UNIVERZITET U NOVOM SADU
INSTITUT ZA FIZIKU

D I P L O M S K I R A D

U Novom Sadu, oktobar 1979.

T A Č N O   R E Š E NJ E
I Z I N G O V O G   M O D E L A

DANICA GAJIĆ

Zahvaljujem se dr Mariu Škrinjaru i dr Darku Kaporu na pomoći prilikom izrade diplomskog rada.

S A D R Ž A J

I
FAZNI PRELAZI

Veliki značaj koji se u okviru fizike kondenzovanog stanja pridaje problemu faznih prelaza, uslovljen je i činjenicom da taj problem obuhvata niz različitih fizičkih objekata-tečnosti, magnetike, binarne smeše i binarne legure, superprovodnike,DNK, polimere itd.

U jednoj od najpoznatijih klasifikacija faznih prelaza, Erenfestovoj, pored faznih prelaza prve vrste, za koje je karakterističan skok prvih izvoda termodinamičkog potencijala u tački prelaza, uvodi se i pojam faznih prelaza druge vrste. Za ove prelaze su prvi izvodi termodinamičkog potencijala u tački prelaza neprekidni, a skok trpe izvodi drugog reda.

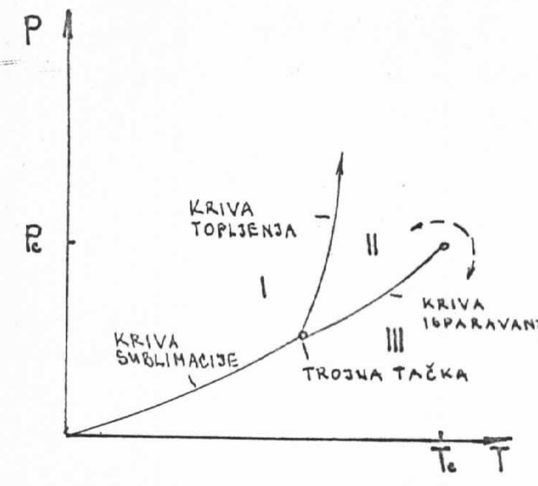
Erenfestova klasifikacija nije bila dovoljno opšta, jer nije mogla da opiše niz faznih prelaza. Opštija, Fišerova klasifikacija, pored prelaza prve vrste, odredjenih skokom prvih izvoda termodinamičkog potencijala u tački prelaza, definiše kontinuirane fazne prelaze, u kojima su prvi izvodi termodinamičkog potencijala neprekidni, a drugi izvodi u tački prelaza ili trpe skok ili teže u beskonačnost.

Usled neprekidnosti termodinamičkih funkcija stanja (entropije, specifične zapremine itd.), kontinuirani fazni prelazi, za razliku od faznih prelaza prve vrste, nisu praćeni emisijom ili apsorpcijom latentne toplote prelaza.

U tački faznih prelaza prve vrste su termodinamički potencijali obe faze medjusobno jednaki. Ovi potencijali imaju smisla na obe strane od tačke prelaza, gde odgovaraju nekom ravnotežnom, iako možda metastabilnom stanju tela. Medjutim, termodinamički potencijali na suprotnim stranama tačke kontinuiranih faznih prelaza, ne odgovaraju nikakvom ravnotežnom, pa čak ni metastabilnom stanju tela. Na osnovu toga se zaključuje da nijedna faza ne može postojati na suprotnoj strani od tačke kontinuiranih prelaza.

Za kontinuirane fazne prelaze, tačka prelaza sa matematičkog aspekta predstavlja neku naročitu tačku termodinamičkog potencijala. Tačka prelaza je, ustvari, tačka neanalitičnosti termodinamičkog potencijala. Pošto su za sve konačne sisteme statističke sume analitičke funkcije (mogu se u toj tački razviti u Tejlorov red), zaključuje se da se u konačnom sistemu ne može javiti fazni prelaz. Samo ako se pretpostavi da je sistem beskonačan, i ako se potraži limes termodinamičkog potencijala po jednoj čestici (kad broj čestica teži u beskonačnost), tada potencijal ima svojstva neanalitičnosti u tački prelaza. Ovaj uslov ističe neophodnost nalaženja termodinamičkog limesa u izučavanju faznih prelaza. Sem toga, prelazom na termodinamički limes se dobijaju jedinstveni statistički rezultati u tački prelaza, bez obzira na to koji se ansambl koristi za opisivanje sistema: u termodinamičkom limesu su svi ansambli ekvivalentni.

Fazni prelazi tečnost-gas, feromagnetni prelazi, prelazi u binarnim legurama itd., karakterišu se kritičnom tačkom pri odredjenim vrednostima termodinamičkih promenljivih. To je tačka na faznoj ravni (npr. P-T za sistem tečnost-gas) u kojoj se završava kriva fazne ravnoteže. Iznad kritične tačke nestaje razlika izmedju faza, i sistem je uvek homogen. Pošto se kriva fazne ravnoteže završava u kritičnoj tački, zaključuje se da se može izvršiti kontinuirani fazni prelaz, obilezeći kritičnu tačku, bez presecanja linije fazne ravnoteže.



Sl. 1.1 Tečni sistem: projekcija površi $P\varrho T$ na ravan PT
I- čvrsta faza; II- tečna faza; III- gasovita faza

Ponašanje različitih fizičkih veličina u okolini kritične tačke se može na zadovoljavajući način opisati uvodeći pojam kritičnih eksponenata.

Neka bezdimenziona promenljiva ε

$$\varepsilon \equiv \frac{T-T_c}{T_c} = \frac{T}{T_c} - 1 \qquad \ldots \quad (1.1)$$

pokazuje stepen odstupanja temperature od kritične. Ako je neka fizička veličina $f(\varepsilon)$ pozitivna i neprekidna za dovoljno malo ε, i ako postoji limes

$$\lambda \equiv \lim_{\varepsilon \to 0} \frac{\ln f(\varepsilon)}{\ln \varepsilon} \qquad \ldots \quad (1.2)$$

tada taj limes predstavlja kritični eksponent, i fizička veličina $f(\varepsilon)$ se može napisati u obliku proste stepene zavisnosti:

$$f(\varepsilon) \approx const\ \varepsilon^{\lambda} \qquad \ldots \quad (1.3)$$

Sa λ je označen kritični eksponent.

Kao kvantitativna karakteristika promene strukture tela pri prolaženju kroz kritičnu tačku, uvodi se parametar uredjenosti. Odredjen je na takav način da uzima vrednosti različite od nule na temperaturama nižim od kritične, a iznad nje je jednak nuli. Svaki sistem je potpuno uredjen samo na apsolutnoj nuli. Povećanjem temperature, i njenim približavanjem kritičnoj, u sistemu nestaje makrouredjenost, koja se karakteriše parametrom uredjenosti. U sistemu se, ipak, iznad kritične temperature zadržava uredjenost na malom broju medjuatomskih rastojanja, koja je označena kao mikrouredjenost.

Ako se funkcija uredjenosti nekog fizičkog sistema označi sa $F(T)$, tada se ona može prikazati u obliku

$$F(T) \sim const\,|T_c - T|^{\beta} \quad (T \to T_c) \qquad \ldots \quad (1.4)$$

Sa β je označen kritični eksponent, Na osnovu eksperimentalnih merenja na različitim fizičkim sistemima, za vrednost kritičnog eksponenta funkcije uredjenosti se dobija približno ista vrednost: $\beta \approx \frac{1}{3}$, koja se razlikuje od teorijski dobijenoh rezultata, kako u klasičnim, tako i u savremenim teorijama faznih prelaza i kritičnih pojava (tabela 1).

NEKI KRITIČNI EKSPONENTI ZA TEČNE I MAGNETNE SISTEME
(uzete su u obzir samo vrednosti dobijene približavanjem kritičnoj temperaturi sa strane nižih temperatura)

TABELA 1.1

OZNAKA	α'	β	γ'	$\alpha'+2\beta+\gamma'$
TEČNOST	$C_{V=V_c} \sim (-\varepsilon)^{-\alpha'}$	$\rho_L - \rho_G \sim (-\varepsilon)^{\beta}$	$K_T \sim (-\varepsilon)^{-\gamma'}$	–
MAGNETIK	$C_{H=0} \sim (-\varepsilon)^{-\alpha'}$	$M_{H=0} \sim (-\varepsilon)^{\beta}$	$\chi_T \sim (-\varepsilon)^{-\gamma'}$	–
Tipične eksperimentalne vrednosti				
TEČNOST ILI MAGNETIK	0 - 0,2	0,3 - 0,5	1,1 - 1,4	≤ 2
Teorijske vrednosti				
VAN DER VALS ILI VAJS	0 (PREKID NEPREKIDNOSTI)	$\frac{1}{2}$	1	2
DVODIMENZIONI IZINGOV MODEL	0 (LOGARITAMSKI SINGULARITET)	$\frac{1}{8}$	$\frac{7}{4}$	2

II
IZINGOV MODEL

Iako postoji mnoštvo eksperimentalnih činjenica vezanih za fazne prelaze, od kojih su neke poznate dugi niz godina, fazni prelazi su sa teorijskog aspekta još nerešen problem. Usled matematičkih osobenosti termodinamičkih veličina u kritičnoj tački, niz približnih teorija koje su postavljene ne daje zadovoljavajuće rezultate, i zato se nalaženje tačnog rešenja javlja kao neophodnost.

Početkom XX veka u teoriji magnetnih faznih prelaza postignuti su značajni rezultati. Jedna od najuspešnijih je Vajsova teorija feromagnetizma, zasnovana na pretpostavci da magnetni momenti interaguju preko veštački uvedenog takozvanog molekularnog polja, proporcionalno srednjoj magnetizaciji. U modelima koji su se kasnije pojavili pretpostavljalo se da su magnetni momenti lokalizovani u odredjenim čvorovima rešetke, da je njihova interakcija parnog karaktera, a energija interakcije dostiže maksimum pri medjusobno paralelnoj orijentaciji momenata.

Jedan od tipova interakcije koji i danas zauzima značajno mesto u teoriji faznih prelaza, predložio je Lenc u modelu, koji se danas naziva Izingovim modelom.

U Izingovom modelu feromagnetizma se razmatra sistem n fiksiranih tačaka, čvorova rešetke, koji obrazuju d-dimenzionu periodičnu rešetku (d= 1,2,3). Svakom čvoru rešetke se pridružuje spinska promenljiva s_i (i= 1,2,...,n), koja uzima brojne vrednosti +1 i -1. Ako je $s_i = +1$, podrazumeva se da je u i-tom čvoru rešetke spin usmeren naviše, a za $s_i = -1$, spin i-tog čvora je usmeren naniže. Dati skup brojeva $\{s_i\}$ odredjuje konfiguraciju celog sistema. U toj konfiguraciji, hamiltonijan sistema je:

$$\mathcal{H}_I\{s_i\} = -\sum_{\langle ij\rangle} J_{ij}\, s_i s_j - B\sum_{i=1}^{n} s_i \quad \ldots \quad (2.1)$$

Simbol $\langle ij\rangle$ označava par spinova najbližih susednih čvorova. Pošto izmedju $\langle ij\rangle$ i $\langle ji\rangle$ nema nikakve razlike, suma po $\langle ij\rangle$ sadrži $\frac{\gamma n}{2}$ članova; sa γ je označen broj najbližih suseda datog čvora. Spoljašnje polje je zadana konstanta. Sa J_{ij} je označena energija interakcije ili takozvani integral izmene. Ako je interakcija izotropna, J_{ij} se svodi na konstantan broj J , tako da je hamiltonijan

$$\mathcal{H}_I\{s_i\} = -J\sum_{\langle ij\rangle} s_i s_j - B\sum_{i=1}^{n} s_i \qquad \ldots \quad (2.2)$$

Slučaj $J>0$ odgovara feromagnetizmu, a $J<0$ - antiferomagnetizmu.

Pretpostavljalo se da će ovako odredjen Izingov model medjučestične interakcije moći opisati magnetne fazne prelaze, odnosno omogućiti nalaženje tačnog rešenja. Medjutim, Izing je uspeo da reši svoj model samo za slučaj jednodimenzione rešetke, pri čemu nije otkrio fazni prelaz. Po zaključcima Vajsove teorije molekularnog polja fazni prelaz ne zavisi od dimenzije rešetke, tako da bi se morao pojaviti i u Izingovom linearnom lancu na temperaturi T_c različitoj od nule. Pošto se u svakom sistemu na apsolutnoj nuli uspostavlja makrouredjenost, može se reći da se u Izingovom lancu fazni prelaz dogadja na temperaturi $T_c = 0$.

