

UNIVERZITA PAVLA JOZEFA ŠAFÁRIKA V KOŠICIACH

PRÍRODOVEDECKÁ FAKULTA

ÚSTAV FYZIKÁLNYCH VIED



**TEÓRIA EFEKTÍVNEHO POĽA PRE
LOKALIZOVANÉ SPINOVÉ MODELY**

Michal Jaščur

Košice 2013

Autor: Doc. RNDr. Michal Jaščur, CSc.

Názov: Teória efektívneho poľa pre lokalizované spinové modely
Vedecká monografia

Vedecký redaktor: prof. RNDr. Andrej Bobák, DrSc.

Recenzenti: Prof. RNDr. Vladimír Lisý, DrSc.
Doc. RNDr. Peter Kopčanský, CSc.

Vydavateľ: Univerzita Pavla Jozefa Šafárika v Košiciach

Umiestnenie: <http://www.upjs.sk/pracoviska/univerzitna-kniznica/e-publikacia/#pf>

Dostupné od: 07. 10. 2013

Vydanie: prvé

ISBN 978-80-8152-044-0

Zoznam obrázkov

1	Teplotná závislosť magnetizácie.	24
2	Teplotná závislosť $\Delta F/(NJ)$ pre Isingov model v náhodnom magnetickom poli na jednoduchej kubickej mriežke.	36
3	Teplotná závislosť $\Delta F/(NJ)$ pre Isingov model v náhodnom magnetickom poli na jednoduchej kubickej mriežke.	37
4	Dvojuzlový klaster zložený zo spinov σ_i^z, σ_j^z a ich najbližší susedia	46

Zoznam tabuliek

1	Príklady experimentálnych isingovských systémov	15
2	Porovnanie kritických teplôt Isingovho modelu so spinom $1/2$ v rámci rôznych aproximácií.	23
3	Porovnanie kritických teplôt a kritických indexov ν získaných z rôznych renormalizačných schém.	73

Obsah

Predslov	7
1 Callenova identita pre lokalizované spinové modely	9
2 Isingov model	14
3 Jednouzlová aproximácia efektívneho poľa a metóda diferenciálneho operátora pre Isingov model so spinom $1/2$	17
3.1 Spontánna magnetizácia a Curieho teplota	22
3.2 Počiatočná magnetická susceptibilita	24
3.3 Vnútoraná energia, entalpia a tepelná kapacita	27
3.4 Helmholtzova a Gibbsova voľná energia	31
3.5 Teória efektívneho poľa pre jednorozmerný Isingov model so spinom $1/2$	36
4 Dvojuzlová aproximácia efektívneho poľa a metóda diferenciálneho operátora pre Isingov model so spinom $1/2$	41
5 Jednouzlová aproximácia efektívneho poľa pre Isingov model so spinom $1/2$ v transverzálnom vonkajšom magnetickom poli	48
6 Jednouzlová aproximácia efektívneho poľa pre Isingove modely s vyššími spinmi	54
6.1 Blumeho-Capelov model so spinom 1	55
6.1.1 Curieho teplota a trikritický bod	58
6.1.2 Isingovské modely so spinom $S>1$ a aproximatívna van der Waerdenova identita	60
6.2 Teória efektívneho poľa s približnou van der Waerdenovou identitou pre modely s ľubovoľným spinom	63

6.2.1	Curieho teplota a trikritický bod	66
7	Fenomenologická efektívno-polná teória renormalizačnej grupy	68
8	Záver	73

Predslov

Táto monografia je venovaná diskusii teórie efektívneho poľa založenej na metóde diferenciálneho operátora., ktorá bola pôvodne zavedená Honmurom a Kaneyoshim v r. 1979 a dodnes sa aktívne využíva na teoretické štúdium lokalizovaných spinových modelov magnetizmu, predovšetkým rôznych variant Isingovho modelu. Doteraz bola táto metodika aplikovaná mnohými autormi na štúdium veľkého počtu rôznorodých systémov, ako sú napr. kryštalické systémy, zriadené magnetické systémy, systémy s náhodnými výmennými interakciami, amorfné magnetické látky, systémy v náhodnom magnetickom a kryštálovom polí, tenké magnetické vrstvy, magnetické systémy s voľným povrchom, binárne a ternárne magnetické zliatiny, atp.

Počas svojej doterajšej vedeckej kariéry som mal možnosť spolupracovať na rozvoji samotnej metódy diferenciálneho operátora (a teda aj teórie efektívneho poľa) s niekoľkými významnými odborníkmi v tejto oblasti, vrátane prof. Kaneyoshiho, u ktorého som absolvoval dva dlhodobé pracovné pobyty. V danej problematike sa mi doteraz podarilo publikovať viac ako 40 vedeckých prác v popredných zahraničných fyzikálnych časopisoch. Tieto práce sa týkajú jednak rozvoja samotnej metodiky ale sú medzi nimi aj významné aplikácie, v ktorých sú predpovedané zaujímavé fyzikálne javy, napr. multikompenzačné javy vo ferimagnetoch.

V monografii sa prioritne venujem systematickému a dostatočne elementárnemu výkladu teórie efektívneho poľa a metódy diferenciálneho operátora. Je potrebné zdôrazniť, že v práci nejde o rutinné prevzatie výsledkov z publikovaných prác, a to ani metodicky, ani fyzikálne. Práca je venovaná exkluzívne aplikáciám na rôzne kryštalické štruktúry, pričom samotný výklad metodiky je v mnohých ohľadoch unikátny, s dôrazom na jednotný zápis relevantných vzťahov pre všetky kryštalické mriežky. Možno tiež poznamenať, že monografia predstavuje uzavretý celok, takže na pochopenie jednotlivých tém čitateľ nie je nútený študovať žiadne ďalšie práce. Práca je koncipovaná tak, aby zostali otvorené možnosti pre jej rozšírenie na zložitejšie napr.

štrukturálne neusporiadané magnetiká.

V ostatných rokoch som sa paralelne s prácou na exaktne riešiteľných modeloch snažil vyriešiť aj najzávažnejší nedostatok spomínanej metodiky, ktorým je nemožnosť výpočtu voľnej energie študovaných systémov. Práve v tejto monografii je po prvýkrát navrhnutá a otestovaná účinná metóda, ktorá síce neumožňuje priamy výpočet voľnej energie ale definitívne rieši problém s určovaním stability jednotlivých fáz. Veľkou výhodou tejto procedúry je skutočnosť, nie je nijako priamo podmienená samotnou teóriou efektívneho poľa, a teda je ľahko aplikovateľná aj pri iných teoretických prístupoch. Pre samotnú teóriu efektívneho poľa to môže byť významným impulzom pre jej ďalší rozvoj a aplikácie.

Na záver chcem poďakovať Ing. Mgr. Viliamovi Štubňovi za technickú podporu pri spracovaní obrázkov a cenné pripomienky, ktoré pomohli odstrániť z rukopisu mnoho nepresností. Moje poďakovanie patrí tiež Janke Jaščurovej za prečítanie celého rukopisu a jazykové korektúry.

Košice, september 2013,

Michal Jaščur.

1 Callenova identita pre lokalizované spinové modely

Jednotným a univerzálnym východiskovým vzťahom pre vybudovanie rôznych variant teórie efektívneho poľa pre nás bude vždy jednoduchá rovnica, ktorú budeme nazývať Callenova identita. Ako je zrejmé už z pomenovania, túto identitu prvýkrát odvodil Callen už v r. 1963 pomocou techniky Greenových funkcií pre Isingov model so spinom $1/2$ [1]. Neskôr bola táto exaktná identita zovšeobecnená inými matematickými metódami na isingovské systémy s vyššími spinmi, na rôzne neusporiadané systémy (napr. uzlovo a väzbovo zriadené modely, amorfné systémy, systémy v náhodnom poli, systémy s náhodnou výmennou interakciou, atp.)¹. Nakoniec, pre kvantové systémy bola v r. 1981 odvodená aproximatívna podoba tejto identity Sá-Barretom, Fittipaldim a Zeksom [2].

Naším prvým dôležitým cieľom v tejto práci je odvodiť Callenovu identitu jednoduchým výpočtom len použitím elementárnych rovníc Štatistickej fyziky. Uvažujme kvantovomechanický systém N spinov, ktoré sú lokalizované na ideálnej kryštalickej mriežke s koordinačným číslom z . Systém budeme opisovať hamiltoniánom \mathcal{H} , ktorý vo všeobecnosti obsahuje spinové operátory všetkých uzlov mriežky, prípadne ich vyššie mocniny. Jednotlivé výmenné interakcie, vonkajšie polia, ale aj rôzne parametre anizotropie, ktoré tiež vstupujú do hamiltoniánu, zohrávajú úlohu buď fixných alebo voliteľných parametrov.

Bez toho, aby sme akokoľvek špecifikovali ďalšie podrobnosti o systéme, rozdelíme hamiltonián nasledovným spôsobom

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_i + \mathcal{H}', \quad (1.1)$$

kde \mathcal{H}_i popisuje všetky interakčné členy z celkového hamiltoniánu, ktoré

¹V tejto práci budeme interakciu medzi spinmi na mriežke príležitostne terminologicky zamieňať pojmami *interakcia medzi atómami*, alebo *interakcia medzi uzlami*. Táto terminologická voľnosť, však bude vždy fyzikálne znamenať to isté tvrdenie.

1. Callenova identita pre lokalizované spinové modely

v akejkoľvek podobe obsahujú zložky operátora spinu vybraného i -tého spinu (uzla) mriežky. Všetky ostatné členy sú zahrnuté v \mathcal{H}' , pričom vo všeobecnosti \mathcal{H}_i a \mathcal{H}' nekomutujú, t.j.,

$$[\mathcal{H}_i, \mathcal{H}'] \neq 0. \quad (1.2)$$

Strednú hodnotu fyzikálnej veličiny na i -tom uzle mriežky reprezentovanej operátorom \mathcal{O}_i vypočítame na základe všeobecne známeho vzťahu

$$\langle \mathcal{O}_i \rangle = \frac{\text{Tr } \mathcal{O}_i \exp(-\beta\mathcal{H})}{Z}, \quad (1.3)$$

kde Z je kanonická partičná funkcia

$$Z = \text{Tr} \exp(-\beta\mathcal{H}) \quad (1.4)$$

a $\beta = 1/(k_B T)$, pričom T je absolútna teplota a k_B Boltzmannova konštanta. Celková stopa (Tr) v rovniciach (1.3) a (1.4) je súčinom parciálnych stôp spinových operátorov na jednotlivých uzloch mriežky, takže rovnicu (1.3) môžeme prepísať v tvare

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{O}_i \rangle &= \frac{1}{Z} \text{Tr}' \text{Tr}_i \mathcal{O}_i \exp[-\beta(\mathcal{H}_i + \mathcal{H}')], \\ &= \frac{1}{Z} \text{Tr}' \text{Tr}_i \mathcal{O}_i [\exp(-\beta\mathcal{H}_i) \exp(-\beta\mathcal{H}') + \Delta], \end{aligned} \quad (1.5)$$

kde Tr_i označuje stopu cez všetky spinové operátory n -tého spinu, Tr' je stopa cez všetky ostatné operátory a veličina Δ je definovaná vzťahom

$$\Delta = \exp[-\beta(\mathcal{H}_i + \mathcal{H}')] - \exp(-\beta\mathcal{H}_i) \exp(-\beta\mathcal{H}'). \quad (1.6)$$

Vzťah (1.5) teda môžeme prepísať nasledovne

$$\langle \mathcal{O}_i \rangle = \frac{1}{Z} \text{Tr}' \left[\text{Tr}_i \mathcal{O}_i \exp(-\beta\mathcal{H}_i) \right] \exp(-\beta\mathcal{H}') + \frac{1}{Z} \text{Tr} (\mathcal{O}_i \Delta). \quad (1.7)$$

1. Callenova identita pre lokalizované spinové modely

Aby sme pokročili ďalej, vynásobíme a vydělíme prvý člen na pravej strane predchádzajúcej rovnice výrazom $\text{Tr}_i \exp(-\beta\mathcal{H}_i) \neq 0$ a potom ju upravíme do tvaru

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{O}_i \rangle &= \frac{1}{Z} \text{Tr}' \left\{ \frac{\text{Tr}_i \mathcal{O}_i \exp(-\beta\mathcal{H}_i)}{\text{Tr}_i \exp(-\beta\mathcal{H}_i)} \right\} \text{Tr}_i \exp(-\beta\mathcal{H}_i) \exp(-\beta\mathcal{H}') \\ &+ \frac{1}{Z} \text{Tr} (\mathcal{O}_i \Delta). \end{aligned} \quad (1.8)$$

Ak si uvedomíme, že zlomok v predchádzajúcom výraze už nezávisí od i a využijeme fakt, že $\text{Tr}' \text{Tr}_i = \text{Tr}$, potom vzťah (1.7) prepíšeme nasledovne

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{O}_i \rangle &= \frac{1}{Z} \text{Tr} \left\{ \frac{\text{Tr}_i \mathcal{O}_i \exp(-\beta\mathcal{H}_i)}{\text{Tr}_i \exp(-\beta\mathcal{H}_i)} \right\} \exp(-\beta\mathcal{H}_i) \exp(-\beta\mathcal{H}') \\ &+ \frac{1}{Z} \text{Tr} (\mathcal{O}_i \Delta). \end{aligned} \quad (1.9)$$

Využitím definičného vzťahu (1.6) a preusporiadaním jednotlivých členov dostaneme rovnicu

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{O}_i \rangle &= \frac{1}{Z} \text{Tr} \left\{ \frac{\text{Tr}_i \mathcal{O}_i \exp(-\beta\mathcal{H}_i)}{\text{Tr}_i \exp(-\beta\mathcal{H}_i)} \right\} \exp(-\beta\mathcal{H}) \\ &- \frac{1}{Z} \text{Tr} \left\{ \frac{\text{Tr}_i \mathcal{O}_i \exp(-\beta\mathcal{H}_i)}{\text{Tr}_i \exp(-\beta\mathcal{H}_i)} - \mathcal{O}_i \right\} \Delta, \end{aligned} \quad (1.10)$$

ktorú je výhodné definitívne zapísať v tvare

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{O}_i \rangle &= \left\langle \frac{\text{Tr}_i \mathcal{O}_i \exp(-\beta\mathcal{H}_i)}{\text{Tr}_i \exp(-\beta\mathcal{H}_i)} \right\rangle \\ &- \left\langle \left(\frac{\text{Tr}_i \mathcal{O}_i \exp(-\beta\mathcal{H}_i)}{\text{Tr}_i \exp(-\beta\mathcal{H}_i)} - \mathcal{O}_i \right) \tilde{\Delta} \right\rangle, \end{aligned} \quad (1.11)$$

1. Callenova identita pre lokalizované spinové modely

kde sme zaviedli operátor

$$\begin{aligned}\tilde{\Delta} &= \Delta \exp(-\beta\mathcal{H}) \\ &= 1 - \exp(-\beta\mathcal{H}_i) \exp(-\beta\mathcal{H}') \exp(-\beta(\mathcal{H})).\end{aligned}\quad (1.12)$$

Ak teraz v druhom výraze rovnice (1.11) urobíme nasledovné rozštiepenie ("decoupling")

$$\begin{aligned}&\left\langle \left(\frac{\text{Tr}_i \mathcal{O}_i \exp(-\beta\mathcal{H}_i)}{\text{Tr}_i \exp(-\beta\mathcal{H}_i)} - \mathcal{O}_i \right) \tilde{\Delta} \right\rangle \\ &\approx \left\langle \left(\frac{\text{Tr}_i \mathcal{O}_i \exp(-\beta\mathcal{H}_i)}{\text{Tr}_i \exp(-\beta\mathcal{H}_i)} - \mathcal{O}_i \right) \right\rangle \langle \tilde{\Delta} \rangle,\end{aligned}\quad (1.13)$$

potom po jednoduchej úprave obdržíme vzťah

$$\left(\langle \mathcal{O}_i \rangle - \left\langle \frac{\text{Tr}_i \mathcal{O}_i \exp(-\beta\mathcal{H}_i)}{\text{Tr}_i \exp(-\beta\mathcal{H}_i)} \right\rangle \right) (1 - \langle \tilde{\Delta} \rangle) = 0. \quad (1.14)$$

Keďže v dôsledku predpokladu (1.2) je $\langle \tilde{\Delta} \rangle \neq 1$, dostaneme nakoniec z (1.14) vzťah, ktorý sme chceli získať:

$$\langle \mathcal{O}_i \rangle = \left\langle \frac{\text{Tr}_i \mathcal{O}_i \exp(-\beta\mathcal{H}_i)}{\text{Tr}_i \exp(-\beta\mathcal{H}_i)} \right\rangle. \quad (1.15)$$

Táto rovnica sa v literatúre nazýva Callenova identita ² a slúži ako štartovný bod na vybudovanie rôznych variant teórie efektívneho poľa. Aj keď platí pre všetky spinové modely s lokalizovanými spinmi, je potrebné jasne zdôrazniť, že v dôsledku priblíženia (1.13) je táto rovnica v prípade kvantových modelov len približná. Naproti tomu, pre všetky modely spĺňajúce

²Niektorí autori túto identitu nazývajú aj Callenova-Suzukiho alebo SáBarettova identita.

1. Callenova identita pre lokalizované spinové modely

podmienku $[\mathcal{H}_i, \mathcal{H}'] = 0$ (napr. Isingov, alebo Pottsov model) je $\Delta = 0$, takže Callenova identita sa pre takéto modely stáva exaktnou reláciou, ako to priamo vyplýva z rovnice (1.10).

Kvôli úplnosti ešte dodajme, že pri výpočte konkrétnych fyzikálnych veličín (napr. multispinových korelačných funkcií, či vnútornej energie systému) sa okrem identity (1.15) často využíva aj jej všeobecnejšia verzia

$$\langle \mathcal{O}_i \{f_i\} \rangle = \left\langle \{f_i\} \frac{\text{Tr}_i \mathcal{O}_i \exp(-\beta \mathcal{H}_i)}{\text{Tr}_i \exp(-\beta \mathcal{H}_i)} \right\rangle, \quad (1.16)$$

kde za $\{f_i\}$ je možné dosadiť prakticky ľubovoľnú (dobře definovanú) funkciu spinových operátorov, ktorá však nesmie obsahovať operátory centrálného i -tého uzla.

Na záver ešte uveďme, že pri našom odvodení Callenovej identity sme operátory \mathcal{O}_i a \mathcal{H}_i obmedzili na jeden uzol mriežky (resp. jeden spin). Ako je však zrejmé, všetky výpočty je možné urobiť rovnakým spôsobom aj pre prípad dvoch uzlov, alebo aj väčšieho klastra atómov. To nám umožňuje odvodiť ďalšie zovšeobecnené formy Callenovej identity, na základe ktorých je potom možné vybudovať presnejšie teórie efektívneho poľa, ale tiež rozvinúť napr. fenomenologickú verziu teórie renormalizačnej grupy.

Keďže odvodenie takýchto zovšeobecných vzťahov je identické s postupom, ktorý sme aplikovali pre prípad jednouzlového klastra, nebudeme tieto výpočty opakovať, ale uvedieme len konečnú podobu Callenovej identity pre všeobecný klaster pozostávajúci z n uzlov (atómov):

$$\langle \mathcal{O}_{ij\dots n} \{f_{ij\dots n}\} \rangle = \left\langle \{f_{ij\dots n}\} \frac{\text{Tr}_{ij\dots n} \mathcal{O}_{ij\dots n} \exp(-\beta \mathcal{H}_{ij\dots n})}{\text{Tr}_{ij\dots n} \exp(-\beta \mathcal{H}_{ij\dots n})} \right\rangle. \quad (1.17)$$

V tomto vzťahu operátor $\mathcal{O}_{ij\dots n}$ obsahuje spinové operátory zvoleného multiuzlového klastra (buď všetky, alebo len niektoré z nich) a veličina $\{f_{ij\dots n}\}$ reprezentuje ľubovoľnú, fyzikálne však dostatočne rozumnú funkciu ľubovoľných spinových operátorov, s výnimkou spinových operátorov všetkých

2. Isingov model

uzlov z centrálného klastra. Čiastkový hamiltonián $\mathcal{H}_{ij\dots n}$ predstavuje tú časť celkového hamiltoniánu, ktorá exaktne započítava interakcie všetkých atómov centrálného klastra s ich najbližšími susednými atómami na mriežke.

