Teoria di campo medio per l'antiferromagnete di Ising

L. P.

24 Novembre 2005

Consideriamo la hamiltoniana di Ising, definita su un reticolo cubico semplice in d dimensioni, con coefficiente di interazione $-J$, dove $J > 0$:

$$H(\sigma) = \sum_{<ij>} J\sigma_i\sigma_j - \sum_i h\sigma_i. \tag{1}$$

È ragionevole aspettarsi, in questa situazione, che gli stati di più bassa energia corrispondano a configurazioni in cui spin primi vicini puntano prevalentemente in direzioni opposte. Per descrivere questa situazione, suddividiamo il reticolo in due sottoreticoli: il sottoreticolo **pari**, in cui la somma delle coordinate (espresse in unità del passo del reticolo) è pari, e il sottoreticolo dispari. Se i appartiene, per esempio, al sottoreticolo pari, ciascuno dei suoi primi vicini apparterrà al sottoreticolo dispari. Definiamo quindi la **magnetizzazione alternata** N mediante l'espressione

$$N = \sum_i \epsilon_i\sigma_i, \tag{2}$$

dove $\epsilon_i = +1$ se i appartiene al sottoreticolo pari, e $\epsilon_i = -1$ se appartiene al sottoreticolo dispari. D'altra parte, possiamo anche considerare la magnetizzazione M, definita come al solito da

$$M = \sum_i \sigma_i. \tag{3}$$

Indichiamo con m ed n la magnetizzazione e la magnetizzazione alternata per spin:

$$m = \frac{M}{\mathcal{N}}, \qquad n = \frac{N}{\mathcal{N}}, \tag{4}$$

dove $\mathcal{N}$ è il numero totale di spin.

Desideriamo studiare il sistema in approssimazione di campo medio. Ci aspetteremo che il valor medio dello spin $\langle\sigma_i\rangle$ abbia valori diversi nei due sottoreticoli. Indichiamo con m_+ (rispettivamente m_-) questo valore per il sottoreticolo pari (rispettivamente dispari). Si ha ovviamente

$$m = \frac{m_+ + m_-}{2}; \qquad n = \frac{m_+ - m_-}{2}. \tag{5}$$

Quindi

$$m_+ = m + n; \qquad m_- = m - n. \tag{6}$$

Possiamo adesso valutare l'entropia S_0 che compare nell'espressione dell'energia libera di prova nella teoria di campo medio. Avremo $\mathcal{N}/2$ spin con magnetizzazione m_+ e altrettanti con magnetizzazione m_-. L'entropia per spin di un paramagnete con magnetizzazione x è data da

$$s(x) = -k_{\mathrm{B}} \left[\left(\frac{1+x}{2} \right) \log \left(\frac{1+x}{2} \right) + \left(\frac{1-x}{2} \right) \log \left(\frac{1-x}{2} \right) \right]. \tag{7}$$

Quindi

$$S_0 = \frac{\mathcal{N}}{2} \left[s(m_+) + s(m_-) \right] = \frac{\mathcal{N}}{2} \left[s(m+n) + s(m-n) \right]. \tag{8}$$

L'energia libera di prova, espressa in funzione di m ed n, è quindi data da

$$\mathcal{F}(m,n) = \mathcal{N} \left\{ -\frac{\zeta J n^2}{2} - hm - \frac{T}{2} \left[s(m+n) + s(m-n) \right] \right\}, \tag{9}$$

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

$$\frac{\mathrm{d}s}{\mathrm{d}x} = -k_{\mathrm{B}} \tanh^{-1} x, \tag{10}$$

possiamo ottenere le equazioni di autoconsistenza per m ed n:

$$h = \frac{k_{\mathrm{B}} T}{2} \left[\tanh^{-1}(m+n) + \tanh^{-1}(m-n) \right]; \tag{11}$$

$$\zeta J n = \frac{k_{\mathrm{B}} T}{2} \left[\tanh^{-1}(m+n) - \tanh^{-1}(m-n) \right]. \tag{12}$$

Evidentemente queste equazioni ammettono sempre la soluzione banale con $n = 0$ e con

$$m = \tanh \left(\frac{h}{k_{\mathrm{B}} T} \right). \tag{13}$$

Vediamo in quali condizioni è possibile ottenere delle soluzioni stabili con $n \neq 0$. Poiché

$$\tanh(m+n) = \tanh(m) + \frac{n}{1-m^2} + \frac{mn^2}{(1-m^2)^2} + \frac{(1+m^2)^2 n^3}{3(1-m^2)^3} + \mathrm{o}(n^3), \tag{14}$$

otteniamo

$$\frac{1}{2} \left[\tanh^{-1}(m+n) - \tanh^{-1}(m-n) \right] = \frac{n}{1-m^2} + \frac{(1+m^2)^2 n^3}{3(1-m^2)^3} + \mathrm{o}(n^3). \tag{15}$$

Quindi, per piccoli valori di n, otteniamo l'equazione

$$\left(\frac{\zeta J}{k_{\mathrm{B}} T} - \frac{1}{1-m^2} \right) n \simeq \frac{(1+m^2)^2 n^3}{3(1-m^2)^3}. \tag{16}$$

