

# 74941 FASEOVERGANGER OG KRITISKE FENOMENER

Kontinuasjonsksem 20.8.93

Løsningsforslag

## Oppgave 1

a) Faseovergang fra høysymmetri (ordnet) fikk til ordnet fikk (en av et sett som til sammen har den høyere symmetri), karakterisert ved en endelig ordensparameter,  $\alpha_f$  som gitt utgangspunkt.

Ordensparametren,  $\alpha_f$  (skalar, vektor, ....), null (unntatt i spesielle) i ordnet fikk,  $\neq 0$  i ordnet, antydt funnet. Med kontinuerlig eller svakt 1. ordens overgang kan  $\alpha_f$  regnes som liten før overgang. Landau's "fri energi",  $F_L$ , for gitte intensive variable,  $\Omega$  og  $\alpha_f$  gitt, som elektrisk (like-termodyn.) betraktet konstrueres på basis av minimistiske filosofi.

- ① Ta med alle ledde som ikke er forbudt av symmetrier,
- ② Anta potensiale i  $\alpha_f$ , med potensiale av koeff. i  $\sim \alpha_f^2 - \alpha_f^4$
- ③ Ta bare med så mange ledde som nødvendig for å få gode ledende tekniske oppførsel.

b) Antar: Tredje-ordens teori (for enkelhetss skyld)

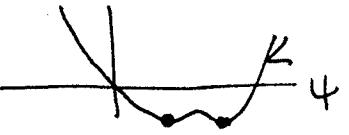
$$\Delta F_L = -h\alpha_f + \frac{c}{2}\alpha_f^2 + \frac{u}{4!}\alpha_f^4$$

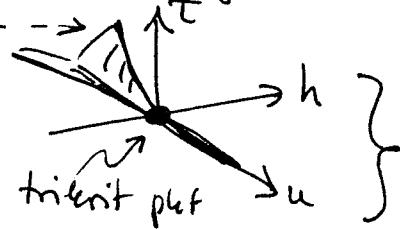
$$h=0 \quad \text{---} \quad \text{spontant symmetribrydel}$$

$$h \neq 0 \quad \text{---} \quad \text{Intet spontant s.b.}$$

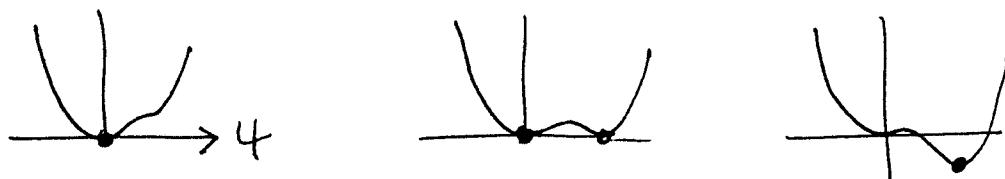
En fikk fremskrift

h ≠ 0 fjerner systemet fra ått kritiske punkt!

Dette er ikke alltid sant. Med 6.ordens teori og  $u < 0$ , f.eks.  
 her krit. linje ved  $h=0$   

 mulig  $\Rightarrow$  freidigram



c)  $\Delta \bar{F}_L = \frac{c}{2} r^2 - \frac{c}{3!} r^3 + \frac{u}{4!} r^4$



Første ordens overgang for (liten)  $r > 0$ . (Og til  
om  $C < 0$  som gir  $\chi_{\text{ord}} < 0$ )

Den kvalitative bandan predikjon er alltid (?) oppfylt i 3 dimensjoner. I  $d=2$  stemmer den denkost ikke for  $q$ -tilstands Potts med  $q=3$  og  $q=4$ . OK for  $q \geq 5$ . De sterke fluktuasjonene i  $d=2$  viser ut første ordens overgangen i 3 og 4 tilst. Potts.

d)

- (i)  $h=0$  betyr uten felt ( $H$ -feltet) lik null for ferromagnet, siden det er det vanlige magnetfeltet som koplet til magnetiseringen i "spinn-opp" og "spinn-ned" fasene.
- (ii) Antiferromagnet: Ordnete faser  $\uparrow \downarrow \uparrow \dots$  versus  $\downarrow \uparrow \downarrow \dots$  Ordensparameter "velselmagnetiseringen" med " $h$ " = "velselfelt". Aktiv: Ikke det vanlige  $H$ -feltet. I praksis: Kan være et krystalfelt med alternende fortegn.
- (iii) " $h$ " =  $\mu_0 \mu_0(t)$ , der  $\mu_0(t)$  er det kjemiske potensial langs koexistanslinjen
- (iv) Goroff-overflate: 3 ekvivalente undergrunner av adsorbsjonspt. " $h=0$ ": Ingen felt foretrekker det ene fremfor de andre !