2 Isingov model

Isingov model reprezentuje jeden z najjednoduchších, ale súčasne aj jeden z najviac študovaných modelov kooperatívnych javov v štatistickej fyzike. Po prvýkrát sa v odbornej literatúre tento model objavuje vo svojej najjednoduchšej podobe v dvadsiatych rokoch minulého storočia, ako model pre teoretický popis magnetických fázových prechodov lineárnej mriežky pozostávajúcej z atómov so spinom $1/2$. Takto formulovaný problém bol v r. 1925 exaktne vyriešený E. Isingom, ktorý ukázal, že bez vonkajšieho magnetického poľa jednorozmerný Isingov model nevykazuje pri nenulových teplotách žiaden fázový prechod [3]. V modeli teda nevzniká ďalekosahové usporiadanie, takže spontánna magnetizácia je pri všetkých konečných teplotách rovná nule. Takmer o 20 rokov neskôr však L. Onsager [4] dokázal exaktne nájsť partičnú funkciu a ďalšie termodynamické funkcie Isingovho modelu so spinom $1/2$ na štvorcovej mriežke s anizotropnou výmennou interakciou. Neskôr, v r. 1949 Onsager zverejnil bez podrobného odvodenia aj exaktný vzorec pre spontánnu magnetizáciu a ukázal, že kritický index $\beta = 1/8$ a nie $1/2$, ako to predpovedá Landauova teória. Onsagerom zverejnený vzťah pre magnetizáciu bol exaktne odvodený až v r. 1952 Yangom [5].

Význam Onsagerovho riešenia bol obrovský hlavne pre rozvoj teórie fázových prechodov, ale aj pre štatistickú fyziku exaktne riešiteľných modelov. Je však potrebné zdôrazniť, že aj napriek dosiahnutému pokroku Isingov model bol dlho traktovaný len ako teoretický model, bez referencie na akékoľvek reálne materiály. Až začiatkom päťdesiatych rokov minulého storočia bolo zistené, že niektoré zlúčeniny vzácnych kovov môžu byť veľmi dobre

2. Isingov model

popísané Isingovym modelom. Kvôli ilustrácii uvádzame v Tabuľke 1 niekoľko typických zástupcov z triedy isingovských systémov aj s niektorými fyzikálnymi charakteristikami [6], [7]. Vo všeobecnosti možno konštatovať,

Tabuľka 1: *Príklady experimentálnych isingovských systémov .*

Chemické zloženie	Priestorová grupa	Typ usporiadania	$T_c(K)$
Dy(C ₂ H ₅ SO ₄) ₃ .9H ₂ O	P6/m	Dipolárny feromagnet	10
LiTbF ₄ , LiHoF ₄	I4 ₇ a	Dipolárny feromagnet	29
Dy ₂ Ti ₂ O ₇	FD3m	Spinový řad	<0.05
DyC ₃ Al ₅ SO ₁₂	Ia3d	6-podmriežkový antiferomagnet	25
DyPO ₄	I4 ₇ amd	2-podmriežkový antiferomagnet	34
Rb ₂ CoF ₄ , K ₂ CoF ₄	I4 ₇ mmm	2d antiferomagnet	101

že materiály isingovského typu musia spĺňať dve fyzikálne podmienky:

1. Základný stav magnetického iónu musí byť dublet, ktorý je výrazne separovaný od excitovaných stavov $\Delta E \gg k_B T_c$ (ideálne by mal mať príslušný dublet Kramersovu degeneráciu zodpovedajúcu nepárnemu počtu elektrónov v ióne).
2. Druhá podmienka zahŕňa kvantovo-mechanický opis dvojice iónových stavov. V tomto prípade je dôležitým kritériom požiadavka, aby všetky maticové elementy viažuce dva stavy každého z interagujúcich atómov boli nulové pre všetky operátory zahrnuté v spin-spinovej interakcii.

Okrem splnenia vyššie uvedených podmienok sa hamiltonián pri konkrétnych aplikáciách na rôzne isingovské systémy ešte spresňuje na základe ďalších experimentálnych údajov. Z teoretického hľadiska je pri výpočte konkrétnych termodynamických veličín takýchto systémov možné využiť buď

2. Isingov model

exaktné výsledky Isinga a Onsagera, alebo aplikovať vhodné aproximatívne metódy [7], [8], [9].

V skutočnosti sme na aproximatívne výpočty odkázaní veľmi často, lebo zovšeobecnenie Onsagerovho riešenia na trojrozmerné štruktúry sa ukázalo ako neriešiteľný problém a dokonca sa nedá exaktne vyriešiť ani štvorcová mriežka v nenulovom vonkajšom magnetickom poli. Taktiež je nemožné nájsť exaktné výsledky pre rôzne štrukturálne zložitejšie jedno a dvojrozmerné systémy (napr. amorfné látky, magneticky zriedené systémy, systémy s náhodnou anizotropiou, atp.).

Skôr ako pokročíme ďalej, je však potrebné zdôrazniť, že okrem najbežnejších aplikácií v teórii magnetizmu sa rôzne varianty Isingovho modelu využívajú na štúdium binárnych zliatin, mriežkových kvapalín, tuhého He_3 , lipidových dvojvrstiev, štruktúry DNA, atp..

V tejto práci sa sústreďíme výlučne na aplikácie Isingovho modelu v magnetizme, kde sa veľmi často využívajú rôzne približné metódy, ako je teória stredného poľa, Oguchiho aproximácia, Betheho-Peierlsova-Weisova metóda a rôzne teórie efektívneho poľa [8].

Veľmi zaujímavú skupinu aproximatívnych metód nepochybne reprezentujú tiež rôzne varianty teórie efektívneho poľa založené na metóde diferenciálneho operátora, ktorú pôvodne v r. 1979 zaviedli Honmura a Kaneyoshi [10]. Naším primárnym cieľom v tejto práci je podrobne vysvetliť metódu diferenciálneho operátora, pričom zvolíme originálny postup, ktorý umožňuje nájsť mnohé vzťahy v jednotnej forme platnej pre všetky kryštalické mriežky. Okrem toho je v práci navrhnutý a overený spôsob vyšetrovania stability rôznych magnetických fáz na základe rozdielu ich voľných energií. Tento pôvodný výsledok nie je viazaný na konkrétnu aproximatívnu schému a možno ho považovať za najvýznamnejší príspevok tejto monografie k ďalšiemu rozvoju teórie efektívneho poľa v najširšom možnom ponímaní.

3 Jednouzlová aproximácia efektívneho poľa a metóda diferenciálneho operátora pre Isingov model so spinom 1/2

Budeme študovať Isingov model na ideálnej kryštalickej mriežke definovaný hamiltoniánom

$$\mathcal{H} = - \sum_{i,j} J_{ij} \sigma_i^z \sigma_j^z - h \sum_i \sigma_i^z, \quad (3.1)$$

kde $\sigma_i^z = \pm 1$ sú normované spinové premenné reprezentujúce možné priemety spinu do osi z , h značí hodnotu homogénneho vonkajšieho magnetického poľa a J_{ij} je výmenná interakcia, ktorá je nenulová len pre dvojice najbližších susedných spinov na mriežke. Aj keď samotná teória nekladie žiadne obmedzenie na znamienko výmennej interakcie, budeme kvôli jednoznačnosti predpokladať, že je kladná, takže preferované ďalekodosahové usporiadanie bude feromagnetické. Sumáciu v prvom člene predchádzajúcej rovnice je potrebné vykonať tak, aby sme interakciu medzi každou dvojicou najbližších susedov započítali len raz, avšak v druhom člene sčítavame cez všetky uzly mriežky. Aby sme mohli využiť rovnicu (1.15), položíme $\mathcal{O}_i = \sigma_i^z$ a hamiltonián (3.1) rozdelíme na dve časti

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_i + \mathcal{H}', \quad (3.2)$$

kde člen

$$\mathcal{H}_i = -\sigma_i^z \left(\sum_{j=1}^z J_{ij} \sigma_j^z + h \right) \quad (3.3)$$

obsahuje všetky interakcie vybratého centrálného spinu (atómu) s najbližšími susedmi a vonkajším magnetickým poľom. Počet najbližších susedov špecifikujeme koordinačným číslom z . Všetky ostatné interakčné členy sme

3. Jednouzlová aproximácia efektívneho poľa

zahrnuli do \mathcal{H}' . Teória, ktorú budeme rozvíjať v tejto časti sa v odbornej literatúre nazýva ako jednouzlová klastrová teória efektívneho poľa, keďže za centrálny objekt (klastor) sme zvolili práve jeden uzol (spin) mriežky. Našou hlavnou snahou bude odvodiť v rámci tejto teórie analytické vzťahy pre výpočet dôležitých fyzikálnych veličín, ako je magnetizácia, Curieho teplota, počiatočná susceptibilita, vnútorná energia atp. Ako vidíme pri konkrétnych výpočtoch je možné v rámci jednouzlovej aproximácie získať pre spomínané veličiny pomerne jednoduché rovnice, v ktorých je štruktúra mriežky zohľadnená jediným fyzikálnym parametrom, a to koordinačným číslom z . Tento fakt je univerzálnou vlastnosťou teórie a je veľmi užitočný pri hľadaní jednotnej a univerzálnej podoby relevantných rovníc. Z fyzikálneho hľadiska však ide o vážnejší nedostatok, keďže teória efektívneho poľa v jednouzlovej aproximácii nedokáže vôbec rozlíšiť rôzne topologické štruktúry s rovnakým koordinačným číslom (napr. rovinnú trojuholníkovú a priestorovú jednoduchú kubickú mriežku).

Keďže výpočet stopy v Callenovej identite (1.15) sa v našom prípade redukuje na sumáciu cez možné hodnoty spinovej premennej σ_i^z , môžeme túto identitu vyjadriť v tvare

$$\langle \sigma_i^z \rangle = \left\langle \frac{\sum_{\sigma_i^z = \pm 1} \sigma_i^z \exp(-\beta \mathcal{H}_i)}{\sum_{\sigma_i^z = \pm 1} \exp(-\beta \mathcal{H}_i)} \right\rangle, \quad (3.4)$$

odkiaľ po vykonaní naznačenej sumácie obdržíme nasledovnú rovnicu pre normovanú spontánnu magnetizáciu m

$$m \equiv \langle \sigma_i^z \rangle = \left\langle \tanh \left[\beta \left(\sum_{j=1}^z J_{ij} \sigma_j^z + h \right) \right] \right\rangle. \quad (3.5)$$

Táto rovnica je ešte stále exaktná, lebo sme doteraz neurobili žiadnu aproximáciu a Callenova identita je pre náš model tiež exaktná. Aby sme však

3. Jednouzlová aproximácia efektívneho poľa

mohli vypočítať teplotné a poľné závislosti spontánnej magnetizácie, musíme vypočítať štatistickú strednú hodnotu na pravej strane (3.5). Keďže neexistuje žiaden matematický postup, ako toto stredovanie urobiť presne, musíme v tomto štádiu výpočtu pristúpiť k aproximáciám.

Najjednoduchšie možné, ale súčasne aj najmenej presné priblíženie obdržíme jednoduchým nahradením argumentu funkcie jeho strednou hodnotou. Ak si uvedomíme, že vďaka translačnej symetrii platí $J_{ij} = J_{ji} = J$, potom dostaneme veľmi jednoduchý vťah

$$m = \tanh[\beta(\mathbf{z}Jm + h)], \quad (3.6)$$

kde sme navyše využili skutočnosť, že vďaka translačnej symetrii je tiež $\langle \sigma_j^z \rangle = \langle \sigma_i^z \rangle = m$, $\forall j$. Rovnica je totožná s rovnicou pre spontánnu magnetizáciu, ktorú dostaneme pre tento model z tzv. teórie stredného poľa. Podobne to platí aj pre všetky ostatné lokalizované spinové modely, takže môžeme povedať, že z Callenovej identity vieme priamo a veľmi ľahko získať niektoré výsledky teórie stredného poľa, ktorá sa rigorózne formuluje úplne odlišným spôsobom na základe Bogolubovovej nerovnosti pre Gibbsovú voľnú energiu. Prediktívna schopnosť novej teórie len na úrovni teórie stredného poľa prirodzene nepostačuje, preto teraz ukážeme, ako je možné aplikáciou translačného operátora vybudovať lepšiu aproximatívnu schému pre náš model.

Ako sme už spomenuli, táto metóda bola zavedená Honmurom a Kaneyoshim v prácach [10] a je principiálne založená na dobre známom vzťahu

$$\exp(\alpha \nabla_x) f(x) = f(x + \alpha), \quad (3.7)$$

kde α je ľubovoľný parameter a $\nabla_x = \partial/\partial x$ je diferenciálny operátor ³.

Po aplikácii (3.7) prepíšeme rovnicu (3.5) v tvare

$$m \equiv \langle \sigma_i^z \rangle = \left\langle \exp \left[\left(J \sum_{j=1}^z \sigma_j^z \right) \nabla_x \right] \right\rangle \tanh[\beta(x + h)] \Big|_{x=0}, \quad (3.8)$$

³Je zrejmé, že práve kvôli využitiu vzťahu (3.7) sa tento prístup nazýva metódou diferenciálneho operátora.

3. Jednouzlová aproximácia efektívneho poľa

resp.

$$m = \left\langle \prod_{j=1}^z \exp(J \nabla_x \sigma_j^z) \right\rangle \tanh[\beta(x+h)] \Big|_{x=0}, \quad (3.9)$$

kde sme pri poslednej úprave využili komutatívnosť všetkých členov v argumente exponenciálnej funkcie. Ďalší progres pri úprave predchádzajúceho vzťahu dosiahneme využitím van der Waerdenovej identity

$$\exp(\gamma \sigma_j^z) = \cosh(\gamma) + \sigma_j^z \sinh(\gamma), \quad (3.10)$$

ktorá je evidentne platná pre ľubovoľný parameter γ a $\sigma_j^z = \pm 1$. Pomocou (3.10) upravíme rovnicu (3.9) nasledovne

$$m = \left\langle \prod_{j=1}^z [\cosh(J \nabla_x) + \sigma_j^z \sinh(J \nabla_x)] \right\rangle \tanh[\beta(x+h)] \Big|_{x=0}. \quad (3.11)$$

Na tomto mieste je potrebné zdôrazniť, že táto rovnica je ešte stále exaktná a je zrejmé, že akákoľvek aproximácia pri výpočte strednej hodnoty na jej pravej strane musí dať pre spontánnu magnetizáciu kvantitatívne lepšie výsledky ako teória stredného poľa (viď rovnicu (3.6)). Toto vylepšenie sa prirodzene týka priebehov všetkých fyzikálnych veličín a vyplýva zo skutočnosti, že aplikácia van der Waerdenovej identity automaticky rigorózne započítava všetky relácie typu

$$(\sigma_j^z)^n = \sigma_j^z \quad \text{pre } n \text{ nepárne} \quad (3.12)$$

$$(\sigma_j^z)^n = 1 \quad \text{pre } n \text{ párne}, \quad (3.13)$$

ktoré sú v teórii stredného poľa ignorované. Keďže ďalšie exaktné úpravy rovnice (3.11) už nie sú možné, musíme pristúpiť k približnému výpočtu strednej hodnoty na pravej strane. Najjednoduchšia aproximácia spočíva v nahradení všetkých spinových premenných σ_j^z ich strednými hodnotami.

3. Jednouzlová aproximácia efektívneho poľa

Ak teda položíme $\sigma_j^z = \langle \sigma_i^z \rangle = m$, obdržíme pre spontánnu magnetizáciu kryštalickej mriežky s koordinačným číslom z vzťah

$$m = \left[\cosh(J\nabla_x) + m \sinh(J\nabla_x) \right]^z \tanh[\beta(x+h)] \Big|_{x=0}, \quad (3.14)$$

ktorý ľahko prepíšeme do kompaktnejšej podoby

$$m = \sum_{k=0}^z \binom{z}{k} m^k [\cosh(J\nabla_x)]^{z-k} [\sinh(J\nabla_x)]^k \tanh[\beta(x+h)] \Big|_{x=0}. \quad (3.15)$$

Pre ďalšie výpočty je užitočné predchádzajúcu rovnicu prepísať v tvare

$$m = \sum_{k=0}^z \binom{z}{k} m^k A_k^{(z)}(\beta J, h), \quad (3.16)$$

kde koeficienty $A_k^{(z)}(\beta J, h)$ sme definovali predpisom

$$A_k^{(z)}(\beta J, h) = [\cosh(J\nabla_x)]^{z-k} [\sinh(J\nabla_x)]^k \tanh[\beta(x+h)] \Big|_{x=0}. \quad (3.17)$$

Akékoľvek numerické výpočty samozrejme vyžadujú explicitnú znalosť všetkých relevantných koeficientov, preto si teraz vysvetlíme ako tieto koeficienty pre jednotlivé mriežky vypočítame. Vzťah (3.17) najprv prepíšeme využitím definícií hyperbolických funkcií v tvare

$$A_k^{(z)}(\beta J, h) = \frac{e^{-zJ\nabla_x}}{2^z} \left(e^{2J\nabla_x} + 1 \right)^{z-k} \left(e^{2J\nabla_x} - 1 \right)^k \tanh[\beta(x+h)] \Big|_{x=0} \quad (3.18)$$

odkiaľ priamou aplikáciou (3.7) priamočiaro obdržíme konečný výsledok

$$A_k^{(z)}(\beta J, h) = \frac{1}{2^z} \sum_{i=0}^{z-k} \sum_{j=0}^k (-1)^j \binom{z-k}{i} \binom{k}{j} \tanh[\beta J(z-2i-2j+\tilde{h})], \quad (3.19)$$

3.1 Spontánna magnetizácia a Curieho teplota

kde sme definovali $\tilde{h} = h/J$. Na záver tejto časti ešte zdôraznime, že na základe rovnice (3.16) a (3.19) môžeme numericky študovať magnetizačné krivky pri ľubovoľných pevne zvolených teplotách, alebo teplotné priebehy magnetizácie pri fixovanom vonkajšom poli.

