Tartalomjegyzék

1 Fázisátalakulások és a dimenzió

Legyen egy termodinamikai rendszerünk, melyet tanulmányozunk, és melyet a Φ termodinamikai potenciál ír le. Amennyiben például a tanulmányozást rögzített p nyomás, T hőmérséklet és n molszám mellett végezzük, $\Phi = G = F + pV$ a *Gibbs–potenciál*, melyre:

$$dG = -SdT + Vdp - MdH + \sum \mu_i dn_i \ , \tag{1.1}$$

$$G = G(T, p, n_i) \ ; \quad G = \sum_i n_i \mu_i \ . \tag{1.2}$$

Célunk az, hogy a tanulmányozott anyagot az alkalmazások céljából olyan állapotba hozzuk, melyben kvalitatív új tulajdonságokkal rendelkezik. Ez csak a fázisátalakulás során lehetséges, és mindennek következtében, a fázisátalakulások tanulmányozása a statisztikus fizikában egy lényeges központi téma szerepét tölti be.

1.1 Bevezető fogalmak

A fogalmak rögzítése végett a konvencionális módon kezdjük el a fázisátalakulások tanulmányozását, úgy, hogy rögzített (p, T, n)–re, azaz $\Phi = G$–re szemléltetünk. A kiindulópontként használt alapinformáció a következő: Hogy a rendszerünk milyen állapotban van, azt Φ szélsőértéke határozza meg. A Φ abszolút minimuma az egyensúlyi, Φ más minimuma pedig a metastabil állapotot adja.

Továbbmenetel előtt néhány fontos megjegyzés felsorolása szükséges a pontosság végett. A fenntebb elmondottak, beleértve a termodinamikai potenciál szélsőértékére vonatkozó állításokat is, csupán termodinamikai határesetben érvényesek, így a fázisátalakulások tanulmányozása is tradicionálisan termodinamikai határesetben történik. A termodinamikai határeset létezését a priori feltételezni fogjuk a továbbiakban. Egzaktul igazolható [1] hogy d dimenzióban, $U(r) \sim r^{-\sigma}$ kölcsönhatási potenciál esetében, a termodinamikai határeset létezik, ha $\sigma > d$. (Megjegyzendő, előrevetítve a dolgokat, hogy $n = 1$ komponensű spin esetében, ami az Ising típusú spinváltozót definiálja, $\sigma = d = 1$–re is létezik a termodinamikai határeset). Ennek kapcsán megjegyzendő, hogy a Coulomb vagy a gravitációs $U(r) \sim 1/r$ típusú hosszútávú kölcsönhatási potenciálok nem engedélyeznek termodinamikai határesetben vett viselkedést. Mindennek ellenére, a termodinamikai határeset létezésének feltételezése nem jelent komolyabb megszorítást, mert sokrészecskés rendszerekben a kölcsönhatások mindig árnyékolódnak, mely következtében lecsengésük többnyire exponenciálissá válik, ami megengedi a termodinamikai határesetet. Rögzített párkölcsönhatások esetében, ami pl. a lokalizált spin–rendszerekben előfordul, a termodinamikai határeset létezésének feltétele $\sum_{(j\neq i)} |J_{ij}| < \infty$, ahol J_{ij} a spinek közötti csatolást jelöli.

Most tételezzük fel, hogy habár a rendszer egykomponensű és adott körülmények között homogén, bizonyos jellemző makroszkópikus paraméterek esetében két egymással érintkező homogén részre esik szét, melyek egymástól különböznek, és így különböző állapotokat jelölnek. Az anyag ezen állapotait, melyek érintkezve egymással, egyensúlyban egyidejűleg léteznek, fázisoknak nevezzük. Tudjuk, hogy Φ minimuma határozza meg az állapotot, és ha két fázis egyensúlyban van, akkor a két fázis fajlagos Φ termodinamikai potenciáljának (az extrémumban) egyenlőnek kell lennie.

$$\Phi_1(T,p,n) = \Phi_2(T,p,n) \tag{1.3}$$

Az n anyagmennyiség állandó lévén, ezen egyenlőség $p = p(T)$ egyenlet fennállását jelenti. Így az (**??**) egyenlet a (p,T) diagramban egy görbét eredményez, mely a két különböző fázist egymástól elhatárolja, s mely koegzisztenciagörbe (vagy fázishatár, fáziselválasztó) görbe nevet viseli. Ezen görbe átszelése vezet fázisátalakuláshoz.

Amint az (**??**) egyenletből látszik, a termodinamikai potenciál a fázisátalakulás során folytonosan változik, de ez a tulajdonság általában az összes parciális deriváltjaira nem terjeszthető ki. Attól függően, hogy Φ hányadrendű parciális deriváltjai szenvednek ugrást a fázisátalakulás során, határozzuk meg Ehrenfest szerint a fázisátalakulás rendjét:

a.) Ha a fázisátalakulás során az elsőrendű parciális deriváltak szenvednek ugrást, mint például az S entropia, vagy a V térfogat:

$$S = -\frac{\partial G}{\partial T}\Big|_{p,H} \; ; \quad V = \frac{\partial G}{\partial p}\Big|_{T,H} \; ; \tag{1.4}$$

akkor elsőrendű fázisátalakulásról beszélünk. Amint tudjuk, ez térfogatváltozással és latens hő megjelenésével jár, melyeket például az ismert Clausius–Clapeyron–egyenlet jellemez.

b.) Ha S, V és a termodinamikai potenciál többi elsőrendű deriváltjai a fázisátalakulás során folytonosan változnak, de a másodrendű deriváltak ugrást szenvednek, másodrendű fázisátalakulásról beszélünk. Az ekkor érintett mennyiségek pl. a mágneses szuszceptibilitás (χ), vagy a fajhő (C):

$$\chi = \frac{\partial M}{\partial H} = -\frac{\partial^2 G}{\partial H^2} \; ; \quad C = T\frac{\partial S}{\partial T} = -\frac{\partial^2 G}{\partial T^2} \; ; \quad \ldots stb. \tag{1.5}$$

Ez esetben a fázisátalakulást sem térfogatváltozás, sem latens hő nem kíséri.

Elvileg ezen gondolatmenet tovább folytatható [2], míg a végtelen rendű fázisátalakuláshoz [3] érünk:

c.) Végtelen rendű fázisátalakulás során a termodinamikai potenciál minden véges rendű deriváltja folytonos. Ilyen fázisátalakulás létezik: például a Kosterlitz–Thouless–Berezinski–féle (KTB) fázisátalakulás ilyen.

Az Ehrenfest–féle rendszerezés napjainkban kevésbé használt a pontos jellemzések esetében [4]. Ennek oka többrétű: ezen rendszerezés felállítása pillanatában nem volt például ismeretes, hogy a másodrendű fázisátalakulásoknál a másodrendű deriváltak nem ugrást szenvednek, hanem divergálnak. Amint látni fogjuk, ezen divergencia fedi a fizikai tartalom lényegét, kihangsúlyozza a termodinamikai határeset fontosságát, lehetőséget ad a kritikus exponensek bevezetésére, lehetővé teszi a konvencionális hosszútávú térbeli rendezettség megértését, és egyben ezen fogalom túllépését. Mindez történhet például a topologikus rendezettség fogalmán keresztül (pl. a KTB átmenet esetében), mely során a divergencia típusa változik meg, vagy például az időbeli rendezettségen keresztül, mely általában az ergodicitás nemtriviális sérülésével kapcsolatos, és pl. a spin–üveget jellemzi.

A fizikai tartalom lényegének megértése céljából tehát nem az Ehrenfest–féle rendszerezésből eredő fogalmakra, hanem olyan fogalomrendszerre építünk majd a továbbiakban, melynek központjában a hosszútávú térbeli rendezettség, folytonos fázisátalakulás, kritikus tartomány, korrelációs hossz, kritikus exponensek és skálainvariancia állnak majd.

1.2 A Gibbs féle fázisszabály

Mindeddig láttuk, hogy a koegzisztencia görbe mentén, két fázis érintkezik egymással. Azon probléma fog érdekelni a továbbiakban, hogy rögzített körülmények között, például a (p, T) diagramban, maximálisan hány fázis érintkezhet, azaz lehet egyensúlyban egymással. Legyen e célból egy l komponensű rendszerünk.

A legtöbb számú fázis egymással pontban érintkezhet. Így tételezzük fel, hogy egy adott pontban r darab fázis érintkezik. Mindegyik fázisnak saját termodinamikai potenciálja van, $\Phi_1, \dots, \Phi_r$, melyek között egyenlőségnek kell fennállnia az érintkezési pontban, Φ folytonossága miatt. Az r mennyiség egymás közötti egyenlőségét $r-1$ egyenlettel írhatjuk le. Legyen a továbbiakban r maximális. Ekkor az $r-1$ egyenletünk maximálisan csak $r-1$ változó meghatározását engedélyezi. Most mindegyik Φ_i, $l+1$ független változótól függ, éspedig $l-1$ relatív koncentrációtól (l komponensből $l-1$ független „arány”, azaz relatív koncentráció írható fel), és két további változótól, ami T és p. Így maximális r esetén

$$r_{max} - 1 = l + 1 \quad \Rightarrow \quad r_{max} = l + 2, \tag{1.6}$$

tehát:

$$r \leq l + 2 \tag{1.7}$$

Ezen összefüggés a *Gibbs–féle fázisszabály* néven ismeretes. Értelme egyszerű: l komponensű rendszer esetében, rendezettségi formától függetlenül, maximálisan $l+2$ fázis lehet egymással egyensúlyban, azaz „érintkezhet egymással”.

Egyszerű alkalmazásként megemlíthető az $l = 1$ eset: Egykomponensű rendszer esetében $r_{max} = 3$, tehát maximálisan három fázis érintkezhet egymással. Ezek szerint egy egykomponensű rendszer a (p, T) diagramjában maximálisan hármaspontot mutathat; benne négy fázis egyensúlya, azaz négyespont, nem lehetséges.

Mindezek után, az ami a termodinamikai rendszerre az eddig bemutatottak alapján fázisátalakulások szempontjából érzékelhető, az azon tény, hogy a rendszernek különböző fázisai lehetségesek, melyek a megemlített módón érintkezhetnek egymással. Minket viszont itt az is érdekel, hogy hogyan jutunk át egyik fázisból a másikba, azaz hogyan és milyen körülmények között jön létre fázisátalakulás. Ha egy ilyen elemzést megpróbálunk végrehajtani, a számítások során (pl. a sűrűségmatrix vagy a particiós függvény kifejezésekor) rájövünk arra, hogy az első rögzítendő paraméter, mely a végeredményeket döntő mértékben befolyásolja, az a d dimenzió. Így indulásként a fázisátalakulás és a dimenzió kapcsolatát fogjuk tanulmányozni.

1.3 A fázisok egyensúlya és a dimenzió

A következőkben egy Landautól és Peierlstől származó gondolatmenetet fogunk megvizsgálni, melynek érdekessége abban nyilvánul meg, hogy mindamellett hogy fontos kérdéseket világít meg, a lehető legegyszerübb módon közelíti meg a d függés tematikáját. A kiinduló alapgondolat az, hogy ha van egy fázisátalakulás, kell létezzen legalább egy pont egy hipotetikus fázisátalakulási görbén, amelyben a (legegyszerübb esetben) két fázis egymással egyensúlyban legyen. Nézzük meg, lehetséges–e mindez $d = 1$ dimenzióban, vagy nem.

1.3.1 A d=1 dimenzió esete a Landau-féle gondolatmenetben

Legyen egy egydimenziós lánc, melynek N csomópontja van (vagy amely N részecskét tartalmaz). Most tételezzük fel, hogy ebből N_A van az A fázisban, N_B pedig a B fázisban, úgy hogy N_A/N_B rögzített, de tetszőleges értékű, és $N_A + N_B = N$. Azt akarjuk megnézni, hogy lehet-e az A és B fázis egymással egyensúlyban egy dimenzióban vagy nem, ami előfeltétele lenne a $d = 1$–ben létrejövő esetleges fázisátalakulásnak.

Legyen Φ_0 a két fázis teljes anyagmennyiségének megfelelő termodinamikai potenciál, mely nem függ a különböző fázisok közötti érintkezési pontoktól. Tehát amennyiben N_A és N_B rögzítettek, Φ_0 ugyanaz marad, függetlenül attól, hogy a láncunk mentén A és B hogyan van megosztva egymás között. Mindezt úgy képzelhetjük el, hogy az A részt, B jelenléte nélkül, Φ_A jellemzi, és hasonlóan, a B részt, az A jelenléte nélkül, a Φ_B adja meg. A két A és B komponenst egymás mellé téve, eltekintve a köztük lévő kölcsönhatástól, Φ extenzív mivoltát kihasználva, $\Phi_0 = \Phi_A + \Phi_B$. Látható, hogy egyelőre Φ_0–ban, az A és B fázisok közötti érintkezési pontok létezését nem vettük figyelembe.

A következőkben, a gondolatmenet folytatása érdekében, osszuk fel a tanulmányozott láncot rendezetlenül az A és B fázisok között úgy, hogy n darab $A - B$ érintkezési pont jöjjön létre. Ezen formában, a láncon a tanulmányozott fázisok véges szakaszokban léteznek, melyek mindegyikét két érintkezési pont határol, s melyek hossza rendezetlen. Mindezen felosztást úgy végezzük, hogy a kiindulópontként választott A fázis és B fázis „nagysága" ugyanaz maradjon (azaz N_A és N_B nem változik). A láncunk ilyenszerű felosztása Φ_A, Φ_B, illetve Φ_0 értékén nem változtat, mert a Φ_0 termodinamikai potenciál extenzív (összeadandó) mennyiség, és eltekint az $A-B$ közötti kölcsönhatásoktól.

Vegyük a következőkben figyelembe az érintkezési pontok jelenlétét. Tételezzük fel e célból, hogy az n érintkezési pontok száma egy nagy szám (így termodinamikailag tárgyalni lehet n–et), de mindezek mellett legyen sokkal kisebb N-nél, azaz: $n/N \ll 1$. Látható, hogy a gondolatmenet valójában csak termodinamikai határesetben alkalmazható. A két fázis érintkezésekor ezen érintkezési pontok szabadon mozoghatnak anélkül, hogy identitásukat elvesztenék, mivel nem kötöttük ki azt sem, hogy a fázisok milyenek, azt sem, hogy hogyan oszlanak meg a lánc mentén, továbbá az $A-B$ felosztást rendezetlenül végeztük el. Mivel a rendszerben az érintkezési pontok koncentrációja kicsi, első közelítésben feltételezhetjük, hogy egymás közötti kölcsönhatásuk kicsi. Továbbá, mivel A és B közötti érintkezési pontokat jellemzik, kölcsönhatásuk az A és B fázisokkal gyakorlatilag nincs jelen. Mindezek után az érintkezési pontokat úgy foghatjuk fel, hogy egy „híg" oldatot alkotnak a Φ_0-val jellemzett rendszerben, és abban úgy viselkednek, mint egy ideális *Boltzmann–gáz*, amelynek szabadságfokai a Φ_0-t meghatározó rendszer szabadságfokaitól függetlenek. Ilyen esetben tudvalevő, hogy ha Φ_0 állapotösszege Z_0, és a gáz állapotösszege Z_1, független szabadságfokokról lévén szó, összeszorzódnak, azaz: $Z = Z_0 \cdot Z_1$. Továbba Z_1 egy ideális *Boltzmann–gáz* állapotösszege, tehát:

$$Z_1 = \frac{1}{n!}\left(\sum_i e^{-\frac{\varepsilon_i}{T}}\right)^n \quad , \tag{1.8}$$

ahol ε_i egyetlen érintkezési pont lehetséges energiaértékeit jelöli. Mivel ε_i az A és B fázistól függ, konkrét értékeit nem ismerjük, de a továbbiakban nem is szükségszerű konkretizálni. Bevezetve a

$$\sum_i e^{-\frac{\varepsilon_i}{T}} = \frac{1}{f(T,p)} \tag{1.9}$$

jelölést, első közelítésben

$$\Phi = -T\ln Z = \Phi_0 - T\ln\left(\frac{1}{n!}\,\frac{1}{f^n}\right) \quad , \tag{1.10}$$

amiből:

$$\Phi = \Phi_0 + T\ln n! + nT\ln f(T,p) \quad . \tag{1.11}$$

Mindezek után a *Stirling*–képlet alapján $n! \simeq \left(\frac{n}{e}\right)^n$, tehát:

$$\Phi = \Phi_0 + nT\left(\ln\frac{n}{e} + \ln f(T,p)\right) = \Phi_0 + nT\ln\left(\frac{n}{e}f(T,p)\right). \tag{1.12}$$

Szokásos még a

$$\frac{1}{e}f(T,p) = \frac{1}{N}e^{\frac{\varphi_1(T,p)}{T}} \tag{1.13}$$

jelölést használni, ugyanis Φ-nek $\left(\frac{n}{N}\right)$ függvényének kell lennie. Bevezetve az egy–részecskére vett termodinamikai potenciálokat $\Phi_0 = N\varphi_0$, $\Phi = N\varphi$, a következő egyenletet kapjuk:

$$\varphi = \Phi/N = \varphi_0 + T\left(\frac{n}{N}\right)\ln\left(\frac{n}{N}\right) + \left(\frac{n}{N}\right)\varphi_1(T,p) \tag{1.14}$$

A probléma tanulmányozására, már ezen első közelítés is elvileg elegendő. Megjegyezzük viszont, hogy φ–re az adott körülmények között pontosabb kifejezés is levezethető. A végeredmény felírásához azt kell megfigyelnünk, hogy φ, a (**??**) egyenletben, $\left(\frac{n}{N}\right)$ sorbafejtésében adott, első rendig. Pontosabb számítás esetén, a φ–re adott sorfejtés $(\frac{n}{N})^m$ növekvő hatványait tartalmazza, pl. a következő tag $\left(\frac{n}{N}\right)^2 \varphi_2(T,p)$ lenne stb. Így, bevezetve a $c = \frac{n}{N}$ jelölést,

$$\varphi = \varphi_0 + cT\ln c + \sum_{m=1}^{\infty} c^m \varphi_m(T,p) \tag{1.15}$$

lenne az egzakt kifejezésünk. Megjegyzendő, hogy az így kapott $\varphi = \Phi/N$ pontosan megegyezik a híg oldatok termodinamikai potenciáljának kifejezésével. Ténylegesen, a mi esetünkben, φ az érintkezési pontok φ_0 fázisban vett híg oldatának termodinamikai potenciálját adja meg.

A továbbiakban arra vagyunk kíváncsiak, hogy c változásával hogyan változik meg φ értéke. E célból fejezzük ki a $\partial\varphi/\partial c$ deriváltat. Mivel c–t kicsinek tételeztük fel, elegendő ha koncentrációban elsőrendig számolunk, tehát:

$$\frac{\partial\varphi}{\partial c} = T(\ln c + \varphi_1(T,p) + 1) \tag{1.16}$$

Most vegyük figyelembe, hogy c egynél kisebb szám, és $c \ll 1$. Így $\frac{\partial\varphi}{\partial c} < 0$, azaz c növekedésével φ csökken. Mivel φ-nek minimumhoz kell tartania, c növekedni fog, azaz a két fázis mind kisebb és kisebb szakaszokra szakad, és mind jobban és jobban összekeveredik. Mindennek következtében, egydimenziós rendszerben fázisátalakulás nem lesz lehetséges. Tehát $d = 1$–ben, termodinamikai rendszer csak egy fázisban lehetséges. (Mindez nyilvánvalóan a Hamilton operátor rögzített paraméterei mellett érvényes, és $T \neq 0$ hőmérsékleten. Ez utóbbi feltétel, a (**??**)–ban szereplő T szorzótényezőből következik). Azt is megfigyelhetjük, hogy a következtetés nem igényelte a rendezett fázis pontos ismeretét, csupán $d = 1$–et, és a termodinamikai határeset feltételezését. Háttér információként a levezetésben benne van viszont, hogy a rendezett fázis homogén, ami hosszútávú térbeli rendezettségre jellemző. Mindez abból látszik, hogy az érintkezési pontok szabadon mozoghatnak az alapjellemzők megváltozása nélkül. Továbbá implicit módon a kölcsönhatások rövid hatótávolsága is szerepel a gondolatmenetben, mert ez esetben tételezhető fel, hogy az A és B fázisok direkt kölcsönhatása elhanyagolható.

Ezen eredményt az egydimenziós modellekre eddig ismert összes egzakt megoldás igazolja. Fontosságát azzal tudjuk például pontozni, hogy a hatvanas évek közepén csúcsfolyóiratokban taglalták még fázisátmenetek létezését, a tanulmányozott keretek között, $d = 1$ dimenzióban.

Szeretnénk a továbbiakban $d > 1$ dimenziós eseteket is tárgyalni, hasonló módon. Sajnos ezen gondolatmenet, a bemutatott formában $d = 2$–re nem általánosítható, mert hiszen ez utóbbi esetben nem érintkezési pontjaink, hanem érintkezési görbéink lennének, melyek nem foghatók fel ideális gázként. Amennyiben viszont a jellemző termodinamikai potenciál a szabadenergia F (mint például kanonikus sokaságokként leírható rendszerek esetében), egy sok szempontból hasonló elemzés felépíthető, mely általánosítható $d > 1$–re is. Az eljárás az *entrópia módszer* néven ismeretes, és megemlítése azért is érdemes, mert a módszert gyakran alkalmazzák fázisátalakulások kimutatására. Az eljárás lényege abból áll, hogy a rendszer két, $T = 0$ és $T \neq 0$ hőmérsékleten lehetséges állapotának F szabadenergiáját hasonlítjuk össze. A $T = 0$ állapotot mindig az alapállapoti energia E, míg a $T \neq 0$ állapotot többnyire a $-TS$ entrópia tag fogja dominálni. A módszer kulcspontja, hogy F viselkedéséből megállapítható, ha az alapállapot $T \neq 0$ hőmérsékleten az F–ben szereplő $-TS$ entrópia tag miatt elveszti stabilitását vagy sem, azaz fázisátalakulás fellép–e a rendszerben vagy nem.

Mindez úgy is megközelíthető, hogy magas hőmérsékleten az S entrópia mindig dominálja a szabadenergiát, és így F minimizálása mindig S maximizálása révén következik be. Alacsony hőmérsékleten viszont megtörténhet az a lehetőség, hogy az E belső energia bizonyos körülmények között elnyomja a szabadenergia $-TS$ entrópia tagját. Ha ez így történik, akkor alacsony hőmérsékleten F minimizálása E minimizálása révén valósul meg. Ha a makroszkopikus állapotok, melyek a magashőmérsékletű S, és az alacsonyhőmérsékletű E extremizálás alapján szolgáltatják F minimumát, egymástól különböznek, ez arra utal, hogy a két szélső $T \to 0$ és $T \to \infty$ érték között egy közbeeső hőmérsékleten fázisátalakulásnak kell fellépnie.

1.3.2 A d=1 dimenzió esete és az entrópia–módszer

Tanulmányozzuk végig az entrópia módszert $d = 1$ dimenzióban egy olyan kanonikus rendszerre, melyet lokalizált spinek alkotnak. Feltételezzük, hogy a spinek komponenseinek száma $n = 1$ (azaz a spin Ising típusú, tetszőleges i csomóponton $S_i = \pm 1$), továbbá hogy a kölcsönhatások rövid hatótávolságúak, azaz egy spin csak a közvetlen szomszédait érzékeli $-JS_iS_{i\pm 1}$ formában, ahol J a csatolás nagysága. Továbbá tételezzük fel, hogy a láncunkban N darab spin szerepel. Ez esetben az egyik lehetséges állapotunk az, melyben minden spin rendezett módon ugyanazon irányba áll be. Ez egy rendezett fázis lenne (neve ferromágneses állapot), melynek alapállapoti energiája $E_f = -(N-1)J$, továbbá a tökéletes rendezettség következtében az entrópiája $S = 0$. Így a „rendezett” f–fázis szabadenergiája

$F_f = -(N-1)J$. Most tételezzük fel, hogy a láncunk két doménra szakad (A és B fázis), melyek a dinamikus változók Ising mivolta miatt csupán a spinek írányában különbözhetnek egymástól (,,fel", illetve ,,le" állapotok). Az A és B fázisokon belüli spinektől származó belső energia, az elválasztó határpont kiesése miatt $E_{A,B} = -(N-2)J$. De ezúttal, még egy érintkezési pontot is figyelembe kell vennünk, mely két darab spint érint. Ebből az energiában egy $+J$ tag adódik, tehát két domén jelenlétében a rendszer energiája $E_{2-dom} = E_{A,B} + J = -(N-1)J + 2J = F_f + 2J$ áll fenn. Viszont, egy érintkezési pont jelenlétében, mivel ez (nyitott lánc esetében) $N-2$ helyen szerepelhet, a mikroállapotokhoz entrópia is rendelhető, mégpedig $S_{2-dom} = k_B \ln(N-2)$. Így a rendszer két doménra vett szabadenergiája $F_{2-dom} = F_f + 2J - k_B T \ln(N-2)$. Azaz a $\delta F = F_{2-dom} - F_f$ szabadenergia különbség értéke:

$$\delta F = 2J - k_B T \ln(N-2) \tag{1.17}$$

Megfigyelhető hogy $T > 0$–ra, termodinamikai limeszben $N \to \infty$, azt kapjuk hogy $\delta F \to -\infty$, azaz a jellemző termodinamikai potenciálunk csökken, ha a rendszerben egy érintkezési pont megjelenik. A gondolatmenet tovább folytatható, amennyiben az A és B fázisokat további két–két fázisra szakítjuk, négyre növelvén az érintkezési pontok számát, és így tovább. Az F értéke folyamatosan csökkenni fog az érintkezési pontok számának növekedésével. Megfigyelhető, hogy ezen gondolatmenet során, az (**??**)–ban szereplő $c \ln c$ tag, az entrópia járuléknak felel meg.

Visszakapjuk tehát a Landau–féle gondolatmenetből származó eredményt, miszerint a $d = 1$ dimenziós rendszerünk összekeveri a benne megjelenő fázisokat, így két fázis egyensúlya, és ezennel fázisátalakulás, ez esetben nem lesz lehetséges.

Az eredmény kiértékelésekor megfigyelhető, hogy az $n = 1$ spin–komponens érték, a gondolatmenet folyamán nem kritikus. Mindez azért, mert bármilyen véges n esetében az entrópia tag, az $N-2$ lehetséges érintkezési pont helyzetből kifolyólag, két domén esetén például mindig $\sim \ln(N-2) \sim \ln N$–el lesz arányos, $N \to \infty$ esetében. Kritikus viszont a $d = 1$, az $N \to \infty$ és a kölcsönhatások rövid hatótávolsága. Egzaktul igazolható, hogy $J(r) \sim r^{-\sigma}$ esetében, ha $d = 1 \leq \sigma \leq 2$, fennállhat az az eset [5], hogy a fázisok nem keverednek össze egy véges T_c hőmérséklet alatt, tehát hosszútávú kölcsönhatások esetében $d = 1$ dimenzióban is lehet fázisátmenet, feltételezve, hogy a termodinamikai határeset értelmezhető. (Például n=1, d=1 és $\sigma < 1$-re nem értelmezhető. Ising esetben n=1, d=1 fennállásakor $1 < \sigma \leq 2$ hosszú hatótávolságú kölcsönhatásnak számít és ekkor bizonyitottan fázisátmenet lép fel. Heisenberg típusú kölcsönhatás esetében d=1-ben hasonló a helyzet $1 < \sigma < 2$–re). A tanulmányozott esetben (n=1,d=1), a rövid hatótávolság $\sigma > 2$–ként értendő, míg az egydimenziós Heisenberg esetben (n=3), $\sigma \geq 2$ kapja a ,,rövid hatótávolságú" jelzőt.

A végeredmény tehát úgy fogalmazható meg, hogy $d = 1$–ben rövid hatótávolságú kölcsönhatások esetén $T > 0$–ra a termodinamikai határesetben fázisátalakulás nincs (és ez $\sigma > 2$–re az $n = 1$ Ising spinre is helytálló). A megállapítás külső tér hiányában értendő. Lényeges kihangsúlyozni, hogy a bemutatott gondolatmenetekből látható, hogy a fázisátalakulásokat lényegileg meghatározó mennyiségek: a d dimenzió, a jellemző dinamikus változók vektorkomponenseinek n száma és a kölcsönhatások milyensége. Látni fogjuk később, hogy ezen elemek határozzák meg majd az univerzalitási osztályokat. (Pontosítás kedvéért megemlítem, hogy ha rendparaméter bevezethető, n szerepét a rendparaméter–dimenzió D veszi át [6] mely a rendparaméter komponensek egymástól független számát jelőli. Ez viszont, pl. topologikus fázisátalakulások esetében nem tehető meg.) A gondolatmenet azt is szemlélteti, hogy a fázisátalakulás során egy valamilyen módon rendezett fázis vált fel egy rendezetlen állapotot (fázist), és mindennek létrejötte fizikai szempontból érdekel, azaz $T > 0$ hőmérsékleten. (Ellenkező esetben, ha a fázisátalakulást $T = 0$–ban, más paraméterek függvényében tanulmányozzuk, kvantum-fázisátalakulásról beszélünk. E témakör tárgyalása azonban nem képezi a jegyzet tárgyát).

Itt az egész tudományág fejlődését döntően befolyásoló lényegi kérdés az, hogy a *rendezettség* milyen. A bemutatott példa szemlélteti ezen kérdésről az első fejezet pillanatnyi színtjén erről alkotott képet, miszerint a rendezettség valamilyen jellemző tulajdonságnak a geometriai térben nagyon hosszú távolságokra vett ,,homogenizálódása". Ezen (nem egyetlen lehetséges) rendezettségi formát nevezzük *hosszútávú térbeli rendezettségnek* (HTR). Egyelőre intuitiv módon az is érzékelhető, hogy a HTR rendezettségi forma $T > 0$–ban vett kialakulását azon faktor gátolja, mely számára a rendezettséget jellemző mennyiség térbeli homogenizálódása idegen, mely ezt a rendezetlenség révén megbontani próbálja. Matematikai nyelven szólva, ez az entrópia tag. Arra is rátapinthatunk, hogy fizikai szempontból a homogenizálódást megbontó faktor, azaz a fluktuációk tanulmányozása lesz mérvadó a rendezett fázis létrejötte lehetőségeinek vizsgálatában, mely az entrópia által dominált, magashőmérsékletű rendezetlen fázist váltaná fel fázisátalakulás formájában.