Pri razmatranju Izingovog modela, veliki značaj se pridaje Onzagerovom rešenju, koje je on dobio za dvodimenzionu rešetku u odsustvu spoljašnjeg magnetnog polja. Onzager je tačno rešio Izingov dvodimenzioni model, i dokazao postojanje faznog prelaza. Tačan statistički račun koji je Onzager primenio je dokaz primenljivosti statističke mehanike na izučavanje faznih prelaza.

Trodimenzioni Izingov model do danas nije tačno rešen, ali postoji niz približnih teorija za taj slučaj.

III
PRIMENA IZINGOVOG MODELA

Izingov model, koji je prvenstveno uveden da bi opisao feromagnetne fazne prelaze, može da se primeni i za opisivanje faznih transformacija u drugim sistemima. Ovde će, pored karakteristika magnetika u blizini kritičke tačke, biti pokazana i ekvivalentnost Izingovog modela i modela rešetkinog gasa koji opisuje fazne prelaze u sistemu tečnost-gas, kao i mogućnost primene u objašnjavanju transformacije "uredjeno-neuredjeno" u binarnim legurama.

1. FEROMAGNETIZAM

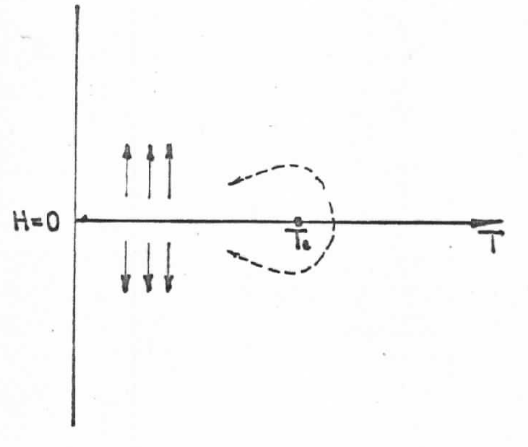
Za feromagnetike je karakteristična pojava spontane magnetizacije, koja postoji čak i u odsustvu spoljašnjeg magnetnog polja. Spontana magnetizacija ukazuje da sile interakcije izmedju spinova elektrona spontano orijentišu spinove u pravilan, paralelan položaj. To stanje se realizuje samo na temperaturama nižim od karakteristične, Kirijeve temperature- kritične temperature feromagnetika. Naime, povećanjem temperature se narušava spinska uredjenost, jer se orijentišućem dejstvu sila interakcije suprotstavlja toplotno kretanje, tako da je iznad Kirijeve temperature spontana magnetizacija jednaka nuli. Pošto je ispod kritične temperature različita od nule, a iznad nje jednaka nuli, spontana magnetizacija je za feromagnetike parametar uredjenosti. Kirijeva tačka razdvaja neuredjenu, paramagnetsku fazu, sa haotično orijentisanim spinovima, za $T > T_c$, od uredjene, feromagnetske faze, u kojoj su spinovi medjusobno paralelni, za $T < T_c$.

Treba napomenuti da je sistem potpuno uredjen samo na apsolutnoj nuli. Ali, iako je iznad Kirijeve temperature rezultujuća magnetizacija jednaka nuli tojest broj spinova orijentisanih naviše jednak je broju spinova orijentisanih naniže, ipak u sistemu mogu postojati velike dimenzije oblasti sa uredjenim rasporedom spinova; takva uredjenost se naziva mikrouredjenošću.

Iako je iznad Kirijeve temperature magnetizacija jednaka nuli u odsustvu spoljašnjeg polja, izotermna susceptibilnost $\chi_T = \left(\frac{\partial M}{\partial H}\right)_{T,H=0}$, koja može biti predstavljena i kao drugi izvod Gibsovog termodinamičkog potencijala, je pozitivna, i kad $T \to T_c^+$, funkcija χ_T neograničeno raste, teži u beskonačnost, ukazujući na pojavu spontane magnetizacije.

Približavanjem Kirijevoj temperaturi, kako sa jedne, tako i sa druge strane, zapaža se anomalija toplotnog kapaciteta, koji u tački Kiri teži u beskonačnost. Toplotni kapacitet je vezan sa drugim izvodom termodinamičkog potencijala.

Analizirajući fazni dijagram feromagnetika (H-T ravan), zaključuje se da se obilazeći Kiri tačku, koja se nalazi na kraju linije koja deli faze, može izvršiti kontinuirani prelaz iz jedne magnetne faze u drugu



Sl. 3.1 Magnetni sistem: projekcija površi HMT na ravan HT

Izingov hamiltonijan za feromagnetike, čija je konfiguracija odredjena skupom $\{s_i\}$ je dat jednačinom (2.1). Statistička suma je

$$Z_I(B,T) = \sum_{s_1} \sum_{s_2} \dots \sum_{s_n} \exp\left[-\beta \mathcal{H}_I \{s_i\}\right]; \quad \beta = \frac{1}{kT} \quad \dots (3.1)$$

k- Bolcmanova konstanta T- apsolutna temperatura
Svaka promenljiva s_i , (i=1,...,n), nezavisno od drugih, uzima vrednosti +1 i -1, tako da u sumi ima ukupno 2^n članova. Znajući statističku sumu mogu se, polazeći od nje, odrediti ostale termodinamičke veličine.

2. ANTIFEROMAGNETIZAM

Antiferomagnetizam se javlja u slučaju kada je antiparalelna spinska konfiguracija energetski povoljnija od paralelne.

Antiferomagnetik se može predstaviti kao kristal sa dve feromagnetne rešetke: spinovi su rasporedjeni na takav način da su najbliži susedi spina iz jedne podrešetke, spinovi druge podrešetke.

Prelaz iz neuredjenog, paramagnetnog stanja u uredjeno, antiferomagnetno se karakteriše više ili manje oštrim maksimumom na krivoj zavisnosti susceptibilnosti od temperature. Tačka faznog prelaza, na kojoj se javlja taj maksimum, je kritična tačka antiferomagnetika takozvana Nelova tačka.

Pri faznom prelazu se pojavljuju i oštri maksimumi toplotnog kapaciteta i koeficijenta toplotnog širenja. Ova anomalija toplotnog kapaciteta na Nelovoj temperaturi, ukazuje da se u antiferomagnetiku uspostavlja neka uredjenost na temperaturama nižim od Nelove.

U eksperimentima rasejanja neutrona je utvrdjeno da u blizini Nelove temperature postoji izvesna mikrouredjenost, koja se narušava daljim rastom temperature, i kad $T\to\infty$, raspored postaje haotičan.

Mera makrouredjenosti koja se javlja ispod Nelove temperature u antiferomagnetiku je magnetizacija podrešetke. Ona je uvek kompenzovana jednakom i suprotno usmerenom magnetizacijom druge podrešetke. Porastom temperature magnetizacija brzo opada, i na Nelovoj temperaturi je jednaka nuli.

U Izingovom hamiltonijanu, kada se primenjuje na antiferomagnetike integral izmene je $J<0$.

3. REŠETKIN GAS

Pre nego što se napravi analogija izmedju Izingovog modela i modela rešetkinog gasa, ukratko o rezultatima eksperimentalnih ispitivanja ponašanja sistema tečnost-gas u okolini kritične tačke.

Projekcijom $P\varrho T$ - površi na npr. $P\varrho$- i PT -ravan, mogu se, na osnovu dobijenih faznih dijagrama, doneti odredjeni zaključci o ponašanju sistema tečnost-gas u okolini kritične tačke.

Pošto se kriva isparavanja, duž koje se nalaze u ravnoteži tečna i gasovita faza, završava u kritičnoj tački, zaključuje se da se može izvršiti kontinuirani fazni prelaz, bez presecanja linije fazne ravnoteže.

Na temperaturama nižim od kritične, razlika gustina tečnosti i gasa je velika; približavanjem kritičnoj tački, ta razlika se postepeno smanjuje, i postaje jednaka nuli na kritičnoj temperaturi $T=T_c$. Razlika gustina $\rho_L-\rho_G$ je parametar uredjenosti za sistem tečnost-gas.

U neposrednoj blizini kritične tačke izoterme na $P\rho$ dijagramu imaju zaravnjen deo, na osnovu čega se zaključuje da nagib $\frac{\partial P}{\partial \rho}$ teži nuli, kad $T\to T_c^+$. Pošto je izotermni kompresibilitet definisan kao $K_T=\rho^{-1}\left(\frac{\partial \rho}{\partial P}\right)_T$, znači, približavanjem kritičnoj tački, on teži u beskonačnost. Zaključuje se da je osetljivost gustine na vrlo male fluktuacije pritiska u blizini kritične tačke beskonačno velika.

Eksperimentalno je utvrdjeno da toplotni kapacitet ima maksimum iznad T_c, za $\rho=\rho_c$, i taj maksimum ratse približavanjem kritičnoj temperaturi od $\frac{3}{2}k$ na izmerenu 11-12 puta veću vrednost. Iako eksperimentalno nije mogla biti dokazana "beskonačnost" toplotnog kapaciteta, zaključuje se da

$$C_V\to\infty \qquad (T\to T_c^{\pm}\,,\ \rho=\rho_c) \qquad \ldots \quad (3.2)$$

Vrlo često se pravi analogija izmedju feromagnetnih sistema i tečnosti, pretpostavljajući da je polje H analogno pritisku P, spontana magnetizacija razlici gustina $\rho_L-\rho_G$, a funkciji K_T, koja karakteriše reakciju tečnosti na spoljašnji pritisak, u magnetnom sistemu je analogna susceptibilnost $\chi_T=\left(\frac{\partial M}{\partial H}\right)_T$, koja u blizini kritične tačke teži u beskonačnost, i vezana je sa ogromnim fluktuacijama magnetizacije.

Pojave u blizini kritične tačke tečnosti se mogu razmatrati pomoću modela rešetkinog gasa. Pomoću ovog modela može da se napravi analogija izmedju Izingovog feromagnetika i proste jednokomponentne tečnosti, tako da se Izingov model može, pod odredjenim uslovima, primeniti i na model rešetkinog gasa.

U modelu rešetkinog gasa se pretpostavlja da je zapremina tečnosti V izdeljena na ćelije zapremine v, pri čemu je zapremina ćelije približno jednaka zapremini molekula tečnosti. Ćelija je zauzeta, ako u nju pada centar jednog molekula, ali sami molekuli nisu ograničeni tim ćelijama. Zbog približnih veličina zapremina ćelije i molekula, ćeliju može zauzimati najviše jedan molekul. Višestruka naseljenost ćelije se zabranjuje pretpostavkom da je potencijal interakcije izmedju najbližih susednih ćelija **i** i **j** oblika

$$u(i,j) \equiv \begin{cases} \infty & \text{, ako je i=j; obe ćelije zauzete} \\ -J & \text{, ako su i i j susedne ćelije; obe zauzete} \\ 0 & \text{, u svim drugim slučajevima} \end{cases} \quad \ldots (3.3)$$

Svaka ćelija je ili zauzeta ili prazna. Stanje ćelije se odredjuje promenljivom

$$e_j \equiv \begin{cases} 1 & \text{, ako je ćelija j zauzeta} \\ 0 & \text{, ako je ćelija j prazna} \end{cases} \quad \ldots \quad (3.4)$$

U Izingovom modelu feromagnetika spinska promenljiva s_j je odredjena na sličan način:

$$s_j \equiv \begin{cases} +1 & \text{, ako je spin u čvoru j usmeren naviše} \\ -1 & \text{, ako je spin u čvoru j usmeren naniže} \end{cases} \quad \ldots \quad (3.5)$$

Zauzeta ćelija u modelu rešetkinog gasa može se izjednačiti sa Izingovim spinom usmerenim naviše, ako se stavi da je

$$e_j = \frac{1}{2}(1 + s_j) \quad \ldots \quad (3.6)$$

Praznoj ćeliji odgovara Izingov spin usmeren naniže.

Na osnovu ovih pretpostavki očekuje se da postoji podudarnost izmedju Izingovog modela i modela rešetkinog gasa. Ova podudarnost postoji ako je kanonička statistička suma Izingovog modela proporcionalna velikokanoničkoj sumi modela rešetkinog gasa.