Questa equazione ammette soluzioni con n reale solo se il fattore fra parentesi a primo membro è positivo. Abbiamo quindi identificato la linea di transizione $T_c(m)$ in funzione della magnetizzazione per spin m:

$$k_B T_c(m) = (1 - m^2)\zeta J. \tag{17}$$

Vediamo che, per $m = 0$, la temperatura critica è uguale a quella del modello di Ising ferromagnetico. Però, all'aumentare di $|m|$, la temperatura tende a 0. È anche interessante considerare la linea di transizione $T_c(h)$ in funzione del campo magnetico applicato h. Poiché m, h e T sono collegati dalla (13), dobbiamo risolvere la seguente equazione in T_c:

$$k_B T_c = \left[1 - \tanh^2(h/k_B T_c)\right]\zeta J. \tag{18}$$

In realtà è molto più semplice esprimere parametricamente $T_c(m)$ tramite la (17) e $h(T_c, m)$ invertendo la (13). Si ottiene così il diagramma di fase mostrato in figura 1, in cui gli stati con $n \neq 0$ sono all'interno della curva, e le temperature sono misurate in unità $T_c(0)$. Notiamo che, se $h \neq 0$, c'è una regione in cui si ha

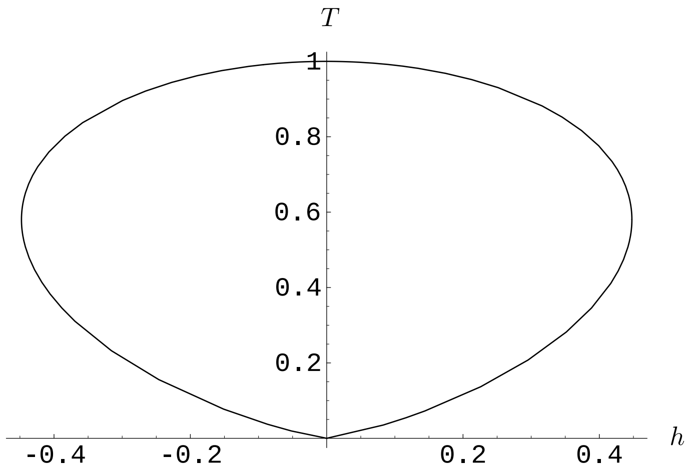

Figura 1: Diagramma di fase per l'antiferromagnete di Ising nel piano (h, T). La fase antiferromagnetica è all'interno della curva.

un comportamento rientrante della fase antiferromagnetica: si passa dalla fase disordinata alla fase antiferromagnetica abbassando la temperatura al disotto di una temperatura T_{c1}; poi però, a una temperatura $T_{c2} < T_{c1}$, il sistema ritorna nella fase disordinata.

Notiamo che l'andamento della suscettività $\chi = \partial m/\partial h$ cambia quando n diventa non nullo. per piccoli valori di $|n|$, abbiamo infatti dalla (11), tenendo conto della (14),

$$h \simeq k_B T\left[\tanh(m) + \frac{mn^2}{(1-m^2)^2}\right]. \tag{19}$$

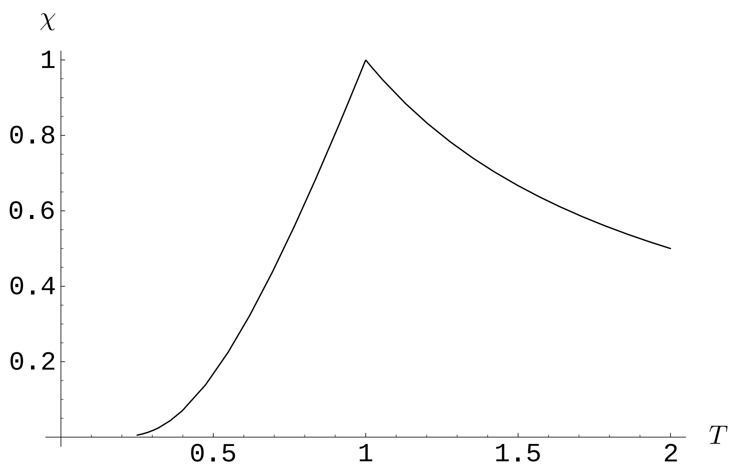

Figura 2: Suscettività magnetica $\chi = \partial m/\partial h$ in funzione di T, lungo la linea $h = 0$. La temperatura è misurata in unità di T_c.

Il secondo termine di questa equazione è proporzionale a $m\,[T_\mathrm{c}(m) - T]$ (con un coefficiente positivo). Quindi la derivata di χ rispetto a T subisce una discontinuità per $T = T_\mathrm{c}$. Per esempio, in figura 2 viene mostrata la suscettività in funzione di T lungo la linea $h = 0$. In questo caso, è facile vedere che

$$\chi = \frac{1 - n^2}{k_\mathrm{B} T}. \tag{20}$$