В.Н.Глазков

«Физика низкоразмерных систем»

слайды к лекции 3

МОДЕЛЬ ИЗИНГА: КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ И ПРИМЕРЫ В РЕАЛЬНОМ МИРЕ.

Применение классического метода Монте-Карло к двумерной модели Изинга.

$$\hat{H} = -\sum_{k,l=0}^{N-1} \left(\hat{\sigma}_{k,l} \hat{\sigma}_{k,l+1} + \hat{\sigma}_{k,l} \hat{\sigma}_{k+1,l} \right)$$

задача на двумерной сетке NxN, периодические граничные условия (=сворачивание плоскости в тор)

Шаг1. Исходное состояние при T=0, все σ=+1

Шаг 2. Проходим по всей решётке, вычисляем дефект энергии при перевороте спина

$$\Delta E_{i,j} = E(\ldots, -\sigma_{i,j}, \ldots) - E(\ldots, \sigma_{i,j}, \ldots) = 2\sigma_{i,j} \left(\sigma_{i+1,j} + \sigma_{i-1,j} + \sigma_{i,j+1} + \sigma_{i,j-1} \right)$$

оставляем спин перевёрнутым с вероятностью
$$W = \begin{cases} 1, \Delta E < 0 \\ \exp(-\Delta E / T), \Delta E > 0 \end{cases}$$

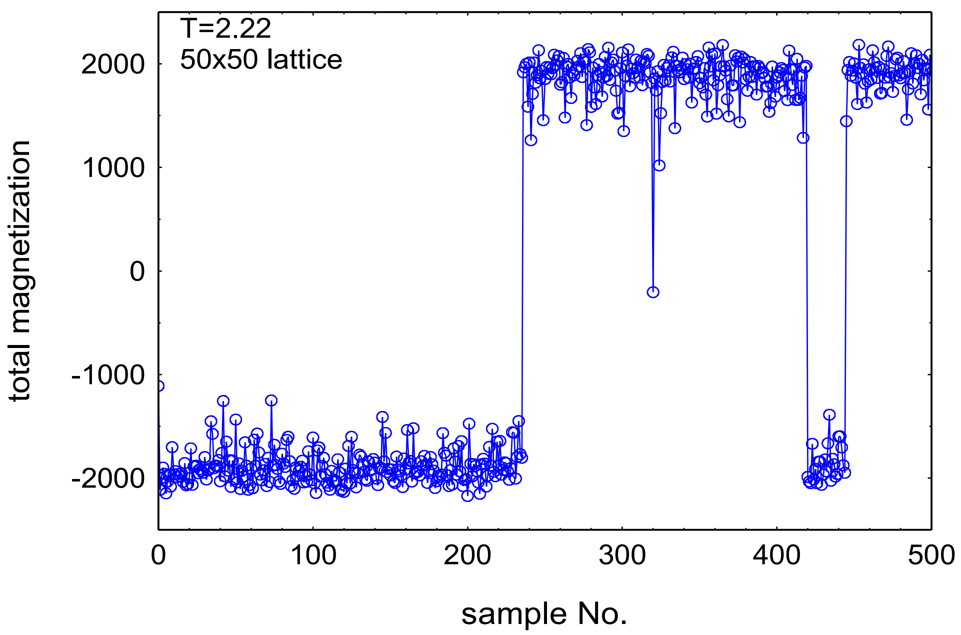
Повторяем «Шаг 2» N_{therm} раз, получаем (надеемся что) равновесную конфигурацию изинговских переменных X_i. Делаем $N_{sampling}$ повторений «Шага 2» для получения случайного нового состояния

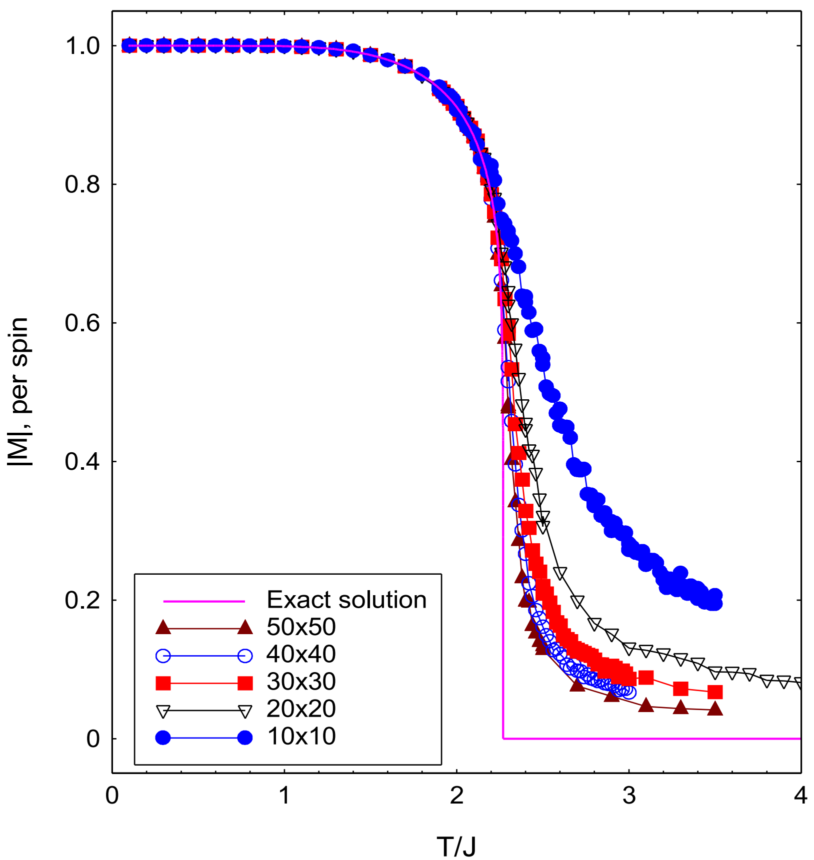
N раз

Шаг 3. По полученной выборке (надеемся что) равновесных состояний $\{X_i\}$ вычисляем среднее интересующей нас величины (например, намагниченности)

Шаг 4. Изменяем температуру. Если изменение не велико в качестве исходного состояния берём последнее из сгенерированных.

Применение метода Монте-Карло: результат





Размер решётки	Число шагов для термализации	Число шагов между состояниями	Число состояний для вычисления M	Время на вычисление M при одной температуре
10x10	500	300	500	14 сек
20x20	500	300	500	56 сек.
30x30	1000	900	500	374 сек. (6 мин. 14 сек.)
40x40	1000	600	500	447 сек. (7 мин. 27 сек.)
50x50	2000	1000	500	1153 сек. (19 мин. 13 сек.)