3.1 Spontánna magnetizácia a Curieho teplota

Spontánna magnetizácia je magnetizácia, ktorú magnetický systém vyka-
zuje v neprítomnosti vonkajšieho magnetického poľa. V rámci jednodzlovej
aproximácie efektívneho poľa určíme túto veličinu z rovnice (3.16), v ktorej
položíme $h = 0$. Takto dostaneme

$$m = \sum_{k=0}^z \binom{z}{k} m^k A_k^{(z)}(\beta J), \quad (3.20)$$

kde teplotne závislé koeficienty $A_k^{(z)}(\beta J) = A_k^{(z)}(\beta J, 0)$ sú definované vzťahmi

$$A_k^{(z)}(\beta J) = \frac{1}{2^z} \sum_{i=0}^{z-k} \sum_{j=0}^k (-1)^j \binom{z-k}{i} \binom{k}{j} \tanh[\beta J(z-2i-2j)], \quad (3.21)$$

pričom pre ľubovoľné z a párne k platí

$$A_k^{(z)}(\beta J) = 0. \quad (3.22)$$

Vzťah (3.20) je polynomická rovnica stupňa z , ktorá má vždy triviálne rie-
šenie $m = 0$ zodpovedajúce neusporiadanej paramagnetickej fáze stabilnej
nad kritickou (Curieho) teplotou T_c . Okrem nulového riešenia existujú tiež
netriviálne riešenia reprezentujúce usporiadanú feromagnetickú fázu, ktorá
je stabilná pre $T < T_c$. Keď sa z nízkych teplôt postupne blížíme k tep-
lote fázového prechodu, spontánna magnetizácia kontinuálne klesá, až na-
koniec v samotnej Curieho teplote nadobudne nulovú hodnotu. V rámci
teórie fázových prechodov takýto prechod klasifikujeme ako fázový prechod

3.1 Spontánna magnetizácia a Curieho teplota

Tabuľka 2: Porovnanie kritických teplôt Isingovho modelu so spinom $1/2$.
JAEP - jednouzlová aproximácia efektívneho poľa, *TMP* - teória molekulárneho poľa, *Betheho-Peierlsova metóda*, *Exakt/VTR* - exaktné výsledky/vysoteplotný rozvoj.

z	JAEP	TMP	Bethe-Peierls	Exakt/VTR
	$k_B T_c/J$	$k_B T_c/J$	$k_B T_c/J$	$k_B T_c/J$
2	0.0	2.0	0.0	0.0
3	2.104	3.0	1.821	1.519
4	3.090	4.0	2.885	2.269
6	5.073	6.0	4.933	4.511
8	7.061	8.0	6.952	6.353
12	11.045	12.0	10.970	9.795

druhého druhu a charakterizujeme ho tzv. kritickým indexom β . Na tomto mieste je potrebné zdôrazniť, že všetky varianty teórie efektívneho poľa dávajú pre všetky možné študované systémy (mriežky) hodnotu $\beta = 1/2$, ktorá je zhodná s hodnotou vyplývajúcou z teórie stredného poľa, resp. z Landauovej fenomenologickej teórie fázových prechodov. Samozrejme, aj pre kritické indexy ostatných relevantných veličín obdržíme v rámci tejto teórie vždy koeficienty zhodné s teóriou stredného poľa. Jednouzlová teória efektívneho poľa teda v prezentovanej podobe neposkytuje kvantitatívne správny fyzikálny obraz kritického správania sa magnetických systémov.

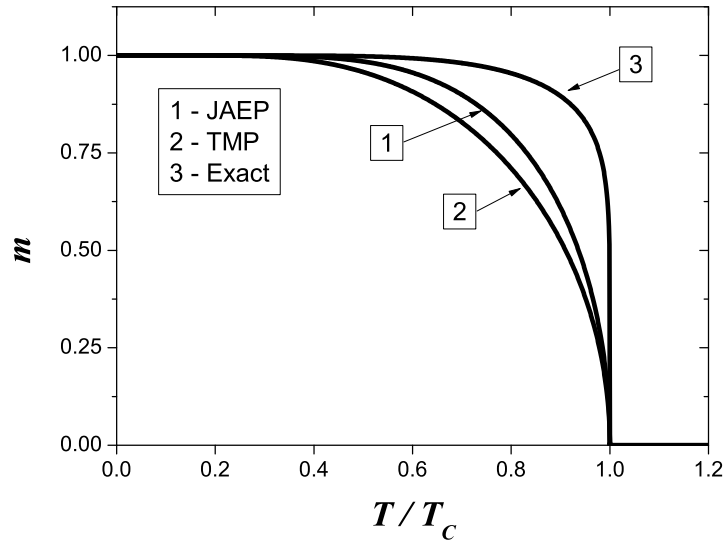
Ako sme už konštatovali, pre $T \rightarrow T_c$ spontánna magnetizácia prudko klesá (t.j., $m \ll 1$), preto ak v rovnici (3.21) ponecháme len členy lineárne vzhľadom na m a zohľadníme, že $A_0^{(z)}(\beta J) = 0$, potom pre kritickú teplotu dostaneme rovnicu

$$1 = zA_1^{(z)}(\beta_c J), \quad \beta_c = 1/(k_B T_c). \quad (3.23)$$

Numerické výsledky pre kritické teploty rôznych kryštalických štruktúr získané na základe vzťahov (3.23) uvádzame v Tabuľke 2, kde sú pre porovna-

3.2 Počiatočná magnetická susceptibilita

nie uvedené aj kritické teploty vyplývajúce z teórie stredného poľa (TMP), Betheho-Peierlsovej metódy, exaktné výsledky (Exakt) a výsledky obdržané metódou vysokoteplotných rozvojev (VTR) (viď [11]).



Obr. 1: Teplotná závislosť magnetizácie.

Nakoniec pre porovnanie uvádzame na Obr. 1 teplotný priebeh magnetizácie vypočítaný v rámci jednuzlovej aproximácie efektívneho poľa (JAEP), teórie molekulárneho poľa (TMP) a exaktný výsledok (Exact) pre štvorcovú mriežku.

3.2 Počiatočná magnetická susceptibilita

Ďalšou významnou experimentálne merateľnou fyzikálnou veličinou je počiatočná magnetická susceptibilita, ktorá popisuje odozvu systému na von-

3.2 Počiatočná magnetická susceptibilita

kajšie magnetické pole a je definovaná vzťahom

$$\chi = (g\mu_B)^2 \lim_{h \rightarrow 0} \left(\frac{\partial m}{\partial h} \right)_T, \quad (3.24)$$

kde g je Landého faktor a μ_B Bohrov magnetón. V tejto časti monografie vysvetlíme, ako je možné vypočítať túto veličinu pre študovaný model v rámci jednouzlovej teórie efektívneho poľa.

Je zrejmé, že na určenie tejto veličiny bude postačujúce uvažovať stavovú rovnicu pre slabé vonkajšie magnetické polia a teda uvažovať v rovnici (3.14) len lineárny príspevok vzhľadom k veličine h . Ak teda v tomto vzťahu rozvinieme funkciu $\tanh[\beta(x+h)]$ do Taylorovho radu a obmedzíme sa len na prvé dva členy radu, potom dostaneme pre magnetizáciu vzťah

$$\begin{aligned} m &= \left[\cosh(J\nabla_x) + m \sinh(J\nabla_x) \right]^z \tanh(\beta x) \Big|_{x=0} \\ &+ \beta h \left[\cosh(J\nabla_x) + m \sinh(J\nabla_x) \right]^z \operatorname{sech}^2(\beta x) \Big|_{x=0}. \end{aligned} \quad (3.25)$$

Analogickým spôsobom ako v prechádzajúcej časti prepíšeme túto rovnicu v tvare

$$m = \sum_{k=0}^z \binom{z}{k} m^k \left[A_k^{(z)}(\beta J) + \beta h B_k^{(z)}(\beta J) \right], \quad (3.26)$$

kde teplotne závislé koeficienty $A_k^{(z)}(\beta J)$ sú dané vzťahom (3.21) a koeficienty $B_k^{(z)}(\beta J)$ definujeme analogickým spôsobom, t.j.,

$$B_k^{(z)}(\beta J) = \frac{1}{2^z} \sum_{i=0}^{z-k} \sum_{j=0}^k (-1)^j \binom{z-k}{i} \binom{k}{j} \operatorname{sech}^2[\beta J(z-2i-2j)]. \quad (3.27)$$

Ľahko sa možno presvedčiť, že na rozdiel od koeficientov $A_k^{(z)}(\beta J)$ sú koeficienty $B_k^{(z)}(\beta J)$ nulové, ak je k nepárne.

3.2 Počiatočná magnetická susceptibilita

Z rovnice (3.25) dostaneme nasledovné vyjadrenie pre deriváciu magnetizácie podľa poľa pri konštantnej teplote

$$\left(\frac{\partial m}{\partial h}\right)_T = \frac{\beta \sum_{k=0}^z m^k B_k^{(z)}(\beta J)}{1 - \sum_{k=0}^z \binom{z}{k} k m^{k-1} A_k^{(z)}(\beta J)}, \quad (3.28)$$

takže po dosadení do (3.23) pre počiatočnú susceptibilitu obdržíme rovnicu

$$\chi = \frac{(g\mu_B)^2}{k_B T} \frac{\sum_{k=0}^z m^k B_k^{(z)}(\beta J)}{1 - \sum_{k=0}^z \binom{z}{k} k m^{k-1} A_k^{(z)}(\beta J)}. \quad (3.29)$$

V prípade, že sa obmedzíme len na paramagnetickú oblasť ($m = 0$), tak sa predchádzajúca rovnica zjednoduší na tvar

$$\chi = \frac{(g\mu_B)^2}{k_B T} \frac{B_0^{(z)}(\beta J)}{1 - z A_1^{(z)}(\beta J)}, \quad (3.30)$$

pričom

$$A_1^{(z)}(\beta J) = \frac{1}{2^z} \sum_{i=0}^{z-1} \binom{z-1}{i} \left\{ \tanh[\beta J(z-2i)] - \tanh[\beta J(z-2i-2)] \right\} \quad (3.31)$$

a

$$B_0^{(z)}(\beta J) = \frac{1}{2^z} \sum_{i=0}^z \binom{z}{i} \operatorname{sech}^2[\beta J(z-2i)]. \quad (3.32)$$

Experimentálne bolo na mnohých feromagnetických materiáloch zistené, že prevrátená hodnota počiatočnej susceptibility vo vysokoteplotnej oblasti rastie lineárne s teplotou. Táto závislosť je magnetikom známa ako Curieho-Weissov zákon. Podrobné výpočty, ktoré sme pre susceptibilitu urobili nám

3.3 Vnútoraná energia, entalpia a tepelná kapacita

umožňujú overiť, či jednouzlová teória efektívneho poľa je schopná správne vysvetliť spomínaný Curieho-Weissov zákon.

Pri dostatočne vysokých teplotách ($T \gg T_c$) je parameter β veľmi malý, takže môžeme pre hyperbolické funkcie v rovniciach (3.31) a (3.32) urobiť Taylorové rozvoje, z ktorých ponecháme len lineárne a absolútne členy a dostaneme

$$A_1^{(z)}(\beta J) \approx \beta J, \quad B_0^{(z)}(\beta J) \approx 1. \quad (3.33)$$

Vzťah pre počiatočnú susceptibilitu potom môžeme vyjadriť vo veľmi jednoduchom tvare

$$\chi = \frac{(g\sigma_B)^2}{k_B T} \frac{1}{1 - z\beta J}, \quad (3.34)$$

alebo alternatívne, v známej podobe Curieho-Weissovho zákona

$$\chi = \frac{C}{T - zJ/k_B} = \frac{C}{T - \Theta}. \quad (3.35)$$

V poslednom vzťahu $C = (g\sigma_B)^2/k_B$ je Curieho konštanta a $\Theta = zJ/k_B$ reprezentuje Curieho-Weissovú teplotu.

3.3 Vnútoraná energia, entalpia a tepelná kapacita

Vnútoraná energia fyzikálneho systému je v štatistickej fyzike definovaná ako stredná hodnota tej časti hamiltoniánu, ktorá neobsahuje vonkajšie polia. V našom prípade, teda pre vnútornú energiu dostaneme

$$U = \langle \mathcal{H} \rangle = - \left\langle \sum_{i,j} J_{ij} \sigma_i^z \sigma_j^z \right\rangle. \quad (3.36)$$

Ak zohľadníme, že $J_{ij} = J \neq 0$ len pre najbližších susedov na mriežke a zoberieme do úvahy translačnú invariantnosť, potom môžeme predchádzajúci

3.3 Vnútoraná energia, entalpia a tepelná kapacita

vzťah prepísať v tvare

$$U = -\frac{N}{2} \langle \sigma_i^z E_i \rangle, \quad (3.37)$$

kde N je počet spinov (uzlov) na mriežke a E_i exaktne zahŕňa všetky interakcie medzi centrálnym spinom σ_i a jeho najbližšími susedmi, t.j.,

$$E_i = \sum_{j=1}^z J_{ij} \sigma_j^z. \quad (3.38)$$

Pri výpočte strednej hodnoty na pravej strane (3.37) budeme vychádzať tentokrát zo zovšeobecnenej Callenovej identity (1.16), v ktorej položíme $\mathcal{O}_i = \sigma_i^z$, $\{f_i\} = E_i$ a Tr_i nahradíme sumáciou cez hodnoty spinovej premennej σ_i^z . Ak navyše vo vzťahu (3.3) pre \mathcal{H}_i zohľadníme, že $h = 0$, potom (1.16) nadobudne podobu

$$\langle \sigma_i^z E_i \rangle = \left\langle E_i \frac{\sum_{\sigma_i^z = \pm 1} \sigma_i^z \exp(\beta \sigma_i^z E_i)}{\sum_{\sigma_i^z = \pm 1} \exp(\beta \sigma_i^z E_i)} \right\rangle. \quad (3.39)$$

Po vykonaní sumácie cez σ_i^z a aplikácii vzťahu (3.7) dostaneme

$$\langle \sigma_i^z E_i \rangle = \left\langle E_i \exp(E_i \nabla_x) \right\rangle \tanh(\beta x) \Big|_{x=0}. \quad (3.40)$$

Po dosadení (3.40) do (3.37) a jednoduchšej úprave vyjadríme redukovanú vnútornú energiu v nasledovnej všeobecnej podobe

$$\frac{2U}{N} = - \left[\frac{\partial}{\partial y} \left\langle \exp(E_i y) \right\rangle \right]_{y=\nabla_x} \tanh(\beta x) \Big|_{x=0}. \quad (3.41)$$

Táto rovnica je ešte stále exaktná, avšak podobne ako pri výpočte magnetizácie, ani tu už ďalej nevieme budovať teóriu bez vhodnej aproximácie.

3.3 Vnútoraná energia, entalpia a tepelná kapacita

Preto poslednú rovnicu upravíme využitím van der Waerdenovej identity a aproximácie efektívneho poľa do tvaru

$$\frac{2U}{N} = - \left\{ \frac{\partial}{\partial y} [\cosh(Jy) + m \sinh(Jy)]^z \right\}_{y=\nabla_x} \tanh(\beta x) \Big|_{x=0}. \quad (3.42)$$

Po vykonaní naznačeného derivovania nakoniec dostaneme vzťah

$$-\frac{2U}{zNJ} = \left[\sinh(J\nabla_x) + m \cosh(J\nabla_x) \right] \left[\sinh(J\nabla_x) + m \cosh(J\nabla_x) \right]^{z-1} \times \tanh(\beta x) \Big|_{x=0}. \quad (3.43)$$

Podobne ako pri výpočte magnetizácie a počiatkovej susceptibility, aj teraz je naším definitívnym cieľom dotiahnuť výpočet vnútornej energie do podoby vhodnej pre numerické výpočty. Postup je veľmi podobný ako v predchádzajúcej sekcii, takže aj teraz prepíšeme rovnicu (3.43) pomocou binomickej vety a po krátkej úprave obdržíme

$$-\frac{2U}{zNJ} = \sum_{k=0}^{z-1} \binom{z-1}{k} m^k [\cosh(J\nabla_x)]^{z-1-k} [\sinh(J\nabla_x)]^{k+1} \tanh(\beta x) \Big|_{x=0} + \sum_{k=0}^z \binom{z-1}{k} m^{k+1} [\cosh(J\nabla_x)]^{z-k} [\sinh(J\nabla_x)]^k \tanh(\beta x) \Big|_{x=0}. \quad (3.44)$$

Predchádzajúci vzťah môžeme prirodzene prepísať v nasledovnej elegantnej a stručnej forme

$$-\frac{2U}{zNJ} = \sum_{k=0}^{z-1} \binom{z-1}{k} \left[m^k C_k^{(z)}(\beta J) + m^{k+1} D_k^{(z)}(\beta J) \right], \quad (3.45)$$

kde teplotne závislé koeficienty $C_k^{(z)}(\beta J)$ a $D_k^{(z)}(\beta J)$ sme definovali takto:

$$C_k^{(z)}(\beta J) = [\cosh(J\nabla_x)]^{z-k-1} [\sinh(J\nabla_x)]^{k+1} \tanh(\beta x) \Big|_{x=0}, \quad (3.46)$$

3.3 Vnútoraná energia, entalpia a tepelná kapacita

$$D_k^{(z)}(\beta J) = [\cosh(J\nabla_x)]^{z-k} [\sinh(J\nabla_x)]^k \tanh(\beta x) \Big|_{x=0}. \quad (3.47)$$

Explicitnú podobu týchto koeficientov získame opätovnou rutinnou aplikáciou binomickej vety a rovnice (3.7). Po pomerne jednoduchých výpočtoch nakoniec pre spomínané koeficienty dostaneme

$$C_k^{(r)}(\beta J) = \frac{1}{2^z} \sum_{i=0}^{z-k-1} \sum_{j=0}^{k+1} (-1)^j \binom{z-k-1}{i} \binom{k+1}{j} \tanh[\beta J(z-2i-2j)], \quad (3.48)$$

$$D_k^{(r)}(\beta J) = \frac{1}{2^z} \sum_{i=0}^{z-k} \sum_{j=0}^k (-1)^j \binom{z-k}{i} \binom{k}{j} \tanh[\beta J(z-2i-2j)], \quad (3.49)$$

Tu je potrebné ešte uviesť, že koeficienty $C_k^{(r)}(\beta J)$ a $D_k^{(r)}(\beta J)$ spĺňajú nasledovne podmienky

$$C_k^{(z)}(\beta J) = 0, \quad \text{pre } k \text{ párne} \quad (3.50)$$

$$D_k^{(z)}(\beta J) = 0, \quad \text{pre } k \text{ nepárne.} \quad (3.51)$$

Podarilo sa nám teda pre výpočet vnútornej energie Isingovho modelu so spinom 1/2 odvodiť jednu univerzálnu rovnicu, v ktorej je koordinačné číslo opäť tým parametrom, ktorým špecifikujeme príslušnú mriežku.

Bez ďalšej veľkej námahy získame rovnicu pre výpočet entalpie systému H v tvare

$$H = U - Nhm, \quad (3.52)$$

kde vnútoraná energia U je daná vzťahom (3.45), magnetizáciu m získame z rovnice (3.16) a h reprezentuje vonkajšie magnetické pole.

Samotná vnútoraná energia a entalpia sú veľmi významné stavové veličiny, ktoré nám umožňujú pochopiť a vysvetliť mnohé fyzikálne vlastnosti

3.4 Helmholtzova a Gibbsova voľná energia

študovaných systémov. V teórii efektívneho poľa je význam týchto dvoch veličín ešte zvýraznený tým, že prostredníctvom nich dokážeme vypočítať ďalšie dve veľmi dôležité veličiny, ktorými sú tepelná kapacita a voľná energia.

Tepelnú kapacitu pri konštantnej magnetizácii vypočítame priamo z definície

$$C_m = \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_m \quad (3.53)$$

a tepelnú kapacitu pri konštantnom vonkajšom poli získame zo vzťahu

$$C_h = \left(\frac{\partial H}{\partial T} \right)_h. \quad (3.54)$$

Aj keď by sme v princípe mohli derivovaním rovníc (3.45) a (3.51) získať pre výpočet tepelných kapacít analytické vzťahy, nebudeme takto postupovať, lebo výsledok je natoľko zložitý, že je oveľa pohodlnejšie počítat tepelnú kapacitu numerickým derivovaním príslušných teplotných závislostí vnútornej energie a entalpie.

3.4 Helmholtzova a Gibbsova voľná energia

Helmholtzova a Gibbsova voľná energia reprezentujú dve kľúčové termodynamické veličiny, ktorých význam spočíva predovšetkým v tom, že nám umožňujú stanoviť hranice pre stabilitu jednotlivých rovnovážnych fáz (stavov) študovaného systému za rôznych fyzikálnych podmienok. Potreba vyšetrenia stability jednotlivých fáz vyvstáva pri ľubovoľnom teoretickom prístupe, vrátane exaktných výpočtov. Obyčajne sa viacero fáz (stabilných, metastabilných a nestabilných) objavuje pri štúdiu fyzikálne zložitejších systémov (napr. systémy v náhodnom magnetickom poli, modely s mixovanými spinmi, Isigov model s voľným povrchom, frustrované systémy, atp.). Rôzne

3.4 Helmholtzova a Gibbsova voľná energia

varianty teórie efektívneho poľa ⁴ poskytujú pre stavovú rovnicu systému aj v najjednoduchších prípadoch implicitnú polynomickú rovnicu, ktorá spravidla poskytuje viacero riešení, a teda tu prirodzene vyvstáva potreba analyzovať stabilitu týchto riešení pomocou niektorej z voľných energií. Musíme však konštatovať, že v rámci ľubovoľnej teórie efektívneho poľa vychádzajúcej z Callenovej identity nie je možné analyticky vypočítať ani Helmholtzovu, ani Gibbsovu energiu. Táto skutočnosť je dôsledkom toho, že všetky takéto teórie vychádzajú z Callenovej identity, ktorá má striktné lokálny charakter, a preto principiálne nie možné v rámci takéhoto prístupu získať analytické vzťahy pre veličiny charakterizujúce globálnu stabilitu systému.