## Oppgave 2

a Ideen er å utføre en delvis utsumming av frihetsgradene, men slik at de langbølgende fluktusjonene som bestemmer de kritiske egenskapene forblir uberørt

$$Z = \sum_{s,s'} P(s'|s) e^{H(s)} \quad \sum_{s'} P(s'|s) = 1$$

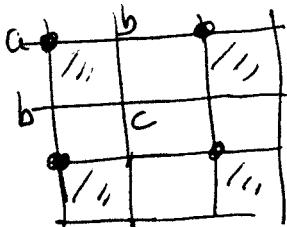
↙ celle spinn  
 ↑ opprinnelige spinn  
 ↘ normalisert H-funksjon

$$= \frac{1}{\Omega} e^{\sum_{s'} e^{H'(s')}}$$

Celle spinn i 3-spinn celle definert ved flerkobb-regel  
 (Derved overlever langbølgende fluktusjoner fra  $H(s)$  til  $H'(s')$ )

Med 4 spinn pr. celle kan vi ha to opp & to ned, intet flerkobb. Med lederspinne (med dobbeltstørrelse)  
 oppheves degenerasjonen

b



Vi får 3 forskjellige middelverdier med lederspinne

$$\langle s_a \rangle_{s'=1}, \langle s_b \rangle_{s'=1}, \langle s_c \rangle_{s'=1}$$

1. ordens kumulant-Tilnærming gir

$$k' = k \langle s_b \rangle \langle s_a \rangle + k \langle s_c \rangle \langle s_b \rangle = k \langle s_b \rangle (\langle s_a \rangle + \langle s_c \rangle)$$

$$\langle s_a \rangle_{s'=1} = \frac{++ + (3-1) + + + + - + -}{++ + 4 + + + + - + - + - + -}$$

$$= \frac{e^{4k} + 2 + 1 + 1 + e^{-4k}}{e^{4k} + 4 + 1 + 1 + e^{-4k}} = \frac{x + 4 + x^{-1}}{x + 6 + x^{-1}}$$

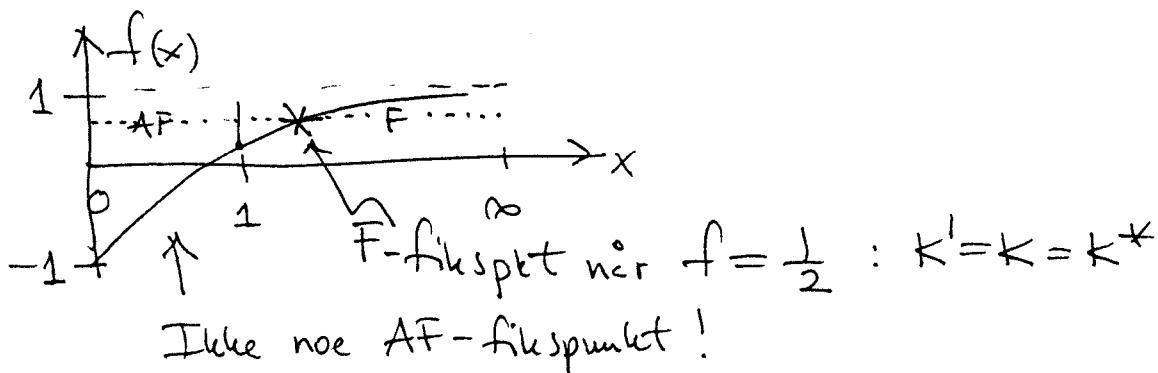
$$\langle s_b \rangle = \frac{\frac{++}{++} + 2 \frac{++}{+-} + \frac{+-}{--} - \frac{+-}{+-} - \frac{+-}{-+}}{x + 6 + x^{-1}} = \frac{x + 2 - x^{-1}}{x + 6 + x^{-1}}$$

$$\langle s_c \rangle = \frac{\frac{++}{++} + 2 \frac{++}{+-} - \frac{+-}{--} - \frac{+-}{+-} + \frac{+-}{-+}}{x + 6 + x^{-1}} = \frac{x + x^{-1}}{x + 6 + x^{-1}}$$