Neka je statistička suma Izingovog modela

$$Z_I = \sum_{\{s\}} \exp\left(\gamma \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j + h \sum_{i=1}^{n} s_i \right) \quad \ldots \quad (3.7)$$

$$\gamma \equiv \frac{J}{KT} \quad ; \quad h \equiv \frac{\mu H}{KT}$$

Ako je ukupan broj molekula u konfiguraciji odredjenoj skupom $\{e_j\}$ jednak

$$\sum_{j=1}^{n} e_j = N \quad \ldots \quad (3.8)$$

tada je velikokanonička statistička suma rešetkinog gasa

$$\mathcal{Z} = \sum_{N=0}^{\infty} z^N \exp\left(\gamma \sum_{\langle ij \rangle} e_i e_j\right) \qquad \ldots \quad (3.9)$$

gde je $z = \exp(\beta\mu)$ - aktivnost, μ - hemijski potencijal. Pomoću izraza (3.8) ova suma se transformiše u oblik

$$\mathcal{Z} = \sum_{\{e\}} \exp\left\{ \ln z \sum_{i=1}^{n} e_i + \gamma \sum_{\langle ij \rangle} e_i e_j \right\} \qquad \ldots \quad (3.10)$$

koji se smenom, kojom se od kvadratnih članova po e_j prelazi na kvadratne članove po s_j , transformiše u oblik analogan Izingovoj statističkoj sumi za feromagnetike. Smena je:

$$e_i e_j = \frac{1}{4} s_i s_j + \frac{1}{4}(s_i + s_j) + \frac{1}{4} \qquad \ldots \quad (3.11)$$

Poredjenjem sa sumom (3.7) može se pronaći veza izmedju odgovarajućih veličina koje karakterišu Izingov feromagnetik i rešetkin gas. Ako su poznata rešenja za Izingov model, izmenom označavanja mogu se dobiti rešenja za model rešetkinog gasa.

4. BINARNE LEGURE

U binarnim legurama se javlja fazna transformacija izmedju uredjenog i neuredjenog stanja, praćena toplotnim anomalijama.

Legura, sastavljena iz jednakog broja metalnih atoma dve vrste, A i B, uredjena je, ako su atomi pravilno periodično rasporedjeni jedni u odnosu na druge, i neuredjena, ako je njihov raspored haotičan. Potpuna uredjenost legure postoji samo na apsolutnoj nuli. Povećanjem temperature narušava se uredjeni raspored atoma i potpuno nestaje na temperaturi transformacije. Nestaje makrouredjenost, ali se može zadržati izvesna mikrouredjenost - uredjenost na malom broju medjuatomskih rastojanja, odnosno korelacija izmedju položaja najbližih suseda.

U legurama tipa AB se javlja fazni prelaz druge vrste praćen anomalnim ponašanjem toplotnog kapaciteta koji u tački prelaza ima oštar maksimum.

Najpoznatija legura tipa AB je β - mesing, legura bakra i cinka. U uredjenom stanju prostorna rešetka β - mesinga je prosta kubna; motiv je sastavljen iz jednog atoma Cu u (0 0 0) i jednog atoma Zn u $(\frac{1}{2}\,\frac{1}{2}\,\frac{1}{2})$. Ako se temperatura povećava, atomi Cu i Zn mogu zameniti mesta, ali je verovatnoća nalaženja atoma Zn u pravilnom položaju je veća od $\frac{1}{2}$. Iznad temperature prelaza, svi čvorovi rešetke su medjusobno ekvivalentni, i verovatnoća nalaženja atoma Zn u pravilnom položaju je tačno $\frac{1}{2}$. Za motiv postaje jednako verovatno da se atom Zn ili Cu nalazi u položaju (0 0 0) odnosno $(\frac{1}{2}\,\frac{1}{2}\,\frac{1}{2})$.

Transformacija izmedju uredjene i neuredjene faze β - mesinga se može eksperimentalno posmatrati preko difrakcije X - zraka. Pokazuje se, izračunavanjem difrakcionog strukturnog faktora, da se u uredjenoj leguri javljaju svi refleksi za prostu kubnu rešetku, dok rezultati, dobijeni difrakcijom na neuredjenoj leguri, pokazuju da je rešetka kubna, zapreminski centrirana.

Izingov model za feromagnetike se odgovarajućom izmenom u označavanju, može primeniti u objašnjavanju faznog prelaza iz uredjenog u neuredjeno stanje u binarnim legurama.

Pretpostavlja se da model binarne legure čini skup dve vrste atoma, označenih sa A i B, i da je broj tih atoma, respektivno, N_A i N_B . Atomi su rasporedjeni u čvorovima rešetke: svakom čvoru odgovara γ najbližih suseda (γ - koordinacioni broj rešetke). Ako se u svakom čvoru rešetke može nalaziti samo jedan atom, ukupan broj atoma je $N = N_A + N_B$. Postoji tri tipa najbližih parova - AA, BB, AB (AB = BA), a njihov broj je, respektivno N_{AA} , N_{BB} , N_{AB} .

Ako se zanemari kinetička, i uračunava samo energija veze najbližih suseda, ukupna energija sistema je

$$E\,(N_{AA}, N_{BB}, N_{AB}) = \varepsilon_A N_{AA} + \varepsilon_B N_{BB} + \varepsilon_{AB} N_{AB} \quad \ldots \quad (3.12)$$

Pošto brojevi N_{AA} , N_{BB} i N_{AB} nisu medjusobno nezavisni, stanje sa energijom E je u opštem **slučaju** degenerisano. Veza izmedju ovih brojeva se može odrediti na vrlo jednostavan način, ako se u kvadratnoj rešetki, sastavljenoj od atoma A i B, na primer atom A spoji linijama sa najbližim susednim atomima vrste A. Ukupan broj linija je za sve atome A rešetke, γN_A . Izmedju svakog para AA su povučene dve linije, AB - jedna, BB- nema linija, tako da je

$$\gamma N_A = 2 N_{AA} + N_{AB} \quad \ldots \quad ($$

Analogno, za atome vrste B je ukupan broj linija:

$$\gamma N_B = 2 N_{BB} + N_{AB}$$

Iz ove dve, i relacije $N = N_A + N_B$ mogu se eliminisati bilo koja tri broja, tako da zamenom u jednačinu (3.12), dobijeni izraz za energiju odgovara nedegenerisanim stanjima:

$$E(N_{AA}) = (\varepsilon_A + \varepsilon_B + 2\varepsilon_{AB})N_{AA} + [\gamma(\varepsilon_{AB} - \varepsilon_B)N_A + \frac{1}{2}\gamma\varepsilon_B N] \quad \dots (3.13)$$

Izraz u srednjoj zagradi je konstantan, tako da energija zavisi samo od broja parova najbližih suseda tipa N_{AA}.

Izingov model se može primeniti na binarne legure, ako se izjednači broj Izingovih spinova usmerenih naviše, N^+, sa brojem atoma vrste A, N_A, u binarnim legurama. Broju atoma vrste B, $N_B = N - N_A$, će odgovarati broj Izingovih spinova usmerenih naniže, N^-. Energija Izingovog modela se može izraziti u zavisnosti od broja spinova usmerenih naviše i broja parova susednih spinova usmerenih naviše primenjujući postupak analogan napred opisanom za binarne legure. Poredjenjem ta dva izraza za energiju, mogu se odrediti veze koje postoje izmedju odgovarajućih veličina koje karakterišu feromagnetike i binarne legure.

IV
JEDNODIMENZIONI IZINGOV MODEL

Jednodimenzioni Izingov model u odsustvu spoljašnjeg polja je predstavljen linearnim lancem, sastavljenim od n spinova. Konfiguracija modela je odredjena skupom $\{s_i\}$. Pretpostavlja se da postoji samo interakcija izmedju najbližih suseda. Za ovaj slučaj hamiltonijan ima oblik:

$$\mathcal{H} = -\sum_{i=1}^{n-1} J_i s_i s_{i+1} \qquad \ldots \quad (4.1)$$

Spin s_i ima samo dve diskretne vrednosti, +1 i -1. Sa J_i je označena energija interakcije izmedju para najbližih suseda - spinova, rasporedjenih u čvorovima i i i+1, pri čemu je uvedena kraća oznaka $J_i \equiv J_{i,i+1}$.

Statistička suma je funkcija oblika

$$Z_n = Z_n(J_1, J_2, \ldots, J_{n-1}) = \sum_{\{s\}} \exp(-\beta\mathcal{H}) =$$
$$= \sum_{s_1=-1}^{1} \sum_{s_2=-1}^{1} \ldots \sum_{s_n=-1}^{1} \exp\left(\sum_{i=1}^{n-1} \mathcal{J}_i s_i s_{i+1}\right) \qquad \ldots \quad (4.2)$$

Sa $\mathcal{J}_i \equiv \frac{J_i}{kT} \equiv \beta J_i$ je označena bezdimenziona energija interakcije. Pošto s_i ima dve orijentacije, sumiranje se vrši po svim 2^n konfiguracionim stanjima sistema. Da bi se dobila statistička suma u zatvorenom obliku, posmatra se efekat dodavanja još jednog spina na kraju lanca. Statistička suma "produženog" lanca je

$$Z_{n+1} = \sum_{s_1=-1}^{1} \sum_{s_2=-1}^{1} \ldots \sum_{s_n=-1}^{1} \exp\left(\sum_{i=1}^{n-1} \mathcal{J}_i s_i s_{i+1}\right) \times \sum_{s_{n+1}=-1}^{1} \exp\left(\mathcal{J}_n s_n s_{n+1}\right) \ldots \quad (4.3)$$

Ako se odvojeno posmatra poslednja suma, vidi se da se, pošto ne zavisi od orijentacije spina, svodi na jednostavan oblik:

$$\sum_{s_{n+1}=-1}^{1} \exp\left(\mathcal{J}_n s_n s_{n+1}\right) = 2\,\mathrm{ch}\left(\mathcal{J}_n s_n\right) = 2\,\mathrm{ch}\,\mathcal{J}_n$$

tako da je

$$Z_{n+1} = 2\,\mathrm{ch}\,\mathcal{J}_n \cdot Z_n \qquad \ldots \quad (4.4)$$

Posle jednostavne interakcije, i uračunavanja činjenice da je $Z_1 = 2$, tojest odgovara broju ili sumi stanja jednog spina, dobija se konačan oblik statističke sume lanca od n spinova

$$Z_n = 2^n \prod_{i=1}^{n-1} ch\, J_i \qquad \ldots \quad (4.5)$$

Ovaj rezultat je dobijen za slučaj proizvoljne interakcije izmedju parova najbližih suseda. Ako je interakcija homogena, $J_i \equiv J$ za svaki čvor i, i statistička suma za taj slučaj je:

$$Z_n = 2^n ch^{n-1} J \qquad \ldots \quad (4.6)$$

Informacije o temperaturi T_c, na kojoj se javlja uredjenost sistema, mogu da se dobiju na jednostavan način, preko dvospinske korelacione funkcije $\Gamma_k(r)$:

$$\Gamma_k(r) \equiv \langle s_k s_{k+r} \rangle = Z_n^{-1} \sum_{\{s\}} s_k s_{k+r} \exp\left(\sum_{i=1}^{n-1} J_i s_i s_{i+1}\right) \ldots \quad (4.7)$$

Sumira se po svim stanjima sistema, kojih ima 2^n. Sa r je označeno rastojanje izmedju spinova, izraženo u jedinicama konstante rešetke. Korelaciona funkcija najbližih suseda je $\Gamma_k(1)$:

$$Z_n \Gamma_k(1) = \sum_{\{s\}} s_k s_{k+1} \exp\left(\sum_{i=1}^{n-1} J_i s_i s_{i+1}\right) = \frac{\partial}{\partial J_k} \sum_{\{s\}} \exp\left(\sum_{i=1}^{n-1} J_i s_i s_{i+1}\right)$$

Uopštavanjem, za proizvoljno r je

$$Z_n \Gamma_k(r) = \frac{\partial}{\partial J_k} \frac{\partial}{\partial J_{k+1}} \cdots \frac{\partial}{\partial J_{k+r-1}} (Z_n)$$

Posle naznačenog diferenciranja, za korelacione funkcije se dobija:

$$\Gamma_k(1) = th\, J_k \qquad \ldots \quad (4.8)$$

$$\Gamma_k(r) = (th\, J_k)(th\, J_{k+1}) \ldots (th\, J_{k+r-1}) = \prod_{i=1}^{r} th\, J_{k+i-1} \quad \ldots (4.9)$$

Ako je interakcija homogena, $J_i \equiv J$: korelaciona funkcija ne zavisi od čvora

$$\Gamma_k(r) \equiv \langle s_k s_{k+r} \rangle = th^r J \qquad \ldots \quad (4.10)$$

Makrouredjenost sistema, odnosno spontana magnetizacija različita od nule se javlja na temperaturi na kojoj dvospinska korelaciona funkcija dovoljno sporo opada sa medjuspinskim rastojanjem r. Neka je sa

$$\sigma \equiv \frac{M(T, H=0)}{M(T=0, H=0)}$$

označena normirana magnetizacija u nultom polju. Tada je

$$\sigma^2 = \lim_{r \to \infty} \Gamma_N(r) \qquad \ldots \quad (4.11)$$

Analizirajući izraze (4.9) i (4.1o), vidi se da su, za konačne vrednosti γ_i , odnosno za temperature različite od nule, vrednosti tangensa hiperbolnih manje od jedinice, tako da njihov proizvod, kad $r \to \infty$, teži nuli. Medjutim, kad je $T=0$, svi $\gamma_i \equiv \beta J_i \equiv \frac{J_i}{kT}$ teže u beskonačnost, a proizvodi tangensa hiperbolnih u (4.9) i (4.1o) teže jedinici. Na osnovu toga se zaključuje da se u Izingovom lancu na svim temperaturama različitim od nule javlja nulta spontana magnetizacija, a na temperaturi $T=T_c=0$ magnetizacija skokom dostiže svoju punu vrednost. Iako, znači, Izingov jednodimenzioni model ne predvidja fazni prelaz, često se govori da se on dogadja na apsolutnoj nuli, jer se na toj temperaturi u sistemu javlja makrouredjenost.