Problém výpočtu voľnej energie v rámci nami diskutovanej teórie efektívneho poľa nebol doteraz v odbornej literatúre vôbec systematicky diskutovaný, preto v tejto časti ukážeme všeobecný postup pre numerický výpočet Helmholtzovej a Gibbsovej voľnej energie. Najprv podrobnejšie rozoberieme konkrétny príklad výpočtu pre jednouzlovú teóriu efektívneho poľa a potom objasníme možné zovšeobecnenia tohto prístupu a to tak z fyzikálneho, ako aj matematického hľadiska.

Východiskovým bodom pre naše výpočty sú dva dobre známe vzťahy zo štatistickej fyziky:

$$U = -\frac{\partial}{\partial\beta} \ln Z, \quad (3.55)$$

kde partičná funkcia systému je definovaná rovnicou

$$Z = \text{Tr} e^{-\beta\mathcal{H}_0} \quad (3.56)$$

a súvisí s Helmholtzovou voľnou energiou vzťahom

$$F = -\frac{1}{\beta} \ln Z, \quad (3.57)$$

⁴Na mysli máme len teórie využívajúce metódu diferenciálneho operátora a ich ekvivalentné formulácie.

3.4 Helmholtzova a Gibbsova voľná energia

Formálne rovnaké rovnice platia aj pre entalpiu a Gibbsovu voľnú energiu, t.j.,

$$H = -\frac{\partial}{\partial\beta} \ln Z, \quad (3.58)$$

kde partičná funkcia systému je definovaná rovnicou

$$Z = \text{Tr } e^{-\beta\mathcal{H}} \quad (3.59)$$

a súvisí s Gibbsovou voľnou energiou vzťahom

$$G = -\frac{1}{\beta} \ln Z. \quad (3.60)$$

Aby nedošlo k omylu v chápaní vyššie uvedených rovníc, je nutné zdôrazniť, že pri výpočte príslušných veličín v rovniciach (3.55)-(3.57) sa počíta stredná hodnota len tej časti hamiltoniánu, ktorá neobsahuje žiadne príspevky od vonkajších polí, čo sme formálne vyjadrili indexom 0. Naopak, pri výpočte veličín (3.58)-(3.60) je nutné zobrať do úvahy aj všetky príspevky od vonkajších polí, v dôsledku čoho sú veličiny F a G rozdielne.

Kombináciou rovníc (3.55)-(3.57) a (3.58)-(3.60) dostaneme jednoduché vzťahy

$$U(\beta) = \frac{\partial(\beta F)}{\partial\beta}, \quad (3.61)$$

$$H(\beta) = \frac{\partial(\beta G)}{\partial\beta}. \quad (3.62)$$

Tieto parciálne diferenciálne rovnice sú veľmi jednoduché a môžeme ich priamo integrovať v hraniciach (β', β) a získame

$$\beta F(\beta) - \beta' F(\beta') = \int_{\beta'}^{\beta} U(\beta) d\beta, \quad (3.63)$$

3.4 Helmholtzova a Gibbsova voľná energia

resp.,

$$\beta G(\beta) - \beta' G(\beta') = \int_{\beta'}^{\beta} H(\beta) d\beta. \quad (3.64)$$

Tak ako doteraz, aj ďalší postup pre určenie oboch voľných energií bude veľmi podobný, preto sa obmedzíme len na výpočet Helmholtzovej energie a odvodenie vzorcov pre Gibbsovu energiu prenechávame čitateľovi. Ako je zrejmé z doterajších výsledkov, hlavným problémom je stanovenie jednej z hraníc integrovania tak, aby sme mohli príslušnú energiu (resp. rozdiel energií) numericky jednoznačne vypočítať. Vzhľadom na celkový kvalitatívny teplotný priebeh Helmholtzovej energie pre lokalizované spinové modely nemôžeme za referenčnú (resp. počiatočnú) teplotu β' zvoliť ani nulu a ani ∞ , pretože by sme neboli schopní určiť člen $\beta' F(\beta')$. Keďže v magnetizme študujeme spravidla systémy, ktoré vykazujú fázové prechody, ukazuje sa, že najvhodnejší výber v takomto prípade bude voľba $\beta' = \beta_c$, kde β_c reprezentuje teplotu fázového prechodu.

Uvažujme kvôli určitosti, že v skúmanom systéme môžu za vhodných podmienok existovať (prípadne koexistovať) dve rôzne fázy, ktoré označíme *I* a *II*. Ak teda za integračnú hranicu zoberieme kritickú teplotu fázového prechodu, potom na základe (3.63) môžeme pre jednotlivé fázy písať rovnice

$$\beta F_I(\beta) - \beta_c F_I(\beta_c) = \int_{\beta_c}^{\beta} U_I(\beta) d\beta, \quad (3.65)$$

a

$$\beta F_{II}(\beta) - \beta_c F_{II}(\beta_c) = \int_{\beta_c}^{\beta} U_{II}(\beta) d\beta. \quad (3.66)$$

Kľúčovým faktom pre zmysluplné využitie prechádzajúcich vzťahov je spojitý priebeh Helmholtzovej voľnej energie v bode fázového prechodu a to pre fázové prechody prvého, aj druhého druhu. Platí teda rovnosť

$$F_I(\beta_c) = F_{II}(\beta_c). \quad (3.67)$$

3.4 Helmholtzova a Gibbsova voľná energia

Ďalšou veľmi dôležitou skutočnosťou je, že na jednoznačné určenie stability jednotlivých fáz nepotrebujeme absolútne hodnoty voľných energií jednotlivých fáz, ale stačí nám vypočítať pri každej teplote ich rozdiel.

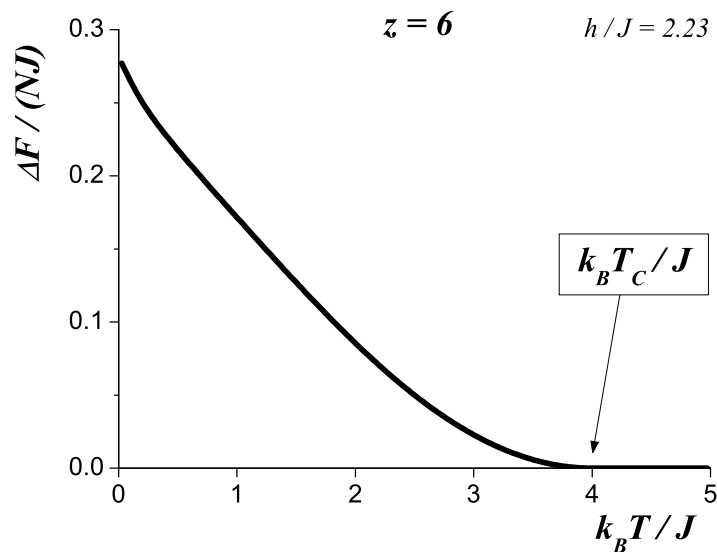
Ak zoberieme do úvahy (3.67), potom odčítaním (3.66) a (3.65) dostaneme pre rozdiel voľných energií vzťah

$$\Delta F = F_{II}(\beta) - F_I(\beta) = \frac{1}{\beta} \int_{\beta_c}^{\beta} [U_{II}(\beta) - U_I(\beta)] d\beta. \quad (3.68)$$

Z tohto vzťahu priamo vyplýva, že pri ľubovoľnej (pevne zvolenej) teplote je pre $\Delta F < 0$ stabilná fáza *II* a pre $\Delta F > 0$ stabilná fáza *I*. Kvôli úplnosti ešte dodajme, že kritickú teplotu T_c (resp. β_c) určíme pre fázové prechody druhého druhu ako teplotu, kde spojito zaniká parameter usporiadania. Pre fázové prechody prvého druhu je situácia zložitejšia a na určenie teploty fázového prechodu je nutné využiť dobre známu Maxwellovu konštrukciu.

Postup, ktorý sme využili na odvodenie rovnice (3.68) je možné rutinne zopakovať aj pre Gibbsovu voľnú energiu, pričom vo výslednom vzťahu bude vystupovať namiesto vnútornej energie entalpia študovaného systému. Je tiež veľmi dôležité si uvedomiť, že navrhnutá procedúra na učenie stability fáz je univerzálna a môže byť využitá v rámci ľubovoľnej teórie v prípade, že sme schopní vypočítať vnútornú energiu alebo entalpiu príslušného fyzikálneho systému. Kvôli overeniu správnosti tohto prístupu, prezentujeme na Obr. 2 a Obr 3. teplotné priebehy v rámci jednouzlovej aproximácie efektívneho poľa veličiny ΔF pre Isingov model so spinom 1/2 v náhodnom magnetickom poli. Zobrazené výsledky jasne dokumentujú správnosť vyššie navrhnutej procedúry na určenie stability jednotlivých fáz. Ako je známe z nezávislých štúdií [12], Isingov model v náhodnom poli na kubickej mriežke vykazuje napr. pre hodnotu náhodného poľa $h = 2.23J$ fázový prechod druhého druhu pri teplote $T_c = 4.0J/k_B$. Avšak pri dostatočne vysokej hodnote náhodného poľa, napr. $h = 3.23J$ systém vykazuje fázový prechod prvého druhu pri teplote $T_c = 1.0J/k_B$. Priebehy veličiny ΔF na Obr. 2 a 3 toto

3.5 Teória efektívneho poľa a pre jednorozmerný Isingov model so spinom 1/2



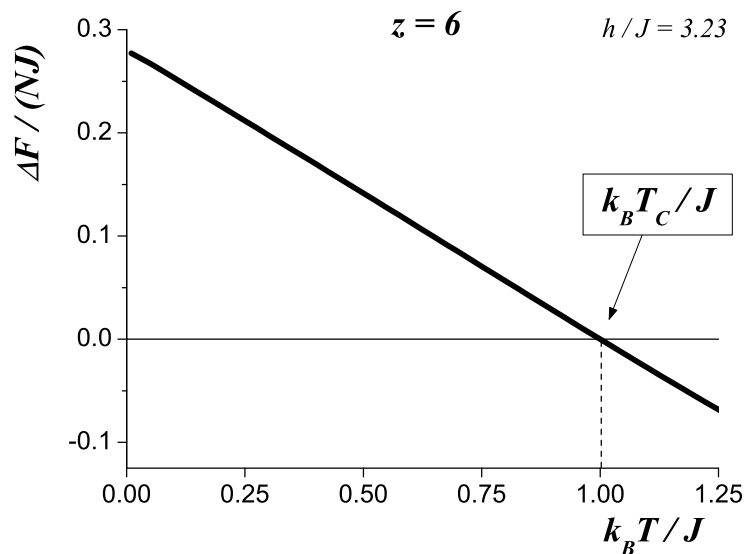
Obr. 2: Teplotná závislosť $\Delta F / (NJ)$ pre Isingov model v náhodnom magnetickom poli na jednoduchej kubickej mriežke. Teplota $k_B T_c / J = 4.0$ je teplota fázového prechodu druhého druhu.

správanie perfektne potvrdzujú.

3.5 Teória efektívneho poľa pre jednorozmerný Isingov model so spinom 1/2

Ako sme sa podrobne oboznámili v predchádzajúcom texte, teória efektívneho poľa je vo svojej podstate aproximatívna metóda, ktorá je založená na predpoklade štatistickej nezávislosti spinových premenných, ktoré sú najbližšími susedmi vybratého centrálného atómu. Práve predpoklad o štatistickej nezávislosti spomínaných spinov nám umožňuje zanedbať všetky

3.5 Teória efektívneho poľa a pre jednorozmerný Isingov model so spinom 1/2



Obr. 3: Teplotná závislosť $\Delta F/(NJ)$ pre Isingov model v náhodnom magnetickom poli na jednoduchej kubickej mriežke. Teplota $k_B T_c/J = 1.0$ je teplota fázového prechodu prvého druhu.

korelácie medzi týmito spinmi a tým sa teória dostane do uzavretej (selfkonzistentnej) podoby. Tieto tvrdenia majú všeobecnú platnosť s výnimkou lineárnej mriežky s isingovskými spinmi 1/2, pre ktorú nami uvažovaná teória efektívneho poľa poskytuje exaktné výsledky. V tomto prípade je teda teória efektívneho poľa neporovnateľne presnejšia v porovnaní s teóriou stredného poľa, ktorá v rozpore s realitou predpovedá pre lineárnu reťazku existenciu spontánnej magnetizácie a fázový prechod druhého druhu pri $k_B T_c/J = 2.0$. Pripomeňme, že jednorozmerný Isingov model spinom 1/2 sa štandardne dá vyriešiť exaktne veľmi elegantnou metódou matice prechodu, avšak ako ukážeme priamym výpočtom v tejto časti, predstavuje metóda diferenciálneho

3.5 Teória efektívneho po a pre jednorozmerný Isingov model so spinom 1/2

operátora kľúčový matematický trik, ktorý nám umožní získať exaktné riešenie tohto modelu alternatívnym spôsobom.

Budeme študovať model definovaný hamiltoniánom (3.1), kde špeciálne položíme $z = 2$ a $h = 0$. Na odvodenie exaktných výsledkov bude pre nás štartovným bodom mierne modifikovaná rovnica (3.11), ktorú ľahko získame, ak budeme vychádzať pri výpočtoch zo zovšeobecnenej Callenovej identity (1.16)

$$\langle \sigma_i^z \{f_i\} \rangle = \left\langle \{f_i\} \prod_j \left[\cosh(J\nabla_x) + \sigma_j^z \sinh(J\nabla_x) \right] \right\rangle \tanh[\beta(x)] \Big|_{x=0}, \quad (3.69)$$

Po roznásobení pravej strany prepíšeme (3.69) v tvare

$$\langle \sigma_i^z \{f_i\} \rangle = \langle \{f_i\} (\sigma_{i-1}^z + \sigma_{i+1}^z) \rangle A_1^{(2)}, \quad (3.70)$$

kde

$$A_1^{(2)} = \frac{1}{2} \tanh(2\beta J) \quad (3.71)$$

a navyše sme zohľadnili, že pre $h = 0$ je $A_0^{(2)} = A_2^{(2)} = 0$. Ak teraz do (3.70) dosadíme (3.71) a tiež $\{f_i\} = 0$, ľahko sa presvedčíme, že rovnica pre kritickú teplotu nadobúda tvar

$$1 = \tanh\left(\frac{2J}{k_B T_c}\right), \quad (3.72)$$

odkiaľ vyplýva, že teplota fázového prechodu je $T_c = 0$, v súlade s exaktným riešením získaným pomocou matice prechodu.

Pre získanie ďalších exaktných výsledkov do (3.70) dosadíme (3.71) a $\{f_i\} = \sigma_k^z$, $k \neq i - 1, i + 1$. Takto obdržíme

$$\langle \sigma_k^z \sigma_i^z \rangle = \frac{1}{2} \tanh(2\beta J) \left(\langle \sigma_k^z \sigma_{i-1}^z \rangle + \langle \sigma_k^z \sigma_{i+1}^z \rangle \right). \quad (3.73)$$

3.5 Teória efektívneho po a pre jednorozmerný Isingov model so spinom 1/2

Túto rovnicu môžeme ďalej modifikovať, ak si uvedomíme, že korelačná funkcia $\langle \sigma_k^z \sigma_i^z \rangle$ pri ľubovoľnej, ale pevne zadanej teplote je len funkciou vzájomnej vzdialenosti príslušných spinov na lineárnej reťiazke. Môžeme teda definovať funkciu $g(r)$

$$\langle \sigma_k^z \sigma_i^z \rangle = g(r) = g(i - k), \quad (3.74)$$

potom môžeme rovnicu (3.73) prepísať v tvare

$$2 \coth(2\beta J) = \frac{g(r+1)}{g(r)} + \frac{g(r-1)}{g(r)}. \quad (3.75)$$

Ľavá strana tejto rovnice však vôbec nezávisí od vzdialenosti r , a teda aby táto rovnica mohla byť splnená, nesmie ani jej pravá strana závisieť od r . Musí teda platiť

$$\frac{g(r+1)}{g(r)} = \gamma. \quad (3.76)$$

Dosadením (3.75) do (3.76) dostaneme kvadratickú rovnicu pre neznámu funkciu γ , ktorej riešením získame

$$\gamma = \tanh(\beta J). \quad (3.77)$$

To znamená, že

$$\langle \sigma_k^z \sigma_i^z \rangle = g(r) = \left[\tanh(\beta J) \right]^r, \quad (3.78)$$

čo je dobre známy exaktný výsledok pre jednorozmerný Isingov model.

Ukážme ešte ako možno našim prístupom vypočítať vnútornú energiu a tepelnú kapacitu lineárnej reťiazky. Vnútornú energiu vypočítame z definičného vzťahu (3.37), pričom zoberieme do úvahy, že v našom prípade je E_i dané vzťahom

$$E_i = J(\sigma_{i-1}^z + \sigma_{i+1}^z), \quad (3.79)$$

3.5 Teória efektívneho po a pre jednorozmerný Isingov model so spinom 1/2

takže po dosadení tohto vyjadrenia za $\{f_i\}$ v rovnici (3.70) a využití (3.71) dostaneme vyjadrenie

$$U = -\frac{NJ}{2} \tanh(2\beta J) \left(1 + \langle \sigma_{i-1}^z \sigma_{i+1}^z \rangle\right). \quad (3.80)$$

Ak ešte dosadíme za $\langle \sigma_{i-1}^z \sigma_{i+1}^z \rangle = \tanh^2(\beta J)$, potom po triviálnej úprave dostaneme dobre známy exaktný výraz

$$U = -NJ \tanh(\beta J), \quad (3.81)$$

z ktorého derivovaním podľa teploty obdržíme tiež exaktný vzorec pre tepelnú kapacitu

$$C(T) = \frac{NJ^2}{k_B T^2} \operatorname{sech}^2\left(\frac{J}{k_B T}\right). \quad (3.82)$$

Nakoniec ešte uvádzame výslednú rovnicu pre počiatočnú magnetickú susceptibilitu

$$\chi = \frac{\beta}{2} \frac{\left(1 + \langle \sigma_{i-1}^z \sigma_{i+1}^z \rangle\right) \operatorname{sech}^2(2\beta) + 1 - \langle \sigma_{i-1}^z \sigma_{i+1}^z \rangle}{1 - \tanh(2\beta)}, \quad (3.83)$$

ktorú je možné priamočiaro získať z definičného vzťahu (3.24) a ktorú opäť dosadením za $\langle \sigma_{i-1}^z \sigma_{i+1}^z \rangle = \tanh^2(\beta J)$ upravíme do známej podoby

$$\chi(T) = \frac{1}{k_B T} \exp\left(2J/k_B T\right). \quad (3.84)$$

V tejto časti sme teda priamym výpočtom rôznych fyzikálnych veličín jasne ukázali, že teoretický prístup založený na lokálnych Callenových identitách môže viesť aj k exaktnej teórii.

