Enodimenzionalna Isingova veriga (NN) v zunanjem polju

Franci Bajd

9.12.2009

0.1 Statistična vsota in termodinamske količine 1D Isingove verige

Energija enodimenzionalne Isingove verige v zunanjem polju je sestavljena iz prispevka Isingove sklopitve med najbljižjimi sosedi (NN, Nearest Neighbour) in interakcijskega člena, ki sklaplja spine z zunanjim magnetnim poljem,

$$H = J \sum_i S_i S_{i+1} + B_0 \sum_i S_i. \tag{1}$$

V izrazu nastopajo spini na i-tem mestu v 1D verigi ter njihovi sosedi na desni strani, torej spini na $i+1$-tem mestu. Energijo lahko drugače zapišemo tudi v simetrizirani obliki

$$H = J \sum_i S_i S_{i+1} + B_0 \frac{1}{2} \sum_i (S_i + S_{i+1}). \tag{2}$$

Če vpeljemo prenosno matriko T z matričnimi elementi,

$$\langle S_i | T | S_{i+1} \rangle = e^{\beta (J\, S_i S_{i+1} + B_0 \frac{1}{2}(S_i + S_{i+1})}, \tag{3}$$

potem se izkaže, da je statistična vsota enodimenzionalnega Isingovega modela s cikličnimi robnimi pogoji ($S_{N+1} = S_1$, N je število spinov) enaka vsoti N-tih potenc lastnih vrednosti prenosne matrike,

$$\begin{aligned}
\mathcal{Z} &= \sum_{\{S\}} e^{-\beta H} = \sum_{\{S\}} e^{\beta (\sum_i J\, S_i S_{i+1} + B_0 \sum_i S_i)} && (4)\\
&= \sum_{\{S\}} e^{\beta (\sum_i (J\, S_i S_{i+1} + B_0 \frac{1}{2}(S_i + S_{i+1}))} && (5)\\
&= \sum_n \lambda_n^N. && (6)
\end{aligned}$$

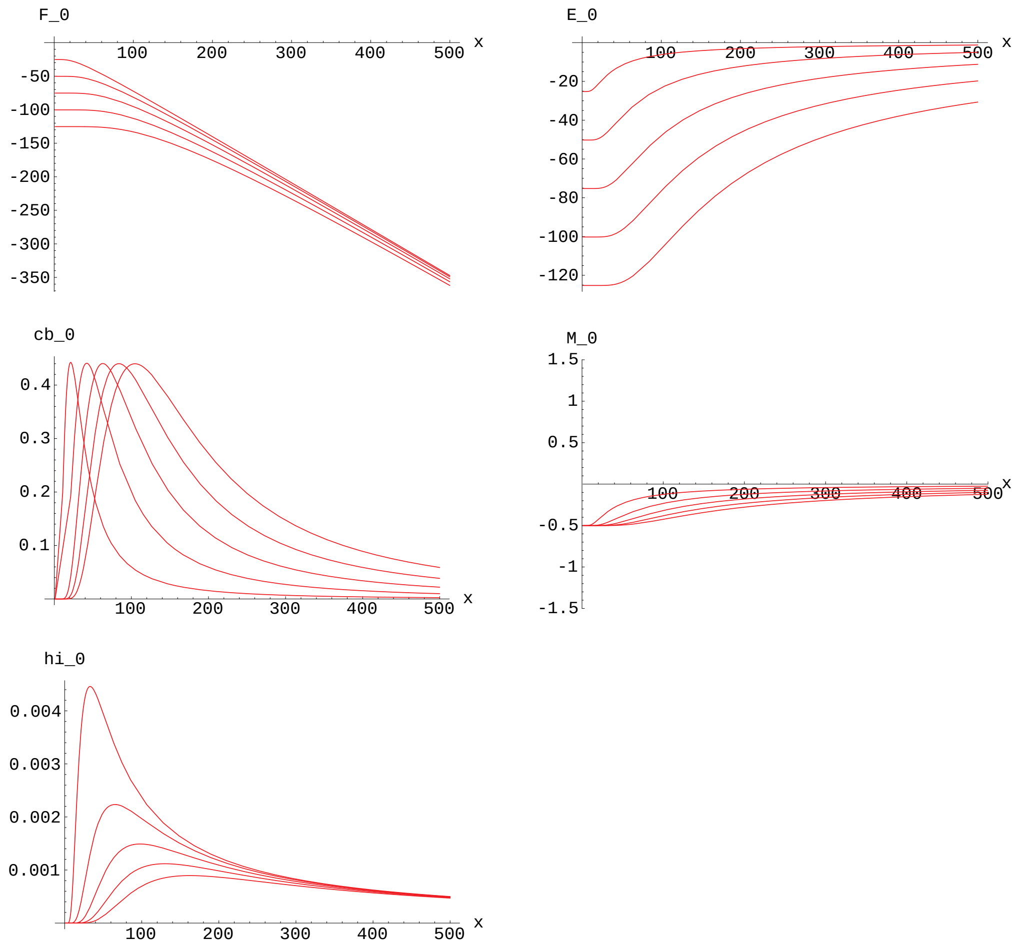
Problem izračuna statistične vsote smo tako prevedli na izračun lastnih vrednosti prenosne matrike. Statistična vsota preko znanih relacij določa relevantne termodinamske količine (prosto energijo $\mathcal{F}$, energijo E, specifično toploto c_B, magnetizacijo M in susceptibilnost χ) na sledeč način:

$$\begin{aligned}
\mathcal{F} &= -k_B T \log \mathcal{Z} && (7)\\
E &= \frac{\partial \beta \mathcal{F}}{\partial \beta} = -k_B T^2 \frac{\partial}{\partial T} \left(\frac{\mathcal{F}}{T} \right) && (8)\\
c_B &= \frac{\partial E}{\partial T} && (9)\\
M &= \frac{\partial E}{\partial B} && (10)\\
\chi &= \frac{\partial M}{\partial B} && (11)
\end{aligned}$$

0.2 Isingova veriga z $S = 1/2$

Uvedemo brezdimenzijsko temperaturo $x = k_B T/J$ in brezdimenzijsko zunanje polje $y = B_0/J$. Prenosna matrika $T_{1/2}$ (2×2) ima obliko

$$T = \begin{pmatrix} e^{\frac{1}{x}(1+y)} & e^{-\frac{1}{x}} \\ e^{-\frac{1}{x}} & e^{\frac{1}{x}(1-y)} \end{pmatrix}.$$

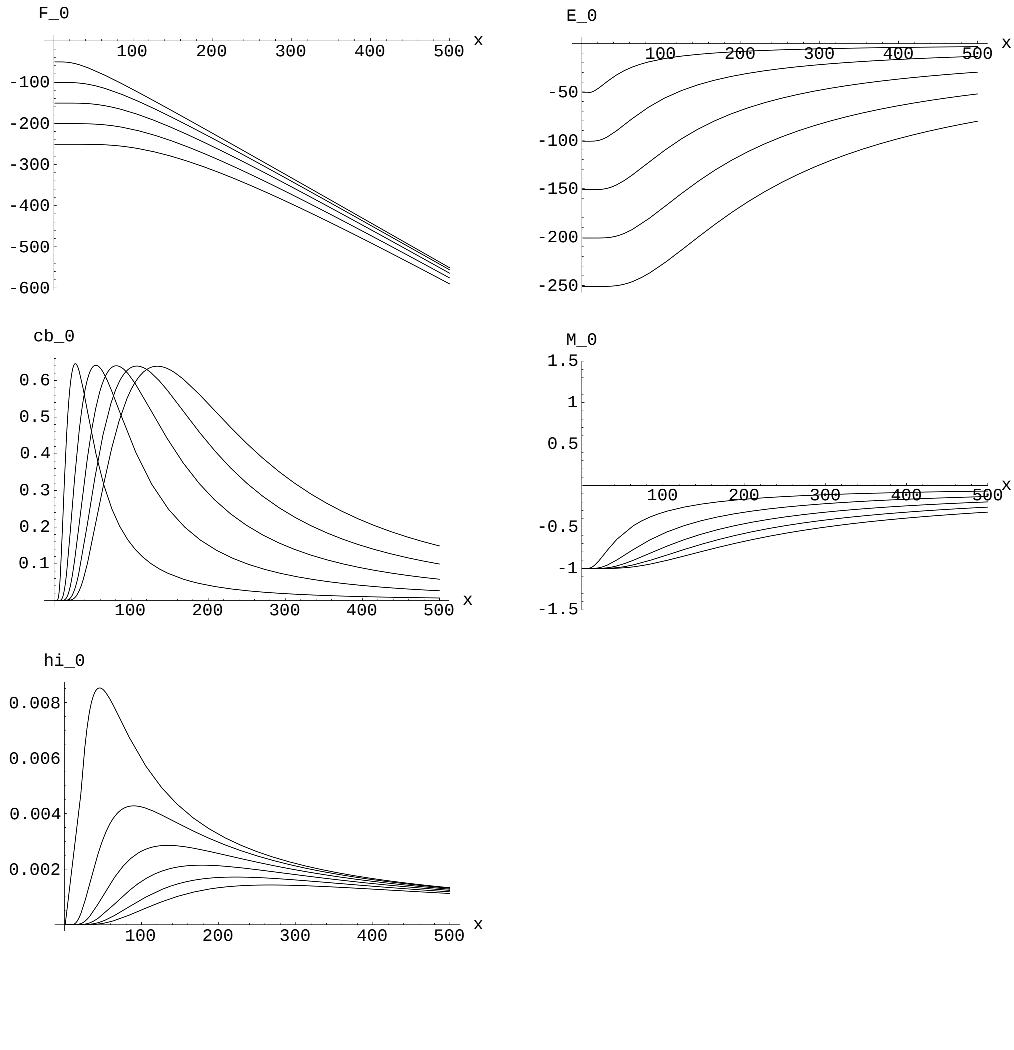


