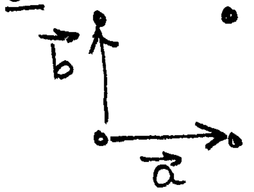
Løsningsforslag

FASEOVERGANGER & KRITISKE FENOMENER

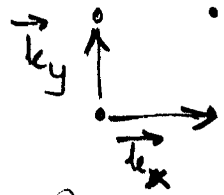
Eksamen 19.1.1985

Oppgave 1

a



Direkte gitter



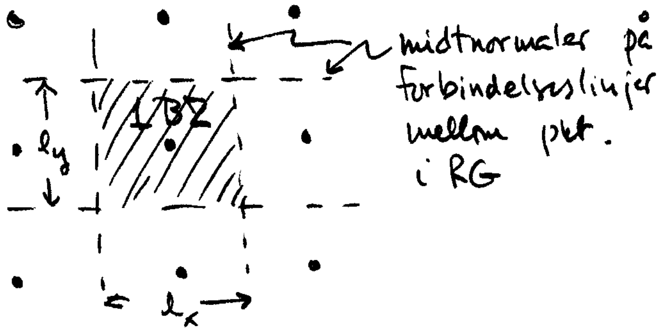
Resiproke gitter

$|\vec{a}|=|\vec{b}|=a$

$\vec{k}_x, \vec{k}_y$ gitt av

$$\left.\begin{array}{ll} \vec{k}_x\cdot\vec{a} = 2\pi & ; \ \vec{k}_y\cdot\vec{a} = 0 \\ \vec{k}_x\cdot\vec{b} = 0 & ; \ \vec{k}_y\cdot\vec{b} = 2\pi \end{array}\right\} \Rightarrow \begin{array}{l} \vec{k}_x = \frac{2\pi}{a}\hat{x} \\ \vec{k}_y = \frac{2\pi}{a}\hat{y} \end{array}$$

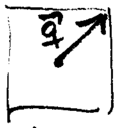
1. Brillouinsone: Wigner-Seitz celle i RG:



$\Rightarrow l_x = l_y = \frac{2\pi}{a}$

b

$$\delta\rho_j = \rho(m_j a\hat{x}, n_j a\hat{y}) - \rho = \frac{1}{V}\sum_{\vec{k}}{}' e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}_j}\rho_{\vec{k}} = \frac{1}{V}e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}_j}\rho_{\vec{q}}$$

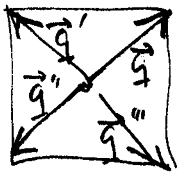


$$\vec{q}\cdot\vec{r}_j = \frac{\pi}{a}\cdot m_j a + \frac{\pi}{a}n_j a = \pi(m_j + n_j)$$

$$\delta\rho_j = \rho + \frac{\rho_{\vec{q}}}{V}\cdot(-1)^{m_j+n_j} \Rightarrow$$

A B A B A
B A B A B "$\sqrt{2}\times\sqrt{2}$"
A B A B A struktur
B A B A B

c Fourierkomponenten $\rho_{\vec{q}'}$ inneholder ingen ny fysikk utover $\rho_{\vec{q}}$, dersom $\vec{q}' - \vec{q} = \vec{K} \in RG$



Symmetrioperasjoner på $\vec{q}$ gir $\vec{q}', \vec{q}'', \vec{q}'''$, men alle de øvrige kan skrives som

$$\vec{q} + \vec{K} \quad \text{der} \quad \vec{K} \in RG$$

Altså utgjøres $\vec{q}$'s "stjerne" av $\vec{q}$ alene.

d Siden $\vec{q}$'s "stjerne" utgjøres av $\vec{q}$ alene, sier ikke den diskrete rotasjonssymmetrien til gitteret noe om formen på Landaus fri energi i dette tilfellet. Translasjonssymmetrien gjenstår. Den sier

$$T_{\vec{R}} F(\vec{r}) = F(\vec{r} + \vec{R}) = F(\vec{r}) \quad \text{der } \vec{R} \in DG$$

direkte G.

