

Fázové přechody – Isingův model

Fázové přechody prvního druhu:

- diskontinuita v první derivaci volné energie

Fázové přechody druhého druhu:

- diskontinuita v druhých derivacích A

Může statistická mechanika (partiční funkce) popsat fázové přechody?

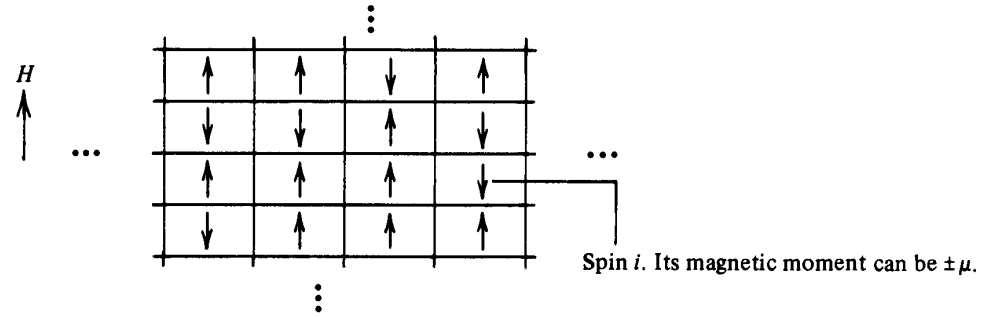


Fig. 5.1. Spins on a lattice.

$$E_v = - \sum_{i=1}^N H \mu s_i + (\text{energy due to interactions between spins})$$

$$\downarrow$$

$$s_i = \pm 1.$$

$$\downarrow$$

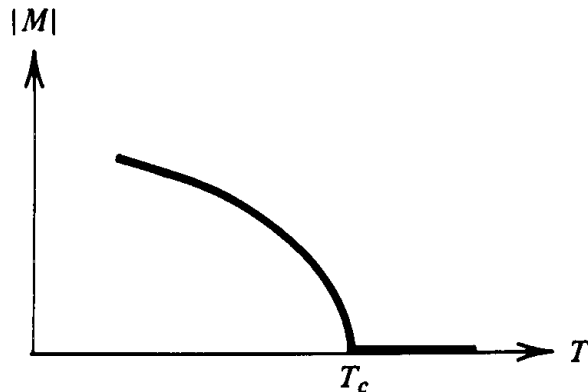
$$-J \sum_{ij}' s_i s_j$$

Topologie mříže, dimensionalita

Kubická mříž: $E_0 = -DNJ$

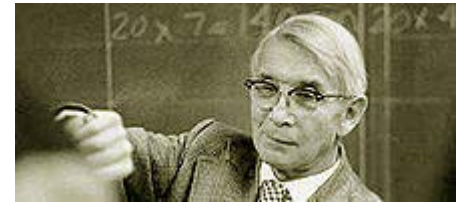
$$\langle M \rangle = \sum_{i=1}^N \mu s_i$$

$J > 0$: Spontánní magnetizace - „long ranged correlation“, „long ranged order“



T_c – kritická teplota (Curie temperature)

Makroskopické vlastnosti magnetické mříže – partiční funkce



$$Q(\beta, N, H) = \sum_v e^{-\beta E_v} = \sum_{s_1} \sum_{s_2} \dots \sum_{s_N} e^{\left[\beta \mu H \sum_{i=1}^N s_i + \beta J \sum_{ij} s_i s_j \right]}$$

Jednorozměrná mříž:

$$-J \sum_{i=1}^N s_i s_{i+1}$$

(periodické okrajové podmínky)