Kihangsúlyozódik továbbá a termodinamikai határeset fontossága is. Ennek kapcsán megemlítjük, hogy elméleti szempontból a fázisátalakulás értelmezése csak a termodinamikai határesetben lehetséges. Mindez azzal kapcsolatos, hogy a termodinamikai potenciál alaptulajdonságai (mint például analicitása, konvexitása) csupán az $N \to \infty$ határesetben vezethetőek le. Továbbá a folytonos Φ deriváltjaiban fellépő divergenciák, amelyek a kísérletileg észlelt adatokat reprodukálják, szintén a termodinamikai határeset következményei (mindez például az ismert egzakt megoldásokból világosan látszik). Továbbmenőleg, a hosszútávú térbeli rendezettség fogalmát matematikailag csak úgy tudjuk megkülönböztetni a véges távú rendezettségtől (ami e koncepcióban nem az egész rendszerre kiterjedő rendezett fázis hanem lokális rendezettség), ha a rendeződés távolságát (amely amint később meglátjuk a korrelációs hosszal kapcsolatos) végtelen nagynak tekintjük. Ez viszont csak termodinamikai határesetben lehetséges. Ami a tárgykörhöz kapcsolodó kisérleti aspektust illeti, igazolható például, hogy egy $L = 1\,cm$-es próbatest esetében egy L hosszúságú rendeződési hossz hőmérséklet függvényében történő pontos beállásához a $t = \frac{T-T_c}{T_c}$ változóban $t \sim 10^{-11}$ pontosságú hőmérsékletmérés lenne szükséges. De kisérleti lehetőségeink távol állnak ezen értéktől, így a kritikus tartományokra jellemző „véges hossz” hatások kisérleti kimutatása pillanatnyilag nehezen hozzáférhető. A véges hossz hatások figyelembevétele viszont a numerikus szimulációk esetében előtérbe kerül, mivel pillanatnyi numerikus lehetőségeink szerint az ilyen úton leírható rendszerek kiterjedése aránylag kicsi. A kisérleti oldal napjainkban fejlődik, főként a nano-szerkezetek tanulmányozása kapcsán.

1.4 A d=2 dimenzió esete

A $d = 2$ esetet az entrópia módszer segítségével fogjuk vizsgálni (Peierls–féle gondolatmenet). A kanonikus rendszerünket újból $n = 1$ komponensű Ising–spinrendszernek választjuk, ezúttal $d = 2$ dimenzióban. Tételezzük továbbá fel, hogy a spinek rács-csomópontokban lokalizáltak, s a rács egy rögzített csomópontjához mért legközelebbi szomszédok száma z (első koordinációs szám). A spinek közötti kölcsönhatás újból csak a legközelebbi szomszédokra szorítkozik, és a csatolási állandót ez esetben is J–vel jelöljük. A tanulmányozott esetünkben is a rendezett fázis ferromágneses ($J > 0$). Ekkor ezen állapotban minden $S_i = +1$, továbbá az entrópia $S_f = 0$ és a belső energia $E_f = -zJ\frac{N}{2}$, ahol N a csomópontok száma. A rendezett fázis szabadenergiája tehát $F_f = -zJ\frac{N}{2}$. Most képzeljük el, hogy rendszerünkben megjelennek doménok, melyek belsejében a spin-irányítottság ellentétes, $S_i = -1$. Ekkor a rendszerünkben két különböző fázis van jelen, melyeket újból A-val és B-vel jelölhetünk. A két fázist ezúttal zárt sokszögek választják el egymástól. Tételezzük most fel, hogy a doméneket körülhatároló sokszögek szakaszainak száma n. Egy ilyen szakasz, két szomszédos spin közötti kölcsönhatást érint és $+2Jn$ járulékot ad a belső energiába. Így, nagy N-re, $\delta E = E_{dom} - E_f = +2Jn$. Az elválasztó doménfalakkal rendelkező fázis entrópiájának megítélése céljából csupán azt kell figyelembe vennünk, hogy ha egy domén–elválasztó vonal egy adott szomszédtól egy adott csomópontba befut, akkor $z - 1$ írányba folytatódhat tovább (feltételezzük, hogy a doménfalnak nincs szakadási pontja, azaz egy csomópontból nem távozik a befutási vonalon, továbbá a doménfalak az egyszerűség kedvéért nem metszik egymást). A doménfalak, zárt sokszögek lévén, n elemi szakasz mellett n csomópontot tartalmaznak, így kialakításuk rögzített n esetén $(z-1)^n$ féle képpen történhet, azaz $S_{dom} = k_B n \ln(z-1)$. Mindezek után tehát:

$$\delta F = F_{dom} - F_f = n\left[2J - k_B T \ln(z-1)\right] \tag{1.18}$$

Megfigyelhető, hogy a $d = 1$ esethez képest a lényegi különbség abban nyílvánul meg, hogy az egységnyi érintkezési pontra eső entrópia, a doménokat tartalmazó fázisban $d = 1$–ben $\ln n$–el, míg $d = 2$–ben $\ln(z-1)$ véges értékkel arányos. Mindezek után az (**??**) egyenletből látszik, hogy δF előjelét T konkrét értéke határozza meg. Ekkor, a $\delta F = 0$ egyenlőségből

$$T_c = \frac{2J}{k_B \ln(z-1)} \; ; \quad \delta F = 2nJ(1 - \frac{T}{T_c}) \; , \tag{1.19}$$

adódik. Ebből látható, hogy $T > T_c$ esetében $\delta F < 0$, azaz a termodinamikai potenciál úgy minimizálható, ha $n \to \infty$. Tehát ez esetben a rendszerünk, növelve az érintkezési pontok számát, teljesen összekeveri a két fázist, úgy mint $d = 1$–ben, így fázisátalakulás nem lehetséges, és $T > T_c$–re a rendezetlen fázis valósulhat csak meg. Viszont $T < T_c$ esetében $\delta F > 0$, így F minimalizálódni az $n \to 0$ határesetben tud. Ekkor a rendszer eltünteti az A és B közötti érintkezési pontokat, és egy teljesen „homogén" rendezett fázist, a ferromágneses fázist alakítja ki. A rendezetlen magashőmérsékletű és a rendezett alacsony hőmérsékletű fázisok közötti átmenet T_c–ben történik, ami a fázisátalakulás kritikus hőmérséklete. A rendezett fázis ezúttal is hosszútávú térbeli rendezettséget mutat. Érdekességként megjegyzendő, hogy például négyzetes rácsra, ahol $z = 4$, a (**??**) egyenletből kapott kritikus hőmérséklet k_B egységekben $\sim 1.82J$, míg az egzakt érték $2.27J$.

A végkövetkeztetés tehát: külső tér hiányában, rövid hatótávolságú kölcsönhatások esetében és termodinamikai határesetben a $d = 2$ Ising spinrendszer $T_c > 0$ kritikus hőmérsékleten fázisátalakulást szenved, HTR-típusú rendezettséget felvéve. Az állítás helyességét messzemenően igazolja Lars Onsanger $d = 2$ Ising–modellre adott egzakt megoldása.

A (**??**) egyenletben adott T_c kifejezés nem egzakt, túlértékelt entrópiából származik, de a gondolatmenet helytálló, és valós fizikai képet tükröz. (Megjegyezzük, hogy a Peierls–féle körvonal módszer egzakt jellemzésekben is alkalmazott [7]). Mivel ez az első levezetett kritikus hőmérsékletünk, figyeljük meg, hogy T_c kifejezésében szerepel z, azaz a rács típusa, tehát T_c nem egy univerzális mennyiség.

Kiértékelés gyanánt megemlítjük, hogy a levezetés lényegi feltételezése a fáziselválasztó doménfalak létezése. A „létezés" fontos jellemzője itt, hogy „véges" vastagságú a doménfal, ami minden diszkrét szimmetriájú Hamilton–operátorra fennáll. Így az eredmény nemcsak Ising–spinrendszerre, hanem minden más diszkrét szimmetriájú Hamilton–operátorral leírt $d = 2$ rendszerre fennáll. A Heisenberg–típusú spin esetében, például, a spin szempontjából nincs kitüntetett irány, a spin, és ezúttal a Hamilton–operátor folytonos szimmetriájú. Ennek következménye, hogy a doménfal vastagsága végtelen, azaz doménfal nem létezik, és így HTR típusú rendezettség sincs Heisenberg spinrendszer esetében $d = 2$–ben (rövid hatótávolságú kölcsönhatások esetében, külső tér hiányában és a termodinamikai határesetben).

1.5 Az alsó kritikus dimenzió d_{ak}

Az előbbi gondolatmenetből az is megfigyelhető, hogy megtartva a modellt (pl. Ising–spin, csupán legközelebbi szomszédokkal vett kölcsönhatás), és megnövelve a dimenziót, az entrópia alacsonyhőmérsékleti instabilizáló hatása csökken. Matematikailag mindez, például (**??**) egyenlet szintjén formálisan abban nyilvánul meg, hogy rögzített z jelenlétében $T = 0$-ban $\delta F > 0$ és $T \to \infty$ határesetben $\delta F < 0$ fennállása mellett, a dimenzió növekedésével z nővekszik. Ez a $T = 0$ esetben vett $\delta F > 0$ értéket nem folyásolja be, de d növekedésével $\delta F < 0$ értéket továbbra is fenntartja. (Pontos elemzés esetében a doménelválasztó határ d növekedésével bonyolultabbá válik ugyan, de $\delta F(T = T_c) = 0$ fellépését ez nem gátolja meg).

Így fázisátalakulást kimutatva egy rögzített modellben egy adott dimenzióban, a fázisátalakulás léte egy magasabb dimenzióban szintén igazolttá válik. Ezért használatos az *alsó kritikus dimenzió*, d_{ak} fogalma, mely definició szerint azon maximális dimenzió, melyben még (rögzített modell és rendezettségi forma esetében) $T > 0$–ra nincs fázisátalakulás. Tehát fázisátalakulás csak $d > d_{ak}$–ra jelenik meg. Így például, az Ising modellre (kizárólagosan csak legközelebbi szomszédokkal vett kölcsönhatásra és HTR–re), $d_{ak} = 1$, míg a Heisenberg modellre ugyanazon körülmények között (mint folytonos modellre és HTR–re) $d_{ak} = 2$. A $d_{ak} = 2$ érték minden folytonos szimmetriájú rendszerre általánosítható HTR vonatkozásában.

Hogy miért fontos a rendezettségi formát mindig emlegetni, azt példázza azon tény, hogy a Heisenberg–spinrendszer rövid hatótávolságú kölcsönhatásokkal ellátott verzióban csak $d > d_{ak} = 2$ dimenzióban mutat fázisátalakulást HTR formában (azaz $min(d) = 3$–ban), de ugyanakkor topologikus fázisátalakulást (azaz KTB átmenetet) $d = 2$–ben is megenged.

1.6 Szakirodalmi jegyzék 1.

[1] N. Goldenfeld, Frontiers in Physics Vol. 85., *Lectures on Phase Transitions and the Renormalization Group*, Addison-Wesley Publ. Comp., 1992, 35. oldal.

[2] P. Kumar, *Properties of Phase Transitions of a Higher Order*, Jour.Low Temp.Phys. 106, 705, (1997).

[3] Zs. Gulácsi, M. Gulácsi, *Theory of Phase Transitions in Two Dimensions*, Advan. in Phys. (1997), nyomtatás alatt.

[4] J. J. Binney, N. J. Dowrick, A. J. Fisher, M. E. J. Newman, *The Theory of Critical Phenomena, An introduction to the renormalization group*, Oxford Science Publications, Clarendon Press, Oxford, 1995, 26. oldal.

N. Goldenfeld, Frontiers in Physics Vol. 85., *Lectures on Phase Transitions and the Renormalization Group*, Addison-Wesley Publ. Comp., 1992, 14. oldal.

[5] H. Nakano, M. Takahashi, Phys. Rev. B50, 10331, (1994).

[6] J.J. Binney, N.J. Dowrick, A.J. Fisher, and M.E.J.Newman, *The Theory of Critical Phenomena*, Oxford Science Publication, Clarendon Press, Oxford, 1995, 21. oldal.

[7] Y. G. Sinai, *Theory of Phase Transitions: Rigorous Results*, Akadémiai Kiadó, Budapest, 1982, 29. oldal.

2 A fluktuációk hatása

Az előbbiekben hangsúlyoztuk, hogy a HTR kiépülésének lényegi akadályozói a fluktuációk. Ezen kérdést szeretnénk részletesebben megvizsgálni a következőkben.

2.1 A fluktuációk hatása a termodinamikai potenciálban

A fluktuációk nagyságát szeretnénk megállapítani, figyelemmel kísérve, hogy hatásuk lényegileg lokális jellegű. A lokális jelleg figyelembevétele végett, tételezzük fel, hogy a Φ termodinamikai potenciálunk n darab X_i, $i = 1, ..., n$ lokális mennyiségtől függ. Mindennek során termodinamikai potenciál–sűrűséget kell bevezetnünk, $\overline{\Phi}(\vec{r})$, melynek térfogat integrálja adja majd a globális, rendszert jellemző Φ értéket, $X_i = X(\vec{r})$ feltételezésével:

$$\Phi = \frac{1}{V} \int \overline{\Phi}(\vec{r}) dV \tag{2.20}$$

Példaként megemlítendő, hogy az X_i mennyiségek szerepét játszhatják például lokalizált rendszerek esetében az atomi koordináták, vagy általánosabb keretek között, a lokális függést mutató sűrűség jellegű mennyiségek.

Tételezzük fel a továbbiakban, hogy egy egyensúlyi, fluktuációmentes (pl. $T = 0$) állapotban, a termodinamikai potenciált lokálisan befolyásoló X_i mennyiségeknek van egy X_i^e egyensúlyi értéke. Ezen egyensúlyi állapotban tehát a termodinamikai potenciálsűrűség

$$\overline{\Phi}_0 = \overline{\Phi}(\{X_i^e\})\,. \tag{2.21}$$

Most, ha ezen, kezdetben fluktuációmentes állapotban, fluktuációkat vezetünk be, ezt úgy képzeljük el, hogy hatásukra, a lokális X_i mennyiségek megváltoznak X_i^e egyensúlyi értékükhöz képest. Ez a tény az X_i–ket érzékelő $\overline{\Phi}(\{X_i\})$ szintjén is kifejezésre jut, mégpedig úgy, hogy értéke $\overline{\Phi}_0$–hoz képest egy $\Delta\overline{\Phi}$ értékkel megváltozik. Célunk a $\Delta\overline{\Phi}$ meghatározása lesz, aminek érdekében a következő módon járunk el: Feltételezzük, hogy a fluktuációkat előidéző perturbációk, a rendszerünket direkt módon az X_i lokális mennyiségekben érintik, melyek egyensúlyi értékükből kimozdulva, lokálisan, $y_i = \Delta X_i = X_i - X_i^e$ fluktuációkat szenvednek. Mivel általánosan véve, X_i vektormennyiségként reprezentálható, így y_i-nek is vektorkomponensei lesznek, melyeket $\alpha, \beta, ...$ stb. görög betűkkel fogunk jelölni.

Tehát a lokális fluktuációink az $y_{\alpha,i} = y_\alpha(r_i)$ helyfüggő mennyiségek. A $\overline{\Phi}$ függvény, a fluktuációk jelenlétében, $\overline{\Phi} = \overline{\Phi}(y_{\alpha,i})$ formában fogható fel. Továbbá, ez esetben, $\overline{\Phi}_0 = \overline{\Phi}(y_{\alpha,i} = 0)$ egyensúlyi állapotot jelöl. Így, $\overline{\Phi}$ az $y_{\alpha,i}$ változók szerint Taylor sorba fejtve $y_{\alpha,i} = 0$ értékek körül:

$$\overline{\Phi} = \overline{\Phi}_0 + \sum_{\alpha,i} y_{\alpha,i} \frac{\partial\bar{\Phi}}{\partial y_{\alpha,i}}\bigg|_{y_{\alpha,i}=0} + \frac{1}{2!} \sum_{\alpha,\beta,i,j} y_{\alpha,i} y_{\beta,j} \frac{\partial^2\bar{\Phi}}{\partial y_{\alpha,i}\partial y_{\beta,j}}\bigg|_{y_{\alpha,i}=y_{\beta,j}=0} + \ldots \tag{2.22}$$

Bevezetve a

$$\varphi_{\alpha,\beta}(i,j) = \left.\frac{\partial^2 \bar{\Phi}}{\partial y_{\alpha,i} \partial y_{\beta,j}}\right|_{y_{\alpha,i}=y_{\beta,j}=0} \tag{2.23}$$

jelőlést, az $y_{\alpha,i}$ változókról az $y_{\alpha,k}$ Fourier komponensekre térve

$$y_{\alpha,i} = \sum_{\vec{k}} y_{\alpha,\vec{k}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}_i} , \tag{2.24}$$

és figyelembe véve hogy $\overline{\Phi}_0$ egyensúlyi érték, azaz $\overline{\Phi}$ szélsőértéke, (??) egyenlőség a következő képpen alakul:

$$\overline{\Phi} = \overline{\Phi}_0 + \frac{1}{2!} \sum_{\alpha,\beta} \sum_{\vec{k}_1,\vec{k}_2} y_{\alpha,\vec{k}_1} y_{\beta,\vec{k}_2} \varphi_{\alpha,\beta}(\vec{r}_1,\vec{r}_2) e^{i\vec{k}_1\cdot\vec{r}_1} e^{i\vec{k}_2\cdot\vec{r}_2} . \tag{2.25}$$

Transzlációszimmetrikus rendszert feltételezve, úgy φ mint $\overline{\Phi}$, csupán $\vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2$-től függ, tehát (??) összefüggésben $\vec{k}_1 = -\vec{k}_2 = \vec{k}$ érvényesül, így

$$\overline{\Phi} = \overline{\Phi}_0 + \frac{1}{2} \sum_{\alpha,\beta,\vec{k}} y_{\alpha,\vec{k}} y_{\beta,-\vec{k}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \varphi_{\alpha,\beta}(\vec{r}) . \tag{2.26}$$

Figyelembe véve hogy $y_{\alpha,i}$ egy valós szám, így $y_{\alpha,i} = y^*_{\alpha,i}$, azaz

$$\sum_{\vec{k}} y^*_{\alpha,\vec{k}} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} = \sum_{\vec{k}} y_{\alpha,\vec{k}} e^{+i\vec{k}\cdot\vec{r}} . \tag{2.27}$$

Az egyenlőség első tagjában $\vec{k} \to -\vec{k}$ változócserét végrehajtva, majd az egyenlőség fennállását megkövetelve minden $\vec{r}$ értékre

$$y^*_{\alpha,-\vec{k}} = y_{\alpha,\vec{k}}, \tag{2.28}$$

adódik. Ezek szerint, a (??) egyenlőségből

$$\overline{\Phi} = \overline{\Phi}_0 + \frac{1}{2} \sum_{\alpha,\beta,\vec{k}} y_{\alpha,\vec{k}} y^*_{\beta,\vec{k}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \phi_{\alpha,\beta}(\vec{r}) \tag{2.29}$$

összefüggés ered. Most $\Delta\overline{\Phi} = \overline{\Phi} - \overline{\Phi}_0$ jelölést és (??) egyenlőséget felhasználva, (??) alapján

$$\Delta\Phi = \frac{1}{2} \sum_{\alpha,\beta,\vec{k}} y_{\alpha,\vec{k}} y^*_{\beta,\vec{k}} \varphi_{\alpha,\beta}(\vec{k}) \tag{2.30}$$

írható, ahol $\varphi_{\alpha,\beta}(\vec{k})$-ra a következő egyenlőség áll fenn

$$\varphi_{\alpha,\beta}(\vec{k}) = \frac{1}{V} \int d\vec{r} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \varphi_{\alpha,\beta}(\vec{r}) . \tag{2.31}$$

A továbbiakban arra vagyunk kiváncsiak, hogy $\varphi_{\alpha,\beta}(\vec{k})$-ban milyen vezető járulékok jelennek meg. Inverziószimmetriát feltételezve $\varphi_{\alpha,\beta}(\vec{r}) = \varphi_{\alpha,\beta}(-\vec{r})$, tehát (**??**) jobboldalán minden $exp(i\vec{k}\cdot\vec{r})$-ből származó páratlan hatványú $\vec{k}$ járulék zérót ad eredményűl. Igy az exponenciális tag csupán a

$$\cos(\vec{k}\cdot\vec{r}) = 1 - \frac{1}{2}(\vec{k}\cdot\vec{r})(\vec{k}\cdot\vec{r}) + ... \tag{2.32}$$

páros függvény járulékain keresztül érvényesül. A (**??**) első tagja (**??**) szerint $\varphi(k \rightarrow 0)$ értéket adja vissza, amely a rövid hatótávolságú kölcsönhatások jelenléte miatt zéró. Ennek az a magyarázata, hogy $\varphi(k \rightarrow 0)$ érték $\varphi(r \rightarrow \infty)$-nek felel meg, és $\varphi(r)$ a $\overline{\Phi}$–ben az r távolságra lévő (i,j) pontok egymásrahatását tükrözi, melynek rövid hatótávolságú kölcsönhatások esetén zéróhoz kell tartania ha $r = |\vec{r}_i - \vec{r}_j| \rightarrow \infty$.

Igy $\varphi_{\alpha,\beta}(\vec{k})$ függvényben a legkisebb k hatányú járulék (**??**) második tagjából ered, tehát

$$\varphi_{\alpha,\beta}(\vec{k}) = -\frac{1}{2}\sum_{\gamma,\epsilon}\int d\vec{r} k_\gamma r_\gamma k_\epsilon r_\epsilon \varphi_{\alpha,\beta}(\vec{r}) + ... \tag{2.33}$$

ahol a jobboldali összegzés után elhagyott tagok mind k-ban négyzetesnél nagyobb hatványú komponenseket jelőlnek.

Továbbhaladás végett a (**??**)-ban szereplő $\int d\vec{r}$ integrált r_γ komponensenként végezzük. A $\varphi(\vec{r})$ inverziószimmetriája az r_γ tengelyek mentén is fennáll, így (**??**) jobboldalán csak $\delta_{\gamma,\epsilon}$ típusú járulékok jelennek meg. Ennek következtében

$$\varphi_{\alpha,\beta}(\vec{k}) = -\frac{1}{2}\sum_{\gamma} k_\gamma^2 \int d\vec{r} r_\gamma^2 \varphi_{\alpha,\beta}(\vec{r}) + ... \tag{2.34}$$

Mivel a tanulmányozott körülmények között minden r_γ komponens az integrál elvégzése során ugyanazt a járulékot adja, a

$$A_{\alpha,\beta} = -\frac{1}{2}\int d\vec{r} r_\gamma^2 \varphi_{\alpha,\beta}(\vec{r}) \tag{2.35}$$

jelöléssel és $k^2 = \sum_\gamma k_\gamma^2$ bevezetésével

$$\varphi_{\alpha,\beta}(\vec{k}) = A_{\alpha,\beta} k^2 + \mathcal{O}(k^4) \tag{2.36}$$

kifejezés ered. Látható tehát, hogy $\varphi_{\alpha,\beta}(\vec{k})$-ban szereplő legalacsonyabb hatványú k járulék négyzetes, továbbá megjegyezzük, hogy $A_{\alpha,\beta}$ a k nagyságától független. Továbbmenőleg, a globális $\Delta\Phi$ szintjén a

$$\Delta\Phi = \frac{1}{V}\int(\bar{\Phi} - \bar{\Phi}_0)dV = \frac{1}{2}\sum_k y_{k\alpha} y^*_{k\beta} \varphi_{\alpha\beta}(k) \quad ; \tag{2.37}$$

összefüggés valósúl meg, ahol a megduplázott görög indexek az összegzési konvenciónak tesznek eleget.

2.2 Négyzetes fluktuációk átlagértéke

A gondolatmenet folytatása érdekében matematikai háttérinformációra van szükség. E célból tételezzük fel, hogy egy tetszőleges ϕ termodinamikai potenciált y_i fluktuációk befolyásolnak úgy, hogy ϕ fluktuációk nélküli értékét $\Delta\phi$ taggal változtatják meg, ahol

$$\Delta\phi = \frac{1}{2}\sum_{ij}\beta_{ij}\tilde{y}_i\tilde{y}_j = \frac{1}{2}\sum_{ij}\beta_{ij}(y_i - \langle y_i\rangle)(y_j - \langle y_j\rangle) \tag{2.38}$$

Itt az i indexet tömörített indexként (index halmazként) is felfoghatjuk, továbbá számítástechnikai okokból kifolyólag az $\tilde{y}_i = y_i - < y_i >$ fluktuációkban a lokális fluktuáció átlagértékét, a $< y_i >$ tagot is figyelembe vesszük. A $\Delta\phi$ konkrét formáját a (**??**) következményeinek kiértékelése céljából választottuk a megadott módon. A fluktuációkat elég klasszikusan kezelnünk. Ez a fázisátalakulások tanulmányozásánál általában helytálló. Amint látni fogjuk, ennek oka az, hogy a kritikus tartomány skálainvariáns, így szükségtelen azon mikroszkopikus skálán való jellemzés, amelyet a kvantumtörvények dominálnak, mindannak ellenére, hogy a rendezettség milyenségét a kvantumtörvények határozhatják meg. A tisztánlátás érdekében szükséges hangsúlyozni, hogy a *fázisátalakulások elméletében* a fő kérdés nem az, hogy a fázis mikroszkopikus szempontból milyen, hanem az, hogy a rendszer minőségének megváltozása milyen körülmények között jön létre, és melyek ezen változás általános jellemzői. A kritikus jelenségek törvényszerüségeiben a kvantummechanika így semmi szerepet nem játszik, legalábbis amig a fázisátalakulás véges hőmérsékleten megy végbe. Ami itt lényeges az a statisztikus fizikai leírás és a termodinamikai határeset. A $T = 0$ esetben a kvantumfolyamatok már lényegesek, (ezért is nevezzük a $T = 0$ átmeneteket kvantummechanikai fázisátalakulásoknak). Tudvalevő azonban, hogy egy $T = 0$–ban vizsgált d dimenziós kvantum rendszer mindig leképezhető egy $d+1$ dimenziós klasszikus statisztikus rendszerre, mely tulajdonságait újból a klasszikus statisztikus fizika adja [1].

Mindezek után a létrejött fluktuációk valószínűségi eloszlását rögzített hőmérsékleten, melyen a vizsgálat történik:

$$w \sim e^{-\frac{\Delta\phi}{k_B T}} \tag{2.39}$$

határozza meg. A továbbiakban a (**??**)–ben megjelenő arányossági tényezőt A-val jelölve, y_j átlagértéke:

$$\begin{aligned}\langle y_j\rangle &= \int dy_1...dy_n w\cdot y_j = \\ &= A\int y_j e^{-\frac{1}{2k_B T}\sum_{ik}\beta_{ik}(y_i-\langle y_i\rangle)(y_j-\langle y_i\rangle)}d\tau \quad ,\end{aligned} \tag{2.40}$$

ahol az integrálási változók differenciáljait $d\tau$–ban sűrítettük. Deriváljuk a következőkben a kapott kifejezést egy rögzített k indexű $\langle y_k\rangle$ szerint:

$$
\begin{aligned}
\delta_{jk} &= A\int y_j(-2)\left(-\frac{1}{2k_BT}\right)\sum_i \beta_{ik}(y_i-\langle y_i\rangle)\times \\
&\quad\times exp\left[-\frac{1}{2k_BT}\sum_{ik}\beta_{ik}(y_i-\langle y_i\rangle)(y_j-\langle y_j\rangle)\right]\,d\tau \\
&= \frac{1}{k_BT}\beta_{ik}(\langle y_jy_i\rangle-\langle y_i\rangle\langle y_j\rangle)\quad ; \qquad (2.41)
\end{aligned}
$$

Itt, mint az előbbiekben, a kétszer szereplő indexekre összegezni kell. A kapott kifejezés $\langle y_i\rangle \to 0$ határesetben is helytálló és mivel ez az eset fordul elő általában, képlet formájában ezt rögzitjük:

$$
\langle y_iy_j\rangle = \beta_{ij}^{-1}(k_BT)\ ;\quad \text{ha}\quad \Delta\phi = \frac{1}{2}\sum_{ij}\beta_{ij}y_iy_j \quad . \qquad (2.42)
$$

Itt egzaktul véve β_{ij}^{-1} inverz matrixelemet jelent, mely a k_BT tagot szorozza. A lényeg mindebből az, hogy $\Delta\phi$-t előidéző négyzetes $\frac{1}{2}\beta_{ij}y_iy_j$ fluktuációs tag, a $\langle y_iy_j\rangle$ négyzetes fluktuáció átlagára $\beta_{ij}^{-1}T$–vel arányos kifejezést eredményez.

2.3 A dimenziófüggés tanulmányozása

Megfigyelhető, hogy a (**??**)-ben adott $\Delta\phi$ bármilyen négyzetes fluktuációs tagot jelenthet, így a konkrét tanulmányozott eset (**??**)-ban adott $\Delta\Phi$ kifejezése is állhat helyette. Ez esetben a levezetett eredmény szerint:

$$
\langle y_{k,\alpha}y^*_{k,\beta}\rangle = \frac{k_BT}{\varphi_{\alpha\beta}(k)}\ ; \qquad (2.43)
$$

és hasonlóan,

$$
\langle y_{k_1\alpha}y^*_{k_2\beta}\rangle\ \Big|_{k_1\neq k_2} = 0 \quad . \qquad (2.44)
$$

A második egyenlőség a $\varphi \sim k^2 \sim k_1k_2\delta_{k_1,k_2}$ (transzlációszimmetria) következménye.