F skal konstrueres (iflg) Landau som en potensutvikling i ordensparameteren. Ordensparameteren er her

$\rho_{-\vec{q}} = \rho_{\vec{q}}$ (1 reell komponent, siden $\vec{q}$'s "stjerne" er $\vec{q}$ alene)

$$T_{\vec{R}} \rho_{\vec{q}}^{l} = T_{\vec{R}} \left(v_0 \sum_j e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}_j} \delta\rho_j \right)^{l}$$

$$= \left(v_0 \sum_j e^{-i\vec{q}(\vec{r}_j + \vec{R})} \right)^{l} = e^{-i\vec{q}\cdot\vec{R}\cdot l} \cdot \rho_{\vec{q}}^{l}$$

La $\vec{R} = ma\hat{x} + na\hat{y}$, da er $\vec{q}\cdot\vec{R} = \pi(m+n)$, slik at

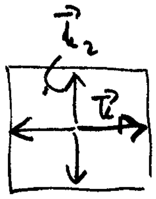
$$T_{\vec{R}} \rho_{\vec{q}}^{l} = (-1)^{(m+n)l} \rho_{\vec{q}}^{l}$$

Høyre side er lik $\rho_{\vec{q}}^{l}$ for alle m & n dersom l = like tall. Altså: Landaus fri energi må ha form av en potensrekke i $\rho_{\vec{q}}^{2}$:

$$F(T, \rho_{\vec{q}}) = F(T,0) + \frac{r(T)}{2} \rho_{\vec{q}}^{2} + \frac{u}{4!} \rho_{\vec{q}}^{4} + \cdots$$

[Formen på koeffisientene er konvensjonelle]. Dette er en F som er karakteristisk for "Ising universalitetsklassen".

<u>e</u>.



"Stjernen" ~~består~~ her (F.eks.) av $\vec{k}_1$ & $\vec{k}_2$. De to andre $\vec{k}$-ene generert av symmetri-operasjonene adskiller seg fra $\vec{k}_1$ eller $\vec{k}_2$ med en vektor i RG.

Rotasjonssymmetrien krever da at Landau's F er invariant overfor $\vec{k}_1 \rightleftarrows \vec{k}_2$.

Translasjonssymmetrien gir på tilsvarende vis som sist

$$T_{\vec{R}}\, \rho_{\vec{k}_1}^{l_1} \rho_{\vec{k}_2}^{l_2} = (-1)^{m l_1} (-1)^{m l_2} \rho_{\vec{k}_1}^{l_1} \rho_{\vec{k}_2}^{l_2}$$

Translasjonsinvarians ~~krever~~ altså at <u>både</u> l_1 og l_2 er partall. Igjen er $\rho_{-\vec{k}_i} = \rho_{\vec{k}_i}$ = reell, slik at alt i alt

$$F(T, \rho_{\vec{k}_1}, \rho_{\vec{k}_2}) = F(T,0,0) + \frac{r(T)}{2}\left[\rho_{\vec{k}_1}^2 + \rho_{\vec{k}_2}^2\right]$$

$$+ \frac{u}{4!}\left[\rho_{\vec{k}_1}^2 + \rho_{\vec{k}_2}^2\right]^2 + \frac{v}{4!}\rho_{\vec{k}_1}^2 \rho_{\vec{k}_2}^2$$

eller, ekvivalent

$$= \cdots + \frac{u}{4!}\left[\rho_{\vec{k}_1}^2 + \rho_{\vec{k}_2}^2\right]^2 + \frac{w}{4!}\left[\rho_{\vec{k}_1}^4 + \rho_{\vec{k}_2}^4\right]$$

Dette er en form som karakteriserer Heisenberg-modellen med kubisk anisotropi.

