UNIVERZA V LJUBLJANI
FAKULTETA ZA MATEMATIKO IN FIZIKO

Fizika – 2. stopnja

Luka Černe

Notranja energija pri 1D Isingovem modelu, s spinom 1

Domača naloga pri statistični fiziki

Ljubljana, 2013

Kazalo

1 Uvod

Cilj naloge je izračunati notranjo energijo enodimenzionalne verige spinov z uporabo prehodnih matrik. Upoštevali bomo le interakcijo med najbližjimi sosedi. Analitično bomo rešili sistem brez zunanjega magnetnega polja, ogledali pa si bomo tudi numerično rešitev problema, v primeru, ko polje imamo.

2 Primer brez zunanjega polja

Problema se lotimo tako, da najprej zapišemo hamiltonjan za naš problem. Ker nimamo zunanjega magnetnega polja, je naš hamiltonjan oblike:

$$H = -J \sum_{i=1}^{N} \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z, \tag{1}$$

kjer je N število spinov v verigi, σ^z paulijeva matrika in J jakost sklopitve. Pri reševanju upoštevamo periodične robne pogoje, kar pomeni $N + i = i$.

Kot vemo, lahko fazno vsoto zapišemo v obliki:

$$Z = tr(e^{-\beta H}) = e^{-\beta F}, \tag{2}$$

kjer je Z fazna vsota, $\beta = 1/k_b T$ in F prosta energija sistema.

Izraz (2) lahko preoblikujemo tako, da uporabimo prehodno matriko. Velja namreč:

$$Z = tr(K^N), \tag{3}$$

kjer je K prehodna matrika. Prehodna matrika K je oblike:

$$K = \begin{pmatrix} e^{\beta J} & 1 & e^{-\beta J} \\ 1 & 1 & 1 \\ e^{-\beta J} & 1 & e^{\beta J} \end{pmatrix}$$

Ker v naši fazni vsoti nastopa zgolj sled matrike K^N je dovolj, če izračunamo zgolj lastne vrednosti matrike K, saj velja:

$$tr(K^N) = \lambda_1^N + \lambda_2^N + \lambda_3^N, \tag{4}$$

kjer so λ_1, λ_2 in λ_3 lastne vrednosti matrike K. Za lastne vrednosti dobimo izraze:

$$\lambda_1 = e^{-\beta J}(e^{2\beta J} - 1)$$
$$\lambda_2 = \frac{1}{2} e^{-\beta J}(1 + e^{\beta J} + e^{2\beta J} + \sqrt{1 - 2e^{\beta J} + 11e^{2\beta J} - 2e^{3\beta J} + e^{4\beta J}}$$
$$\lambda_3 = \frac{1}{2} e^{-\beta J}(1 + e^{\beta J} + e^{2\beta J} - \sqrt{1 - 2e^{\beta J} + 11e^{2\beta J} - 2e^{3\beta J} + e^{4\beta J}}$$

V termodinamični limiti t.j., ko gre N proti nsekončno, bo pomembna samo največja lastna vrednost, ki pa je λ_2. V termodinamični limiti tako velja:

$$Z = \lambda_2^N. \tag{5}$$

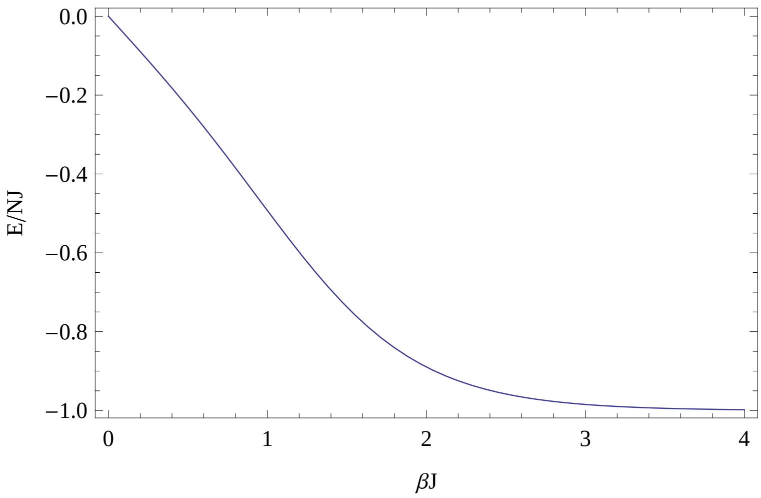
Sedaj moramo zgolj še izračunati energijo sistema. Vemo da velja:

$$E = -\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta} = -N \frac{\partial \ln \lambda_2}{\partial \beta}, \tag{6}$$

kjer je E energija našega sistema. Če izraz (6) odvajamo, dobimo:

$$E = NJ \left(1 - \frac{e^{\beta J} + 2e^{2\beta J} + \frac{-2e^{\beta J} + 22e^{2\beta J} - 6e^{3\beta J} + 4e^{4\beta J}}{2\sqrt{1 - 2e^{\beta J} + 11e^{2\beta J} - 2e^{3\beta J} + e^{4\beta J}}}}{1 + e^{\beta J} + e^{2\beta J} + \sqrt{1 - 2e^{\beta J} + 11e^{2\beta J} - 2e^{3\beta J} + e^{4\beta J}}} \right) \tag{7}$$

Funkcijska oblika energije je prikazana na sliki 1 .



