begin{pmatrix} 1 \\ x_{\pm} \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (42)$$

Nadalje, to znači da zahtijevamo da je:

$$\mathbb{T} \begin{pmatrix} 1 \\ x \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2e^{\beta\Delta} \cosh(\beta J) + xe^{\beta\Delta/2} \\ 2e^{\beta\Delta/2} + x \\ 2e^{\beta\Delta} \cosh(\beta J) + xe^{\beta\Delta/2} \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} 1 \\ x \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (43)$$

što rezultira jednadžbama:

$$\begin{aligned} \lambda &= 2e^{\beta\Delta} \cosh(\beta J) + xe^{\beta\Delta/2} \\ \lambda x &= 2e^{\beta\Delta/2} + x. \end{aligned} \quad (44)$$

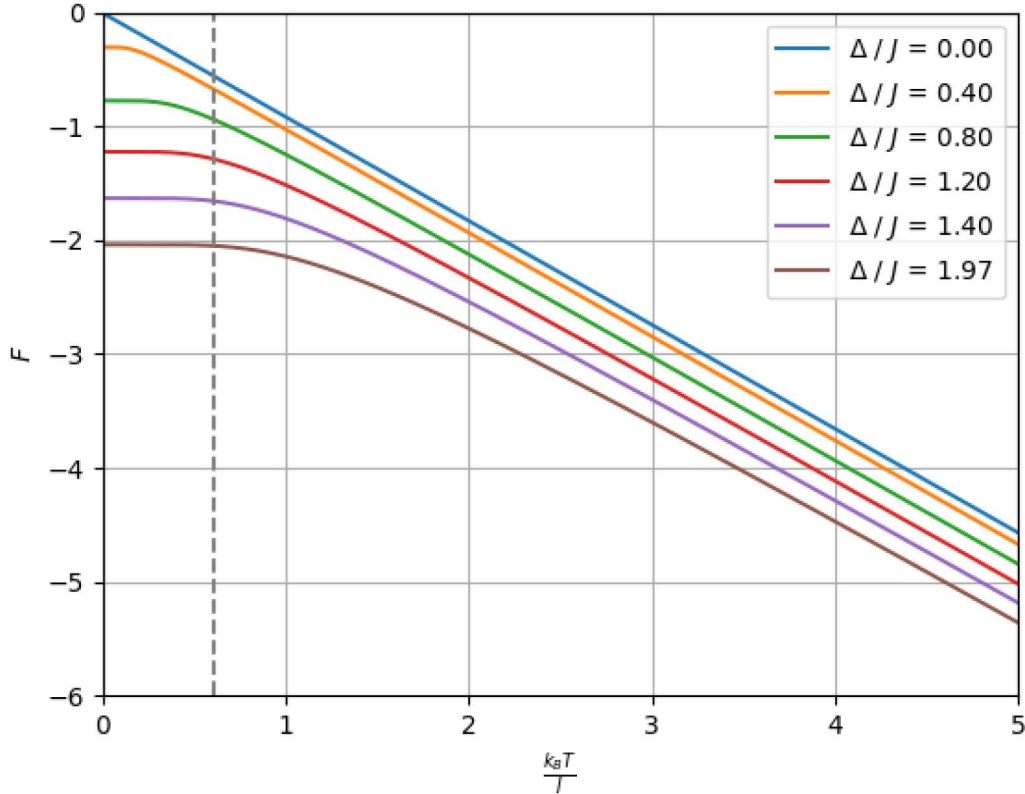
Eliminacijom $\lambda \equiv \lambda_{\pm}$ iz izraza (44), slijedi da su:

$$x_{\pm} = e^{-\beta\Delta/2} \left\{ \left[\frac{1}{2} - e^{\beta\Delta} \cosh(\beta J) \right] \pm \sqrt{\left[\frac{1}{2} - e^{\beta\Delta} \cosh(\beta J) \right]^2 + 2e^{\beta\Delta}} \right\}. \quad (45)$$

Pripadni svojstveni vektor $\vec{\psi}$ takav je da su sve njegove komponente istog predznaka. U termodinamičkoj granici $N \rightarrow \infty$ vrijedi da je $Z \approx \lambda_+^N$ pa za slobodnu energiju dobivamo:

$$\begin{aligned} F(T, \Delta, N) &= -Nk_B T \ln \lambda_+ \\ &= -Nk_B T \ln \left\{ \left[e^{\beta\Delta} \cosh(\beta J) + \frac{1}{2} \right] + \sqrt{\left[e^{\beta\Delta} \cosh(\beta J) - \frac{1}{2} \right]^2 + 2e^{\beta\Delta}} \right\}. \end{aligned} \quad (46)$$