Amint láttuk, $\varphi_{\alpha\beta}(k)$ első nemzéró járuléka négyzetesen függ k-tól. A levezetett kifejezés egy négyzetes fluktuáció átlaga, mely k-tól függő, azaz egy Fourier komponensként fogható fel. Ennek megfelelően, a direkt tér egy tetszőleges origóként választott pontjában a négyzetes fluktuáció átlagértékét úgy kapjuk meg, hogy k szerint összegezünk. A négyzetes átlagértékre így:

$$
\langle y_\alpha y_\beta\rangle = k_BT\int_0^{k_{max}}\frac{A_{\alpha,\beta}(n)}{k^2}\,\frac{d^dk}{(2\pi)^d} \qquad (2.45)
$$

ahol $\alpha\beta$ az $y(r_0)$-nak két vektorkomponense, és az n kifejezésre juttatja, hogy az $A_{\alpha,\beta}$ tag, teljesen általános esetben, nem függ $\vec{k}$ nagyságától, csupán irányától. Továbbá

d a dimenzió, k_{max} pedig a maximális hullámszám vektor érték, amely mint láttuk $1/\overline{d}$ felső határral rendelkezik (levágás értéke). Továbbmenőleg, mivel

$$< y^2 >= \sum_{\alpha=1}^{d} < y_\alpha^2 >, \tag{2.46}$$

és bevezetve az $A(n) = \sum_{\alpha=1}^{d} A_{\alpha,\alpha}(n)$ jelölést, a rögzített, de tetszőleges pontban vett négyzetes fluktuáció átlagértékére a következő végeredményt kapjuk:

$$\langle y^2 \rangle = k_B T \int_0^{k_{max}} \frac{A(n)}{k^2} \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \tag{2.47}$$

Az eredmény kiértékelése előtt megjegyezzük, hogy a lokális fluktuációk leírására ezen gondolatmenetben legalább két vektorkomponens kell jelen legyen, az eljárás így $n = 1$ Ising típusú spin változók fluktuációinak elemzésére nem alkalmas. Továbbá, a $\Delta\Phi$-ben szereplő $\varphi_{\alpha,\beta}$ levezetésekor rövid hatótávolságú kölcsönhatásokat tételeztünk fel, így a bemutatásra kerülő dimenzió szerinti jellemzés eredményei csupán kis hatótávolságú kölcsönhatások esetében helytállóak.

Tanulmányozzuk a következőkben, mekkora a négyzetes fluktuációk átlagértéke rögzített $T \neq 0$ hőmérsékleten a dimenzió függvényében. Mivel a számított $< y^2 >$–es tagok kifejezésében T szorzófaktor áll mely $T \to 0$ határesetben $< y^2 > \to 0$ viselkedést eredményez, a tanulmányozott fluktuációk eredetüket tekintve lényegében termikus jellegűek.

A végeredmények tehát a következőek ($d^d k \sim k^{d-1} dk$):

$$d = 1: \quad \int_0^{k_m} \frac{dk}{k^2} = \frac{1}{\varepsilon}\Big|_{\varepsilon\to 0} - \frac{1}{k_m} \sim \frac{1}{\varepsilon}\Big|_{\varepsilon\to 0} \tag{2.48}$$

$$d = 2: \quad \int_0^{k_m} \frac{k dk}{k^2} = \ln k \Big|_0^{k_m} = \ln \frac{k_m}{\varepsilon}\Big|_{\varepsilon\to 0} \sim \ln \varepsilon \Big|_{\varepsilon\to 0} \tag{2.49}$$

$$d = 3: \quad \int_0^{k_m} \frac{k^2 dk}{k^2} = \int_0^{k_m} dk = k_m < \infty. \tag{2.50}$$

Látható tehát, hogy $\langle y^2 \rangle$ érték d=1-ben ($1/\varepsilon$, $\varepsilon \to 0$) és d=2-ben pedig ($\ln \varepsilon$, $\varepsilon \to 0$) szerint divergál kis k-ra, azaz $k \to 0$ határértékben. Mivel kis k-nak nagy hullámhossz (λ) felel meg, ez azt jelenti, hogy a hosszú hullámhosszú perturbációk végtelen nagyságú fluktuációkat hoznak létre. Most, ha tetszőleges kis k (vagy, nagy λ) a rendszerben lehetséges, ez azt jelenti, hogy a rendszer végtelen nagy, azaz termodinamikai határesetben van. Tehát azt állítjuk, termodinamikai határesetben, azaz végtelen nagy rendszerben ($R \to \infty$–re, hol R a rendszerméret), d=1-ben és d=2-ben (ha a jellemző dinamikus változó vektorkomponenseinek száma nagyobb vagy egyenlő 2-vel, a kölcsönhatások rövid hatótávolságúak és a rendeződési törekvés a rendszerben HTR típusú), a nagyhullámhosszú perturbációk (infravörös divergenciák) minden rendezettségi törekvést végtelen nagy fluktuációkkal szétrombolnak. Ennek következtében csak a $T \to \infty$ teljesen rendeződés–mentes fázisok maradhatnak meg, semmilyen új fázisba való átalakulás nem lehetséges.

Peierls és *Landau* ezen gondolatmenetet a rács stabilitásának tanulmányozására alkalmazta első ízben. Ez esetben, $X(r)$ a rácspontok helyzetét jelöli, míg $y(r)$, a rácspont egyensúlyi helyzetből való kitérését. Az $y(r)$ fluktuációk ekkor a fonon alrendszerből származnak. A végkövetkeztetés szerint d=1 és d=2 dimenzióban még maga a rács sem létezik végtelen formában, hanem teljesen elkenődik. A gondolatmenet azonban tetszőleges $X(r)$ sűrűségfüggvénnyel leírt testre [2], illetve $X(r)$ térrel jellemzett Hamilton-operátor sűrűségre [3] elvileg, megkötések mellett (pl. n=1 eset mellözése), alkalmazható és szemlélteti az ingadozások befolyásának csökkenését a dimenzió növekedésével.

A levezetett eredmények viszont nem jelentik azt, hogy valamilyenfajta hosszú (de nem végtelen) távú rendeződés nem jöhet létre véges rendszerekben. Továbbá topologikus (nem hosszútávú) rendeződés létrejöhet, amint majd látni fogjuk, d=2-ben, továbbá az $n = 1$ spinkomponensű rendszerek is mutatnak HTR típusú rendeződést szintén $d = 2$–ben véges hőmérsékleten és rövid hatótávolságú kölcsönhatások esetében. Itt újból hangsúlyozzuk, hogy a hosszútávú kölcsönhatások jelenléte a rendszer viselkedését a fázisátalakulások szempontjából nagymértékben befolyásolja. Példázatként, *Kac* rigurózusan igazolta (lásd [4]), hogy $d = 1$–ben egy olyan potenciál esetében mely, végtelen $r < r_0$–ra, és $-ke^{-kr}$ formát ölt $r > r_0$ esetében,

$$U(r) = \begin{cases} \infty \, ; & r < r_0 \, , \\ -ke^{-kr} \, ; & r > r_0 \, , \end{cases} \tag{2.51}$$

a $k \to 0$ limeszben fázisátalakulást kapunk. A modell a $d = 1$ dimenziós kontinuum gáz nevet viseli, és az állapotegyenlete Van der Waals típusú, metastabil tartomány nélkül, azaz Maxwell konstrukciót nem igényelve. Mindez újból példázza, hogy a hosszútávú kölcsöhatások következtében fellépő kritikus viselkedés (ha a termodinamikai határeset létezik), teljesen specifikus, és eltér a rövid hatótávolságú kölcsönhatások következtében fellépő viselkedéstől. A levezetett eredmények továbbá a folytonos szimmetriájú rendszerekre is érvényesek, mely esetben a HTR–re vett $d_{ak} = 2$ egyenlőséget, *Mermin–Wagner–tétel* [5] formájában emlegetik a szakirodalomban.

A bemutatottakból világosan kitűnik, hogy a fluktuációk, mégpedig a nagy hullámhosszú termikus fluktuációk felelősek a rendezettség kialakulásának megakadályozásáért termodinamikai rendszerekben. A fluktuációk divergenciája leghangsúlyozottabb $d = 1$ dimenzióban, $d = 2$–ben csupán logaritmikusan vannak jelen (diszkrét szimmetriájú rendszerek esetében ettől eltérés lehetséges, lásd az 1.4 paragrafust), tehát hatásuk a dimenzióval csökken. A $d = 3$ dimenzió az első eset, mikor a fluktuációk divergenciája (az említett feltételek mellett) elkerülhető, és így rendezett fázis (teljesen egzaktul HTR) kialakulhat.

Sokat beszéltünk itt ,,rendezett" fázisról, ,,hosszútávú térbeli rendezettségről", anélkül viszont, hogy ezen fogalmakat pontosan definiáltuk volna. Az elkövetkezőkben, ezen fogalomrendszer matematikai tisztázására lesz szükség ahhoz, hogy a tanulmányunkat tovább folytathassuk. Nézzük tehát meg a továbbiakban, milyen típusúak is azon fázisok melyeket HTR jelzővel illettünk, s melyeket a hosszú hullámhosszú fluktuációk megjelenésükben gátolnak.

2.4 Szakirodalmi jegyzék 2.

[1] S.L. Sondhi, S.M. Girvin, J.P.Carini, D. Shahon, *Continuous Quantum Phase Transitions*, Rev. Mod. Phys. 69,315,(1997).

[2] L. D. Landau, E. M. Lifsic, Elméleti Fizika sorozat V. kötet, Statisztikus Fizika I., Tankönyvkiadó, Budapest, 1981, 491 oldal.

[3] J. J. Binney, N. J. Dowrick, A. J. Fisher, M. E. J. Newman, *The Theory of Critical Phenomena, An introduction to the renormalization group*, Oxford Science Publications, Clarendon Press, Oxford, 1995, 323. oldal.

[4] H. E. Stanley, *Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena*, Clarendon Press, Oxford, 1971, 91 oldal.

[5] N. D. Mermin, H. Wagner, Phys. Rev. Lett. 17, 1133, (1966).

3 A térbeli korrelációk

Az elemzést a hosszútávú térbeli rendezettség matematikai definiciójával fogjuk folytatni.

3.1 A hosszútávú térbeli rendezettség

Legyen e célból egy, a rendszerre jellemző lokális mennyiség $X(\vec{r})$. Tételezzük továbbá fel, hogy az $\vec{r}$ változó a test által kitöltött teljes rendelkezésünkre álló geometriai teret végigfutja. Két, egymástól különböző $\vec{r}_1$ és $\vec{r}_2$ pontban vett $X(\vec{r}_1)$ és $X(\vec{r}_2)$ mennyiséget korreláltnak nevezünk, ha szorzatuk átlaga eltér az átlaguk szorzatától. Azaz

$$< X(\vec{r}_1) \cdot X(\vec{r}_2) > - < X(\vec{r}_1) >< X(\vec{r}_2) >= G(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \neq 0 \tag{3.1}$$

A $G(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ függvény, az X mennyiség korrelációs függvénye nevet viseli (pontos megfogalmazásban: statikus két-pont korrelációs függvény), az átlagolás pedig az X mennyiség fluktuációinak valószinűségi eloszlására történik. Az $\vec{r}_1 \neq \vec{r}_2$ kikötés magától értendő. Képletesen szólva, a korrelációs függvény megmutatja, hogy két különböző pontban vett $X(\vec{r})$ mennyiségnek van-e „tudomása" egymásról vagy sem, azaz létezik e valamilyen fizikai kapcsolat, amely az X mennyiség $\vec{r}_1$, illetve $\vec{r}_2$ pontbeli viselkedését egymástól függővé teszi vagy nem.

Mindezek után hosszútávú térbeli rendezettségről (HTR) akkor beszélünk, ha a rendszerre jellemző valamilyen $X(\vec{r})$ mennyiség korrelációs függvénye végtelen elválasztó távolság határesetében sem válik zéróvá. Tehát[1]:

$$\lim_{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2| \to \infty} G(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \neq 0 \tag{3.2}$$

Mindezt megfogalmazhatjuk a következő képpen is: jelölje ξ, névszerint a *korrelációs hossz*, azon távolságot melyre még a jellemző X mennyiségek lokálisan korreláltak maradnak. Ekkor a (**??**) képletben sűritett információ azt tükrözi, hogy a jellemző dinamikus változóra vonatkozó korrelációs hossz nagyon nagy távolságokra kiterjed. Ezek szerint, a HTR rendezettség azon T_c hőmérséklet alatt jön létre, melyet $\xi \to \infty$ definiál.

[1] Ezen definició bevezetése után néhány megjegyzést kell tennünk. Először is, a HTR rendezettségi forma (**??**) szerinti definiciója a szakirodalomban tradicionálisan használt úgy kvantumos [1] mint klasszikus [2] viselkedésű rendszerek esetében. Továbbmenőleg, logikus lehetőséget ad lényegi, a témakörrel kapcsolatos fogalmak megközelítésére mint a „nem-diagonális hosszútávú rendezettség" (off-diagonal long-range order, [1,3]), topologikus rendezettség (pl. d=2 XY modellben $< S_i S_j > \to 0$ ha $|r_i - r_j| \to \infty$, mégis topologikus rendezettség jelen lehet)[4], időváltozóra való téréssel: spin-üveg [5]. Ezen definició tartozéka, hogy $T = T_c$ értéket, azaz a rendezetlen fázis – rendezett fázis fáziselválasztó vonalat a rendezetlen fázisba sorolja. Ez koherens módón helytálló [6], hiszen rendparaméter bevezetése esetén $T = T_c$-ben a rendparaméter értéke zéró és csupán $T < T_c$-re válik zérótól különbözővé. Ennek következtében, amint majd látni fogjuk, $T = T_c$-ben $G(r) \sim 1/r^{d-2+\eta}$.

A következőkben, amennyire lehet rendszerspecifikumok feltüntetése nélkül azt szeretnénk megvizsgálni, hogy a fluktuációk, mint a HTR rendezettséget legnagyobb mértékben megakadályozó faktorok, hogyan befolyásolják a korrelációs függvények viselkedését, melyek segítségével magát a HTR rendezettséget definiáltuk.

Tekintsünk e célból az elkövetkezőkben, egy a rendszerre jellemző $X(\vec{r})$ lokális mennyiséget melynek egyensúlyi állapotban vett értéke legyen $X_0(\vec{r})$. Amennyiben a rendszert lokálisan az $\vec{r}$ pontban egy perturbáció éri, az X mennyiség az $X_0(\vec{r})$ értékéből kimozdul és $X(\vec{r})$ értéket veszi fel. Ezt a változást egy lokális fluktuáció $\vec{y}(\vec{r})$ hatásaként kezeljük. Azaz, a fluktuáció megjelenése, az X mennyiséget, lokálisan, az $X_0(\vec{r})$ értékről, $X(\vec{r})$ értékre változtatja. Megjegyzendő, hogy a rendszerre jellemző X lokális mennyiségként valamilyen jellemző lokális sűrűségfüggvényt is elképzelhetünk.

A lokális $\vec{y}(\vec{r})$ fluktuációt az egyszerüség kedvéért lokális transzlációként fogjuk felfogni. Ez azt jelenti, hogy az $X(\vec{r})$ értéket, $X_0(\vec{r})$ argumentumában vett transzlációjaként értelmezzük. Azaz, a fluktuáló $X(\vec{r})$ mennyiséget

$$X(\vec{r}) = X_0(\vec{r} - \vec{y}(\vec{r})) \tag{3.3}$$

formában adjuk meg. Ezen eljárás előnye, hogy az X tagokat gyakorlatilag az X_0 funkcionális formája segítségével tárgyalhatjuk. Ha rácsrendszerünk van, mindez például azt jelenti, hogy a fluktuációk hatását úgy értelmezzük, mintha a rácsot lokálisan minden $\vec{r}$-pontban $\vec{y}(\vec{r})$-el toltuk volna el. Ezen kép megfelelő, amennyiben a rendszer diszkrét mikrostrukturára épül, és így $X_0(\vec{r})$–nek (például a rácscsomópontok körül) folytonos és aránylag számottevő értékváltozása lehetséges. Ellenkező esetben a közelítés fizikailag helytálló, ha a végeredményben kishullámhosszú hatások (azaz nagy k értékek) lesznek dominánsak.

Mindezek után, az $X(\vec{r})$ két különböző $\vec{r}_1$ és $\vec{r}_2$ pontban vett értékei közötti korrelációt:

$$\langle X(\vec{r}_1)X(\vec{r}_2)\rangle = \langle X_0[\vec{r}_1 - \vec{y}(\vec{r}_1)]X_0[\vec{r}_2 - \vec{y}(\vec{r}_2)]\rangle \tag{3.4}$$

összefüggés adja. Ezen felfogás szerint az $\vec{y}(\vec{r})$ mennyiségek lokálisan függetlenek, és véletlenszerüek. A lokális függetlenség, implicit a rövid hatótávolságú kölcsönhatásokat feltételező információ, míg a véletlenszerüség implicit az időbeli rendezetlenség következménye. Mindennek ellenére, az explicit időfüggésektől eltekintünk, mert egyelőre csupán a hosszútávú térbeli rendezettség (HTR) tanulmányozása van előtérben, és más típusú rendezettség (pl. időbeni befagyás, a saját specifikumaival, mint a spin–üvegek esetében) nem.

A továbbiakban, számítástechnikai okokból kifolyólag, az X_0 tagokat *Fourier*–sorba fejtjük:

$$X_0(\vec{r}) = \sum_{\vec{p}} X_{\vec{p}} e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}} = \bar{X} + \sum_{\vec{p}\neq 0} X_{\vec{p}} e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}} \tag{3.5}$$

A felírt összefüggés kapcsán megjegyzendő, hogy a $\vec{p}=0$ Fourier komponens pontosan $\bar{X} \equiv \bar{X}_0$ átlagát adja hiszen

$$\bar{X} = \frac{1}{V}\int d\vec{r} X_0(\vec{r}) = \frac{1}{V}\int d\vec{r}\sum_{\vec{p}} X_{\vec{p}} e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}} = \sum_{\vec{p}} X_{\vec{p}}\delta_{\vec{p},0} = X_{\vec{p}=0}. \tag{3.6}$$

Jelölésbeli egyszerűsítés kedvéért az X_0 mennyiségek $\vec{p}$ komponenseiben a 0 indexet elhagyjuk. Továbbá, $\vec{y}_i = \vec{y}(\vec{r}_i)$ jelölés bevezetésével:

$$X_0(\vec{r}_1 - \vec{y}_1) = \bar{X} + \sum_{\vec{p}\neq 0} X_{\vec{p}} e^{i\vec{p}\cdot(\vec{r}_1-\vec{y}_1)} = \bar{X} + X_1\ , \quad X_1 = \sum_{\vec{p}\neq 0} X_{\vec{p}} e^{i\vec{p}\cdot(\vec{r}_1-\vec{y}_1)}. \tag{3.7}$$

Hasonlóan

$$X_0(\vec{r}_2 - \vec{y}_2) = \bar{X} + \sum_{\vec{p}\neq 0} X_{\vec{p}} e^{i\vec{p}\cdot(\vec{r}_2-\vec{y}_2)} = \bar{X} + X_2\ , \quad X_2 = \sum_{\vec{p}\neq 0} X_{\vec{p}} e^{i\vec{p}\cdot(\vec{r}_2-\vec{y}_2)}\ , \tag{3.8}$$

továbbá

$$\langle X(\vec{r}_1)X(\vec{r}_2)\rangle = \left\langle \bar{X}^2 + \bar{X}(X_1+X_2) + X_1X_2 \right\rangle \tag{3.9}$$

Mindezek után a (**??**)–ben adott korrelációs függvényben szereplő $X_0(\vec{r}_1 - \vec{y}_1)\cdot X_0(\vec{r}_2 - \vec{y}_2)$ szorzat elvégezhetővé válik. A számítás során figyelembe kell vennünk, hogy (**??**)–ben, az $\bar{X}$–t első hatványon tartalmazó tag zéró járulékot ad, mivel:

$$\langle X_0(\vec{r}) - \bar{X}\rangle \quad = \quad \bar{X} - \bar{X} = 0 \quad , \tag{3.10}$$

tehát:

$$\left\langle \sum_{\vec{p}\neq 0} X_{\vec{p}} e^{i\vec{p}\cdot(\vec{r}_i-\vec{y}_i)} \right\rangle = \langle X_i\rangle = 0\ . \tag{3.11}$$

Mindezek után, a keresett kifejezésünk:

$$\langle X(\vec{r}_1)X(\vec{r}_2)\rangle \quad = \quad \bar{X}^2 + \sum_{\substack{\vec{p}_1\neq 0\\ \vec{p}_2\neq 0}} X_{\vec{p}_1}X_{\vec{p}_2}\langle e^{i\vec{p}_1\cdot(\vec{r}_1-\vec{y}_1)} e^{i\vec{p}_2\cdot(\vec{r}_2-\vec{y}_2)}\rangle \tag{3.12}$$

Az átlagolás csupán az $\vec{y}_1$ és $\vec{y}_2$ véletlen változókat tartalmazó részre terjed ki. Tehát:

$$\langle X(\vec{r}_1)X(\vec{r}_2)\rangle = \bar{X}^2 + \sum_{\substack{p_1\neq 0\\ p_2\neq 0}} X_{p_1}X_{p_2} e^{(ip_1r_1+ip_2r_2)}\langle e^{-i(p_1y_1+p_2y_2)}\rangle \tag{3.13}$$

Mint az előző (fluktuációkat tárgyaló) esetben $\vec{p}_1 \neq -\vec{p}_2$ járulékok a végső $\sum_{\vec{p}_i}$ összegzésnél, a trigonometriai tag erős oszcilláló hatása miatt kiesnek (lásd a 2. Fejezet), így csupán a $\vec{p}_1 = -\vec{p}_2$ tag vizsgálata mérvadó, tehát:

$$\langle X(\vec{r}_1)X(\vec{r}_2)\rangle = \bar{X}^{\ 2} + \sum_{\vec{p}\neq 0} |X_{\vec{p}}|^2 e^{i\vec{p}\cdot(\vec{r}_1-\vec{r}_2)}\langle e^{-i\vec{p}\cdot(\vec{y}_1-\vec{y}_2)}\rangle\ . \tag{3.14}$$

Megjegyzendő, hogy az előbbiekben felhasználtuk az $X(\vec{r})$ valós mivoltából származó $X_{-\vec{p}} = X^*_{\vec{p}}$ összefüggést.

Megfigyelhető, hogy a gondolatmenet folytatása céljából egy $< \exp(\alpha_i x_i) >$ típusú átlagot kell kifejeznünk, ahol az átlagolás az x_i véletlen eloszlású változók szerint történik. Ezen okból kifolyólag, a továbbiakban, egy kis matematikai kiegészítést kell tennünk.

3.2 Véletlen változók exponenciális függvényének átlaga

Legyenek az x_i mennyiségek független véletlen változók úgy, hogy az egyszerűség kedvéért, egy négyzetes (Gauss típusú), valószínűségi elosztással rendelkezzenek. Amenynyiben az x_i halmaz komponensei függetlenek és véletlenszerű lokális helyvektor fluktuációkkal kapcsolatosak ezen közelítés fizikailag mérvadó [7]. Tehát a figyelembe vett valószínűségeloszlás:

$$w \sim \exp\left[-\frac{1}{2}\,\gamma_{ij}x_i x_j\right] \ , \tag{3.15}$$

ahol az ismételt indexekre az összegezési konvenció áll fenn. Ezek szerint, egy tetszőleges $A(\{x_i\})$ mennyiség átlaga

$$\langle A\rangle = \int wA dx_1 \ldots dx_n \quad , \tag{3.16}$$

formában fejezhető ki. Az előző fejezetben viszont láttuk (az esetben $\gamma_{ij} = \frac{1}{k_B T}\beta_{ij}$ jelölés volt használatos), hogy $\langle x_i x_j\rangle = \gamma^{-1}_{ij}$ egyenlőség áll fenn. Számítsuk most ki az

$$\langle e^{\alpha_i x_i}\rangle = K\int \exp\left(\alpha_i x_i - \frac{1}{2}\,\gamma_{ij}x_i x_j\right) dx_1 \ldots dx_n \ ; \tag{3.17}$$

átlagértéket, ahol K egy normálási konstans szerepét tölti be. Az integrál elvégzése érdekében, vezessünk be egy változó cserét:

$$x_i = a_{in}x'_n \ ; \tag{3.18}$$

melynek alapján:

$$E = \alpha_i x_i - \frac{1}{2}\,\gamma_{ij}x_i x_j = \alpha_i a_{in}x'_n - \frac{1}{2}\,\gamma_{ij}a_{in}a_{jm}x'_n x'_m \ . \tag{3.19}$$

Nyilvánvalóan ezen kifejezések mindegyikében az Einstein összegezési konvenció teljesül. A változócserét a kifejezés matematikai leegyszerűsítése végett vezettük be. E célból, az új koefficienseket válasszuk úgy meg, hogy a

$$\gamma_{ij}a_{in}a_{jm} = \delta_{mn} \ , \tag{3.20}$$

összefüggésnek tegyenek eleget. Ekkor:

$$E = \alpha_i a_{in} x'_n - \frac{1}{2}(x'_n x'_n) = -\frac{1}{2}(x'_n - \alpha_i a_{in})^2 + \frac{1}{2}\, \alpha_i a_{in} \alpha_j a_{jn} \; ; \tag{3.21}$$

Azaz:

$$\langle e^{\alpha_i x_i} \rangle = K \left[\int e^{-\frac{1}{2}(x'_n - \alpha_i a_{in})^2} dx_1 \ldots dx_n \right] \; e^{+\frac{1}{2}\alpha_i a_{in} \alpha_j a_{jn}} \; ; \tag{3.22}$$

Megfigyelhető viszont, hogy a kiemelt négyzetes zárójelbeli tag egy *Gauss* integrál, ami a normálási K konstanssal együtt 1-et ad eredményül. Erről úgy is meggyőződhetünk, hogy megfigyeljük: $\alpha_i = 0$-ra, $\langle 1 \rangle = 1$ végeredmény kell adódjon, ami csak

$$K \left[\int e^{-\frac{1}{2}(x'_n - \alpha_i a_{in})^2} dx_1 \ldots dx_n \right] = 1 \tag{3.23}$$

esetében helytálló. Tehát:

$$\langle e^{\alpha_i x_i} \rangle = e^{\frac{1}{2}\alpha_i a_{in} \alpha_j a_{jn}} \; ; \tag{3.24}$$

De a feltételezésünk szerint

$$\gamma_{ij} a_{in} a_{jn} = \delta_{nm} \quad \Rightarrow \quad a_{in} a_{jn} = \gamma_{ij}^{-1} = \langle x_i x_j \rangle \; , \tag{3.25}$$

és így a végeredményünk az

$$\langle e^{\alpha_i x_i} \rangle = e^{\frac{1}{2}\alpha_i \alpha_j \langle x_i x_j \rangle} \tag{3.26}$$

összefüggés, mely a *Gauss* típusú eloszlásra mindig helytálló.