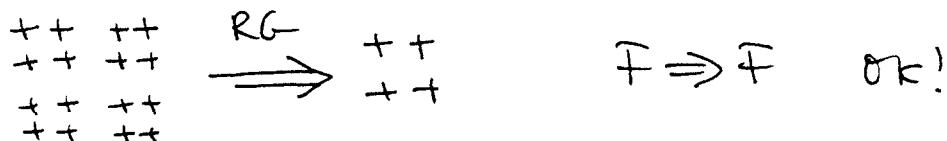
$$k' = K \cdot \frac{x + 2 - x^{-1}}{(x + 6 + x^{-1})^2} [x + 4 + x^{-1} + x + x^{-1}] = 2K \frac{(x + 2 - x^{-1})(x + 2 + x^{-1})}{(x + 6 + x^{-1})^2} \equiv 2K f(x)$$

ged.

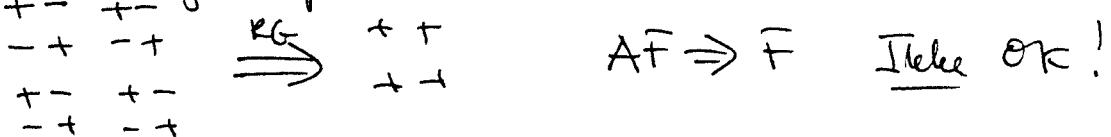
$$f(x) \approx \begin{cases} -1 & x \rightarrow 0 \quad (T \rightarrow 0, J < 0) \\ 1/8 & x = 1 \quad (T \rightarrow \infty, J \geq 0) \\ 1 & x \rightarrow \infty \quad (T \rightarrow 0, J > 0) \end{cases}$$



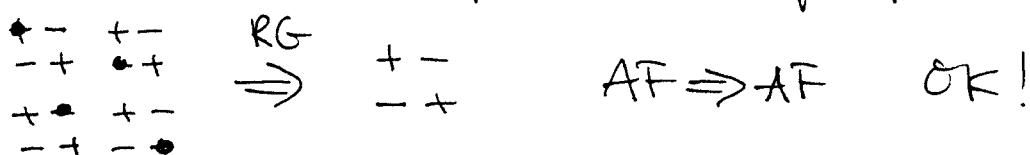
## c Ferromagnetisk grunntilstand



Antiferromagn. gr. tilst.

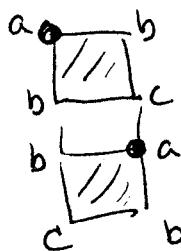


Med alternativ distribution av lederspinne:



(Og, selvkast, fortsatt  $F \Rightarrow F$ )

d. Första kumulant-Tilnärmlse



$$K^1 = K \left( \langle s_a \rangle \langle s_c \rangle + \langle s_b \rangle \langle s_b \rangle \right)$$

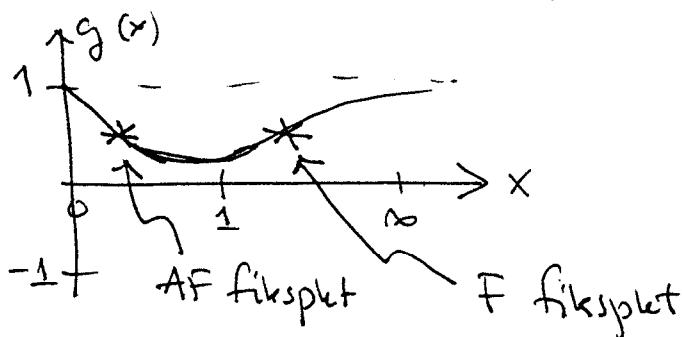
Dette för en för alle naboceller!

$$K^1 = K \frac{1}{(x+6+x^{-1})^2} \left\{ (x+4+x^{-1})(x+x^{-1}) + (x+2-x^{-1})^2 \right\}$$

$$= -11 - \left\{ x^2 + 4x + 1 + 1 + 4x^{-1} + x^{-2} \right. \\ \left. + x^2 + 4 + x^{-2} + 4x - 2 - 4x^{-1} \right\}$$

$$= 2K \frac{x^2 + 4x + 2 + x^{-2}}{(x+6+x^{-1})^2} = 2K g(x)$$

$$g(x) = \begin{cases} 1 & x \rightarrow 0 \quad (T \rightarrow 0, J < 0) \\ 1/8 & x = 1 \quad (T \rightarrow \infty, J \geq 0) \\ 1 & x \rightarrow \infty \quad (T \rightarrow 0, J > 0) \end{cases}$$



Som ventet böde AF och F fiksptet här.

