

ΣΕΜΦΕ ΕΜΠ 2011-2012

ΣΤΑΤΙΣΤΙΚΗ ΦΥΣΙΚΗ: Μέρος Γ

Μεταβάσεις Φάσεων -
Συμπληρώματα

Αναπλ. Καθ. Γεώργιος Βαρελογιάννης

12 Μαρτίου 2012

Κεφάλαιο 1

Μεταβάσεις Φάσεων I: Γενικότητες

Μία πολύ μικρή μεταβολή της τιμής μίας φυσικής παραμέτρου του συστήματος (π.χ. θερμοκρασία, πίεση, μαγνητικό πεδίο, κλπ...), αλλάζει ποιοτικά την κατάσταση του συστήματος. Η αλλαγή αυτή χαρακτηρίζεται από:

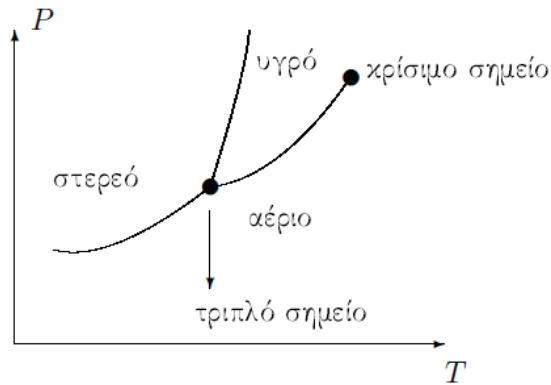
- Ποιοτικές μεταβολές των φυσικών χαρακτηριστικών του συστήματος
- Ασυνέχεια ορισμένων φυσικών ιδιοτήτων στο σημείο της μετάβασης

1.1 Διαγράμματα Φάσεων

Προσδιορίζουν τη φυσική κατάσταση στην οποία βρίσκεται το σύστημα για συγκεκριμένες τιμές των φυσικών παραμέτρων των οποίων η μεταβολή ενδεχομένως να οδηγήσει σε αλλαγή φάσης. Αρα στους άξονες των διαγραμμάτων φάσεων είναι οι τιμές των φυσικών παραμέτρων που ενδεχομένως οδηγούν στη μετάβαση φάσης (π.χ. θερμοκρασία, πίεση, μαγνητικό πεδίο, χημική πρόσμιξη, κλπ...). Ο προσδιορισμός του διαγράμματος φάσεων ενός υλικού συστήματος ειδικά στα λεγόμενα λειτουργικά υλικά αποτελεί κεντρικό στόχο της ερευνητικής μελέτης γύρω από τα υλικά αυτά. Για ορισμένες φάσεις ο προσδιορισμός τους είναι προφανής ή εύκολος ενώ για άλλες φάσεις χρειάζεται ο συνδυασμός πολύπλοκων πειραματικών τεχνικών χωρίς να είναι δεδομένο το θετικό αποτέλεσμα. Πράγματι, ακόμη και σήμερα για πολλές φάσεις εξαιρετικού ερευνητικού και τεχνολογικού ενδιαφέροντος, όπως για παράδειγμα διάφορες υπεραγωγίμες ή και μαγνητικές φάσεις σε συστήματα ισχυρά συσχετισμένων ηλεκτρονίων, δεν υπάρχει πλήρης ταυτοποίηση των φάσεων αυτών παρά την τεράστια ερευνητική προσπάθεια σε παγκόσμιο επίπεδο. Η ταυτοποίηση των φάσεων οδηγεί στα

διαγράμματα φάσεων. Το γνωστότερο όλων είναι ίσως το διάγραμμα φάσεων Πίεση - Θερμοκρασία του νερού

Διάγραμμα Φάσεων, πίεση-θερμοκρασία ($P - T$), του νερού



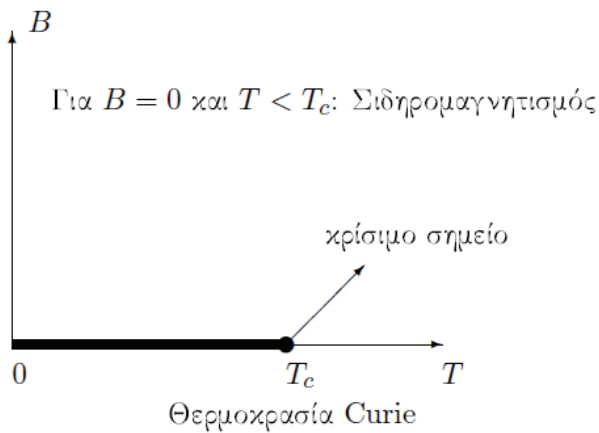
Σχήμα 1.1: Το διάγραμμα φάσεων του νερού για διάφορες τιμές πίεσης και θερμοκρασίας.

Σχεδόν για όλα τα γνωστά συστήματα μπορεί να κατασκευαστούν αντίστοιχα διαγράμματα φάσεων με πολλές φορές απρόβλεπτες μεταβάσεις φάσεων. Η σύγχρονη πειραματική τεχνολογία επιτρέπει να θέσουμε τα υλικά σε ακραίες συνθήκες πίεσης, θερμοκρασίας ή πεδίων με πολλές φορές απρόβλεπτα αποτελέσματα. Για παράδειγμα, το τόσο σημαντικό για τη ζωή μας αέριο οξυγόνο, σε εξαιρετικά υψηλές πιέσεις και χαμηλές θερμοκρασίες γίνεται όπως αναμένεται στερεό. Στη στερεά κατάσταση, παρατηρήθηκε στις χαμηλότερες θερμοκρασίες μια Υπεραγώγιμη μετάβαση !

Διάγραμμα φάσεων, μαγνητικού πεδίου - θερμοκρασίας ($B - T$), σιδηρομαγνητικής μετάβασης σε παραμαγνητικό υλικό

Σε ένα παραμαγνητικό υλικό παρατηρείται μαγνήτιση για κάθε πεπερασμένο εξωτερικό πεδίο. Χωρίς την παρουσία πεδίου, κάτω από μια κρίσιμη θερμοκρασία, είναι δυνατό να παρατηρηθεί αυθόρμητη μαγνήτιση. Εάν συμβεί αυτό έχουμε μια σιδηρομαγνητική μετάβαση η κρίσιμη θερμοκρασία της οποίας ονομάζεται θερμοκρασία *Curie*.

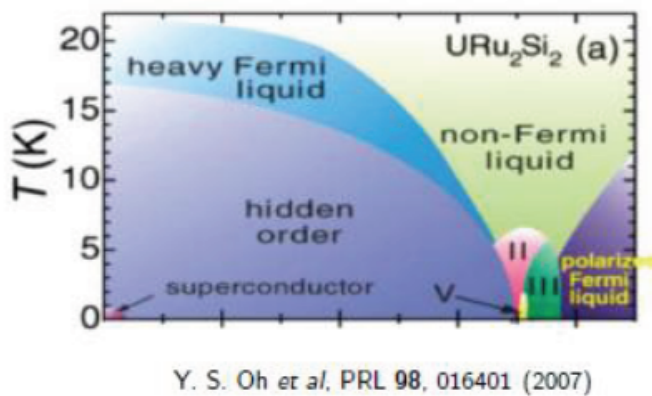
Μόνον στην περιοχή της πλατειάς γραμμής έχουμε τη σιδηρομαγνητική φάση,



Σχήμα 1.2: Διάγραμμα πεδίου - Θερμοκρασίας ενός παραμαγνήτη.

ενώ θερμοκρασία *Curie* ονομάζεται η κρίσιμη θερμοκρασία της σιδηρομαγνητικής μετάβασης.

Διάγραμμα μαγνητικού πεδίου - θερμοκρασίας ($B - T$), για το URu_2Si_2 .



Σχήμα 1.3: Διάγραμμα φάσεων του URu_2Si_2 για διάφορες τιμές του μαγνητικού πεδίου και της θερμοκρασίας. Κάθε περιοχή με διαφορετική χρωματική απόχρωση αντιστοιχεί σε μια διαφορετική φάση του συστήματος. Κάθε μικρό (μεγάλο) σημάδι στον οριζόντιο άξονα αντιστοιχεί σε μαγνητικό πεδίο 5 T (10 T).

Είναι ένα παράδειγμα πολύπλοκου διαγράμματος φάσεων σε συστήματα ισχυρά συσχετισμένων ηλεκτρονίων, η κατανόηση των οποίων αποτελεί αντικείμενο εντονότατης ερευνητικής προσπάθειας στις μέρες μας. Επι της ουσίας καμμία από τις φάσεις που εμφανίζονται στο διάγραμμα αυτό δεν έχει ταυτοποιηθεί πλήρως ενώ μερικές είναι απολύτως άγνωστες. Περιέχοντας Ουράνιο και άρα ηλεκτρόνια τύπου f , το υλικό αυτό ονομάζεται υλικό βαρέων φερμιονίων όπου η ενεργή μάζα των φορέων του ηλεκτρικού φορτίου είναι ακόμη και εκατό φορές μεγαλύτερη από αυτή του ηλεκτρονίου. Πολλά από τα υλικά της κατηγορίας αυτής εμφανίζουν πολύπλοκα διαγράμματα φάσεων με μη συμβατικές υπεραγωγικές φάσεις. Μάλιστα το καθαρό πλουτώνιο αποδείχτηκε πρόσφατα ένας εξαιρετικά καλός υπεραγωγός!