Neexistuje spontánní magnetizace

$$\begin{array}{cccccccc} \uparrow & \uparrow & \downarrow & \dots & \uparrow & \downarrow & \downarrow & \dots & \uparrow \\ 1 & 2 & 3 & & i-1 & i & i+1 & & N \end{array}$$

$$Q(\beta, N, 0) = [2 \cosh(\beta J)]^N$$

$$\begin{array}{ccccccc} \uparrow & \uparrow & \uparrow & \dots & \uparrow & \uparrow & \dots & \uparrow \\ 1 & 2 & & & \frac{N}{2} & & & N \end{array}$$

$$E = -NJ$$

$$\Delta E = 4J$$

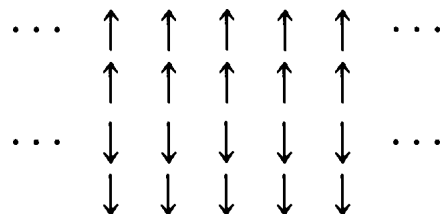
Příliš malý rozdíl pro makroskopický systém

$$T_c \approx \frac{J}{Nk} \rightarrow 0$$

$$\begin{array}{ccccccc} \uparrow & \uparrow & \uparrow & \dots & \uparrow & \downarrow & \dots & \downarrow \\ 1 & 2 & & & \frac{N}{2} & & & N \end{array}$$

$$E = (-N + 4)J$$

Dvojrozměrná mříž:



$$\Delta E = 4J\sqrt{N}$$

Analytické řešení (Onsager):

$$Q(\beta, N, 0) = [2 \cosh(\beta J) e^I]^N$$



$$T_c = 2.269J/k_B$$

Tepelná kapacita – singularita

Magnetizace

$$I = (2\pi)^{-1} \int_0^\pi d\phi \ln\left\{\frac{1}{2}[1 + (1 - \kappa^2 \sin^2 \phi)^{1/2}]\right\}$$

$$\kappa = 2 \sinh(2\beta J) / \cosh^2(2\beta J)$$

$$(C/N) \sim (8k_B/\pi)(\beta J)^2 \ln|1/(T - T_c)|$$

$$(M/N) \sim (\text{constant})(T_c - T)^\beta, \quad T < T_c, \quad \beta = 1/8$$

Trojrozměrná mříž:

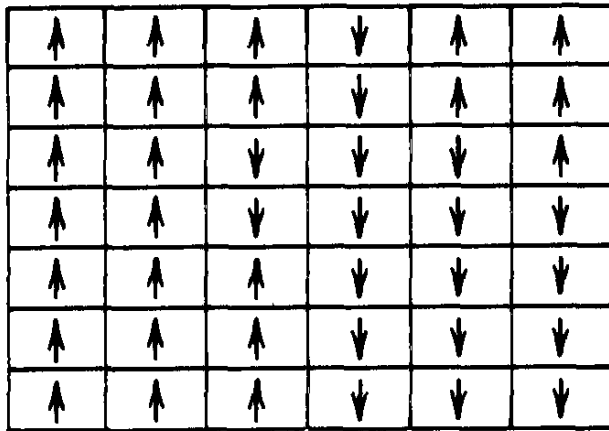
Analytické řešení není, numerické řešení:

$$(C/N) \propto |T - T_c|^{-\alpha}$$

$$(M/N) \propto (T_c - T)^\beta, \quad T < T_c,$$

$$\alpha \approx 0.125, \quad \beta \approx 0.313$$

Mřížkový plyn („Lattice Gas“)



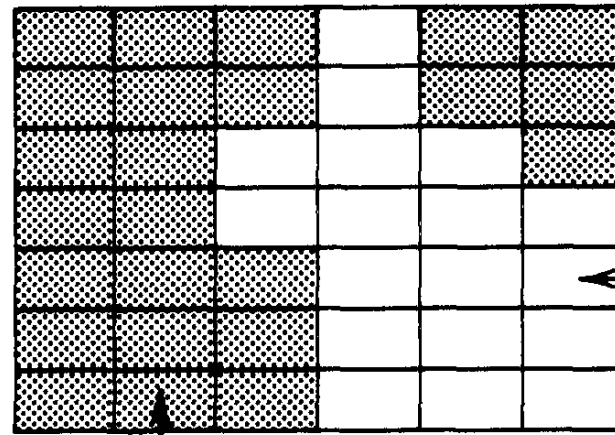
Ising magnet

$$S_i = -1, 1$$

$$-J \sum_{ij}' s_i s_j$$

$$s_i = 2n_i - 1$$

$$J = \varepsilon/4$$



Lattice gas

$$n_i = 0, 1$$

$$-\varepsilon \sum_{i,j}' n_i n_j$$

$$\Xi = \sum_{\substack{n_1, \dots, n_N \\ =0,1}} \exp \left\{ \beta \mu \sum_{i=1}^N n_i + \beta \varepsilon \sum_{ij}' n_i n_j \right\}$$

