8.334 İstatistiksel Mekanik II: Alanların İstatistiksel Fiziği
2008 Bahar

Faz Geçişleri

1. *Bir gazın kritik davranışı:* Bir gazın basıncı, yoğunluğuna $n = N/V$ ve sıcaklığına T

$$P = k_B T n - \frac{b}{2} n^2 + \frac{c}{6} n^3$$

kesilmiş serisiyle bağlıdır, burada b ve c pozitif oldukları kabul edilen, sıcaklıktan bağımsız sabitlerdir.
(a) Daha düşük sıcaklıklarda bu denklemin geçersiz olması gereken kritik sıcaklığı T_c, ve karşılık gelen kritik noktanın yoğunluk n_c ve basıncını bulun. Buradan, $k_B T_c n_c / P_c$ oranını bulun.
(b) Eşsıcaklık sıkıştırılabilirliğini $\kappa_T = -\frac{1}{V} \frac{\partial V}{\partial P}\Big|_T$ hesaplayın, ve $n = n_c$'de sıcaklığın fonksiyonu olarak davranışını kabataslak çizin.
(c) Kritik eşsıcaklık eğrisinde, $(P - P_c)$'nin $(n - n_c)$'nin fonksiyonu olarak ifadesini verin.
(d) Sistem, $T < T_c$'deki kritik eşsıcaklık eğrilerindeki kararsızlıktan, n_+ yoğunluğundaki bir sıvı ve n_- yoğunluğundaki gaz fazlarına ayrılarak kaçınır. T_c'ye yakın sıcaklıklarda, bu yoğunluklar $n_\pm \approx n_c(1 \pm \delta)$ olarak davranırlar. Maxwell yapılanmasını kullanarak, veya başka türlü, $\delta(T)$ için kapalı bir denklem bulun, ve $(T_c - T) \to 0$ iken davranışını belirtin. (İpucu: Eşsıcaklık eğrisi boyunca, kimyasal potansiyelin değişimi $d\mu = dP/n$ denklemine uyar.)
(e) Dieterici'nin durum denklemini sağlayan bir gaz düşünün:

$$P(v - b) = k_B T \exp\left(-\frac{a}{k_B T v}\right)$$

burada $v = V/N$. Kritik noktasında, $Pv/k_B T$ oranını bulun.
(f) Dieterici gazı için eşsıcaklık sıkıştırılabilirliğini κ_T, $v = v_c$'de, $T - T_c$'nin fonksiyonu olarak hesaplayın.
(g) Dieterici kritik eşsıcaklık eğrisi üzerinde, basıncı, $(v - v_c)$'de sıfırdan farklı en küçük mertebeye kadar açın.

****

2. *Manyetik ince filmler:* Kristalize bir film (basit kübik), sonlu n sayıda tabaka biriktirerek elde edilir. Her atomun üç bileşenli (Heisenberg) spini vardır, ve

$$-\beta\mathcal{H} = \sum_{\alpha=1}^{n} \sum_{<i,j>} J_H \vec{s}_i^{\alpha} \cdot \vec{s}_j^{\alpha} + \sum_{\alpha=1}^{n-1} \sum_i J_V \vec{s}_i^{\alpha} \cdot \vec{s}_i^{\alpha+1}$$

Hamiltoniyeni ile etkileşir. (Birim $\vec{s}_i^{\alpha}$ vektörü, α katmanındaki i konumundaki spini belirtir. Alt index $< i,j >$, i konumundaki spinin, aynı katmandaki kare ağda j olarak işaretlenmiş 4 en yakın komşusu ile etkileştiğini işaret eder.) Bir ortalama-alan yaklaştırması, varyasyonal $\rho_0 \propto \exp(-\beta\mathcal{H}_0)$ yoğunluğunda, deneme

$$-\beta\mathcal{H}_0 = \sum_{\alpha=1}^{n} \sum_i \vec{h}^{\alpha} \cdot \vec{s}_i^{\alpha}$$

