Teoria di campo medio del modello di Heisenberg anisotropo

L. P.

28 Novembre 2005

Consideriamo un sistema di Heisenberg definito su un reticolo cubico a d dimensioni, con un termine di anisotropia. La hamiltoniana è definita da

$$H(s) = -\sum_{<ij>} J\left(s_i^x s_j^x + s_i^y s_j^y + \Delta\, s_i^z s_j^z\right) - \sum_i \vec{h}\cdot\vec{s}_i. \tag{1}$$

Si ha $s = (\vec{s}_i)$, $i = 1, \ldots, N$, $\vec{s}_i = (s_i^x, s_i^y, s_i^z)$, $(s^x)^2 + (s^y)^2 + (s^z)^2 = 1$, $\forall i$. Quando $\Delta = 1$ (e $\vec{h} = 0$) il sistema ammette la piena simmetria O(3). Altrimenti la simmetria viene rotta in $\mathrm{O}(2)\times Z_2$, dove O(2) è la simmetria di rotazione attorno all'asse z dello spin e Z_2 è l'usuale simmetria d'inversione di Ising ($s_i^z \longrightarrow -s_i^z$).

Vogliamo valutare il diagramma di fase del sistema in approssimazione di campo medio. Poniamo

$$\vec{m} = \langle \vec{s}\rangle = (\vec{\pi}, \sigma), \tag{2}$$

dove $\vec{\pi} = (\langle s^x\rangle, \langle s^y\rangle)$ e $\sigma = \langle s^z\rangle$. In funzione di $\vec{\pi}$ e di σ, l'energia interna del sistema (a $\vec{h} = 0$) è data da

$$\langle H\rangle = -\frac{NJ\zeta}{2}\left(\pi^2 + \Delta\,\sigma^2\right), \tag{3}$$

dove $\zeta = 2d$ è il numero di coordinazione del reticolo.

Per valutare l'energia libera di prova dovremmo avere l'espressione dell'entropia per spin $S(\vec{m})$ del paramagnete di Heisenberg in funzione di $\vec{m} = \langle\vec{s}\rangle$. Ora, $S(\vec{m})$ non è valutabile in forma chiusa, ma può essere facilmente graficata (vedi fig. 1). Supponiamo di fissare la direzione di $\vec{m}$ e introduciamo un campo ausiliario λ lungo questa direzione. Definiamo allora

$$f(\lambda) = \ln \int \mathrm{d}\vec{s}\; \mathrm{e}^{\vec{\lambda}\cdot\vec{s}} = \ln\left[4\pi\left(\frac{\sinh\lambda}{\lambda}\right)\right]. \tag{4}$$

La componente $m(\lambda)$ lungo questa direzione è allora data da

$$m(\lambda) = \frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}\lambda} = L_3(\lambda) = \frac{1}{\tanh\lambda} - \frac{1}{\lambda}. \tag{5}$$

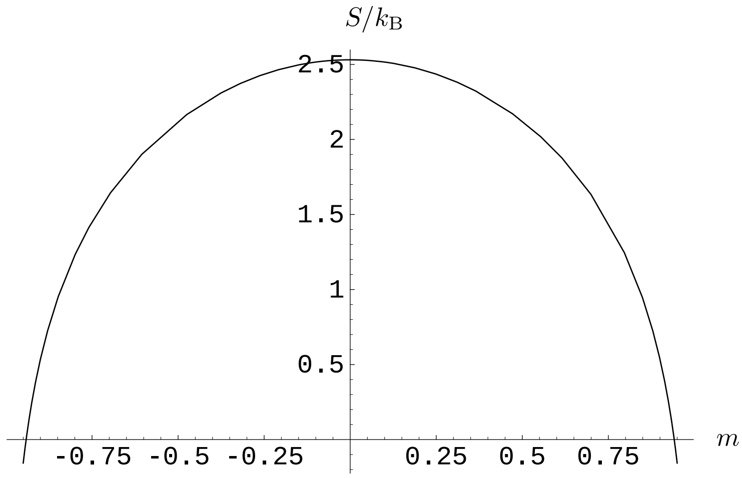

Figura 1: Entropia $S(m)$ in funzione di m per il paramagnete di Heisenberg.