Susceptibilnost u nultom polju za jednosimenzioni Izingov lanac se može jednostavno izračunati polazeći od fluktuaciono-disipativne relacije

$$\chi_T(T,H=0) = \frac{\bar{\mu}^2}{kT} \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} \langle s_i s_j \rangle \qquad \ldots \quad (4.12)$$

gde je $\bar{\mu} = g\mu_0$. (g- Landeov faktor, μ_0 - Borov magneton). Za homogenu interakciju je

$$\langle s_i s_j \rangle = v^{|i-j|} ; \quad v \equiv th\, \gamma \qquad \ldots \quad (4.13)$$

tako da jednostavno sumiranje za jednosimenzioni slučaj daje rezultat

$$\chi_T(T,H=0) = \frac{\bar{\mu}^2}{kT} \left\{ n + 2 \sum_{k=1}^{n-1} (n-k) v^k \right\}$$

Odgovarajućim transformacijama izraz za susceptibilnost se svodi na oblik koji predstavlja tačno rešenje dvospinske korelacione funkcije za otvoren lanac od n spinova:

$$\chi_T(T,H=0) = \frac{\bar{\mu}^2}{kT} \left\{ n\left(1+\frac{2v}{1-v}\right) - \frac{2v(1-v^n)}{(1-v)^2} \right\} \qquad \ldots \quad (4.14)$$

U termodinamičkom limesu, kad $n \to \infty$, susceptibilnost je:

$$\chi_T(T,H=0) = \frac{\bar{\mu}^2 n}{kT} \frac{1+v}{1-v} = \frac{\bar{\mu}^2 n}{kT} e^{2\gamma} \qquad \ldots \quad (4.15)$$

Iz poslednje jednačine se vidi da se susceptibilnost u nultom polju, u blizini kritične temperature $T_c=0$, menja sa temperaturom po zakonu

$$\chi_T(T, H=0) \sim \frac{1}{T}\, e^{\frac{2J}{kT}} \qquad \ldots \quad (4.16)$$

Znači, susceptibilnost u nultom polju teži u beskonačnost, kad $T \to T_c,\ T_c = 0$.

Može se pokazati da toplotni kapacitet jednodimenzionog sistema nema singulariteta kad $T \to T_c,\ T_c = 0$, što je još jedna potvrda zaključka da se u jednodimenzionom sistemu ne javlja fazni prelaz. Ako je entalpija za slučaj proizvoljne interakcije data sa

$$E(S, H=0) = -\frac{\partial}{\partial \beta}\left\{ \ln Z_n(T, H=0) \right\} = -\sum_{i=1}^{n-1} J_i \,\mathrm{th}\, \mathcal{J}_i$$

a za homogenu interakciju, kad je $J_i \equiv J$, sa

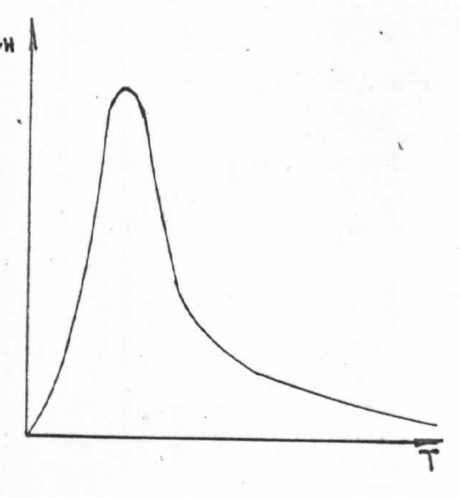
$$E(S, H=0) = -J(n-1)\,\mathrm{th}\,\mathcal{J}$$

toplotni kapacitet je $C_H = \left(\frac{\partial E}{\partial T}\right)_H$:

$$C_H(T, H=0) = k \sum_{i=1}^{n-1} \left(\mathcal{J}_i \frac{1}{\mathrm{ch}\,\mathcal{J}_i} \right)^2 \qquad \ldots \quad (4.17)$$

$$C_H(T, H=0) = k(n-1) \left(\frac{\mathcal{J}}{\mathrm{ch}\,\mathcal{J}} \right)^2 \qquad \ldots \quad (4.18)$$

Analizom ovih rezultata, vidi se da je, kad $T \to T_c$, $T_c = 0$, toplotni kapacitet Izingovog lanca konačan-teži nuli. Oblik zavisnosti toplotnog kapaciteta Izingovog lanca u nultom polju od temperature je identičan obliku zavisnosti toplotnog kapaciteta paramagnetika, uz uslov $J \leftrightarrow H$.

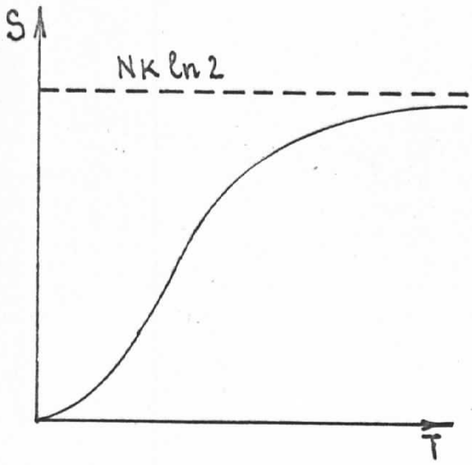


Sl. 4.1 Toplotni kapacitet Izingovog lanca

Posmatrajući izraz za entropiju u slučaju homogene interakcije

$$S_n(T, H=0) = k\{n \ln 2 + (n-1)\ln ch\, J - (n-1) J\, th\, J\} \quad \ldots \quad (4.19)$$

zaključuje se da entropija na niskim temperaturama teži vrednosti $k\ln 2 \ll nk\ln 2$ sa nultim nagibom, a na visokim temperaturama teži vrednosti $nk \ln 2$, što je pokazatelj tendencija jednodimenzionog sistema ka slučajnom, haotičnom rasporedu na $T \neq 0$.



Sl. 4.2 Zavisnost entropije Izingovog lanca od temperature

I kao zaključak, na osnovu prethodno datih rezultata, može se reći da se u Izingovom jednodimenzionom modelu nikada ne javlja fazni prelaz na temperaturama različitim od nule. To se može objasniti činjenicom da se na proizvoljnoj temperaturi u sistemu srednja konfiguracija odredjuje dvema konkurentnim tendencijama, suprotnog znaka: tendencijom ka potpunoj uredjenosti, koja vodi minimalnoj vrednosti unutrašnje energije, i koja je, usled nedovoljnog broja najbližih suseda u jednodimenzionom sistemu vrlo slaba, i tendencijom ka slučajnom rasporedu, koja uslovljava maksimalnu vrednost entropije. I kao njihov rezultat, slobodna energija A = U - TS postaje minimalna, jednodimenzioni sistem nestabilan, tako da u njemu ne može postojati uredjena faza na temperaturi $T > 0$.

Izingov jednodimenzioni sistem u magnetnom polju se može na jednostavan način analizirati polazeći od hamiltonijana oblika

$$\mathcal{H} = -J\sum_{i=1}^{n} s_i s_{i+1} - B\sum_{i=1}^{n} s_i \quad \ldots \quad (4.20)$$

Usled periodičnog graničnog ualova

$$s_{n+1} \equiv s_1 \qquad \ldots \quad (4.21)$$

Izingov lanac u magnetnom polju je zatvoren, oblika kružnice. Ovaj granični uslov omogućava da se statistička suma formulisana u matičnom obliku, jednostavno izračuna kao trag matrice. Ali baš zbog tog graničnog uslova, rezultat za statističku sumu Izingovog lanca u magnetnom polju razlikuje se od rezultata dobijenog za lanac u odsustvu polja. Može se pokazati, da u termodinamičkom limesu, kad $n \to \infty$, Gibsov potencijal za otvoren i zatvoren Izingov lanac ima istu vrednost, tako da se i u ovom slučaju dobija da je spontana magnetizacija po spinu za sve $T > 0$ jednaka nuli. Znači i Izingov zatvoren lanac ne otkriva feromagnetizam, odnosno uredjenu fazu.

Pokazano je da se poznavanjem dvospinske korelacione funkcije mogu ispitati mnoga svojstva feromagnetnih interakcija. Rezultati o antiferomagnetnim interakcijama, kada je $J < 0$, mogu se dobiti jednostavnom promenom znaka u prethodnim relacijama. Iako u tom slučaju spinska korelaciona funkcija menja znak od čvora do čvora, pokazuje se da entalpija, toplotni kapacitet i entropija u nultom polju ostaju neizmenjene u odnosu na feromagnetni slučaj. Ali, za razliku od feromagnetne, antiferomagnetna susceptibilnost ostaje konačna za sve temperature. Naime, susceptibilnost je vezana sa sumiranjem dvospinske korelacione funkcije po svim čvorovima lanca, i korelaciona funkcija u tom slučaju menja znak od čvora do čvora.

V
TAČNO REŠENJE DVODIMENZIONOG IZINGOVOG MODELA

Uspešnost Izingovog modela medjučestične interakcije je potvdjena mnogo godina nakon njegove formulacije Onzagerovim tačnim rešenjem dvodimenzionog Izingovog modela, u kojem je pokazano da se u dvodimenzionom sistemu vrši fazni prelaz na temperaturi T_c različitoj od nule.

Onzagerov matematički postupak za dobijanje tačnog rešenja je vrlo složen, zasnovan na matričnom računu sa spisnkim operatorima. Ovde će biti opisan jedan od najkraćih pristupa kojim se dobija tačno rešenje, Kaufmanov.

Tačno, Onzagerovo rešenje za dvodimenzioni Izingov model može da se dobije primenom različitih metoda.

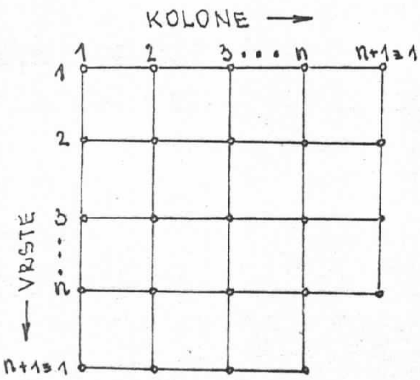
U kombinatornom metodu Kaca i Uorda uvodi se determinanta koja uračunava odredjene konfiguracije rešetke.

Harst i Grin nalaze tačno rešenje dovodjenjem statističke sume u oblik klasične algebarske forme, takozvane Pfafove forme. Kastlejn uprošćava ovaj račun uvodjenjem pojma dimera-tečnog "molekula" koji zauzima dva čvora u rešetki. Rešenje koje se dobija poznato je pod imenom dimerno rešenje.

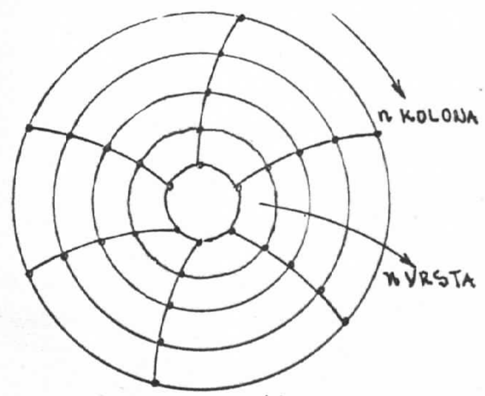
To su samo neki od metoda koji dovode do tačnog rešenja dvodimenzionog Izingovog modela. Ali, svima njima je zajednički rezultat - simetričan logaritamski simularitet specifičnog toplotnog kapaciteta, i na osnovu toga zaključak o neanalitičnosti slobodne energije (Helmholcovog termodinamičkog potencijala). U svim metodima, za sve tipove dvodimenzione rešetke, izračunavanja spontane magnetizacije daju istu vrednost njenog kritičnog eksponenta $\beta = \frac{1}{8}$, na osnovu čega se zaključuje da ponašanje bilo kog dvodimenzionog sistema u kritičnoj tački ne zavisi od detalja strukture rešetke.