Slika 1: Termodinamske količine Isingove verige s spini $S = 1/2$: prosta energija, energija, specifična toplota, magnetizacija in susceptibilnost. Vse količine so normirane na en delec; vrednosti zunanjega polja y so 50, 100, 150 200 in 250.

0.3 Isingova veriga z $S = 1$

Prenosna matrika T_1 (3×3) ima obliko

$$T = \begin{pmatrix} e^{\frac{1+y}{x}} & e^{\frac{y}{2x}} & e^{-\frac{1}{x}} \\ e^{\frac{y}{2x}} & 1 & e^{-\frac{y}{2x}} \\ e^{-\frac{1}{x}} & e^{-\frac{y}{2x}} & e^{\frac{1-y}{x}} \end{pmatrix}.$$

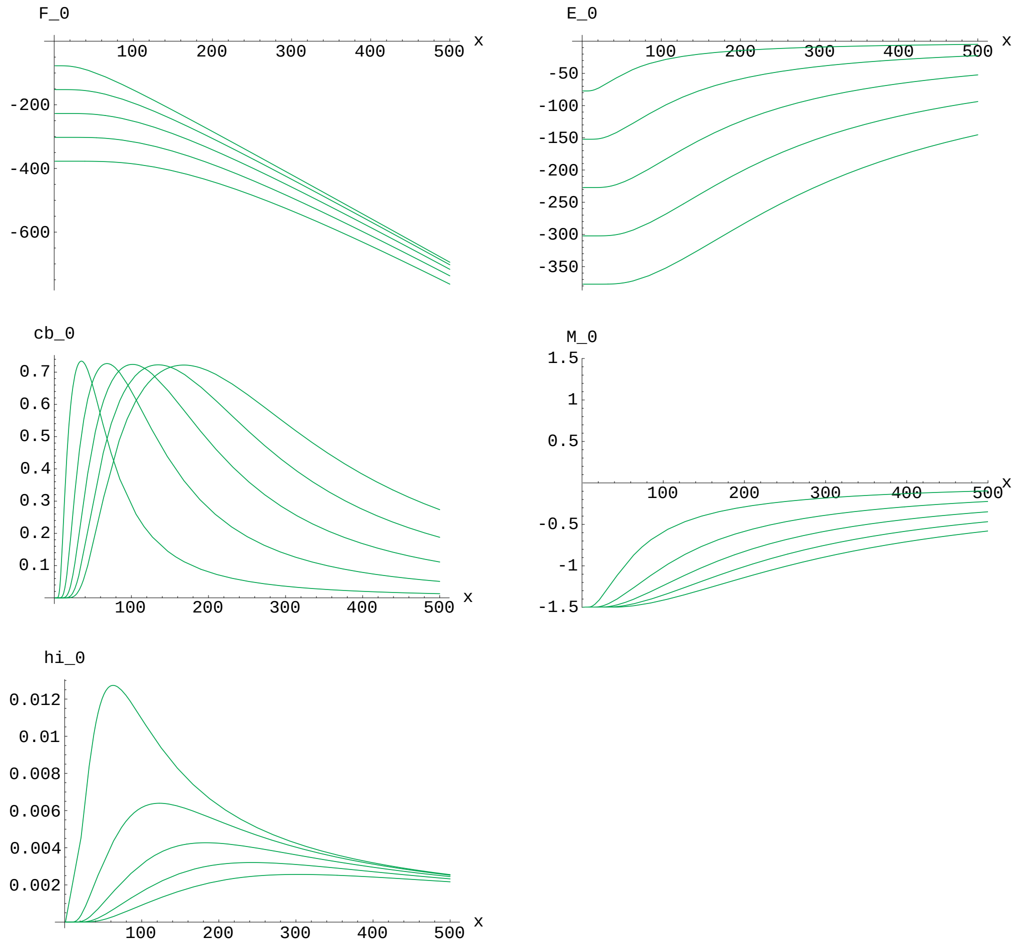


Slika 2: Termodinamske količine Isingove verige s spini $S = 1$: prosta energija, energija, specifična toplota, magnetizacija in susceptibilnost. Vse količine so normirane na en delec; vrednosti zunanjega polja y so 50, 100, 150 200 in 250.