1.2 Κατηγοριοποίηση των Μεταβάσεων Φάσεων

1.2.1 Κατηγοριοποίηση *Ehrenfest*

Θεωρούμε το θερμοδυναμικό δυναμικό:

$$\mathcal{G} = U - TS + PV. \quad (1.2.1)$$

Ο Ehrenfest πρότεινε να ονομάζονται, μεταβάσεις **1^{ης} τάξης**, οι μεταβάσεις που συνοδεύονται από ασυνέχειες στις φυσικές ποσότητες (όπως η εντροπία) που σχετίζονται με τις πρώτες παραγώγους του θερμοδυναμικού δυναμικού \mathcal{G} . Αντίστοιχα, οι μεταβάσεις που συνοδεύονται από ασυνέχειες στις φυσικές ποσότητες (όπως η ειδική θερμότητα) που σχετίζονται με τις δεύτερες παραγώγους του θερμοδυναμικού δυναμικού \mathcal{G} , πρότεινε να ονομάζονται, μεταβάσεις **2^{ης} τάξης**.

Γενικά:

Αν όλες οι παράγωγοι $n - 1$ τάξης του θερμοδυναμικού δυναμικού \mathcal{G} είναι συνεχείς και η παράγωγος n τάξης ασυνεχής, η μετάβαση θα είναι τάξης n .

1.2.2 Κατηγοριοποίηση *Landau*

Το 1937, ο Landau παρατήρησε ότι το πέρασμα από μία φάση σε μία άλλη, χωρίς λανθάνουσα θερμότητα (latent heat), συνοδεύεται από μία **αλλαγή της συμμετρίας**. Ο Landau εισήγαγε την έννοια της **παραμέτρου τάξης** η οποία είναι η φυσική ποσότητα που θα μπορούσε να χαρακτηρίζει την αλλαγή της συμμετρίας που συμβαίνει στο σημείο της μετάβασης. Η παράμετρος τάξης, είναι μία προσθετική φυσική ιδιότητα του συστήματος, η οποία είναι

μηδέν στην πιο συμμετρική φάση και μη μηδενική στη λιγότερο συμμετρική φάση.

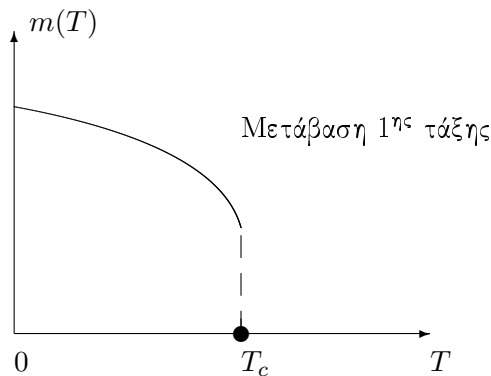
Παράμετρος Τάξης \Rightarrow Σπάσιμο Συμμετρίας

Με την έννοια των παραμέτρων τάξης, δίνεται η ακόλουθη κατηγοριοποίηση των μεταβάσεων φάσης:

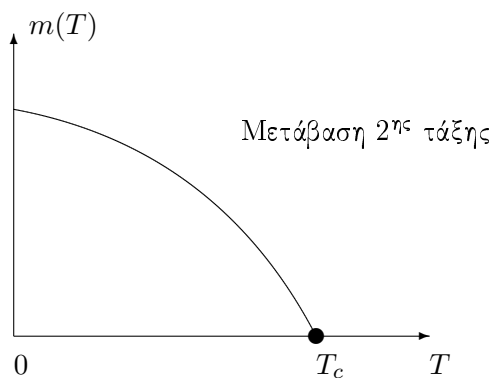
- **Μεταβάσεις χωρίς παράμετρο τάξης**
Οι ομάδες συμμετρίας των δύο φάσεων είναι τέτοιες, ώστε καμία δεν είναι περιεχόμενη στην άλλη.
- **Μεταβάσεις με παράμετρο τάξης**
Η ομάδα συμμετρίας της λιγότερο συμμετρικής κατάστασης (κατάσταση τάξης), είναι υποομάδα της ομάδας συμμετρίας της πιο συμμετρικής κατάστασης (κατάσταση αταξίας).

Σύμφωνα με τον Landau ξαναβρίσκουμε την κατηγοριοποίηση του Ehrenfest μόνο που ισχύουν επιπλέον τα ακόλουθα:

- Εάν η παράμετρος τάξης είναι ασυνεχής στο σημείο της μετάβασης, τότε έχουμε μετάβαση 1^{ης} τάξης. Σε αυτήν την περίπτωση μπορούμε να έχουμε συνύπαρξη φάσεων στην κρίσιμη θερμοκρασία (T_c).



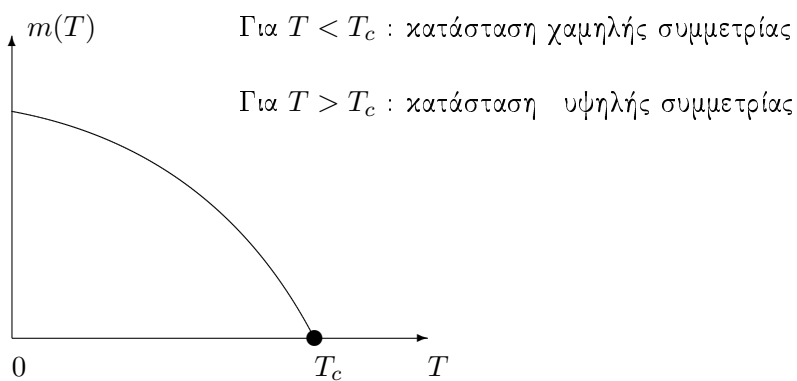
- Εάν η παράμετρος τάξης είναι συνεχής στο σημείο της μετάβασης, τότε έχουμε μετάβαση 2^{ης} τάξης. Σε αυτήν την περίπτωση δεν μπορούμε να έχουμε συνύπαρξη φάσεων στην κρίσιμη θερμοκρασία (T_c).



1.3 Γενικότητες για το πρότυπο *Landau*

Υπόθεση: Η ελεύθερη ενέργεια είναι αναλυτική συνάρτηση της παραμέτρου τάξης.

Η συναρτησιακή δομή της ελεύθερης ενέργειας μπορεί να προκύψει από τις ιδιότητες συμμετρίας της πιο συμμετρικής φάσης (φάση υψηλής θερμοκρασίας).



Οι ιδιότητες του συστήματος, προκύπτουν από την ελαχιστοποίηση της ελεύθερης ενέργειας, ως προς την παράμετρο τάξης.

Θα δούμε στη συνέχεια στα πλαίσια μιας εφαρμογής, στην απλή προσέγγιση

μέσου πεδίου για μια μετάβαση δεύτερης τάξεως, πως προκύπτει στα πλαίσια του πρότυπου Landau η κρίσιμη συμπεριφορά της κλάσης καθολικότητας του Μέσου Πεδίου.

- Η παράμετρος τάξης $M(T)$, παίρνει μικρές τιμές κοντά στην κρίσιμη θερμοκρασία (T_c), και υπακούει στη σχέση:

$$M(T) \sim (T_c - T)^{1/2}. \quad (1.3.1)$$

- Η ειδική θερμότητα είναι ασυνεχής στην κρίσιμη θερμοκρασία.
- Η επιδεικτικότητα που σχετίζεται με την παράμετρο τάξης, κοντά στην κρίσιμη θερμοκρασία, υπακούει στη σχέση:

$$\chi(T) \sim (T_c - T)^{-1} \quad (1.3.2)$$

Τα παραπάνω αποτελέσματα είναι ίδια με αυτά της προσέγγισης μέσου ή μοριακού πεδίου του Weiss στη χαμιλτονιανή του Heisenberg για το σιδηρομαγνητισμό.

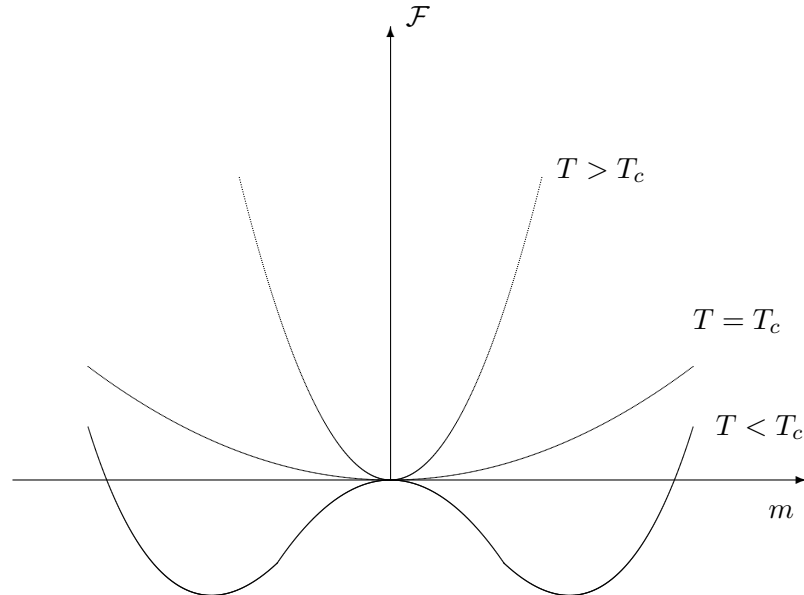
1.3.1 Πρότυπο Landau και τάξη των μεταβάσεων

Θεωρούμε μία μετάβαση η οποία εξαρτάται από τη θερμοκρασία T και χαρακτηρίζεται από την παράμετρο τάξης $m(x)$. Η ελεύθερη ενέργεια \mathcal{F} εξαρτάται από τις παραμέτρους T και m . Οι καταστάσεις ισορροπίας του συστήματος, δίνονται από τα ακρότατα της \mathcal{F} :

$$\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial m(x)} = 0. \quad (1.3.3)$$

