8.334 İstatistiksel Mekanik II: Alanların İstatistiksel Fiziği
2008 Bahar

II.G Gauss İntegralleri

Bir önceki bölümde, dalgalanmaların enerji maliyeti, ikinci mertebede hesaplanmıştı. Bu dalgalanmalar, semer noktası serbest enerjisini de değiştirirler. Bu değişiklikleri hesaplamadan önce, Gauss integralleri hesaplama konusunda kısa (ancak gerekli), matematiksel bir ara verelim.

En basit Gauss integrali, tek bir değişken ϕ içerir:

$$\mathcal{I}_1 = \int_{-\infty}^{\infty} d\phi e^{-\frac{K}{2}\phi^2 + h\phi} = \sqrt{\frac{2\pi}{K}} e^{\frac{h^2}{2K}} \tag{II.54}$$

Yukarıdaki ifadenin h'ye göre türevlerini alarak, ϕ'nin kuvvetlerini içeren integraller yaratılır; yani

$$\begin{aligned} \frac{d}{dh}: \qquad & \int_{-\infty}^{\infty} d\phi \phi e^{-\frac{K}{2}\phi^2 + h\phi} = \sqrt{\frac{2\pi}{K}} e^{\frac{h^2}{2K}} \cdot \frac{h}{K}, \\ \frac{d^2}{dh^2}: \qquad & \int_{-\infty}^{\infty} d\phi \phi^2 e^{-\frac{K}{2}\phi^2 + h\phi} = \sqrt{\frac{2\pi}{K}} e^{\frac{h^2}{2K}} \cdot \left[\frac{1}{K} + \frac{h^2}{K^2}\right] . \end{aligned} \tag{II.55}$$

Eğer integrali alınan ifade, rastsal değişken ϕ'nin olasılığına karşılık geliyorsa, yukarıdaki integraller $\langle\phi\rangle = h/K$ ve $\langle\phi^2\rangle = h^2/K^2 + 1/K$ anlamına gelir. Karşılık gelen kümülantlar $\langle\phi\rangle_c = \langle\phi\rangle = h/K$ ve $\langle\phi^2\rangle_c = \langle\phi^2\rangle - \langle\phi\rangle^2 = 1/K$ olur. Aslında, Gauss dağılımının bütün yüksek mertebeden kümülantları sıfırdır çünkü

$$\langle e^{-ik\phi}\rangle \equiv \exp\left[\sum_{\ell=1}^{\infty} \frac{(-ik)^\ell}{\ell!}\langle\phi^\ell\rangle_c\right] = \exp\left[-ikh - \frac{k^2}{2K}\right] . \tag{II.56}$$

Şimdi, aşağıdaki, N değişken içeren Gauss integralina bakalım:

$$\mathcal{I}_N = \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{i=1}^{N} d\phi_i \exp\left[-\sum_{i,j}\frac{K_{i,j}}{2}\phi_i\phi_j + \sum_i h_i\phi_i\right] . \tag{II.57}$$

$\mathbf{K} \equiv K_{i,j}$ matrisini köşegenleştirerek, N tane tek boyutlu integrale indirgenebilir. Sadece *simetrik matris*leri göz önüne almamız gerektiğinden, özdeğerler gerçektir ve öz vektörleri de ortanormal yapılabilirler. $\mathbf{K}$'nin öz vektörlerini ve öz değerlerini sırasıyla $\hat{q}$ ve K_q ile gösterelim, yani $\mathbf{K}\hat{q} = K_q\hat{q}$. $\{\hat{q}\}$ vektörleri, orijinal N boyutlu uzayın yeni bir koordinat bazını oluştururlar. Bu uzaydaki herhangi bir nokta, ya $\{\phi_i\}$, ya da $\{\tilde{\phi}_q\}$, $\phi_i = \sum_q \tilde{\phi}_q\hat{q}_i$ olmak üzere, koordinatları ile gösterilebilir. Şimdi, integral değişkenlerini $\{\phi_i\}$'den $\left\{\tilde{\phi}_q\right\}$'a değiştirebiliriz. Bu üniter dönüşümün Jakobiyen'i birdir, ve

$$\mathcal{I}_N = \prod_{q=1}^{N} \int_{-\infty}^{\infty} d\tilde{\phi}_q \exp\left[-\frac{K_q}{2}\tilde{\phi}_q^2 + \tilde{h}_q\tilde{\phi}_q\right] = \prod_{q=1}^{N} \sqrt{\frac{2\pi}{K_q}} \exp\left[\frac{\tilde{h}_q K_q^{-1}\tilde{h}_q}{2}\right] . \tag{II.58}$$