3.3 A korrelációs függvények és fluktuációk kapcsolata

A levezetett összefüggést a mi konkrét esetünkre alkalmazva:

$$\langle e^{-ip_\alpha (y_1 - y_2)_\alpha} \rangle = \exp\left(-\frac{1}{2}\, p_\alpha p_\beta \chi_{\alpha\beta} \right) \tag{3.27}$$

egyenlőség adódik. Itt az $\alpha, \beta, ...$ stb. görög indexek vektorkomponenseket jelölnek, továbbá:

$$\begin{aligned} \chi_{\alpha\beta}(r) &= \langle (y_1 - y_2)_\alpha (y_1 - y_2)_\beta \rangle \\ &= (\langle y_{1\alpha} y_{1\beta} \rangle + \langle y_{2\alpha} y_{2\beta} \rangle) - (\langle y_{1\alpha} y_{2\beta} \rangle + \langle y_{2\alpha} y_{1\beta} \rangle) \end{aligned} \tag{3.28}$$

Most, ha ugyanazon csomópontban vagyunk, $y_{1\alpha} y_{1\beta}$, illetve $y_{2\alpha} y_{2\beta}$-ra alkalmazhatjuk az előző fejezet eredményét, mely rögzített r-re vonatkozott:

$$\langle y_{1\alpha} y_{1\beta} \rangle = \langle y_{2\alpha} y_{2\beta} \rangle = k_B T \int_0^{k_{\max}} \frac{A_{\alpha\beta}(n)}{k^2} \, \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \; . \tag{3.29}$$

Továbbmenőleg, két különböző csomópont esetében:

$$\langle y_{1\alpha} y_{2\beta} \rangle = \left\langle \sum_{\vec{k}_1 \vec{k}_2} y_{\vec{k}_1 \alpha} y_{\vec{k}_2 \beta} e^{i\vec{k}_1 \cdot \vec{r}_1 - i\vec{k}_2 \cdot \vec{r}_2} \right\rangle = \sum_{\vec{k}} \langle y_{\vec{k}\alpha} y^*_{\vec{k}\beta} \rangle e^{i\vec{k} \cdot (\vec{r}_1 - \vec{r}_2)} \tag{3.30}$$

ahol újból, mint az előbbiekben, a $\vec{k}_1 = -\vec{k}_2$ összefüggés adja a domináns járulékot. Az összeg alatt lévő átlag egyetlen közös $\vec{k}$ segítségével adott, így alkalmazható rá az előbbi fejezetben levezetett $k_B T(A_{\alpha\beta}(n))/(k^2)$ összefüggés. Továbbá, az $e^{i\vec{k} \cdot (\vec{r}_1 - \vec{r}_2)} = \cos \vec{k} \cdot \vec{r} + i \sin \vec{k} \cdot \vec{r}$; $\vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2$ felbontást használva, figyelembe véve hogy a $\vec{k}$ szerinti szimmetrikus összegezés a $\sin \vec{k} \cdot \vec{r}$ tagot kiejti, és a diszkrét összegezésről k szerinti integrálra térve, a következő egyenletet kapjuk:

$$\langle y_{1\alpha} y_{2\beta} \rangle = k_B T \int_0^{k_{\max}} \frac{A_{\alpha\beta}(n)}{k^2} \cos \vec{k} \cdot \vec{r} \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \, . \tag{3.31}$$

Mindezek után a $\langle y_{i,\alpha} y_{j,\beta} \rangle$ tagokat χ–be helyettesítve

$$\chi_{\alpha\beta}(r) = k_B T \int_0^{k_{\max}} \frac{A_{\alpha\beta}(n)}{k^2} 2(1 - \cos \vec{k} \cdot \vec{r}) \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \, . \tag{3.32}$$

Így végeredményként, a keresett korrelációs függvény:

$$\langle X(\vec{r}_1) X(\vec{r}_2) \rangle = \bar{X}^{\,2} + \sum_{\vec{p} \neq 0} |X_{\vec{p}}|^2 e^{i\vec{p} \cdot (\vec{r}_1 - \vec{r}_2)} \exp\left(-\frac{1}{2} \, p_\alpha p_\beta \chi_{\alpha\beta} \right) \, , \tag{3.33}$$

ahol χ a (**??**) egyenletben adott. Ezen két összefüggés azért is érdekes, mert a χ kifejezésén keresztül, a korrelációs függvényben explicit figyelembe vevődik a fluktuációk hatása, továbbá, mindemellett, a d dimenzió szerinti explicit függés is nyilvánvaló marad. A konkrét kiértékelés előtt figyeljük meg, hogy a χ tag, a $k = |\vec{k}| \to 0$ határesetben semmi rendellenességet nem mutat, és nem is divergál, hiszen kis k esetében

$$\cos(\vec{k} \cdot \vec{r}) \mid_{k \to 0} = 1 - \frac{(\vec{k} \cdot \vec{r})^2}{2} + \ldots . \tag{3.34}$$

Tehát:

$$\left. \frac{2(1 - \cos \vec{k} \cdot \vec{r})}{k^2} \right|_{k \to 0} = r^2 \, , \tag{3.35}$$

melyben amint látható, k függés nem szerepel, így $k \to 0$ határesetben véges marad. Megfigyelhető továbbá, hogy a χ–ben szereplő integrál felső határának megítélésében, az integrandus számlálójában $(1 - cos(\vec{k} \cdot \vec{r}))$ egynek tekinthető, ugyanis $k \to k_{\max}$ és $k \gg 1$ esetében, $\cos \vec{k} \cdot \vec{r}$ nagyon gyorsan oszcilláló függvény, integrálja (és ezúttal a végeredményben vett járuléka) az 1 járuléka mellett elhanyagolható.

3.4 A dimenziófüggés tanulmányozása

A következőkben, fejezzük ki különböző d dimenzióban a χ tag értékét, és ezáltal a párkorrelációs függvényt.

3.4.1 A d=1 dimenzió esete

Abban az esetben ha $d = 1$, az integrálás $d^d k = dk$ szerint végzendő, tehát:

$$\chi_{\alpha\beta}(r) = 2k_B T \int_0^{k_{\max}} \frac{A_{\alpha\beta}(n)}{k^2} (1 - \cos kr) \frac{dk}{2\pi} \,|_{kr=x} \tag{3.36}$$

$$= 2k_B T r \int_0^{rk_{\max}} \frac{A_{\alpha\beta}(n)}{x^2} (1 - \cos x) \frac{dx}{2\pi} \tag{3.37}$$

$$= r\frac{T}{\pi} F(x) \Big|_0^{\infty} \sim rT \; ; \tag{3.38}$$

ahol $F(x)$ az integrál primitív függvénye, a felső határ pedig végtelenig kiterjesztett ($k_{max} \to \infty$), ugyanis az integrandus nagy x–re $1/x^2$ formában viselkedik. Látható tehát hogy $F(x)$ a két feltüntetett határ között véges értéket ad. Tehát, ez esetben $\chi \sim rT$. Az integrál persze pontosan is nyomonkövethető ha figyelembe vesszük, hogy $d = 1$-ben nincs $\vec{n} = \frac{\vec{k}}{|\vec{k}|}$ szerinti explicit függés A–ban. Ekkor:

$$\chi_{\alpha\beta}(r) = \frac{rT}{\pi} A_{\alpha\beta} \int_0^{rk_{\max}} \frac{1 - \cos x}{x^2} \, dx \tag{3.39}$$

$$\tag{3.40}$$

Ezen összefüggésben két integrál szerepel, tehát:

$$\int \frac{\cos x}{x^2} \, dx = -\frac{\cos x}{x} - Si(x) \; ; \quad Si(x) = \int_0^x \frac{\sin t}{t} \, dt \tag{3.41}$$

$$\int \frac{dx}{x^2} = -\frac{1}{x} \; ; \quad F(x) = -\frac{1}{x} + \frac{\cos x}{x} + Si(x) \tag{3.42}$$

Itt $Si(x)$ az integrál–sinus függvény, melynek értéke az $x \to \infty$ határesetben $\pi/2$. Így:

$$F(x) \,|_0^{rk_{\max}\to\infty} = \frac{\pi}{2} \quad ; \qquad \chi_{\alpha\beta}(r) = \frac{TA_{\alpha\beta}}{2} \, r \quad . \tag{3.43}$$

Mindezek során a keresett korrelációs függvény ($r = |r_1 - r_2|$):

$$\langle X(r_1)X(r_2)\rangle - \bar{X}^2 = \sum_{p\neq 0} |X_p|^2 e^{ipr} \exp\left(-\frac{1}{2}\, p_\alpha p_\beta A_{\alpha\beta} \frac{rT}{2}\right) \quad . \tag{3.44}$$

Megfigyelhető továbbá, hogy $d = 1$–ben, mivel csak egy tengelyünk van, $p_\alpha p_\beta A_{\alpha\beta} = p^2 A_{\alpha\alpha}$. Így a $\sum\limits_p$ miatt figyelembe véve hogy az exponenciális tagon kívül minden p függés páros, az e^{ipr} függvényünk $\cos pr$–be megy át, azaz:

$$G(r) = \sum_{p\neq 0} |X_p|^2 cos(pr) \exp\left(-rT\frac{p^2 A}{4}\right) \ . \tag{3.45}$$

A vezető tag felírása céljából a p szerinti összegből azon p értéket választva, melyre $p^2 A$ minimális lesz, egy exponenciális lecsengést kapunk a korrelációfüggvényben r és T szerint is egyaránt:

$$G(r) \sim exp(-rT\overline{K}) \tag{3.46}$$

ahol, $\overline{K}$ egy zérótól különböző konstans. Látható tehát, hogy $r \to \infty$ határesetben, zérótól különböző hőmérsékleten, $G(r) \to 0$, tehát hosszútávú térbeli rendezettség nem lehetséges.

3.4.2 A d=2 dimenzió esete

Abban az esetben ha $d = 2$, a k szerinti integrál $d^2k = 2\pi k dk$ összefüggés figyelembevételével végzendő, így:

$$\begin{aligned} \chi_{\alpha\beta}(r) &= 2k_BT \int\limits_0^{k_{\max}} \frac{A_{\alpha\beta}(n)}{2\pi k} \,(1-\cos kr)dk \\ &= 2k_BTr \int\limits_0^{rk\,\max} \frac{A_{\alpha\beta}(n)}{2\pi x} \,(1-\cos x)dx \quad ; \end{aligned} \tag{3.47}$$

Itt az alsó határon a primitív függvény $F(x) \sim x^2$ formájú, ami $x \to 0$–ban zérót ad eredményül. Továbbá, a felső határ közelében, a primitív függvény $F(x) \sim \ln(x)$ jellegű, viselkedés mely $f(x) \sim 1/x$ integrandusból származik. Így tehát, az $A(n)$–ben fellépő esetleges síkbeli iránytól való függés miatt, a kifejezésünk:

$$\chi_{\alpha\beta}(r) = \frac{T}{\pi}\, \bar{A}_{\alpha\beta} \ln(rk_{\max}) \tag{3.48}$$

formát ölt, ahol $\bar{A}_{\alpha\beta}$, az $A_{\alpha\beta}$-nak egy középértékét jelöli. Így:

$$\begin{aligned} \langle e^{-ip_\alpha(y_1-y_2)_\alpha}\rangle &= \exp\left(-\frac{1}{2}\,p_\alpha p_\beta \frac{T}{\pi}\bar{A}_{\alpha\beta}\ln(rk_{\max})\right) \\ &= \frac{1}{(rk_{\max})^{T\alpha_p}} \quad , \end{aligned} \tag{3.49}$$

ahol

$$\alpha_p = \frac{1}{2}\,p_\alpha p_\beta \frac{\bar{A}_{\alpha\beta}}{\pi} \ . \tag{3.50}$$

A korrelációs függvényben szereplő e^{ipr} újból $\cos pr$-et eredményez. Mindezek után, azon $\alpha_p = \overline{\alpha_p}$ értéket választva a p szerinti összegezésből, mely a legkisebb exponensbeli járulékot adja, a korrelációs függvény amplitudójára vonatkozó végeredmény (a $\cos pr$ elhagyásával), a következő képpen alakul:

$$G(r) = \langle X(r_1)X(r_2)\rangle - \bar{X}^2 \sim \frac{1}{r^{k_B T \overline{\alpha_p}}} \tag{3.51}$$

Látható tehát, hogy $G(r)$, az $r \to \infty$ határtértékben $1/r^T$ szerint változik, a lecsengés annál erősebb lévén, minél nagyobb a T. Továbbá, végtelen r–re, a korrelációs függvényünk zéró. Tehát, mindannak ellenére hogy a korrelációs függvények r szerint történő lecsengése nem annyira hangsúlyozott mint $d = 1$ dimenzióban, a tanulmányozott keretek között hosszútávú térbeli rendezettség ez esetben sem lehetséges. Az itt kapott eredmények továbbá jól reprodukálják a konkrét rendszerekre végzett hasonló számításokat (pl. T.M.Rice, 1965, $d = 2$ szupravezető; Berezinski, 1971, $d = 2$ rácsra vett termikus gerjesztések hatása, stb.), melyek során, a jellemző korrelációs függvények $1/r^{k_B T \overline{\alpha_p}}$ típusú viselkedését visszakapjuk eredményül [8].

3.4.3 A d=3 dimenzió esete

A tanulmányozott $d = 3$ dimenzióban a χ–ben szereplő integrált $d^3k = 4\pi k^2 dk$ szerint végezzük, tehát

$$\chi_{\alpha\beta}(r) = 8\pi \frac{T}{(2\pi)^3} \int_0^{k_{\max}} A_{\alpha\beta}(n)(1 - \cos kr)dk = \frac{T}{\pi^2}\, \bar{A}_{\alpha\beta} k_{\max} \tag{3.52}$$

Ezen kifejezésben, mint az előbbiekben, $\bar{A}_{\alpha,\beta}$ egy átlagos $A_{\alpha\beta}$ koefficiens érték, továbbá, a második integrált $\int_0^\infty \cos x dx = 0$-nak tekintettük, a trigonometriai tag gyors oszcilláló mivolta miatt.

Ez esetben a $\chi_{\alpha\beta}$ tag r-től független mennyiség, így a $d = 3$, az első olyan dimenziónális eset, mely fennállásakor az $r \to \infty$-re vett korrelációs függvények véges értékűek maradhatnak, ami elvileg a HTR rendezettség kialakulásának előfeltételét szolgáltatja. Látható tehát, hogy a tanulmányozás feltételei mellett, a hosszútávú térbeli rendezettség igazi birodalma a $d = 3$ dimenziós tartomány (amint azt már említettük, ez alól kivételt képeznek az $n = 1$ vektorkomponensű, diszkrét szimmetriájú, és a hosszú hatótávolságú kölcsönhatásokkal rendelkező rendszerek). Érdemes továbbá megfigyelni, hogy a fluktuációk hatása a dimenzió növekedésével, mind jobban és jobban lényegtelenebbé válik. Mindez előrevetiti, hogy d növekedésével és rögzített modell esetében, egy adott pillanatban elérünk egy olyan dimenzionális korlátot mely felett a fázisátalakulást leíró elmélet keretei között a korrelációs hatások elhanyagolhatóak[2].

[2]Lásd a Ginzburg–kritérium, felső kritikus dimenzió fogalmakat a 12. fejezetben

3.4.4 A $d \geq 4$ geometriai dimenziók esete

A $d \geq 4$ esetben a χ–ben szereplő integrál $d^d k \sim k^{d-1}dk$, $d \geq 4$ szerint végzendő. Ekkor χ–re, a következő összefüggést kapjuk:

$$\chi_{\alpha\beta}(r) \quad \sim \quad k_B T \int_0^{k_{\max}} k^{d-3} dk A_{\alpha\beta}(n)(1 - \cos kr) dk \tag{3.53}$$

Ez esetben a primitiv függvény kifejezhető, éspedig:

$$\int k^m(1 - cos(kr))dk = \frac{1}{m+1}k^{m+1} - \sum_{l=0}^{m} \frac{m!}{(m-l)!}\frac{k^{m-l}}{r^{l+1}} \sin(rk + \frac{l\pi}{2}) \tag{3.54}$$

Mindennek során újból átlagos $A_{\alpha,\beta}$ értéket vettünk figyelembe. Az integrálási alsó határ problémamentes, hiszen egy $1/r^{m+1}$ (ahol $m = d - 3$) taggal arányos járulékot eredményez az l szerinti összegből. A felső határ járuléka

$$\frac{1}{m+1}k_{max}^{m+1}[1 - (m+1)\frac{\sin(rk_{max})}{rk_{max}} + \mathcal{O}(1/r^2)] \tag{3.55}$$

alakú, azaz:

$$\chi_{\alpha,\beta}(r) \sim \frac{k_B T k_{max}^{d-2}}{d-2}\overline{A_{\alpha,\beta}(n)}[1 - (d-2)\frac{\sin(rk_{max})}{rk_{max}} + \mathcal{O}(\frac{1}{r^2})] \tag{3.56}$$

Megfigyelhető tehát hogy $d > 3$–ra, a χ abszolút értékben csökken az r növekedésével. Mindez mutatja hogy $d > 3$ esetekben a fluktuációk szerepe a korrelációs függvény kialakításában minimálissá válik, továbbá, az $r \to \infty$ határesetre, $\chi_{\alpha\beta}(r) \sim k_B T \overline{A} k_{max}^{d-2}$. Ez esetben

$$\langle e^{-ip_\alpha(y_1 - y_2)} \rangle \sim exp(-k_{max}^{d-2} T) \tag{3.57}$$

és a fluktuációk szerepe a korrelációs függvényekben elenyésző. Mindez mutatja, hogy $d > 3$–ban HTR könnyen kialakulhat. Az eredmény ugyanakkor azt is sugallja, hogy azon elméletek, melyek a fluktuációk hatásától eltekintenek, tulajdonképpen $d > 3$–ban működnek jól (pontosabban $d > d_c$, hol d_c a felső kritikus dimenzió, lásd a 12. fejezetet), mert e doméniumban, amint láttuk, a fluktuációk hatása kicsi és d-vel csökken.

A felsorolt eredmények világosan mutatják, mi az, amit a fluktuációk $d = 1, 2$–ben megsemmisítenek. Ezen mennyiség nem más mint a $\lim_{r \to \infty} \langle X(r)X(0) \rangle$ korrelációs függvény, tehát a hosszútávú térbeli rendezettség. Az is megfigyelhető, hogy végtelen hőmérsékleten a korrelációs függvény mindig zéró, tehát a $T \to \infty$ fázis mindig a teljesen rendezetlen fázis. Továbbá, nyilvánvalóan, a termikus fluktuációk hatása $T = 0$-ban eltünik.

3.5 Az eredmények rövid áttekintése

Foglaljuk össze röviden az eddig gyűjtött ismereteket.

d=1 dimenzióban fázisátalakulás nem jöhet létre, amennyiben a rendszer végtelen, és a kölcsönhatások hatótávolsága véges. A fázisérintkezési pontok, a *Landau–Peierls* gondolatmenet szerint, végtelen rendszerben a két potenciális fázist teljesen összekevernék. Ez végtelen rendszerre semmiféle fázisátalakulást nem engedélyez, független a „rendezett fázis" rendezési típusától (hogy az hosszútávú térbeli rendezettség–e, vagy sem), ha a kölcsönhatások hatótávolsága kicsi. Véges rendszer esetében azonban egy véges doméniumban létező új fázis megjelenése nem zárható ki. Mindennek az oka: az óriási (hatványfüggvény szerinti divergenciákat előidéző) fluktuációk, melyek exponenciálisan lecsengő térbeli korrelációkat eredményeznek. A HTR típusú rendezettség esetleg hosszútávú kölcsönhatások esetében jöhet létre (pl. a $d = 1$ Kac féle kontinuum gáz esete).

d=2 dimenzióban, a jellemző dinamikus változó egynél több független komponense esetében ($n > 1$), hosszútávú térbeli rendezettség, végtelen rendszerben és rövid kölcsönhatási hatótávolságok esetében nem jöhet létre. Végtelen termodinamikai rendszerben azonban van fázisátalakulás $n = 1$ esetében (pl. d=2 *Ising* modell), ami térbeli hosszútávú rendezettséget mutat. Elvileg hasonló rendezettség más diszkrét szimmetriájú Hamilton–operátorral leírt rendszerben is létrejöhet. Rövid hatótávolságú kölcsönhatások, és termodinamikai határesetben $d = 2$–ben, esetleg még olyan rendezett fázis is megvalósulhat, amely nem mutat hosszútávú térbeli rendezettséget. Ilyen pl. a *Kosterlitz–Thouless–Berezinski* féle topologikus fázisátalakulás. Abban az esetben mikor a HTR nem jelenhet meg (a kivételeket az elöbb felsoroltuk) a fluktuációk logaritmikus viselkedést mutatnak infravörös (nagy λ, vagy kis k határesetében), a térbeli korrelációk pedig $1/\mathrm{r}^{(\alpha_p T)}$ típusúan csengenek le. Így tehát a fluktuációk nem olyan nagyok, mint $d = 1$–ben. Továbbmenőleg elég nagy, makroszkópikus méretű, de véges rendszerekben egy új, rendezett fázis fellépése nem kizárható.

d=3 dimenzió, a valóságban előforduló, legtöbb létező rendszer fizikai dimenziója. Itt a fluktuációk nem idéznek divergenciákat elő, továbbá a korrelációs függvények $r \to \infty$-re végesek maradhatnak. Bármilyen hosszútávú térbeli rendezettséggel rendelkező fázis, végtelen termodinamikai rendszerben és $T \neq 0$ hőmérsékleten megjelenhet (legalábbis a termikus fluktuációk szempontjából).

d≥4: A $d = 4$ dimenzió kitüntetett szerepet játszik (ez egy teljesen absztrakt, csupán geometriai–tér dimenziót jelent). Ettől a dimenziótól kezdve a fluktuációk kezdenek kis szerepet játszani. A fluktuációkat kevésbé figyelembe vévő elméletek ezen tartományon kezdenek jól viselkedni, majd a d növekedésével fontosságuk is növekszik. Amint látni fogjuk, a kritikus exponensek szempontjából ez áll majd fenn a *Landau* elméletre (és hasonló „molekuláris-tér" típusú leírásokra), ezen információt használja majd ki a renormálási csoport bizonyos értelemben, az

ϵ sorbafejtés során, stb. Habár ez matematikai tartomány, a $d \to \infty$ határeset figyelembevételét is beszámítva, a fizikai rendszerek tulajdonságainak jellemzésében gyakran alkalmazott (lásd például [9]). Minden rendszerre létezik egy d_c dimenzió (lásd 12. fejezet) mely fölött a fázisátalakulási tulajdonságok lényegi fluktuációs hatások figyelembevétele nélkül jellemezhetőek.

d=∞ esetről, mint a $d > 3$ tartomány specifikus határesetéről, érdemes még néhány észrevételt kihangsúlyozni. Kitüntetett szerepe abból áll, hogy a nagyszámú első szomszéd jelenléte miatt a fluktuációk gyakorlatilag teljesen kiátlagolják egymást. A fluktuációk szerepe megszűnik, itt válik a ,,mean–field" (molekuláris tér közelítés) lokalizált rendszerekre (azaz mozgó szabadságfokok nélküli rendszerekre) egzakttá. Jellegzetességeinek összessége számítástechnikai szinten jól megközelíthetővé teszik ezen határesetet (pl. a sajátenergia járulékok k függésüket elveszítik és csupán az ω függésüket tartják meg, stb. [9]).

3.6 Szakirodalmi jegyzék 3.

[1] D. Vollhardt, P. Wölfle, *The Superfluid phases of Helium 3*, Taylor and Francis, London-New York-Philadelphia, 1990, 138. oldal.

[2] C. N. Yang, *Derivation of the mean magnetization of the d = 2 Ising model in closed form*, Phys. Rev. 85, 808, (1952). Lásd továbbá J. J. Binney, N. J. Dowrick, A. J. Fisher, M. E. J. Newman, *The Theory of Critical Phenomena and Introduction to the Renormalization Group*, Oxford Science Publications, Clarendon Press, Oxford, 1995, 79 oldal.

[3] C. N. Yang, *Concept of Off-Diagonal Long-Range Order and the Quantum Phases of Liquid He and Superconductors*, Rev. Mod. Phys. 34, 694, (1962).

[4] Zs. Gulácsi, M. Gulácsi, *Theory of Phase Transitions in Two Dimensions*, Advan. in Phys. 1997, nyomtatás alatt.

[5] M. Mezard, G. Parisi, M. A. Virasoro, Lecture Notes in Physics Vol. 9.,

Spin glass theory and Beyond, World Scientific, 1993, 90 oldal.

[6] L. D. Landau, E. M. Lifsic, Elméleti Fizika V., *Statisztikus Fizika 1.*, Tankönyvkiadó, Budapest, 1981, 524 oldal.

[7] L. D. Landau, E. M. Lifsic, Elméleti Fizika V., *Statisztikus Fizika 1.*, Tankönyvkiadó, Budapest, 1981, 496 oldal.

[8] L. D. Landau, E. M. Lifsic, Elméleti Fizika V., *Statisztikus Fizika 1.*, Tankönyvkiadó, Budapest, 1981, 498 oldali lábjegyzék.

[9] D. Vollhardt, *Investigation of Correlated Electron Systems Using the Limit of High Dimensions*, Correlated Electron Systems, Vol. 9., ed.by V.J. Emery, World Scientific, 1993, 57. oldal.

4 Fázisátalakulás és szimmetria

A hosszútávú térbeli rendezettségről sok információt gyűjtöttünk mindeddig össze. Mindennek ellenére, ismereteink nagyjából kvalítatív jellegűek, számítástechnikai szempontból pedig értékük eléggé kicsi. Ezen állapoton szeretnénk a következőkben változtatni a folytonos fázisátalakulás fogalmának bevezetésével.

4.1 A folytonos fázisátalakulás

A folytonos fázisátalakulás fogalmának megértése céljából elemezzük egy kicsit a másodrendű fázisátalakulásokat. A fázisátalakulási pontban, ez esetben, a két érintkező fázis termodinamikai potenciálja, Φ és Φ', egyezik. Azaz, matematikai szempontból, folytonos termodinamikai potenciálunk van, és a folytonosság a Φ elsőrendű deriváltjaira is fennáll. Végiggondolva ezen információt, például a kvantummechanikában is, a Ψ hullámfüggvény ,,sima" mivoltát, a Ψ, és elsőrendű deriváltjainak folytonosságával kötjük ki. Hasonló eset áll itt fenn a termodinamikai potenciálra, Φ–re is, mely, képletesen szólva, szintén teljesen ,,sima" függvény: folytonos és szögpontjai nincsenek. Így a test állapota teljesen ,,folytonos-nak" tűnőként változik a fázisatalakulási ponton: latens hő nincs, térfogatváltozás nincs, ha strukturális változásunk van az atomok helyzete teljesen folytonosan, semmi helyzetbeli diszkontinuitás nélkül változik meg a fázisátalakulás során. Mindezen tulajdonságok megfigyeléseként, a másodrendű fázisátalakulásokat sok szakkönyvben *folytonos* fázisátalakulásoknak nevezik és e név alatt tárgyalják [1]. Ami itt rendkívül érdekes, az az a tény, hogy a test állapota teljesen folytonosnak tűnőként változik, mégis az átalakulási pontban, a test minőségileg új tulajdonságokra tesz szert, melyek a test Φ termodinamikai potenciáljának másodrendű deriváltjaiban drasztikus változásokhoz (divergenciákhoz) vezetnek. Ha az állapot úgymond ,,teljesen" folytonosan változik, akkor felmerül az a kérdés, hogy mi is változik meg tulajdonképpen a rendszerben a ,,folytonos" fázisátalakulás során.

A kérdésre az egyedüli válasz: valamilyen fajta szimmetria. Hogy hogyan egyeztethető össze a hirtelen szimmetriaváltozás a folytonos állapotváltozással, azt a következőképpen érzékeltethetjük: Legyen egy rács szimmetriája például $d = 2$ dimenzióban négyzetes típusú, és tanulmányozzuk egy elemi cella négy atomjának helyzetét, ezen rendszeren belül, egy adott síkban. Tételezzük fel, hogy az O origóhoz képest, az x és y tengelyeken, a négy atom egyenlő távolságra van egyensúly esetén (ahogy ennek lennie kell négyzetes rács esetén). Most valamilyen okból kifolyólag változzon meg az atomok helyzete az origóhoz képest radiálisan, de különböző értékekkel a két tengely mentén. A változást tételezzük fel végtelenül lassan, folytonosan, semmilyen ugrás nélkül az atomok pozicióiban (a másodrendű strukturális fázisátalakulás például ilyen). Az atomok elindulási pillanatától kezdve, az elmozdulásuk az x és y irányban $\varepsilon_x \neq \varepsilon_y$ bármilyen kicsi is, ha nem zéró, a szimmetriánk azonnal megváltozik: már nem négyzetes lesz, hanem axiális. Ezen példa igazolja, hogy a szimmetria változhat ugrásszerűen, miközben az állapot folytonosan.

Az elkövetkezőkben, azon fázisátalakulást, mely során a rendszer valamilyenfajta szimmetriaváltozást (mondják: szimmetriasérülést) szenved a fázisátalakulási ponton, másodrendű fázisátalakulásnak, avagy folytonos fázisátalakulásnak nevezzük. Említsünk meg néhány ismert példát is: rács–szimmetria változás strukturális fázisátalakulás esetében; gauge–invariancia–sérülés a szupravezetőknél; rotációs szimmetria sérülés az egész rendszerre vonatkozólag paramágnes–ferromágnes átalakulásnál; alrács–rotációs szimmetria–sérülés antiferromágneses átalakulás esetében, stb.