Isingův magnet – symmetry breaking

Střední hodnota magnetizace:

$$\langle M \rangle = Q^{-1} \sum_{\mathbf{v}} \left(\sum_{i=1}^N \mu s_i \right) e^{-\beta E_{\mathbf{v}}}$$

žádné vnější pole - měla by být 0

$$P_{M_v} = P_{-M_v}$$

$$Q(\beta, N, H) = \sum_{\mathbf{v}} e^{-\beta E_{\mathbf{v}}} = \sum_M \tilde{Q}(M)$$

Rozdělíme pouze na součty
přes magnetizace M

$$\tilde{Q}(M) = \sum_{\mathbf{v}} \Delta(M - M_v) e^{-\beta E_{\mathbf{v}}}$$

$M = M_v \Rightarrow 1$, v ostatních případech 0

$$A(N, H, T) = -kT \ln Q$$

$$\tilde{A}(M) = -kT \ln \tilde{Q}(M)$$

Volná energie – reverzibilní práce
potřebná ke změně magnetizace systému

Změna magnetizace vyžaduje fluktuace
velikost E^*

- Polovina magnetů musí být přetočena

$$2D \sim N^{1/2}$$

$$3D \sim N^{2/3}$$

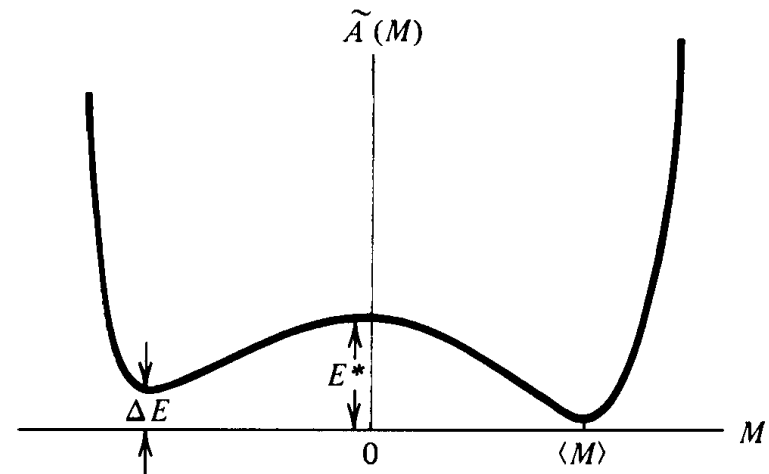
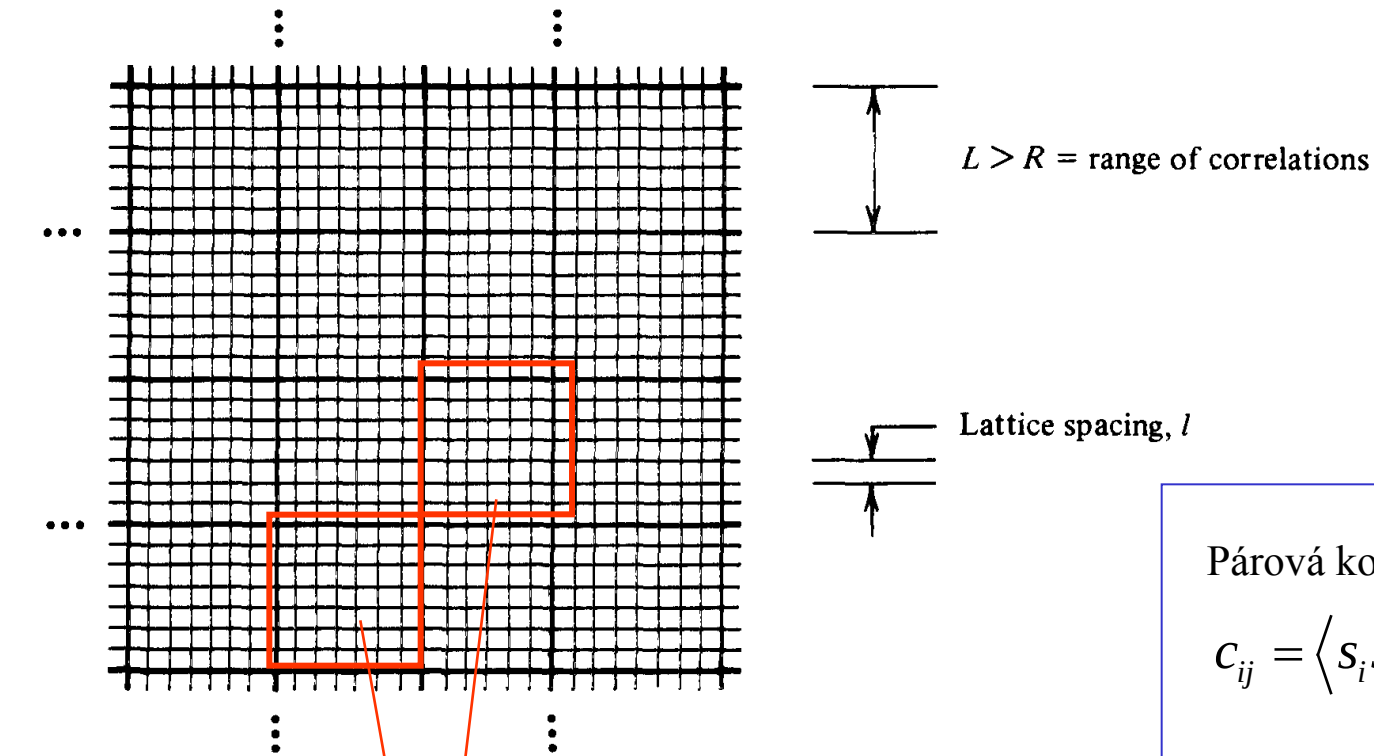


Fig. 5.4. Reversible work function for the magnetization.