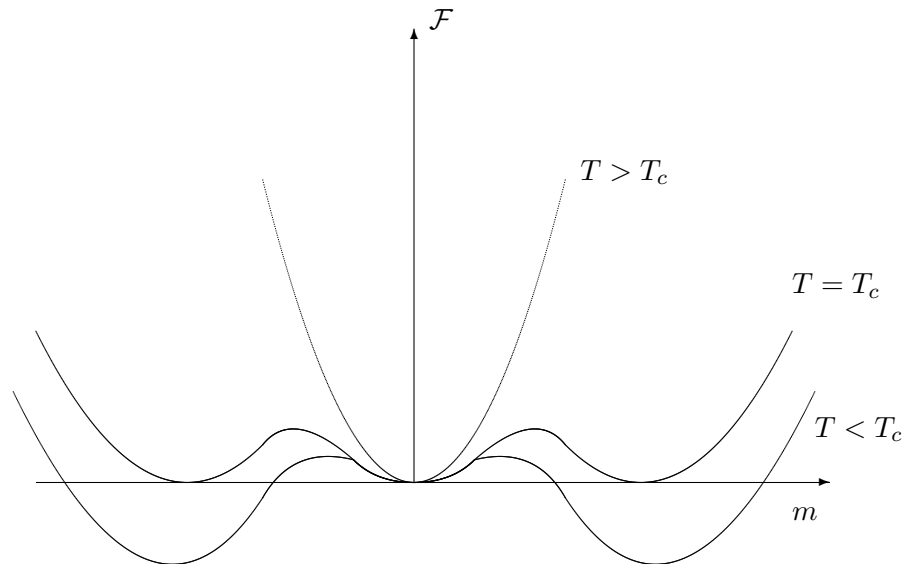
Έχουμε δύο οικογένειες από γραφήματα της συναρτησιακής της ελεύθερης ενέργειας.

- Μεταβάσεις Δεύτερης Τάξης



- Για $T > T_c$ έχουμε $\frac{\partial^2 \mathcal{F}}{\partial m^2} |_{m=0} > 0$ (κοίλα προς τα πάνω). Η θέση ελαχίστου της ελεύθερης ενέργειας, βρίσκεται για $m=0$. Παραμαγνητική Φάση.
- Για $T < T_c$ έχουμε $\frac{\partial^2 \mathcal{F}}{\partial m^2} |_{m=0} < 0$ (κοίλα προς τα κάτω). Έχουμε δύο θέσεις ελαχίστων της ελεύθερης ενέργειας, $m_1 \neq 0, m_2 \neq 0$. Σιδηρομαγνητική Φάση-Αυθόρμητη Μαγνήτιση.
- Για $T = T_c$ έχουμε $\frac{\partial^2 \mathcal{F}}{\partial m^2} |_{m=0} = 0$.

- Μεταβάσεις Πρώτης Τάξης

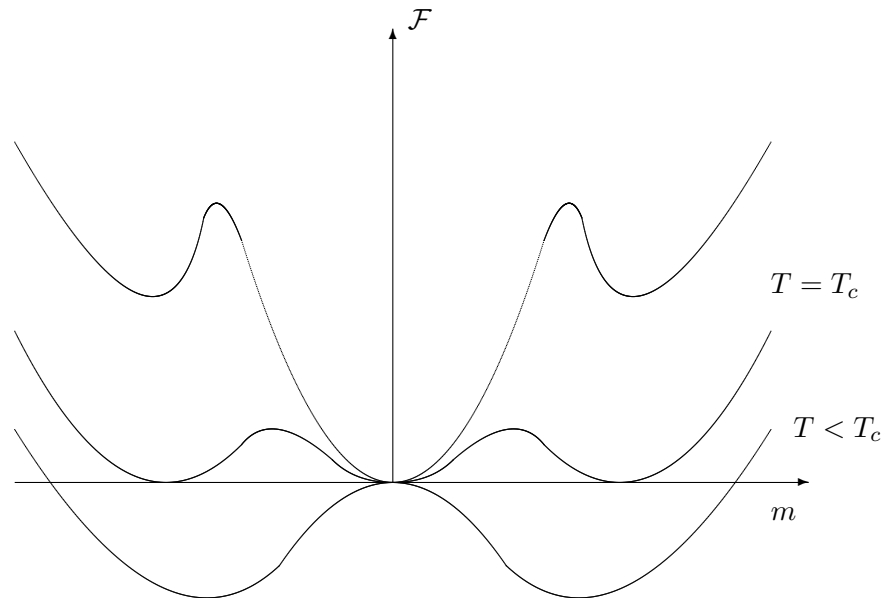


- Για $T > T_c$ έχουμε ελάχιστο της ελεύθερης ενέργειας για $m_0 = 0$. Παραμαγνητική Φάση.
- Για $T = T_c$ έχουμε ελάχιστο της ελεύθερης ενέργειας στα σημεία $m_0 = 0, m_1 > 0, m_2 < 0$. Συνύπαρξη των δύο φάσεων.
- Για $T < T_c$ έχουμε ελάχιστο της ελεύθερης ενέργειας για $m_1 > 0$ και $m_1 < 0$. Σιδηρομαγνητική Φάση.

Στα πλαίσια της θεωρίας Landau, τουλάχιστο κοντά στο T_c , προσπαθούμε να γράψουμε την ελεύθερη ενέργεια σαν ένα πολυώνυμο και μένουμε στις κατώτερες δυνατές δυναμείς που είναι συμβατές με τη συμμετρία της πιο συμμετρικής κατάστασης. Ικανή συνθήκη για να έχουμε μεταβάσεις πρώτης τάξης, είναι η ύπαρξη ενός όρου m^3 στο ανάπτυγμα της ελεύθερης ενέργειας. Η ύπαρξη του όρου m^3 , μπορεί να καθοριστεί χρησιμοποιώντας επιχειρήματα συμμετρίας.

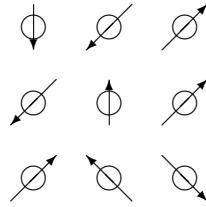
Για παράδειγμα, στη σιδηρομαγνητική μετάβαση, έχουμε σαν παράμετρο τάξης τη μαγνήτιση. Στην κανονική κατάσταση, το σύστημα χαρακτηρίζεται από τη συμμετρία αντιστροφής του χρόνου, ή ισοδύναμα είναι αναλλοίωτη από τη συμμετρία $m \rightarrow -m$. Είναι επόμενο σε αυτήν την περίπτωση να μην έχουμε περιττές δυνάμεις της m στο ανάπτυγμα της \mathcal{F} . Συνεπώς, αναμένουμε η σιδηρομαγνητική μετάβαση να μπορεί να είναι δεύτερης τάξης όμως δεν είναι σίγουρα δεύτερης τάξης.

Η μη ύπαρξη του όρου m^3 είναι απαραίτητη αλλά όχι και ικανή συνθήκη για να έχουμε μετάβαση δεύτερης τάξης. Σε περίπτωση που ο όρος m^4 , έχει αρνητικό πρόσημο, μπορούμε να έχουμε μετάβαση πρώτης τάξης. Σε αυτήν την περίπτωση, η γραφική παράσταση έχει τη μορφή:



1.4 Γενικότητες για την προσέγγιση Μέσου Πεδίου του *Weiss*

Για να προκύψει η σιδηρομαγνητική μετάβαση φάσης, θα πρέπει με κάποιο τρόπο να αλληλεπιδρούν οι μαγνητικές ροπές ώστε να γίνουν αυθόρμητα παράλληλες. Θεωρώντας για παράδειγμα ένα τετραγωνικό πλέγμα σπιν \vec{S}_i , τα οποία μπορούν να αλληλεπιδρούν μεταξύ τους.



Η Χαμιλτονιανή αλληλεπίδρασης των σπιν ονομάζεται χαμιλτονιανή *Heisenberg*, και εκφράζεται μέσω της σχέσης:

$$H = \sum_{i,j} J_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \quad (1.4.1)$$

Το συγκεκριμένο πρόβλημα, αποτελεί ένα πρόβλημα **πολλών σωμάτων** (πρόβλημα πολλών βαθμών ελευθερίας σε αλληλεπίδραση). Τέτοια προβλήματα εν γέννηι **δεν μπορούμε να τα επιλύσουμε ακριβώς**. Γι'αυτό το λόγο κάνουμε κάποιες προσεγγίσεις. Η πρώτη προσέγγιση, είναι η παραδοχή ότι το κάθε σπιν βρίσκεται σε ένα ιδεατό **μέσο πεδίο** το οποίο αναπαριστά την επίδραση των υπόλοιπων σπιν (προσέγγιση Weiss). Με αυτή την προσέγγιση το πρόβλημα απλουστεύεται, αφού η Χαμιλτονιανή έχει τώρα την παραμαγνητική μορφή:

$$H = \sum_i \vec{m} \cdot \vec{S}_i \quad (1.4.2)$$

όπου \vec{m} το μέσο πεδίο. Πέρασαμε από ένα πρόβλημα πολλών σωμάτων σε αλληλεπίδραση σε ένα πρόβλημα ανεξάρτητων σωμάτων υπό την επήρεια ενός εξωτερικού πεδίου. Με τη μέθοδο του μέσου πεδίου, δεν λαμβάνονται υπόψη οι διακυμάνσεις του συστήματος στο χώρο, στο χρόνο ή και στα δύο.