Hamiltoniyeni ile elde edilir. (En genel, tek-konum Hamiltoniyeninin yüksek mertebeden $L^{\alpha}_{c_1,\cdots,c_p} s^{\alpha}_{c_1}\cdots s^{\alpha}_{c_1}$, burada s_c, $\vec{s}$ vektörünün c bileşeni, terimlerini de içerebileceğine dikkat edin.)
(a) $Z_0\left(\left\{\vec{h}^{\alpha}\right\}\right)$ bölüşüm fonksiyonunu ve $\beta F_0 = -\ln Z_0$'ı elde edin.
(b) $m_\alpha = |\langle \vec{s}_i^{\alpha}\rangle_0|$ mıknatıslanmalarını, ve $\langle \beta\mathcal{H}_0\rangle_0$'ı, $\mathcal{L}(h) = \coth(h) - 1/h$ *Langevin fonksiyonu* cinsinden elde ediniz.
(c) $\langle \beta\mathcal{H}\rangle_0$'ı, (makul) bütün varyasyonel $\left(\left\{\vec{h}^{\alpha}\right\}\right)$ alanlarının paralel olduğu varsayımı ile hesaplayın.
(d) Tam serbest enerji, $\beta F = -\ln Z$, Gibbs eşitsizliğini sağlar (aşağıya bkz.), $-\beta F \leq \beta F_0 + \langle \beta\mathcal{H} - \beta\mathcal{H}_0\rangle_0$. Mıknatıslanma $\{m_\alpha\}$ için, $\beta\mathcal{H}_0$'ı optimize eden kendinden tutarlı denklemleri bulunuz. Bu denklemleri sayısal olarak nasıl çözersiniz?
(e) Kritik sıcaklığı, ve mıknatıslanmanın *hacimsel bölgede* nasıl davrandığını, $n \to \infty$ limitinde bulun. ($\lim_{m\to 0} \mathcal{L}^{-1}(m) = 3m + 9m^3/5 + \mathcal{O}(m^5)$ olduğuna dikkat edin.)
(f) Kendinden tutarlı denklemleri doğrusallaştırarak, filmin kritik sıcaklığının, katmanların sayısına, n, $kT_c(n \gg 1) \approx kT_c(\infty) - J_V\pi^2/(3n^2)$ olarak bağlı olduğunu gösteriniz.
(g) Kendinden tutarlı denklemlerin, süreklilikteki şeklini elde ediniz, ve m'de üçüncü dereceden terimleri tutunuz. Elde edilen doğrusal olmayan differansiyel denklemlerin $m(x) = m_{\text{hacim}} \tanh(kx)$ şeklinde bir çözümü olduğunu gösterin. Bu çözümle hangi durumlar tasvir edilir?
(h) Yukarıdaki çözüm, *yarı sonsuz* bir sistemi tasvir etmesi için nasıl değiştirilebilir? İyileşme uzunluğu $\lambda \sim 1/k$ için, kritik davranışları elde edin.
(i) Yüzeyin mıknatıslanmasının $|T - T_c|$ gibi yok olduğunu gösterin.

(f)'deki sonuç, L boyutlarındaki bir sistemin geçiş sıcaklığının, asimptotik (sonsuz boyutlu) limitine aşağıdan, $T_c(L) = T_C(\infty) - A/L^{1/\nu}$ şeklinde, ν bağdaşma uzunluğunu kontrol eden üstel olmak üzere, nasıl yaklaştığı ile ilgili oldukça genel davranışını gösterir. Ancak, bazı sıvı kristal filmleri, bu davranışa aykırı davranıyormuş gibi göründüler. Aslında, bu filmlerde, çiftlenimler, yüzey katmanlarından daha kuvvetlidir, ve bundan dolayı hacimden daha önce düzene girerler. Bu durumda, T_c'nin katman sayısına bağlılığı ile ilgili bir tartışma için, bkz. H. Li, M. Paczuski, M. Kardar, ve K. huang, Phys. Rev. B **44**, 8274 (1991)

• **Gibbs eşitsizliğinin ispatı:** Zor bir problemin, $Z = \text{İz} e^{-\beta\mathcal{H}}$ bölüşüm fonksiyonunu yaklaşık olarak hesaplayabilmek için, özellikleri daha kolay hesaplanabilen, daha basit $\mathcal{H}_0$ Hamiltoniyeni ile başlarız. $\mathcal{H}(\lambda) = \mathcal{H}_0 + (\mathcal{H} - \mathcal{H}_0)$ Hamiltoniyeni, λ sıfırdan bire giderken, bir Hamiltoniyenden diğerine gider. Karşılık gelen bölüşüm fonksiyonu

$$Z(\lambda) = \text{İz}\left\{\exp\left[-\beta\mathcal{H}_0 - \lambda\beta(\mathcal{H} - \mathcal{H}_0)\right]\right\}$$

içbükeylik koşulunu sağlamak zorundadır $d^2 \ln Z(\lambda)/d\lambda^2 = \beta^2 \left\langle (\mathcal{H} - \mathcal{H})^2\right\rangle_{0c} \geq 0$, ve dolayısıyla

$$\ln Z(\lambda) \geq \ln Z(0) + \lambda \left.\frac{d\ln Z}{d\lambda}\right|_{\lambda=0}$$

Ama, $d\ln Z/d\lambda|_{\lambda=0} = \beta\langle \mathcal{H}_0 - \mathcal{H}\rangle_0$ olduğunu göstermek basittir, burada alt indeks $\mathcal{H}_0$'a göre beklenen değeri işaret eder. Serbest enerjileri $\beta F = -\ln Z$ olarak tanımlayarak,

$$\beta F \leq \beta F_0 + \langle \beta\mathcal{H} - \beta\mathcal{H}_0\rangle_0$$

eşitsizliğine geliriz.