Na slici 9 prikazana je ovisnost slobodne energije F o omjeru $k_B T/J$ za nekoliko različitih vrijednosti omjera parametara Δ/J , uz $N = 12$. Simulacijama su određene koordinate kritične točke kao $k_B T_c/J = 0.609$, $\Delta/J = 1.966$. [12]



Slika 9: Temperaturna ovisnost slobodne energije za 1D BC model [vlastita izrada]

5.3. Korelacijska funkcija 1D BC modela

Za korelacijsku funkciju $C(n)$ prstenaste konfiguracije imamo:

$$C(n) = \langle s_i s_{i+n} \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\{s_i=0,\pm 1\}} s_i s_{i+n} e^{-\beta H} = \frac{\text{Tr}(\Sigma \mathbb{T}^n \Sigma \mathbb{T}^{N-n})}{\text{Tr}(\mathbb{T}^N)}, \quad (47)$$

gdje je $\sum_{s_i, s_j} = s_i \delta_{s_i, s_j}$. Rješenje tražimo u termodinamičkoj granici $N \rightarrow \infty$. Primijetimo da je $\langle +1|\Sigma|+1 \rangle = 0$, pa očito matricu \mathbb{T} moramo pisati u obliku:

$$\mathbb{T} = \lambda_+ |+1\rangle\langle +1| + \lambda_0 |0\rangle\langle 0| + \lambda_- |-1\rangle\langle -1|, \quad (48)$$

i odabrati srednji član za n pojava matrice \mathbb{T} između gornje dvije Σ matrice. To vodi na:

$$C(n) = \left(\frac{\lambda_0}{\lambda_+}\right)^n |\langle +1|\Sigma|0 \rangle|^2. \quad (49)$$

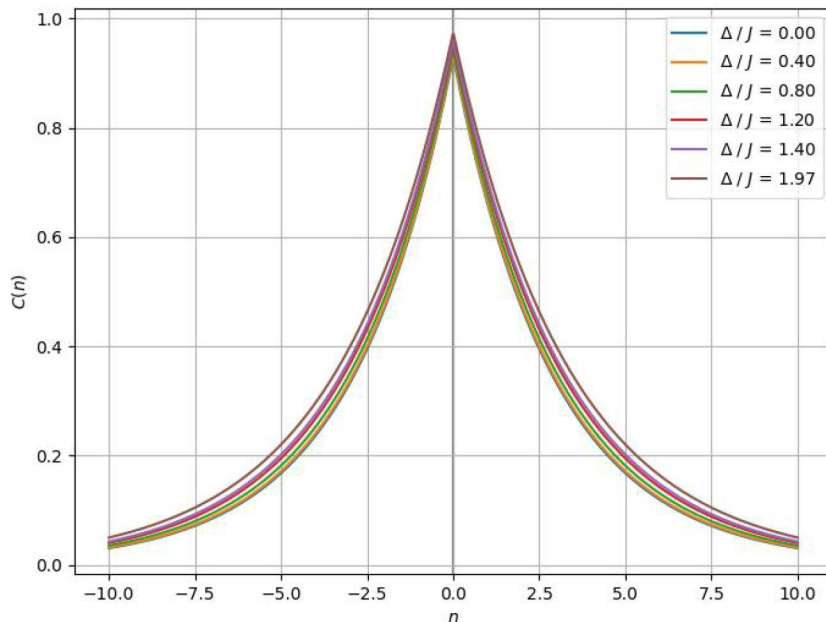
Korelacijska dužina ξ je, uz $\lambda_1 \equiv \lambda_+$ i $\lambda_2 \equiv \lambda_0$, dana relacijom (27) kao $\xi = 1/\ln\left(\frac{\lambda_+}{\lambda_0}\right)$ pa možemo pisati:

$$C(n) = A e^{-\frac{|n|}{\xi}}, \quad (50)$$

gdje rezultat sada poopćavamo na pozitivne i negativne vrijednosti n , pri čemu je:

$$A \equiv |\langle +1|\Sigma|0 \rangle|^2 = \frac{1}{1 + \frac{1}{2}x_+^2}, \quad (51)$$

Slika 10 prikazuje korelacijsku funkciju $C(n)$, za nekoliko vrijednosti omjera parametara Δ/J . [9]



Slika 10: Korelacijska funkcija 1D BC modela [vlastita izrada]

6. Zaključak

Na temelju prethodnih razmatranja, jasno se vidi kako Blume-Capel spin-1 model pokazuje fazni prijelaz pri $T = 0$ između feromagnetske, uređene, i paramagnetske, neuređene, faze. Zaista, već iz izraza (19) možemo vidjeti da će, pri temperaturi apsolutne nule i u odsustvu vanjskog magnetskog polja, svi spinovi preferirati stanja $s_i = \pm 1$ ukoliko je kristalno polje Δ pozitivnih i velikih vrijednosti, dok će za velike negativne vrijednosti Δ dominirati $s_i = 0$ stanje. Fazni prijelaz na konačnoj temperaturi između tih dviju faza može biti kontinuiran ili diskontinuiran, što zahtijeva posebne matematičke postupke za izračun fazne granice. U posebnom slučaju $\Delta = 0$, zauzeće sva tri stanja $\pm 1, 0$ jednako je vjerojatno na T_c .