Son ifade, matrisin *tersi*ni $\mathbf{K^{-1}}$, öyle ki $\mathbf{K^{-1}K} = \mathbf{1}$, kullanarak ilk koordinatlar cinsinden ifade edilebilir. Matrisin determinantı seçilen bazdan bağımsız olduğu için, $\det \mathbf{K} = \prod_q K_q$ ve

$$\mathcal{I}_N = \sqrt{\frac{(2\pi)^N}{\det \mathbf{K}}} \exp\left[\sum_{i,j} \frac{K^{-1}_{i,j}}{2} h_i h_j\right] . \tag{II.59}$$

$\{\phi_i\}$'leri, ortak olasılık dağılımları denklem II.57'deki integrali alınan fonksiyonla orantılı rastgele değişkenler olarak alırsak, *ortak karakteristik fonksiyon*u

$$\left\langle e^{-i\sum_j k_j \phi_j}\right\rangle = \exp\left[-i\sum_{i,j} K^{-1}_{i,j} h_i k_j - \sum_{i,j} \frac{K^{-1}_{i,j}}{2} k_i k_j\right] . \tag{II.60}$$

olarak verilir.

Dağılımın *moment*leri, karakteristik fonksiyonun k_i'ye göre türevlerinden, *kümülantlar* da logaritmasının türevlerinden elde edilir. Dolayısıyla, denklem II.60

$$\left\{\begin{array}{lcl} \langle \phi_i \rangle_c & = & \sum_j K^{-1}_{i,j} h_j \\ \langle \phi_i \phi_j \rangle_c & = & K^{-1}_{i,j} \end{array}\right. \tag{II.61}$$

anlamına gelir. Denklem II.60'ın bir başka faydalı şekli

$$\langle \exp(A) \rangle = \exp\left[\langle A \rangle_c + \frac{1}{2}\langle A^2 \rangle_c\right] . \tag{II.62}$$

burada $A = \sum_i a_i \phi_i$ Gauss dağılımlı değişkenlerin herhangi bir dogrusal birleşimidir. Bu sonucu daha önce, bir süperiletkende faz salınımları varken düzen parametresini hesaplamak için kullandık.

Gauss *fonksiyonel integralleri* yukarıdaki çok değişkenli integralin bir limit durumudur. i noktalarını d-boyutlu bir ağ üzerinde noktalar olarak düşünün ve ağ aralığını sıfıra götürün. Süreklilik limitinde, $\{\phi_i\}$'ler $\phi(\mathbf{x})$ fonksiyonlarına dönüşür ve K_{ij} yerine $K(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$ çekirdeği gelir. Denklem II.59'un doğal genellemesi

$$\begin{aligned} &\int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{D}\phi(\mathbf{x}) \exp\left[-\int d^d\mathbf{x} d^d\mathbf{x}' \frac{K(\mathbf{x}, \mathbf{x}')}{2} \phi(\mathbf{x})\phi(\mathbf{x},) + \int d^d\mathbf{x} h(\mathbf{x})\phi(\mathbf{x})\right] \\ &\propto (\det \mathbf{K})^{-1/2} \exp\left[\int d^d\mathbf{x} d^d\mathbf{x}' \frac{K^{-1}(\mathbf{x}, \mathbf{x}')}{2} h(\mathbf{x}) h(\mathbf{x}')\right] \end{aligned} \tag{II.63}$$

burada ters çekirdek $K^{-1}(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$,

$$\int d^d\mathbf{x}' K(\mathbf{x}, \mathbf{x}') K^{-1}(\mathbf{x}', \mathbf{x}'') = \delta^d(\mathbf{x} - \mathbf{x}'') \tag{II.64}$$

denklemini sağlar. $\mathcal{D}\phi(\mathbf{x})$ ifadesi, fonksiyonel integrali gösterir. Denklem II.63'de yazılmamış $(2\pi)^{N/2}$ orantı sabiti vardır. $N \to \infty$ süreklilik limitinde sonsuz olmakla beraber, benzer integrallerin türevleri olarak elde edilen ortalamaları etkilemez. Özel olarak, Gauss dağılımlı fonksiyonlar için, denklem II.61

$$\begin{cases} \langle\phi(\mathbf{x})\rangle_c &= \int d^d\mathbf{x}' K^{-1}(\mathbf{x},\mathbf{x}')h(\mathbf{x}') \\ \langle\phi(\mathbf{x})\phi(\mathbf{x}')\rangle_c &= K^{-1}(\mathbf{x},\mathbf{x}') \end{cases} \quad \text{(II.65)}$$

olarak genelleşir.