4.2 A szimmetriasértés általános következményei

Tanulmányozzuk a következőkben, hogy a szimmetriasértésnek, mint új megismert információnak, milyen következményei vannak a folytonos fázisátalakulásokra vonatkozólag.

a.) A fázisátalakulási görbe két oldalán létező mindegyik fázisban, a rendszer jólmeghatározott szimmetriával rendelkezik, mely a másik fázis szimmetriájától pontosan megkülönböztethető. Ennek direkt következménye: nincs kritikus pont másodrendű fázisátalakulás esetében. Kritikus pont a fázisdiagram azon pontja, melyben egy fázisátalakulási görbe véget ér anélkül, hogy más görbét metszene (pl. klasszikus folyadék esetében, a (P,T) diagramban, a gáz és folyadék állapotokat elválasztó fázisátalakulási görbe végpontja). Mindez azért van így, mert a kritikus pontot meg lehet kerülni, és egyik fázisból a másikba, fázisátalakulás nélkül átmenni. Ez viszont azt jelentené, hogy a fázisátalakulási görbe két oldalán lévő fázisok szimmetriája megegyező, ami viszont nem lehetséges másodrendű fázisátalakulás esetében. Tehát, a kritikus pont, az elsőrendű fázisátalakulások sajátja, nem a másodrendűeké.

b.) Mivel van kritikus pont elsőrendű fázisátalakuláskor, ezért általában az elsőrendű fázisátalakulás során semmi szimmetriasérülést a rendszer nem szenved. Itt a változások legtöbbször kvantitatívak, mint kvalitatív jellegűek.[3]

c.) A fázisátalakulási görbe két oldalán csak jól meghatározott szimmetria az, ami a Φ minimumát adja. Így a fázisátalakulási görbe egyik oldalán létező fázis Φ_1 termodinamikai potenciálját (folytonos fázisátalakulás esetén), a fázisátalakulási

[3]Az ,,általában" jelző használatának itt pontos oka van. A pontosság kedvéért előrevetítve a dolgokat megjegyezzük hogy a szimmetriasértés fellépésekor mindig rendparaméterrel jellemezhető a fázisátalakulás, ez minden folytonos fázisátalakulásra szigorúan helytálló és ajegyzet gondolatmenete is erre épül. Vannak azonban olyan esetek amelyekben a szimmetriaváltozás lehetőségére építve rendparamétert vezetünk be egy új fázis jellemzésére, amely azonban a rendparaméter kicsi, zérótól különböző értékeire energiastabilitási okok (azaz a termodinamikai potenciál abszolut minimumának fel nem lépése) miatt nem valósulhat meg. Ekkor, az új fázist szimmetriasértés jellemzi ugyan, de megjelenése a rendparaméter véges ugrásával történik, és ezáltal a fázisátalakulás elsőrendűvé válik (konkrét példa látható [2]-ben). Ilyen esetekkel a jegyzet keretén belül nem foglalkozunk hiszen itt a szimmetriasérült fázist végig a termodinamikai potenciál abszolut minimumában tárgyaljuk.

görbe másik oldalára extrapolálva, semmilyen féle állapotnak nem felel meg. Ez nem áll fenn az elsőrendű fázisátalakulások esetében, ahol szimmetriasérülés hiányában, a fázisátalakulási görbe egyik oldaláról, a termodinamikai potenciál Φ_1 kifejezése, a görbe másik oldalán is, a rendszer valamilyenfajta állapotának felel meg, ami viszont nem abszolút minimum, hanem metastabil állapot. Mindennek következtében, másodrendű fázisátalakulás esetében ,,túlhevítés" jellegű folyamat, (azaz, metastabil állapotban, a fázisátalakulási görbe egyik oldalán létező egyik fázisnak, a görbe másik oldalán való megtartása) nem lehetséges. Ez viszont elsőrendű fázisátalakulások esetében megvalósítható.

d.) A fázisátalakulási görbe két oldalán nem lehetséges tetszőleges, találomra választott szimmetria. A görbe egyik oldalán a legnagyobb szimmetriájú (tehát a legrendezettebb) fázis áll. Ezen fázis szimmetriatranszformációi összességükben egy csoportot alkotnak (legyen $\mathcal{G}_0$). De minden fázis szimmetriatranszformációi együttesen csoportot alkotnak, tehát a tulajdonság a fázisátalakulási görbe másik oldalán is fennáll (legyen $\mathcal{G}$). A teljesen rendezetlen, magas–szimmetriájú fázisból (azaz $\mathcal{G}_0$–ból), a fázisátalakulási görbe másik oldalára, a ,,rendezett" fázisba (azaz $\mathcal{G}$–be), amint már láttuk, csak egy bizonyos szimmetriatranszformáció elvesztésével (azaz szimmetriasérüléssel) juthatunk át. De ez azt jelenti hogy $\mathcal{G}$, a $\mathcal{G}_0$–nak részcsoportja kell legyen. Tehát, ha a fázisátalakulási görbe ,,rendezett" oldalán álló fázis, a görbén, a ,,rendezetlen" fázissal egyensúlyban van, így a rendezett fázist leíró csoport, a rendezetlen fázist leíró csoportnak egy részcsoportja kell hogy legyen ($\mathcal{G}$–ből legalább egy szimmetriatranszformáció hiányzik $\mathcal{G}_0$–hoz képest).

e.) Elemezzünk a továbbiakban egy egykomponensű rendszert. Amint már láttuk, ezen rendszer (P,T) fázisdiagramjában maximálisan hármaspont (legyen O_h) lehetséges. Ezen hármaspontba három fáziselválasztó görbe fut be $(\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3)$, mely három különböző fázist $(\Gamma_1, \Gamma_2, \Gamma_3)$ definiál. A jelöléseket illetőleg, legyen Γ_i a γ_i vonallal átellenes fázis, így például a γ_1 kétoldalán Γ_2 és Γ_3 áll, továbbá a Γ_1 fázist az O_h–ba befutó γ_2 és γ_3 határolja. Legyen továbbá Γ_1 a legmagasabb szimmetriájú (azaz a rendezetlen) fázis, mely szimmetriatranszformációit jelölje $\{g_i\}$, és csoportját $\mathcal{G}_0$. Mindezek után tételezzük fel, hogy a Γ_1–ből a Γ_2 és Γ_3–ba másodrendű fázisátalakulás visz át, mégpedig úgy, hogy a Γ_2–be való belépéskor (γ_3) metszésével, elveszítjük g_2 szimmetriatranszformációt, míg Γ_3–ba való belépéskor (γ_2) metszésével, g_3–at. Jelölje továbbá Γ_2 és Γ_3 jellemző csoportjait $\mathcal{G}_2$, illetve $\mathcal{G}_3$.

Most elvileg a következő lehetőségek állhatnak fenn: ha $g_2 = g_3$ akkor a γ_1 menti átmenet a Γ_2 és Γ_3 fázisok között nem lehet másodrendű, ha pedig $g_2 \neq g_3$, akkor $\mathcal{G}_2$ nem lehet részcsoportja $\mathcal{G}_3$–nak (vagy viszont), és így újból a γ_1 menti átmenet nem lehet másodrendű. (A következő fejezetben ezen kérdésre még visszatérünk. Ott látni fogjuk hogy ha Γ_2 és Γ_3 különböző fázis, akkor g_2 és g_3 két különböző osztályhoz tartozik, mely esetben az itt megemlített tulajdonság szigorúan fennáll). Tehát, egykomponensű rendszer esetében, a hármaspontba befutó három fáziselválasztó görbe mindegyike nem jelölhet folytonos fázisátalakulást.

Közülük csupán kettő lehet másodrendű átmenetet jelölő, a harmadiknak elsőrendű fázisátalakulást kell jelentenie.

Továbbmenőleg, ha mindhárom görbe elsőrendű fázisátalakulást jelöl, semmi szimmetria–resztrikció nincs, ezért ezen lehetőség szintén lehetséges. Így, egy egykomponensű rendszer hármaspontjába befutó fáziselválasztó vonalak vagy mind elsőrendűek, vagy kettő másodrendű és egy elsőrendű.

f.) Az utóbbi lehetőség, azaz két másodrendű és egy elsőrendű fázisátalakulási görbe hármaspontban való metszése, úgy is előfordulhat, hogy az egyik másodrendű vonal a másik két görbe síkjából kilép. Ez esetben, a fázisdiagram két fáziselválasztó görbéjét és a hármaspontot tartalmazó síkjában, minden úgy fest mintha a másodrendű fázisátalakulás, az O_h pontban elsőrendűvé menne át. Ezen pontot nevezik a másodrendű fázisátalakulás kritikus pontjának.

g.) Megjegyzendő, hogy többkomponensű rendszerben lehetséges két darab másodrendű görbe négyespontban vett metszése (tetrakritikus pont). Ekkor, egy kiinduló rendezetlen magas–szimmetriájú $\mathcal{G}_0$ fázisból, két vonal mentén ennek két különböző $\mathcal{G}_1$ és $\mathcal{G}_2$ részlcsoportjába mehetünk át, majd ezekből, két különböző vonal mentén, egy $\mathcal{G}_3$–ba, mely $\mathcal{G}_1$ és $\mathcal{G}_2$ közös részcsoportja.

h.) Egy másik megjegyzés arra vonatkozik, hogy elsőrendű fázisátalakulási vonalak metszéspontjaiban keletkező négyespontok lehetnek izolált, másodrendű átmenetet jellemző pontok.

i.) Mivel a másodrendű fázisátalakulás „folytonosan"változtatja a test állapotát, úgy, hogy közben a test tulajdonságai kvalitatíve megváltoznak, kell létezzen egy változó (Δ = rendparaméter) ami a rendezett fázisban, az átalakulási görbétől fokozatosan felnő zérótól különböző értékekre teljesen folytonosan, úgy, hogy a fázisátalakulási görbén válik zéróval egyenlővé és a rendezetlen fázisban azonosan zéró (*Landau*–féle rendparaméter fogalom). Ez az elképzelés vezetett a fázisátalakulások első átfogó elméletéhez, melyet ma a Landau elméletnek neveznek. Ezen elmélet központi eleme a rendparaméter fogalma, mellyel a következőkben, külön fejezetben fogunk foglalkozni. A szimmetriasérülés további jellemzőire, a későbbiekben, kvalítativ új ismeretek birtokában majd visszatérünk.

4.3 Szakirodalmi jegyzék 4.

[1] N. Goldenfeld, Frontiers in Physics Vol. 85, *Lectures on Phase Transitions and the Renormalization Group*, Edison-Wesley, 1992, 14. oldal.

[2] M. Gulácsi, A. R. Bishop, Zs. Gulácsi: Physica C244, 87, (1995).

5 A rendparaméter

Folytatni fogjuk a továbbiakban a folytonos fázisátalakulások tanulmányozását, figyelembe véve ezúttal a szimmetriával kapcsolatos új ismereteinket is.

5.1 Bevezető fogalmak

Legyen az α görbe egy másodrendű fázisátalakulási görbe, melyen rajta található egy A pont. Továbbá jelöljük 1-es indexel az α egyik oldalán található magas szimmetriájú (rendezetlen), 2-vel pedig az alacsony szimmetriájú (rendezett), másik oldalon elhelyezkedő fázist. Legyen továbbá $\varrho(r)$ a rendszernek valamilyen fajta jellemző sűrűségfüggvénye. Ez lehet például anyagsűrűség, mely esetben ϱdV adja a dV térfogatban lévő tömeget; vagy például mágneses momentum sűrűség, elektromos polarizáció sűrűség, stb. Legyen továbbá az A pontban a rendszer szimmetria tulajdonságai által meghatározott szimmetriacsoport [4] $\mathcal{G}_0$. Itt meg kell jegyeznünk, hogy az A pont a magas szimmetriájú (rendezetlen) fázishoz hozzátartozónak tekintendő (ennek határvonalán helyezkedik el), tehát $\mathcal{G}_0$ számunkra az 1-es (rendezetlen) fázis jellemzője lesz. Most ϱ invariáns kell legyen a $\mathcal{G}_0$ csoport szimmetriatranszformációira. Megjegyzendő, hogy a jellemző fizikai mennyiségekre vonatkozó ilyenszerű elképzeléseket *Wigner Jenő* használta először, aki az elgondolást a rendszer hullámfüggvényére alkalmazta. A jellemző sűrűségfüggvényre vonatkozólag, a gondolatmenetet Landau használta első ízben.

A tanulmányozás folytatása érdekében, néhány matematikai jellegű háttérinformációt elevenítünk fel.

Legyen G egy csoport. Ha G elemeinek a száma g, akkor g egyben a csoport rendje. Ha $f_1(r)$ egy egyértékű függvény, akkor a g darab szimmetria transzormációt rá alkalmazva, maximálisan g különböző új függvényt kaphatunk eredményül. Most előállítható egy $\{f_1, f_2, \ldots f_l\}$ lineárisan független halmaz ($l \leq g$), melynek elemei G összes elemei hatására egymásba mennek át. Ekkor $\{f_i\}$ halmaz a G csoport egy ábrázolásának bázisa, l pedig az ábrázolás dimenziója. Minden szimmetriaelem hatását operátorként foghatjuk fel, ezek f_i–vel kiszámított matrixelemei matrixokat alkotnak, minden operáció matrixának összessége pedig a csoport egy *ábrázolása.* Most $\{f_i\}$ halmaz megválasztása nem egyértelmű, mert az elemek lineáris kombinációjából új ekvivalens $\{f_i\}$ halmaz építhető fel. Most az $\{f_i\}$ halmaz mindig megválasztható úgy, hogy olyan halmazokra essen szét, melyek lehető legkevesebb függvényt tartalmazzanak, és az egyes halmazokat alkotó elemek G összes elemének hatására csak egymásba menjenek át. Legyen n ezen részhalmazok indexe, i pedig az elemek indexe egy rögzített n esetén. Ekkor $\{f^n_{i=1}, f^n_{i=2}, \ldots f^n_{i=i_n}\}$ egy n–edik

[4] Ha nagybetűkkel jelöljük a szimmetria transzformációkat, azaz az elemeket, akkor a jelölések szempontjából: A^{-1}, az A inverz transzformációja; E az egységelem, azaz az azonos transzformáció. Az $AB = C$ mindig fennállónak tekínthető, mert addig bővítjük a transzformációk halmazát míg ezen követelmény is helytálló, és C is $\in \mathcal{G}_0$. Az $(AB)C = A(BC)$ asszociativitás általában teljesül, és az $AB = BA$ kommutativitás fennállása nem szükségszerű (ha fennáll: Abel–csoportot kapunk.).

irreducibilis ábrázolást jellemez (pontosabban annak a bázisa). Így, i_n ezen irreducibilis ábrázolás dimenziója. Az $\{f_i^n\}$–ben szereplő elemek száma ($l = i_n$) semmilyen lineáris transzformációval nem redukálható, ezért nevezzük ezen ábrázolást irreducibilisnek. A további kiegészítéseket illetőleg, az A és B–vel jelölt G elemek ,,konjugáltak", ha van egy C elem G–ben úgy, hogy $A = CBC^{-1}$. Egymással konjugált elemek osztályokat alkotnak, és az osztályok száma r, számszerűleg egyenlő az irreducibilis reprezentációk számával (ábrázolás = reprezentáció). Adott ábrázolásban az egy osztályba tartozó elemek karakterei (matrixaiknak spurjai) egyenlőek.

Mindezen kiegészítő után, folytatjuk a rendszer jellemzésére vonatkozó fizikai gondolatmenetet.

5.2 A sűrűségfüggvény irreducibilis ábrázolások szerinti sorbafejtése

Ha ϱ invariáns $\mathcal{G}_0$–ra, akkor felírható bármely bázis $\{f_i\}$ lineáris kombinációjaként, tehát megadható az $\{f_i^n\}$ irreducibilis ábrázolások segítségével is:

$$\varrho = \sum_{n=1}^{r} \sum_{i=1}^{i_n} \alpha_i^{(n)} f_i^n \quad . \tag{5.1}$$

Itt $i_n = l_n$ az n–edik irreducibilis ábrázolás dimenziója, r pedig az osztályok száma.

Az irreducibilis ábrázolások között mindig van egy olyan ábrázolás (melyet egységábrázolásnak nevezünk), mely dimenziója 1 (egyetlen függvényből áll), és ez a függvény egymaga, önmagában invariáns $\mathcal{G}_0$ összes szimmetriatranszformációira. (Ez általában egy ,,konstans függvény", ahol a konstans jelleg a $\mathcal{G}_0$ transzformációira vonatkozó konstans mivoltot jelöl).

A ϱ sorfejtésében ezen egységábrázolás bázisfüggvényét különválasztva, a következő egyenlőséget kapjuk:

$$\varrho = \varrho_0 + \underbrace{\sum\nolimits_n' \sum_i \alpha_i^{(n)} \; f_i^n}_{\varrho'} = \varrho_0 + \varrho' \quad , \tag{5.2}$$

ahol ϱ_0 az f_i^0 egységábrázolás bázisfüggvényével arányos, továbbá a ϱ' kifejezésében szereplő irreducibilis ábrázolások szerinti összegből, az egységábrázolás hiányzik (ezt jelöli a $\sum'$–ben szereplő felülvonás). Most ϱ' szimmetriája a $\mathcal{G}_0$ szimmetriájánál alacsonyabb, egyszerűen azért, mert ϱ' nem tartalmazza az f_i^0 tagot, így nem lehet minden $\mathcal{G}_0$–beli transzformációra invariáns. Jelöljük a továbbiakban ϱ' szimmetriacsoportját $\mathcal{G}$–vel.

Amint már említettük, az 1–es tartományt tételeztük fel a magas szimmetriájú fázisnak. Továbbá, a fázisátalakulási α görbe az A ponttal együtt az 1–es tartományhoz tartozónak tekinthető, tehát az 1–ben (és ezúttal A–ban is) a jellemző szimmetriacsoport $\mathcal{G}_0$. Ez lesz a szimmetriacsoportja ϱ–nak, és ugyanakkor ϱ_0–nak is.

Továbbmenve, a $\mathcal{G}$ csoporton belül, a $\sum_n' \ldots f_i^n$ összegben, az f_i^n bázisfüggvények szigorúan egymásba transzformálódnak maguk között, mert hiszen a $\sum_n'$ által rögzített irreducibilis ábrázolás indexeihez tartozó függvények. Mivel $\mathcal{G}$ nem jellemezheti az 1-es fázist, de fizikailag létezhető fázist jelöl, feltételezzük, hogy ezen $\mathcal{G}$ a 2–es fázis (azaz az alacsony szimmetriájú rendezett fázis) szimmetriája által meghatározott csoport. A $\mathcal{G}$–beli szimmetria transzformációk az $\{f_i^n\}'$ sokaságot transzformálják önmagába, ahol $\{\ldots\}'$–ben, a $\mathcal{G}_0$ egységábrázolása nincs benne. Ezen $\mathcal{G}$–beli szimmetriatranszformációk hatására, ϱ' formája marad változatlan. De teljesen általánosan elemezve a problémát, az $\{f_i^n\}'$ halmaz reducibilis lesz $\mathcal{G}$–ben. Mindennek ellenére, belőle felépíthető egy $\mathcal{G}$–ben irreducibilis halmaz $\{g_i^{n_1}\}$, ami tartalmazni fogja $\mathcal{G}$ egységábrázolását is. Így:

$$\varrho = \varrho_0 + \underbrace{\sum_{n_1}\sum_{i} \beta_i^{n_1} g_i^{n_1}}_{\varrho'} \quad , \tag{5.3}$$

ahol most az n_1 szerinti szumma $\mathcal{G}$ szerint történik, és ennek minden irreducibilis ábrázolását érinti.

5.3 A termodinamikai potenciál kifejezése

A $\mathcal{G}$ csoportban ϱ' formája a $\mathcal{G}$–beli transzformációk hatására invariáns marad, és mindig ugyanazon $\{g_i^{n_1}\}$ elemek sorfejtésében adott. Így felfoghatjuk, hogy ezen transzformációk nem a $\{g_i^{n_1}\}$ halmazra, hanem a $\{\beta_i^{n_1}\}$ koefficiensek halmazára hatnak, és $\beta_i^{n_1}$ tagokat változtatják [5].

Így maga a $\{g_i^{n_1}\}$ halmaz rögzítetté válik, és ami változhat, az a $\{\beta_i^{n_1}\}$ halmaz elemeinek konkrét értéke lesz. Most a termodinamikai potenciál, Φ, függni fog p, T és $\{\beta_i^{n_1}\}$ halmaz elemeitől, mint ,,változók"–tól (és ezenkívül rögzített paraméterektől, mint a részecskeszám, a konkrét $\{g_i^{n_1}\}$ halmaz, térfogat, stb). Így:

$$\Phi = \Phi\left(p, T, \{\beta_i^{n_1}\}\right) \quad . \tag{5.4}$$

Mindezek után elemezzük a következő szituációt: Ha jövünk az alacsony szimmetriájú fázis felől (2) a magas szimmetriájú fázis felé (1) az A ponton keresztül, az A pontban a szimmetria $\mathcal{G}$–ből $\mathcal{G}_0$–vá válik. Mindennek hatására, a jellemző sűrűségfüggvényünk a $\mathcal{G}$ szimmetriával $\mathcal{G}_0$ szimmetriájúvá kéne váljon, de ezt a rögzített $\{g_i^{n_1}\}$ tagok nem biztosítják, mert szimmetriájuk csupán $\mathcal{G}$. Csak úgy kapunk az A pontban $\mathcal{G}_0$ szimmetriát, ha az összes $\{\beta_i^{n_1}\}$ zéróvá válik, és $\varrho = \varrho_0$ marad fenn. Mindez azért, mert amint már említettük, ϱ_0 a teljes $\mathcal{G}_0$ szimmetriával rendelkezik, továbbá az összes szimmetriatranszformációra invariáns, így $\mathcal{G}$–ben is helytálló. Most mivel a fázisátalakulásunk másodrendű, azaz Φ folytonos, és deriváltjai is folytonosak, $\{\beta_i^{n_1}\}$ halmaz elemei folytonosan kell zéróvá váljanak a

[5] Megértés szempontjából gondoljunk itt a rögzített vektor mellett forgatott koordinátarendszer, és a rögzített koordinátarendszer mellett forgatott vektor esetére.

fázisátalakulási vonalon (és nem ugrásszerűen). A $\{\beta_i^{n_1}\}$ halmaz így az A pontban és az 1–es fázisban zéró, a 2–es fázisban pedig folytonosan válik zérótól különbözővé.

A következőkben koncentráljunk egy kicsit a termodinamikai potenciálra, Φ–re. A Φ mennyiség ϱ–tól is függ, így tartalmaz egy ϱ_0–nak megfelelő Φ_0 tagot [6], továbbá egy ϱ'–nek megfelelő $\Phi' = \Phi'\left(p, T, \{\beta_i^{n_1}\}\right)$ járulékot:

$$\Phi = \Phi_0 + \Phi' \, . \tag{5.5}$$

Nyilvánvalóan, ezen felírás csupán az α fázisátmeneti görbe mellett érvényes általában, és Φ valamilyen fajta sorbafejtésének tekinthető az α görbe körül. Mivel ϱ_0–ban, $\{\beta_i^{n_1}\}$ nem szerepel, így $\Phi_0 = \Phi_0(p, T)$. Megfigyelhető továbbá, hogy $\mathcal{G}_0$ és $\mathcal{G}$ szimmetria transzformációi valamilyenfajta koordináta–transzformációkkal hozhatók összefüggésbe, továbbá tudjuk, hogy Φ–nek invariánsnak kell lennie a koordinátatranszformációkkal szenben. Így a Φ'–nek, $\{\beta_i^{n_1}\}$ szerinti függése, a $\beta_i^{n_1}$–ből alkotott invariánsokon keresztül történhet csupán. Ezen invariánsoknak az A pontban $\mathcal{G}$ mellett $\mathcal{G}_0$ invariánsainak is kell lenniük.

Ezen információból kifolyólag, koncentrálnunk kell a $\{\beta_i^{n_1}\}$–ből felépíthető lehetséges invariánsokra. Elemezzük sorra a lehetséges eseteket:

a.) **Lineáris invariáns esete**:

Ez esetben a keresett invariánsunk a $\beta_i^{n_1}$ tagoknak lineáris kombinációja kéne legyen. Ez viszont, ha $\mathcal{G}_0$–ra invariáns, úgy ahogy ϱ volt, f_i^n elemek lineáris kombinációjaként is felírható, és így f_i^0–t is tartalmaznia kéne. De a $\mathcal{G}$ csoportot (melyet a $\beta_i^{n_1}$ jellemzi) úgy kaptuk, hogy $\{f_i^n\}$–ből, az f_i^0–t, azaz az egységábrázolást kívettük. Így nem formálható $\beta_i^{n_1}$–ből lineáris invariáns $\mathcal{G}_0$–ra, tehát ezen eshetőség elesik.

b.) **Négyzetes invariáns esete**:

Megfigyelhető, hogy másodrendű (azaz négyzetes) invariáns az egységelem nélkül is képezhető. Mindez azért, mert minden irreducibilis ábrázolás (és így a reducibilisé is, ami az irreducibilissekkel kifejezhető), önnmagával vett szorzatában mindig tartalmazza az egységábrázolást. Tehát a legalacsonyabb rendű invariánsunk, mely a követelményeket teljesíti, négyzetes invariáns [1].

Mindezen ismeretek tudatában, transzformáljuk vissza a $\{g_i^{n_1}\}$ tagokat az eredeti $\{f_i^n\}$ bázisba. Az így kapott $\{\beta_i^{n_1}\}$ halmazból eredő új halmazt jelöljük $\{\eta_i^n\}'$–el. Az elmondottak alapján, n rögzítése mellett vett $\sum_i (\eta_i^n)^2$ formájú kifejezésből invariáns alkotható. Mindezek után az n szerinti összegzéssel a következő összefüggés

[6] A használt jelölés $\Phi_0 = \Phi(\{\beta_i^{n_1} = 0\})$

adódik:

$$\Phi = \Phi_0 + \sum\nolimits_n' A^{(n)}(p,T)\left(\sum_i \eta_i^{(n)2}\right) + \mathcal{O}\left((\eta_i^{(n)})^3\right) \quad . \tag{5.6}$$

A felül jelzett összegezés, ezúttal is azt jelöli, hogy az n szerinti szummázás során a $\mathcal{G}_0$ egységábrázolása kimarad.

Azt állítottuk, hogy az 1–es magasabb szimmetriájú fázisban az összes $\{\beta_i^n\}$ járuléknak zéróvá kell válnia. Ekkor viszont, a $\{\beta_i^n\}$ lineáris kombinációiból nyert $\{\eta_i^n\}$ tagoknak is mind zéróvá kell válniuk. Közben azt is tudjuk, hogy Φ végig minimum kell maradjon. Ez az 1–es fázisra is fenn kell álljon. Az 1–es magasszimmetriájú $\{\eta_i^n \equiv 0\}$ fázisban azonban Φ úgy minimum $\eta_i^n = 0$ mellett, ha az összes $A^{(n)}(p,T)$ tagok az 1–es fázisban pozitivak. Csak így biztosítható ugyanis, hogy egy tetszőleges kis η_i^n megjelenése az 1–es fázisban Φ–t növelni fogja. A 2–es fázisban viszont, folytonos módon, $\eta_i^n \neq 0$ tagok kell megjelenjenek. Ezek négyzetesen szerepelnek Φ–ben (a legkisebb rendben). Így, hogy η_i^n megjelenése a 2–es fázisban Φ–t csökkentse, legalább egy $A^{(n)}$ (egy rögzített n –re) a 2–es fázisban negatívvá kell váljon. Tehát az A pontban egy rögzitett irreducibilis reprezentáció $n = n^*$ indexre:

$$A^n(p,T)\Big|_{n=n^*} = 0 \quad , \tag{5.7}$$

kell fennálljon. Ez viszont egy (p,T) változókat tartalmazó összefüggés, tehát pontosan az α fázisátalakulási görbe egyenlete. Ha a fázisátalakulási görbén két darab, különböző n–értékű $A^{(n)}$ válna zéróvá, akkor azt kapnánk hogy:

$$A^{n_1}(p,T) = 0 \; ; \qquad A^{n_2}(p,T) = 0 \; . \tag{5.8}$$

Ez viszont már két darab egyenlet lenne, ami csupán egyetlen pontot adna a (p,T) síkban, nem fázisátalakulási görbét. Nekünk viszont fázisátalakulási görbénk van, így ezen lehetőséget ki kell zárnunk.

Mindezek után jogos azon következtetés, miszerint a 2–es „rendezett”, alacsonyabb szimmetriájú fázisban a Φ temodinamikai potenciálban, Φ_0 mellett egyetlen rögzített irreducibilis reprezentációs n indexre (amely nem $\mathcal{G}_0$ egységábrázolását jellemzi) egy

$$\Phi' = A^{(n)}(p,T)\sum_i (\eta_i^n)^2 + \mathcal{O}\left((\eta_i^n)^3\right) \tag{5.9}$$

új tag jelenik meg a termodinamikai potenciálban. Mindez úgy történik, hogy az 1–es rendezetlen, magasabb szimmetriájú fázisban az η_i^n tagok folytonosan zéróvá válnak, és $A^{(n)}(p,T) > 0$ áll fenn. Továbbá, a 2–es alacsony szimmetriájú (rendezett) fázisban az η_i^n tagok folytonosan felnőnek zérótól különböző értékre, és $A^{(n)}(p,T) < 0$ a fázisdiagram ezen részében. Most, Landau szerint, mindez csak úgy lehetséges, ha pontosan az α fázisátalakulási görbén, az $A^{(n)}(p,T)$ függvény folytonos, azaz

$$A^{(n)}(p,T_c) = 0 \; . \tag{5.10}$$

Figyelmesen nyomonkövetve a gondolatmenetet, rájövünk, hogy ez egy szuplimentáris matematikai feltételezés, amely az η_i^n tagok folytonos változását az $A^{(n)}(p,T)$ koefficiensek folytonosságára is extrapolálja, egy olyan lépés, mely (mint később látni fogjuk) nem szükségszerű. Tehát az α görbe mentén

$$\Phi = \Phi_0 + A^{(n)}(p,T)\sum_i (\eta_i^n)^2 + \mathcal{O}\left((\eta_i^n)^3\right) \tag{5.11}$$

Ezen egyenletben az n index rögzitett és az α fázisátalakulási görbe direkt jellemzője.

5.4 A rendparaméter bevezetése

A levezetett termodinamikai potenciál kifejezéséből kiindulva, legyen

$$\Delta = (\eta_1^n, \eta_2^n, \ldots \eta_{i_n}^n) \quad , \tag{5.12}$$

egy i_n komponensű vektormennyiség, mely neve *Landau* nyomán: rendparaméter[7]. Ekkor, definiciószerüen

$$\Delta^2 = \sum_i ((\eta_{i_n}^n)^2)\,, \quad \Delta^4 = (\Delta^2)^2\,. \tag{5.13}$$

Mivel egyetlen rögzített irreducibilis ábrázolás játszik szerepet az α görbe adott szakaszán, az n indexet elhagyjuk, és így:

$$\Phi = \Phi_0 + \Delta^2 A(p,T) + \Delta^3 C(p,T) + \Delta^4 B(p,T) + \ldots \tag{5.14}$$

összefüggés adható meg a folytonos fázátalakulás közelében a termodinamikai potenciálra, ahol

$$\Delta \begin{cases} = 0 & \text{1–es rendezetlen fázisban,} \\ \neq 0 & \text{2–es rendezett fázisban.} \end{cases} \tag{5.15}$$

Ezen összefüggéshez persze hozzá kell még tenni Δ folytonosságát is a fázisátalakulási görbe mentén. Továbbá azt is tudjuk, hogy:

$$A(p,T) \begin{cases} > 0 & \text{a rendezetlen fázisban,} \\ = 0 & \text{a fázisátalakulási görbén,} \\ < 0 & \text{a rendezett fázisban.} \end{cases} \tag{5.16}$$

[7] A pontosság kedvéért megjegyezzük, hogy teljes általánosságban a Δ nem szükségszerüen matematikai értelemben vett vektor, hanem i_n független komponensű halmaz, ahol $D = i_n$ a rendparaméter ,,dimenziója". Példaként megemlítjük, hogy a ^3He-ban megjelenő Bose-kondenzátum 18 független elemből álló rendparaméter segítségével írható le teljes általánosságban, vagy, a ^4He esetében a $HeI - HeII$ fázisátalakulás rendparamétere $\Psi(\mathbf{x})$ egy lokális komplex skalár tér ($i_n = 2$) [2]. Az általános esetekben a (**??**) kifejezés definiciószerüen használt, továbbá $\Delta^{2k} = (\Delta^2)^k$. Ha páratlan rendparaméter hatványok Δ^{2k+1}, $k \geq 1$ előfordulnak (pl. Δ^3), akkor ezen tagokat a $(\{\eta_i^n\})$ járulékokból a $(2k+1)$ rendű invariánsok felépítési szabályai szerint képezzük.