4 Dvojuzlová aproximácia efektívneho poľa a metóda diferenciálneho operátora pre Isingov model so spinom 1/2

Prvé rozšírenie jednouzlovej aproximácie efektívneho poľa bolo urobené v r. 1986 v práci [13], kde bola sformulovaná teória efektívneho poľa na základe zovšeobecnenej Callenovej identity pre klaster pozostávajúci z dvoch najbližších susedných atómov na mriežke. Z tohto dôvodu sa táto verzia teórie nazýva v literatúre ako dvojuzlová aproximácia efektívneho poľa. Formulácia takejto teórie na základe zovšeobecnenej Callenovej identity si prirodzene vyžiadala aj modifikáciu metódy diferenciálneho operátora, kde bolo nutné zaviesť dvojicu diferenciálnych operátov $\nabla_x = \partial/\partial x$ a $\nabla_y = \partial/\partial y$. Jedným z očakávaných benefitov sú samozrejme presnejšie kvantitatívne hodnoty a priebehy všetkých fyzikálnych veličín, ktoré z teórie obdržíme. Hlavný fyzikálny prínos tejto formulácie však spočíva v tom, že dvojuzlová aproximácia efektívneho poľa dokáže na rozdiel od jej jednouzlovej verzie a na rozdiel od iných podobných teórií rozlíšiť topológiu mriežok s tým istým koordináčnym číslom (napr. rovinnú trojuholníkovú a priestorovú jednoduchú kubickú štruktúru). V tomto zmysle teda dvojuzlová aproximácia prináša okrem kvantitatívneho zlepšenia výsledkov aj novú kvalitu. Okrem toho, práve toto zovšeobecnenie teórie efektívneho poľa je základom formulácie efektívno-poľnej renormalizačnej grupy, ktorá zase výrazným spôsobom zlepšuje fyzikálne predikcie pre kritické koeficienty rôznych veličín [14].

Samotná matematická formulácia dvojuzlového priblíženia je metodicky veľmi podobná postupom, ktoré sme použili v prechádzajúcej časti, preto nebudeme všetky odvodenia robiť podrobne, ale sústredíme sa len na výklad kľúčových bodov a na zdôraznenie odlišnosti oproti jednouzlovej verzii.

Budeme uvažovať Isingov model definovaný hamiltoniánom (3.1), pričom výmennú interakciu obmedzíme opäť len na najbližšie susedné dvojice atómov na mriežke. Celkový hamiltonián aj teraz rozdelíme na dve časti

4. Dvojuzlová aproximácia efektívneho poľa

nasledovným spôsobom

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{ij} + \mathcal{H}', \quad (4.1)$$

kde člen

$$\mathcal{H}_{ij} = -J_{ij}\sigma_i^z\sigma_j^z - \sigma_i^z\left(\sum_{k=1}^z J_{ik}\sigma_k + h\right) - \sigma_j^z\left(\sum_{\ell=1}^z J_{j\ell}\sigma_\ell + h\right) \quad (4.2)$$

explicitne zahŕňa všetky interakcie vybranej dvojice spinov (dvojuzlového klastra) s ich najbližšími susedmi a vonkajším magnetickým poľom. Ak teraz vo vzťahu (1.17) položíme $\mathcal{O}_{ij\dots n} = (\sigma_i^z + \sigma_j^z)$ a $\{f_{ij\dots n}\} = 1$, potom Callenova identita nadobudne tvar

$$\langle (\sigma_i^z + \sigma_j^z) \rangle = \left\langle \frac{\sum_{\sigma_i^z, \sigma_j^z = \pm 1} (\sigma_i^z + \sigma_j^z) \exp(-\beta \mathcal{H}_{ij})}{\sum_{\sigma_i^z, \sigma_j^z = \pm 1} \exp(-\beta \mathcal{H}_{ij})} \right\rangle. \quad (4.3)$$

Kvôli zjednodušeniu zápisu zavedieme nasledovné označenie lokálnych polí v (4.2)

$$E_i = J \sum_{k=1}^{z-1} \sigma_k \quad \text{a} \quad E_j = J \sum_{\ell=1}^{z-1} \sigma_\ell. \quad (4.4)$$

Týmto zjednodušením, po vykonaní sumácie v (4.3) obdržíme

$$\langle (\sigma_i^z + \sigma_j^z) \rangle = \left\langle \frac{2 \sinh[\beta(E_i + E_j) + 2\beta h]}{\cosh[\beta(E_i + E_j + 2\beta h)] + e^{-2\beta J_{ij}} \cosh[\beta(E_i - E_j)]} \right\rangle \quad (4.5)$$

Táto rovnica je stále exaktná a slúži ako východiskový bod pre formuláciu vhodných aproximatívnych výpočtových schém pre rôzne fyzikálne systémy.

4. Dvojuzlová aproximácia efektívneho poľa

Podobne ako v predchádzajúcej časti, aj teraz sa pri všetkých ďalších výpočtoch obmedzíme len na izotropný prípad, t.j., položíme $J_{ij} = J, \forall i, j$. Keďže ani pri tomto zjednodušení nevieme výpočet strednej hodnoty na pravej strane (4.5) urobiť exaktne, je nutné tento problém riešiť zavedením vhodnej aproximatívnej schémy. Najjednoduchšia možná aproximácia spočíva v nahradení argumentov hyperbolických funkcií ich strednými hodnotami. Ak si navyše uvedomíme, že stredná hodnota je nezávislá od polohy uzla ($\langle \sigma_i^z \rangle = m, \forall i$), potom v tomto priblížení dostaneme rovnicu.

$$m = \frac{\sinh[2\beta J(z-1)m + 2\beta h]}{\cosh[2\beta J(z-1)m + 2\beta h] + e^{-2\beta J}}, \quad (4.6)$$

ktorá podľa očakávania je identická s rovnicou pre magnetizáciu v tzv. Oguchiho aproximácii. Táto aproximácia bola samozrejme pôvodne odvodená iným postupom a predstavuje iste kvalitatívne zlepšenie teórie stredného poľa [Oguchi]. V porovnaní s jednouuzlovou aproximáciou efektívneho poľa poskytuje Oguchiho aproximácia kvantitatívne horšie výsledky.

Aby sme sformulovali presnejšiu aproximatívnu schému, ako je spomínaná Oguchiho aproximácia, využijeme na výpočet pravej strany v (4.5) nasledovný vzťah

$$e^{\lambda_x \nabla_x + \lambda_y \nabla_y} f(x, y) = f(x + \lambda_x, y + \lambda_y) \quad (4.7)$$

a obdržíme

$$\frac{1}{2} \langle (\sigma_i^z + \sigma_j^z) \rangle = \left\langle e^{(E_i + E_j) \nabla_x + (E_i - E_j) \nabla_y} F(x, y, h) \right\rangle_{\substack{x=0 \\ y=0}}, \quad (4.8)$$

kde funkciu $F(x, y, h)$ sme definovali nasledovne

$$F(x, y, h) = \frac{\sinh[\beta(x + 2h)]}{\cosh[\beta(x + 2h)] + e^{-2\beta J} \cosh(\beta y)}. \quad (4.9)$$

4. Dvojuzlová aproximácia efektívneho poľa

Aby sme pokročili ďalej, prepíšeme (4.8) v tvare

$$\frac{1}{2} \langle (\sigma_i^z + \sigma_j^z) \rangle = \left\langle e^{E_i(\nabla_x + \nabla_y)} e^{E_j(\nabla_x - \nabla_y)} \right\rangle F(x, y, h) \Big|_{\substack{x=0 \\ y=0}}, \quad (4.10)$$

odkiaľ po aplikácii van der Waerdenovej identity (3.10) obdržíme rovnicu

$$\begin{aligned} m &= \left\langle \prod_{k=1}^{z-1} \left\{ \cosh[J(\nabla_x + \nabla_y)] + \sigma_k^z \sinh[J(\nabla_x + \nabla_y)] \right\} \right. \\ &\quad \times \left. \prod_{\ell=1}^{z-1} \left\{ \cosh[J(\nabla_x - \nabla_y)] + \sigma_\ell^z \sinh[J(\nabla_x - \nabla_y)] \right\} \right\rangle \\ &\quad \times F(x, y, h) \Big|_{\substack{x=0 \\ y=0}}. \end{aligned} \quad (4.11)$$

Rovnica (4.11) je ešte stále exaktná, avšak od tohto štádia výpočtu už nie je možné postupovať tak, aby sme neurobili nejakú aproximáciu na jej pravej strane.

Ak teraz na pravej strane zanedbáme korelácie medzi všetkými spinmi dostaneme približnú teóriu, ktorá je v literatúre známa ako dvojuzlová aproximácia efektívneho poľa. V rámci tohto priblíženia potom rovnicu pre magnetizáciu vyjadríme v tvare

$$\begin{aligned} m &= \left\{ \cosh[J(\nabla_x + \nabla_y)] + m \sinh[J(\nabla_x + \nabla_y)] \right\}^{z-1} \\ &\quad \times \left\{ \cosh[J(\nabla_x - \nabla_y)] + m \sinh[J(\nabla_x - \nabla_y)] \right\}^{z-1} \\ &\quad \times F(x, y, h) \Big|_{\substack{x=0 \\ y=0}}, \end{aligned} \quad (4.12)$$

4. Dvojzlová aproximácia efektívneho poľa

odkiaľ po aplikácii binomickej vety získame

$$\begin{aligned}
 m &= \sum_{k=0}^{z-1} \binom{z-1}{k} m^k \left\{ \cosh[J(\nabla_x + \nabla_y)] \right\}^{z-k-1} \left\{ \sinh[J(\nabla_x + \nabla_y)] \right\}^k \\
 &\times \sum_{\ell=0}^{z-1} \binom{z-1}{\ell} m^\ell \left\{ \cosh[J(\nabla_x - \nabla_y)] \right\}^{z-\ell-1} \left\{ \sinh[J(\nabla_x - \nabla_y)] \right\}^\ell \\
 &\times F(x, y, h) \Big|_{\substack{x=0 \\ y=0}}. \tag{4.13}
 \end{aligned}$$

Rovnicu (4.13) môžeme evidentne zapísať v nasledovnej elegantnej podobe

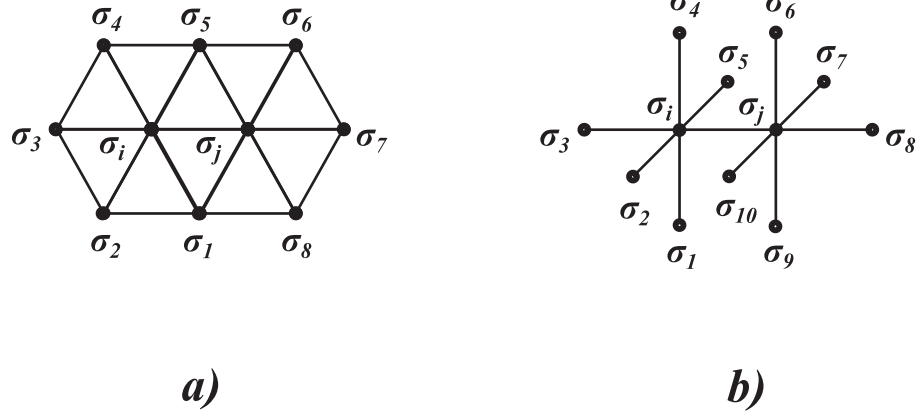
$$m = \sum_{k=0}^{z-1} \sum_{\ell=0}^{z-1} \binom{z-1}{k} \binom{z-1}{\ell} m^{k+\ell} A_{k\ell}^{(z)}, \tag{4.14}$$

kde sme koeficienty $A_{k\ell}^{(z)}$ definovali vzťahom

$$\begin{aligned}
 A_{k\ell}^{(z)} = A_{k\ell}^{(z)}(\beta J, h) &= \left\{ \cosh[J(\nabla_x + \nabla_y)] \right\}^{z-k-1} \left\{ \sinh[J(\nabla_x + \nabla_y)] \right\}^k \\
 &\times \left\{ \cosh[J(\nabla_x - \nabla_y)] \right\}^{z-\ell-1} \left\{ \sinh[J(\nabla_x - \nabla_y)] \right\}^\ell \\
 &\times F(x, y, h) \Big|_{\substack{x=0 \\ y=0}}. \tag{4.15}
 \end{aligned}$$

Tieto koeficienty vieme priamočiaro vypočítať využitím binomickej vety a

4. Dvojuzlová aproximácia efektívneho poľa



Obr. 4: Dvojuzlový klaster zložený zo spinov σ_i^z, σ_j^z a ich najbližší susedia. a) plošná trojuholníková mriežka, b) jednoduchá kubická mriežka.

rovnice (4.7), pričom dostaneme nasledovné vyjadrenie

$$\begin{aligned}
 A_{k\ell}^{(z)} = & \sum_{i=0}^{z-k-1} \sum_{j=0}^k \sum_{n=0}^{z-\ell-1} \sum_{p=0}^{\ell} (-1)^{j+p} \binom{z-k-1}{i} \binom{z-\ell-1}{n} \binom{z}{j} \binom{z}{p} \\
 & \times \frac{\sinh[2\beta J(z-1-i-j-n-p)]}{\cosh[2\beta J(z-1-i-j-n-p)] + e^{-2\beta J} \cosh[2\beta J(n+p-i-j)]}.
 \end{aligned}
 \tag{4.16}$$

Rovnice (4.14) a (4.16) jednoznačne určujú stavovú rovnicu Isingovho modelu so spinom $1/2$ v rámci dvojuzlovej aproximácie efektívneho poľa. Aj keď sú tieto rovnice evidentne zložitejšie ako v jednuzlovom priblížení (hlavne vyjadrenie koeficientov), ich numerické riešenie nepredstavuje žiadne dodatočné komplikácie v porovnaní s (3.16) a (3.19). Ako vidíme, tak aj v dvojuzlovej aproximácii je štruktúra mriežky zohľadnená koordináčnym číslom z . Tu je však nutné zdôrazniť, že v prípade $z = 4$ je rovnica (4.14) platná

4. Dvojzlová aproximácia efektívneho poľa

pre štvorcovú mriežku a pre $z = 6$ zase pre jednoduchú kubickú mriežku. Pre rovinnú Kagomé ($z = 4$) a rovinnú trojuholníkovú ($z = 6$) mriežku rovnica (4.14) neplatí, pretože v týchto prípadoch musíme pri zanedbávaní korelácií na pravej strane v rovnici (4.14) zohľadniť fakt, že atómy centrálného klastra σ_i^z a σ_j^z majú vo svojom okolí spoločných najbližších susedov. Kvôli názornosti sme na Obr. 4 zobrazili príslušné klastre spolu s ich najbližšími susedmi pre trojuholníkovú a kubickú mriežku.

Z obrázka vidíme, že na trojuholníkovej mriežke spiny σ_1^z a σ_5^z sú spoločnými najbližšími susedmi pre obidva centrálné spiny σ_i^z a σ_j^z , ale na kubickej mriežke spoloční susedia neexistujú. Ak zohľadníme tento fakt a zoberieme do úvahy, že $(\sigma_1^z)^2 = (\sigma_5^z)^2$, potom pre trojuholníkovú mriežku z rovnice (4.11) dostaneme v rámci teórie efektívneho poľa nasledovný vzťah pre magnetizáciu

$$\begin{aligned}
 m &= \left\{ \cosh[J(\nabla_x + \nabla_y)] + m \sinh[J(\nabla_x + \nabla_y)] \right\}^3 \\
 &\times \left\{ \cosh[J(\nabla_x - \nabla_y)] + m \sinh[J(\nabla_x - \nabla_y)] \right\}^3 \\
 &\times \left\{ \cosh(2J\nabla_x) + m \sinh(2J\nabla_x) \right\}^2 \\
 &\times F(x, y, h) \Big|_{\substack{x=0 \\ y=0}}.
 \end{aligned} \tag{4.17}$$

Pre jednoduchú kubickú mriežku však platí rovnica (1.12), takže vzťah pre magnetizáciu zapíšeme v tvare

$$\begin{aligned}
 m &= \left\{ \cosh[J(\nabla_x + \nabla_y)] + m \sinh[J(\nabla_x + \nabla_y)] \right\}^5 \\
 &\times \left\{ \cosh[J(\nabla_x - \nabla_y)] + m \sinh[J(\nabla_x - \nabla_y)] \right\}^5 \\
 &\times F(x, y, h) \Big|_{\substack{x=0 \\ y=0}}.
 \end{aligned} \tag{4.18}$$

Rovnice (4.17) a (4.18) sú evidentne rozdielne, takže zákonite z nich dostaneme rôzne numerické výsledky. Aj bez ďalších výpočtov je zrejmé, že

5. Jednouzlová aproximácia efektívneho poľa a pre Isingov model so spinom $1/2$ v transverzálnom vonkajšom magnetickom poli

aj ostatné fyzikálne veličiny, ktoré vypočítame v rámci dvojuzlovej teórie efektívneho poľa budú rozdielne vďaka rozlíšeniu topologickej štruktúry príslušných mriežok. Tento fakt predstavuje významné kvalitatívne vylepšenie, ktoré dvojuzlovú teóriu efektívneho poľa stavia do nadradenej pozície voči doteraz známym teóriám efektívneho poľa v magnetizme.

5 Jednouzlová aproximácia efektívneho poľa pre Isingov model so spinom $1/2$ v transverzálnom vonkajšom magnetickom poli

Transverzálny Isingov model bol prvýkrát diskutovaný Kirkwoodom už v r. 1933 [15], ktorý dokázal, že tento model vykazuje ďalekodiosahové usporiadanie, a teda aj fázový prechod. Neskôr bol model aplikovaný na štúdium rôznych systémov, ako sú feroelektriká, feromagnetické materiály s indukovaným magnetickým momentom alebo Jahnove-Tellerove systémy [16]. Model samozrejme možno použiť aj na teoretický popis reálnych magnetických systémov v priečnom magnetickom poli (viď napr. [17], [18]). Okrem aplikačného významu je tento model významný aj z čisto teoretického hľadiska, keďže ide o najjednoduchší kvantový systém popisujúci kooperatívne javy. Transverzálny Isingov model bol študovaný mnohými teoretickými prístupmi, a to počnúc jednoduchými metódami, ako sú teórie molekulárneho poľa [17] či teórie efektívneho poľa [18] a končiac sofistikovanými prístupmi ako sú napr. vysokoteplotné rozvoje [19], Monte Carlo simulácie [20] či exaktné výpočty [21].

Naším hlavným cieľom v tejto časti je zovšeobecnenie jednouzlovej aproximácie efektívneho poľa na prípad, keď vonkajšie magnetické pole bude mať aj transverzálnu zložku. Budeme študovať Isingov model so spinom $1/2$ nachádzajúci sa v magnetickom poli, ktoré má okrem štandardnej z -ovej zložky aj ďalšiu nenulovú komponentu v smere kolmom na os kvantovania.

5. Jednouzlová aproximácia efektívneho po a pre Isingov model so spinom 1/2 v transverzálnom vonkajšom magnetickom poli

Takýto model je definovaný hamiltoniánom

$$\hat{\mathcal{H}} = - \sum_{i,j} J_{ij} \hat{S}_i^z \hat{S}_j^z - h \sum_i \hat{S}_i^z - \Omega \sum_i \hat{S}_i^x, \quad (5.1)$$

kde J_{ij} je zase výmenná interakcia medzi najbližšími susednými atómami (spinmi) na mriežke, h je zložka intenzity vonkajšieho magnetického poľa v smere osi z a Ω v smere osi x . Operátory \hat{S}_i^x a \hat{S}_i^z ($i = 1, \dots, N$) sú pre dvojstavový Isingov model reprezentované spinovými maticami

$$\hat{S}_i^x = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}_i, \quad \hat{S}_i^z = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}_i. \quad (5.2)$$

Podobne ako v predchádzajúcich častiach, aj teraz najprv rozdelíme hamiltonián (5.1) na dve časti

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{H}}_i + \hat{\mathcal{H}}', \quad (5.3)$$

kde časť

$$\hat{\mathcal{H}}_i = -\hat{S}_i^z \left(\sum_j J_{ij} \hat{S}_j^z + h \right) - \Omega \hat{S}_i^x \quad (5.4)$$

obsahuje všetky interakcie centrálného i -tého atómu s jeho najbližšími susedmi a vonkajším magnetickým poľom a $\hat{\mathcal{H}}'$ zahŕňa všetky ostatné interakcie v študovanom systéme.