1. MATRIČNA FORMULACIJA PROBLEMA

Izingov dvodimenzioni model predstavlja kvadratna rešetka, sastavljena iz n vrsta n kolona, sa $N=n^2$ spinova, raspodredjenih u čvorovima rešetke. Pretpostavlja se da se rešetka uvećava za jednu vrstu i jednu kolonu na takav način, da su konfiguracije (n+1)-ve vrste i (n+1)-ve kolone identične, respektivno, konfiguracijama prve vrste i prve kolone. Usled ovakvog graničnog uslova, rešetka ima topološka svojstva torusa. (sl. 5.2)



Sl. 5.1 Dvodimenziona Izingova rešetka



Sl. 5.2 Topologija Izingove rešetke

Ako je sa μ_α (α = 1,...,n) označen skup svih spinskih koordinata α - vrste

$$\mu_\alpha \equiv \{ s_1, s_2, \dots, s_n \} \qquad \dots \quad (5.1)$$

tada je toroidalni granični uslov dat jednakošću:

$$\mu_{n+1} \equiv \mu_1 \qquad \dots \quad (5.2)$$

Konfiguracija rešetke kao celine je odredjena skupom $\{\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_n\}$.

Pretpostavlja se, u skladu sa opštim principima Izingovog modela, da interaguju samo najbliži susedi. Znači α - vrsta interaguje samo sa (α - 1) -vom vrstom i (α + 1) -vom vrstom. Neka je sa

$$E(\mu, \mu') = -\varepsilon \sum_{k=1}^{n} s_k s_k' \qquad \dots \quad (5.3)$$

označena enrgija interakcije izmedju α -vrste i (α +1)-ve vrste, a sa

$$E(\mu) = -\varepsilon \sum_{k=1}^{n} s_k s_{k+1} - B \sum_{k=1}^{n} s_k \qquad \dots \quad (5.4)$$

zbir energije interakcije spinova unutar $\mathcal{L}$ - vrste i energije interakcije tih spinova sa spoljašnjim magnetnim poljem. ε je integral izmene. Sa μ i μ' je označen skup spinskih koordinata dve susedne vrste

$$\begin{aligned} \mu &= \{s_1, \dots, s_n\} \\ \mu' &= \{s'_1, \dots, s'_n\} \end{aligned} \qquad \dots \quad (5.5)$$

Usled toroidalnog graničnog uslova, u svakoj vrsti mora biti ispunjen uslov

$$s_{n+1} = s_1 \qquad \dots \quad (5.6)$$

U konfiguraciji rešetke, odredjenoj skupom $\{\mu_1, \dots, \mu_n\}$, ukupna energija interakcije, ili hamiltonijan rešetke je

$$E_I\{\mu_1, \dots, \mu_n\} = \sum_{\mathcal{L}=1}^{n} \left[E(\mu_{\mathcal{L}}, \mu_{\mathcal{L}+1}) + E(\mu_{\mathcal{L}}) \right] \qquad \dots \quad (5.7)$$

a statistička suma je

$$Z_I(B,T) = \sum_{\mu_1} \dots \sum_{\mu_n} \exp\left\{ -\beta \sum_{\mathcal{L}=1}^{n} \left[E(\mu_{\mathcal{L}}, \mu_{\mathcal{L}+1}) + E(\mu_{\mathcal{L}}) \right] \right\} \dots \quad (5.8)$$

Statistička suma se može transformisati uvodjenjem 2^n-dimenzione matrice P, odredjene matričnim elementima

$$\langle \mu | P | \mu' \rangle = e^{-\beta[E(\mu, \mu') + E(\mu)]} \qquad \dots \quad (5.9)$$

Matrica P je 2^n-dimenziona, jer svaka od n spinskih koordinata iz skupa μ i μ' matričnih elemenata matrice P ima dve orijentacije, +1 i -1.

$$Z_I(B,T) = \sum_{\mu_1} \dots \sum_{\mu_n} \langle \mu_1 | P | \mu_2 \rangle \langle \mu_2 | P | \mu_3 \rangle \dots \langle \mu_n | P | \mu_1 \rangle$$

Ovde je iskorišćen uslov $\mu_{n+1} = \mu_1$, koji transformiše dvodimenzionu rešetku u cilindar, tako da se statistička suma može izraziti kao trag matrice:

$$Z_I(B,T) = \sum_{\mu_1} \langle \mu_1 | P^n | \mu_1 \rangle = Sp\, P^n \qquad \dots \quad (5.10)$$

Pošto trag matrice ne zavisi od reprezentacije matrice, neka je matrica P dijagonalna

$$P = \begin{bmatrix} \lambda_1 & & & \\ & \lambda_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & \lambda_{2^n} \end{bmatrix} \qquad \ldots \quad (5.11)$$

sa 2^n sopstvenih vrednosti $\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_{2^n}$. Matrica P^n je takodje dijagonalna, sa matričnim elementima $(\lambda_1)^n, (\lambda_2)^n, \ldots, (\lambda_{2^n})^n$, tako da je statistička suma data kao njihov zbir:

$$Z_I(B,T) = \sum_{k=1}^{2^n} (\lambda_k)^n \qquad \ldots \quad (5.12)$$

Znači, zadatak izračunavanja statističke sume se svodi na nalaženje sopstvenih vrednosti matrice P. Ali, može se pokazati da se komplikovan zadatak odredjivanja 2^n sopstvenih vrednosti matrice P, u slučaju razmatranja beskonačnog sistema- kad je n velik broj, u termodinamičkom limesu svodi na odredjivanje najveće sopstvene vrednosti matrice P.

Iz izraza (5.9) se zaključuje da će, pošto su $E(\mu,\mu')$ i $E(\mu)$ reda veličine n, sopstvene vrednosti matrice P biti reda e^n, gde je n velik broj. Ako je λ_{max} najveća sopstvena vrednost matrice P, očekuje se da je

$$\lim_{n\to\infty} \frac{1}{n} \ln \lambda_{max} \quad \text{konačan broj} \qquad \ldots \quad (5.13)$$

Ako je ovaj uslov ispunjen, i ako su sve sopstvene vrednosti pozitivne ($\lambda_k > 0$), tada je

$$(\lambda_{max})^n \leq Z_I \leq 2^n (\lambda_{max})^n$$

$$\frac{1}{n} \ln \lambda_{max} \leq \frac{1}{n^2} \ln Z_I \leq \frac{1}{n} \ln \lambda_{max} + \frac{1}{n} \ln 2$$

U termodinamičkom limesu, kad $n \to \infty$, prethodni izraz se svodi na oblik iz kojeg se vidi da je za rešenje problema dovoljno naći najveću sopstvenu vrednost matrice P:

$$\lim_{N\to\infty} \frac{1}{N} \ln Z_I = \lim_{n\to\infty} \frac{1}{n} \ln \lambda_{max} \qquad \ldots \quad (5.14)$$

Polazeći od jednačina (5.3), (5.4) i (5.9), matrični elementi matrice P se mogu napisati u obliku

$$\langle s_1,\dots,s_n|P|s_1',\dots,s_n'\rangle = \prod_{k=1}^{n} e^{\beta B s_k}\, e^{\beta E s_k s_{k+1}}\, e^{\beta E s_k s_k'}$$

Ako su matrice V_1', V_2 i V_3 odredjene svojim matričnim elementima na sledeći način

$$\langle s_1,\dots,s_n|V_1'|s_1',\dots,s_n'\rangle \equiv \prod_{k=1}^{n} e^{\beta E s_k s_k'} \qquad \dots \quad (5.15)$$

$$\langle s_1,\dots,s_n|V_2|s_1',\dots,s_n'\rangle \equiv \delta_{s_1 s_1'},\dots,\delta_{s_n s_n'} \prod_{k=1}^{n} e^{\beta E s_k s_{k+1}} \qquad \dots \quad (5.16)$$

$$\langle s_1,\dots,s_n|V_3|s_1',\dots,s_n'\rangle \equiv \delta_{s_1 s_1'},\dots,\delta_{s_n s_n'} \prod_{k=1}^{n} e^{\beta E s_k} \qquad \dots \quad (5.17)$$

($\delta_{ss'}$ - Kronekerov simbol; matrice V_2 i V_3 su dijagonalne) tada je matrica P data kao proizvod

$$P = V_3 V_2 V_1' \qquad \dots \quad (5.18)$$

Matrice V_1', V_2 i V_3 se mogu predstaviti u pogodnijem obliku, uvodeći specijalne spinske matrice. To su 2^n-dimenzione matrice X_α, Y_α, Z_α odredjene sledećim jednakostima:

$X_\alpha \equiv 1\times 1\times \dots \times X\times \dots \times 1$ n množitelja

$Y_\alpha \equiv 1\times 1\times \dots \times Y\times \dots \times 1$ - " -

$Z_\alpha \equiv 1\times 1\times \dots \times \underset{\alpha\text{-MNOŽITELJ}}{\underset{\downarrow}{Z}}\times \dots \times 1$ - " -

Za ove matrice, za $\alpha \neq \beta$, važe sledeće komutativne relacije:

$$[X_\alpha, X_\beta] = [Y_\alpha, Y_\beta] = [Z_\alpha, Z_\beta] = 0$$

$$[X_\alpha, Y_\beta] = [X_\alpha, Z_\beta] = [Y_\alpha, Z_\beta] = 0$$

Na mestu α - množitelja u matricama X_α, Y_α, Z_α su 2-dimenzione Paulijeve spinske matrice

$$X \equiv \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad Y \equiv \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad Z \equiv \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \qquad \dots \quad (5.20)$$

sa osobinama

$$X^2=1, \quad Y^2=1, \quad Z^2=1$$

$$XY+YX=0, \quad YZ+ZY=0, \quad ZX+XZ=0$$

$$XY=iZ, \quad YZ=iX, \quad ZX=iY$$

koje za svako i =1,2,..., n važe i za matrice X_i , Y_i , Z_i .

Pokazuje se da se matrice V_1', V_2 i V_3 mogu predstaviti preko matrica X_i , Y_i i Z_i .

Polazeći od jednačine (5.15), može se matrica V_1' predstaviti u obliku direktnog proizvoda n identičnih 2-dimenzionih matrica

$$V_1' = a \times a \times \ldots \times a \qquad \ldots (5.21)$$

odredjenih matričnim elementima

$$\langle s|a|s'\rangle = e^{\beta\varepsilon s s'}$$

Pošto s i s' nezavisno jedan od drugoga uzimaju vrednosti +1 i -1, matrica a u eksplicitnom obliku je

$$a = \begin{bmatrix} e^{\beta\varepsilon} & e^{-\beta\varepsilon} \\ e^{-\beta\varepsilon} & e^{\beta\varepsilon} \end{bmatrix} = e^{\beta\varepsilon} + e^{-\beta\varepsilon} X$$

Koristeći tvrdjenje da je za svaku matricu X čiji je kvadrat jednak jediničnoj matrici

$$e^{\theta X} = \operatorname{ch}\theta + X \operatorname{sh}\theta$$

dobija se konačan izraz za matricu a

$$a = \sqrt{2\operatorname{sh}(2\beta\varepsilon)}\; e^{\theta X} \qquad \ldots (5.22)$$

gde je

$$\operatorname{th}\theta = e^{-2\beta\varepsilon} \qquad \ldots (5.23)$$

Zamenom dobijenog izraza za a u (5.21), dobija se da je

$$V_1' = [2\,sh(2\beta\varepsilon)]^{\frac{n}{2}}\; e^{\theta X'} \times e^{\theta X} \times \ldots \times e^{\theta X} \qquad \ldots \quad (5.24)$$

Koristeći osobine direktnog proizvoda može se izvršiti tranformacija:

$$e^{\theta X} \times e^{\theta X} \times \ldots \times e^{\theta X} = e^{\theta(X_1 + X_2 + \ldots + X_n)}$$

tako da je

$$V_1' = [2\,sh(2\beta\varepsilon)]^{\frac{n}{2}}\, V_1 \qquad \ldots \quad (5.25)$$

$$V_1 = \prod_{k=1}^{n} e^{\theta X_k} \;, \qquad th\,\theta = e^{-2\beta\varepsilon} \qquad \ldots \quad (5.26)$$

Matrice V_2 i V_3 izražene preko 2^n-dimenzionih spinskih matrica su

$$V_2 = \prod_{k=1}^{n} e^{\beta\varepsilon Z_k Z_{k+1}} \qquad \ldots \quad (5.27)$$

$$V_3 = \prod_{k=1}^{n} e^{\beta B Z_k} \qquad \ldots \quad (5.28)$$

pri čemu je $Z_{n+1} = Z_1$. Zamenom u jednačinu (5.18) odgovarajućih izraza za V_1' , V_2 i V_3 , završava se matrična formulacija Izingovog dvodimenzionog modela:

$$P = [2\,sh(2\beta\varepsilon)]^{\frac{n}{2}}\, V_3 V_2 V_1 \qquad \ldots \quad (5.29)$$

Ako je spoljašnje magnetno polje B=0, u prethodnom izrazu je V_3 =1.