0.4 Isingova veriga z $S = 3/2$

Prenosna matrika $T_{3/2}$ (4×4) ima obliko

$$T = \begin{pmatrix} e^{\frac{1}{x}(\frac{9}{4}+\frac{3}{2}y)} & e^{\frac{1}{x}(\frac{3}{4}+y)} & e^{\frac{1}{x}(-\frac{3}{4}+\frac{1}{2}y)} & e^{\frac{1}{x}(-\frac{9}{4})} \\ e^{\frac{1}{x}(\frac{3}{4}+y)} & e^{\frac{1}{x}(\frac{1}{4}+\frac{1}{2}y)} & e^{\frac{1}{x}(-\frac{1}{4}y)} & e^{\frac{1}{x}(-\frac{3}{4}-\frac{1}{2}y)} \\ e^{\frac{1}{x}(-\frac{3}{4}+\frac{1}{2}y)} & e^{\frac{1}{x}(-\frac{1}{4}y)} & e^{\frac{1}{x}(\frac{1}{4}-\frac{1}{2}y)} & e^{\frac{1}{x}(\frac{3}{4}-y)} \\ e^{\frac{1}{x}(-\frac{9}{4})} & e^{\frac{1}{x}(-\frac{3}{4}-\frac{1}{2}y)} & e^{\frac{1}{x}(\frac{3}{4}-y)} & e^{\frac{1}{x}(\frac{9}{4}-\frac{3}{2}y)} \end{pmatrix}.$$

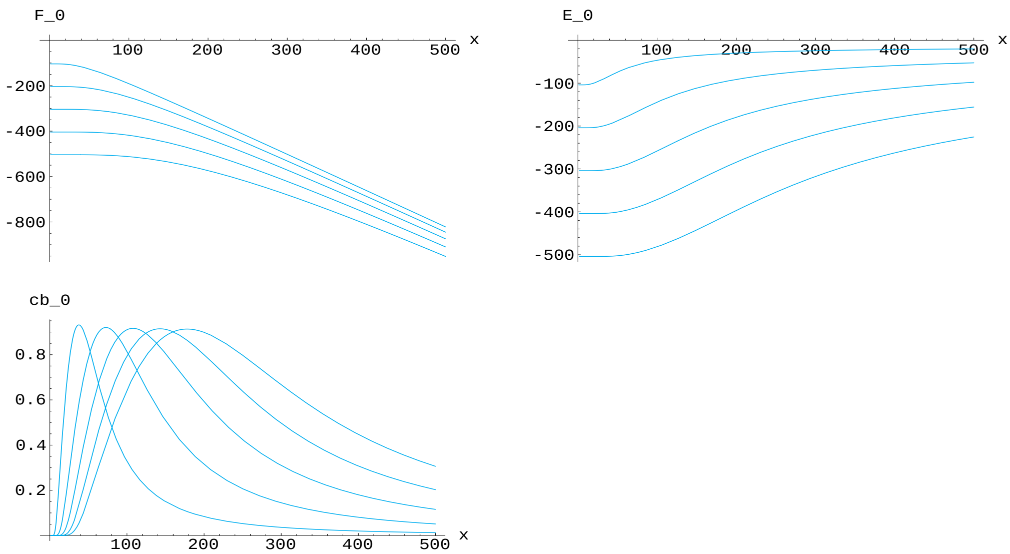


Slika 3: Termodinamske količine Isingove verige s spini $S = 3/2$: prosta energija, energija, specifična toplota, magnetizacija in susceptibilnost. Vse količine so normirane na en delec; vrednosti zunanjega polja y so 50, 100, 150 200 in 250.