Связь изинговского гамильтониана с задачей о газе на решётке.

$$F = F_{ид} - T\ln\left[\frac{1}{V^N}\int\ldots\int e^{-\frac{U}{T}}dV_{1\ldots}dV_N\right] + \mu N = F_{ид} - T\ln\left[\frac{1}{V^N}\int\ldots\int e^{-\frac{U+\mu N}{T}}dV_{1\ldots}dV_N\right]$$

Для вычисления вклада потенциальной энергии перейдём от непрерывной переменной к дискретной решётке

$$U_{12}(\vec{r}^{(1)}=\vec{r}_i, \vec{r}^{(2)}=\vec{r}_j) = U_{ij} = U(\vec{r}_i - \vec{r}_j)$$

$$E = \sum_{\langle i,j\rangle} U_{ij} B_i B_j + \mu \sum_i B_i$$

где B={0,1} занятость соответствующего узла, первая сумма берётся по неповторяющимся парам индексов

$$B_i = \frac{1}{2}(1+\sigma_i)$$

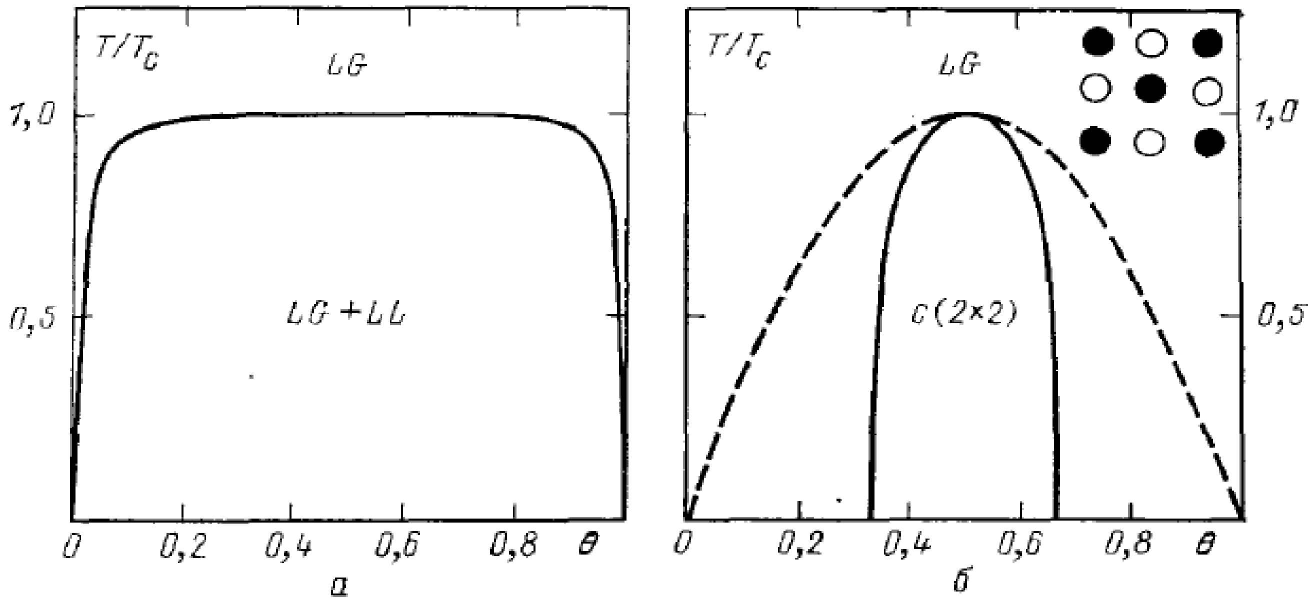
где σ=±1

$$E = \frac{1}{4}\sum_{\langle i,j\rangle} U_{ij} + \frac{\mu}{2}L^d + \sum_{\langle i,j\rangle}\frac{U_{ij}}{4}\sigma_i\sigma_j + \sum_i\left[\frac{1}{4}\sum_j U_{ij} + \frac{\mu}{2}\right]\sigma_i$$

$$\boxed{E = \frac{1}{2}\left(\frac{zU_0}{4}+\mu\right)L^d + \sum_{\langle i,j\rangle'}\frac{U_0}{4}\sigma_i\sigma_j + \sum_i\left[\frac{zU_0}{4}+\frac{\mu}{2}\right]\sigma_i}$$

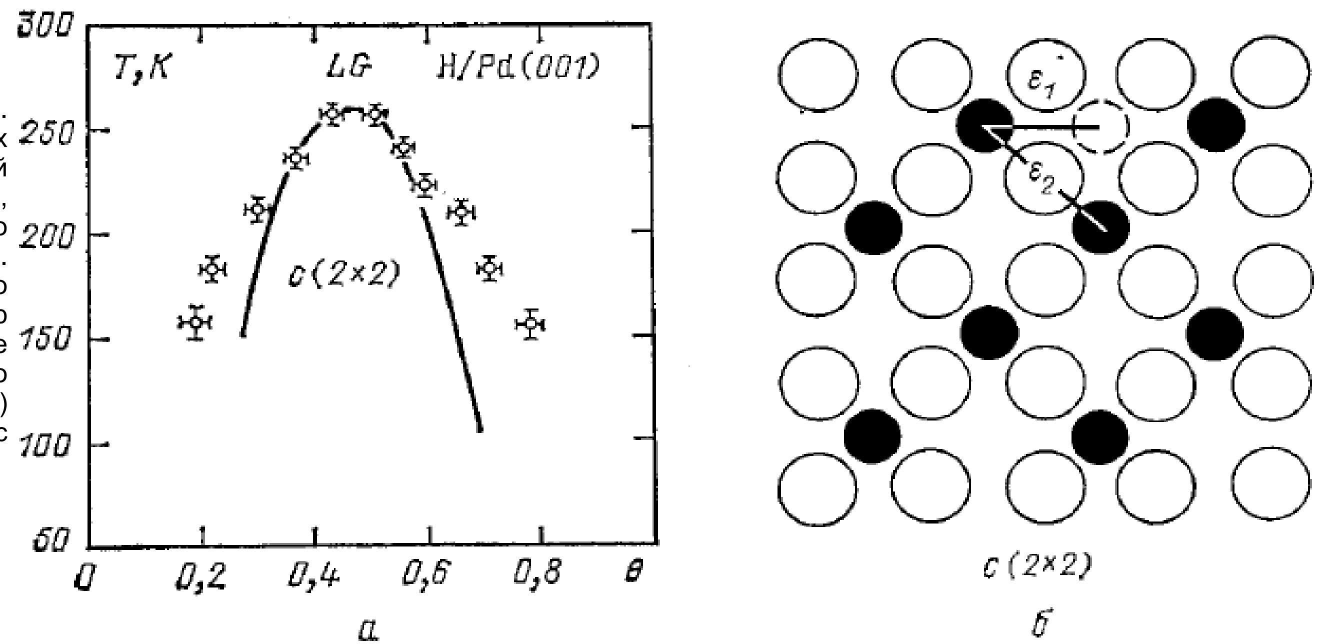
константа Изинг «поле»