Az elemzés viszont tovább folytatható: az állapotunk $\Delta = 0$ közelében (azaz a fázisátalakulási görbén és annak környezetében) stabil állapot kell legyen. Ehhez viszont az szükséges, hogy a másodrendű fázisátalakulási vonalon és környezetében $\partial\Phi/\partial\Delta = 0$ mellett

$$\frac{\partial^2\Phi}{\partial\Delta^2} > 0 \tag{5.17}$$

kell fennálljon. Mindez Φ sorfejtése alapján:

$$2A(p,T) + 6\Delta C(p,T) + 12\Delta^2 B(p,T) > 0 \tag{5.18}$$

összefüggést jelent kis Δ–ra. A rendezett 2–es fázisban, ahol Δ zérótól különböző, és $A(p,T) < 0$, mindez teljes általánosságban csak úgy állhat fenn, ha

$$C = 0\,, \quad B > 0\,. \tag{5.19}$$

Ellenkező esetben, nagyon kis Δ–ra, (**??**) alapján, abban a tartományban amelyben a $\Delta^2 B(p,T)$ tag elhanyagolható az első két járulék mellett, a másodrendű Φ derivált negatív lenne $A(p,T)$ negatív mivolta miatt. Erről úgy is meggyőződhetünk, hogy figyelembe vasszük a $\partial\Phi/\partial\Delta = 0$, $\Delta \neq 0$ stabilitási kondició alapján ($2A + 3\Delta C + 4\Delta^2 B = 0$) azt a tényt miszerint a (**??**) egyenlőtlenség

$$g(\Delta) = 3\Delta C + 8\Delta^2 B > 0 \tag{5.20}$$

formába írható. Mivel $g(\Delta)$ négyzetes tagjának koefficiensében $B(p,T)$ szerepel, (**??**) nagy tartományon való fennállásához $B(p,T) > 0$ szükséges (a $g(\Delta)$ parabola ágai felfele mutassanak az $y = g$ tengely mentén). Továbbá $g(\Delta)$ zéróhelyei

$$\Delta_1 = 0, \quad \Delta_2 = -\frac{3C}{8B} \tag{5.21}$$

Megfigyelhető, hogy $B > 0$ mellett, a felírt másodfokú egyenletből származó két gyök közötti tartományban mindig $g(\Delta) < 0$ teljesülne ha C nem zéró. Mindez akkor is fennállna ha $A = 0$, tehát pont a fázisátalakulási vonalon vagyunk, de érvényes a fázisátalakulási vonal környezetében is hiszen a (**??**) összefüggések fennállásához a (**??**) kondició tükrében, az $A = 0$ feltétel nem szükségszerű[8].

[8]Megjegyezzük, hogy nemcsak $B > 0$, hanem $B = 0$ esetében is, a (**??**) stabilitási feltétel a $C = 0$ kitételt megköveteli. Ennek alapján, ha (**??**) szintjén direkt $C = 0$-val, az A-ra vonatkozólag a (**??**) kikötésekkel és $B(p,T) > 0$ egyenlötlenséggel indulunk a Φ kifejezésében, és mindezek mellett a folytonos fázisátalakulási görbe mentén egy konkrét rendszerben egy $B(p,T) = 0$ pontot érünk el a (p,T) diagramban, ennél a pontnál a (**??**) stabilitási kondició nem teljesül többé. Ennek az a következménye lesz, hogy kis Δ értékre a $\Delta \neq 0$ rendezett fázis energetikailag nem lesz stabil, és Δ novekedésével a Φ kifejezésébe a hatodrendű tag figyelembevétele is szükségszerű lesz $D(p,T)\Delta^6$, $D(p,T) > 0$ formában. Továbbmenőleg a Δ^6 tag miatt a rendezett fázis stabillá válik egy véges Δ_c érték felett, ami azt eredményezi, hogy a rendezett fázis rendparaméter ugrással, elsőrendű fázisátalakulás formájában lép be. Ezért szokásos az $A(p,T) = B(p,T) = 0$ pontot a másodrendű fázisátalakulás „kritikus pontjaként” kezelni.

Tehát, teljesen általános meggondolásokból, folytonos állapotváltozáskor

$$\Phi = \Phi_0(p,T) + A(p,T)\Delta^2 + B(p,T)\Delta^4 + \ldots, \tag{5.22}$$

ahol A előjelet vált a fázisátalakulási görbén, és $A > 0$ a $\Delta = 0$–val rendelkező rendezetlen fázisban. Továbbá a folytonos fázisátalakulási görbe környezetében (és az átalakulási görbén is) $B > 0$. Mindezen gondolatmenetben, a rendszerünket homogénnak tekintettük, tehát impliciten feltételeztük, hogy $\Delta = \Delta(r)$ =konstans.

5.5 Inhomogenitás és külső tér hatása

Inhomogén rendszerre általánosítva a rendparaméter fogalmát,

$$\Phi \sim (\vec{\nabla}\Delta(r))^n \tag{5.23}$$

additív járulékok jelenlétét nem küszöbölhetjük ki a termodinamikai potenciál kifejezésében, így ezek előfordulását is meg kell engednünk. Ez esetben Φ egy r-függő $\overline{\Phi}(r)$ potenciálsűrűség segítségével az $\int \overline{\Phi}(r)dV$ formában adható meg. Mindezek után azt kell eldöntenünk, melyik a legkisebb n hatvány, mely az inhomogenitás relevánsságát tükrözi. Ha $n = 1$, akkor $\int \frac{\partial\Delta}{\partial r}\, dV$ felületi integrállá alakítható, és ez termodinamikai határesetben nem bír fizikai jelentéssel[9]. Tehát $n = 1$–re az inhomogenitási járulék az eredő Φ-ben teljesen jelentéktelen. Így az első előforduló releváns, inhomogenitásokat tartalmazó tag $\left(\frac{\partial\Delta}{\partial r}\right)^2$ típusú. Mivel a rendszerben fennálló gradiensek különböző áramsűrűségek révén kiegyensúlyozódnak, Δ konstans értéke kell Φ minimumát adja. Így a $\left(\frac{\partial\Delta}{\partial r}\right)^2$ koefficiense $g(p,T) > 0$ kell legyen. Mindez tulajdonképpen $\overline{\Phi}(r)$ sorbafejtésének inhomogenitási járulékaként fogható fel, vezető rendben, egy folytonos fázisátalakulási görbe körül.

Ellemzésünk teljessége kedvéért hangsúlyoznunk kell, hogy mindeddig eltekintettünk külső tér jelenlététől. A külső tér itt egy absztrakt fogalom, melynek fellépése egy adott szimmetriasérülést okoz, és a rendszert automatikusan egy Δ rendparaméterrel jellemzett rendezett fázisba viszi át. Ezáltal egy adott külső tér mindig egy rendparaméterhez kötött, így szokásos a rendparaméterrel *konjugált* külső tér formájában is megnevezni.

Most $\mathcal{G}$ lévén a csoport, mely a rendezett fázist jellemzi, és a külső tér jelenlétében $\Delta \neq 0$ fázis lép fel, a $\{\beta_i^{n_1}\}$ tagok ezen konfigurációban a ‚teljes' szimmetriát tükrözik, így ekkor elsőrendű invariáns képezhető. A Φ-ben megjelenik egy Δ–val arányos tag. Jelöljük a továbbiakban a teret h–val. Ahhoz, hogy h hatása reális legyen, és a rendszert stabil állapotban $\mathcal{G}$–be vigye át $\Delta \neq 0$–val, a külső térnek megfelelő tagnak a termodinamikai potenciálban $-\Delta h$–nak kell lennie. Így $h \neq 0$–ra, $\Delta \neq 0$ jelenlétében, ténylegesen Φ csökkenése érhető el (itt h pozitiv

[9] A szakirodalomban ez esetben gyakran használt jelölési rövidités alapján $\partial/\partial r$ itt gradienst jelent. Megjegyezzük továbbá, hogy a tanulmányozott tag vektor, így a skalár jellegű Φ-be az inhomogenitás járuléka ezen formába nem kerülhet bele.

definitnek választott). Azonban $h \neq 0$ értéke, a Φ–ben, elsőrendű Δ tagot indukál, azaz ez esetben a fázisátalakulásunk, ha van [10], nem folytonos (másodrendű) többé. Ezt *Ehrenfest*–törvény néven emlegeti a szakirodalom.

Az elmondottakat összefoglalva, általános esetben:

$$\begin{aligned}\overline{\Phi}(r) &= \overline{\Phi}_0(r) + A(p,T)\Delta^2(r) + B(p,T)\Delta^4(r) \\ &+ g(p,T)\left(\frac{\partial\Delta(r)}{\partial r}\right)^2 - \Delta(r)h(r)\ ,\end{aligned} \tag{5.24}$$

továbbá, a termodinamikai potenciál értéke:

$$\Phi = \frac{1}{V}\int\overline{\Phi}(r)dV. \tag{5.25}$$

A meghatározó és elemzendő kifejezés tehát inhomogén esetben a $\overline{\Phi}(r)$ potenciálsűrűség lesz. Az (**??**, **??**) összefüggésekből eredő termodinamikai potenciál kifejezést szokásos *Ginzburg-Landau*–féle formának is nevezni.

5.6 Egykomponensű rendszer hármaspontja

Végezetül visszatérünk egy előbbiekben tett megállapításra, miszerint egykomponensű rendszer esetében, ha a fázisdiagram hármaspontjába másodrendű fázisátalakulási görbék futnak be, akkor ezek közül csak kettő másodrendű, a harmadik pedig elsőrendű kell legyen. Ezen probléma elemzésekor felhasználjuk a szimmetriatulajdonságokkal kapcsolatos új ismereteinket.

A hármaspont tanulmányozására vonatkozólag ugyanazon jelöléseket fogjuk használni mint a 4.2 paragrafus e pontjában, éspedig: a (p,T) diagramban O_h a hármaspont, melyben három darab fáziselválasztó vonal fut be $(\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3)$, továbbá minden γ_i–vel átellenes fázist Γ_i jelöli. Konvenció szerint a Γ_1 fázis a legnagyobb szimmetriájú (rendezetlen) fázis, mely jellemző csoportja $\mathcal{G}_0$. Most tételezzük fel, hogy $\Gamma_1 \to \Gamma_2$ másodrendű fázisátalakulásnál az n_2 irreducibilis reprezentációnak megfelelő $A^{n_2}(p,T)$ koefficiens válik zéróvá, míg a $\Gamma_1 \to \Gamma_3$ másodrendű átmenetnél az n_3–nek megfelelő $A^{n_3}(p,T)$ lesz zéró, ahol $n_3 \neq n_2$. Ha most a Γ_2 fázist $\mathcal{G}_2$ csoport, és a Γ_3 fázist a $\mathcal{G}_3$ csoport jellemzi, akkor ezen csoportokból két különböző irreducibilis reprezentáció hiányzik a $\mathcal{G}_0$–hoz képest. Így, $\mathcal{G}_2$ és $\mathcal{G}_3$ nem lehetnek egymás részcsoportjai, tehát a köztük levő fázisátmeneti görbe (γ_1) kötelezően elsőrendű.

Tehát, ha egy egykomponensű rendszer hármaspontjába folytonos fázisátalakulási görbék futnak be, számuk mindig páros: vagy kettő, vagy zéró.

[10] A pontosság kedvéért megjegyezzük, hogy a (p,T) diagramban A és B változnak, igy fázisátalakulás nem zárható ki h jelenlétében (lásd: antiferro-ferro, vagy szupravezető-normál állapot). Megemlítjük továbbá, hogy vektoriális jellegű rendparaméter esetében a Δh szorzat két vektor között vett skaláris szorzat formában értendő.

5.7 Szakirodalmi jegyzék 5.

[1] Másodrendű invariáns minden ábrázolás esetében csak egy darab van, és ez kifejezhető egy pozitiv definit kvadratikus formában, azaz mindig felírható négyzetek összegeként. Lásd: L. D. Landau, E. M. Lifsic, Elméleti Fizika V., *Statisztikus Fizika 1.*, Tankönyvkiadó, Budapest, 1981, 524 oldal.

[2] J. J. Binney, N. J. Dowrick, A. J. Fisher, M. E. Newman, *The Theory of Critical Phenomena, An Introduction to the Renormalization Group*, Oxford Science Publication, Clarendon Press, Oxford, 1995, 16. oldal.

6 A Kadanoff-konstrukció

A továbbiakban szintén a folytonos fázisátalakulások jellemzőivel fogunk foglalkozni, de most már új szempontok alapján, melyek a leírás paramétereit minőségileg új oldalakról világítják majd meg.

6.1 A korrelációs hossz

A rendezett fázisban, amint azt a korrelációs függvények tanulmányozásánál kifejtettük, hosszútávú térbeli korrelációk vannak jelen. A rendezett fázisról lévén szó, definició szerint ezek az $r \to \infty$ határesetben is fennállnak. Továbbá, amint láttuk, a másodrendű fázisátalakulás ,,folytonos". Így a rendezetlen fázisból közeledve a fázisátalakulási vonalhoz, a távolság, melyen belül korrelációk vannak jelen, folytonosan nő. Jelöljük azon távolságot, melyen belül korrelációk állnak fenn, ξ–vel, és nevezzük a következőkben korrelációs hossznak. Ha csak T változhat a rendszerben, $T \to T_c$ esetében $\xi \to \infty$, ahol T_c fogja jelölni azon hőmérsékletet, melyen a fázisátalakulási görbét metszettük (T_c neve: *kritikus hőmérséklet*).

Mindezen észrevételt, matematikailag úgy fejezzük ki, hogy $t = (T - T_c)/T_c$–re, ha $t \to 0$, akkor $\xi \sim t^{-\nu}$, ahol $\nu > 0$. A ν neve: kritikus exponens, mégpedig a ξ korrelációs hossz kritikus exponense. A későbbiekben látni fogjuk, hogy nemcsak ξ az egyedüli mennyiség, melyhez a $t \to 0$ határéresetben kritikus exponens értelmezhető, hanem minden olyan mennyiség rendelkezik egy ilyenfajta tulajdonsággal, mely $T \to T_c$ esetében divergál.

Egyelőre mindez matematikai artifaktumnak tünik csupán. Hogy látni lehessen, hogy többről van szó, tanulmányozzuk egy kicsit a d=3 dimenziós *Ising*–modell jellemzőit a T_c hőmérséklethez közeledve. Távol T_c–től és T_c felett, a rendszert felépítő spinek jó közelítésben independenseknek tekinthetőek. A nagy fluktuációk miatt viselkedésük független, nem korrelált. Közeledve T_c–hez, mind nagyobb és nagyobb tartományok alakulnak ki, melyek belsejében a spinek erősen korreláltak, ezáltal mereven kötődnek egymáshoz. Ezen domének eredő spinje együttesen mozoghat a fluktuációk hatására, mintha eredeti egy-részecske spinváltozó volna. Egy ilyen tartománynak, a szakirodalom nyelvén szólva ,,blokk"–nak a nagysága mindig sokkal kisebb, mint a korrelációs hossz, így belsejében a spinek ténylegesen mereven egymáshoz kötöttnek tekinthetők.

6.2 A Kadanoff-féle blokk-transzformáció

Ebből a megfigyelésből kiindulva *Kadanoff*, 1966–ban, azt a következtetést vonta le, hogy T_c–hez elég közel az eredeti csomópontokban értelmezett spinektől függő Hamilton-operátor ekvivalens módon helyettesíthető domének-re (azaz blokkokra) definiált spin-változók segítségével. Azaz a Hamilton-operátorunkat az eredeti spin-változók helyett blokkspinek segítségével is felírhatjuk anélkül, hogy T_c

közvetlen közelében ezáltal a termodinamikai potenciál valami változtatást is szenvedne, azaz a fizikai lényeg megváltozna. (Ne feledjük, makroszkópikus szempontból Φ tartalmazza a fizikai lényeget.) Konkrét példaként vegyünk egy d dimenziós hiperköbös rácsot, melynek rácsállandója legyen a. Válasszunk olyan blokkokat, melyeknek egy adott irányban vett mérete aL, ahol L a tanulmányozott blokk illető irányba eső csomópontjainak a száma. Ha most a rendszerben lévő összes csomópontok száma N, és egy blokkban L^d csomópont van jelen, akkor a blokkok száma $n = N/L^d$–vel lesz egyenlő. Feltételezzük továbbá, hogy $1 \ll L \ll (\xi/a)$.

Minket a Φ termodinamikai potenciál érdekel, melynek kiszámításához az elkövetkezőkben $e^{-\beta H}$ spurját kell kifejeznünk. Legyen a kezdeti „csomóponti" felírásban

$$-\beta H_{cs} = +J_{cs} \sum_{<ij>}^{N} S_i S_j + h_{cs} \sum_{i=1}^{N} S_i \; ; \tag{6.26}$$

ahol a kölcsönhatási részt a *Heisenberg*-kölcsönhatás mintájára választottuk (az *Ising*-modellben $S_i = \pm 1$), és:

$$J_{cs} = \frac{J}{k_B T} \; ; \quad h_{cs} = \frac{H\overline{\mu}}{k_B T} \; . \tag{6.27}$$

A használt jelölések hagyományosak: $\overline{\mu} S = M$ a mágneses momentum, továbbá MH energia dimenziójú. A H_{cs} Hamilton-operátor az állapotösszegen keresztül egy termodinamikai potenciált határoz meg, mely a (h, t) változóktól függ, és melynek egy csomópontra eső értéke $\Phi_{cs}(t, h_{cs})$.

Mindezek után blokkokkal felírva a Hamilton operátorunkat a

$$-\beta H_b = +J_b \sum_{<ij>}^{n} S_i^b S_j^b + h_b \sum_{i=1}^{n} S_i^b \quad . \tag{6.28}$$

egyenlőséget kell kapjuk eredményül, amennyiben a „blokk" kép az eredeti „csomópont" képpel T_c közelében ekvivalens. Ezen H_b Hamilton operátor legelemibb alkotó köve a blokk, melynek spinjét jelöltük S_i^b–vel. Így H_b az aL hosszon aluli fizikát nem érzékeli. Mindezek szerint Kadanoff elképzelése azt jelenti, hogy a T_c közelében a rendszer skálainvariáns. Azaz, mindegy, hogy a rendszert milyen skálán nézzük, (mindegy, hogy milyen skála mértékkel írjuk fel a Hamilton-operátorunkat), ugyanazt kell látnunk (azaz ugyanazt a fizikát kell visszakapnunk) a T_c hőmérséklet közelében. Amint majd látni fogjuk, ezen megállapítás következményei egyáltalán nem triviálisak.

6.3 A termodinamikai potenciál a Kadanoff-féle blokk-transzformáció tükrében

Folytassuk a gondolatmenetet a következő képpen: a H_b alapján újból egy termodinamikai potenciált tudunk kiszámítani. Ez mostmár a blokk képre épül, és egy blokkra eső értékét jelölje $\Phi_b(t_b, h_b)$. De a termodinamikai potenciál Φ extenzív mennyiség, így figyelembe véve, hogy egy blokkban L^d csomópont van, szükségszerűen fenn kell álljon az

$$\Phi_b(t_b, h_b) = L^d \Phi_{cs}(t_{cs}, h_{cs}) \ . \tag{6.29}$$

összefüggés, ahol $t = t_{cs}$ jelölést vezettük be az eredeti csomópontszint jellemzésére. Elemezzük a továbbiakban a Hamilton-operátorok Zeeman-tagjait (azaz H_b–ben a h_b–t tartalmazó részt és H_{cs}–ben a h_{cs}–t tartalmazó részt). Mivel a H_{cs}–ből kaptuk a H_b–t, a h_{cs} és h_b tagok között nyilvánvalóan valamilyen összefüggés kell fennálljon. A Zeeman-tag mind h–ban, mind S_i–ben lineáris, így $S_i^b = S_i^b(\{S_i\})$ lineáris transzformáció során nyert mennyiség kell legyen. Ezek szerint a h_b koefficiens szintén lineárisan kell függjön h_{cs}–től, továbbá a spinek kölcsönhatásait tartalmazó első Hamilton-operátorbeli tag, mely négyzetesen függ a spin változóktól, nem adhat járulékot ezen összefüggésben. Mindez azt jelenti, hogy a $t_b = t_b(t_{cs})$, illetve a $h_b = h_b(h_{cs})$ összefüggéseknek kell fennállniuk.

Visszatérve a kapott $h_b = h_b(h_{cs})$ lineáris összefüggésre, ennek $h_b = konstans \times h_{cs}$ formát kell öltenie. A blokk nagysága L–től függ, így a kapott arányossági tényező L függő kell legyen, tehát:

$$h_b = f_1(L) h_{cs} \tag{6.30}$$

Most vessük alá hasonló elemzésnek a t–s tagokat. Amint már említettük, ez egy független $t_b = t_b(t_{cs})$ új összefüggést jelent. Ha $t_{cs} = 0$, ez $t_b = 0$–t kellene eredményezzen (a skálainvariancia miatt T_c nem szabad megváltozzon, ha H_{cs}–ről H_b–re térünk át). Így a $t_b = t_b(t_{cs})$ függvényben szabad tag (a t_b függvény $t_{cs} = 0$ körüli Taylor sorfejtésének a független változót nem tartalmazó első tagja) nem szabad szerepeljen. Mivel ez az egész elmélet $T \to T_c$ azaz $t \ll 1$–re érvényes, elég, ha a t változók viszonylatában csak a lineáris tagokat vesszük figyelembe. A szorzó koefficiens újból L függvénye kell legyen, így tehát:

$$t_b = f_2(L) t_{cs} \tag{6.31}$$

Ezen lépéseket a blokk-transzformáció többszöri alkalmazása során mind újból felhasználhatjuk. Azaz az első blokk szintjén nyert Hamilton-operátort kiinduló csomóponti operátorként kezelhetjük, majd a blokk-transzformációt újra elvégezzük, és így tovább. Mindez azt eredményezi hogy

$$f_i(L_{j+1}) f_i(L_j) = f_i(L_{j+1} L_j) \tag{6.32}$$

ahol $i = 1, 2$, továbbá a $(j+1)$-edik, illetve a (j)–edik blokk-transzformációt megtettük egyrész egyszerre (az egyenlőség jobboldalán), másrészt külön–külön (az egyenlőség baloldalán). A levezetett (**??**) egyenlőség nyilvánvalóan akkor áll fenn, ha az f_i függvények hatványfüggvény formájúak. Megfigyelhető továbbá, hogy $L = 1$–re, $h_b = h_{cs}$, $t_b = t_{cs}$. A felsorolt tulajdonságok T_c közelében minden rendszerre és minden L-re fenn kell álljanak, tehát:

$$f_1(L) = L^x, \quad f_2(L) = L^y \; ; \tag{6.33}$$

Ezen egyenlőségek Φ viszonylatában a $h = h_{cs}$ és $t = t_{cs}$ átjelöléssel, a következő összefüggést eredményezik:

$$\Phi_b\left((L^y t), (L^x h)\right) = L^d \Phi_{cs}(t, h) \; , \tag{6.34}$$

ahol L egy rögzített, de tetszőleges szám. Mindezek után, az $L^d = L'$ jelöléssel, majd

$$a_t = \frac{y}{d} \; , \quad a_h = \frac{x}{d} \tag{6.35}$$

bevezetésével, továbbá az $L' \to L$ változócserével, a kifejezésünk a következő képpen alakul:

$$\Phi_b\left((L^{a_t} t), (L^{a_h} h)\right) = L \Phi_{cs}(t, h) \; . \tag{6.36}$$

Most, mivel H_{cs} és H_b formája ugyanaz, és S_i^b értékét mindig lehet L–en keresztül egyre normálni, továbbá a normálás kompenzálása J és h–ban jelenik meg, következik az is, hogy Φ_b és Φ_{cs} funkcionális formája ugyanaz. Így egyetlen függvénnyel lehet őket jelölni, melynek csupán az argumentuma változik meg a tanulmányozott egyenlet két oldalán. Mivel L egy rögzített, de tetszőleges szám, λ–val jelölve, a

$$\Phi(\lambda^{a_t} t, \lambda^{a_h} h) = \lambda \Phi(t, h) \tag{6.37}$$

összefüggés adódik. Az összefüggést, amit kaptunk, ,,statikus skálahipotézis” néven nevezik a szakirodalomban [11]. Így a *Kadanoff*–féle konstrukció a statikus skálahipotézis indoklásaként fogható fel. A kapott végeredmény matematikai szempontból azt jelenti, hogy T_c közelében $\Phi(t, h)$ egy általánosított homogén függvény.

6.4 Az általánosított homogén függvény

A tisztánlátás érdekében az általánosított homogenitás matematikai vonatkozásait szeretnénk kidomborítani a következőkben. Ha egy $f(r)$ függvényre rögzített, de általános λ skalár esetében fennáll az

$$f(\lambda r) = g(\lambda) f(r) \tag{6.38}$$

[11] Az elnevezést az indokolja, hogy a (**??**) összefüggést kezdetben hipotézisként használták mint a skálatörvények levezetésének ,,posztulált” kiindulópontját. Kadanoff volt az első aki a (**??**) egyenlőséget a blokk-transzformáción keresztül magyarázta. Ma tudjuk, hogy a kritikus fixpont közvetlen környezetében értelmezett tetszöleges reguláris renormálási transzformáció (és a bemutatott Kadanoff-féle blokk-transzformáció is ilyen amennyiben hozzátesszük, hogy a blokk-spin változó a kiinduló csomóponti spinváltozók lineáris függvénye), a (**??**) összefüggést visszaadja [1].

összefüggés, akkor $f(r)$ a homogén függvény nevet viseli. Megfigyelhető, hogy ez esetben két különböző skalár, λ és μ külön alkalmazása $\lambda\mu$ együttes alkalmazásával egyenértékű. Azaz:

$$g(\lambda)g(\mu) = g(\lambda\mu)\ . \tag{6.39}$$

Ezen összefüggésből viszont következik a $g(\lambda)$ függvény konkrét formája:

$$g(\lambda) = \lambda^p\ , \tag{6.40}$$

ahol p-t a homogenitás fokának nevezzük. Megfigyelhető, hogy egy homogén függvény értékét egy pontban ismerve, a függvény értéke az értelmezési tartomány minden más pontjában meghatározható.

A homogenitási tulajdonság a többváltozós függvényekre is kiterjeszthető, a következő formában:

$$f(\lambda x_1, \lambda x_2, \dots \lambda x_n) = g(\lambda) f(x_1, x_2 \dots x_n). \tag{6.41}$$

Ezen összefüggés az egyváltozós homogenitáshoz szimbólikusan hasonló formára hozható az $r = (x_1, x_2, \dots x_n)$ vektor bevezetésével. Ekkor ugyanis, a többváltozós függvényre vett homogenitás

$$f(\lambda\vec{r}) = g(\lambda) f(\vec{r}) \tag{6.42}$$

formában adható meg. Ezen összefüggés két változóra felírva, a következő egyenlőséget eredményezi:

$$f(\lambda x, \lambda y) = \lambda^p f(x, y)\ . \tag{6.43}$$

Hangsúlyozzuk, hogy ezen összefüggés baloldalán szereplő argumentumban, minden egyes változó λ hatványa ugyanaz. Az általánosított homogén függvény fogalmát úgy kapjuk, hogy ezen hatványokat megváltoztatjuk:

$$f(\lambda^a x, \lambda^b y) = \lambda^p f(x, y). \tag{6.44}$$

Ezen összefüggésben $\lambda^p \to \lambda'$ átmenettel, majd λ'–nek mint változónak, λ–val való visszajelölésével:

$$f(\lambda^{\tilde{a}} x, \lambda^{\tilde{b}} y) = \lambda f(x, y) \tag{6.45}$$

adódik, ami pontosan a Φ termodinamikai potenciálra levezetett összefüggés. Megfigyelhető, hogy λ tetszőleges lévén, értékét $\lambda = x^{-1/\tilde{a}}$-ra rögzítve, (**??**) a következő formára hozható:

$$f(x, y) = x^{1/\tilde{a}} f(1, y/x^{\tilde{b}/\tilde{a}}) \tag{6.46}$$

Az általánosított homogenitás (**??**)-ben adott formáját Widom alkalmazta a termodinamikai potenciálra. A két kifejezés ekvivalens, ezért a továbbiakban (**??**)-ra építünk.

6.5 A kritikus exponensek

A termodinamikai potenciál általánosított homogenitási tulajdonságára visszatérve megfigyelhető, hogy benne szerepel egy tetszőleges λ skalár, illetve két további független paraméter, a_t és a_h. Ezen két utóbbi paraméter értéke nincs meghatározva, továbbá kizárólag a homogenitási összefüggés alapján értékük meghatározhatatlan. Mégis puszta jelenlétük lényeges összefüggésekhez vezet, melyeket skálatörvényeknek (pontosabban, statikus skálatörvényeknek) nevez a szakirodalom. Ezen összefüggések a kritikus exponensek közötti összefüggések. Minden kritikus exponens, amint majd látni fogjuk, a_t-vel és a_h–val kifejezhető, így közülük csak kettő lesz független. Ennek alapján, kettő ismeretében az összes többi meghatározhatóvá válik.

Melyek ezek a kritikus exponensek, azt vizsgáljuk meg a következőkben. A korrelációs hossz, ξ példájára ($\xi \sim |t|^{-\nu}$) minden mennyiséget, mely egy folytonos fázisátalakulás esetében potenciálisan nemanalitikusan viselkedhet T_c közelében (azaz a $t \to 0$ határesetben) egy–egy kritikus exponenssel jellemzünk. Az explicit $|t|$ függéssel definiált kritikus exponensek, sorra: a $C_{h=0}$ fajhő (α), a Δ rendparaméter (β), a χ általánosított szuszceptibilitás (γ) és a ξ korrelációs hossz (ν) kritikus exponensei. Ezek $t \neq 0$, $t \to 0$ határesetben értelmezett mennyiségek:

$$C_{h=0} \sim |t|^{-\alpha}; \quad \Delta \sim |t|^{\beta}; \quad \chi = \frac{\partial \Delta}{\partial h} |_{h\to 0} \sim |t|^{-\gamma}; \quad \xi \sim |t|^{-\nu}. \tag{6.47}$$

Itt h a rendparaméterhez általános értelemben rendelt külső tér. Értéke a (**??**) összefüggésekben zéró, kivéve a χ kifejezését melyben a deriválás után elvégzendő $h \to 0$ szerepel.