1.5 Σπάσιμο Συμμετρίας

Υπάρχουν δύο βασικοί τρόποι να σπάσει μία συμμετρία ενός συστήματος:

Υδροδυναμικές αστάθειες

Σε αυτήν την περίπτωση έχουμε δυναμικό σπάσιμο της συμμετρίας *dynamic symmetry breaking*. Τα συστήματα βρίσκονται εκτός ισορροπίας όπως για παράδειγμα συμβαίνει κατά τη διάρκεια διαφόρων μετεωρολογικών φαινομένων. Τα συγκεκριμένα συστήματα, περιγράφονται για παράδειγμα από τη θεωρία καταστροφών του Thom. Δεν αναφερόμαστε στα συστήματα αυτά.

Αυθόρμητο Σπάσιμο Συμμετρίας

Είναι η περίπτωση που μας ενδιαφέρει. Πρόκειται για συστήματα σε ισορροπία στα οποία είναι δυνατό να σπάσουν συμμετρίες στα πλαίσια μιας μετάβασης. Συνήθεις συμμετρίες που μπορεί είναι:

- Συμμετρία μετατόπισης στο χώρο
- Συμμετρία περιστροφής στο χώρο
- Συμμετρία αντιστροφής του χρόνου
- Συμμετρίες που σχετίζονται με την κρυσταλλική δομή του υπό μελέτη συστήματος

Η ομοιογένεια και η ισοτροπία του χώρου σπάνε όταν περνάμε, από το υγρό ή το αέριο, στο στερεό. Η ομοιογένεια του χώρου σπάει κατά τη σιδηρομαγνητική μετάβαση. Όλες οι κατευθύνσεις δεν είναι ισοδύναμες εφόσον οι μαγνητικές ροπές επιλέξουν μια κατεύθυνση στο χώρο. Η συμμετρία αντιστροφής του χρόνου $t \rightarrow -t$ σπάει εφόσον οι εξισώσεις που περιγράφουν ένα σύστημα δεν παραμένουν αναλλοίωτες στο προηγούμενο μετασχηματισμό $t \rightarrow -t$. Κλασικό παράδειγμα συστημάτων που σπάνε τη συμμετρία αντιστροφής του χρόνου, είναι οι σιδηρομαγνήτες. Σε ένα τέτοιο σύστημα η παρουσία της μαγνήτισης επιβάλλει σε ένα φορτίο τη δύναμη Lorentz η οποία αλλάζει πρόσημο εφόσον αντιστραφεί η φορά της κίνησης ενός φορτίου (αντιστραφεί ο χρόνος). Πέραν από τις παραπάνω συμμετρίες είναι δυνατό να σπάσουν και οι λεγόμενες **Συμμετρίες Βαθμίδας**, οι οποίες αντιστοιχούν σε γενικευμένα φορτία. Για παράδειγμα, η διατήρηση του ηλεκτρικού φορτίου επιβάλλει στην κβαντομηχανική, ότι στο κομμάτι των αλληλεπιδράσεων της Χαμιλτονιανής θε υπεισέρχεται η κυματοσυνάρτηση επί τη συζυγή της (απόλυτη τιμή στο τετράγωνο). Δηλαδή $\Psi^* \Psi = \text{πυκνότητα}$. Αρα υπάρχει ελευθερία στην επιλογή της φάσης της κυματοσυνάρτησης δεδομένου ότι

$$\Psi = |\Psi| e^{-i\eta} \text{ και } \Psi^* \Psi = |\Psi|^2 e^{-i\eta} e^{i\eta} = |\Psi|^2 \quad (1.5.1)$$

όπου η η φάση. Από τα παραπάνω είναι φανερό ότι δε μας ενδιαφέρει η φάση της κυματοσυνάρτησης, αφού απαλείφεται από το γινόμενο $\Psi^* \Psi$. Άρα υπάρχει ελευθερία στην επιλογή της φάσης της κυματοσυνάρτησης η οποία αναπαριστά τη συμμετρία βαθμίδας που αντιστοιχεί στη διατήρηση του ηλεκτρικού φορτίου. Η συγκεκριμένη συμμετρία ονομάζεται Καθολική Συμμετρία Βαθμίδας (Global Gauge Symmetry). Στην περίπτωση της υπεραγωγιμότητας, ο Landau κατάφερε να ταυτοποιήσει την παράμετρο τάξης σαν μια μακροσκοπική κυματοσυνάρτηση με συγκεκριμένη φάση. Δεδομένου ότι η κυματοσυνάρτηση αυτή

προκύπτει από την υπέρθεση των κυματοσυναρτήσεων όλων των φορέων, θα πρέπει όλες αυτές να είναι σε φάση ώστε το άθροισμά τους να είναι μια κυματοσυνάρτηση. Αρα δεν υπάρχει πλέον ελευθερία στην επιλογή της φάσης σπάζοντας τη συμμετρία βαθμίδος.

1.6 Γενικότητες για το Πρότυπο *Ising*

Το πρότυπο (ή μοντέλο) *Ising*, ανήκει στα συστήματα που περιγράφονται από μία Χαμιλτονιανή της μορφής (1.4.1) αλλά εξαιρετικά απλουστευμένη. Η ξαμιλτονιανή του μοντέλου *Ising*, έχει τόσο απλή μορφή ώστε μοντέλο *Ising* να είναι επιλύσιμο στη μία και στις δύο διαστάσεις. Στη μία διάσταση το μοντέλο επιλύθηκε στις αρχές του προηγούμενου αιώνα όμως δεν προέκυψε κάποιο ενδιαφέρων αποτέλεσμα. Πράγματι, το μονοδιάστατο σύστημα δεν παρουσιάζει κάποια μετάβαση φάσης ή κατάσταση τάξης, και αυτό λόγω της χαμηλής του διαστατικότητας. Όσο χαμηλότερη η διάσταση τόσο σημαντικότερες είναι οι διακυμάνσεις και τόσο δυσκολότερο είναι να επιτευχθεί μια κατάσταση τάξης. Το αντίστοιχο διδιάστατο μοντέλο είναι πολύ πιο δύσκολο και επιλύθηκε αργότερα από τον Onsager παρουσιάζοντας πράγματι μια μετάβαση φάσης. Το διδιάστατο μοντέλο παρουσιάζει την ακόλουθη κρίσιμη συμπεριφορά:

- Παράμετρος τάξης: $m \sim (T - T_c)^{1/8}$.
- Ειδική Θερμότητα: $C_v \sim \ln(T - T_c)$.
- Επιδεκτικότητα: $\chi \sim (T_c - T)^{7/4}$.

Παρατηρούμε ότι αυτή η κρίσιμη συμπεριφορά διαφέρει από αυτή που βρήκαν ο *Weiss* και ο *Landau* με την προσέγγιση μέσου πεδίου. Θα δούμε στην επόμενη παράγραφο ότι το πρότυπο *Ising* στις δύο διαστάσεις ορίζει μέσω των παραπάνω εκθετών μία **κλάση καθολικότητας** διαφορετική από αυτή του Μέσου Πεδίου.

1.7 Γενικότητες για τα Κρίσιμα Φαινόμενα

Είδαμε ότι η ακριβής λύση του προτύπου *Ising* στις 2-διαστάσεις οδήγησε σε διαφορετική κρίσιμη συμπεριφορά από αυτή της προσέγγισης μέσου πεδίου. Η προσέγγιση μέσου πεδίου δεν λαμβάνει υπόψη της διακυμάνσεις της παραμέτρου τάξης. Για να περιγράψουμε την κρίσιμη συμπεριφορά, ορίζουμε τους παρακάτω **κρίσιμους εκθέτες**:

- **Ειδική θερμότητα**

$$C \sim (T - T_c)^{-\alpha'} \quad T < T_c \quad (1.7.1)$$

$$C \sim (T_c - T)^\alpha \quad T > T_c \quad (1.7.2)$$

- **Παράμετρος τάξης**

$$m \sim (T_c - T)^\beta \quad (1.7.3)$$

- **Επιδεκτικότητα**

$$\chi \sim (T_c - T)^{-\gamma'} \quad T < T_c \quad (1.7.4)$$

$$\chi \sim (T_c - T)^\gamma \quad T > T_c \quad (1.7.5)$$

και άρα για το πρότυπο *Ising* στις δύο διαστάσεις έχουμε

$$\alpha = \alpha' = 0 \quad (1.7.6)$$

$$\gamma = \gamma' = 7/4 \quad (1.7.7)$$

$$\beta = 1/8 \quad (1.7.8)$$

Έχουμε μεγάλο αριθμό μεταβάσεων φάσεων οι οποίες παρόλο που μπορεί να αφορούν εντελώς διαφορετικές φυσικές καταστάσεις χαρακτηρίζονται από **μία συγκεκριμένη ομάδα τιμών των κρίσιμων εκθετών**. Οι ομάδες τιμών που έχουν παρατηρηθεί είναι λίγες (της τάξης ≈ 10) ενώ βέβαια οι μεταβάσεις που έχουμε καταγράψει είναι χιλιάδες. Κάθε συγκεκριμένη ομάδα τιμών των κρίσιμων εκθετών ονομάζεται **κλάση καθολικότητας**. Εντελώς διαφορετικές μεταβάσεις μπορεί λοιπόν να επιδεικνύουν ακριβώς την ίδια κρίσιμη συμπεριφορά ανήκοντας στην ίδια κλάση καθολικότητας.