Landau-Ginzburg Hamiltoniyen'e küçük salınımları incelerken

$$\int d^d\mathbf{x}\left[(\nabla\phi)^2 + \phi^2/\xi^2\right] \equiv \int d^d\mathbf{x} d^d\mathbf{x}' \phi(\mathbf{x}')\delta^d(\mathbf{x}-\mathbf{x}')(-\nabla^2+\xi^{-2})\phi(\mathbf{x}) \quad \text{(II.66)}$$

kareli formuna rastlamıştık, bu, çekirdeğin

$$K(\mathbf{x},\mathbf{x}') = K\delta^d(\mathbf{x}-\mathbf{x}')(-\nabla^2+\xi^{-2}) \quad \text{(II.67)}$$

olduğu anlamına gelir. Denklem II.64'den, ters çekirdek

$$K\int d^d\mathbf{x}''\delta^d(\mathbf{x}-\mathbf{x}'')(-\nabla^2+\xi^{-2})K^{-1}(\mathbf{x}''-\mathbf{x}') = \delta^d(\mathbf{x}'-\mathbf{x}) \quad \text{(II.68)}$$

denklemini sağlar ki, bu da

$$K(-\nabla^2+\xi^{-2})K^{-1}(\mathbf{x}) = \delta^d(\mathbf{x}) \quad \text{(II.69)}$$

denklemini sağladığı anlamına gelir. Denklem II.44 ile kıyaslandığında, daha önce daha az doğrudan bir yöntemle elde edilen, $K^{-1}(\mathbf{x}) = \langle\phi(\mathbf{x})\phi(\mathbf{0})\rangle = -I_d(\mathbf{x})/K$ olduğu anlaşılır.

II.H Semer Noktasına Salınım Düzeltmeleri

Artık semer noktası etrafındaki salınımların serbest enerjiyi ve diğer makroskopik özellikleri nasıl değiştirdiğini inceleyebiliriz. Denklem II.35'den başlayarak, küçük salınımları içeren bölüşüm fonksiyonu

$$Z \approx \exp\left[-V\left(\frac{t}{2}\bar{m}^2 + u\bar{m}^4\right)\right]\int\mathcal{D}\phi_b(\mathbf{x})\exp\left\{-\frac{K}{2}\int d^d\mathbf{x}\left[(\nabla\phi_b)^2 + \frac{\phi_b^{2\,2}}{\xi_b}\right]\right\}$$
$$\cdot\int\mathcal{D}\phi_e(\mathbf{x})\exp\left\{-\frac{K}{2}\int d^d\mathbf{x}\left[(\nabla\phi_e)^2 + \frac{\phi_e^2}{\xi_e^2}\right]\right\} \quad \text{(II.70)}$$

olur. Her Gauss çekirdeği,

$$\tilde{\phi}(\mathbf{q}) = \int d^d\mathbf{x}\exp e(-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x})\phi(\mathbf{x})/\sqrt{V}$$

Fourier dönüşümü ile köşegenleştirilir ve karşılık gelen özdeğerler $K(\mathbf{q}) = K(q^2 + \xi^{-2})$ olur. Elde edilen $\mathbf{K}$'nin determinantı böyle özdeğerlerin çarpımıdır ve dolayısıyla

$$\ln \det \mathbf{K} = \sum_q \ln K(\mathbf{q}) = V \int \frac{d^d\mathbf{q}}{(2\pi)^d} \ln[K(q^2 + \xi^{-2})] \tag{II.71}$$

olur. Denklem II.70'den elde edilen serbest enerji

$$f = -\frac{\ln Z}{V} = \frac{t\bar{m}^2}{2} + u\bar{m}^4 + \frac{1}{2}\int \frac{d^d\mathbf{q}}{(2\pi)^d} \ln[K(q^2 + \xi_b^{-2})] + \frac{n-1}{2}\int \frac{d^d\mathbf{q}}{(2\pi)^d} \ln[K(q^2 + \xi_e^{-2})] \tag{II.72}$$

olarak verilir. ($n - 1$ tane enine bileşen olduğuna dikkat ediniz.) Bağdaşıklık uzunluğunun indirgenmiş sıcaklığa bağlılığını kullanarak, ısı sığasının tekil kısmı