Štartovným bodom pre formuláciu jednouzlovej aproximácie efektívneho poľa bude prirodzene opäť Callenova identita (1.15), ktorú pre $\mathcal{O}_i = \hat{S}_i^z$ prepíšeme v tvare

$$\langle \hat{S}_i^z \rangle = \left\langle \frac{\text{Tr}_i \hat{S}_i^z \exp(-\beta \hat{\mathcal{H}}_i)}{\text{Tr}_i \exp(-\beta \hat{\mathcal{H}}_i)} \right\rangle, \quad (5.5)$$

kde $\hat{\mathcal{H}}_i$ je teraz dané vzťahom (5.4). Tu sa žiada pripomenúť, že predchádzajúca identita platí v dôsledku nekomutatívnosti $\hat{\mathcal{H}}_i$ a $\hat{\mathcal{H}}'$ len približne, čo nám už v princípe neumožňuje získať žiadne exaktné výsledky.

5. Jednouzlová aproximácia efektívneho po a pre Isingov model so spinom 1/2 v transverzálnom vonkajšom magnetickom poli

Skôr, ako prejdeme k ďalším výpočtom si musíme uvedomiť, že operátor $\hat{\mathcal{H}}_i$ je reprezentovaný nasledovnou nediagonálnou maticou

$$\hat{\mathcal{H}}_i = -\frac{1}{2} \begin{pmatrix} E_i + h & \Omega \\ \Omega & -E_i - h \end{pmatrix}_i, \quad (5.6)$$

kde sme kvôli zjednodušeniu označili

$$E_i = \sum_j J_{ij} \hat{S}_j^z. \quad (5.7)$$

Je však potrebné zdôrazniť, že práve nediagonálnosť uzlového hamiltoniánu $\hat{\mathcal{H}}_i$ nám spôsobuje problém s výpočtom exponenciály v rovnici (5.5). Najčastejšie sa tento problém rieši prechodom k tzv. vlastnej reprezentácii operátora $\hat{\mathcal{H}}_i$, kde je tento operátor prirodzene vyjadrený diagonálnou maticou, takže výpočet exponenciály je potom veľmi jednoduchý. Tento cieľ môžeme v našom prípade dosiahnuť priamym nájdením vlastných hodnôt a vlastných funkcií matice (5.6), avšak z hľadiska ďalších zovšeobecnení teórie je oveľa elegantnejšie a užitočnejšie diagonalizovať $\hat{\mathcal{H}}_i$ využitím nasledovnej rotačnej transformácie

$$\hat{S}_i^z = \hat{S}_i^{z'} \cos \varphi_i - \hat{S}_i^{x'} \sin \varphi_i \quad (5.8)$$

$$\hat{S}_i^x = \hat{S}_i^{z'} \sin \varphi_i + \hat{S}_i^{x'} \cos \varphi_i, \quad (5.9)$$

kde

$$\cos \varphi_i = \frac{E_i + h}{\sqrt{\Omega^2 + (E_i + h)^2}}, \quad \sin \varphi_i = \frac{\Omega}{\sqrt{\Omega^2 + (E_i + h)^2}}. \quad (5.10)$$

Využitím vzťahov (5.8) a (5.9) vyjadríme operátory $\hat{\mathcal{H}}_i$, \hat{S}_j^z a \hat{S}_j^x v tvare

$$\hat{\mathcal{H}}_i = -\frac{1}{2} \begin{pmatrix} \sqrt{\Omega^2 + (E_i + h)^2} & 0 \\ 0 & -\sqrt{\Omega^2 + (E_i + h)^2} \end{pmatrix}_i, \quad (5.11)$$

5. Jednozlová aproximácia efektívneho po a pre Isingov model so spinom 1/2 v transverzálnom vonkajšom magnetickom poli

$$\hat{S}_j^z = -\frac{1}{2} \begin{pmatrix} \frac{E_i + h}{\sqrt{\Omega^2 + (E_i + h)^2}} & -\frac{\Omega}{\sqrt{\Omega^2 + (E_i + h)^2}} \\ -\frac{\Omega}{\sqrt{\Omega^2 + (E_i + h)^2}} & -\frac{E_i + h}{\sqrt{\Omega^2 + (E_i + h)^2}} \end{pmatrix}_i, \quad (5.12)$$

a

$$\hat{S}_j^x = -\frac{1}{2} \begin{pmatrix} \frac{\Omega}{\sqrt{\Omega^2 + (E_i + h)^2}} & \frac{E_i + h}{\sqrt{\Omega^2 + (E_i + h)^2}} \\ \frac{E_i + h}{\sqrt{\Omega^2 + (E_i + h)^2}} & -\frac{\Omega}{\sqrt{\Omega^2 + (E_i + h)^2}} \end{pmatrix}_i. \quad (5.13)$$

Po dosadení (5.11) - (5.13) do vzťahu (5.5) a vypočítaní naznačenej stopy obdržíme pre strednú hodnotu pozdĺžnej komponenty magnetizácie rovnicu

$$m_z \equiv \langle \hat{S}_i^z \rangle = \left\langle \frac{1}{2} \frac{E_i}{\sqrt{\Omega^2 + E_i^2}} \tanh \left[\frac{\beta}{2} \sqrt{\Omega^2 + (E_i + h)^2} \right] \right\rangle. \quad (5.14)$$

Je zrejmé, že rutinným zopakovaním celej procedúry pre operátor S_i^x dostaneme pre transverzálnu magnetizáciu m_x analogický vzťah

$$m_x \equiv \langle \hat{S}_i^x \rangle = \left\langle \frac{1}{2} \frac{\Omega}{\sqrt{\Omega^2 + E_i^2}} \tanh \left[\frac{\beta}{2} \sqrt{\Omega^2 + (E_i + h)^2} \right] \right\rangle. \quad (5.15)$$

Ak teraz opäť pristúpime k najjednoduchšej možnej aproximácii a odstredujeme argumenty funkcií na pravej strane v predchádzajúcich dvoch rovniciach a vo všetkých ďalších výpočtoch zohľadníme, že $J_{ij} = J$, $\forall i, j$, potom obdržíme vzťahy

$$m_z = \frac{1}{2} \frac{Jqm_z + h}{\sqrt{\Omega^2 + (Jqm_z + h)^2}} \tanh \left[\frac{\beta}{2} \sqrt{\Omega^2 + (Jqm_z + h)^2} \right] \quad (5.16)$$

5. Jednouzlová aproximácia efektívneho po a pre Isingov model so spinom 1/2 v transverzálnom vonkajšom magnetickom poli

a

$$m_x = \frac{1}{2} \frac{\Omega}{\sqrt{\Omega^2 + (Jqm_z + h)^2}} \tanh \left[\frac{\beta}{2} \sqrt{\Omega^2 + (Jqm_z + h)^2} \right], \quad (5.17)$$

ktoré podľa očakávania reprezentujú dobre známu aproximáciu stredného poľa pre študovaný model.

Aby sme získali presnejšiu aproximáciu upravíme pravé strany rovníc (5.14) a (5.15) pomocou (3.7) a následne využijeme modifikovanú van der Waerdenovu identitu

$$\exp(\gamma \hat{S}_j^z) = \cosh\left(\frac{\gamma}{2}\right) + 2\hat{S}_j^z \sinh\left(\frac{\gamma}{2}\right). \quad (5.18)$$

Takto z (5.14) a (5.15) obdržíme

$$m_z = \left\langle \prod_{j=1}^z \left[\cosh(J\nabla_x) + \sigma_j^z \sinh(J\nabla_x) \right] \right\rangle f(x) \Big|_{x=0}. \quad (5.19)$$

$$m_x = \left\langle \prod_{j=1}^z \left[\cosh(J\nabla_x) + \sigma_j^z \sinh(J\nabla_x) \right] \right\rangle g(x) \Big|_{x=0}, \quad (5.20)$$

kde funkcie $f(x)$ a $g(x)$ sme definovali vzťahmi

$$f(x) = \frac{x}{2\sqrt{\Omega^2 + x^2}} \tanh\left(\frac{\beta}{2}\sqrt{\Omega^2 + x^2}\right), \quad (5.21)$$

$$g(x) = \frac{\Omega}{2\sqrt{\Omega^2 + x^2}} \tanh\left(\frac{\beta}{2}\sqrt{\Omega^2 + x^2}\right). \quad (5.22)$$

Ak teraz zanedbáme všetky korelácie na pravej strane (5.14) a (5.15), dostaneme jednouzlovú aproximáciu efektívneho poľa pre dvojtavový Isingov model. Rovnice pre jednotlivé komponenty magnetizácie nadobudnú v tomto priblížení tvar

$$m_z = \left[\cosh\left(\frac{J}{2}\nabla_x\right) + 2m_z \sinh\left(\frac{J}{2}\nabla_x\right) \right]^z f(x) \Big|_{x=0}, \quad (5.23)$$

5. Jednouzlová aproximácia efektívneho po a pre Isingov model so spinom 1/2 v transverzálnom vonkajšom magnetickom poli

$$m_x = \left[\cosh\left(\frac{J}{2}\nabla_x\right) + 2m_z \sinh\left(\frac{J}{2}\nabla_x\right) \right]^z g(x) \Big|_{x=0}. \quad (5.24)$$

Ak teraz použijeme rovnaký matematický postup ako v tretej časti 3 tejto monografie, potom pre obidve zložky dostaneme rovnice, ktoré sú formálne zhodné s rovnicou (3.10), t.j.,

$$m_z = \sum_{k=0}^z \binom{z}{k} m_z^k A_k^{(z)}, \quad (5.25)$$

$$m_x = \sum_{k=0}^z \binom{z}{k} m_z^k B_k^{(z)}, \quad (5.26)$$

avšak koeficienty $A_k^{(z)}$ a $B_k^{(z)}$ sú teraz definované vzťahmi

$$A_k^{(z)} = 2^k \left[\cosh\left(\frac{J}{2}\nabla_x\right) \right]^{z-k} \left[\sinh\left(\frac{J}{2}\nabla_x\right) \right]^k f(x) \Big|_{x=0} \quad (5.27)$$

a

$$B_k^{(z)} = 2^k \left[\cosh\left(\frac{J}{2}\nabla_x\right) \right]^{z-k} \left[\sinh\left(\frac{J}{2}\nabla_x\right) \right]^k g(x) \Big|_{x=0}, \quad (5.28)$$

kde funkcie $f(x)$ a $g(x)$ sú samozrejme dané rovnicami (5.21) a (5.22). Kvôli jasnosti je potrebné poznamenať, že malé rozdiely v definícii koeficientov oproti rovnici (3.17) súvisia jednak so zavedením transverzálneho poľa (zložitejšie funkcie), ale aj s použitím spinových matíc (objavia sa navyše mocniny dvojky). V tomto štádiu výpočtov je zrejmé, že by sme teraz mohli pre výpočet všetkých fyzikálnych veličín (Curieho teplota, spontánna magnetizácia, vnútorná energia) odvodiť formálne rovnaké rovnice ako v tretej časti, len s inými koeficientami. Keďže ide o rutinný postup, nebudeme ho podrobne opakovať, ale sústredíme sa na ďalšie zaujímavé zovšeobecnenia teórie efektívneho poľa založenej na technike diferenciálneho operátora.

6. Jednouzlová aproximácia efektívneho poľa a pre Isingove modely s vyššími spinmi

Skôr, ako prejdeme k ďalším aplikáciám, ešte zdôrazníme niektoré významné črty sformulovanej teórie.

V prvom rade je potrebné zdôrazniť, že jednouzlová aproximácia efektívneho poľa poskytuje veľmi dobrý kvalitatívny fyzikálny obraz správania sa transverzálneho Isingovho modelu. Prezentovaná teória správne predpovedá existenciu usporiadanej fázy v istom konečnom rozsahu hodnôt transverzálneho poľa $0 < \Omega < \Omega_c$. Navyše aj hodnoty veličiny Ω_c vypočítané z tejto teórie sú v porovnaní s inými metódami dostatočne presné (viď napr.[18]). Diskutovaná teória tiež správne predpovedá postupný pokles kritickej teploty a jej postupný zánik v Ω_c . Okrem toho možno konštatovať, že jednouzlová aproximácia poskytuje aj veľmi dobré odhady teplotných priebehov relevantných fyzikálnych veličín v širokom teplotnom intervale, s výnimkou úzkej oblasti na blízkom okolí Curieho teploty. Za výhodu možno považovať aj jej jednoduché zovšeobecnenie na zložitejšie fyzikálne systémy (napr. systémy s vyššími spinmi či štruktúrne neusporiadané materiály) [18].

6 Jednouzlová aproximácia efektívneho poľa pre Isingove modely s vyššími spinmi

V tejto časti monografie sa sústredíme na rozšírenie jednouzlovej aproximácie efektívneho poľa na isingovské modely so spinmi väčšími ako 1/2. Takéto modely predstavujú netriviálne zovšeobecnenie dvojstavového Isingovho modelu a umožňujú započítať celú škálu nových efektov, ako je napr. jednoiónová anizotropia, bikvadratická interakcia, atp. Ako uvidíme ďalej, jedno i dvojuzlovú aproximáciu efektívneho poľa je možné s malými modifikáciami v matematickom aparáte sformulovať pre lokalizované spinové modely s ľubovoľným spinom [22], [23]. Navyše, ako sme už spomínali, je takéto zovšeobecnenie možné aj po započítaní transverzálneho magnetického poľa [18].

6.1 Blumeho-Capelov model so spinom 1

Kvôli lepšiemu pochopeniu matematických detailov budeme najprv študovať isingovský systém so spinom 1, v ktorom okrem štandardného interakčného člena a vonkajšieho magnetického poľa zoberieme do úvahy aj jednoiónovú anizotropiu ⁵.

Takýto model je definovaný hamiltoniánom

$$\hat{\mathcal{H}} = - \sum_{i,j} J_{ij} S_i^z S_j^z - D \sum_i (S_i^z)^2 - h \sum_i S_i^z, \quad (6.1)$$

kde $S_i^z = 0, \pm 1$ sú možné priemety z -ovej zložky operátora spinu do osi kvantovania a D reprezentuje parameter jednoiónovej anizotropie. Je zrejmé, že pre kladné hodnoty D budú v systéme preferované stavy $S_i^z = \pm 1$ a pri záporných hodnotách anizotropie budú zase energeticky favorizované stavy $S_i^z = 0$. Dodajme ešte, že význam ostatných symbolov je rovnaký ako v predchádzajúcom texte.

Štandardným postupom odvodíme pre náš model exaktnú Callenovu identitu v tvare

$$m \equiv \langle S_i^z \rangle = \left\langle \frac{2 \sinh[\beta(E_i + h)]}{2 \sinh[\beta(E_i + h)] + e^{-\beta D}} \right\rangle, \quad (6.2)$$

kde sme označili

$$E_i = \sum_{j=1}^z J_{ij} S_j^z. \quad (6.3)$$

Na rozdiel od dvojstavového modelu budeme teraz okrem magnetizácie potrebovať aj výpočet strednej hodnoty kvadrátu spinu, pre ktorý rovnakým

⁵Veľmi často sa v odbornej literatúre jednoiónová anizotropia nazýva aj ako jednoosová anizotropia alebo tiež kryštálové pole.

6.1 Blumeho-Capelov model so spinom 1

postupom ako pre magnetizáciu obdržime nasledovnú exaktnú Callenovu identitu

$$q \equiv \langle (S_i^z)^2 \rangle = \left\langle \frac{2 \cosh[\beta(E_i + h)]}{2 \sinh[\beta(E_i + h)] + e^{-\beta D}} \right\rangle. \quad (6.4)$$

Samozrejme, že aj pre tento model dostaneme vystredovaním argumentov hyperbolických funkcií príslušné rovnice teórie stredného poľa. Našou úlohou je však sformulovať jednoduzlovú aproximáciu efektívneho poľa, ktorá poskytuje kvantitatívne aj kvalitatívne lepšie výsledky, ako teória stredného poľa i Oguchiho aproximácia [8].

Ako je zrejmé zo štruktúry predchádzajúcich dvoch rovníc, ak položíme $J_{ij} = J$, $\forall i, j$, môžeme ich aplikáciou vzťahu (3.7) vyjadriť v tvare

$$m = \left\langle \exp(E_i \nabla_x) \right\rangle \frac{2 \sinh[\beta(x + h)]}{2 \sinh[\beta(x + h)] + e^{-\beta D}} \Big|_{x=0} \quad (6.5)$$

$$q = \left\langle \exp(E_i \nabla_x) \right\rangle \frac{2 \cosh[\beta(x + h)]}{2 \sinh[\beta(x + h)] + e^{-\beta D}} \Big|_{x=0}, \quad (6.6)$$

kde sme kvôli prehľadnosti zaviedli funkcie $f(x)$ a $g(x)$ vzťahmi

$$f(x) = \frac{2 \sinh[\beta(x + h)]}{2 \sinh[\beta(x + h)] + e^{-\beta D}} \quad (6.7)$$

$$g(x) = \frac{2 \cosh[\beta(x + h)]}{2 \sinh[\beta(x + h)] + e^{-\beta D}}. \quad (6.8)$$

Aby sme urobili ďalší progres, potrebujeme využiť van der Waerdenovu identitu, ktorá pre spin 1 nadobúda tvar

$$\exp(\gamma S_i^z) = (S_j^z)^2 \cosh(\gamma) + S_j^z \sinh(\gamma) + 1 - (S_j^z)^2. \quad (6.9)$$

6.1 Blumeho-Capelov model so spinom 1

Rovnice (6.5) a (6.6) teda môžeme prepísať nasledovne

$$m = \left\langle \prod_{j=1}^z \left[(S_j^z)^2 \cosh(J\nabla_x) + S_j^z \sinh(J\nabla_x) + 1 - (S_j^z)^2 \right] \right\rangle f(x) \Big|_{x=0} \quad (6.10)$$

$$q = \left\langle \prod_{j=1}^z \left[(S_j^z)^2 \cosh(J\nabla_x) + S_j^z \sinh(J\nabla_x) + 1 - (S_j^z)^2 \right] \right\rangle g(x) \Big|_{x=0}. \quad (6.11)$$

Po roznásobení výrazov na pravej strane rovníc (6.10) a (6.11) vzniknú na pravých stranách oboch rovníc viacspinové korelačné funkcie, ktoré už nevieme započítať exaktne, preto ich v duchu teórie efektívneho poľa rozštiepime podľa schémy

$$\langle S_j^z (S_k^z)^2 \dots S_\ell^z \rangle \approx \langle S_j^z \rangle \langle (S_k^z)^2 \rangle \dots \langle S_\ell^z \rangle, \quad (6.12)$$

a príslušné rovnice v takomto priblížení prepíšeme v nasledovnej zjednodušenej podobe

$$m = \left[q \cosh(J\nabla_x) + m \sinh(J\nabla_x) + 1 - q \right]^z f(x) \Big|_{x=0} \quad (6.13)$$

$$q = \left[q \cosh(J\nabla_x) + m \sinh(J\nabla_x) + 1 - q \right]^z g(x) \Big|_{x=0}. \quad (6.14)$$

Vidíme, že aj pre najjednoduchší model so spinom 1 je nutné pre výpočet všetkých fyzikálnych veličín už v rámci jednouzlovej aproximácie riešiť sústavu dvoch nelineárnych navzájom previazaných polynomických rovníc s pomerne komplikovanými koeficientmi. Naviac každá z týchto rovníc je sama o sebe zložitejšia, ako v prípade modelu so spinom 1/2, a preto nie je možné rutinne prevziať matematické postupy použité v predchádzajúcich častiach.

Naším cieľom bude teraz ďalej matematicky rozpracovať sformulovanú teóriu tak, aby bol jasný postup výpočtu jednotlivých fyzikálnych veličín pre rôzne kryštalické štruktúry.

6.1.1 Curieho teplota a trikritický bod

6.1.1 Curieho teplota a trikritický bod

Aby sme mohli študovať priebehy spontánnej magnetizácie na okolí Curieho teploty, vypočítať krivku fázových prechodov druhého druhu a trikritický bod, položíme v rovniciach (6.7) a (6.8) $h = 0$ vo vzťahoch (6.13) a (6.14) využijeme procedúru, ktorá je známa z Landauovej teórie fázových prechodov. Prezentovaný prístup je odlišný od Landauovej teórie len v tom, že tu nepracujeme s rozvojom Gibbsovej energie, ale s rozvojom magnetizácie a parametra q . Z tohto dôvodu sa príslušné podmienky (nerovnosti) budú od Landauovej teórie líšiť v znamienku.