Riktigtvis inte full symmetri  $x \rightarrow -x$  ( $J \rightarrow -J$ ), men en står jo ihop venta alt är et  
så enkelt reparsymstrich heller.

### Oppgave 3

a Energi pr. spinn i endel periodisk repeterte mønster

$$\begin{array}{c} \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \end{array} \quad E_{1 \times 1} = h - \frac{6}{2} J_1 - \frac{6}{2} J_2 = h + 3|J_1| + 3|J_2|$$

# naboer  
bind delt p<sup>o</sup> 2 spinn

$$\begin{array}{c} \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \end{array} \quad E_{2 \times 2} = \frac{1}{4} \left\{ 3h - h + \frac{6}{2} J_1 - 3 \frac{4-2}{2} J_1 + \frac{6}{2} J_2 - 3 \frac{4-2}{2} J_2 \right\}$$

$$= \frac{1}{2} h$$

$$\begin{array}{c} \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \end{array} \quad E_{\sqrt{3} \times \sqrt{3}} = \frac{1}{3} \left\{ 2h - h + \frac{6}{2} J_1 + 2 \cdot \frac{3-3}{2} J_1 - 3 \frac{6}{2} J_2 \right\}$$

$$= \frac{1}{3} h - |J_1| + 3|J_2|$$

$$\begin{array}{c} \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \end{array} \quad E_{1 \times 2} = \frac{1}{2} \left\{ h - h + 2 \frac{4-2}{2} J_1 + 2 \frac{4-2}{2} J_2 \right\}$$

$$= -|J_1| - |J_2|$$

b Ved  $h=0$  er det åpenbart  $1 \times 2$  konfigurasjonen som minimaliserer energien

Linje A gitt av  $E_{\sqrt{3} \times \sqrt{3}} = E_{1 \times 2} \Rightarrow \frac{1}{3} h - |J_1| + 3|J_2| = -|J_1| - |J_2|$

$$A: -\frac{h}{|J_1|} = 12 \frac{|J_2|}{|J_1|} \equiv 12\alpha$$

$$D: E_{1 \times 2} = E_{2 \times 2} \Rightarrow -|J_1| - |J_2| = \frac{1}{2} h \Rightarrow -\frac{h}{|J_1|} = 2 + 2\alpha$$

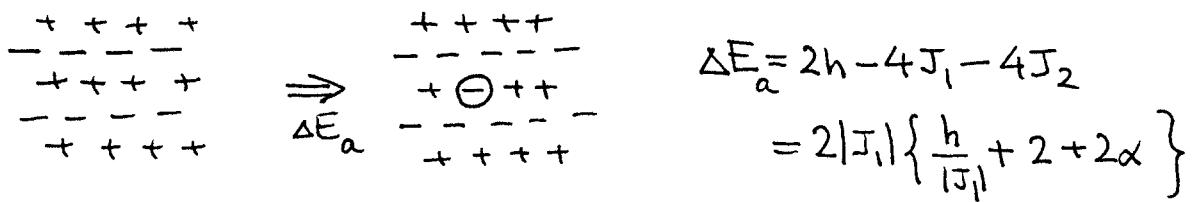
$$B: E_{\sqrt{3} \times \sqrt{3}} = E_{2 \times 2} \Rightarrow \frac{1}{3} h - |J_1| + 3|J_2| = \frac{1}{2} h \Rightarrow -\frac{h}{|J_1|} = 6 - 18\alpha$$

Sjekk A, D  $\neq$  B løper sammen for  $\alpha=0.2$ ,  $-\frac{h}{|J_1|} = 2.4$

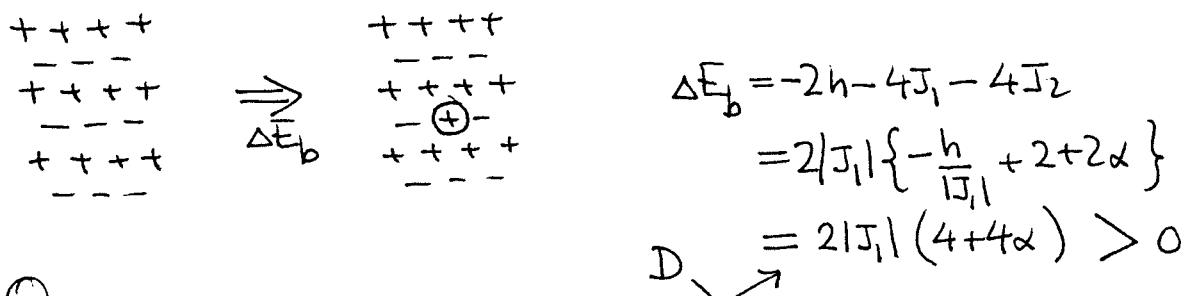
$$C: E_{kx_1} = E_{kx_2} \Rightarrow h + 3|J_1| + 3|J_2| = \frac{1}{2}h \Rightarrow -\frac{h}{|J_1|} = 6 + 6\alpha$$