Fázové přechody souvisí s rozsahem fluktuace

„Range of correlation“ – R – fluktuace jsou korelovány

body ve vzdálenosti větší – fluktuace nejsou korelovány



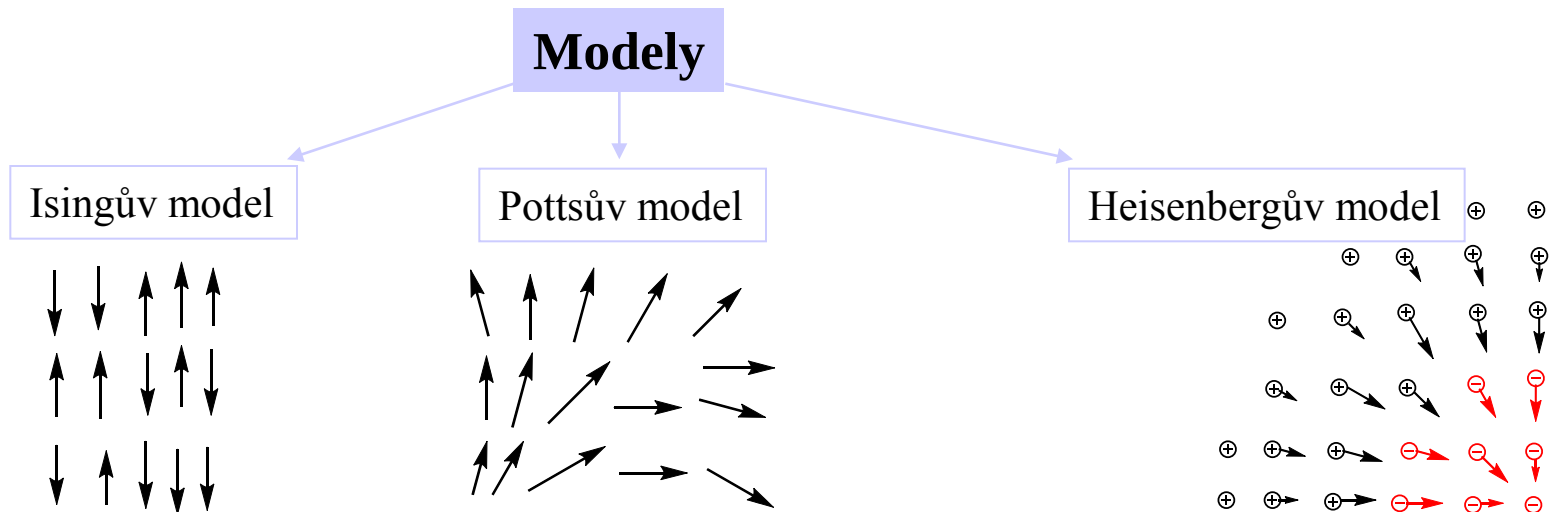
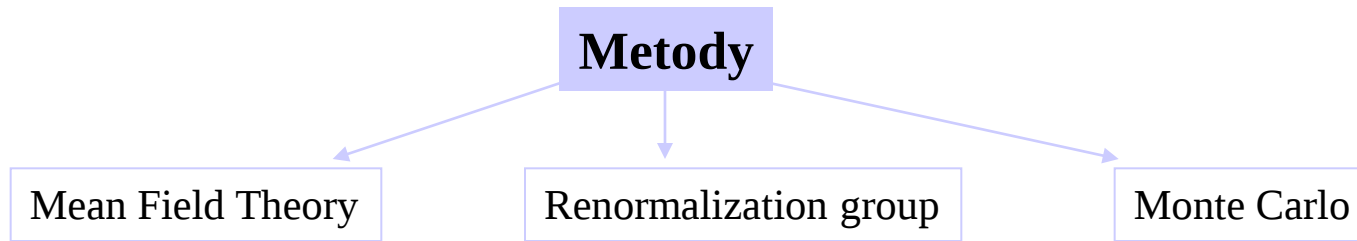
Párová korelační funkce:

$$c_{ij} = \langle s_i s_j \rangle - \langle s_i \rangle \langle s_j \rangle$$

$$R \sim nl$$

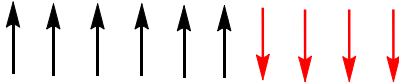
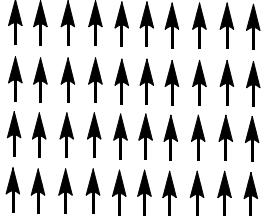
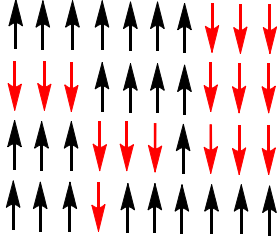
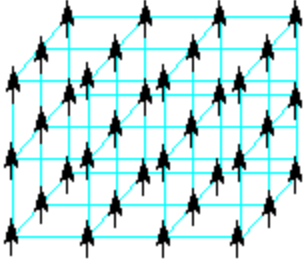
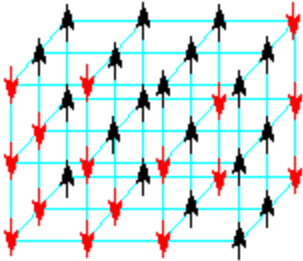
Nejsou korelovány – průměrná magnetizace je nulová.