Ako je vidieť z rovníc (6.13) a (6.14), magnetizáciu môžeme v kritickej oblasti vyjadriť v tvare

$$m = am + bm^3 + cm^5 + \dots, \quad (6.15)$$

pričom koeficient a je určený vzťahom

$$a = z \sinh(J\nabla_x) \left[q_0 \cosh(J\nabla_x) + 1 - q_0 \right]^{z-1} f(x) \Big|_{x=0}, \quad (6.16)$$

kde parameter q_0 je riešením rovnice

$$q_0 = \left[q_0 \cosh(J\nabla_x) + 1 - q_0 \right]^z g(x) \Big|_{x=0}. \quad (6.17)$$

Krivka fázových prechodov druhého druhu je potom určená známymi vzťahmi

$$a = 1, \quad b < 0 \quad (6.18)$$

a priebeh spontánnej magnetizácie na v blízkom okolí kritickej teploty popisuje rovnica

$$m^2 = \frac{1-a}{b}, \quad (6.19)$$

6.1.1 Curieho teplota a trikritický bod

ktorá má reálne riešenie len pre $b < 0$. Ak je $b > 0$, potom sa magnetizácia mení skokom a nastáva fázový prechod prvého druhu. Je jasné, že bod v ktorom platí

$$a = 1, \quad b = 0, \quad (6.20)$$

je špeciálny bod na krivke fázovej rovnováhy, ktorý oddeľuje fázové prechody druhého a prvého druhu. Takýto bod sa v teórii fázových prechodov nazýva trikritický a jeho numerické určenie (ale aj overenie podmienok stability v (6.18)) vyžaduje samozrejme explicitnú znalosť koeficientu b . Aby sme tento koeficient vypočítali vyjadříme parameter q ako

$$q = q_0 + q_1 m^2 \quad (6.21)$$

a dosadíme tento výraz do (6.14). Po krátkom výpočte dostaneme pre q_1 vyjadrenie

$$q_1 = \frac{f}{1 - e}, \quad (6.22)$$

kde

$$e = z [q_0 \cosh(J\nabla_x) + 1 - q_0]^{z-1} [\cosh(J\nabla_x) - 1] g(x) \Big|_{x=0}, \quad (6.23)$$

$$f = \frac{z!}{2!(z-2)!} [q_0 \cosh(J\nabla_x) + 1 - q_0]^{z-2} \sinh^2(J\nabla_x) g(x) \Big|_{x=0}. \quad (6.24)$$

Nakoniec substitúciou (6.21) do (6.13) obdržíme pre koeficient b nasledovný vzťah

$$\begin{aligned} b &= \frac{z!}{2!(z-2)!} q_1 [q_0 \cosh(J\nabla_x) + 1 - q_0]^{z-2} \\ &\quad \times \sinh(J\nabla_x) [\cosh(J\nabla_x) - 1] f(x) \Big|_{x=0} \\ &\quad + \frac{z!}{3!(z-3)!} [q_0 \cosh(J\nabla_x) + 1 - q_0]^{z-3} \sinh^3(J\nabla_x) f(x) \Big|_{x=0}. \end{aligned} \quad (6.25)$$

6.1.2 Isingovské modely so spinom $S > 1$ a aproximatívna van der Waerdenova identita

Ako vyplýva z doterajšej diskusie, dokáže teória efektívneho poľa poskytnúť vhodný aparát na štúdium fázových prechodov druhého druhu a trikritického správania. Avšak, ak chceme v rámci teórie efektívneho poľa študovať aj fázové prechody prvého druhu, je nevyhnutné doplniť formuláciu o Maxwellovu konštrukciu, ktorá umožňuje nájsť príslušné fázové hranice aj bez znalosti voľnej energie systému. Samotná Maxwellova konštrukcia je spravidla zahrnutá v štandardných učebniciach Štatistickej mechaniky, preto sa ňou bližšie nebudeme zaoberať.

Na záver tejto časti možno ešte poznamenať, že podobne ako pre $S = 1/2$, aj pre $S = 1$ funguje kvalitatívne teória efektívneho poľa veľmi priateľne a navyiac voči teórii molekulárneho poľa poskytuje aj významné kvantitatívne zlepšenie pri výpočte všetkých relevantných fyzikálnych veličín.

6.1.2 Isingovské modely so spinom $S > 1$ a aproximatívna van der Waerdenova identita

V predchádzajúcej časti sme na príklade Blumeho-Capelovho modelu ilustrovali ako sa matematicky komplikuje jednouzlová aproximácia teórie efektívneho poľa, keď zvýšime spin. Z podrobných výpočtov pre Blumeho-Capelov model so spinom 1 je zrejmé, že zložitosť celej formulácie narastá v dôsledku toho, že narastá zložitosť Callenovej identity (viď (6.9)). Je tiež jasné, že aplikácia samotnej metódy diferenciálneho operátora príslušné matematické rovnice neprináša v porovnaní s jej aplikáciou na dvojstavový Isingov model žiadne dodatočné komplikácie. Vychádza preto otázka, ako bude narastať zložitosť samotnej van der Waerdenovej identity s narastajúcou hodnotou spinu a aký to bude mať vplyv na zložitosť formulácie samotnej teórie efektívneho poľa. Aby sme túto otázku vyriešili, musíme si uvedomiť, že van der Waerdenovu identitu pre ľubovoľnú hodnotu spinu S môžeme vyjadriť v tvare

$$\exp(\gamma S_i^z) = \sum_{k=0}^{2S} A_k(\gamma) (S_i^z)^k. \quad (6.26)$$

6.1.2 Isingovské modely so spinom $S > 1$ a aproximatívna van der Waerdenova identita

Explicitnú formu identity dostaneme tak, že do predchádzajúcej rovnice dosadíme postupne $S_i^z = -S, \dots, S$ a dostaneme sústavu $2S$ lineárnych rovníc pre neznáme koeficienty A_k . Ak túto sústavu vyriešime, potom pre spin $1/2$ dostaneme vzťah (3.10) a pre spin 1 (6.11). Zopakovaním tejto procedúry pre $S = 3/2$ a $S = 2$ z rovnice (6.26) postupne obdržíme

$$S = 3/2$$

$$\exp(\gamma S_i^z) = A_0 + A_1 S_j^z + A_2 (S_j^z)^2 + A_3 (S_j^z)^3, \quad (6.27)$$

kde

$$A_0(\gamma) = \frac{1}{8} \left[9 \cosh\left(\frac{\gamma}{2}\right) - \cosh\left(\frac{3\gamma}{2}\right) \right] \quad (6.28)$$

$$A_1(\gamma) = \frac{1}{12} \left[27 \sinh\left(\frac{\gamma}{2}\right) - \sinh\left(\frac{3\gamma}{2}\right) \right] \quad (6.29)$$

$$A_2(\gamma) = \frac{1}{2} \left[\cosh\left(\frac{3\gamma}{2}\right) - \cosh\left(\frac{\gamma}{2}\right) \right] \quad (6.30)$$

$$A_3(\gamma) = \frac{1}{3} \left[\sinh\left(\frac{3\gamma}{2}\right) - 3 \sinh\left(\frac{\gamma}{2}\right) \right]. \quad (6.31)$$

a

$$S = 2$$

$$\exp(\gamma S_i^z) = A_0 + A_1 S_j^z + A_2 (S_j^z)^2 + A_3 (S_j^z)^3 + A_4 (S_j^z)^4, \quad (6.32)$$

kde

$$A_0(\gamma) = 1 \quad (6.33)$$

$$A_1(\gamma) = \frac{1}{6} [8 \sinh(\gamma) - \sinh(2\gamma)] \quad (6.34)$$

$$A_2(\gamma) = \frac{1}{12} [16 \cosh(\gamma) - \cosh(2\gamma) - 15] \quad (6.35)$$

$$A_3(\gamma) = \frac{1}{6} [8 \sinh(2\gamma) - 2 \sinh(\gamma)] \quad (6.36)$$

$$A_4(\gamma) = \frac{1}{12} [\cosh(2\gamma) - 4 \cosh(\gamma) + 3]. \quad (6.37)$$

Z týchto ilustračných príkladov vidno, že so zvyšovaním spinu rastie jednak algebraická náročnosť formulácie, ale aj počet parametrov teórie, ktoré je potrebné brať do úvahy. Vo všeobecnosti na konzistentnú formuláciu jednouzlovej aproximácie efektívneho poľa pre isingovský model so spinom S je nevyhnutné odvodiť a riešiť sústavu $2S$ polynomických rovníc pre magnetizáciu a $2S - 1$ stredných hodnôt vyšších mocnín spinu, t.j., $\langle (S_j^z)^n \rangle$, $n = 2, \dots, 2S$. Pre úplnosť je potrebné ešte dodať, že aj samotné funkcie, ktoré vstupujú ako štartovný bod do Callenovej identity sa z narastajúcim spinom stavajú zložitejšími a narastá aj ich počet. Ako je však zrejmé z doterajších konkrétnych výpočtov, tento fakt je z hľadiska výpočtovej náročnosti marginálny.

Naviac, ďalšie komplikácie a nárast zložitosti sa v tomto type teórie objaví, ak ju aplikujeme na zložitejšie fyzikálne systémy, ako sú systémy s mixovanými spinmi, uzlovo a väzbovo zriedené magnetické látky, tenké magnetické vrstvy, binárne a ternárne zliatiny, atp. [11] Z uvedených argumentov dostatočne jasne vyplýva, že narastajúca zložitosť teórie efektívneho poľa môže byť zásadným limitujúcim faktorom pri mnohých potenciálnych aplikáciach. Tento fakt bol principiálnym motivačným faktorom na vypracovanie alternatívnej verzie efektívneho poľa, ktorá je založená na približnej van der Waerdenovej identite. Podrobnejšie sa budeme tejto variante teórie venovať v nasledujúcej časti monografie.

6.2 Teória efektívneho poľa s približnou van der Waerdenovou identitou pre modely s ľubovoľným spinom

Ako sme už naznačili v predchádzajúcej diskusii, pri aplikáciach teórie efektívneho poľa na mnohé zaujímavé systémy s vyššími spinmi sa matematická formulácia teórie efektívneho poľa komplikuje natoľko, že prestáva byť vhodným teoretickým nástrojom na štúdium fyzikálnych veličín v týchto systémoch. Ako v r. 1992 ukázali Kaneyoshi, Tucker a Jaščur [22], všetky problémy s narastajúcou zložitou teóriou sa dajú obísť zavedením a aplikáciou nasledovnej zovšeobecnenej, ale približnej van der Waerdenovej identity

$$\exp(aS_i^z) = \cosh(a\eta) + \frac{S_i^z}{\eta} \sinh(a\eta), \quad (6.38)$$

kde parameter η sme definovali ako

$$\eta^2 = \langle (S_j^z)^2 \rangle. \quad (6.39)$$

Táto identita platí v aproximatívnej podobe pre ľubovoľný spin S a v špeciálnom prípade $S = 1/2$ sa stáva exaktnou.

Budeme teraz študovať Blumeho-Capelov model definovaný hamiltoniánom (6.1), ale spin budeme uvažovať ľubovoľný. Ako je jasné z výpočtov, ktoré sme urobili v predchádzajúcej časti, budeme aj v prípade ľubovoľného spinu potrebovať len dve rovnice, aj keď použijeme približnú van der Waerdenovu identitu (6.38). Naviac, tieto dve rovnice budú mať po príslušných úpravách rovnaký tvar ako (6.2) a (6.4), len je potrebné funkcie $f(x)$ a $g(x)$ zameniť zodpovedajúcimi zovšeobecnenými funkciami pre ľubovoľný spin S , ktoré sú dané vzťahmi

$$F_S(x) = \frac{\sum_{k=-S}^{k=S} k \exp(\beta D k^2) \sinh[\beta k(x+h)]}{\sum_{k=-S}^{k=S} \exp(\beta D k^2) \cosh[\beta k(x+h)]}, \quad (6.40)$$

6.2 Teória efektívneho poľa s približnou van der Waerdenovou identitou pre modely s ubovo ným spinom

$$G_S(x) = \frac{\sum_{k=-S}^{k=S} k^2 \exp(\beta D k^2) \cosh[\beta k(x+h)]}{\sum_{k=-S}^{k=S} \exp(\beta D k^2) \cosh[\beta k(x+h)]}. \quad (6.41)$$

Poznamenanajme ešte, že v špeciálnom prípade $S = 1/2$ je nutne v predchádzajúcich rovniciach položiť $D = 0$, lebo príslušný energetický člen v hamiltoniáne je konštantný a nemá žiaden zmysel ho brať do úvahy.

Pri formulácii zjednodušenej verzie teórie efektívneho poľa teda adoptujeme vzťahy (6.7) a (6.8), ktoré pomocou (6.38) prepíšeme v známej forme

$$m = \left\langle \prod_{j=1}^z \left[\cosh(J\eta \nabla_x) + \frac{S_j^z}{\eta} \sinh(J\eta \nabla_x) \right] \right\rangle F_S(x) \Big|_{x=0}, \quad (6.42)$$

$$q = \left\langle \prod_{j=1}^z \left[\cosh(J\eta \nabla_x) + \frac{S_j^z}{\eta} \sinh(J\eta \nabla_x) \right] \right\rangle G_S(x) \Big|_{x=0}, \quad (6.43)$$

kde sme sa obmedzili na izotropný prípad a položili sme $J_{ij} = J$. Tu je nutné zdôrazniť, že tieto vzťahy sú v dôsledku aplikácie (6.38) približné, a preto takto budovaná teória bude kvantitatívne menej presná, ako predchádzajúce formulácie vychádzajúce z exaktných relácií (6.5), (6.2), (6.4) a (3.9). Samozrejme, aj teraz musíme korelácie medzi rôznymi spinmi na pravej strane zanedbať, čo nám však umožňuje (6.42) a (6.43) prepísať nasledovne

$$m = \left[\cosh(J\eta \nabla_x) + \frac{m}{\eta} \sinh(J\eta \nabla_x) \right]^z F_S(x) \Big|_{x=0} \quad (6.44)$$

$$q = \left[\cosh(J\eta \nabla_x) + \frac{m}{\eta} \sinh(J\eta \nabla_x) \right]^z G_S(x) \Big|_{x=0}. \quad (6.45)$$

Keďže tieto rovnice majú takmer identickú podobu ako vzťah (3.14), môžeme ich rovnakým matematickým postupom prepísať takto:

$$m = \sum_{k=0}^z \binom{z}{k} \frac{m^k}{\eta^k} A_k^{(z)}(\beta J, \eta, h), \quad (6.46)$$

6.2 Teória efektívneho poľa s približnou van der Waerdenovou identitou pre modely s ľubovoľným spinom

$$q = \eta^2 = \sum_{\ell=0}^z \binom{z}{\ell} \frac{\eta^\ell}{\eta^\ell} B_\ell^{(z)}(\beta J, \eta, h), \quad (6.47)$$

kde sú príslušné koeficienty dané vzťahmi

$$A_k^{(z)}(\beta J, \eta, h) = \frac{1}{2^z} \sum_{i=0}^{z-k} \sum_{j=0}^k (-1)^j \binom{z-k}{i} \binom{k}{j} F_S[\eta\beta J(z-2i-2j+\tilde{h})], \quad (6.48)$$

$$B_k^{(z)}(\beta J, \eta, h) = \frac{1}{2^z} \sum_{i=0}^{z-k} \sum_{j=0}^k (-1)^j \binom{z-k}{i} \binom{k}{j} G_S[\eta\beta J(z-2i-2j+\tilde{h})]. \quad (6.49)$$

Predchádzajúca sústava rovníc je platná pre ľubovoľný spin a umožňuje nám výpočet magnetizácie, parametra q a samozrejme aj výpočet Curieho a trikritickej teploty v rámci zjednodušenej verzie jednouzlovej aproximácie efektívneho poľa. Skôr, ako sa týmto výpočtom budeme venovať, je nutné upozorniť, že aj keď sú predchádzajúce vzťahy zapísané formálne v rovnakom tvare ako magnetizácia pre dvojstavový Isingov model (viď (3.14)), príslušné rovnice sú teraz zložitejšie, lebo jedna z hľadaných veličín q vstupuje aj do argumentov hyperbolických funkcií. Z tohto dôvodu už výsledné vzťahy nie sú striktne polynomicke rovnice, takže ich numerická analýza je trochu zložitejšia. Príslušné aplikácie v odbornej literatúre však jednoznačne dokazujú, že aj napriek spomínanej komplikácii je oveľa príjemnejšie a výhodnejšie pracovať s touto zjednodušenou aproximáciou hlavne pre systémy so spinom $S \gg 1$. Okrem toho sa výhody aproximatívnej formulácie teórie efektívneho poľa markantne prejavujú pri štúdiu zložitejších fyzikálnych systémov, z ktorých sme niektoré explicitne vymenovali v časti 6.1.2.

6.2.1 Curieho teplota a trikritický bod

6.2.1 Curieho teplota a trikritický bod

V predchádzajúcich častiach sme spomenuli jednak výhody, ale aj nevýhody približnej formulácie teórie efektívneho poľa. V tejto časti podrobnejšie ukážeme, ako táto teória funguje v prípade stanovenia krivky fázových prechodov druhého druhu a trikritického bodu pre Blumeho-Capelov model s ľubovoľným spinom. Z podrobných výpočtov, ktoré sme urobili pre $S = 1$ vyplýva, že na určenie kritickej teploty a trikritického bodu systémov s ľubovoľným spinom môžeme aplikovať formálne rovnaké matematické postupy, ktoré sme využili pre model so spinom $S = 1$.

Ak položíme vo funkciách F_S a G_S $h = 0$ a zopakujeme príslušný postup z časti 6.1.1, potom pre výpočet kritickej a trikritickej teploty obdržíme úplne rovnaké vzťahy

$$a = 1, \quad b < 0. \quad (6.50)$$

a

$$a = 1, \quad b = 0, \quad (6.51)$$

avšak teraz sú relevantné koeficienty dané vzťahmi

$$a = \frac{z}{\eta_0} \sinh(J\eta_0 \nabla_x) \left[\cosh(J\eta_0 \nabla_x) \right]^{z-1} F_S(x) \Big|_{\substack{h=0 \\ x=0}}, \quad (6.52)$$

$$\begin{aligned} b = & \frac{1}{\eta_0^3} \frac{z!}{3!(z-3)!} \left[\cosh(J\eta_0 \nabla_x) \right]^{z-3} \sinh^3(J\eta_0 \nabla_x) F_S(x) \Big|_{\substack{h=0 \\ x=0}} \\ & - \frac{q_1}{\eta_0^3} \frac{z}{2} \left[\cosh(J\eta_0 \nabla_x) \right]^{z-1} \sinh(J\eta_0 \nabla_x) F_S(x) \Big|_{\substack{h=0 \\ x=0}} \\ & + \frac{q_1}{\eta_0^2} \beta J \frac{z(z-1)}{2} \left[\cosh(J\eta_0 \nabla_x) \right]^z \sinh^2(J\eta_0 \nabla_x) \tilde{F}_S(x) \Big|_{\substack{h=0 \\ x=0}} \\ & + \frac{q_1}{\eta_0^2} \beta J \left[\cosh(J\eta_0 \nabla_x) \right]^z \tilde{F}_S(x) \Big|_{\substack{h=0 \\ x=0}}, \end{aligned} \quad (6.53)$$

6.2.1 Curieho teplota a trikritický bod

kde η_0 je nutné určit zo vzťahu

$$q_0 = \eta_0^2 = \left[\cosh(J\eta_0 \nabla_x) \right]^z G_S(x) \Big|_{x=0}^{h=0}. \quad (6.54)$$

Veličinu q_1 určíme tak, že výraz $q = q_0 + q_1 m^2$ dosadíme do rovnice (6.45) a obmedzíme sa len na výrazy do mocnín m^2 , čo nám opäť umožní vyjadriť q_1 v tvare

$$q_1 = \frac{e}{1-f}, \quad (6.55)$$

pričom koeficienty e a f sú dané vzťahmi

$$e = \frac{1}{\eta_0^2} \frac{z!}{2!(z-2)!} \sinh^2(J\eta_0 \nabla_x) \left[\cosh(J\eta_0 \nabla_x) \right]^{z-2} G_S(x) \Big|_{x=0}^{h=0}, \quad (6.56)$$

$$f = \frac{1}{\eta_0} \frac{z}{2} \beta J \sinh(J\eta_0 \nabla_x) \left[\cosh(J\eta_0 \nabla_x) \right]^{z-1} \tilde{G}_S(x) \Big|_{x=0}^{h=0}. \quad (6.57)$$

Poznamenejme ešte, že funkcie \tilde{F}_S a \tilde{G}_S sme definovali predpisom

$$\tilde{F}_S = \nabla_x F_S(x), \quad \tilde{G}_S = \nabla_x G_S(x). \quad (6.58)$$

Pri výpočte kritickej teploty a trikrického bodu sme v posledných dvoch prípadoch kvôli konzistentnosti zaviedli nové značenie pre koeficienty, avšak pozornému čitateľovi musí byť jasné, že platí $a = zA_1^z(\beta J, \eta_0, 0)$ a vzťah (6.54) je v súlade s rovnicou (6.47), ak sa obmedzíme len na prvý člen a položíme $\eta = \eta_0$ a $h = 0$.