Η κατανόηση της κρίσιμης συμπεριφοράς των μεταβάσεων φάσεων και των κλάσεων καθολικότητας αποτελεί από μόνο του ένα δραστήριο κλάδο της Στατιστικής Φυσικής ο οποίος είναι πέρα από το περιεχόμενο του μαθήματος. Σχηματικά οι υποθέσεις που βοήθησαν να κατανοήσουμε την ύπαρξη την ύπαρξη των κλάσεων καθολικότητας (τις συγκεκριμένες σχέσεις ανάμεσα στους κρίσιμους εκθέτες) είναι:

Υπόθεση ομοιογένειας του Widom: Σύμφωνα με τη συγκεκριμένη υπόθεση, ο χώρος θα πρέπει να είναι ομοιογενής τη στιγμή της μετάβασης.

$$\mathcal{F}(T, m) = (T - T_c)^{2-\alpha} f\left(\frac{m}{(T - T_c)^\beta}\right) \quad (1.7.9)$$

Υπόθεση της ομοιότητας (ως προς την κλίμακα) του Kadonoff: Διαιρώντας για παράδειγμα το σύστημα των σπίν στο πλέγμα σε τεμάχια ίδιου

μεγέθους blocks , μπορούμε να υποθέσουμε ότι σε κάθε block έχουμε ένα σπιν το οποίο είναι ο μέσος όρος όλων των σπιν του block. Επαλαμβάνοντας την ίδια μέθοδο, για όλα τα blockστα οποία έχει διαμεριστεί το πλέγμα μπορούμε να πάρουμε τις Σχέσεις Κλίμακας, δηλαδή τις σχέσεις μεταξύ των κρίσιμων εκθετών.

Το 1972, ο **Wilson** έδειξε ότι μπορούμε να εκφρασθούν κρίσιμοι εκθέτες σαν ανάπτυγμα του $\epsilon = 4 - d$, όπου d ο αριθμός των διαστάσεων. Μπορούμε να κάνουμε αναπτύγματα ως προς ϵ κάτι που οδήγησε στον ορισμό της **Ομάδας Επανακανονικοποίησης** για το οποίο του απονεμήθηκε το βραβείο Nobel δεδομένου ότι επέτρεψε τη συστηματοποίηση της μελέτης της κρίσιμης συμπεριφοράς.

Κεφάλαιο 2

Δύο Κλασσικά Προβλήματα Λυμένα

2.1 ΠΡΩΤΟ ΠΡΟΒΛΗΜΑ: Μελέτη μιας κατάστασης τάξεως με τη βοήθεια της θεωρίας *Landau*

Θεωρούμε ένα μονοδιάστατο πρόβλημα. Μέσα στα πλαίσια της θεωρίας *Landau* για τις μεταβάσεις τάξεως γράφουμε την ελεύθερη ενέργεια υπο την ακόλουθη μορφή:

$$F = \int f(x) dx \quad (1)$$

όπου η πυκνότητα ελεύθερης ενέργειας $f(x)$ δίνεται απο τη σχέση

$$f(x) = f_o(T) + a(T)M^2(x) + b(T)M^4(x) + c(T)(\nabla M)^2 - BM(x) \quad (2)$$

Μέσα στο πνεύμα της θεωρίας *Landau*, η οποία είναι μια θεωρία μέσου πεδίου, η ποσότητα $M(x)$ είναι μια μή διακυμαινόμενη ποσότητα που συμπίπτει με τη μέση τιμή της $\langle M \rangle$. $f_o(T)$ είναι η πυκνότητα ελεύθερης ενέργειας στην κανονική κατάσταση. B είναι το συζηγές πεδίο της παραμέτρου τάξης M . Οι συντελεστές b και c είναι θετικοί και κοντά στη μετάβαση έχουν μηδαμινή εξάρτηση απο τη θερμοκρασία.

Κοντά στο T_c , υποθέτουμε ότι $a(T)$ υπακούει στο ανάπτυγμα *Taylor*:

$$a(T \approx T_c) = a'(T - T_c) + \dots \quad (3)$$

όπου $a' > 0$.

I) Η πιο πιθανή τιμή της παραμέτρου τάξης είναι αυτή που ελαχιστοποιεί την ελεύθερη ενέργεια F . Κάνοντας μια συναρτησιακή μεταβολή:

$$M(x) \rightarrow M(x) + \delta M(x) \quad (4)$$

με $\delta M(x) = 0$ στο **άπειρο**, βρείτε την εξίσωση που μας δίνει αυτή την πιο πιθανή τιμή.

II) Στην περίπτωση κατά την οποία B είναι ανεξάρτητο του x (επίσης M είναι ανεξάρτητο του x) να βρείτε το M που ελαχιστοποιεί την Ελεύθερη ενέργεια. Βρείτε τους κρίσιμους εκθέτες δ , β και γ οι οποίοι είναι τέτοιοι ώστε εάν $t = (T - T_c)/T_c$ να ισχύει:

II.a. Αμέσως κάτω από το T_c η αυθόρμητη μαγνήτιση (χωρίς την εφαρμογή μαγνητικού πεδίου) να δίνεται από τη σχέση

$$M \approx |t|^\beta \quad (5)$$

II.b. Ακριβώς στο $T = T_c$, συναρτήσει του μαγνητικού πεδίου η μαγνήτιση να δίνεται από τη σχέση

$$M \approx B^{1/\delta} \quad (6)$$

II.c. Κοντά στο T_c :

$$\chi(0, T) = \left[\frac{\partial M}{\partial B} \right]_{B=0} \approx |t|^{-\gamma} \quad (7)$$

II.d. Ποιό είναι το άλμα ΔC της ειδικής θερμότητας στο $T = T_c$;

Με τις ίδιες υποθέσεις όπως πιο πάνω, θεωρούμε στη συνέχεια μια ανομοιογενή κατάσταση. Η μαγνήτιση μπορεί να μεταβάλλεται στο μονοδιάστατο χώρο. Ορίζουμε τη **συνάρτηση συσχετισμού** $C(x, x')$ ανάμεσα στην τιμή της μαγνήτισης σε δύο διαφορετικά σημεία του χώρου x και x' από τη σχέση

$$C(x, x') = \langle M(x)M(x') \rangle - \langle M(x) \rangle \langle M(x') \rangle \quad (1)$$

Εάν οι $M(x)$ και $M(x')$ ήταν ανεξάρτητες τότε προφανώς $\langle M(x)M(x') \rangle = \langle M(x) \rangle \langle M(x') \rangle$ και άρα $C(x, x')$ μετράει το βαθμό συσχετισμού των μαγνητικών ροπών στο χώρο. Ορίζουμε επίσης μια γενικευμένη επιδεικτικότητα $\chi(x, x')$

$$\chi(x, x') = \frac{\partial \langle M(x) \rangle}{\partial B(x')} \quad (2)$$

III) Να δείξετε ότι ισχύει η σχέση:

$$C(x, x') = k_B T \chi(x, x') \quad (3)$$

2.1. ΠΡΩΤΟ ΠΡΟΒΛΗΜΑ: Μελέτη μιας κατάστασης τάξεως με τη βοήθεια της θεωρίας Landau21

IV) Η συνάρτηση συσχετισμού υπακούει στη σχέση:

$$\left[2a + 12b\langle M \rangle^2 - 2c\Delta\right]C(x, x') = k_B T \delta(x - x') \quad (4)$$

όπου Δ είναι ο λαπλασιανός τελεστής. Γιατί ;

Να λύσετε την (4) στο χώρο *Fourier* και να ορίσετε το μήκος συσχετισμού ξ πάνω και κάτω από το T_c και τον κρίσιμο εκθέτη που του αντιστοιχεί.

2.1.1 ΛΥΣΗ:

$$\mathcal{F} = \int f(x) dx \quad (2.1.1)$$

$$f(x) = f_0(T) + a(T)M(x)^2 + b(T)M(x)^4 + c(T)(\partial_x M(x))^2 - BM(x) \quad (2.1.2)$$

Η μεταβλητή M είναι η παράμετρος τάξης του συστήματος και B ένα εξωτερικό πεδίο το οποίο συζεύνεται με την παράμετρο τάξης. Οι μεταβλητές b και c εξαρτώνται ασθενώς από τη θερμοκρασία. Για $T \rightarrow T_c$, έχουμε την προσέγγιση: $a(T) = \alpha(T - T_c) + \dots$. Για να βρούμε τις καταστάσεις ισορροπίας του συστήματος, ελαχιστοποιούμε την ελεύθερη ενέργεια.