Двумерный решёточный газ: сорбция на поверхность кристалла



Вычисление фазовой диаграммы атомов, сорбированных на поверхности с квадратной решёткой. Слева - случай притяжения между сорбированными атомами, справа — отталкивания.Tc=1 соответствует результату двумерной модели Изинга, сплошная линия — Монте-Карло моделирование, пунктир — модель среднего поля. Обозначения фаз: LG - «решёточный газ», LL - «решёточная жидкость», C(2x2) - «кристалл» с удвоением периода.

Сорбция водорода на поверхность [100] палладия. Точки фазового перехода при различных уровнях заполнения решётки определены по температурной зависимости дифракционного пика, соответсвующего удвоению периода, в опытах по дифракции низкоэнергетических электронов. Асимметрия фазовой диаграммы относительно половинного заполнения связывается с ролью взаимодействия далёких соседей, уширение упорядоченной области относительно модельного предсказания (сплошная кривая) предположительно связывается с неоднородностью поверхности.



В.П.Жданов и К.И.Замараев, Модель решеточного газа для описания хемсорбции на поверхности металлов, УФН,149 (635)(1984)

Магнетики, описываемые моделью Изинга

$$\vec{M}=\mu_B\left(\vec{L}+2\vec{S}\right) \Rightarrow M_z=g\,\mu_B J_z \qquad g=1+\frac{J\left(J+1\right)-L\left(L+1\right)+S\left(S+1\right)}{2\mathrm{J}\left(J+1\right)}$$

для изолированного иона, в приближении слабой LS связи

НА САМОМ ДЕЛЕ:

спин-орбитальное взаимодействие $-\lambda\vec{L}\vec{S}$

электрическое поле соседей («кристаллическое поле») снимает вырождение по проекции момента

Предельные случаи:
1) <u>кристаллическое поле << спин-орбиты</u> (редкоземельные ионы) : нет приближения LS-связи, только J_z как квантовое число, расщепление по J_z масштаба сотен градусов, нижний дублет «S=1/2» с сильно анизотропным g-фактором.
2) <u>спин-орбита<<кристаллического поля</u> (переходные металлы) : замораживание орбитального момента, магнетизм почти чисто спиновый, расщепление кристаллическим полем возникает в теории возмущений, масштаб градусов.

Если обменное взаимодействие мало, его учёт по теории возмущений=проекция на нижние подуровни=изинг

Проецируем на нижний дублет...

Пусть, для модельного рассмотрения, нижний одноионный подуровень это дублет S_z=±3/2. Пусть есть всего пара взаимодействующих ионов и обменное взаимодействие между ними слабо по сравнению с расстоянием до следующего одноионного подуровня.
В нулевом приближении имеем четырёхкратно вырожденное основное состояние. В рамках теории возмущений надо написать матрицу обменного гамильтониана по этому урезанному базису. При этом учитываем, что повышающий/понижающий операторы не перепутывают волновые функции подуровня и отбрасываем все волновые вункции вне нашего базиса:

$$J\vec{S}_1\vec{S}_2\left|+3/2,+3/2\right\rangle = J\left(S_1^z S_2^z + S_1^x S_2^x + S_1^y S_2^y\right)\left|+3/2,+3/2\right\rangle = \frac{9}{4}J\left|+3/2,+3/2\right\rangle + smth.$$

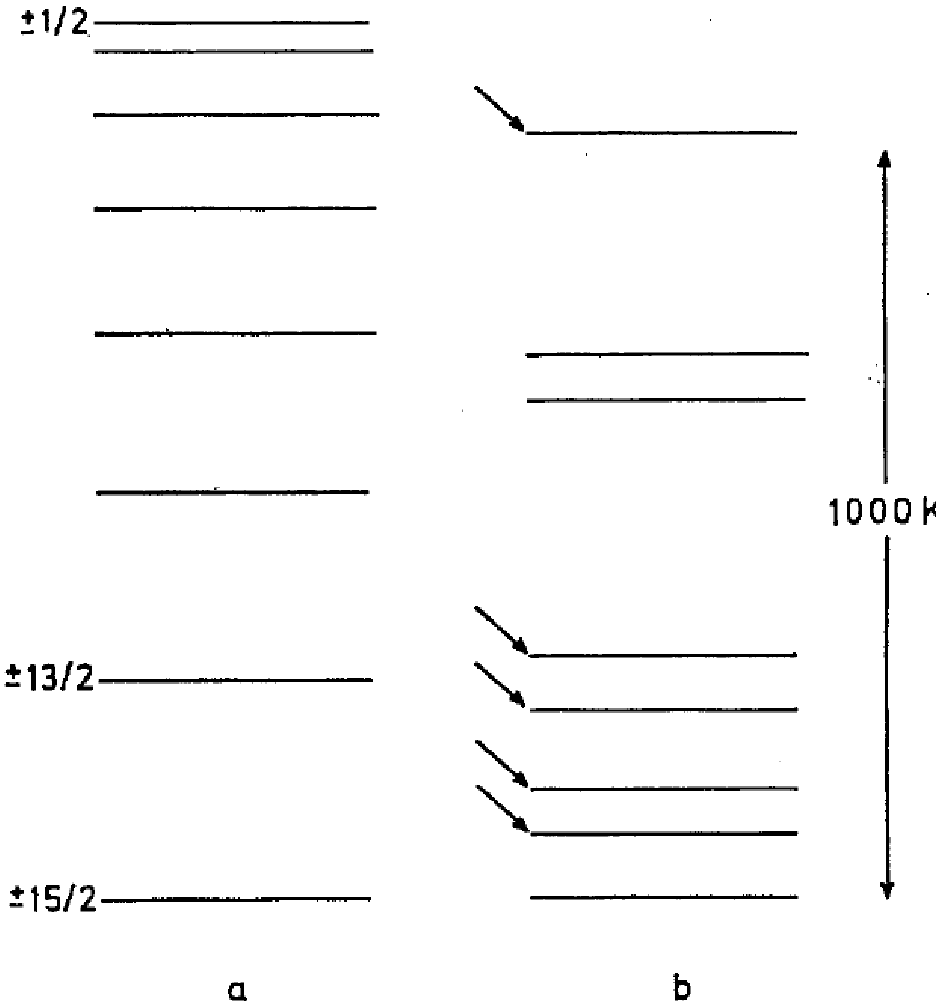
$$J\vec{S}_1\vec{S}_2\left|+3/2,-3/2\right\rangle = -\frac{9}{4}J\left|+3/2,-3/2\right\rangle + smth.$$