2. MATEMATIČKA DOPUNA

U izrazima (5.26) i (5.27) matrice V_1 i V_2 su predstavljene preko dvodrednih spinskih matrica X_k i Z_k, koje mogu da izraze samo činjenicu da spinska koordinata ima dve orijentacije, ali ne i dvodimenzionalnost Izingove kvadratne rešetke. Zato se uvodi nova klasa matrica $\{\Gamma_\mu\}$, čije će osobine biti navedene u ovom odeljku, i preko kojih mogu da se izraze V_1 i V_2 na takav način da pored dve dimenzije spina budu uračunate i dve dimenzije Izingove rešetke.

Skup od 2n matrica Γ_μ ($\mu = 1,\ldots,2n$) je definisan antikomutacionom relacijom:

$$\Gamma_\mu\Gamma_\nu + \Gamma_\nu\Gamma_\mu = 2\,\delta_{\mu\nu} \qquad (\mu,\nu = 1,2,\ldots,2n) \qquad \ldots \qquad (5.29)$$

Dimenzija $\{\Gamma_\mu\}$ ne može biti manja od 2^n. Ako uporedo sa skupom $\{\Gamma_\mu\}$ postoji i drugi skup matrica $\{\Gamma_\mu'\}$, koji takodje zadovoljava antikomutacione relacije (5.29), tada postoji nesingularna unitarna matrica S, takva da transformiše jedan skup u drugi: $\Gamma_\mu = S\Gamma_\mu' S^{-1}$. Svaka 2^n-dimenziona matrica je linearna kombinacija jedinične matrice, matrica Γ_μ, i svih nezavisnih proizvoda $\Gamma_\mu\Gamma_\nu$, $\Gamma_\mu\Gamma_\nu\Gamma_\lambda$, ...

Za n=1, relacija (5.29) odredjuje dve dvodimenzione Paulijeve spinske matrice. Za n=2, relacijom (5.29) su odredjene četiri 4-dimenzione Dirakove matrice γ_μ.

Jedna od mogućnosti predstavljanja skupa $\{\Gamma_\mu\}$ 2^n-dimenzionim matricama, koja će biti iskorišćena pri transformaciji V_1 i V_2, je:

$$\Gamma_1 = Z_1 \qquad \Gamma_2 = Y_1$$

$$\Gamma_3 = X_1 Z_2 \qquad \Gamma_4 = X_1 Y_2$$

$$\Gamma_5 = X_1 X_2 Z_3 \qquad \Gamma_6 = X_1 X_2 Y_3$$

$$\begin{aligned} \Gamma_{2k-1} &= X_1 X_2 \ldots X_{k-1} Z_k \\ \Gamma_{2k} &= X_1 X_2 \ldots X_{k-1} Y_k \end{aligned} \qquad \ldots \qquad (5.30)$$

Neka je zadan odredjeni skup matrica $\{\Gamma_\mu\}$, i neka je ω 2^n- dimenziona matrica linearne ortogonalne transformacije

$$\Gamma'_\mu = \sum_{\nu=1}^{2n} \omega_{\mu\nu} \Gamma_\nu \qquad \ldots \quad (5.31)$$

$\omega_{\mu\nu}$ - su kompleksni brojevi, odredjeni relacijom

$$\sum_{\mu=1}^{2n} \omega_{\mu\nu} \omega_{\mu\lambda} = \delta_{\nu\lambda}$$

ili, u matričnom obliku

$$\omega^T \omega = 1$$

Sa ω^T je označena matrica, transponovana u odnosu na ω. Ako se Γ_μ razmatra kao komponenta nekog vektora u 2n-dimenzionom prostoru, tada transformacija sa matricom ω predstavlja rotaciju u tom prostoru.

Pošto skup Γ'_μ zadovoljava relaciju (5.29), može se unitarno transformisati pomoću 2^n-dimenzione nesingularne matrice $S(\omega)$, tako da je

$$\Gamma'_\mu = S(\omega) \Gamma_\mu S^{-1}(\omega) \qquad \ldots \quad (5.32)$$

Zaključuje se da postoji korespodencija

$$\omega \longleftrightarrow S(\omega) \qquad \ldots \quad (5.33)$$

kojom se $S(\omega)$ odredjuje kao 2^n-dimenziona reprezentacija rotacije ω u 2n-dimenzionom prostoru. Iz (5.31) i (5.32) se dobija jednakost

$$S(\omega) \Gamma_\mu S^{-1}(\omega) = \sum_{\nu=1}^{2n} \omega_{\mu\nu} \Gamma_\nu \qquad \ldots \quad (5.33)$$

koja povezuje rotaciju ω u 2n-dimenzionom prostoru, sa spinskom reprezentacijom rotacije $S(\omega)$ u tom istom prostoru.

Na primer rotacija u dvodimenzionoj ravni $\mu\nu$ u 2n-dimenzionom prostoru, za ugao θ, je data transformacijama:

$$\Gamma'_\lambda = \Gamma_\lambda \qquad (\lambda \neq \mu, \lambda \neq \nu)$$

$$\Gamma'_\mu = \Gamma_\mu \cos\theta - \Gamma_\nu \sin\theta \qquad (\mu \neq \nu)$$

$$\Gamma'_\nu = \Gamma_\mu \sin\theta + \Gamma_\nu \cos\theta \qquad (\mu \neq \nu)$$

Matrica rotacije $\omega(\mu\nu|\theta)$ u eksplicitnom obliku je:

$$\omega(\mu\nu|\theta) = \begin{array}{cc} \begin{bmatrix} & \vdots & & \vdots & \\ \cdots & \cos\theta & & \sin\theta & \cdots \\ & \vdots & & \vdots & \\ \cdots & -\sin\theta & & \cos\theta & \cdots \\ & \vdots & & \vdots & \end{bmatrix} & \begin{array}{l} \\ \mu\text{-VRSTA} \\ \\ \nu\text{-VRSTA} \\ \\ \end{array} \\ \begin{array}{cc} \mu\text{-KOLONA} & \nu\text{-KOLONA} \end{array} & \end{array} \qquad \ldots \quad (5.34)$$

Nisu napisani matrični elementi jednaki jedinici na glavnoj dijagonali, i nuli na svim ostalim mestima. Za matricu $\omega(\mu\nu|\theta)$, koja se označava kao ravna rotacija u ravni $\mu\nu$ za ugao θ , važe sledeća svojstva:

$$\omega(\mu\nu|\theta) = \omega(\nu\mu|-\theta)$$

$$\omega^T(\mu\nu|\theta)\,\omega(\mu\nu|\theta) = 1$$

U sledećim lemama su navedena svojstva matrica ω i $S(\omega)$:

LEMA 1.

Ako postoji korespodencija $\omega(\mu\nu|\theta) \longrightarrow S_{\mu\nu}(\theta)$, tada je

$$S_{\mu\nu}(\theta) = e^{-\frac{\theta}{2}\Gamma_\mu\Gamma_\nu} \qquad \ldots \quad (5.35)$$

LEMA 2.

Sopstvene vrednosti matrice $\omega(\mu\nu|\theta)$ su jednake 1 (stepen degeneracije 2n-2) i $e^{\pm i\theta}$ (nedegenerisane). Sopstvene vrednosti matrice $S_{\mu\nu}(\theta)$ su $e^{\pm i\frac{\theta}{2}}$ (stepen degeneracije svake je 2^{n-1}).

LEMA 3.

Neka je ω proizvod n komutirajućih ravnih rotacija :

$$\omega = \omega(\alpha\beta|\theta_1)\,\omega(\gamma\delta|\theta_2)\ldots\omega(\mu\nu|\theta_n)$$

gde su $\theta_1, \ldots, \theta_n$ - kompleksni brojevi, a sa $\{\alpha, \beta, \ldots, \mu, \nu\}$ je označena permutacija skupa celih brojeva $\{1, 2\ldots, 2n-1, 2n\}$. Tada je:

a). $\omega \longrightarrow S(\omega)$

$$S(\omega) = e^{-\frac{\theta_1}{2}\Gamma_\alpha\Gamma_\beta}\, e^{-\frac{\theta_2}{2}\Gamma_\gamma\Gamma_\delta} \ldots e^{-\frac{\theta_n}{2}\Gamma_\mu\Gamma_\nu}$$

b). 2n sopstvenih vrednosti matrice ω su

$$e^{\pm i\theta_1}, e^{\pm i\theta_2}, \ldots, e^{\pm i\theta_n} \qquad \ldots (5.36)$$

c). 2^n sopstvenih vrednosti matrice $S(\omega)$ su

$$e^{\frac{i}{2}(\pm\theta_1 \pm\theta_2 \pm \ldots \pm\theta_n)} \qquad \ldots (5.37)$$

pri čemu se znaci "+" i "-" uzimaju nezavisno.

Na osnovu LEME 3. se zaključuje da se sopstvene vrednosti matrice $S(\omega)$ mogu dobiti neposredno iz sopstvenih vrednosti matrice ω .

Dalje će biti pokazano da se matrice V_1 i V_2 mogu transformisati pomoću skupa matrica $\{\Gamma_\mu\}$, tako da predstavljaju spinsku reprezentaciju proizvoda ravni komutirajućih rotacija.

3. ONZAGEROVO REŠENJE

U odsustvu spoljašnjeg magnetnog polja (B=0), u matrici P je $V_3 = 1$

$$P = [2 \operatorname{sh}(2\beta\varepsilon)]^{\frac{n}{2}} V_1 V_2$$

tako da se relacija (5.14) svodi na oblik

$$\lim_{N \to \infty} \frac{1}{N} Z_I(0,T) = \frac{1}{2} \ln [2 \operatorname{sh}(2\beta\varepsilon)]^{\frac{n}{2}} + \lim_{n \to \infty} \frac{1}{n} \ln \Lambda \quad \ldots \quad (5.38)$$

gde je

Λ najveća sopstvena vrednost matrice V ... (5.39)

$$V \equiv V_1 V_2 \quad \ldots \quad (5.40)$$

Relacija (5.38) važi pod uslovom da su sve sopstvene vrednosti matrice V pozitivne, i da postoji lim $\frac{1}{n} \ln \Lambda$. Dalji zadatak se, na osnovu (5.38), svodi na dijagonalizaciju matrice V, odnosno na nalaženje njene najveće sopstvene vrednosti.

Matrice V_1 i V_2 se mogu pomoću skupa matrica $\{\Gamma_\mu\}$ tako transformisati, da matrica V bude izražena preko spinskih reprezentacija rotacije.

Jednostavnim transformacijama, koristeći jednačine (5.3 matrica V_1 se dovodi u oblik spinske reprezentacije proizvoda komutirajućih ravnih rotacija:

$$V_1 = \prod_{k=1}^{n} e^{\theta X_k} = \prod_{k=1}^{n} e^{-i\theta \Gamma_{2k} \Gamma_{2k-1}} \quad \ldots \quad (5.41)$$

Matrica V_2 , transformisana preko skupa $\{\Gamma_\mu\}$, nema oblik spinske reprezentacije rotacija:

$$V_2 = e^{\beta\varepsilon Z_n Z_1} \left[\prod_{k=1}^{n-1} e^{\beta\varepsilon Z_k Z_{k+1}} \right] = e^{i\beta\varepsilon U \Gamma_1 \Gamma_{2n}} \prod_{k=1}^{n-1} e^{-i\beta\varepsilon \Gamma_{2k+1} \Gamma_{2k}} \quad \ldots \quad (5.42)$$

$$U \equiv X_1 X_2 \ldots X_n \quad \ldots \quad (5.43)$$

Razlog je prvi množitelj, koji je posledica ispunjavanja periodičnog graničnog uslova $s_{n+1} \equiv s_1$ na svakoj vrsti rešetke.