Mulige strukturer:

$\rho_{\vec{k}_1} \neq 0,\ \rho_{\vec{k}_2} = 0$:

A B A B A
A B A B A
A B A B A

"2×1"

$\rho_{\vec{k}_1} = 0,\ \rho_{\vec{k}_2} \neq 0$

A A A A
B B B B
A A A A

"1×2" = "2×1"

$\rho_{\vec{k}_1} \neq 0,\ \rho_{\vec{k}_2} \neq 0$

A B A B A
C D C D C
A B A B A
C D C D C

"2×2"

med $\rho_A + \rho_D = \rho_B + \rho_C$

Oppgave II

a Partisjonsfunksjon

$$Z = \sum_{\{\sigma\}} e^{\beta\left(\sum_{i<j} J_{ij}\sigma_i\sigma_j + \sum_i h_i\sigma_i\right)}$$

$$m_i = \langle\sigma_i\rangle = \frac{1}{\beta}\frac{\partial \ln Z}{\partial h_i} = \frac{1}{Z}\sum_{\{\sigma\}} \sigma_i\, e^{\beta(-\shortparallel-)}$$

[Alt unntatt h_i holdes konstant under derivasjonen]

$$\frac{1}{\beta}\frac{\partial m_i}{\partial h_j} = -\frac{1}{Z^2}\sum_{\{\sigma\}}\sigma_i e^{\beta(-\shortparallel-)}\sum_{\{\sigma\}}\sigma_j e^{\beta(-\shortparallel-)} + \frac{1}{Z}\sum_{\{\sigma\}}\sigma_i\sigma_j e^{\beta(-\shortparallel-)}$$

$$= \langle\sigma_i\sigma_j\rangle - \langle\sigma_i\rangle\langle\sigma_j\rangle \equiv \Gamma_{ij} \qquad \text{qed.}$$

b

$$\beta\sum_j \Gamma_{ij} = \sum_j \frac{\partial m_i}{\partial h_j}$$

I denne prosessen bringes σ_j ned ved derivasjon mhp h_j, og deretter summeres over alle j (i inkludert). Nøyaktig samme resultat får en ved å sette $h_j = h$ (alle j) og derivere mhp den felles h (med T = konst.) Altså

$$\beta\sum_j \Gamma_{ij} = \left(\frac{\partial m}{\partial h}\right)_T \equiv \chi_T \qquad (\text{siden } m_i = m\text{, samme for alle } i)$$

qed.

c Når kritisk punkt får Γ_{ij} (for $|i-j| \gg 1$) formen

$$\Gamma_{ij} \sim \Gamma(r_{ij}) \sim A\,\frac{e^{-r_{ij}/\xi}}{r_{ij}^{\,d-2+\eta}}$$

Altså

$$\beta\sum_j \Gamma_{ij} \simeq \beta a^{-d} A\int d^d r\,\frac{e^{-r/\xi}}{r^{d-2+\eta}} \overset{x=r/\xi}{=} \frac{\beta A}{a^d}\,\xi^{d-d+2-\eta}\underbrace{\int d^d x\,\frac{e^{-x}}{x^{d-2+\eta}}}_{\text{konst.}}$$

Divergensen nær det kritiske punkt er derfor bestemt av

$$\underbrace{\chi_T \sim |T-T_c|^{-\gamma}}_{\text{def.}(\gamma)} \sim \beta \sum_j \Gamma_{ij} \sim \xi^{2-\eta} \underbrace{\sim |T-T_c|^{-\nu(2-\eta)}}_{\text{def } \nu}$$

Altså

$$\boxed{\gamma = \nu(2-\eta)}$$

Oppgave III

a En kontinuerlig faseovergang er karakterisert ved at den dertil svarende susceptibiliteten divergerer, dvs at

$$\Gamma_{\vec{k}} \to \infty, \quad T \searrow T_c \quad \text{for } \vec{k} = \vec{q}$$

der $\vec{q}$ beskriver den ordnete fasen under T_c. Mao: $\rho_{\vec{Q}}$ der $\vec{Q}$ er "stjernen" med medlem $\vec{q}$, er ordens-parameteren som beskriver den ordnete fasen under T_c.