$$J\vec{S}_1\vec{S}_2\left|-3/2,-3/2\right\rangle = \frac{9}{4}J\left|-3/2,-3/2\right\rangle + smth.$$

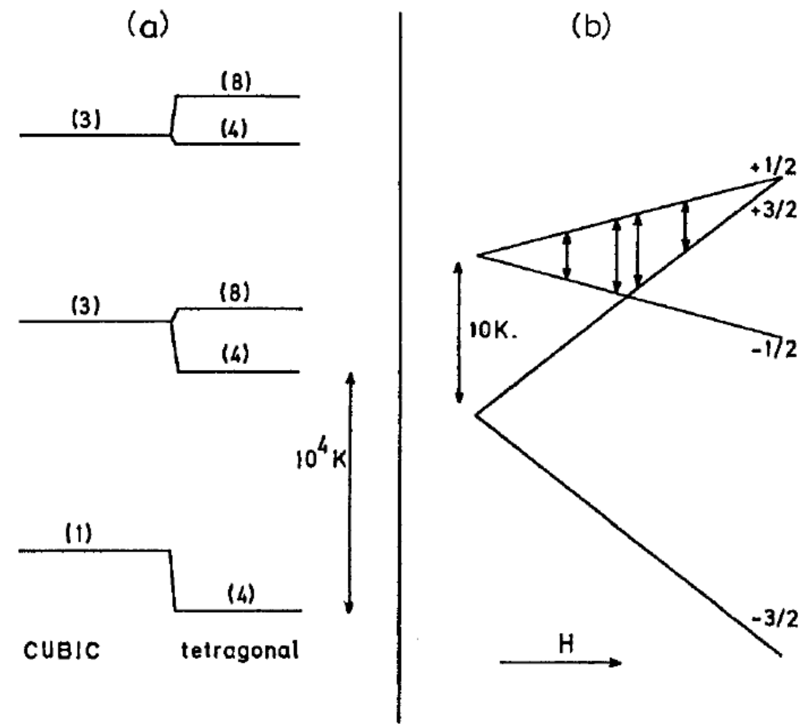
$$J\vec{S}_1\vec{S}_2\left|-3/2,+3/2\right\rangle = -\frac{9}{4}J\left|-3/2,+3/2\right\rangle + smth.$$

Это действие обменного гамильтониана с точностью до переобозначений соответствует модели Изинга

Примеры расщепления одноионных уровней в кристаллах



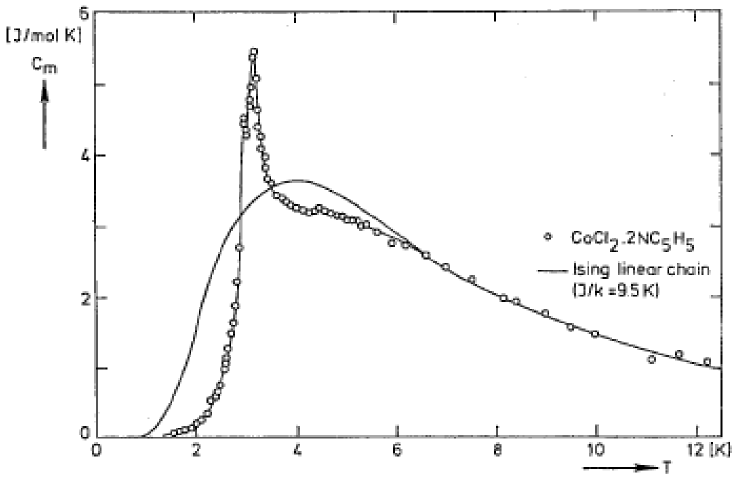
(a) Расщепление в аксиальном кристаллическом поле уровня $^6H_{15/2}$ иона Dy^{3+} ;(b) схема уровней в диспрозий-алюминиевом гранате (стрелками показаны экспериментально наблюдённые уровни)



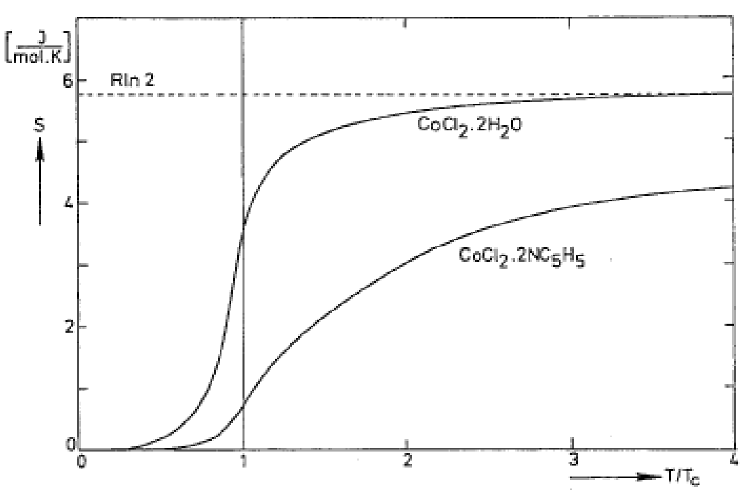
Расщепление нижнего мультиплета (L=3, S=3/2) иона Co^{2+} в $CoCs_3Cl_5$.(a) Схема уровней в кубическом и тетрагональном кристаллическом поле. (b) Схема уровней нижнего спинового мультиплета в магнитном поле.