Pokazali smo primjenjivost metode matrice transfera na proučavanje faznih prijelaza u području oko kritične točke. Ovi se prijelazi mogu ustanoviti usporedbom slobodne energije za feromagnetsko i paramagnetsko stanje, što je moguće postići ovom metodom budući da pruža točnu procjenu particijske funkcije i slobodne energije za različite vrijednosti parametara modela. Njezinu točnost mogli smo provjeriti usporedbom s rezultatima prikupljenim nekim drugim metodama.

Korelacijska funkcija također izražava kritično ponašanje u blizini faznih prijelaza. Ona opada eksponencijalno s povećanjem udaljenosti među spinovima, a eksponent koji karakterizira njeno trnjenje povezan je s klasom univerzalnosti faznog prijelaza. Određivanje korelacijske funkcije pomaže pri identificiranju korelacijske dužine povezane sa svakom fazom, pružajući time uvid u njihovu prirodu. Na visokim temperaturama, korelacijska dužina obično je kratka, što ukazuje na neuređene spinove, dok je u suprotnoj temperaturnoj granici ona obično znatno veća, ukazujući time veliku korelaciju spinova, odnosno visok stupanj uređenja faze.

7. Literatura

- [1] Glumac, Z., *Statistička fizika: kratak uvod*, Publisher, book-website.com, 2016.
- [2] Tong, D., *Lectures on Statistical Physics*, Cambridge: University of Cambridge, 2012.
- [3] Gros, C., *Thermodynamik & Statistische Mechanik – Theoretische Physik V*, Frankfurt: Johann Wolfgang Goethe-Universität, 2018.
- [4] Akhtar, S., *Singularities in Free Energy: Lee-Yang Theory*, IIT Bombay, 2020.
- [5] Sneppen, K., Haerter, J. O., *Complex Physics*, Copenhagen: Niels Bohr Institute, 2018.
- [6] Strečka, J., Jaščur, M., *A Brief Account of the Ising and Ising-like Models: Mean-field, Effective-field and Exact Results*, Košice: P. J. Šafarik University, 2015.
- [7] Ridderstolpe, L., *Exact Solutions of the Ising Model*, Uppsala: Uppsala University, 2017.
- [8] Thijssen, J., *Computational Physics*, Cambridge University Press, 2007., II. izdanje
- [9] Arovas, D., *Lecture Notes on Thermodynamics and Statistical Mechanics*, San Diego: University of California, 2019.
- [10] Costabile, E., Amazonas, M. A., Viana, J. R., de Sousa, J. R., *Study of the first-order transition in the spin-1 Blume–Capel model by using effective-field theory*, Elsevier B. V., 2012.
- [11] Jung, M., Kim, D. H., *First-order transitions and thermodynamic properties in the 2D Blume-Capel model: the transfer-matrix method revisited*, Gwangju: Gwangju Institute of Science and Technology, 2017.
- [12] Silva, C. J., Caparica, A. A., Plascak, J. A., *Wang-Landau Monte Carlo Simulation of the Blume-Capel Model*, Journals, 2006.,
URL: <https://journals.aps.org/pre/abstract/10.1103/PhysRevE.73.036702>

8. Životopis

Rođena sam 16. 10. 1997. u malom mjestu Jarmini u Republici Hrvatskoj. Osnovnu školu Matije Gupca u Jarmini završila sam 2012. godine te iste godine upisala Gimnaziju Matije Antuna Reljkovića u Vinkovcima, koju sam pohađala do 2016. godine. Iako sam za svoje srednjoškolsko obrazovanje odabrala smjer Jezične gimnazije, ljubav prema matematici i fizici doveli su me 2020. godine na Odjel za fiziku Sveučilišta Josipa Jurja Strossmayera u Osijeku, gdje trenutno studiram. U periodu između 2016. i 2020. godine, živjela sam i radila u Njemačkoj te stekla razna znanja i iskustva za svakodnevni život. Tri godine nakon povratka u domovinu, završavam Preddiplomski studij Fizike na Odjelu za fiziku i upisujem Diplomski studij na Odjelu, s velikom željom za daljnjim obrazovanjem i usavršavanjem.