Ελαχιστοποίηση της \mathcal{F}

Θεωρούμε τη συναρτησιακή μεταβολή $M(x) \rightarrow M(x) + \delta M(x)$, όπου $\delta M(x) \rightarrow 0$ όταν $|x| \rightarrow \infty$.

$$\delta f\left(M, \frac{dM}{dx}\right) = \frac{\partial f}{\partial M} \delta M + \frac{\partial f}{\partial \left(\frac{dM}{dx}\right)} \delta \left(\frac{dM}{dx}\right) = \frac{\partial f}{\partial M} \delta M + \frac{\partial f}{\partial \left(\frac{dM}{dx}\right)} \frac{d}{dx}(\delta M) \quad (2.1.3)$$

$$\begin{aligned}
\delta\mathcal{F} &= \int_{-\infty}^{+\infty} dx \left(\frac{\partial f}{\partial M} \delta M + \frac{\partial f}{\partial \left(\frac{dM}{dx}\right)} \frac{d}{dx}(\delta M) \right) \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty} dx \left(\frac{\partial f}{\partial M} \delta M + \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial f}{\partial \left(\frac{dM}{dx}\right)} (\delta M) \right) - \left(\frac{d}{dx} \frac{\partial f}{\partial \left(\frac{dM}{dx}\right)} \right) (\delta M) \right) \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty} dx \left(\frac{\partial f}{\partial M} - \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial f}{\partial \left(\frac{dM}{dx}\right)} \right) \right) (\delta M) + \left[(\delta M) \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial f}{\partial \left(\frac{dM}{dx}\right)} \right) \right]_{-\infty}^{+\infty} \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty} dx \left(\frac{\partial f}{\partial M} \delta M + \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial f}{\partial \left(\frac{dM}{dx}\right)} (\delta M) \right) - \left(\frac{d}{dx} \frac{\partial f}{\partial \left(\frac{dM}{dx}\right)} \right) (\delta M) \right) \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty} dx \left(\frac{\partial f}{\partial M} - \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial f}{\partial \left(\frac{dM}{dx}\right)} \right) \right) (\delta M) = 0 \quad \forall M \quad (2.1.4)
\end{aligned}$$

Η ελαχιστοποίηση της ελεύθερης ενέργειας, ή ισοδύναμα η σχέση $\delta\mathcal{F}$, δίνει τη σχέση Euler-Lagrange:

$$\frac{\partial f}{\partial M} - \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial f}{\partial \left(\frac{dM}{dx}\right)} \right) = 0 \quad (2.1.5)$$

Ξησιμοποιώντας την παραπάνω εξίσωση, μπορούμε να βρούμε τις καταστάσεις ισοροπίας για το πρόβλημα που μας ενδιαφέρει. Θέτοντας την εξίσωση (2.1.2) στην εξίσωση (2.1.5), προκύπτει:

$$2a(T)M(x) + 4bM(x)^3 - B(x) = 2c \frac{d^2}{dx^2} M(x) \quad (2.1.6)$$

Θεωρούμε την περίπτωση $M(x) = M = \text{σταθερά}$ και $B(x) = B = \text{σταθερά}$

Η προηγούμενη εξίσωση, παίρνει τη μορφή:

$$2a(T)M + 4bM^3 - B = 0 \quad (2.1.7)$$

- **Αυθόρμητη Μαγνήτιση - ($B = 0$)**

Κοντά στο T_c , $a(T) \sim \alpha(T - T_c)$. Οι λύσεις είναι:

$$\begin{cases} M = 0 & \text{απορρίπτεται} \\ M^2 = -\frac{a}{2b} = -\frac{\alpha(T-T_c)}{2b} \end{cases} \quad (2.1.8)$$

2.1. ΠΡΩΤΟ ΠΡΟΒΛΗΜΑ: Μελέτη μιας κατάστασης τάξεως με τη βοήθεια της θεωρίας Landau23

Αφού $M^2 \sim |t|$, όπου $t = (T - T_c)/T_c$, για τον κρίσιμο εκθέτη β ισχύει $\beta = 1/2$.

- Περίπτωση παρουσίας μαγνητικού πεδίου στο $T = T_c$

Σε αυτήν την περίπτωση, $M = \left(\frac{B}{4b}\right)^{1/3} \sim B^{1/\delta}$. Ο κρίσιμος εκθέτης δ , δίνεται από τη σχέση (2.1.7). Μάλιστα ισχύει $\delta = 3$.

- Επιδεκτικότητα κοντά στο T_c

Κοντά στο T_c :

$$\chi(0, T) = \left(\frac{\partial M}{\partial B}\right)_{B=0} \quad \text{και} \quad \chi(0, T) \sim |t|^{-\gamma} \quad (2.1.9)$$

$$\delta M = \chi(0, T)\delta B \quad (2.1.10)$$

$$(2a + 12bM^2)dM = dB \quad (2.1.11)$$

$$\chi = \frac{1}{2a + 12bM^2} \quad (2.1.12)$$

- $T > T_c \rightarrow M = 0 \Rightarrow \chi \sim |t|^{-1}$
- $T < T_c \rightarrow M^2 = -a/2b \Rightarrow \chi \sim -1/4a$

Συνεπώς $\gamma = 1$.

- Θερμοχωρητικότητα όταν $B = 0$

$$C = -T \frac{\partial^2 \mathcal{F}}{\partial T^2} \quad (2.1.13)$$

Η θερμοχωρητικότητα, είναι ασυνεχής στο T_c , αφού η μετάβαση είναι δεύτερης τάξης. Σε αυτήν την περίπτωση, $M^2 = -a/2b$. Για την ελεύθερη ενέργεια ισχύει:

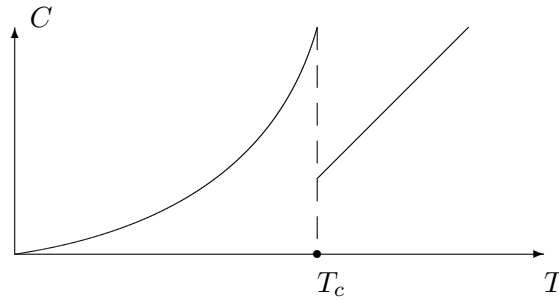
$$\begin{aligned}
\mathcal{F} &= \int (f_0 + \text{Σταθερές}) dx + \int (aM^2 + bM^4) dx \\
&= \mathcal{F}_0 - \int \left(\frac{a^2}{2b} - \frac{a^2}{4b} \right) dx \Rightarrow \\
&\begin{cases} \mathcal{F} = \mathcal{F}_0 - V_{\text{όγκος}} \frac{a^2}{2b} & T < T_c \\ \mathcal{F} = \mathcal{F}_0 & T > T_c \end{cases} \quad (2.1.14)
\end{aligned}$$

Η διαφορά της θερμοχωρητικότητας, θα ισούται με:

$$\delta C = -T \frac{\partial^2 \mathcal{F}}{\partial T^2} = -T \frac{\partial^2}{\partial T^2} \left[-V_{\text{όγκος}} \frac{\alpha^2 (T - T_c)^2}{4b} \right] \quad (2.1.15)$$

$$= \frac{\alpha}{2b} T_c \quad \text{ανά μονάδα όγκου} \quad (2.1.16)$$

Όσο πιο μεγάλη είναι η κρίσιμη θερμοκρασία T_c , τόσο μεγαλύτερο είναι το άλμα.



Θεωρούμε την περίπτωση $M = M(x)$

Ορίζουμε τη συνάρτηση συσχετισμού:

$$C(x, x') = \langle M(x)M(x') \rangle - \langle M(x) \rangle \langle M(x') \rangle \quad (2.1.17)$$

Αν οι τιμές της μαγνήτισης στα σημεία x και x' είναι ανεξάρτητες μεταξύ τους, τότε $C(x, x') = 0$. Όταν συσχετίζονται $C(x, x') \neq 0$. Αν τα $M(x)$ και $M(x')$ είναι ανεξάρτητα μεταξύ τους, τότε $C(x, x') = 0$.

Ορίζουμε τη γενικευμένη επιδεκτικότητα:

$$\chi(x, x') = \frac{\partial \langle M(x) \rangle}{\partial B(x')} \quad (2.1.18)$$

2.1. ΠΡΩΤΟ ΠΡΟΒΛΗΜΑ: Μελέτη μιας κατάστασης τάξεως με τη βοήθεια της θεωρίας Landau25

$$\langle M(x) \rangle = \chi(x, x') B_{ext}(x') \quad (2.1.19)$$

Βάζω ένα εξωτερικό μαγνητικό πεδίο στο x' και μέσω της παραπάνω σχέσης, βρίσκω τη μαγνήτιση που δημιουργεί το πεδίο στο σημείο x .

1. **Δείξτε ότι** $C(x, x') = kT\chi(x, x')$

Θα χρησιμοποιήσουμε ότι η Χαμιλτονιανή γράφεται:

$$H = H_0 - \int dx \vec{B}(x) \cdot \vec{M}(x) \quad (2.1.20)$$

$$\frac{\partial H}{\partial B(x')} = -M(x') \quad (2.1.21)$$

Θα υπολογίσουμε τώρα τη μέση τιμή της μαγνήτισης, θεωρώντας ότι βρισκόμαστε στο Κανονικό Σύνολο. Επιλέγοντας μία βάση η οποία διαγωνοποιεί τη Χαμιλτονιανή, έχουμε:

$$\langle M(x) \rangle = Tr\{\hat{\rho}M(x)\} \quad (2.1.22)$$

$$\hat{\rho} = \frac{e^{-\beta\hat{H}}}{Tr\{e^{-\beta\hat{H}}\}} \quad (2.1.23)$$

$$\langle M(x) \rangle = \left(\frac{1}{\sum \{e^{-\beta\hat{H}}\}} \right) \sum M(x)e^{-\beta\hat{H}} \quad (2.1.24)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \langle M(x) \rangle}{\partial B(x')} &= \frac{\frac{\partial}{\partial B(x')} \left\{ \sum M(x)e^{-\beta(H_0 - \int B(x)M(x)dx)} \right\} \sum e^{-\beta\hat{H}}}{\left[\sum e^{-\beta\hat{H}} \right]^2} \\ &= \frac{\sum M(x)e^{-\beta(H_0 - \int B(x)M(x)dx)} \frac{\partial}{\partial B(x')} \left[\sum e^{-\beta(H_0 - \int B(x)M(x)dx)} \right]}{\left[\sum e^{-\beta\hat{H}} \right]^2} \\ &= \frac{\sum M(x) \left[\beta \frac{\partial H}{\partial B(x')} \right] e^{-\beta H}}{\sum e^{-\beta H}} - \frac{\sum M(x)e^{-\beta H} \sum \left[\beta \frac{\partial H}{\partial B(x')} \right] e^{-\beta H}}{\left(\sum e^{-\beta H} \right)^2} \\ &\stackrel{?}{=} \beta Tr\{\hat{\rho}M(x)M(x')\} - \beta Tr\{\hat{\rho}M(x)\} Tr\{\hat{\rho}M(x')\} \\ &= \beta [\langle M(x)M(x') \rangle - \langle M(x) \rangle \langle M(x') \rangle] \\ &= \frac{1}{kT} C(x, x') \end{aligned} \quad (2.1.25)$$

2. Δείξτε ότι η συνάρτηση συσχετισμού, υπακούει στη σχέση:

$$\left[2a + 12b\langle M \rangle^2 - 2c \frac{d^2}{dx^2}\right] C(x, x') = kT\delta(x - x') \quad (2.1.26)$$

Να λυθεί στο χώρο Fourier. Να οριστεί το μήκος συσχετισμού άνω και κάτω από το T_c .