L.J de Jong and A.R.Miedema, Experiments on simple magnetic model systems, Advances in Physics,50 (247)(2001)

Одномерные изинговские магнетики



(a)



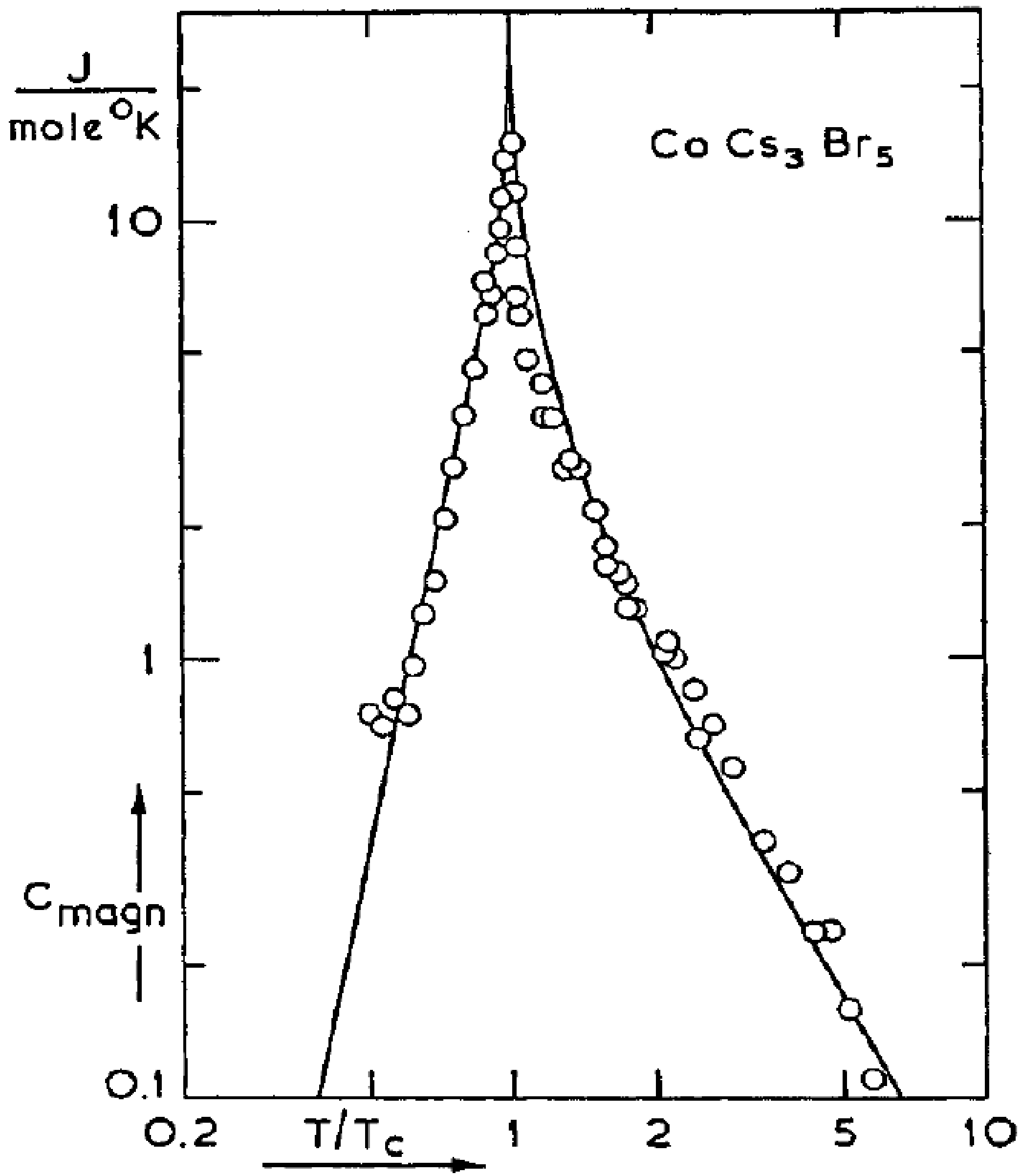
(b)

Зависимости магнитной чати теплоёмкости и энтропии от температуры для изинговского квазиодномерного магнетика $CoCl_2 \cdot 2NC_5H_5$. (нижний график) Зависимость магнитной части энтропии от температуры Температура нормирована на температуру перехода в трёхмерно-упорядоченное состояние (8К для $CoCl_2 \cdot 2H_2O$, 3.7К для $CoCl_2 \cdot 2NC_5H_5$ [1]). Из обзора [2]. (приведённое на верхнем рисунке значение параметра взаимодействия соответствует принятому нами определению J, отсутствие поправочных множителей, связанных с другими определениями, видимо является результатом опечатки в одной из работ вошедших в обзор).

[1] Таблица физических величин

[2] L.J de Jong and A.R.Miedema, Experiments on simple magnetic model systems, Advances in Physics, 50 (247)(2001)

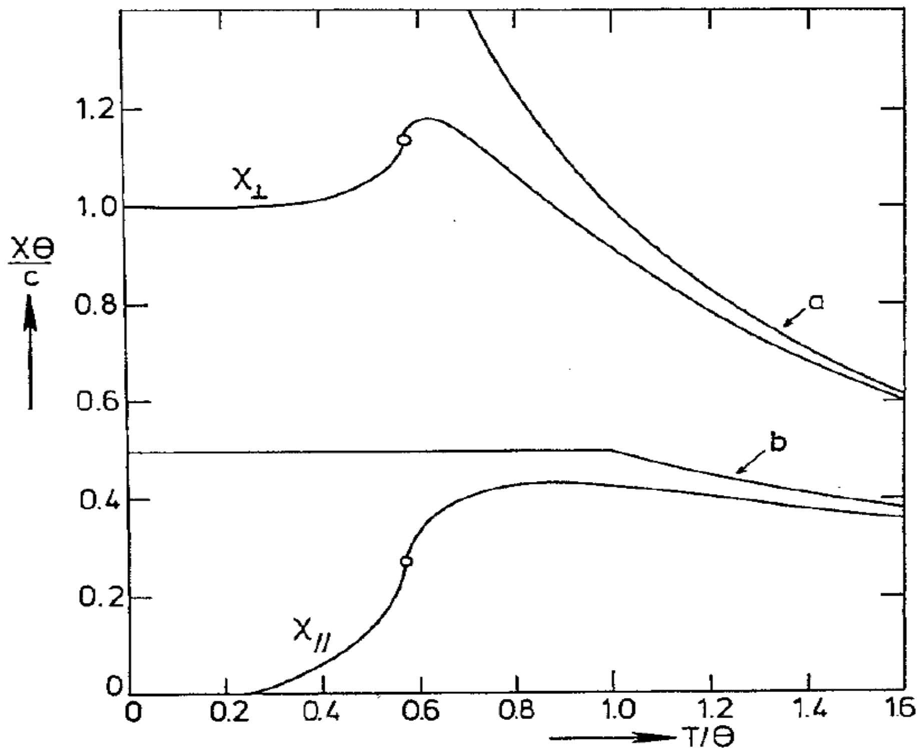
Двумерные изинговские магнетики: теплоёмкость.