Koristeći osobine matrice U

1. $U^2=1$, $U(1+U)=1+U$, $U(1-U)=-(1-U)$

2. $U=i^n\Gamma_1\Gamma_2\dots\Gamma_{2n}$

3. U komutira sa proizvodom parnog broja matrica Γ_μ , a antikomutira sa proizvodom neparnog broja Γ_μ

posle jednostavnih izračunavanja matrica

$$V\equiv V_1V_2=e^{i\varphi U\Gamma_1\Gamma_{2n}}\left[\prod_{k=1}^{n-1}e^{-i\varphi\Gamma_{2k+1}\Gamma_{2k}}\right]\left[\prod_{\lambda=1}^{n}e^{-i\theta\Gamma_{2\lambda}\Gamma_{2\lambda-1}}\right]$$

$$\varphi=\beta\varepsilon\,,\quad \varepsilon>0\,,\quad \theta=\operatorname{arth}e^{-2\varphi}$$

se transformiše u oblik

$$V=\frac{1}{2}(1+U)V^{+}+\frac{1}{2}(1-U)V^{-} \qquad \dots (5.44)$$

u kojem su matrice V^+ i V^- spinske reprezentacije rotacije:

$$V^{\pm}\equiv e^{\pm i\varphi\Gamma_1\Gamma_{2n}}\left[\prod_{k=1}^{n-1}e^{-i\varphi\Gamma_{2k+1}\Gamma_{2k}}\right]\left[\prod_{\lambda=1}^{n}e^{-i\theta\Gamma_{2\lambda}\Gamma_{2\lambda-1}}\right] \qquad \dots (5.45)$$

Matrice U, V^+ i V^- , preko kojih je izražena matrica V (5.44) medjusobno komutiraju, tako da mogu biti istovremeno dijagonalizovane. U otm cilju se matrica V unitarno transformiše, tako da matrica U bude dijagonalna, dok matrice V^+ i V^- ne moraju biti dijagonalne. Pogodnim izborom matrice transformacije, polazeći od (5.43), dobija se dijagonalna matrica $\tilde{U}$, sa sopstvenim vrednostima ± 1 (ima ih 2^n), rasporedjenim na dijagonali. Iz poznatog oblika matrice U, i iz uslova komutativnosti unitarno transformisanih matrica $\tilde{U}$, $\tilde{V}^+$ i $\tilde{V}^-$, odredjuje se oblik matrica $\tilde{V}^{\pm}$. Njihovim množenjem sa $\frac{1}{2}(1+\tilde{U})$ i $\frac{1}{2}(1-\tilde{U})$, respektivno, pokazuje se da sistem sopstvenih vrednosti matrice $\tilde{V}$ čini kombinacija polovina sistema sopstvenih vrednosti $\tilde{V}^{\pm}$.

Pošto je matrični sistem sopstvenih vrednosti invarijantan u odnosu na unitarne transformacije, matrice V i $\tilde{V}$ moraju imati jednak sistem sopstvenih vrednosti, pa se zadatak svodi na dijagonalizaciju $\tilde{V}$.

Analizom u suprotnom smeru, zaključuje se da se dijagonalizacija $\tilde{V}$ svodi na odvojenu i nezavisnu dijagonalizaciju matrica $\frac{1}{2}(1+\tilde{U})\tilde{V}^+$ i $\frac{1}{2}(1-\tilde{U})\tilde{V}^-$. Ali, prethodno se moraju odvojeno i nezavisno dijagonalizovati matrice $\tilde{V}^{\pm}$, pri čemu će se dobiti dvaput više sopstvenih vrednosti nego što je potrebno. Pošto se u termodinamičkom limesu, kad $n \to \infty$, traži samo najveća sopstvena vrednost, nije potrebno eksplicitno odredjivati koja polovina sopstvenih vrednosti matrica $\tilde{V}^{\pm}$ treba da se odbaci.

Sistem sopstvenih vrednosti matrica $\tilde{V}^{\pm}$ je, usled invarijantnosti pri unitarnim transformacijama, jednak sistemu sopstvenih vrednosti matrica $V^{\pm}$, tako da se dalji zadatak dijagonalizacije matrice V svodi na odvojenu i nezavisnu dijagonalizaciju matrica $V^{\pm}$.

Matrice $V^{\pm}$, date jednačinom (5.45), su spinske reprezentacije rotacija. Koristeći LEMU 3., njihove sopstvene vrednosti mogu da se odrede na jednostavan način, ako su poznate sopstvene vrednosti rotacija, čije su one spinske reprezentacije.

Neka su te rotacije $\Omega^{\pm}$ 2n-dimenzione matrice, i neka postoji korespodencija

$$V^{\pm} \longleftrightarrow \Omega^{\pm} \qquad \ldots (5.46)$$

tada je, na osnovu (5.45)

$$\Omega^{\pm} = \omega(1,2n|\pm 2i\varphi)\left[\prod_{\lambda=1}^{n-1}\omega(2\lambda+1,2\lambda|-2i\varphi)\right]\left[\prod_{\lambda=1}^{n}\omega(2\lambda,2\lambda-1|-2i\theta)\right] \ldots (5.47)$$

ovde je sa $\omega(\mu\nu|\mathcal{L}) = \omega(\nu\mu|-\mathcal{L})$ odredjena ravna rotacija u ravni $\mu\nu$ za ugao θ , odredjena jednačinom (5.37). Pošto matrice $\Omega^{\pm}$ i $\omega^{\pm} = \Delta\,\Omega^{\pm}\,\Delta^{-1}$ imaju jednak sistem sopstvenih vrednosti, gde je sa Δ označena unitarna matrica

$$\Delta = \sqrt{\prod_{\lambda=1}^{n}\omega(2\lambda+1,2\lambda|-2i\varphi)} = \prod_{\lambda=1}^{n}\omega(2\lambda-1,2\lambda|i\theta)$$

dalji zadatak se svodi na odredjivanje sopstvenih vrednosti matrice

$$\omega^{\pm} = \Delta\,\chi^{\pm}\,\Delta \qquad \ldots (5.48)$$

gde je

$$\chi^{\pm} = \omega(1,2n|\pm 2i\varphi)\left[\omega(23|2i\varphi)\,\omega(45|2i\varphi)\ldots\omega(2n-2,2n-1|2i\varphi)\right]$$

Matrice Δ i $\chi^{\pm}$ se napišu eksplicitno, i posle množenja (5.48), dobija se i eksplicitni oblik matrice $\omega^{\pm}$.

Sopstveni problem matrice $\omega^{\pm}$ dat matričnom jednačinom

$$\omega^{\pm}\,\Psi = \lambda\,\Psi$$

gde je Υ sopstveni vektor $\omega^{\pm}$, odredjuje sopstvene vrednosti λ_k, matrice $\omega^{\pm}$ kao

$$\lambda_k = e^{\pm \gamma_k} \qquad k=0,1,2,\dots,2n-1 \qquad \dots (5.49)$$

Svakoj vrednosti k odgovaraju dve sopstvene vrednosti λ_k, pri čemu se može pokazati da matrici ω^{+} odgovaraju one λ_k za koje je

$$k= 0,2,\dots,2n-2$$

a matrici ω^{-}

$$k= 1,3,\dots,2n-1$$

Vrednosti eksponenta γ_k se odredjuju kao pozitivno rešenje jednačine

$$ch\, \gamma_k = ch\, 2\varphi\, ch\, 2\theta - \cos\frac{\pi k}{n}\, sh\, 2\varphi\, sh\, 2\theta \qquad \dots (5.50)$$

Za γ_k važi

$$\gamma_k = \gamma_{2n-k}$$
$$0 < \gamma_0 < \gamma_1 < \dots < \gamma_n \qquad \dots (5.51)$$

Koristeći činjenice da matrice $\omega^{\pm}$ i $\Omega^{\pm}$ imaju jednak sistem sopstvenih vrednosti i da su matrice $\Omega^{\pm}$ proizvodi komutirajućih ravnih rotacija, na osnovu LEME 3.,mogu se napisati svih 2^n sopstvenih vrednosti matrica $V^{\pm}$:

$$\text{Sopstvene vrednosti } V^{+} \text{ su } \quad e^{\frac{1}{2}(\pm\gamma_0 \pm \gamma_2 \pm \dots \pm \gamma_{2n-2})} \qquad \dots (5.52)$$

$$\text{Sopstvene vrednosti } V^{-} \text{ su } \quad e^{\frac{1}{2}(\pm\gamma_1 \pm \gamma_3 \pm \dots \pm \gamma_{2n-1})} \qquad \dots (5.53)$$

pri čemu je izbor znakova "$\pm$" nezavisan.

Sistem sopstvenih vrednosti matrice V čini polovina sopstvenih vrednosti V^{+} i polovina sopstvenih vrednosti V^{-}. Pošto su sopstvene vrednosti matrica $V^{\pm}$ pozitivne, reda e^n, i sopstvene vrednosti matrice V su pozitivne, reda e^n, čime je ispunjen uslov pod kojim važi jednačina (5.38).

U daljem postupku nalaženja najveće sopstvene vrednosti matrice V, još jednom dolaze do izražaja olakšice koje unosi matrica U, uvedena radi uračunavanja graničnih uslova $s_{n+1} \equiv s_1$ na svakoj vrsti rešetke.

Matrice $\frac{1}{2}(1+\tilde{U})\tilde{V}^{+}$ i $\frac{1}{2}(1-\tilde{U})\tilde{V}^{-}$ se mogu transformisati pomoću 2^n-dimenzionih unitarnih matrica tako da dobijene matrice $V_D^{\pm}$ budu dijagonalne; na njihovim dijagonalama se nalazi po polovina sopstvenih vrednosti (5.52) i (5.53). Matrice transformacije se mogu tako izabrati da samo premeštaju sopstvene vrednosti ± 1 matrice $\tilde{U}$ duž dijagonale; odnosno, da ili komutiraju ili antikomutiraju sa matricom $\tilde{U}$. Rezultat takvog izbora matrica transformacije je da matrice $V_D^{\pm}$ imaju zajednički faktor

$$\frac{1}{2}(1\pm\tilde{U}) = \frac{1}{2}(1\pm Z_1 Z_2 \ldots Z_n)$$

Pošto su sopstvene vrednosti matrice Z_k, ± 1, može se napisati uslov pomoću kojeg se mogu odrediti sopstvene vrednosti matrica $V_D^{\pm}$, odnosno najveća sopstvena vrednost V:

$$\frac{1}{2}(1\pm\tilde{U}) = \begin{cases} 1, & \text{ako je paran broj sopstvenih vrednosti } Z_k \text{ jednak } \mp 1 \\ 0, & \text{ako je neparan broj sopstvenih vrednosti } Z_k \text{ jednak } \mp 1 \end{cases} \quad \ldots (5.54)$$

Uzimajući u obzir, pored uslova (5.54) i invarijantnost sistema sopstvenih vrednosti pri unitarnim transformacijama, usled koje unitarno transformisane matrice $\tilde{V}^{+}$ i $\tilde{V}^{-}$ imaju sistem vrednosti kao i matrice V^{+} i V^{-} - jednaki su sa tačnosšću do moguće izmene numeracije- dobija se da je, kad $n \to \infty$

Najveća sopstvena vrednost V_D^{+} $\quad e^{\frac{1}{2}(\gamma_0+\gamma_2+\ldots+\gamma_{2n-2})}$

Najveća sopstvena vrednost V_D^{-} $\quad e^{\frac{1}{2}(\gamma_1+\gamma_3+\ldots+\gamma_{2n-1})}$

Na osnovu uslova (5.51)

$$\gamma_0 < \gamma_1 < \gamma_2 < \ldots < \gamma_n$$

dobija se da je najveća sopstvena vrednost matrice V

$$\Lambda = e^{\frac{1}{2}(\gamma_1+\gamma_3+\ldots+\gamma_{2n-1})} \quad \ldots (5.55)$$

Da bi se odredila najveća sopstvena vrednost matrice V u eksplicitnom obliku, u relaciji

$$\mathcal{L} \equiv \lim_{n\to\infty} \frac{1}{n} \ln \Lambda = \lim_{n\to\infty} \frac{1}{2n} (\gamma_1 + \gamma_3 + \ldots + \gamma_{2n-1})$$

se smenom

$$\gamma(\nu) \equiv \gamma_{2k-1} \qquad \nu \equiv \frac{\pi}{n}(2k-1) \qquad \ldots (5.56)$$

kad $n\to\infty$, prelazi sa diskretnih na kontinuirane promenljive, sa sumiranja po k na integraciju po ν , tako da je

$$\mathcal{L} = \frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} d\nu\, \gamma(\nu) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{\pi} d\nu\, \gamma(\nu) \qquad \ldots (5.57)$$

Ovde je iskorišćen uslov periodičnosti $\gamma(\nu) = \gamma(2\pi - \nu)$.
$\gamma(\nu)$ se odredjuje kao pozitivno rešenje jednačine

$$\operatorname{ch} \gamma(\nu) = \operatorname{ch} 2\varphi \operatorname{ch} 2\theta - \cos\nu \operatorname{sh} 2\varphi \operatorname{sh} 2\theta \qquad \ldots (5.58)$$

gde je

$$\varphi \equiv \beta\varepsilon , \quad \varepsilon > 0$$
$$\theta \equiv \operatorname{arth} e^{-2\varphi} \qquad \ldots (5.59)$$

Posle odgovarajućih transformacija i izračunavanja, dobija se konačan rezultat za $\mathcal{L}$:

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} \ln \left(\frac{2 \operatorname{ch}^2 2\beta\varepsilon}{\operatorname{sh} 2\beta\varepsilon} \right) + \frac{1}{2\pi} \int_0^{\pi} d\varphi \ln \frac{1}{2} \left(1 + \sqrt{1 - \varkappa^2 \sin^2\varphi} \right) \ldots (5.60)$$

gde je

$$\varkappa \equiv \frac{2 \operatorname{sh} 2\beta\varepsilon}{\operatorname{ch}^2 2\beta\varepsilon} \qquad \ldots (5.61)$$

Uvrštavanjem izraza $\mathcal{L} = \lim_{n\to\infty} \frac{1}{n} \ln \Lambda$ u (5.38) dobija se da je

$$\lim_{N\to\infty} \frac{1}{N} \ln Z_I(0,T) = \ln (2 \operatorname{ch} 2\beta\varepsilon) + \frac{1}{2\pi} \int_0^{\pi} d\varphi \ln \frac{1}{2} \left(1 + \sqrt{1 - \varkappa^2 \sin^2\varphi} \right) \ldots (5.62)$$

tako da se može preći na izračunavanje odgovarajućih termodinamičkih veličina i analizu njihovog ponašanja u okolini kritične tačke.