$R \sim \text{makroskopická}$ – magnetizace může existovat – vyžaduje korelaci na makroskopické škále



Libovolná dimenzionalita modelu/problému – analytická řešení pro nízkou dimenzionalitu

Ising Model

	Low T	High T	Solved
1-D			Ising – 1925
2-D			Onsager – 1944
3-D			Proven computationally intractable - 2000

As T increases, S increases but net magnetization decreases

Mean Field Theory (1970)

Jednotlivá částice (spin) pociťuje průměrný potenciál okolních částic.

Fluktuace okolí nejsou explicitně uvažovány.

Redukce mnohočásticového problému na jednočásticový.

Aproximativní řešení – špatné zejména v okolí kritického bodu

- lze aplikovat na libovolnou dimenzionalitu

Energie Isingova modelu

$$E_v = -\mu H \sum_i s_i - \frac{1}{2} \sum_{i,j} J_{ij} s_i s_j$$

Síla působící na spin s_i

$$-(\partial E_v / \partial s_i) = \mu H + \sum_j J_{ij} s_j$$

Magnetické pole působící na s_i

$$\mu H_i = \mu H + \sum_j J_{ij} s_j$$

Fluktuace okolních spinů

$$\langle H_i \rangle = H + \sum_j J_{ij} \langle s_j \rangle / \mu = H + Jz \langle s_j \rangle / \mu$$

Počet uvažovaných sousedů

=> H_i nezávisí na orientaci okolních spinů ale pouze na průměru

Průměrný spin

$$\langle s_1 \rangle \approx \sum_{s_1 = \pm 1} s_1 \exp [\beta \mu (H + \Delta H) s_1] / \sum_{s = \pm 1} \exp [\beta \mu (H + \Delta H) s]$$


$$\Delta H = Jz \langle s_j \rangle / \mu$$

Magnetizace vztažená
na jednu částici

$$m = \langle M \rangle / N\mu = \left\langle \sum_{i=1}^N \mu s_i \right\rangle / N\mu$$

$$m = \tanh (\beta \mu H + \beta z J m)$$

s_i závisí na H_i a naopak $\rightarrow$ SCF řešení

MFT předpovídá fázový přechod i pro 1-D model ($2J/k_B$)

MFT předpovídá $T_c = 4J/k_B$ pro 2-D model (Onsager 2.3)

V rámci MFT může být model snadno vylepšován.

Renormalization group theory (1971)

Metoda určená nejen ke studiu fázových přechodů

Kenneth Wilson – 1982 Nobelova cena

1-D Isingův magnet bez vnějšího pole

$$Q(K, N) = \sum_{\substack{s_1, s_2, \dots, s_N \\ = \pm 1}} \exp [K(\dots + s_1 s_2 + s_2 s_3 + s_3 s_4 + s_4 s_5 + \dots)]$$

$$K = J/k_B T.$$

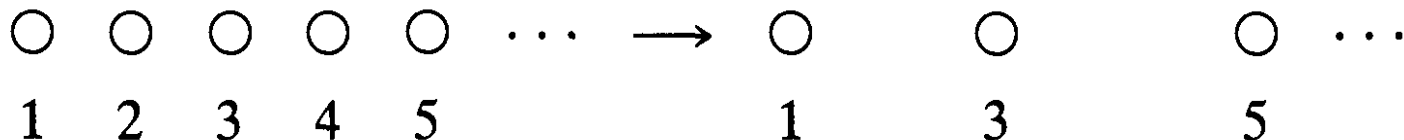
Ekvivalentní

1. Snížíme počet stupňů volnosti tak, že přes ně vysčítáme

$$Q(K, N) = \sum_{s_1, s_2, \dots, s_N} \exp [K(s_1 s_2 + s_2 s_3)] \exp [K(s_3 s_4 + s_4 s_5)] \dots$$

Vysčítáme přes sudé částice

$$Q(K, N) = \sum_{s_1, s_3, s_5, \dots} \{ \exp [K(s_1 + s_3)] + \exp [-K(s_1 + s_3)] \} \\ \times \{ \exp [K(s_3 + s_5)] + \exp [-K(s_3 + s_5)] \} \dots$$