Divergens fås i MFT når nevneren forsvinner, mao. når

$$1 - v_0^{-1}(1-m^2)\beta J_{\vec{k}} = 0$$

Må derfor først finne $\vec{q}$ som gir $J_{\vec{k}} = \max$

Kvadratisk gitter med nærmeste nabovekselvirkning:

$$J_{\vec{k}} = v_0 \sum_{nn}{}' e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}_{ij}} J_{ij} = v_0 J (2\cos k_x a + 2\cos k_y a)$$

når gitterkonstanten er a. Med $J>0$

$$\operatorname{Max} J_{\vec{k}} = J_{\vec{0}} = 4 v_0 J$$

Altså

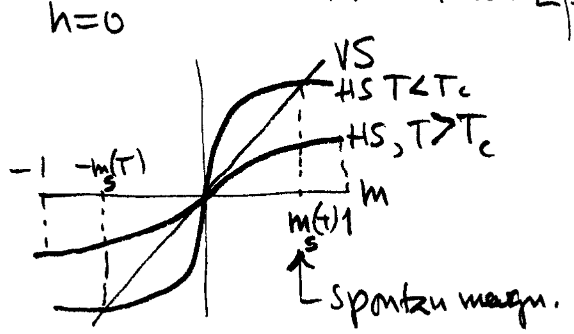
$$1 - (1-m^2)\frac{4J}{k_B T_c} = 0$$

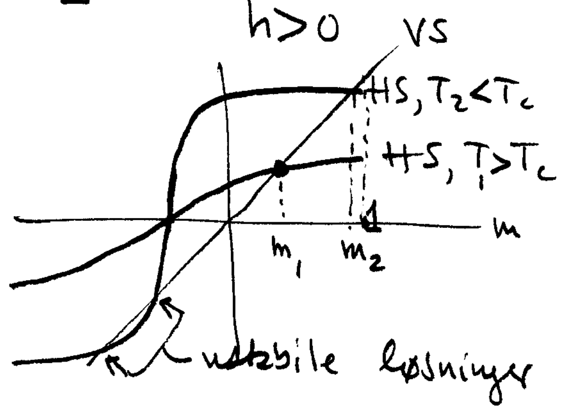
Vi "vet" at for en ferromagnet er det kritiske punkt i $h=0$, $m=0$. Derved

$$T_c = \frac{4J}{k_B}$$

En dypsindig tenker vil her innvende at denne "viten" må ligge begravd i likningene selv. For romlig homogent felt er m gitt av

$$m = \tanh[\beta(4Jm+h)]$$





Av skissen til høyre ser en at m øker raskt med synkende T når $h>0$. $m(T,h) > m_s(T)$ når $h>0$ for $T<T_c$.
Skal susceptibiliteten bli ∞ for $h \neq 0$ må

$$k_B T = (1-m^2)4J = (1-m^2)k_B T_c$$

for en eller annen T_1 om (T_1,h). Eller

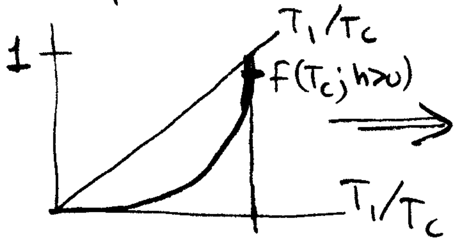
$$\frac{T_1}{T_c} = 1-m^2 = \frac{1}{\cosh^2[\beta_1(4Jm+h)]} \overset{h>0}{<} \frac{1}{\cosh^2[\beta_1(4Jm_s+h)]}$$

Men $m_s = c\sqrt{T_c-T}$ (som følger av $m=\tanh \beta 4Jm$ ved utvikling til $O(m^3)$) slik at høyre side får formen

$$f(T_1) = \frac{1}{\cosh^2\left[\frac{T_c}{T_1}c\sqrt{T_c-T_1} + \frac{h}{k_B T_1}\right]} \quad : \quad f(T_c; h>0) < 1$$

$$f'(T_c^-; h>0) = \infty$$

Altså



$\Longrightarrow$ Ingen løsning for $h \neq 0$

Altså: Bare ett pkt med divergerende susceptibilitet, i $h=0$

b For antiferromagnet, $J = -|J|$ er

$$\mathrm{Max}\, J_{\vec{k}} = J_{\frac{\pi}{a},\frac{\pi}{a}} = 4\nu_0 |J|$$ på kvadratisk gitter

$\vec{q} = \{\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}\} \Rightarrow$ strukturen $\begin{matrix} A & B & A \\ B & A & B \\ A & B & A \end{matrix}$; antiferro $= \sqrt{2}\times\sqrt{2}$