Jednu z najvýznamnejších aplikácií približnej van der Waerdenovej identity predstavuje práca Kaneyoshiho et. al. [18], v ktorej bol spomínaný vzťah aplikovaný na výpočet fázových diagramov, magnetizácií, vnútornej energie a tepelnej kapacity transverzálneho Isingovho modelu s ľubovoľným spinom na rôznych kryštálových mriežkach. Ďalšou významnou aplikáciou je rozšírenie tejto metódy na dvojuzlový klaster, ktoré bolo urobené pre Blumeho-Capelov model spinom 1 v práci [23]. Tieto aplikácie jasne ilustrujú veľký potenciál tejto metódy.

7 Fenomenologická efektívno-polná teória renormalizačnej grupy

Pri budovaní a analýze rôznych verzií teórie efektívneho poľa sme v predchádzajúcich častiach jasne preukázali, že tento typ teórie poskytuje výsledky, ktoré spravidla vylepšujú klasickú teóriu stredného poľa nielen kvantitatívne, ale aj kvalitatívne. Toto vylepšenie sa odvíja od van der Waerdenovej identity a metódy diferenciálneho operátora, ktorých aplikácia umožňuje exaktným, alebo približným spôsobom započítať isté vlastnosti spinových premenných (operátorov). Je však potrebné zdôrazniť, že s výnimkou isingovskej lineárnej reťazky so spinom $1/2$ sú teórie efektívneho poľa vo všetkých ostatných prípadoch nepresné v opise správania sa magnetických systémov v kritickej oblasti. V tomto smere je asi najdôležitejší fakt, že tento typ teórie efektívneho poľa nie je v princípe schopný predpovedať hodnoty kritických indexov odlišné od Landauovskej teórie. Je veľmi dobre známe, že korelačná dĺžka v blízkosti kritickej teploty veľmi prudko narastá, čo znamená, že korelácie zohrávajú v kritickom regióne podstatnú úlohu a určujú priebehy jednotlivých fyzikálnych veličín v systéme. Teória efektívneho poľa, ktorou sme sa zaoberali v tejto monografii je však založená práve na zanedbávaní mnohých významných korelácií, čo vysvetľuje jej zlyhávanie v kritickej oblasti. Zaujímavým je tiež fakt, že ani podstatne vylepšené verzie teórie efektívneho, ktoré dokážu korelácie medzi spinmi rôznymi spôsobmi započítavať, nie sú schopné poskytnúť *neklasické* kritické indexy. Na druhej strane je však potešiteľné, že nami diskutované verzie tejto teórie umožňujú formuláciu zaujímavej renormalizačnej schémy, kompatibilnej s Wilsonovskou renormalizačnou grupou.

Našou hlavnou úlohou v tejto časti práce preto bude ukázať, ako je možné takúto fenomenologickú schému explicitne matematicky sformulovať a tiež preskúmať, v akom vzťahu je k podobnej renormalizačnej procedúre založenej na teórii stredného poľa.

Každá fenomenologická renormalizácia je ideovo založená na porovná-

7. Fenomenologická efektívno-po ná teória renormaliza nej grupy

vaní fyzikálnych vlastností dvoch klastrov rôznej veľkosti N a N' , ($N' < N$), z ktorých každý istým spôsobom simuluje celý nekonečný systém. Najprv si objasníme, ako sa táto schéma konštruuje pre klasickú teóriu stredného poľa. Prvým dôležitým krokom je určenie približných stavových rovníc jednotlivých klastrov, teda výpočet magnetizácii m_N a $m_{N'}$ pripadajúcich na jeden uzol klastra. V rámci teórie stredného poľa to urobíme tak, že vplyv okolia na každý z klastrov zameníme malými strednými poľami b a b' . Tieto polia narúšajú symetriu a pôsobia na hraničné uzly klastra. Centrálnou ideou samotnej renormalizačnej schémy je predpoklad, že normované magnetizácie, ako aj symetriu narúšajúce polia sa škálujú rovnako, čo vedie k podmienke

$$\left. \frac{\partial m_N(K, b)}{\partial b} \right|_{b=0} = \left. \frac{\partial m_{N'}(K', b')}{\partial b'} \right|_{b'=0}, \quad (7.1)$$

ktorá je nezávislá na škálovacom faktore. Túto reláciu interpretujeme ako rekurzívny vzťah $K' = K'(K)$ medzi väzbovými konštantami, ktoré v duchu renormalizačnej filozofie v systéme definujeme pre jednotlivé klastre. Takáto rekurzívna relácia má tzv. fixovaný bod $K^* = K'(K^*)$, ktorý určuje kritickú väzbovú konštantu $K_c = J/k_B T_c$, resp. kritickú teplotu. Navyše, aj kritický index pre korelačnú dĺžku ξ , ktorý je definovaný vzťahom

$$\xi \propto |T - T_c|^{-\nu}, \quad (7.2)$$

je možné vypočítať linearizáciou rekurzívnej relácie na okolí fixovaného bodu K^* , keďže platí

$$\ell^{1/\nu} = \left(\frac{\partial K'}{\partial K} \right)_{K=K^*}, \quad (7.3)$$

kde tzv. škálovací faktor ℓ je definovaný vzťahom

$$\ell = \left(\frac{N}{N'} \right)^{1/d} \quad (7.4)$$

7. Fenomenologická efektívno-po ná teória renormaliza nej grupy

a d reprezentuje priestorovú dimenziu systému.

Vyššie opísaná schéma môže byť evidentne kombinovaná nielen s teóriou stredného poľa, ale aj s inými teoretickými prístupmi, preto teraz podrobnejšie ukážeme, ako vyzerá aplikácia tejto renormalizačnej schémy, ak ju skombinujeme s teóriou efektívneho poľa v jedno a dvojuzlovej aproximácii. Ak teda položíme $N' = 1$ a $N = 2$ a príslušné väzbové parametre označíme K'_{ij} , K_{ik} a $K_{j\ell}$, potom pre magnetizácie obdržíme dobre známe vzťahy

$$m_{N'} = \left\langle \tanh \left(\sum_j K'_{ij} \sigma_j^z \right) \right\rangle, \quad (7.5)$$

$$m_N = \left\langle \frac{2 \sinh(E_i + E_j)}{\cosh(E_i + E_j) + e^{-2\beta K_{ij}} \cosh(E_i - E_j)} \right\rangle, \quad (7.6)$$

kde

$$E_i = \sum_k K_{ik} \sigma_k^z, \quad E_j = \sum_\ell K_{j\ell} \sigma_\ell^z. \quad (7.7)$$

Pri ďalších výpočtoch aplikujeme na pravé strany týchto rovníc identické matematické postupy (diferenciálny operátor a van der Waerdenovu identitu) a dostaneme prirodzene rovnaké rovnice ako sme už odvodili (viď (3.5) a (4.5))⁶. Zásadný rozdiel oproti štandardnej teórii efektívneho poľa spočíva v tom, že teraz pri zanedbávaní korelácií medzi jednotlivými spinmi z okolia príslušného centrálného atómu zavedieme symetriu narúšajúce polia b a b' ako stredné hodnoty príslušných spinových premenných. Je jasné, že príslušné magnetizácie potom budú ich explicitnou funkciou a veľmi dôležitým je tiež fakt, že v kritickej oblasti sú polia b a b' veľmi malé, takže nám stačí na pravých stranách rovníc (7.5) a (7.6) uvažovať len lineárne členy

⁶Formálne sa tieto rovnice líšia od vzťahov (7.5) a (7.6) označením jednotlivých veličín.

7. Fenomenologická efektívno-po ná teória renormaliza nej grupy

vzhľadom na b a b' . Za týchto predpokladov pre izotropný kryštál obdržíme vzťahy

$$m_{N'}(K', b') = A_{N'}^z(K')b' + \mathcal{O}(b'^3) \quad (7.8)$$

$$m_N(K, b) = A_N^z(K) + \mathcal{O}(b^3), \quad (7.9)$$

pričom koeficienty $A_{N'}^z(K')$ a $A_N^z(K)$ sú definované takmer identicky ako pri formulácii teórie efektívneho poľa, t.j.,

$$A_{N'}^z(K') = z \sinh(K' \nabla_x) \left[\cosh(K' \nabla_x) \right]^{z-1} \tanh(x) \Big|_{x=0}, \quad (7.10)$$

a

$$\begin{aligned} A_N^z(K) &= 2z' \sinh(K \nabla_x) \left[\cosh(K \nabla_x) \right]^{z'-1} \left[\cosh(K \nabla_y) \right]^{z'} \\ &\times \left[\cosh(K \nabla_x + K \nabla_y) \right]^{z''} f(x, y)(x) \Big|_{\substack{x=0 \\ y=0}} \\ &+ z'' \sinh(K \nabla_x + K \nabla_y) \left[\cosh(K \nabla_x) \right]^{z'} \left[\cosh(K \nabla_y) \right]^{z'} \\ &\times \left[\cosh(K \nabla_y) \right]^{z''-1} f(x, y)(x) \Big|_{\substack{x=0 \\ y=0}}, \end{aligned} \quad (7.11)$$

kde z je koordinačné číslo mriežky, z' označuje počet rôznych najbližších susedov centrálného atómu i alebo j a z'' reprezentuje počet najbližších spoločných susedných atómov i -tého a j -tého uzla. Príslušné počty najbližších susedov musia pre dvojatómový klaster prirodzene spĺňať rovnicu $z' + z'' + 1 = z$. Takéto rozlíšenie najbližších susedných atómov centrálného klástra je v pri tejto schéme možné až pre $N = 2$ a len ak pracujeme s teóriou efektívneho poľa. Teda podobne ako dvojuzlová aproximácia efektívneho poľa, aj efektívno-poľná renormalizácia dokáže rozlíšiť mriežky s rovnakým koordinačným číslom, ale rôznou topologickou štruktúrou. V tomto

7. Fenomenologická efektívno-po ná teória renormaliza nej grupy

ohľade je teda diskutovaná teória nadradená remormalizácii založenej na teórii stredného poľa, ktorá túto vlastnosť nemá.

Ak teraz zoberieme do úvahy rovnicu (7.1), dostaneme rekurzívnu reláciu pre väzbové konštanty K a K' v tvare

$$A_{N'}^z(K') = A_N^z(K). \quad (7.12)$$

Kritická väzbová konštanta, ktorá určuje teplotu fázového prechodu potom koinciduje s netriviálnym fixným bodom, ktorý dostaneme riešením (7.12) pre $K = K' = K'^* = K_c$. Ak v rámci tejto schémy vypočítame kritickú teplotu, potom môžeme určiť aj kritický index ν , ak do vzťahu (7.3) dosadíme výraz

$$\left(\frac{\partial K'}{\partial K}\right)_{K=K^*} = \frac{\left(\frac{\partial A_N^z(K)}{\partial K}\right)_{K=K_c}}{\left(\frac{\partial A_{N'}^z(K')}{\partial K'}\right)_{K=K_c}}. \quad (7.13)$$

Z predchádzajúcej diskusie je zrejmé, že fenomenologickú efektívno-poľnú renormalizačnú schému môžeme skonštruovať pre klastre prakticky ľubovoľnej veľkosti, pričom sa dá prirodzene predpokladať, že presnosť výsledkov sa bude zlepšovať s nárastom veľkosti klastrov, ktoré zoberieme do úvahy. Túto prognózu jednoznačne potvrdzujú doteraz publikované práce, v ktorých autori explicitne vypracovali túto teóriu až pre štvoruzlové klastre [14].

Kvôli ilustrácii presnosti diskutovanej metódy uvádzame v Tabuľke 3 porovnanie kritických teplôt a kritických koeficientov ν získaných z efektívno-poľnej renormalizácie a výsledkov získaných inými prístupmi pre rôzne kryštalové mriežky [14].

8. Záver

Tabuľka 3: Porovnanie kritických teplôt a kritických indexov ν získaných z re-normalizácie založenej na teórii efektívneho poľa a teórii stredného poľa (údaje v zátvorkách).

N/N'	štvorcová mriežka		jednoduchá kubická mriežka	
	$k_B T_c/J$	ν	$k_B T_c/J$	ν
2/1	2.794 (2.882)	1.393 (1.667)	4.852 (4.926)	1.369 (1.538)
4/1	2.697 (2.770)	1.166 (1.419)	4.829 (4.902)	1.238 (1.389)
4/2	2.640 (2.703)	1.006 (1.282)	4.806 (4.878)	1.139 (1.266)
Exact	2.269	1.000)	4.511	0.629

8 Záver

V tejto monografii sme sa snažili dostatočne elementárnym spôsobom priblížiť čitateľovi niekoľko rôznych verzií teórie efektívneho poľa založenej na metóde diferenciálneho operátora. Naším cieľom bolo postupne vysvetliť jednak samotný matematický aparát, ale aj rôzne typy aproximácií, ktoré boli doteraz aplikované na obrovský počet rôznych magnetických systémov. Kvôli konkrétnosti je možné uviesť, že počet vedeckých prác, v ktorých bola táto metóda použitá už dávno presiahol číslo 500 a aj v súčasnosti sa táto metóda stále aktívne využíva. Vzhľadom na tento obrovský počet prác, sme sa v tejto monografii obmedzili len na systémy s pravidelnou kryštálovou štruktúrou, na ktorých bolo možné ilustrovať všetky kľúčové metodické postupy teórie efektívneho poľa.

V práci sa najprv venujeme podrobnému odvodeniu tzv. Callenovej identity, ktorá je kľúčovým vzťahom pri budovaní všetkých teórií efektívneho poľa využívajúcich metódu diferenciálneho operátora. V ďalšej časti monografie podrobnejšie diskutujeme tzv. jednouzlovú aproximáciu efektívneho poľa pre Isingov model so spinom $1/2$, ktorú potom postupne zovšeobecňujeme na zložitejšie systémy (napr. Blumeho-Capelov model so spinom 1 , Isingov model v transversálnom poli, Isingov model s ľubovoľným spinom

8. Záver

a dvojuzlovú aproximáciu efektívneho poľa). Okrem toho je v monografii podrobne diskutované exaktné riešenie jednorozmerného Isingovho modelu v rámci teórie efektívneho poľa, ktoré je originálnou alternatívou k štandardnej matici prechodu. V závere práce sa stručne venujeme diskusii fenomenologickej efektívno-poľovej renormalizácie, umožňujúcej korektný popis magnetických systémov v kritickej oblasti.

V práci sa spravidla nevenujeme detailnej diskusii obdržaných fyzikálnych výsledkov, keďže tieto sú čitateľovi prístupné v pôvodných citovaných prácach.

Aj keď monografia v podstate sumarizuje už známe výsledky, náš prístup je originálny a umožňuje zjednotiť vzťahy pre jednotlivé mriežky a prezentovať ich v kompaktnej podobe, ktorá je konečná a vhodná na numerické výsledky.

Okrem toho práca obsahuje v časti 3.4 originálny postup pre vyšetovanie stability jednotlivých fáz v rôznych systémoch. Nami navrhnutá metóda sa opiera o vyšetovanie rozdielu voľných energií príslušných fáz, čo nám umožňuje jednoznačne určiť, ktorá fáza je v príslušnej oblasti fázového priestoru stabilná a ktorá nestabilná. Z nášho pohľadu ide o najvýznamnejší pôvodný príspevok prezentovaný v tejto monografii, ktorý definitívne odstraňuje najzávažnejší nedostatok teórie efektívneho poľa, ktorým je nemožnosť výpočtu voľnej energie systému. Navyiac, ako sme poukázali v príslušnej diskusii, je nami navrhnutý postup aplikovateľný na vyšetovanie fázovej stability v podstate pre ľubovoľné teoretické prístupy, v ktorých vieme vypočítať vnútornú energiu alebo entalpiu systému.

Na záver možno konštatovať, že teórie efektívneho poľa založené na metóde diferenciálneho operátora stále predstavujú výborný teoretický nástroj na štúdium magnetických vlastností najrôznejších modelových ale aj reálnych magnetických systémov. Tento teoretický prístup je stále aktívne rozvíjaný jednak samotným zakladateľom, prof. Kaneyoshim, ale aj ďalšími vedeckými skupinami na rôznych svetových pracoviskách.

Literatúra

- [1] H. B. Callen: Phys. Lett. 4, 161 (1963).
- [2] E.F. SáBarreto, H., B., I.P. Fittipaldi, B. Zeks: Ferroelectrics 39, 1103 (1981).
- [3] E. Ising: Z. Phys. 31, 253 (1925).
- [4] L. Onsager: Phys. Rev. 65, 117 (1944).
- [5] C.N. Yang: Phys. Rev. 85, 808 (1952).
- [6] W.P. Wolf: Braz. J. Phys. 30, 794 (200).
- [7] L.J. de Jongh, A.R. Miedema: Adv. Phys. 23, 2 (1974).
- [8] J.S. Smart: *Effective Field Theories of Magnetism*, W.B. Sanders Co., Philadelphia (1966).
- [9] H.E. Stanley: *Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena*, Clarendon Press, Oxford (1971).
- [10] R. Honmura, T. Kaneyoshi: J. Phys. C 12, 3979 (1979).
- [11] T. Kaneyoshi: Acta Phys. Polonica A 83, 703 (1993).
- [12] A. Bobák, P. Macko: J. Magn. Magn. Mat 109, 172 (1992).
- [13] A. Bobák, M. Jaščur: phys. stat. sol. (b) K9, 135 (1986).
- [14] I.P. Fittipaldi, DF. Albuquerque: J. Magn. Magn. Mat 104, 236 (1992).
- [15] J.R. Kirkwood: *Phase Transitions in the Ising Model with Tranverse Field*, IMA Preprint Series 27, 1 (1933).

Literatúra

- [16] P.G. de Gennes: Solid State Commun. 1, 132 (1963);
R. Blinc, B. Zeks, Adv. Phys. 91, 693 (1972).
- [17] R. Scinchcombe: J. Phys. C: Solid State Phys. 6, 2459 (1973).
- [18] T. Kaneyoshi, M. Jaščur, I.P. Fittipaldi: Phys. Rev. B 48, 250 (1993).
- [19] J. Oitmaa, G.J. Coombs: J. Phys. C: Solid State Phys. 14, 143 (1981).
- [20] M. Suzuki: Phys. Rev. B 31, 2957 (1985).
- [21] P. Pfeuty: Annals of Phys. 57, 79 (1970).
- [22] T. Kaneyoshi, J. Tucker, M. Jaščur: Physica A 176, 495 (1992).
- [23] M. Jurčišin, A. Bobák and M. Jaščur: Physica A 224, 684 (1996).