Snížení počtu stupňů volnosti na polovinu

2. Hledáme rekurzivní vztah pomocí kterého vyjádříme Q jako funkci $N/2$ a jiné konstanty K'

$$e^{K(s+s')} + e^{-K(s+s')} = f(K)e^{K'ss'}$$

$$Q(K, N) = \sum_{s_1, s_3, s_5, \dots} f(K) \exp(K's_1 s_3) f(K) \exp(K's_3 s_5) \cdots \\ = [f(K)]^{N/2} Q(K', N/2),$$

Kadanoffova transformace

$$s = s' = \pm 1$$

$$e^{2K} + e^{-2K} = f(K)e^{K'}$$

$$s = -s' = \pm 1$$

$$f(K) = 2e^{K'}$$

$$2 = f(K)e^{-K'}$$

Dvě rovnice pro dvě neznáme:

$$K' = (1/2) \ln \cosh(2K) \\ f(K) = 2 \cosh^{1/2}(2K).$$

Hledáme $\ln Q$

$$\ln Q = Ng(K)$$

$$\ln Q(K, N) = (N/2) \ln f(K) + \ln Q(K', N/2)$$



$$g(K) = \frac{1}{2} \ln f(K) + \frac{1}{2} g(K')$$



Rovnice renormalizační grupy:

$$g(K') = 2g(K) - \ln [2\sqrt{\cosh(2K)}]$$

Známe-li partiční funkci pro jednu hodnotu K' můžeme získat $Q(K)$.

$$\ln Q = Ng(K)$$

Stejně tak můžeme získat vzorce pro opačný směr:

$$K = (1/2) \cosh^{-1}(e^{2K'})$$

$$g(K) = (1/2)g(K') + (1/2) \ln 2 + K'/2,$$

Začneme s libovolně malou nebo velkou interakční konstantou a iteračním způsobem se dostaneme k požadované hodnotě:

$$K' = 0.01$$

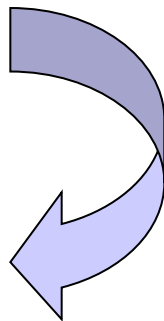
$$Q(0.01, N) \approx Q(0, N) = 2^N$$

$$g(0.01) \approx \ln 2$$



$$K = 0.100\ 334,$$

$$g(K) = 0.698\ 147.$$

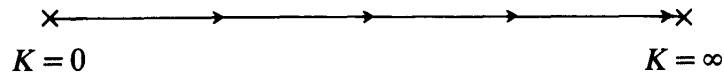


$$K = (1/2) \cosh^{-1} (e^{2K'})$$

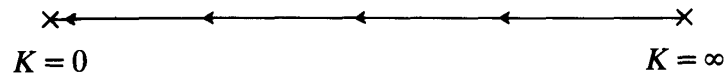
$$g(K) = (1/2)g(K') + (1/2) \ln 2 + K'/2,$$

	K	Renormalization group	Exact
Successive application of RG equations (c) and (d)	0.01	$\ln 2$	0.693 197
	0.100 334	0.698 147	0.698 172
	0.327 447	0.745 814	0.745 827
	0.636 247	0.883 204	0.883 210
	0.972 710	1.106 299	1.106 302
	1.316 710	1.386 078	1.386 080
	1.662 637	1.697 968	1.697 968
	2.009 049	2.026 876	2.026 877
	2.355 582	2.364 536	2.364 537
	2.702 146	2.706 633	2.706 634

The successive application of the RG equations can be represented by a flow diagram. Each iteration using Eq. (c) leads to higher values of K :



Each iteration using Eq. (a) leads to lower values of K :