Kritisk temperatur

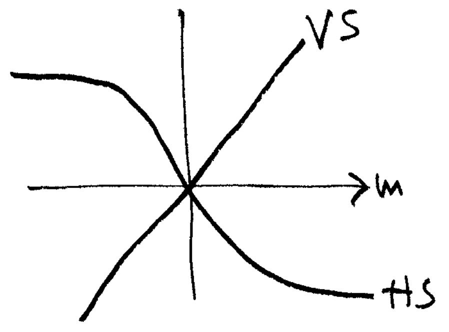
$$k_B T_c = (1-m^2)\, 4|J|$$

I $h=0 \Rightarrow m=0$ er $k_B T_c = 4|J|$ ("som" for ferromagnet)

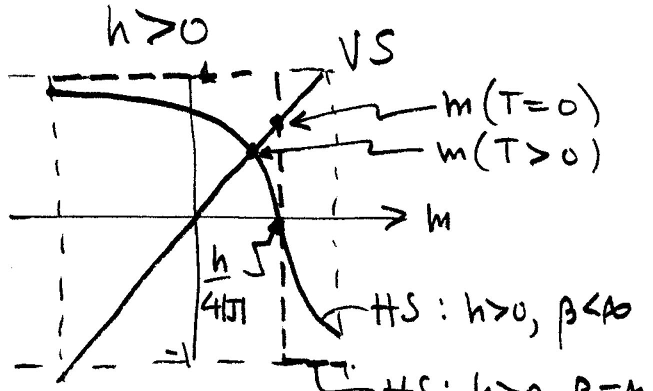
Men: I antiferromagnet har en divergerende susceptibilitet ved $\vec{k}=\vec{q}$ også når $h \neq 0$! Vi ser på (som for) det punktet der den homogene fasen blir ustabil. Der er stadig m gitt som

$$m = \tanh\left[\beta\left(-4|J|m + h\right)\right]$$

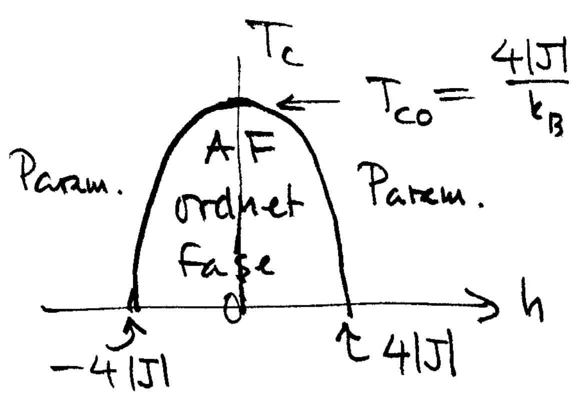
$h=0$



En løsning: $m=0$



⇓



En kritisk linje i h-T planet for antiferromagnet [underforstått: I null ytre "magnetisk vekselfelt"]

<u>c</u> Med nærmeste nabovekselvirkning kan en i MFT få homogene og "$\sqrt{2}\times\sqrt{2}$" ordnete faser. MFT gir <u>typen</u> ordnet fase, <u>og</u> T_c. Ut over dette er Landau-teoretisk tilnærming, som i oppgave I, like god som MFT. Samme (gale!) kritiske eksponenter. Gittergass-ekvivalensen gir detaljerte oversettelser mellom partikkel- (adatom-) og magnetisk (Ising) språk.

Kort sagt:

Landau-teorien ubundet av detaljer i Hamilton-funksjonen. <u>Postulerer</u> eksistensen av 2. ordens faseovergang til <u>gitt</u> ordnet struktur. Ut fra denne ordnete fasens symmetrier konstrueres Landaus fri energi som (med dagens etterpåklokskap) definerer en universalitetsklasse*.

MFT, <u>basert</u> på en detaljert Hamilton-funksjon, kan si noe (approksimativt!) om T_c og om <u>hvilken</u> ordnet struktur en får overgang <u>til</u>. Forøvrig ingen resultater ut over Landau (når det gjelder faseovergangens kvantitative karakteristika)

* U-klassen i oppgave Ie: "2-dimensjonal Heisenberg (x-y) med kubisk anisotropi" er en "ikke-universell universalitetsklasse" (!) Baxters 8-verteks modell er medlem.