Slobodna energija po spinu je $a_I(0,T)$

$$\beta a_I(0,T) = -\ln Z_I(0,T) = -\ln (2 \operatorname{ch} 2\beta\varepsilon) - \frac{1}{2\pi} \int_0^{\pi} d\varphi \ln \frac{1}{2} \left(1 + \sqrt{1 - \varkappa^2 \sin^2\varphi} \right) \ldots (5.63)$$

Ako se potraži prvi izvod ovog izraza po β , dobiće se izraz za unutrašnju energiju po spinu:

$$u_I(0,T) = \frac{d}{d\beta} \left[\beta a_I(0,T) \right] = -2\varepsilon \operatorname{th} 2\beta\varepsilon + \frac{\varkappa}{2\pi} \frac{d\varkappa}{d\beta} \int_0^{\pi} d\varphi \frac{\sin^2\varphi}{\Delta(1+\Delta)}$$

$$\Delta \equiv \sqrt{1 - \varkappa^2 \sin^2\varphi}$$

koji se posle kraćeg računa svodi na oblik

$$u_I(0,T) = -\varepsilon \, \mathrm{cth}\, 2\beta\varepsilon \left[1 + \frac{2}{\pi}\, \varkappa' K_1(\varkappa)\right] \qquad \dots (5.64)$$

gde je

$$K_1(\varkappa) \equiv \int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{d\varphi}{\sqrt{1-\varkappa^2 \sin^2\varphi}} \qquad \dots (5.65)$$

potpuni eliptički integral prve vrste.

$$\varkappa' = 2\,\mathrm{th}^2\, 2\beta\varepsilon - 1 \,, \qquad \varkappa^2 + \varkappa'^2 = 1 \qquad \dots (5.66)$$

Specifični toplotni kapacitet $C_I(0,T)$ se dobija polazeći od formule

$$\frac{1}{k} C_I(0,T) = -\beta^2 \frac{d}{d\beta} u_I(0,T) \qquad \dots (5.67)$$

$$\frac{1}{k} C_I(0,T) = \frac{2}{\pi} \left(\beta\varepsilon \, \mathrm{cth}\, 2\beta\varepsilon\right)^2 \left\{ 2K_1(\varkappa) - 2E_1(\varkappa) - (1-\varkappa')\left[\frac{\pi}{2} + \varkappa' K_1(\varkappa)\right]\right\}$$

Ovde je sa $E_1(\varkappa)$ označen potpuni eliptički integral druge vrste:

$$E_1(\varkappa) \equiv \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\varphi \sqrt{1-\varkappa^2 \sin^2\varphi} \qquad \dots (5.68)$$

Sada se može preći na analizu dobijenih rezultata. Iz relacije (5.65) se zaključuje da eliptički integral $K_1(\varkappa)$ ima singularitet u okolini tačke za koju je $\varkappa$ =1 ili $\varkappa'$ =0, tako da se u okolini te tačke ovaj eliptički integral ponaša kao

$$K_1(\varkappa) \approx \ln \frac{4}{\varkappa'} \qquad \dots (5.69)$$

a u okolini iste tačke je

$$\frac{dK_1(\varkappa)}{d\varkappa} \approx \frac{\pi}{2} \qquad E_1(\varkappa) \approx 1 \qquad \dots (5.70)$$

Da bi se dobio konačan izraz koji će opisivati ponašanje toplotnog kapaciteta u okolini kritične tačke, iz (5.66) se određuje kritična temperatura T_c :

$$\frac{kT_c}{\varepsilon} = 2{,}269185 \qquad \dots (5.71)$$

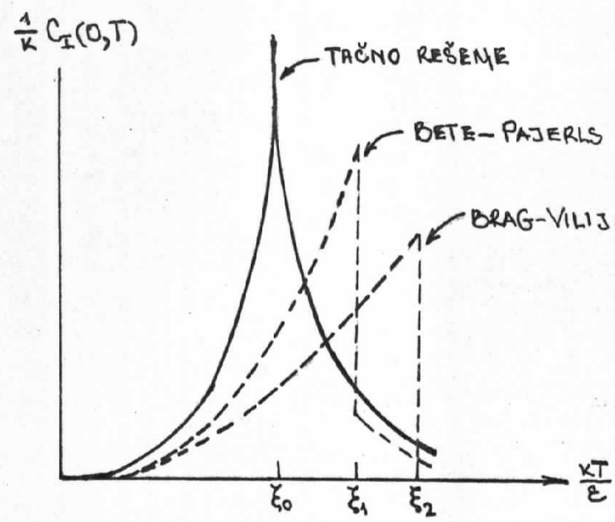
$$e^{-\frac{\varepsilon}{kT_c}} = \sqrt{2} - 1 \,, \quad \mathrm{sh}\, \frac{2\varepsilon}{kT_c} = 1 \,, \quad \mathrm{ch}\, \frac{2\varepsilon}{kT_c} = \sqrt{2} \qquad \dots (5.72)$$

Zamenom u izraz (5.67) za toplotni kapacitet se dobija

$$\frac{1}{K} C_I(0,T) \approx \frac{2}{\bar{m}} \left(\frac{2\varepsilon}{kT_c}\right)^2 \left[-\ln\left|1-\frac{T}{T_c}\right| + \ln\left(\frac{kT_c}{2\varepsilon}\right) - \left(1+\frac{\bar{m}}{4}\right) \right] \quad \ldots \quad (5.73)$$

Kad $|T-T_c| \to 0$ (približavanjem temperature kritičnoj), toplotni kapacitet Izingovog dvodimenzionog modela logaritamski teži u beskonačnost.

Rezultat grafičkog prikazivanja zavisnosti toplotnog kapaciteta od temperature je simetrična kriva sa obe strane kritične temperature, koja na T_c teži u beskonačnost. Simetrična zavisnost toplotnog kapaciteta od temperature nije u skladu ni sa eksperimentalnim, ni sa rezultatima približnih metoda rešavanja dvodimenzionog problema Brag-Vilijamsa i Bete-Pajerlsa.



Sl. 5.3 Specifični toplotni kapacitet Izingovog dvodimenzionog modela ($\xi_0 = 2,27$)

Iako toplotni kapacitet kao izvod unutrašnje energije teži u beskonačnost približavanjem temperature kritičnoj, na osnovu (5.64) i (5.69) se zaključuje da je unutrašnja energija neprekidna u kritičnoj tački. Neprekidnost unutrašnje energije, koja predstavlja prvi izvod slobodne energije ili Helmholcovog termodinamičkog potencijala, ukazuje da ovaj prelaz nije praćen emisijom ili apsorpcijom latentne toplote prelaza.

Singularitet toplotnog kapaciteta i neprekidnosti unutrašnje energije u tački prelaza ukazuju da se u dvodimenzionom Izingovom modelu vrši kontinuirani fazni prelaz na nekoj temperaturi T_c . Pošto je ovaj račun izvršen za slučaj kada je spoljašnje polje jednako nuli, na osnovu njega se ne mogu dobiti informacije o ponašanju spontane magnetizacije i magnetne susceptibilnosti u okolini kritične tačke.

Spontana magnetizacija je pokazatelj makrouredjenosti sistema, i tek njenim odredjivanjem se može potpuno sigurno reći da li se u dvodimenzionom sistemu javlja fazni prelaz ili ne. Onzager je 1948. godine objavio samo konačnu formulu za spontanu magnetizaciju, a 1952. godine je Jang uspeo tačnim matematičkim postupkom da dokaže da je spontana magnetizacija po spinu data izrazom

$$m_I(0,T)=\begin{cases} 0, & T>T_c \\ \dfrac{(1+z^2)^{\frac{1}{4}}\,(1-6z^2+z^4)^{\frac{1}{8}}}{\sqrt{1-z^2}}, & T<T_c \end{cases} \qquad \dots \quad (5.74)$$

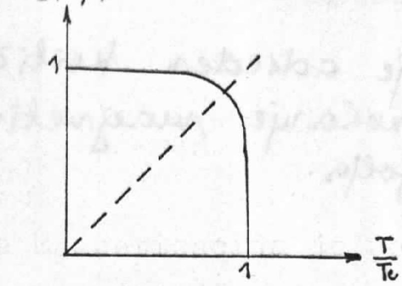
Pretpostavlja se da je magnetni moment po spinu jednak jedinici i da je

$$z = e^{-2\beta\varepsilon} \qquad \dots \quad (5.75)$$

Temperaturi prelaza odgovara vrednost $z_c=\sqrt{2}-1$. Zaključeno je da spontana magnetizacija približavanjem kritičnoj tački teži nuli po zakonu

$$m_I(0,T)=\mathrm{const}\,(T-T_c)^{\frac{1}{8}} \quad (T\to T_c^-) \qquad \dots \quad (5.76)$$

Vrednost kritičnog eksponenta $\beta=\frac{1}{8}$ se razlikuje od rezultata klasične teorije faznih prelaza $\beta=\frac{1}{2}$, a i od eksperimentalnih rezultata koji daju vrednost $\beta=\frac{1}{3}$. Ovaj rezultat, $\beta=\frac{1}{8}$, koji predvidja naglo opadanje magnetizacije približavanjem kritičnoj temperaturi, do danas nije proveren.



Sl. 5.4 Spontana magnetizacija u dvodimenzionom Izingovom modelu

Z A K LJ U Č A K

Značajno mesto Izingovog modela medjučestične interakcije u okviru klasičnih i savremenih modela interakcije, uslovljeno je tačnim Onzagerovim rešenjem dvodimenzione Izingove rešetke, koje je dalo nadu istraživačima da se može tačno rešiti i trodimenzioni slučaj. Tačno rešenje trodimenzionog modela do danas nije pronadjeno, ali je dobijen niz rezultata za ovaj slučaj preko približnih teorija, zasnovanih na izračunavanjima preko Grinovih funkcija.

Rezultati koje je dobio Onzager ne poklapaju se ni sa eksperimentalnim ni sa teorijskim rezultatima. Onzagerov model rešetke ne odgovara nijednom realnom sistemu. Iako je tačno rešio dvodimenzioni problem, treba napomenuti da je i on, u skladu sa opštim zaključkom da se u konačnom sistemu ne javlja fazni prelaz, u svom matematičkom postupku posmatrao beskonačan sistem, i u termodinamičkom limesu uračunavao ne sve sopstvene vrednosti matrice P, već samo najveću sopstvenu vrednost. Svi realni sistemi su konačni, ali greška koja se unosi u račun posmatranjem beskonačnog sistema je izvan granica tačnosti eksperimentalnih merenja.

Inače, još nerešen problem vezan za Izingov model je slučaj razmatranja sistema u spoljašnjem magnetnom polju.

L I T E R A T U R A

1. Г. СТЕНЛИ: ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ И КРИТИЧЕСКИЕ ЯВЛЕНИЯ (prevod sa engleskog); ИЗДАТЕЛЬСТВО „МИР" МОСКВА 1973

2. М. ФИШЕР: ПРИРОДА КРИТИЧЕСКОГО СОСТОЯНИЯ (prevod sa engleskog); ИЗДАТЕЛЬСТВО „МИР" МОСКВА 1968

3. КЕРЗОН ХУАНГ: СТАТИСТИЧЕСКАЯ МЕХАНИКА (prevod sa engleskog); ИЗДАТЕЛЬСТВО „МИР" МОСКВА 1966

4. Charles Kittel: Uvod u fiziku čvrstog stanja, Savremena administracija, Beograd 197o.

5. Л.Д. ЛАНДАУ, Е.М. ЛИФШИЦ: СТАТИСТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА, ЧАСТЬ I ИЗДАТЕЛЬСТВО „НАУКА", МОСКВА 1976.