$$C_{\text{tekil}} \propto -\frac{\partial^2 f}{\partial^2 t} = \begin{cases} 0 + \frac{n}{2}\int \frac{d^d\mathbf{q}}{(2\pi)^d} \frac{1}{(Kq^2+t)^2} & t > 0 \text{ için} \\ \frac{1}{8u} + 2\int \frac{d^d\mathbf{q}}{(2\pi)^d} \frac{1}{(Kq^2-2t)^2} & t < 0 \text{ için} \end{cases} \tag{II.73}$$

olarak elde edilir. Düzeltme terimleri

$$C_F = \frac{1}{K^2}\int \frac{d^d\mathbf{q}}{(2\pi)^d} \frac{1}{(q^2 + \xi^{-2})} \tag{II.74}$$

ile orantılıdır. İntegral, (uzunluk)$^{4-d}$ boyutundadır ve $d = 4$'de davranışı değişir. $d > 4$ için, integral büyük $\mathbf{q}$'da ıraksar ve $\Lambda \simeq 1/a$, a ağ aralığı olmak üzere, tarafından belirlenir. $d > 4$ için, integral iki limitte de sonludur. İntegral, $\mathbf{q}$'yu ξ^{-1} ile ölçekleyerek, boyutsuz yapılabilir ve dolayısıyla ξ^{4-d} ile orantılıdır. Bu yüzden

$$C_F \approx \frac{1}{K^2}\begin{cases} a^{4-d} & d > 4 \text{ için} \\ \xi^{4-d} & d < 4 \text{ için} \end{cases} \tag{II.75}$$

olur.

$d > 4$ boyutlarında, ısı sığasına gelen salınım düzeltmeleri, geçişin iki tarafında fona sabit bir terim ekler. Ancak, tekilliğin temel şekli, C'deki bir süreksizlik, değişmez. $d < 4$ için, geçişte $\xi \propto t^{-1/2}$'nin ıraksaması, denklem II.75'den bir düzeltme getirir, ki bu asıl süreksizlikten daha önemlidir. Gerçekten de, düzeltme $\alpha = (4 - d)/2$ olan bir üstele karşılık gelir. Ancak, bu semer noktası sonucuna gelen ilk düzeltmedir. C_F'ın ıraksaması, semer noktası hesaplarının, *üst kritik boyut* denen $d \leq 4$'te güvenilir olmadığı anlamına gelir. Bu boyutu ısı sığasına gelen salınım düzeltmelerine bakarak elde ettiğimiz halde, herhangi bir başka niceliğin, mıknatıslanma ya da alınganlık gibi, tekil kısmına bakarak da elde edebilirdik. $d \leq 4$ boyutlarında, salınımlardan kaynaklı katkılar her zaman, birincil tekil davranışı, dolayısıyla kritik üstelleri, değiştirirler.

II.I Ginzburg Kriteri

Böylece, salınımların önemini belirlemiş ve semer noktası yaklaşımının gözlemlenen üstelleri açıklamaktaki başarısızlığının olası sebebleri olarak belirlemiş olduk. Ancak, bölüm II.G'de de belirtildiği gibi, bazı malzemelerde, mesela süperiletkenler, deneysel sonuçlar, bu yaklaşımla elde edilen üstellerle çok iyi bir uyum içerisindedir. Salınımların süperiletkenlerde, diğer faz geçişlerine oranla niye daha az önemli olduğunu sayıya dökebilir miyiz?

Denklem II.75, salınımların, bağdaşıklık uzunluğundakı ıraksamadan dolayı önem kazandıklarını gösterir. Semer noktası yaklaşımında, bağdaşıklık uzunluğu $\xi \approx \xi_0|t|^{-1/2}$ şeklinde ıraksar, burada $t = (T_c - T)/T$, indirgenmiş sıcaklık, ve $\xi_0 \approx \sqrt{K}$ ise *mikroskopik* uzunluk ölçeğidir. İlke olarak, ξ_0 saçılma çizgi şekillerine uydurularak deneysel olarak ölçülebilir. Yaklaşık olarak, faz geçişinde, düzen kazanan birimlerin boyutuna eşit olması gerekir. Sıvı-gaz geçişinde, ξ_0, $(v_c)^{1/3}$ olarak tahmin edilebilinir, burada v_c kritik atom hacmidir. Süperakışkanlarda, ξ_0, yaklaşık olarak termal dalga boyuna $\lambda(T)$ eşittir. Bu iki tahmin de bir kaç atomik aralık mertebesindedir $1 - 10$Å. Diğer taraftan, bir süperiletkendeki temel birim Cooper çiftleridir. Çiftlenmiş elektronlar, Coulomb itmesinden dolayı birbirlerinde ayrılmaya zorlanırlar, bu da büyük bir ayrılığa sebep olur $\xi_0 \approx 10^3$Å.