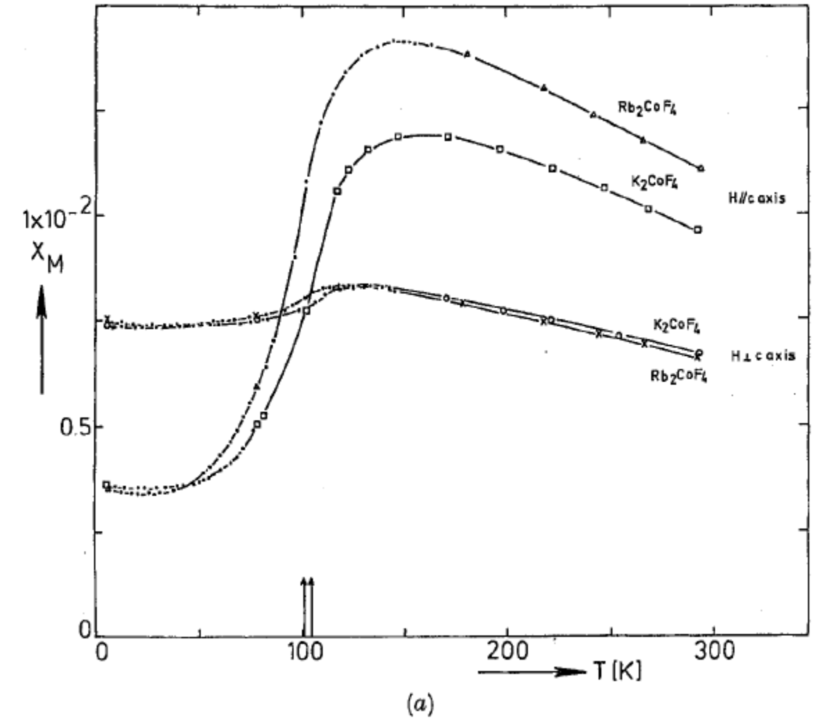
Теплоёмкость квазидвумерного изинговского антиферромагнетика CoCs3Br3 (символы) в сравнении с теоретическим предсказанием (кривая). Температура перехода 280 мК, параметр взаимодействия 110мК (антиферромагнитный). Кривая — теория для изинговского магнетика на квадратной решётке. Из обзора L.J de Jong and A.R.Miedema, Experiments on simple magnetic model systems, Advances in Physics,50 (247)(2001) (в нём приведён параметр взаимодействия 220 мК, что связано с другим определением гамильтониана взаимодействия, включающим множитель 2 и запись гамильтониана для эффективного спина 1/2).

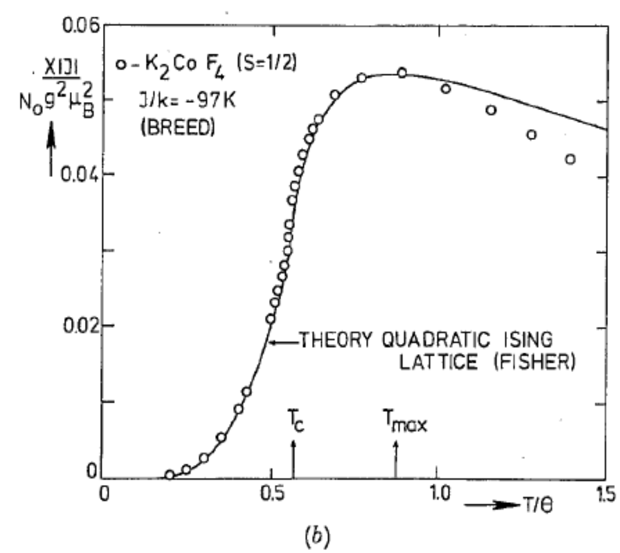
Двумерные изинговские магнетики: восприимчивость.

$$\hat{H} = J\sum \sigma_i^z \sigma_j^z + g\mu_B H_{\|}\sum \sigma^z + g\mu_B H_{\perp}\sum \sigma^x$$



Зависимости восприимчивости от температуры для изинговского двумерного антиферромагнетика с $g^{\perp}=g^{\|}$. Дополнительно показаны кривая парамагнитной восприимчивости (с) и кривая в модели среднего поля для гейзенберговского антиферромагнетика (b).





Зависимость от температуры восприимчивости для квазидвумерных изинговских антиферромагнетиков Rb_2CoF_4 и K_2CoF_4 .

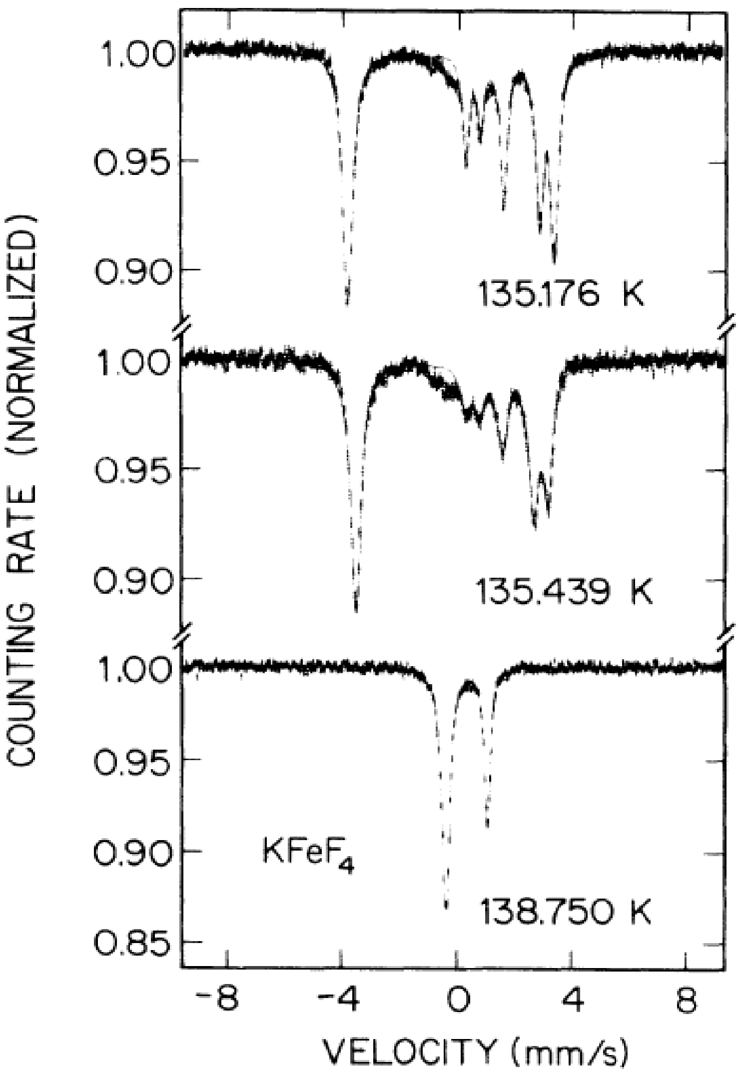
L.J de Jong and A.R.Miedema, Experiments on simple magnetic model systems, Advances in Physics,50 (247)(2001)