Questa espressione introduce la **funzione di Langevin**

$$L_3(\lambda) = \frac{1}{\tanh\lambda} - \frac{1}{\lambda} = \frac{\lambda}{3} - \frac{\lambda^3}{45} + \cdots \tag{6}$$

Invertendo $m(\lambda)$ si ottiene $\lambda(m) = L_3^{-1}(m)$, e quindi

$$S(m) = k_\mathrm{B}\left[f(\lambda(m)) - \lambda(m)\, m\right]. \tag{7}$$

Si può quindi graficare parametricamente $S(\lambda)/k_\mathrm{B} = f(\lambda) - \lambda m(\lambda)$ in funzione di $m(\lambda)$.

Le equazioni di campo medio per $\vec{\pi}$ e σ hanno per espressione

$$\frac{\zeta J}{k_\mathrm{B}T}\pi = L_3^{-1}(\pi); \tag{8}$$

$$\frac{\zeta J\Delta}{k_\mathrm{B}T}\sigma = L_3^{-1}(\sigma). \tag{9}$$

Entrambe ammettono la soluzione banale $\pi = 0$ e $\sigma = 0$. Tuttavia la prima ammette una soluzione $\pi \neq 0$ per $T < T_\mathrm{c}^{(2)}$, dove

$$k_\mathrm{B}T_\mathrm{c}^{(2)} = \frac{\zeta J}{3}, \tag{10}$$

mentre la seconda ammette una soluzione con $\sigma \neq 0$ per $T < T_\mathrm{c}^{(1)}$, con

$$k_\mathrm{B}T_\mathrm{c}^{(1)} = \frac{\zeta J\Delta}{3}. \tag{11}$$

Se $\Delta < 1$, al diminuire di T dalle alte temperature, si incontra per prima $T_\mathrm{c}^{(2)}$, per cui $\pi \neq 0$, e l'equazione (9) non è più valida. In effetti, si può vedere che

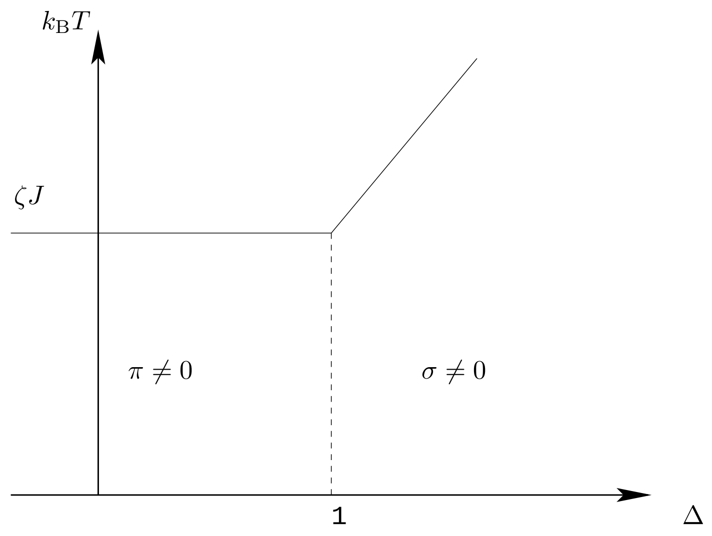

Figura 2: Diagramma di fase del modello di Heisenberg classico con anisotropia, in approssimazione di campo medio. Il punto $(\Delta = 1, k_{\mathrm{B}}T = \zeta J)$ è il punto bicritico. La linea $\Delta = 1$, $T < T_{\mathrm{c}}^{(2)}$ è una linea di transizione discontinua.

in questo caso, $\sigma = 0$ (per $\vec{h} = 0$) per tutte le temperature inferiori a $T_{\mathrm{c}}^{(2)}$. D'altra parte, per $\Delta > 1$, si ha $T_{\mathrm{c}}^{(1)} > T_{\mathrm{c}}^{(2)}$, e si ha $\sigma \neq 0$ per $T < T_{\mathrm{c}}^{(1)}$. In questo caso si ha $\vec{\pi} = 0$ per $T < T_{\mathrm{c}}^{(1)}$. Otteniamo così il diagramma di fase mostrato in figura 2. Lungo la linea $\Delta = 1$, $T < T_{\mathrm{c}}^{(2)}$, si ha coesistenza di fase, poiché la direzione del parametro d'ordine cambia con discontinuità dal piano XY all'asse z. Il punto $(\Delta = 1, k_{\mathrm{B}}T = \zeta J)$, dove si incontrano le due linee di punti critici, è chiamato **punto bicritico**.