

Tilen Huljev Čadež

Kvazi Hamiltonian za 2D Isingov model na kvadratni mreži je

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{ij} J_{ij} S_i S_j - \gamma \sum_i B_i S_i \quad (1)$$

kjer je J_1 izmenjalni integral med najbližjimi sosedi (NN), ki jih je $z_1 = 4$ in J_2 izmenjalni integral med drugimi najbližjimi sosedi (NNN) $z_2 = 4$, ostali pa so enaki 0.

Prvo ugotovimo kakšne ureditve spinov dobimo pri $T = 0$ in v odsotnosti zunanlega magnetnega polja ($B_i = 0$). Zanimali se bomo za produkt spinov najbližjih sosedov $\langle S S' \rangle_{NN}$ in drugih najbližjih sosedov $\langle S S' \rangle_{NNN}$. Osnovno stanje je tisto, ki minimizira energijo. Tako dobimo

- $J_2 = 0$

$$J_1 > 0 \quad \langle S S' \rangle_{NN} = 1/4 \quad \text{feromagnet} \quad (2a)$$

$$J_1 < 0 \quad \langle S S' \rangle_{NN} = -1/4 \quad \text{antiferomagnet} \quad (2b)$$

- $J_1 = 0$

$$J_2 > 0 \quad \langle S S' \rangle_{NNN} = 1/4 \quad \text{feromagnet/antiferomagnet} \quad (3a)$$

$$J_2 < 0 \quad \langle S S' \rangle_{NNN} = -1/4 \quad \text{stripe} \quad (3b)$$

- $J_1 \neq 0, J_2 > 0$

$$J_1 > 0 \quad \text{feromagnet} \quad (4a)$$

$$J_1 < 0 \quad \text{antiferomagnet} \quad (4b)$$

- $J_1 \neq 0, J_2 < 0$

– $J_1 > 0$

V tem primeru sklopitvi med sabo tekmujeta zato imamo pri nekem razmerju J_1/J_2 prehod med feromagnetno in stripe fazo. Energiji v posamezni fazi sta

$$E_{\text{fero}} = -1/8 (J_1 z_1 - |J_2| z_2) \quad (5a)$$

$$E_{\text{stripe}} = -1/8 |J_2| z_2 \quad (5b)$$

Meja med obema fazama poteka tam, kjer sta energiji (5) enaki iz česar dobimo

$$|J_2| = \frac{z_1}{2 z_2} J_1 \quad (6)$$

– $J_1 < 0$

Podobno kot v prejšnjem primeru

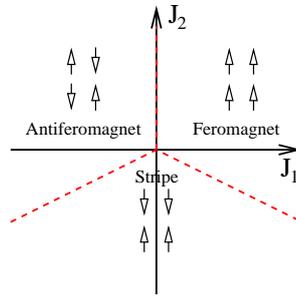
$$E_{\text{anti}} = -1/8 (|J_1| z_1 - |J_2| z_2) \quad (7a)$$

$$E_{\text{stripe}} = -1/8 |J_2| z_2 \quad (7b)$$

Meja med obema fazama je

$$|J_2| = \frac{z_1}{2 z_2} |J_1| \quad (8)$$

Fazni diagram je podan na Sliki 1. Strmina premic nosilk meje med stripe in (anti)feromagnetno fazo je $\pm z_1/(2 z_2)$, za 2D kvadratno mrežo je $\pm 1/2$.



Slika 1: Fazni diagram 2D Isingovega modela pri $T = 0$ in $B = 0$.

Pri obravnavi problema pri končni temperaturi pa se moramo poslužiti približkov, v našem primeru bo to približek povprečnega polja (mean field approximation - MFA). Hamiltonian (1) se poenostavi v

$$\begin{aligned} H_{MFA} &= - \sum_{ij} J_{ij} S_i \langle S_j \rangle + \frac{1}{2} \sum_{ij} J_{ij} \langle S_i \rangle \langle S_j \rangle - \gamma \sum_i B_i S_i = \\ &= - \sum_i B_i^{ef} S_i + \underbrace{\frac{1}{2} \sum_{ij} J_{ij} \langle S_i \rangle \langle S_j \rangle}_{\text{konst.}=C} \end{aligned} \quad (9)$$

kjer je efektivno polje

$$B_i^{ef} = B_i + \frac{1}{\gamma} \sum_j J_{ij} \langle S_j \rangle \quad (10)$$

Pričakovano vrednost spina na i -tem mestu dobimo

$$\langle S_i \rangle = \frac{\sum_{\{S_j\}} \prod_{S_j} \exp[\beta \gamma B_j^{ef} S_j] S_i \exp[-\beta C]}{\sum_{\{S_j\}} \prod_{S_j} \exp[\beta \gamma B_j^{ef} S_j] \exp[-\beta C]} = \frac{1}{2} \tanh[\beta \gamma B_i^{ef}/2]$$

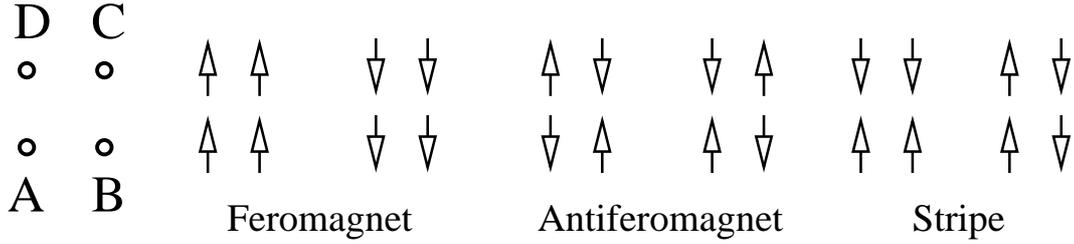
Vpeljemo

$$\begin{aligned} m_i &= 2 \langle S_i \rangle \\ b &= \beta \gamma B_0/2 \end{aligned}$$

in dobimo sistem transcendentnih enačb

$$m_i = \tanh\left[b + \beta/4 \sum_j J_{ij} m_j\right] \quad (11)$$

kjer j teče po najbližjih in drugih najbližjih sosedih od mesta i . Splošno imamo 4 mesta A, B, C, D (Slika 2).