Двумерные изинговские магнетики: температуры перехода

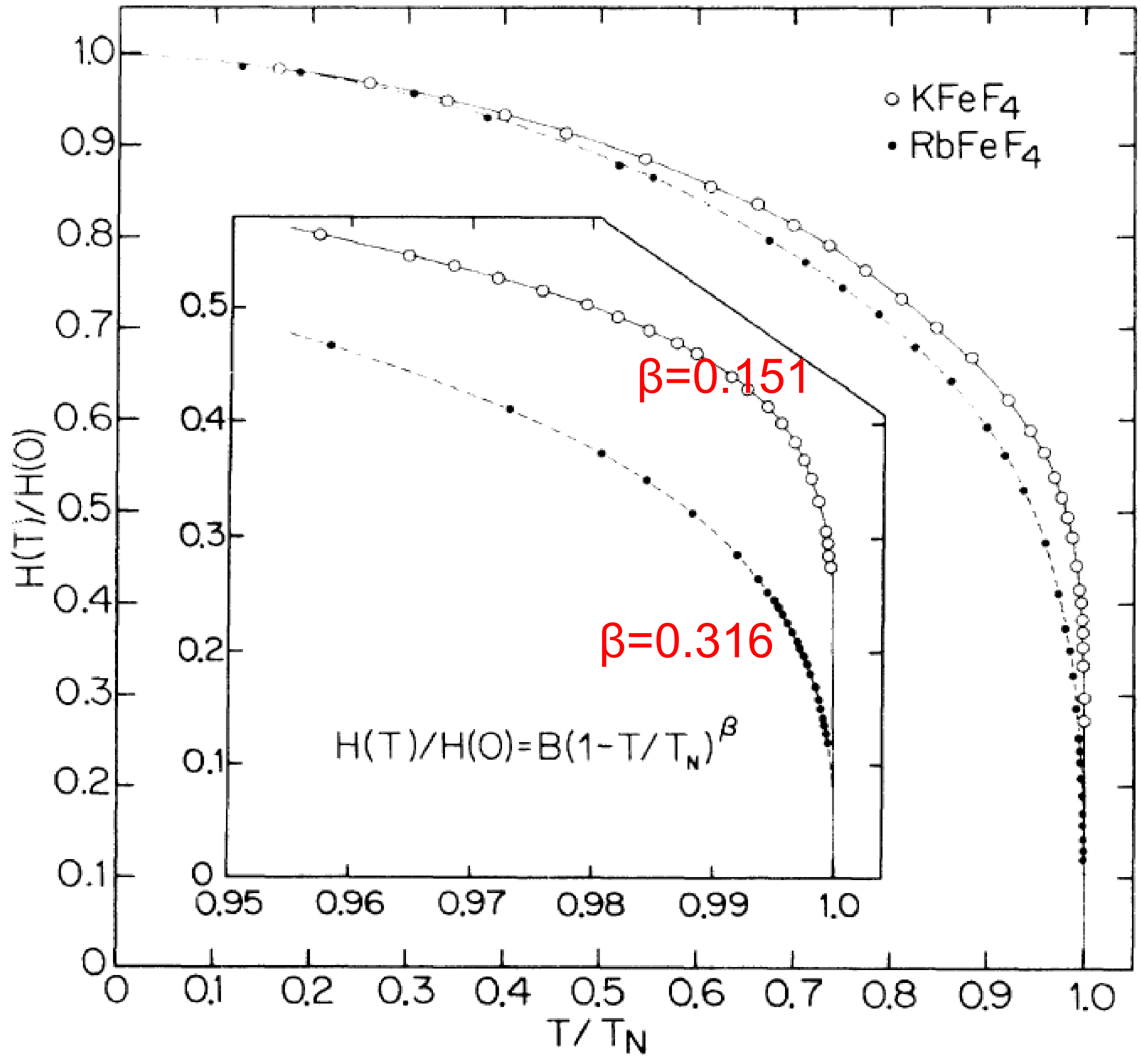
	T_c,K	J, K	J'/J	T_c/J
$CoCs_3Br_5$	0.282	0.11		2.54
$Co(HCOO)_2 \cdot 2H_2O$	5.12	2.15	0.008	2.38
Rb_2CoF_4	101	46	10^{-6}	2.22
K_2CoF_4	107	49	10^{-6}	2.20

$$\boxed{\frac{T_c}{|J|} = \frac{2}{\ln\left(1+\sqrt{2}\right)} \approx 2.269}$$

Двумерные изинговские магнетики: критические экспоненты параметра порядка.