****

3. *Süperakışkan $He^4 - He^3$ karışımları:* Süperakışkan He^4 düzen parametresi, bir karmaşık sayıdır $\psi(\mathbf{x})$. $c(\mathbf{x})$ yoğunluğundaki He^3 safsızlıklarının varlığında, bu sistemin aşağıdaki Landau-Ginzburg enerjisi vardır:

$$\beta\mathcal{H}[\psi, c] = \int d^d\mathbf{x} \left[\frac{K}{2}|\nabla\psi|^2 + \frac{t}{2}|\psi|^2 + u|\psi|^4 + v|\psi|^6 + \frac{c(\mathbf{x})}{2\sigma^2} - \gamma c(\mathbf{x})|\psi|^2\right]$$

burada K, u, ve v pozitiftir.
(a) He^3 yoğunluğunun integralini alarak,

$$Z = \int \mathcal{D}\psi \exp(-\beta\mathcal{H}_{\text{etkin}}[\psi]) \equiv \int \mathcal{D}\psi\mathcal{D}c \exp(-\beta\mathcal{H}[\psi, c])$$

olarak verilen etkin Hamiltoniyeni, $\beta\mathcal{H}_{\text{etkin}}[\psi]$, bulun.
(b) Semer noktası yaklaşımını kullanarak, $\beta\mathcal{H}_{\text{etkin}}[\psi]$ için faz diagramını elde edin. σ^*'ın, üstünde geçişin süreksiz hale geldiği limit değerini bulun.
(c)Süreksiz geçiş, beraberinde ψ'ın şiddetinde bir sıçrama da getirir. $\sigma \to \sigma^*$ iken, bu sıçrayış nasıl yok olur?
(d) Süreksiz geçişin, He^3 yoğunluğundaki bir sıçramayı getirdiğini gösterin.
(e) (t, σ) koordinatlarında, iki parçanın σ^*'da asıl birleştiğini göstererek, kabataslak çizin.
(f) $c(\mathbf{x})$ ve $\Psi(\mathbf{x})$ alanlarının ortak olasılıklarına geri dönerek, $\langle c(\mathbf{x}) - \gamma\sigma^2|\Psi(\mathbf{x})|^2\rangle = 0$ olduğunu gösterin.
(g) $\mathbf{x} \neq \mathbf{y}$ için $\langle c(\mathbf{x})c(\mathbf{y})\rangle = \gamma^2\sigma^4\langle|\ \Psi(\mathbf{x})\ |^2|\ \Psi(\mathbf{y})\ |^2\rangle$ olduğunu gösterin.
(h) Düzensiz fazda, $\langle c(\mathbf{x})c(0)\rangle$'ın, $c = |\mathbf{x}|$ ile nasıl azaldığını niceliksel olarak tartışın.
(i) Düzenli fazda, $\langle c(\mathbf{x})c(0)\rangle$'ın, asimptotik değerine nasıl azaldığını niceliksel olarak tartışın.

****

4. *Buruşturulmuş yüzeyler:* Buruşturulmuş bir sayfa kağıt, düz yaprakta $\mathbf{x} = (x_1, x_2)$ konumundaki noktanın üç boyutlu uzaydaki konumunu $\vec{r} = (r_1, r_2, r_3)$ gösteren bir vektör alanla tasvir edilebilir. Her konfigürasyonun enerjisinin ötelemeler ve dönmeler altında değişmez olduğu varsayılır.
(a) Bu sistemin, Landau-Ginzburg Hamiltoniyeninin ikinci derece kısmında en düşük iki mertebeden (türev olarak mertebe) terimlerin

$$\beta\mathcal{H}_0[\vec{r}] = \sum_{\alpha=1,2} \int d^2\mathbf{x} \left[\frac{t}{2}\partial_\alpha\vec{r} \cdot \partial_\alpha\vec{r} + \frac{K}{2}\partial_\alpha^2\vec{r} \cdot \partial_\alpha^2\vec{r}\right]$$

olduğunu gösterin.
(b) Dördüncü derecede ortaya çıkan en düşük mertebe terimleri (iki tane var) yazın.
(c) Dördüncü dereceden terimin gerekli kararlılığı verdiğini varsayarak (ve $K > 0$), t işaret değiştirdiğinde ne olduğunu tartışın.

****