Slika 2: Možne ureditve spinov na posameznih mestih v različnih fazah.

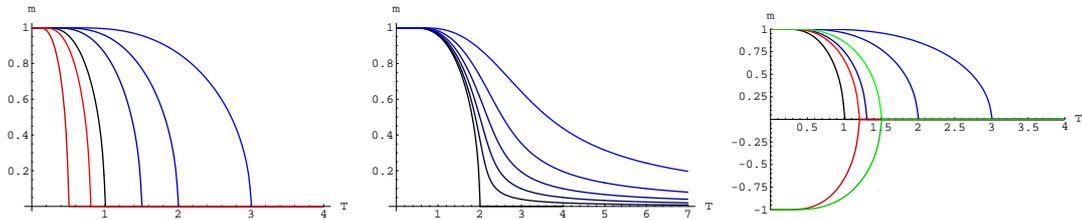
Za feromagnetno ureditev je magnetizacija na vseh mestih enaka $m_i = m \forall i$ in se enačba (11) prepiše v

$$m = \tanh[b + \xi m] \quad (12)$$

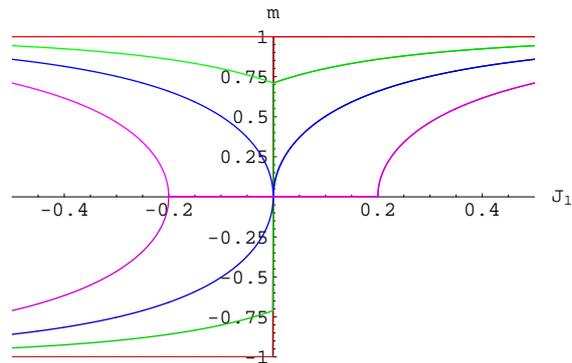
kjer je $\xi = \beta(J_1 z_1 + J_2 z_2)/4$. Temperatura faznega prehoda je pri $T_C = (J_1 + J_2)/k_B$.

V primeru antiferomagnetne ureditve imamo dve podmreži A in B ter $m_A = m_C = -m_B = -m_D$. Ponovno dobimo transcendentno enačbo (12), kjer je $\xi = \beta(-J_1 z_1 + J_2 z_2)/4$ in temperatura prehoda $T_C = (-J_1 + J_2)/k_B$.

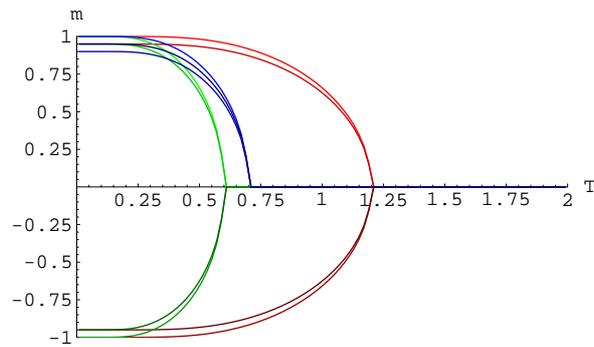
V stripe fazi imamo dve možnosti $m_A = m_B = -m_C = -m_D$ in $m_A = -m_B = -m_C = m_D$. Transcendentna enačba je spet oblike (12), kjer pa je $\xi = -\beta J_2 z_2/4$ in temperatura prehoda v urejeno stripe fazo $T_C = -J_2/k_B$.



Slika 3: Magnetizacija kot funkcija temperature dobljena z numeričnim reševanjem enačbe (12). Levo: Feromagnetni prehod z $J_1 = 1$ in $J_2 = -0.5, -0.2$ (rdeče), 0 (črno), 0.5, 1, 2 (modro) v odsotnosti magnetnega polja. Sredina: Feromagnet v magnetnem polju $b = 0, 0.04, 0.1, 0.2, 0.4, 1$ ($J_1 = J_2 = 1$). Desno: Prehod feromagnet antiferomagnet brez polja ($b = 0$) pri $J_2 = 1$, $J_1 = 0.3, 1, 2$ (modro), 0 (črno), -0.2 (rdeče), -0.5 (zeleno). Svetlejši rdeča in zelena sta magnetizaciji na podmreži A in temnejši na podmreži B.



Slika 4: Prehod feromagnet antiferomagnet: Magnetizacija kot funkcija J_1 pri konstantnem $J_2 = 1, b = 0$ in temperaturah $T = 0.1$ (rdeče), 0.8 (zeleno), 1 (modro) in 1.2 (vijolično). Svetlejši odtenek ustreza magnetizaciji na podmreži A in temnejši na podmreži B.



Slika 5: Prehod feromagnet stripe: Magnetizacija kot funkcija temperature pri konstantnem $J_1 = 1, b = 0$ in $J_2 = -0.3$ (modro), -0.6 (zeleno), -1.2 (rdeče). Narisane so magnetizacije na vseh štirih podmrežah, kjer sta magnetizaciji na mestih B in D pomnoženi s faktorjem 0.95 , v feromagnetni fazi (modro) pa je mesto C pomnoženo s faktorjem 0.9 .