Γνωρίζουμε ότι από την ελαχιστοποίηση της ελεύθερης ενέργειας, προκύπτει η σχέση:

$$2a(T)\langle M(x) \rangle + 4b\langle M(x) \rangle^3 - B(x) = 2c \frac{d^2}{dx^2} \langle M(x) \rangle \quad (2.1.27)$$

Ισχύει ακόμη:

$$\chi(x, x') = \frac{\partial \langle M(x) \rangle}{\partial B(x')} \quad (2.1.28)$$

Παραγωγίζουμε την εξίσωση (2.2.21), ως προς $\partial/\partial B(x')$ και προκύπτει:

$$2a\chi(x, x') + 12b\langle M(x) \rangle^2 \chi(x, x') - \delta(x - x') = 2c \frac{d^2}{dx^2} \chi(x, x') \quad (2.1.29)$$

Θέλουμε να δουλέψουμε στο χώρο Fourier. Θέτουμε:

$$\chi(x, x') = \chi(x - x') \quad (2.1.30)$$

$$\chi(k) = \int e^{ik(x-x')} \chi(x - x') d(x - x') \quad (2.1.31)$$

$$\mathcal{F} [\chi(x - x')] = \chi(k) \quad (2.1.32)$$

$$\mathcal{F} \left[\frac{d^2}{dx^2} \chi(x - x') \right] = -k^2 \chi(k) \quad (2.1.33)$$

Μετασχηματίζοντας κατά Fourier την (2.1.29), προκύπτει:

$$2a\chi(k) + 12b\langle M \rangle^2 \chi(k) - 1 = -2ck^2 \chi(k) \quad (2.1.34)$$

Έχουμε επιπλέον:

2.1. ΠΡΩΤΟ ΠΡΟΒΛΗΜΑ: Μελέτη μιας κατάστασης τάξεως με τη βοήθεια της θεωρίας Landau27

$$C(k) = k_B T \chi(k) \quad (2.1.35)$$

$$C(k) = \frac{k_B T}{2a + 12b\langle M \rangle^2 + 2ck^2} \quad (2.1.36)$$

$$C(k) \sim \frac{A}{k^2 + \xi^2} \quad (2.1.37)$$

Η παράμετρος ξ είναι το μήκος συσχετισμού. Το μήκος συσχετισμού, θα δίνεται από τη σχέση:

$$\xi^2 = \frac{c}{a + 6b\langle M \rangle^2} \quad (2.1.38)$$

- Για $T > T_c$, $\langle M \rangle = 0$, $a > 0$ και προκύπτει:

$$\xi^2 = c/a \quad (2.1.39)$$

- Για $T < T_c$, $\langle M \rangle = -a/2b$, $a < 0$ και προκύπτει:

$$\xi^2 = -c/2a \quad (2.1.40)$$

Άρα και από τις δύο περιπτώσεις:

$$\xi \sim |T - T_c|^{-v} = |T - T_c|^{-1/2} \quad (2.1.41)$$

Συνεπώς έχουμε κρίσιμο εκθέτη $v = 1/2$ για την κρίσιμη συμπεριφορά ενός κανονικού συνόλου.

2.2 ΔΕΥΤΕΡΟ ΠΡΟΒΛΗΜΑ: Η Προσέγγιση του Weiss στο Πρόβλημα του Σιδηρομαγνητισμού

Ο σιδηρομαγνητισμός (ΣΜ) του σιδήρου ήταν ήδη γνωστός στους αρχαίους Έλληνες, όμως ακόμη και σήμερα ορισμένες πτυχές της συμπεριφοράς του παραμένουν ακατανόητες. Η πρώτη θεωρία που επέτρεψε μια βασική περιγραφή του φαινομένου ωφείλεται στον **Weiss** ο οποίος πρότεινε ότι ο ΣΜ του σιδήρου σχετίζεται με την ευθυγράμμιση των ατομικών μοριακών ροπών. Για να περιγράψει το φαινόμενο υπέθεσε την ύπαρξη ενός μοριακού πεδίου ανάλογου της μαγνήτισης στο οποίο ωφείλεται η ευθυγράμμιση των μαγνητικών ροπών. Πρότεινε δηλαδή, ότι το ολικό πεδίο \mathbf{B}_{eff} που δρά πάνω σε μια ροπή είναι:

$$\mathbf{B}_{eff} = \mathbf{B}_{loc} + \lambda\mu_o\mathbf{M} \quad (1)$$

όπου \mathbf{B}_{loc} είναι το πραγματικό πεδίο στο άτομο, $\lambda\mu_o\mathbf{M}$ είναι το μοριακό πεδίο του *Weiss* και \mathbf{M} η μέση μαγνήτιση του υλικού.

Μέρος Ι: Η υπόθεση του *Weiss* είναι στην πραγματικότητα μια προσέγγιση μέσου πεδίου πάνω στη χαμιλτονιανή του **Heisenberg** που αναπαριστά την ενέργεια ανταλλαγής μεταξύ των ροπών \mathbf{J}_i και \mathbf{J}_j :

$$H = - \sum_i \sum_{j \neq i} \zeta_{ij} \mathbf{J}_i \mathbf{J}_j \quad (2)$$

Αντικαθιστώντας στην (2)

$$\mathbf{J}_i = \langle \mathbf{J} \rangle + (\mathbf{J}_i - \langle \mathbf{J} \rangle) \quad (3)$$

$$\mathbf{J}_j = \langle \mathbf{J} \rangle + (\mathbf{J}_j - \langle \mathbf{J} \rangle) \quad (4)$$

δείξτε ότι η χαμιλτονιανή του *Heisenberg* παίρνει τη μορφή

$$H \approx \frac{1}{2} \lambda \mu_o \mathbf{M}^2 - \sum_i \lambda \mu_o \mathbf{m}_i \cdot \mathbf{M} \quad (5)$$

όπου

$$\mathbf{M} = -N g \mu_B \langle \mathbf{J} \rangle \quad (6)$$

η σταθερά λ δίνεται απο τη σχέση

$$\lambda = \frac{\sum_{j \neq i} \zeta_{ij}}{N \mu_o g^2 \mu_B^2} \quad (7)$$

2.2. ΔΕΥΤΕΡΟ ΠΡΟΒΛΗΜΑ: Η Προσέγγιση του Weiss στο Πρόβλημα του Σιδηρομαγνητισμού 29

και $\mathbf{m}_i = -g\mu_B\mathbf{J}_i$ είναι ο τελεστής που αντιστοιχεί στη μαγνητική ροπή του ατόμου. Να σημειωθεί ότι \mathbf{J} περιλαμβάνει την συνεισφορά και της τροχιακής στροφορμής και της ιδιοστροφορμής ($\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$) και g είναι ο συντελεστής *Lande'*

$$g = \frac{3}{2} - \frac{\mathbf{L}(\mathbf{L} + 1) - \mathbf{S}(\mathbf{S} + 1)}{2\mathbf{J}(\mathbf{J} + 1)} \quad (8)$$

Μέρος II: Με την προσέγγιση μέσου πεδίου που ακολουθήθηκε, το αρχικό πρόβλημα N ροπών σε αλληλεπίδραση γίνεται ένα άθροισμα από N προβλήματα μιας ροπής σε ένα πεδίο. Το πρόβλημα γίνεται απολύτως ανάλογο με αυτό του **παραμαγνητισμού** όπου η κάθε ροπή (εδώ η \mathbf{m}_i) αντί να είναι μέσα σε ένα εξωτερικό μαγνητικό πεδίο, είναι μέσα στο πεδίο \mathbf{B}_{eff} . Ένα τέτοιο πρόβλημα είναι κλασσικό και εύκολα επιλύσιμο στα πλαίσια της **στατιστικής φυσικής**. Στοιχειώδης στατιστική ανάλυση για **κβαντικές ροπές \mathbf{J}** χωρίς αλληλεπίδραση μέσα σε ένα πεδίο \mathbf{B} μας οδηγεί στο αποτέλεσμα:

$$M = Ng\mu_B J G_J(\xi) \quad (9)$$

$$G_J(\xi) = \frac{2J+1}{2J} \coth\left(\frac{2J+1}{2J}\xi\right) - \frac{1}{2J} \coth\left(\frac{\xi}{2J}\right) \quad (10)$$

όπου $\xi = g\mu_B B (k_B T)^{-1}$ και $G_J(\xi)$ ονομάζεται **συνάρτηση Brillouin**.

Σε όλη τη συνέχεια, απλουστεύοντας θεωρούμε την περίπτωση $L = 0$ και $J = S = 1/2$.

II.a) Να δείξετε ότι στην περίπτωσή μας έχουμε:

$$M = N\mu_B \tanh\left(\frac{\mu_B B_{eff}}{k_B T}\right) \quad (11)$$

II.b) Στο όριο υψηλών θερμοκρασιών ($k_B T \gg \mu_B B_{eff}$) θέλουμε να υπολογίσουμε την παραμαγνητική επιδεκτικότητα.