Slika 1: Graf energije 1D spinskega sistema, v odvisnosti od temperature.

3 Primer z zunanjim poljem

Sedaj si oglejmo še primer, ko imamo zunanje polje. Hamiltonjan bo imel sedaj sledečo obliko:

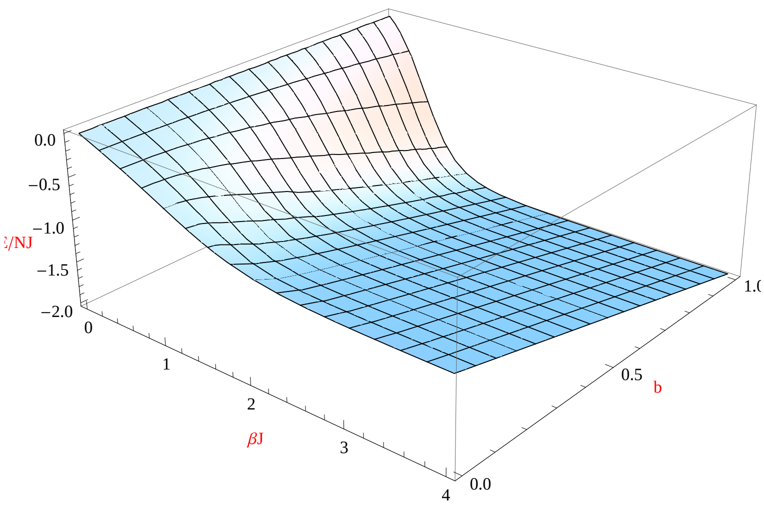
$$H = -J \sum_{i=1}^{N} \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z - \frac{b}{2} \sum_{i=1}^{N} (\sigma_i^z + \sigma_{i+1}), \tag{8}$$

kjer je b parameter jakosti zunanjega magnetnega polja. Pri reševanju bomo zopet upoštevali periodične robne pogoje.

Zopet zapišemo fazno vsoto kot v enačbi (3), le da bo imela tokrat matrika K drugačne elemente kot v prvem primeru. Matrika K bo v tem primeru:

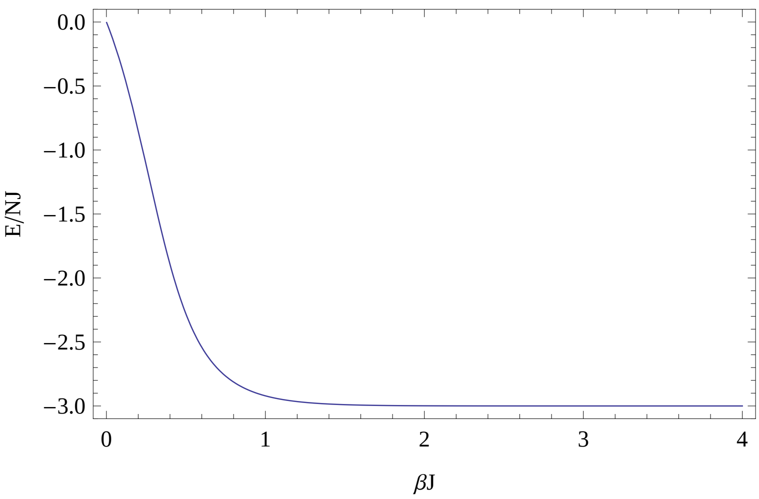
$$K = \begin{pmatrix} e^{\beta(J+b)} & e^{\frac{\beta b}{2}} & e^{-\beta J} \\ e^{\frac{\beta b}{2}} & 1 & e^{-\frac{\beta b}{2}} \\ e^{-\beta J} & e^{-\frac{\beta b}{2}} & e^{\beta(J-b)} \end{pmatrix}$$

Kot v prejšnjem primeru, nas tudi tu zanimajo zgolj lastne vrednosti matrike K oz. največja lastna vrednost matrike K. Ker v tem primeru dobimo precej grše izraze za lastne vrednosti, bom predstavil samo končno obliko energije sistema z zunanjim poljem. Graf energije sistema v odvisnosti od temperature in zunanjega magnetnega polja je prikazan na sliki 3.



Slika 2: Graf energije 1D spinskega sistema, v odvisnosti od temperature in zunanjega magnetnega polja.

Iz slike lepo vidimo, da v primeru, ko je $b = 0$, dobimo enak rezultat kot prej, kar je seveda tudi pričakovano. V primeru, ko zunanje polje ni nič, pa vidimo, da energija z βJ hitreje pada in doseže tudi nižjo vrednost kot v odsotnosti polja. Prerez pri $b = 1$ je prikazan na sliki 3.



Slika 3: Graf energije 1D spinskega sistema, v odvisnosti od temperature za $b = 1$.

Literatura

[1] M.Plischke in B.Bergersen, *Equilibrium Statistical Physics*, (World Scientific, 2006)