A további két használatos kritikus exponens esetében $t = 0$, így közvetlenűl a kritikus hőmérsékleten értelmezettek:

$$h \sim \Delta^{\delta}; \quad G(r) \sim r^{-\eta'} \quad . \tag{6.48}$$

Itt a δ esetében $h \to 0$, míg η' esetében $r \to \infty$ határesetben vett viselkedés értendő. A megadott kifejezésben $G(r)$ a korrelációs függvény, és a későbbiekben világossá váló okok miatt $\eta' = d-2+\eta$, melyben η a korrelációs függvény kritikus exponense[12].

6.6 A fizikai háttér elemzése

A Kadanoff konstrukcióval kapcsolatos történelmi fejlődés komplex útvonalat követett. Kezdetben $t > 0$ és $t < 0$ esetekre külön kritikus exponenseket vezettek be, melyekre egyenlötlenségeket tárgyaltak. A mai ismereteink tükrében, HTR esetében a kritikus exponensek egyenlőségeknek tesznek eleget és a $t > 0$ és $t < 0$ kritikus

[12]Megjegyezzük, hogy $T > T_c$ esetében $G(r)$ a rendszerre jellemző dinamikus változó $X(r)$ korrelációs függvénye. A kritikus hőmérséklet alatt, HTR esetében és $r \to \infty$ határesetben ez véges, ezért $T < T_c$-re a $G(r)$ kifejezése a rendparaméter korrelációs függvényét jelöli. Mindkét esetben $T = T_c$ behelyettesítési érték adja η'-et.

exponensek értéke egyenlő. Mindezt kisérleti tények, egzakt megoldások és amint látni fogjuk elméleti indoklások mind pontosan alátámasztják.

A kritikus exponensek között fennálló összefüggéseket skálatörvényeknek nevezték el. Skálatörvények első világos bemutatása 1965 körül történt, főként *Widom* és *Domb* munkái nyomán [13]. Megfigyelték továbbá, hogy a skálatörvényeket a termodinamikai potenciál $t \to 0$ határesetben vett (és annakidején posztulált) általánosított homogenitása alapján meg lehet elméletileg magyarázni. *Kadanoff* így, a későbbiekben róla elnevezett konstrukcióban, a Φ általánosított homogenitásának származását magyarázta meg, miközben már ismert tényeket próbált argumentálni.

Az a tény, miszerint a skálahipotézis a *Kadanoff*-féle blokk-transzformáció által argumentálható, történelmi szempontból egy óriási előrehaladást jelentett, ami tulajdonképpen (sok más kutató munkáján keresztül) a renormálási csoporthoz és *Kenneth Wilson* későbbi Nobel–díjához vezetett [2]. A fizikai lényeg itt azon tény, hogy T_c közelében minden ξ-nél rövidebb ,,hossz" ekvivalensen fontos. Mivel $T \to T_c$ esetében $\xi \to \infty$, következik, hogy a rendszernek T_c közelében nincs karakterisztikus hossz skálája. Ezen tulajdonságot a skálainvariancia formájában emlegetjük, mely képletesen (amint már láttuk) azt jelenti, hogy a rendszer minden skálán nézve ugyanolyannak látszik $T \to T_c$ határesetben. Ezért van az, hogy $L_1 = 1$, vagy L_2, vagy $L_3 \dots$ stb. blokkokkal felírt Hamilton–operátor T_c közelében ekvivalensé válik Φ–ben [14]. Ez azt jelenti, hogy T_c közelében minden hosszon mért hatás egyenlő fontosságú, így a számítás során figyelembe kell venni, hogy mi történik minden egyes hossz skálán (vagy az inverz térben minden k értéken). Ezen tényállás okozza ezen témakörbe tartozó jelenségek leírásának különleges nehézségét.

A Kadanoff-féle blokk-transzformációról alkotott képet matematikai formában a következőképpen lehet értelmezni. Legyen $R_s = R(L_1, L_2)$ az a transzformáció, mely $\Phi(L_1)$ termodinamikai potenciált (mely az L_1 blokk-Hamilton-operátorral van értelmezve) $\Phi(L_2)$–be (azaz az L_2 blokk-Hamilton-operátorral értelmezett termodinamikai potenciálba) viszi át, miközben az L_1 nagyságú blokkokból mint elemekből, $L_2 = sa_1$ hosszúságú blokkokat alkot, ahol a_1 az L_1-es blokk szint rácsállandója. Az R_s transzformáció többszöri alkalmazásával, fokozatosan minden egyes hosszskála átfésülhető. Ezen transzformációk összessége csoportot alkot, melyet Kadanoff féle transzformációs csoportnak nevezhetnénk (legyen $\mathcal{G}_K$). A $\mathcal{G}_K$ csoport elemeinek hatására az L_1 blokk-szinten vett Hamilton-operátor csatolási állandói újradefiniálódnak (azaz renormálódnak), ezért a $\mathcal{G}_K$-ból (illetve annak mintájára) kifejlesztett csoport (lásd a későbbiekben), a *renormálási csoport* ($\mathcal{G}_R$) nevet kapta [15].

[13] A lista nem kizárólagos. Az első egyenlőséget a kritikus exponensek között J.W.Essam és M. E. Fisher vezette le 1963-ban.

[14] Hogy mindez matematikai értelemben pontosan mit jelent az (??) összefüggésen túlmenőleg, azt majd a renormalizációs csoportot tárgyaló fejezetekben látjuk meg.

[15] $\mathcal{G}_R$ definiciójára tetszőleges P_s transzformáció alkalmas amely a csatolási állandók változását adja meg a hossz skála változásával melyen a Hamilton-operátorban szereplő lokális operátorok értelmezve vannak [3]. Nyilvánvalóan $\mathcal{G}_R$ felépítésére a $\mathcal{G}_K$-ból származó R_s komponensek is alkalmasak, azzal a megkötéssel, hogy a csatolási állandók L_1 és L_2 szinteken vett összehasonlíthatósága

A következő alapgondolat az, hogy amennyiben $\Phi(L_1), \Phi(L_2)\ldots$ stb. egymással ekvivalens fizikát ír le $t \to 0$ határesetben, akkor ezen tény csak úgy állhat fenn, hogy $\mathcal{G}_R$ fixpontjai jellemzik valamilyen módon T_c közvetlen környezetét. A fázisátalakulások modern elmélete teljes egészében ezen a kapcsolaton alapszik, mely részleteit az elkövetkező fejezetekben ismerjük majd meg.

6.7 Szakirodalmi jegyzék 6.

[1] J. J. Binney, N. J. Dowrick, A. J. Fisher, M. E. J. Newman, *The Theory of Critical Phenomena, An Introduction to the Renormalization Group*, Oxford Science Publication, Clarendon Press, Oxford, 1995, 140 oldal.

[2] K. G. Wilson: *Renormalization group and critical phenomena*, Rev. Mod. Phys. 55, 583, (1983).

[3] N. Goldenfeld, Frontiers in Physics, Vol. 85, *Lectures on Phase Transitions and the Renormalization Group*, Addison-Wesley, 1992, 237 oldal.

[4] Shang-keng Ma, *Introduction to the Renormalization Group*, Rev. Mod. Phys. 45, 589, (1973).

miatt a Kadanoff-féle blokk-transzformáció után a hossz egységet egy újraskálázás utján vissza kell állítani az eredeti értékre (lásd pl. [4]).

7 A skálatörvények

A skálatörvények kritikus exponensek között fennálló összefüggéseket jelentenek. Amint már említettük, kísérletileg alátámasztott egyenlőségeket jelentenek. A következőkben azt szeretnénk elemezni, hogy hogyan kapcsolódnak ezen összefüggések a termodinamikai potenciál általánosított homogenitásához.

7.1 Bevezetés

Hogy az említett összefüggések levezetését egy ismertebb esetben nyomon követhessük, a jobb megértés céljából, konkretizáljuk a tanulmányozott folytonos fázisátalakulásunkat egy közismert paramágnes–ferromágnes átmenetre. Ez esetben a rendparaméter $\Delta = M$, a teljes mágneses momentum, a hozzá csatolt külső tér $h = H$ a külső mágneses tér, míg a (T, p, H) változók mellett adott termodinamikai potenciál $\Phi = G$, a Gibbs-potenciál. Ez esetben a G-re vonatkozó ismert differenciális kifejezés

$$dG = -SdT + VdP - MdH \tag{7.1}$$

alakú. Továbbá a többi fontosabb jellemző mennyiség kifejezése a következő: A mágnesezettség

$$M = -\left(\frac{\partial G}{\partial H}\right)_{p,T} \quad . \tag{7.2}$$

A rögzitett külső térre és állandó nyomáson vett fajhő

$$C_H = T\left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_{H,p} = -T\left(\frac{\partial^2 G}{\partial T^2}\right)_{H,p} \quad , \tag{7.3}$$

ahol az entrópia

$$S = -\left(\frac{\partial G}{\partial T}\right)_{H,p} \quad . \tag{7.4}$$

Továbbá az izoterm mágneses szuszceptibilitás (mely $H \to 0$ határesetben értendő):

$$\chi = \left(\frac{\partial M}{\partial H}\right)_{p,T} = -\left(\frac{\partial^2 G}{\partial H^2}\right)_{p,T} \quad . \tag{7.5}$$

A bemutatott összefüggések példájára a továbbiakra vonatkozólag megjegyzendő, hogy a Φ termodinamikai potenciál h szerinti parciális deriváltja adja a rendparamétert (ellentétes előjellel), míg a rendparaméter h szerinti parciális deriváltja adja a szuszceptibilitást.

7.2 A kritikus exponensek közötti összefüggések

Az elkövetkezendő gondolatmenet Φ, Δ, h változókban kerül bemutatásra. Az absztrakt egyenlőségek viszont az előbbiekben felsorolt összefüggések segítségével egy konkrét átmenetre specifikálhatók, és így jobban megérthetők.

A kiindulópont a termodinamikai potenciálra az előbbi fejezetben levezetett, $t, h \to 0$ határesetben fennálló általános homogenitási tulajdonság:

$$\Phi(\lambda^{a_t} t, \lambda^{a_h} h) = \lambda \Phi(t, h) \ , \tag{7.6}$$

ahol, amint láttuk, λ tetszőleges valós skalár, továbbá a_t és a_h két rögzített, de ismeretlen hatványkitevő.

a.) *A rendparaméter kritikus exponense (β):*

A (**??**) egyenlőség mindkét oldalát h szerint deriválva, a következő összefüggés adódik:

$$\frac{\partial \Phi(\lambda^{a_t} t, \lambda^{a_h} h)}{\partial(\lambda^{a_h} h)} \frac{\partial(\lambda^{a_h} h)}{\partial h} = \lambda^{a_h} \frac{\partial \Phi(\lambda^{a_t} t, \lambda^{a_h} h)}{\partial(\lambda^{a_h} h)} = \lambda \frac{\partial \Phi(t, h)}{\partial h} \ . \tag{7.7}$$

azaz

$$\lambda^{a_h} \Delta(\lambda^{a_t} t, \lambda^{a_h} h) = \lambda \Delta(t, h) \ . \tag{7.8}$$

A β kritikus exponens definíciójából, a $T < T_c$ tartományban, ahol Δ zérótól különböző $h = 0$–ban, $\Delta \sim (-t)^\beta$. Így $h = 0$ értéket helyettesítve a levezetett egyenlőségünkbe,

$$\lambda^{a_h} \Delta(\lambda^{a_t} t, 0) = \lambda \Delta(t, 0) \tag{7.9}$$

adódik. Ebből, a λ–val való osztás nyomán:

$$\Delta(t, 0) = \lambda^{a_h - 1} \Delta(\lambda^{a_t} t, 0) \tag{7.10}$$

Hogy a Δ rendparaméter $t = \frac{T - T_c}{T_c} \to 0$ viselkedését megkapjuk, a jobb oldalon szereplő Δ argumentumait konstanssá kell változtatnunk. Így, figyelembe véve, hogy $\Delta \sim (-t)^\beta$ definíciónk adott, egy $(-t)^\beta$ szorzófaktort kell kialakítanunk az egyenlőségünk jobb oldalán. Mindez úgy tehető meg, hogy a λ paramétert

$$\lambda = \left(-\frac{1}{t}\right)^{\frac{1}{a_t}} \tag{7.11}$$

formában választjuk meg. Ez megtehető, mivel Φ általános homogenitása tetszőleges λ értékre fenn kell álljon. Ekkor viszont:

$$\Delta(t, 0) = (-t)^{\frac{1 - a_h}{a_t}} \Delta(-1, 0) \tag{7.12}$$

adódik. Mivel viszont $\Delta(-1,0)$ egy konstans szám, következik hogy

$$\Delta(t,h=0) \sim (-t)^{\beta}\,, \tag{7.13}$$

ahol

$$\beta = \frac{1-a_h}{a_t}\,. \tag{7.14}$$

Ezen összefüggés megadja a β rendparamétert, a rögzített (de ismeretlen) a_h és a_t paraméterek segítségével. Amint meglátjuk a következőkben, Φ homogenitási tulajdonsága következtében, más kritikus exponensek is visszavezethetők ugyanazon a_h és a_t konstansokra. Így adódik lehetőség arra, hogy kritikus exponensek között relációkat vezethessünk le, azaz hogy megkapjuk a skálatörvényeket.

b.) *A rendparaméter $T=T_c$–ben vett h szerinti exponense (δ):*

A definiciós képlet szerint $h \to 0$ határértékben

$$\Delta(T=T_c,h) \sim h^{1/\delta}\,. \tag{7.15}$$

Ezúttal az előbbiekben levezetett (**??**) összefüggésbe, most $t=0$ értéket kell behelyettesítenünk:

$$\lambda^{a_h}\Delta(0,\lambda^{a_h}h) = \lambda\Delta(0,h). \tag{7.16}$$

Mindezek után az egyenletet λ–val osztva, a

$$\Delta(0,h) = \lambda^{a_h-1}\Delta(0,\lambda^{a_h}h). \tag{7.17}$$

egyenlőség következik. Hogy a jobboldali Δ argumentumában újból konstanst alakítsunk ki, legyen ezúttal

$$\lambda = \left(\frac{1}{h}\right)^{1/a_h}\,, \tag{7.18}$$

és így:

$$\Delta(0,h) = h^{\frac{1-a_h}{a_h}}\Delta(0,1) \tag{7.19}$$

Mivel $\Delta(0,1)$ konstans, következik, hogy

$$\Delta(0,h) \sim h^{1/\delta}\,, \tag{7.20}$$

ahol a δ kritikus exponens értéke

$$\delta = \frac{a_h}{1-a_h} \tag{7.21}$$

Ezen összefüggés alkalmat adna arra, hogy a_h leegyszerűsítése révén, β és δ között kapcsolatot teremtsünk. De ezen összefüggésben benne maradna az ismeretlen a_t, ezért az elemzést tovább kell folytatnunk.

c.) *A szuszceptibilitás kritikus exponense* (γ)*:*

A γ kritikus exponens definíciója szerint

$$\chi \sim |t|^{-\gamma} , \quad (h = 0) . \tag{7.22}$$

A χ–re összefüggés úgy vezethető le, hogy a (**??**) egyenletünket h szerint deriváljuk, majd figyelembe vesszük, hogy a Δ rendparaméter h szerinti deriváltja pont a szuszceptibilitás. Pozitiv t értékekkel dolgozva, kapjuk:

$$\lambda^{2a_h}\chi(\lambda^{a_t}t, \lambda^{a_h}h) = \lambda\chi(t, h) . \tag{7.23}$$

Mivel a γ–t definiáló szuszceptibilitásban $h = 0$ kell fennálljon, a kapott összefüggésbe $h = 0$–t helyettesítve, majd λ–val osztva

$$\chi(t, 0) = \lambda^{2a_h-1}\chi(\lambda^{a_t}t, 0) \tag{7.24}$$

adódik. A baloldali rész χ argumentumát most

$$\lambda = \left(\frac{1}{t}\right)^{\frac{1}{a_t}} \tag{7.25}$$

alakítja konstansá. Így:

$$\chi(t, 0) = \left(\frac{1}{t}\right)^{\frac{2a_h-1}{a_t}} \chi(1, 0) . \tag{7.26}$$

A további gondolatmenet már jól ismert. Mivel $\chi(1, 0)$ konstans

$$\chi(t, 0) = t^{-\frac{2a_h-1}{a_t}}\chi(1, 0) \sim t^{-\gamma} , \tag{7.27}$$

tehát

$$\gamma = \frac{2a_h - 1}{a_t} . \tag{7.28}$$

Ezen eljárással még egy kritikus exponens kifejezése levezethető.

d.) *A fajhő kritikus exponense (*α*):*

Az α kritikus exponensre vonatkozó definició

$$C_h \sim |t|^{-\alpha} , \quad h = 0 . \tag{7.29}$$

A következőkben a Φ homogenitását kifejező eredeti (??) egyenletet deriváljuk kétszer a hőmérséklet szerint. Mivel azonban

$$\frac{\partial}{\partial T} = \left(\frac{\partial}{\partial t}\right) \cdot \frac{1}{T_c} \,, \tag{7.30}$$

és T_c az egyenlet mindkét oldalán megjelenve leegyszerűsíthető, gyakorlatilag a t szerinti másodrendű deriváltat kell kiszámolnunk. A számítás során már nem lesz fontos, hogy Φ másodrendű deriváltját $-T$–vel kell szoroznunk, hogy C–t kapjunk eredményül. Mindez azért, mert a $-T$ szorzótényező az egyenlet mindkét oldalát érinti, és így a kifejezésen nem változtat. Tehát, ezúttal is pozitiv t–t feltételezve:

$$\lambda^{2a_t} C_h(\lambda^{a_t} t, \lambda^{a_h} h) = \lambda C_h(t, h) \; . \tag{7.31}$$

Most $h = 0$ helyettesítéssel, és λ–val való osztással az egyenlet a következő képpen alakul:

$$C_h(t, 0) = \lambda^{2a_t - 1} C_h(\lambda^{a_t} t, 0) \tag{7.32}$$

Az egyenlet jobboldalán szereplő C_h függvény konstansá tehető a

$$\lambda = \left(\frac{1}{t}\right)^{1/a_t} \tag{7.33}$$

választással, és így:

$$C_h(t, 0) = \left(\frac{1}{t}\right)^{\frac{2a_t - 1}{a_t}} C_h(1, 0) \sim t^{-\alpha} \; . \tag{7.34}$$

Tehát

$$\alpha = 2 - \frac{1}{a_t} \; . \tag{7.35}$$

Az eddig tanulmányozott négy exponens külön csoportot alkot. Mindezt azért tekinthetjük így, mert a kapott relációk levezetésében csupán a Φ termodinamikai potenciál általános értelemben vett homogenitását kellett felhasználnunk. Megfigyelhető továbbá, hogy a levezetett relációkban a dimenzió nem szerepel, mely szintén az említett kritikus exponens csoport egy jellemző tulajdonsága.

Végeredményként, a_t és a_h tagokat tartalmazó különböző összefüggéseket kaptunk, melyek segítségével skálatörvényeket vezethetünk le. Ezen összefüggések helyességét az eddigi kísérleti tapasztalatok messzemenően igazolták. De nézzük meg az elkövetkezőkben, melyek is a szóbanforgó relációk.

A β és δ egyenletéből az a_h és a_t paraméterek kifejezhetők. Az a_h koefficiens így:

$$\delta = \frac{a_h}{1 - a_h} \; ; \quad \delta - a_h \delta = a_h \; ; \quad a_h = \frac{\delta}{\delta + 1} \; . \tag{7.36}$$

Ezen összefüggésből viszont

$$1 - a_h = \frac{1}{\delta + 1} , \tag{7.37}$$

és így, β kifejezésén keresztül:

$$a_t = \frac{1}{\beta} \cdot \frac{1}{\delta + 1} \tag{7.38}$$

Ezen két összefüggést γ egyenletébe helyettesítve, a következő egyenlőséget kapjuk:

$$\gamma = \left(\frac{2\delta}{\delta + 1} - 1 \right) \left(\frac{1}{\beta} \frac{1}{\beta + 1} \right)^{-1} = \frac{\delta - 1}{\beta^{-1}} . \tag{7.39}$$

Ebből viszont

$$\gamma = \beta(\delta - 1) . \tag{7.40}$$

Ez az általunk levezetett skálatörvény a szakirodalomban *Widom*-féle egyenlőség néven ismeretes.

Most a_t kifejezését az α kritikus exponensbe helyettesítve, a következő összefüggés adódik:

$$\alpha = 2 - \beta(\delta + 1) . \tag{7.41}$$

Ezen egyenletet átrendezése az

$$\alpha + \beta(\delta + 1) = 2 \tag{7.42}$$

egyenlőséget adja, mely a *Griffiths*-féle reláció néven ismeretes.

Továbbá a Widom-egyenlőségből:

$$\beta\delta = \gamma + \beta . \tag{7.43}$$

Ezt a kifejezést a Griffiths-egyenlőségbe helyettesítve

$$\alpha + 2\beta + \gamma = 2 \tag{7.44}$$

összefüggés adódik, mely *Rushbrooke*-egyenlőség néven ismeretes.

Látható tehát, hogy mivel két darab ismeretlen és a homogenitás által egyáltalán nem definiált mennyiségünk van: a_t és a_h), következik, hogy csak két független kritikus exponensünk lehetséges, a többit mind a skálatörvények határozzák meg. Így például alkalom adódik arra hogy egy elmélet belső konzisztenciáját ellenőrizzük (amennyiben az valamilyen paramétertartományban folytonos fázisátalakulást eredményez). E célból a tanulmányozott modell segítségével az eddig elemzett kritikus exponensek közül legalább hármat kell levezetnünk egymástól független módon. A kapott három mennyiséggel a skálatörvények kielégítése, azaz a modell (vagy a használt közelítések) konzisztenciája, belső ellentmondásmentessége ellenőrizhető.

Továbbhaladás előtt néhány megjegyzést szeretnénk megtenni. A történelmi út több komplikációt okozott, melyek az utólagos fejlődés során lényegtelennek bizonyultak. Ezen elemeket a bemutatás során mellőztük. Közülük kettő volt fontosabb:

a.) A skálatörvények, mint kritikus exponensek közötti egyenlőségek, először ,,egyenlőtlenségek" formájában jelentek meg. Például, $\gamma \geq \beta(\delta - 1)$ volt a *Widom*-féle egyenlőtlenség. Ezen egyenlőtlenségek a hatvanas évek közepét jellemző ismeretszintet határozták meg. Annak idején ezeknek a levezetése komplikált eljárásokat igényelt[16]. Végül aztán a kísérleti pontosság növekedésével párhuzamosan világossá vált, hogy az egyenlőtlenségek tulajdonképpen egyenlőségek, és ezt az egzakt megoldások is igazolták. Amint már említettük, ennek hatására tételezték fel kezdetben, hogy Φ általánosított homogén függvény.

b.) Kezdetben a nem direkt módon Δ–hoz kötött kritikus exponensekre (pl.: α, γ) két különböző értéket tételeztek fel (γ és γ' például). A két exponens definíciója csupán t előjelében tért el. Például: γ, ha $T > T_c$ és γ', ha $T < T_c$. A kísérleti eredményekből később látszott viszont, hogy a két érték egyenlő[17]. Ezen eredmény a Φ általánosított homogenitásából (ahogy akkor nevezték: a statikus skála-hipotézisből) szintén levezethető. Például az említett χ esetében az általunk kapott összefüggés:

$$\chi(t, 0) = \lambda^{2a_h - 1} \chi(\lambda^{a_t} t, 0) \ . \tag{7.45}$$

Most, ha negatív t értékkel dolgozunk, (a (**??**) választással ellentétben, ahol $t > 0$ volt feltételezve):

$$\lambda = \left(-\frac{1}{t}\right)^{1/a_t} \tag{7.46}$$

melyből:

$$\chi = \left(-\frac{1}{t}\right)^{\frac{2a_h - 1}{a_t}} \chi(-1, 0) = (-t)^{-\frac{2a_h - 1}{a_t}} \chi(-1, 0) \sim (-t)^{-\gamma'} \ , \tag{7.47}$$

azaz

$$\gamma' = \frac{2a_h - 1}{a_t} \equiv \gamma \ . \tag{7.48}$$

Tehát, amint látható, a $t < 0$ és $t > 0$–ra értelmezett kritikus exponensek egyenlőek.

---

[16] Kézenfekvő termodinamikai feltételezéseken alapúltak ugyan, de a skálainvariancia jelenlétét, ami itt a lényeg, nem tartalmazták.

[17] Ez az állítás csak HTR esetében igaz [1].

7.3 A korrelációs függvény skálázása

Maradt még két kritikus exponensünk ν és η, mely a korrelációs függvényekhez kötött. Ezekre nem lehet összefüggést levezetni Φ homogenitásából, hiszen Φ egy globális mennyiség, ami a rendszer egészére vonatkozik, így rendszerbeli távolságfüggésekre (mint $\int \overline{\Phi} d\vec{r}$ szerint kiintegrált mennyiség) kevésbé érzékeny. Mindezek szerint ν-re és η–ra összefüggéseket levezetni azt jelenti, hogy új feltételezéseket kell bevezetnünk. Erre lehetőséget ad a Kadanoff–konstrukció, melyet a korrelációs függvényre kéne alkalmazni, hasonló módon, mint ahogy ezt Φ-re megtettük. Mindezek szerint a korrelációs függvényt skáláznánk, azaz a korrelációs függvényre vezetnénk be általánosított homogenitás jellegü tulajdonságot. Ha mindez sikerülne, a kapott új összefüggések lehetővé tennék, hogy a ν és η kritikus exponensek is bekapcsolódjanak a skálatörvényekbe, a többi kritikus exponensek mellett.

Szintén Kadanoff nyomán, tanulmányozzuk tehát a korrelációs függvényt. Szemléletesség kedvéért végezzük el mindezt egy konkrét lokalizált spinrendszer esetében. Ekkor

$$G(r,t) = \langle (S_i - \langle S_i \rangle)(S_j - \langle S_j \rangle) \rangle = \langle S_i S_j \rangle - \langle S_i \rangle \langle S_j \rangle \ , \tag{7.49}$$

ahol, az izotrópia feltételezése miatt, $r = |r_i - r_j|$. Megpróbáljuk a kiinduló rácsszinten értelmezett korrelációs függvényt blokk szinten értelmezett korrelációs függvénybe átvinni.

A (**??**)–ben adott korrelációs függvény az eredeti rácsban van értelmezve. Válasszuk az egyszerűség kedvéért a spin-változót Ising típusúnak. Ekkor a spinek értéke az eredeti rácsban ± 1 lehet. Most képzeljük el, hogy az eredeti spinek helyett blokkspineket építettünk fel, és felírjuk a korrelációs függvényt a blokkspinek segítségével. Azon alapgondolatot, mely szerint a rendszerünk T_c közelében skálainvariáns, át szeretnénk vinni ezúttal a $G(r,t)$ kifejezésére is. Nem szabad viszont mindezen eljárás során elfelednünk, hogy a blokkszinten vett képnek teljesen egyeznie kell az eredeti csomópont szinten vett képpel, ha a skálainvariancia igaz. Ez viszont azt is jelenti, hogy mivel az eredeti spinek 1–re voltak „normálva” (azaz értékük ± 1 volt), a blokkspinek is megfelelően normáltak kell legyenek, úgy, hogy értékük ± 1 legyen. Jelöljük a blokk szinten vett korrelációs függvényt

$$G(r_L, t_L) = \langle S_I S_J \rangle - \langle S_I \rangle \langle S_J \rangle \tag{7.50}$$

formában, ahol a blokkspineket nagybetű indexeli. Próbáljuk most ezen összefüggésből a csomóponton értelmezett $G(r,t)$-t visszakapni. Hogy ezt az átmenetet megvalósítsuk, tanulmányozzuk egy kicsit a $h_L = hL^x$ állítást a Φ-re vonatkozó Kadanoff-konstrukcióban. Mindez a Hamilton operátor Zeeman-tagján keresztül könnyen megtehető:

$$h \sum_{i=1}^{N} S_i = h \sum_{I=1}^{n=\frac{N}{L^d}} \underbrace{\left(\sum_{i \in I} S_i \right)}_{S'_I} = h \sum_{i=1}^{n} S'_I = hL^x \sum_{i=1}^{n} S_I \ . \tag{7.51}$$

Így

$$h_L = hL^x \quad \text{azaz} \quad h_b = h_{cs}L^x \ . \tag{7.52}$$

Ezen összefüggésekben N a kezdeti csomópontok száma, n a blokkok száma, melyeket tetszőleges d dimenzióban tárgyalva hiperköbös formában választottunk meg, L lévén a hiperkocka oldalhossza. Továbbá, b és cs betűkkel indexeltük a *blokk* illetve *csomópont–beli* jellemzőket.

Elemezzük részletesen a (**??**)–ben végigvitt gondolatmenetet. Az első lépésben létrehozott blokk spin

$$S_I' = \sum_{i\in I} S_i \tag{7.53}$$

nem egyre normált, azaz értéke nem ± 1. Az S_I' értéke ugyanis függ attól, hogy a blokk–ban hány $\uparrow$ és hány $\downarrow$ irányítású spin található. Így, az egyre való normálást L^x végzi, x kapcsolatban lévén azon információval, hogy a blokk-ban, átlagban, a spinek hány százaléka párhuzamos egymással. Így, az egyenlőségsorozat második és utolsó tagjait összehasonlítva, látjuk, hogy az egyre normált blokk-spin S_I helyébe, átlagban:

$$S_I \to \frac{1}{L^x}\sum_{i\in I} S_i \to L^{d-x}S_i \tag{7.54}$$

kell kerüljön, ahol L^d a blokk-ban lévő spinek száma. Így ténylegesen, ha a blokk-ban minden spin megegyező irányú, és $x = d$, akkor $S_I \to S_i$.