Η επιδεκτικότητα θα είναι η συνάρτηση γραμμικής απόκρισης ως προς το εξωτερικό πεδίο B_{ext} (ισχύει $B_{loc} = \mu_o B_{ext}$), το τοπικό πεδίο B_{loc} ή το B_{eff} ;

Να δείξετε ότι η επιδεκτικότητα χ δίνεται από το νόμο *Curie – Weiss*:

$$\chi = \frac{C}{T - T_c} \quad (12)$$

όπου $k_B C = N\mu_o\mu_B^2$ και $T_c = \lambda C$. Παρατηρούμε ότι στη θερμοκρασία T_c η επιδεκτικότητα αποκλίνει. Θα δούμε στην επόμενη ερώτηση ότι T_c είναι η κρίσιμη θερμοκρασία της ΣΜ μετάβασης (θερμοκρασία *Curie*).

II.c) Για $T \leq T_c$ δεν ισχύει το όριο υψηλών θερμοκρασιών. Δείξτε ότι η **αυθόρμητη** μαγνήτιση δίνεται απο τη σχέση:

$$\frac{T}{T_c}x = \tanh(x) \quad (13)$$

όπου $x = (\lambda\mu_0\mu_B M)/(k_B T)$. Η (13) είναι η εξίσωση **αυτοσυνέπειας** η οποία μας δίνει την παράμετρο τάξης του ΣΜ που είναι η αυθόρμητη μαγνήτιση. Να δείξετε ότι μόνο για $T < T_c$ υπάρχει λύση της (13) για πεπερασμένη τιμή της αυθόρμητης μαγνήτισης. Αρα η κρίσιμη θερμοκρασία T_c κάτω απο την οποία εμφανίζεται η παράμετρος τάξεως του ΣΜ είναι η ίδια θερμοκρασία για την οποία η επιδεκτικότητα αποκλίνει.

2.2.1 ΛΥΣΗ:

1. Θεωρούμε ένα τετραγωνικό πλέγμα μαγνητικών ροπών. Η Χαμιλτονιανή αλληλεπίδρασης του συνόλου των ροπών δίνεται από τη σχέση:

$$H = - \sum_i \sum_{i \neq j} \zeta_{ij} \vec{J}_i \cdot \vec{J}_j \quad (2.2.1)$$

Η παραπάνω Χαμιλτονιανή, ονομάζεται Χαμιλτονιανή Heisenberg. Θα εφαρμόσουμε τη μέθοδο του μέσου πεδίου. Η συγκεκριμενη μέθοδος, βασίζεται στις ακόλουθες σχέσεις:

$$J_i = \langle J \rangle + (J_i - \langle J \rangle) \quad (2.2.2)$$

$$J_j = \langle J \rangle + (J_j - \langle J \rangle) \quad (2.2.3)$$

Εισάγουμε τις δύο σχέσεις, στη Χαμιλτονιανή, και προκύπτει:

$$H \simeq \frac{1}{2} \lambda\mu_0 \vec{M}^2 - \sum_i \lambda\mu_0 \vec{m}_i \cdot \vec{M} \quad (2.2.4)$$

όπου

$$\vec{M} = -Ng\mu_B \langle J \rangle \quad (2.2.5)$$

$$\vec{m}_i = -g\mu_B \vec{J}_i \quad (2.2.6)$$

2.2. ΔΕΥΤΕΡΟ ΠΡΟΒΛΗΜΑ: Η Προσέγγιση του Weiss στο Πρόβλημα του Σιδηρομαγνητισμού 31

$$\lambda = \frac{\sum_{j \neq i} \zeta_{ij}}{N \mu_0 g^2 \mu_B^2} \quad (2.2.7)$$

$$H \simeq \left(\frac{1}{2} \lambda \mu_0 \vec{M} - \sum_i \lambda \mu_0 \vec{m}_i \right) \cdot \vec{M} \Rightarrow \quad (2.2.8)$$

$$\vec{B}_{eff} = \vec{B}_{loc} + \lambda \mu_0 \vec{M} \quad (2.2.9)$$

2. Στο πρόβλημα του παραμαγνητισμού, είχαμε βρει τη σχέση:

$$M = Ng \mu_B \mathcal{B}_J(\xi) \quad (2.2.10)$$

όπου

$$\xi = Jg \mu_B / k_B T \quad (2.2.11)$$

- Για $J = S = 1/2 \Rightarrow$

$$M = N \mu_B \tanh \left(\frac{\mu_B B}{k_B T} \right) \quad (2.2.12)$$

Στην περίπτωσή μας $B = B_{eff}$. Συνεπώς:

$$M = N \mu_B \tanh \left(\frac{\mu_B B_{eff}}{k_B T} \right) \quad (2.2.13)$$

- Υπολογισμός επιδεκτικότητας, στο όριο των υψηλών θερμοκρασιών, $k_B T \gg \mu_B B_{eff}$.

Εφαρμόζουμε ένα εξωτερικό πεδίο στο σύστημα, B_{ext} , για το οποίο θεωρούμε ότι ισχύει:

$$B_{loc} = \mu_0 B_{ext} \quad (2.2.14)$$

$$B_{eff} = \mu_0 B_{ext} + \lambda \mu_0 M \quad (2.2.15)$$

Αναπτύσσουμε την εξίσωση:

$$M = Ng \mu_B \tanh \left(\frac{\mu_B B_{eff}}{k_B T} \right) \quad (2.2.16)$$

κατά Taylor γύρω από το μηδέν, αφού ισχύει $k_B T \gg \mu_B B_{eff}$.

$$M \simeq \frac{N\mu_B^2}{k_B T} (\mu_0 B_{ext} + \lambda\mu_0 M) \quad (2.2.17)$$

$$\chi = \frac{\partial M}{\partial B_{ext}} \quad (2.2.18)$$

Παραγωγίζοντας τη σχέση (2.2.17) ως προς B_{ext} , προκύπτει:

$$\begin{aligned} \frac{\partial M}{\partial B_{ext}} &= \frac{N\mu_B^2\mu_0}{k_B T} \left(1 + \lambda \frac{\partial M}{\partial B_{ext}}\right) \Rightarrow \\ \chi &= \frac{N\mu_B^2\mu_0}{k_B T} (1 + \lambda\chi) \Rightarrow \\ \chi &= \frac{C}{T} + \frac{T_c}{T} \chi \Rightarrow \\ \chi &= \frac{C}{T - T_c} \end{aligned} \quad (2.2.19)$$

- Για $T \leq T_c$ δεν ισχύει το όριο των υψηλών θερμοκρασιών. Στην περίπτωση της αυθόρμητης μαγνήτισης που εξετάζουμε, $B_{loc} = 0$. Άρα η εξίσωση αυτοσυνέπειας (2.2.16), γράφεται:

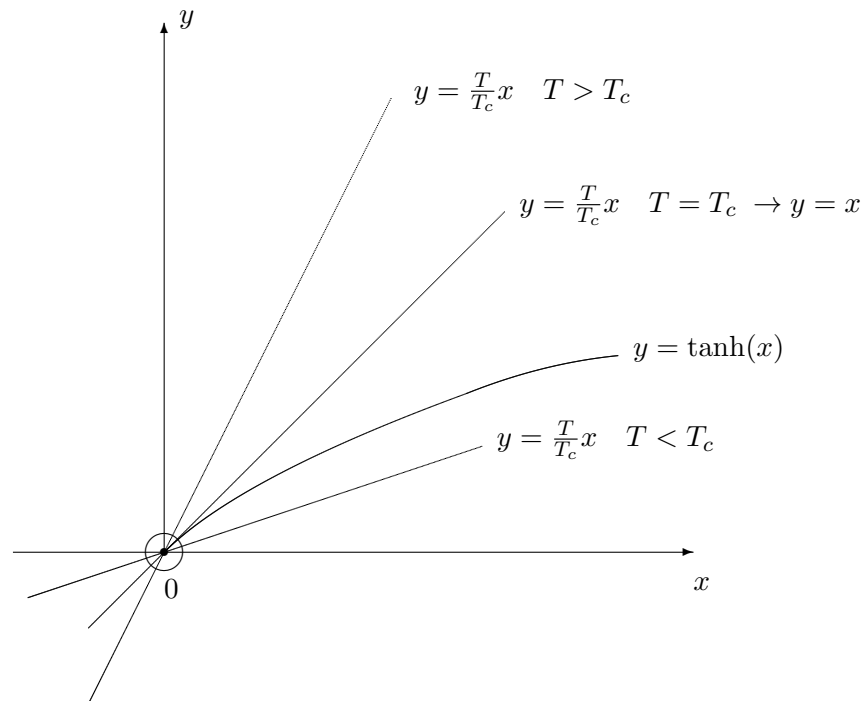
$$M = N\mu_B \tanh\left(\frac{\mu_B \lambda\mu_0 M}{k_B T}\right) \quad (2.2.20)$$

Θέτουμε $x = \lambda\mu_0\mu_B M/k_B T$. Η εξίσωση (2.2.20) γράφεται:

$$\frac{T}{T_c} x = \tanh x \quad (2.2.21)$$

Οι δυνατές λύσεις της παραπάνω σχέσης, προσδιορίζονται ποιοτικά από το ακόλουθο γράφημα:

2.2. ΔΕΥΤΕΡΟ ΠΡΟΒΛΗΜΑ: Η Προσέγγιση του Weiss στο Πρόβλημα του Σιδηρομαγνητισμού 33



Από το παραπάνω γράφημα, βλέπουμε ότι έχουμε πεπερασμένη μαγνήτιση για $T < T_c$.