0.5 Isingova veriga z $S = 2$

Prenosna matrika T_2 (5×5) ima obliko

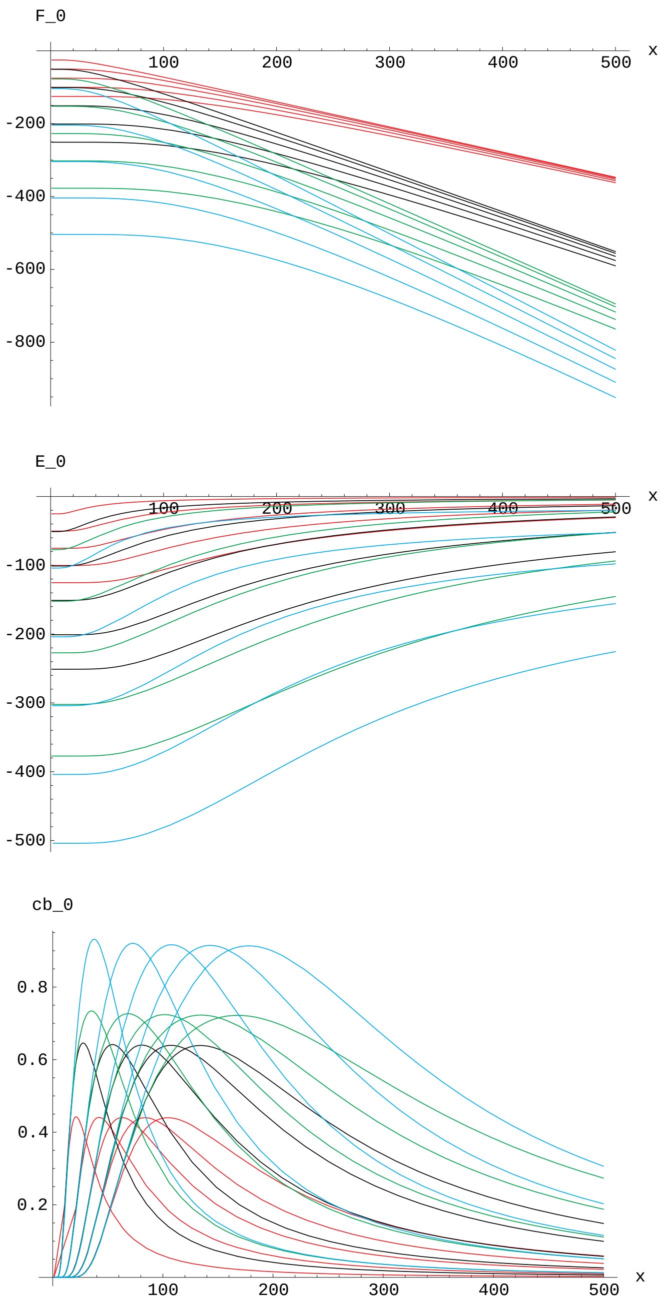
$$T = \begin{pmatrix} e^{\frac{1}{x}(4+2y)} & e^{\frac{1}{x}(2+\frac{3}{2}y)} & e^{\frac{y}{x}} & e^{\frac{1}{x}(-2+\frac{1}{2}y)} & e^{-\frac{4}{x}} \\ e^{\frac{1}{x}(2+\frac{3}{2}y)} & e^{\frac{1}{x}(1+y)} & e^{\frac{y}{2x}} & e^{-\frac{1}{x}} & e^{\frac{1}{x}(-2-\frac{1}{2}y)} \\ e^{\frac{y}{x}} & e^{\frac{y}{2x}} & 1 & e^{-\frac{y}{2x}} & e^{-\frac{y}{x}} \\ e^{\frac{1}{x}(-2+\frac{1}{2}y)} & e^{-\frac{1}{x}} & e^{-\frac{y}{2x}} & e^{\frac{1}{x}(1-y)} & e^{\frac{1}{x}(2-\frac{3}{2}y)} \\ e^{-\frac{4}{x}} & e^{\frac{1}{x}(-2-\frac{1}{2}y)} & e^{-\frac{y}{x}} & e^{\frac{1}{x}(2-\frac{3}{2}y)} & e^{\frac{1}{x}(4-2y)} \end{pmatrix}.$$



Slika 4: Termodinamske količine Isingove verige s spini $S = 2$: prosta energija, energija, specifična toplota, magnetizacija in susceptibilnost. Vse količine so normirane na en delec; vrednosti zunanjega polja y so 50, 100, 150 200 in 250.

0.6 Primerjava

Primerjava proste enerije $\mathcal{F}$, energije E in specifične toplote c_b Isingove verige s spini velikosti $S = 1/2$, $S = 1$, $S = 3/2$ in $S = 2$.



Slika 5: Prosta energija $\mathcal{F}$, energija E in specifična toplota c_b Isingove verige z $S = 1/2$, $S = 1$, $S = 3/2$ in $S = 2$.