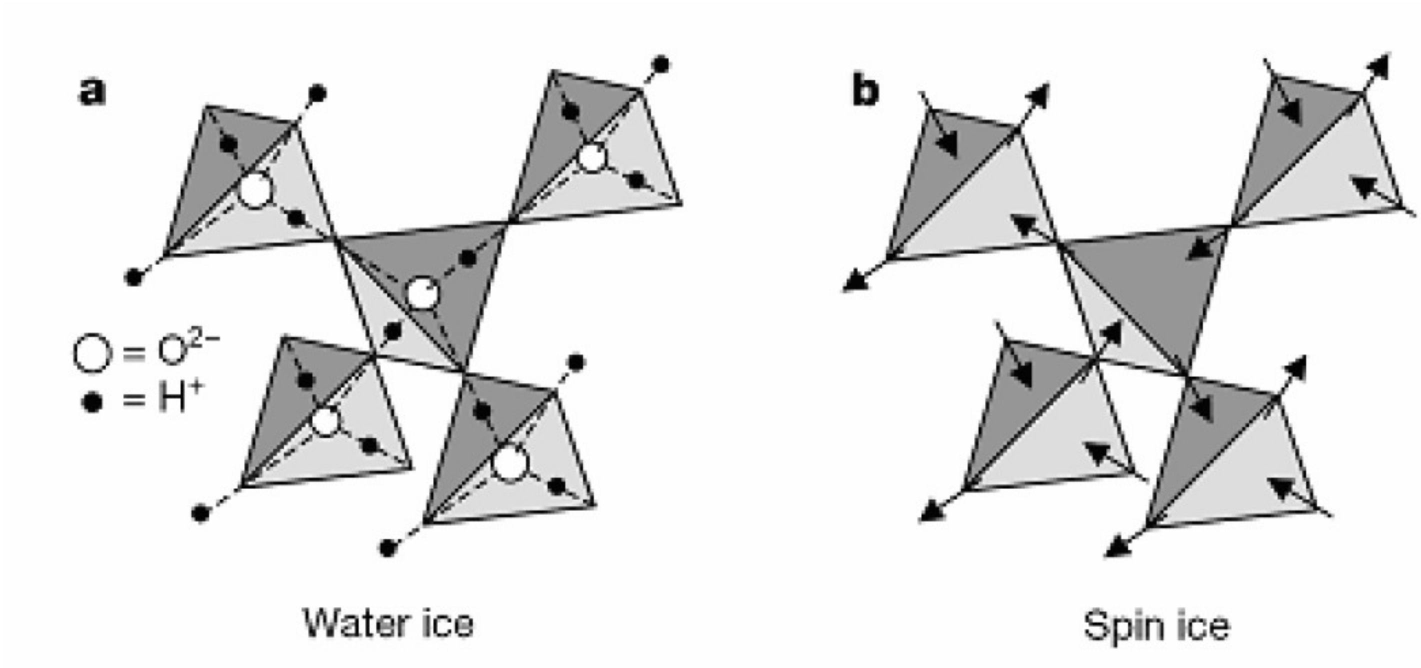
Мессбауэровские спектры квазидвумерного изинговского антиферромагнетика $KFeF_4$ вблизи темепратуры перехода (135.79К). Изменение формы спектра и сдвиги линий связаны с возникновением и величиной параметра порядка.



Зависимость от температуры сверхтонкого поля на ядре железа, измеренного методом мессбауэровской спектроскопии, от температуры для изинговских антиферромагнетиков $KFeF_4$ и $RbFeF_4$.

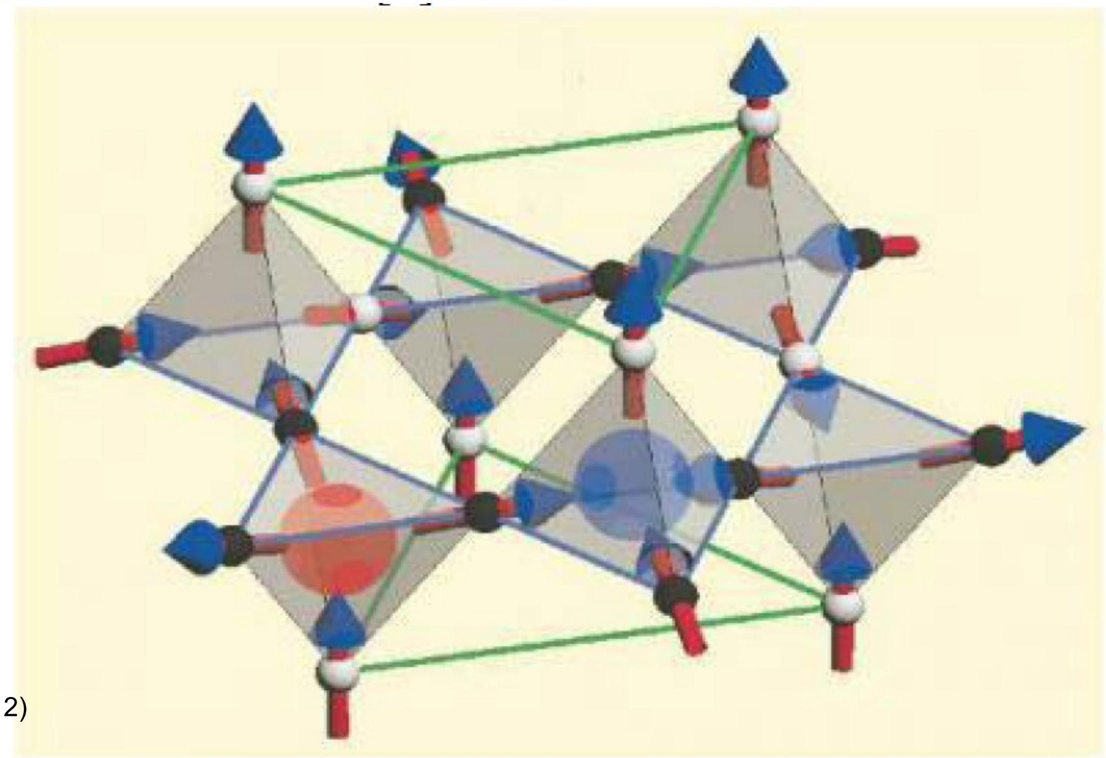
Hugo Keller and Iliia M.Savic, Moessbauer studies of the static and dynamic critical behavior of the layered antiferromagnets RbFeF4 and KFeF4, Physical Review B,28 (2638) (1983)

Трёхмерный случай: «спиновый лёд»



Аналогия между обычным льдом (слева) и изинговским ферромагнетиком на пирохлорной решётке (справа).

Образование "монополя" при перевороте спина в "спиновом льде".



$$E = J\sum_{\langle i,\, j\rangle}\vec{S}_i\vec{S}_j = J\sum_{tetr}\sum_{\langle i,\, j\rangle\subset tetr}\vec{S}_i\vec{S}_j = \frac{J}{2}\sum_{tetr}\left(S_\Sigma^2 - \sum_{i\subset tetr}S_i^2\right) = \frac{J}{2}\sum_{tetr}S_\Sigma^2 + const$$

А.Пятаков, Спиновый лёд: фрустрированное царство., Бюллетень МАГО,13 (2012)