Salınımların önemi denklem II.73deki iki terimi kıyaslayarak tartılabilir; semer noktası süreksizliği $\Delta_{S.N.} \propto 1/u$, ve C_F düzeltme terimi. $K \propto \xi_0^2$ olduğundan dolayı, düzeltme terimi $\xi_0^{-d} t^{-(4-d)/2}$ ile orantılıdır. Dolayısıyla salınımlar önemlidir eğer

$$\xi_0^{-d} t^{-\frac{4-d}{2}} \gg \Delta C_{S.N.}, \quad \Longrightarrow \quad |t| \ll t_G \simeq \frac{1}{(\xi_0^d \Delta C_{S.N.})^{\frac{2}{4-d}}} \tag{II.76}$$

ise. Yukarıdaki gereklilik *Ginzburg kriteri* olarak bilinir. Doğal olarak $d < 4$ için, kritik noktaya yeterince yakında sağlanır. Ancak, deneyin çözünürlüğü Ginzburg indirgenmiş sıcaklığından t_G daha yakına gelmek için yeterli olmayabilir. Bu durumda, $t > t_G$ indirgenmiş sıcaklıklarındaki görünen tekillikler semer noktası davranışı gösterebilir. Öyleyse, denklem II.76'da görünen, bu görünüşteki süreksizliktir, ve kendinden tutarlı bir şekilde t_G'yi belirlemek için kullanılabilinir. Açıkça, $\Delta C_{S.N.}$ ve ξ_0'nun ikisi de boyutsuz birimlerde ölçülebilir, ξ_0 atomik boyut a biriminde, $\Delta C_{S.N.}$, Nk_b biriminden. İkincisi, pek çok geçiş için bir mertebesindedir, ve dolayısıyla $d = 3$ için, $t_G \approx \xi_0^{-6}$'dır. ξ_0'ın bir kaç atomik aralık mertebesinde olduğu durumlarda, $t_G \approx 10^{-1} - 10^{-2}$'lik bir çözünürlük yeterli olacaktır. Ancak, süperiletkenlerde $\xi_0 \approx 10^3 a$'dır ve salınımların etkisini görebilmek için, $t_G < 10^{-18}$'lik bir çözünürlük gerekmektedir. Bu, şu anki aletlerin yeteneklerinin çok ötesindedir. Yeni yüksek sıcaklık süperiletkenlerinin çok daha küçük bir bağdaşıklık uzunluğu vardır $\xi_0 \approx 10a$ ve gerçekten de salınımların bazı etkilerini gösterirler.

Yeniden, benzer bir kriterin, başka nicelikleri inceleyerek de elde edilebileceğini vurgulayalım. Belli bir X niceliğinin ölçülmesinde salınımlar $t \ll t_G(X) \simeq A(X)\xi^{-2d/(4-d)}$ için önemli olurlar. Ancak, $A(X)$ katsayısı farklı nicelikler için farklı olabilirler (bir veya iki mertebe). Dolayısıyla, esas itibariyle, bir nicelikte semer noktası davranışını gözlemlerken, aynı çözünürlükte, salınımlar bir başka nicelikte önemli olabilirler. Elbette, yeterince yüksek çözünürlükte salınımlar her zaman için önemli olacaktır.

Landau-Ginzburg yaklaşımı ile elde edilen sonuçların bir özeti aşağıda verilmiştir:

• $d_u = 4$ üst kritik boyutundan büyük d boyutlarında, semer noktası yaklaşımı geçerlidir ve kritik noktadaki kritik davranış $\alpha = 0$, $\beta = 1/2$, $\gamma = 1$, $\nu = 1/2$, $\cdots$ üstelleri ile tasvir olunur
• Alt kritik boyuttan (sürekli simetri için $d_\ell = 2$, ve kesikli simetri için $d_\ell = 1$'dir) küçük d boyutta, salınımlar, düzenli fazı yok edecek kadar kuvvetlidir.
• Ara boyutlarda, $d_\ell \leq d \leq d_u$, salınımlar, semer noktası sonucunu değiştirecek kadar kuvvetlidir, ancak tamamen yok edecek kadar önemli değillerdir. Maalesef, veya neyseki, $d = 3$'te bizi ilgilendiren durum bu durumdur.