„Fixed points“ – body, ve kterých se K dále nemění

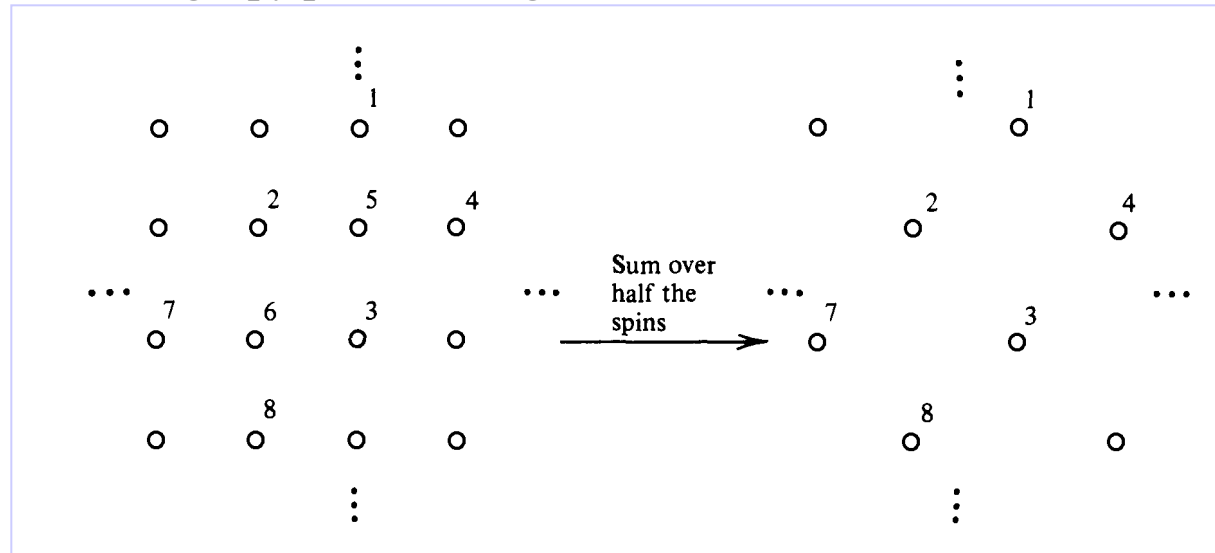
V případě 1-D modelu: $K = 0$

$K = \infty$ Triviální fixované body

Korespondují úplnému uspořádání a naprostému neuspořádání

Fázovým přechdům odpovídají netriviální fixované body

Teorie renormalizační grupy pro 2-D Isingův model



$$Q = \sum_{s_1, s_2, \dots} \dots \exp [K s_5 (s_1 + s_2 + s_3 + s_4)] \\ \times \exp [K s_6 (s_2 + s_3 + s_7 + s_8)] \dots$$

Explicitně vysčítáme polovinu částic

$$\exp [K(s_1 + s_2 + s_3 + s_4)] + \exp [-K(s_1 + s_2 + s_3 + s_4)] \\ = f(K) \exp [K'(s_1 s_2 + s_1 s_4 + s_2 s_3 + s_3 s_4)]$$

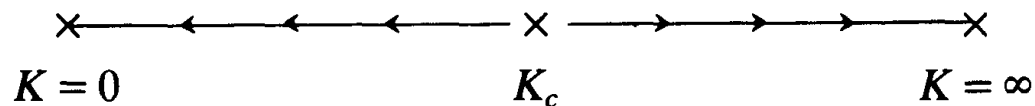
↑
[?]

Kadanoffova transformace
Ve 2-D nelze přesně nalézt

$$K_1 = \frac{1}{4} \ln \cosh (4K), \\ K_2 = \frac{1}{8} \ln \cosh (4K), \\ K_3 = \frac{1}{8} \ln \cosh (4K) - \frac{1}{2} \ln \cosh (2K), \\ f(K) = 2[\cosh (2K)]^{1/2}[\cosh (4K)]^{1/8}.$$

Redukce počtu částic vede na zvýšení počtu interakčních konstant → **aproximace**

Řada možností, jak rekurzivní vzorec aproximovat:



Fixed point
Odpovídá fázovému přechodu

$$\frac{J}{k_B T_c} = 0.50698$$

Kritická teplota v rámci RG metody je blízka exaktní hodnotě (0,44)