Alt dette er i samsvar med figuren

C

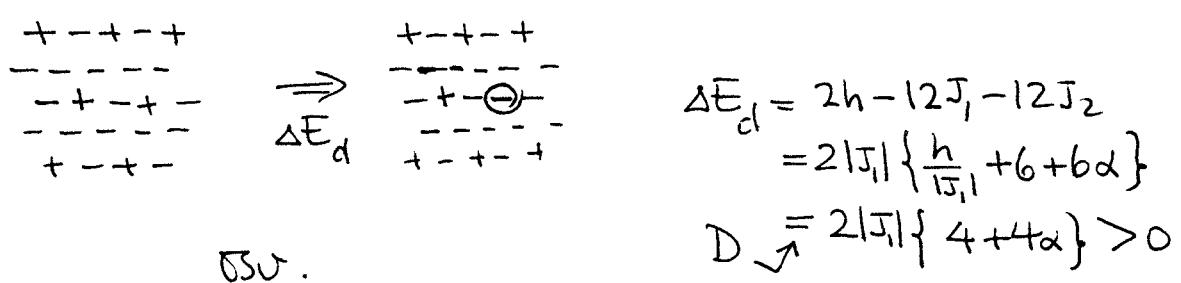
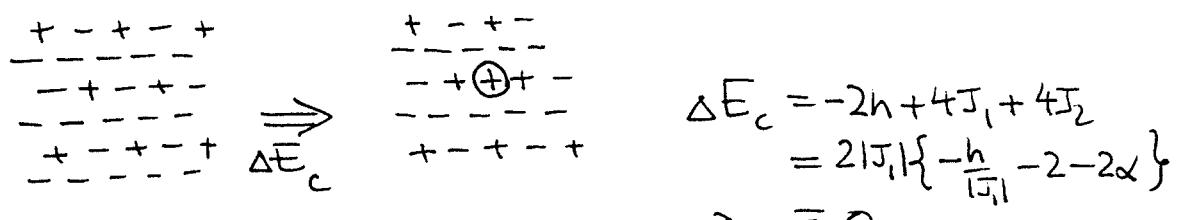


Altso  $\Delta E_a = 0$  langs linje D!



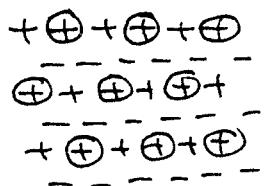
D ✓

Omvendt, utgangspunkt i  $2 \times 2$ :



OSV.

Poenget er at det finnes et regulært gitter av uavhengige "feil" som er gratis langs D!  
Følvs.



Alle de inntingete spinnene kan snus uavhengig av hverandre med  $\Delta E = 0$   
Dette gir  $\sim 2^{N/4}$  muligheter, der N  
er # spinn totalt

Ifølge Boltzmann er

$$S = k_B \ln W$$

Her

$\uparrow$  # mikrotilstander med gitt energi

$$S > k_B \ln 2^{N/4} = \frac{Nk_B}{4} \ln 2$$

Entropi pr. spinn

$$A = \frac{S}{N} \Rightarrow \frac{k_B}{4} \ln 2 > 0$$

Makroskopisk degenerasjonsgrad gir endelig entropi pr. spinn!

d Ved  $\alpha = 0.5$  skal vi ha (jfr. pkt b):

(a) Grunn tilstand  $1 \times 2$  for  $-h/|J_1| < 3$

(b) Grunn tilstand  $2 \times 2$  for  $3 < -h/|J_1| < 9$

(c)  $-h/|J_1| = 3$  ligger på linjen D, med dobbel degenerasjon.  
Det er da ikke mulig å ha en ordnet tilstand ved endelig temperatur (ekspansjoner er gratis!)

Altbi (a) & (b) umuliggjør fasediagram (1) & (2)

(c) umuliggjør fasediagram (3) og (5)

Diagrammene (4) & (6) er begge i samsvar med det vi vet. Taktisk finnes det publiserte prøver som drar i begge retninger.

$\boxed{(4) \leftrightarrow (6) \text{ Uklart !!}}$