Mindezt a blokk-korrelációs függvénybe helyettesítve, mely szintén átlagolás útján adódik:

$$G(r_L, t_L) = L^{2(d-x)}G(r,t) \ . \tag{7.55}$$

Itt, az exponensben levő 2-es faktor azért lép fel, mert a korrelációs függvényben két spin van jelen. Továbbá a blokk rendszer normált hőmérsékleti változója $t_b = t_L$.

Láttuk viszont a Φ-n végzett Kadanoff-konstrukcióból, hogy $t_b = L^y t$. További információ a skálainvarianciából ered: mivel a blokk szinti képnek tökéletesen egyeznie kell az eredeti csomóponti képpel, nemcsak S_I egyre normálása szükséges, hanem a hosszegység újradefiniálása is. A csomóponti hosszegység a kiinduló rácsállandó hossz a. A blokk szinten vett rácsállandó viszont L, így az r_L távolság blokk szinten vett mértéke $r_L = r/L$. Tehát:

$$G(L^{-1}r, tL^y) = L^{2(d-x)}G(r,t) \ . \tag{7.56}$$

A kapott reláció a Kadanoff-konstrukció által nyert homogenitási összefüggés a korrelációs függvényre. Ez egyáltalán nem ekvivalens Φ homogenitásával, hisz ahhoz képest új elemeket is tartalmaz (mint pl. (**??**)–ban az átlagban használatos $\sum\limits_{i\in I} S_i \to L^d S_i$ megfeleltetés).

Most összefüggésben (úgy ahogy Φ esetében λ tetszőleges volt) itt L szintén tetszőleges nagyság. Továbbá L a csómópont szinten egy szám mely a blokkélhossz nagyságát a egységekben adja meg. A blokkélhosszt pontosan a (??) egyenlőség jobboldalán szereplő r-nek választva $L = r/a$ adódik (mivel L tetszőleges, ez megtehető). Mindezek után, $L^{2(d-x)}$–el való osztással, kapjuk:

$$G(r,t) = \left(\frac{r}{a}\right)^{2(x-d)} G(a, t[r/a]^y) \quad . \tag{7.57}$$

Most ezen egyenletből mindkét megmaradt kritikus exponensre skálatörvény vezethető le. Ezen levezetést elemezzük a következő paragrafusban.

7.4 A korrelációs függvény kritikus exponenseinek skálatörvényei

Tanulmányozzuk sorra η és ν eseteit. Kezdjük az elemzést az η kifejezésével.

a.) *A korrelációs függvény kritikus exponense (η):*

Definíció szerint, $t = 0$–ban,

$$G(r) \sim \frac{1}{r^{d-2+\eta}} \ . \tag{7.58}$$

Azonban $t = 0$–ra, a $G(r,t)$ kifejezéséből a

$$G(r,0) = \left(\frac{r}{a}\right)^{2(x-d)} G(a,0) \tag{7.59}$$

egyenlőség adódik. Mivel viszont a jobboldalon $G(a,0)$ konstans, a

$$-(d-2+\eta) = 2(x-d) \tag{7.60}$$

relációt nyerjük. Ismerjük viszont Φ Kadanoff konstrukciójából, hogy $a_h = x/d$. Tehát, $2d$–vel osztva:

$$-\frac{d-2+\eta}{2d} + 1 = a_h \ . \tag{7.61}$$

Ebből viszont

$$a_h = 1 - \frac{d-2+\eta}{2d} = \frac{1}{2} + \frac{2-\eta}{2d} \ . \tag{7.62}$$

A Widom egyenlőség levezetésénél láttuk azonban, hogy $a_h = \delta/(1+\delta)$. Így a

$$\frac{\delta}{\delta+1} = \frac{d+2-\eta}{2d} \tag{7.63}$$

összefüggést kapjuk eredményül.

b.) *A korrelációs hossz kritikus exponense (ν):*

A definíció szerint,

$$\xi \sim t^{-\nu} . \tag{7.64}$$

Ezen összefüggésből

$$t = k\frac{1}{\xi^{\frac{1}{\nu}}} \tag{7.65}$$

írható, ahol k egy konstans arányossági tényező. A ν exponens szempontjából csupán a t függés releváns, ezért ez esetben,

$$G(t) = \left(\frac{r}{\xi}\right)^{2(x-d)} \left(\frac{\xi}{a}\right)^{2(x-d)} G(a, t[\frac{r}{a}]^y) \tag{7.66}$$

összefüggés lesz mérvadó a korrelációs függvényre, melybe $t = k\frac{1}{\xi^{1/\nu}}$ kifejezését kell behelyettesítenünk: helyettesítéssel,

$$G(t) = \left(\frac{r}{\xi}\right)^{2(x-d)} \left(\frac{\xi}{a}\right)^{2(x-d)} G[a, (\frac{k}{a^y}\frac{r^y}{\xi^{1/\nu}})] . \tag{7.67}$$

De a t-ből jövő ξ függés olyan kell mindig legyen, hogy a korrelációs függvény az r változóban csupán $\left(\frac{r}{\xi}\right)$ arányától függjön (pl. $G \sim e^{-\frac{r}{\xi}}$). Mindez azért, mert rögzített t-re a rendszer egyetlen jellemző hosszúságát ξ adja. Ez viszont (**??**) alapján csak úgy lehetséges ha

$$y = \frac{1}{\nu} . \tag{7.68}$$

Ekkor viszont, figyelembe véve Φ skálázásánál levezetett $a_t = y/d$ összefüggést,

$$a_t = \frac{y}{d} = \frac{1}{\nu d} \tag{7.69}$$

adódik. De a_t kifejezését ismerjük már Φ általános homogenitásának tanulmányozásából:

$$a_t = \frac{1}{\beta(\delta+1)} \tag{7.70}$$

Mindezek után a ν–ra kapott összefüggés:

$$\beta(\delta+1) = \nu d \tag{7.71}$$

A következőkben arra törekszünk, hogy a levezetett új skálatörvényeket a szakirodalomban használatos formára hozzuk. Ekkor a Griffiths egyenlőségből

$$\beta(\delta+1) = 2 - \alpha . \tag{7.72}$$

Tehát:

$$2 - \alpha = \nu d. \tag{7.73}$$

Ezen egyenlőség a *Josephson*-egyenlőség nevet viseli. Megfigyelhető, hogy a korrelációs függvényhez kapcsolódó skálatörvényekbe a d dimenzió is általában belekerül. Van viszont egy fontos kivétel, mely *Fisher* nevéhez fűződik.

A (**??**) egyenlőség alapján

$$\frac{\delta}{\delta+1} = \frac{2-\eta}{2d} + \frac{1}{2} \,. \tag{7.74}$$

Ebből

$$2-\eta = d\frac{\delta-1}{\delta+1} \,. \tag{7.75}$$

A Josephson összefüggésből ismert

$$\nu = \frac{2-\alpha}{d} \,. \tag{7.76}$$

Az utóbbi két egyenlőséget összeszorozva

$$(2-\eta)\nu = (\delta-1)\frac{(2-\alpha)}{(\delta+1)} \,. \tag{7.77}$$

A Widom összefüggésből viszont

$$\delta - 1 = \frac{\gamma}{\beta} \,. \tag{7.78}$$

Mindezek után:

$$(2-\eta)\nu = \gamma\frac{(2-\alpha)}{\beta(\delta+1)} \tag{7.79}$$

A levezetett egyenlőség jobboldalán, a γ–t szorzó faktor, a Griffiths egyenlőség miatt $(\alpha + \beta(\delta+1) = 2)$ pontosan egy, tehát

$$(2-\eta)\nu = \gamma \,. \tag{7.80}$$

Ez a *Fisher*-féle egyenlőség.

Érdekességképpen megjegyezzük, hogy a (**??**) egyenlőség levezetésének más útja is ismeretes mely a korrelációs függvény Fourier-transzformált formájából indul, szintén felhasználva $G(r)$ általánosított homogenitás jellegű kifejezését és Φ homogénitásából eredő összefüggéseket. Felhasználva (**??**,**??**) egyenlőségeket, a korrelációs függvény Fourier transzformáltja

$$G(k,t) = \int d^d r \left(\frac{r}{a}\right)^{2(x-d)} G(a, \frac{r}{\xi}) \exp(ikr) \tag{7.81}$$

formában adódik. Most $y = kr$ változócserét végrehajtva

$$G(k,t) = k^{-d} k^{-2(x-d)} \int d^d y \left(\frac{y}{a}\right)^{2(x-d)} G(a, \frac{y}{k\xi}) \exp(iy) \tag{7.82}$$

egyenlőséget kapjuk. A jobboldali integrál k szempontjából csupán $k\xi$ szorzat függvénye, így $f(k\xi)$ formában jelölhető. A $2(x-d)$-re a (??) egyenlőséget használva

$$G(k,t) = k^{-2+\eta} f(k\xi) \tag{7.83}$$

korrelációs függvényre vonatkozó Fourier-transzformált kifejezés ered, mely (??) miatt csak nagyon kis t értékekre érvényes (azaz T_c körül fennáló). Megfigyelhető továbbá, hogy definicíószerűen $t = 0$ és $r \to \infty$ esetre elfogadott (??) viselkedését jelző $1/r^{d-2+\eta}$ Fourier-transzformáltja (újból $y = kr$ változócserét felhasználva):

$$\int d^d r \frac{1}{r^{d-2+\eta}} \exp(ikr) = k^{-d} k^{d-2+\eta} \int d^d y \frac{\exp(iy)}{y^{d-2+\eta}} \sim k^{-2+\eta} \, . \tag{7.84}$$

Figyelembe véve hogy $r \to \infty$ határesetnek a k térben $k \to 0$ határeset felel meg, (??) összefüggésből $t = 0$-ban és $k \to 0$-ra

$$G(k \to 0, \, t = 0) \sim k^{-2+\eta} \tag{7.85}$$

egyenlőség ered. Összehasonlítva (??) és (??) kifejezéseket, látható, hogy (??) szintjén a $k \to 0$ és $t \to 0$ (azaz $\xi \to \infty$) együttes határeset $k\xi = konstans$ formájában adható vissza. Ennek alapján a (??) egyenlőségből

$$G(k,t) = \xi^{2-\eta} \left((k\xi)^{-2+\eta} f(k\xi) \right) \tag{7.86}$$

összefüggés adódik, melyből $k \to 0$, $t \to 0$ határesetben, figyelembe véve hogy $\xi \sim t^{-\nu}$

$$G(k \to 0, t \to 0) \sim t^{-\nu(2-\eta)} \tag{7.87}$$

ered. Tudvalevő viszont[18], hogy

$$G(k=0) = \int d^d r G(r) = (k_B T) \, \chi \, . \tag{7.88}$$

Ekkor, $t \to 0$ határesetben $\chi \sim t^{-\gamma}$, és (??) és (??) csupán a Fisher-féle (??) egyenlőség fennállásával egyeztethető össze.

Visszatérve a további skálatörvényekre, még használatos két fontosabb összefüggés, mely a következőképpen vezethető le: a (??) egyenlet jobboldalába (??)–at behelyettesítve kapjuk:

$$2 - \eta = \frac{d\gamma}{\beta(\delta+1)} \, . \tag{7.89}$$

Megfigyelhető, hogy

$$\beta(\delta+1) = 2 - \alpha = 2\beta + \gamma \, , \tag{7.90}$$

[18]Lásd például a 8. Fejezet 8.3.2. paragrafusát

ahol, első lépésben a Griffiths-, második lépésben a Rushbrooke-összefüggéseket használtuk fel. A kapott egyenlőséget (??)–be helyettesítve, a

$$2-\eta=d\frac{\gamma}{2\beta+\gamma} \tag{7.91}$$

végeredményt kapjuk, mely a második *Buckingham–Gunton* egyenlőség. Az első *Buckingham–Gunton* egyenlőség a (??) egyenlet, melyből a (??)–at levezettük.

Így tehát, a Buckingham–Gunton egyenlőségek:

$$2-\eta=d\,\frac{\delta-1}{\delta+1}\,, \tag{7.92}$$

$$2-\eta=d\,\frac{\gamma}{2\beta+\gamma}\,. \tag{7.93}$$

Foglaljuk össze a következőkben a levezetett eredményeket.

7.5 A használatos skálatörvények

Amint láttuk, összesen hat darab, fontosabb kritikus exponens van (időtől független folyamatok jellemzésében). Ezek az $\alpha, \beta, \gamma, \delta, \nu, \eta$ kritikus exponensek. Ezek közül, amint említettük, csak kettő független. A többi mind ezen tetszőlegesen kiválasztott kettő függvényében megadható. Így nyilvánvalóan a felírt egyenlőségek nem függetlenek egymástól (amint azt pl. a (??) egyenlőség $t \to 0$ határesete is mutatja).

A skálatörvények, a levezetésűk során felhasznált információk tükrében két csoportra oszthatók. Az első csoport Φ általánosított homogenitásának következménye, és jellemző rá a d dimenziótól való függetlenség.

Az első csoport skálatörvényei:

$$\begin{cases} \gamma=\beta(\delta-1) & \text{(Widom)} \\ \alpha+\beta(\delta+1)=2 & \text{(Griffiths)} \\ \alpha+2\beta+\gamma=2 & \text{(Rushbrooke)} \end{cases} \tag{7.94}$$

Habár látszólag a (??) egyenlőség a Φ és G homogenitásából eredő összefüggéseket összekapcsolja, az első csoport skálatörvényei csupán globális, rendszert jellemző mennyiségek (mint pl. $\Phi=(1/V)\int\overline{\Phi}(r)d^dr$ vagy esetleg $(1/V)\int G(r)d^dr$) általánosított homogenitási tulajdonságával hozhatók kapcsolatba. A kisérleti és elméleti ismereteink tükrében az első csoport skálatörvényei mindig (HTR esetében) szigorúan fennállnak.

A második csoportot a ν és η egyenletei adják, melyek a korrelációs függvény általánosított homogenitásának következményei[19]. Ezek általában a d dimenziót expliciten tartalmazzák, kivételt képez a Fisher egyenlőség.

[19]olyan összefüggésekben melyekben Φ általánosított homogénitásának következményei is fel voltak használva

A második csoport skálatörvényei:

$$\begin{cases} 2-\alpha = \nu d & \text{(Josephson)} \\ (2-\eta)\nu = \gamma & \text{(Fisher)} \\ 2-\eta = d(\delta-1)(\delta+1)^{-1} = d\gamma(2\beta+\gamma)^{-1}\ ; & \text{(Buckingham–Gunton)} \end{cases} \tag{7.95}$$

Ezen csoport levezetésében, a globális Φ-re vonatkozó homogenitási tulajdonság mellé, az r függést mutató $G(r)$-re vonatkozó feltételezések is szükségesek, melynek során a skálatörvényekbe bekerül a d dimenzió. Az első csoporthoz képest mért másságot ezen esetekben kifejezve, a dimenziót tartalmazó skálatörvényeket *hiperskála*-törvények néven emlegeti a szakirodalom [2]. Ezek szerint a Josephson és a Buckingham-Gunton egyenlőségek tartoznak a ‚hiperskálázás' keretei közé. Megjegyezzük, hogy a d-t tartalmazó skálatörvények nem teljesűlnek (még HTR esetében sem) minden dimenzióban. Ennek oka amint majd látni fogjuk, abban rejlik[20], hogy a $d > d_c$ felső kritikus dimenzió felett a kritikus exponensek dimenziótól függetlenné válnak, egy olyan d_c feletti dimenzió tartományban melyben a Landau-elmélet a HTR típusú fázisátalakulásokra alkalmazható [3], d-független molekuláris-tér elmélet jellegű kritikus exponenseivel együtt[21]. Továbbmenőleg, igazolható, hogy d_c felett, a $G(r)$ általános homogenitását megadó összefüggés változik [5], mely következtében a hiperskálázás „sérülése" lép fel $d > d_c$-re.

A továbblépés előtt néhány fontosabb megjegyzés aláhúzása szükséges.

— A homogenitási törvények nem határozzák meg a kritikus exponenseket, csak összefüggéseket jelentenek közöttük.

— A zéró kritikus exponens érték két esetben léphet fel: nem divergáló, hanem véges viselkedés (törés vagy véges ugrás) esetében; vagy logaritmikus divergenciánál (ami „gyengébb"–nek tekintett, mint bármely hatványfüggvényszerű divergencia).

— Alkalmazások során (amint ez pl. a renormálási csoport tanulmányozásánál kiderül), mindig azon skálatörvényeket próbáljuk használni először, melyekben d nem szerepel, melyek ezáltal általánosabb érvényűek, kerülve amennyire lehet a hiperskálatörvényeket, próbálva biztosítani ezáltal, hogy a levezetendő eredmények minél szélesebb dimenziótartományban legyenek érvényesek.

— A dimenzió független skálatörvények[22] „ univerzális" összefüggések. Fennállásuk rendszertől, annak milyenségétől független. Ennek következtében beszélhetünk a skálatörvények kapcsán „univerzalitás"–ról. Most attól függően, hogy a kritikus exponensek közvetlen értéke milyen, beszélhetünk „univerzalitási osztályokról". Ezek viszont már rendszer-specifikusak, de amint később látni fogjuk, csupán néhány lényegi jellemző által meghatározottak.

[20] Lásd a Ginzburg kritériumra vonatkozó 12. Fejezetet

[21] Ezért szokták emlegetni, hogy a Landau elméletben skálainvariancia nincs [4].

[22] illetve az alsó és felső kritikus dimenzió közötti hiperskálatörvények

7.6 A szigorúbb értelemben vett skálatörvények

A Kadanoff konstrukcióra alapuló homogenitás (Φ–re és G–re), továbbá az abból levezetett skálatörvények hosszútávú térbeli rendezettség esetében helytállóak. Fennállásuknak tehát a (HTR) az előfeltétele.

Mindennek következtében például megjegyzendő, hogy a Kosterlitz–Thouless–Berezinski-féle (KTB) fázisátalakulásnál, ahol térbeli hosszútávú rendezettség nincs, csak topologikus rendezettség, a skálatörvények az előbbiekben megadott formában nem állnak fenn. Ennek a magyarázata az, hogy HTR hiányában a T_c–ben fellépő divergenciák nem hatványfüggvény (és se nem logaritmikus), hanem exponenciális jellegűek. Exponenciális divergenciákat viszont az eddigi skálatörvények alapján nem lehet elemezni, mert az eddigi sémában végtelen kritikus exponensekként szerepelnének, jelezve, hogy a divergencia minden hatványfüggvényszerű viselkedésnél erősebb. Mégis, egy kis általánosítással, a skálatörvények exponenciális divergenciák esetében is fenntarthatók, éspedig a ,,szigorúbb értelemben vett" skálatörvények formájában. Ezek értelmezésekor nem a t változó, hanem a helyette szereplő korrelációs hossz (ξ) az alapmennyiség, melynek segítségével a divergenciát jellemezzük. Történelmileg ez a gondolat először Halperinnél és Hohenbergnél, az 1967-1969 periodusban jelenik meg, és kezdetben csak a korrelációs függvényre volt alkalmazták.

Amint majd látni fogjuk, a KTB átmenet esetében

$$\xi \sim \exp(t^{-1/2}) \ , \tag{7.96}$$

tehát, $\nu \to \infty$. Továbbmenőleg ekkor a Landau-féle értelemben vett rendparaméter $\Delta = 0$, ha $h = 0$, így a β kritikus exponens nem értelmezhető.

Viszont, a $h \neq 0, T = T_c$–ben értelmezett kritikus exponensek megmaradnak (mert ezek definició szerint Δ értéket indukálnak). Így a $\Delta \sim h^{1/\delta}$ továbbra is mérvadó összefüggés marad. Ekkor δ továbbra is értelemmel bír, és ezúttal azon kritikus exponensek is megmaradnak, melyek kizárólagosan δ és d függvényében fejezhetők ki. Egy ilyen exponens van, éspedig η. Mindennek értelmében az első Buckingham-Gunton-egyenlőség továbbra is fennáll, és így ,,szigorúbb értelemben" is átmentődik:

$$2 - \eta = d\,\frac{\delta - 1}{\delta + 1} \ \Rightarrow \ \delta = \frac{d + 2 - \eta}{d - 2 + \eta} \, . \tag{7.97}$$

A többi, még megmaradt kritikus exponens esetében, újraértelmezést kell végezni. Így $t \to 0$, azaz itt $\xi \to \infty$ esetében:

$$\chi \sim \xi^{\bar{\gamma}} \, ; \quad C \sim \xi^{\bar{\alpha}} \ , \tag{7.98}$$

ahol $\bar{\alpha}$ és $\bar{\gamma}$ felfogható mint:

$$\bar{\gamma} = \frac{\gamma}{\nu} \ ; \ \bar{\alpha} = \frac{\alpha}{\nu} \ . \tag{7.99}$$

Az utóbbi két összefüggés eredetének gondolata abban rejlik, hogy megtartjuk a $\chi \sim t^{-\gamma}, C \sim t^{-\alpha}$ kifejezéseket, de megengedjük bennük, hogy α és γ divergáljon a

$\xi \sim t^{-\nu}$–ben szereplő ν exponenssel együtt. Ekkor ξ kifejezéséből $t \sim \xi^{-1/\nu}$, amit χ és C–be helyettesítve, visszakapjuk a (**??**) egyenlőségeket. Tehát az alapgondolat az, hogy α, γ és ν divergálnak ugyan, de hányadosaik véges értéküek maradnak. Továbbmenőleg, mivel ξ általánosan véve (pl. KTB-esetében [1]) csak $t > 0$–ban értelmezhető véges mennyiségként, a szigorúbb értelemben vett skálatörvények csak $t > 0$–ra használatosak.

A további fennmaradó skálatörvények tanulmányozásánál észrevehető, hogy (**??**) egyenleten kívül két összefüggésünk van, melyben minden paraméter értelmezhető, s mely ν–vel való osztással nemdivergáló relációkat ad. Ezen két összefüggés, a Fisher és a Josephson egyenlőségek. Ezekből tehát szigorú értelemben vett skálatörvények vezethetők le:

$$(2-\eta)\nu = \gamma \ \Rightarrow \ \bar{\gamma} = 2 - \eta \ , \tag{7.100}$$

továbbá:

$$2 - \alpha = \nu d \ \Rightarrow \ \bar{\alpha} = -d \ . \tag{7.101}$$

Az utóbbi egyenlet esetében, figyelembe vettük, hogy ν divergenciája miatt, $1/\nu \to 0$ áll fenn.

Így tehát a „szigorú értelemben vett skálatörvények”, ahol a kritikus exponensek nem $t \to 0$, hanem $\xi \to \infty$ segítségével vannak értelmezve:

$$\bar{\alpha} = -d \ , \quad \bar{\gamma} = 2 - \eta \ , \quad \delta = \frac{d+2-\eta}{d-2+\eta}. \tag{7.102}$$

Megjegyzendő, hogy $\bar{\alpha}$ negatív lévén, elveszti kritikus exponens szellemében vett értelmezését, továbbá (HTR) esetén, mikor ν véges, ezen összefüggés pontatlan.

Bizonyos specifikus esetekben a $\bar{\beta} = \beta/\nu$ kritikus exponens is értelmezhető egy számítási trükk segítségével, éspedig úgy, hogy $t > 0$ esetben $h \neq 0$ jelenlétében Δ járulékot indukálunk, majd $h, t \to 0$–ban $\bar{\beta}$ kritikus exponenset számolunk. Ezen út például a KTB átmenet esetében járható. Ekkor a szuplimentáris skálatörvény úgy kapható, hogy a Rushbrooke egyenletből $2 - \alpha = 2\beta + \gamma$, mely a Josephson egyenletbe helyettesítve, $\nu d = \gamma + 2\beta$ összefüggést eredményez. Ezt ν–vel osztva, kapjuk meg az új szigorú értelemben vett skálatörvényt, mely fennállásának feltétele azonban mindig a Δ értelmezhetősége:

$$\bar{\gamma} = d - 2\bar{\beta} \tag{7.103}$$

A szigorú értelemben vett skálatörvények hasznosságára vonatkozólag néhány példát szeretnénk bemutatni. A $d = 2$ Ising modell, Onsager nyomán, egzaktul megoldható. Ez esetben HTR típusú rendezettség van, és a kritikus exponensek mind egzaktul ismertek. Az értékük:

$$\alpha = 0 \ , \quad \beta = \frac{1}{8} \ , \quad \gamma = \frac{7}{4} \ , \quad \delta = 15 \ , \quad \eta = \frac{1}{4} \ , \quad \nu = 1. \tag{7.104}$$

Ezen eredmények esetében számítsuk ki a szigorú értelemben vett kritikus exponenseket:

$$\bar{\alpha} = 0 \ , \quad \bar{\beta} = \frac{1}{8} \ , \quad \bar{\gamma} = \frac{7}{4} \ , \quad \delta = 15 \ , \quad \eta = \frac{1}{4}. \tag{7.105}$$

Nyilvánvalóan az összes skálatörvény teljesül ($d = 2$). Megfigyelhető viszont az is, hogy a szigorú értelemben vett skálatörvények is fennállnak. (Ez alól kivétel az $\bar{\alpha}$ egyenlete, mely amint már említettük, HTR esetben, ν véges mivolta miatt helytelen).

Mindezek után, előrevetítve a későbbiekben levezetendő eredményeket, megadjuk a KTB fázisátmenet szigorú értelemben definiált kritikus exponenseit (ez esetben a szabadenergia $t \to 0$–ra $F \sim \xi^{-2}$, $\quad T > T_c$, továbbá itt is $d = 2$):

$$\bar{\alpha} = -2 \ , \quad \bar{\beta} = \frac{1}{8} \ , \quad \bar{\gamma} = \frac{7}{4} \ , \quad \delta = 15 \ , \quad \eta = \frac{1}{4}. \tag{7.106}$$

Minden szigorú értelemben vett skálatörvény teljesül, és a hasonlóság a $d = 2$ Ising esettel szembeötlő, mindannak ellenére, hogy a KTB esetben topologikus rendezettség van jelen, és hosszútávú térbeli rendezettség teljesen hiányzik[23].

Egy másik érdekes példa a $d = 1$ Ising modell esete. A megoldás itt is egzaktul ismert, és amint már tudjuk, egy–dimenzióban, véges hőmérsékleten fázisátalakulás rövidhatótávolságú kölcsönhatások esetében (amilyen az Ising modell is) nem lehetséges. Mégis, újból előrevetítve az elkövetkezőkben levezetendő eredményeket, a $d = 1$ dimenziós Ising modell felfogható úgy, hogy $T_c = 0$ kritikus hőmérsékleten fázisátalakulást ad. A $T \to 0$ határesetben nyert divergenciák exponenciális jellegűek, így belőlük a szigorú értelemben definiált kritikus exponensek kiszámíthatók. A meghatározható értékek:

$$\bar{\alpha} = -1 \ , \quad \bar{\gamma} = 1 \ , \quad \eta = 1. \tag{7.107}$$

Megfigyelhető, hogy ezen értékek teljesítik a $\bar{\alpha}$, és $\bar{\gamma}$ számára felírt összefüggéseket.

7.7 A kritikus jelenségek definiálása

Az eddig ismertetettek alapján a kritikus jelenségek a T_c közelében megjelenő, divergenciák által jellemzett folyamatok. Ezek tanulmányozására vezettük be a kritikus exponenseket, melyekre skálatörvényeket vezettünk le, s melyekre „univerzális” jelleget találtunk. A skálatörvények alapja az általánosított homogenitás volt, olyan tulajdonság, melyet a Kadanoff-féle blokk-transzformáció gondolata, azaz a skálainvariancia indokolt.

Ezek egyelőre azon ismeretek, melyek általánosan a „kritikus jelenségek” leírásához kapcsolódnak. Mindennek ellenére, a „kritikus jelenségek” fogalma nem körvonalazódott tisztán. Ezt a hiányt a továbbiakban pótolni szeretnénk.

[23]Habár e területen napjainkig kevés eredmény született, a bemutatott példa alapján gyanitható, hogy a szigorú értelemben vett univerzalitási osztályok több klasszikus értelemben vett univerzalitási osztályt kapcsolnak össze.

Figyelmesen végigvizsgálva, hogy melyek azok az abszolút szükséges tények, melyeket felhasználtunk kritikus exponensek, illetve skálatörvények levezetésében (és gondoljunk itt a szigorú értelemben vett kritikus exponensekre is), megállapítható, hogy az egyedüli lényeges tényező a korrelációs hossz végtelen felé tartása $T \to T_c$–ben. Így tehát, ha van egy T_c hőmérsékletünk, mely (más rögzített paraméterértékekkel együttesen) a $T \to T_c$ határesetben valamilyenfajta korrelációs hossz (legyen ξ) divergenciát idéz elő, ez T_c közvetlen közelében egy kritikus tartományt definiál. A kritikus tartomány lényegi jellemzője pontosan $\xi \to \infty$, ha a $T \to T_c$ paramétertérpont közelében vagyunk. A kritikus tartományban lejátszódó jelenségek a ,,kritikus jelenségek". Megjegyzendő, hogy az itt használt ξ geometriai térbeli korreláltságot jelöl, ezért az itt bemutatott gondolatmenetből a nemtriviális ergodicitás sérülésével járó [6], és időbeli rendezettségre alapuló fázisátalakulások (mint például a spin–üvegek esete) kimaradnak. E típusú fázisátalakulásokat ezen jegyzet nem érinti.

Ténylegesen, ha ξ divergál, ez azt eredményezi, hogy minden hossz–skálán fennálló folyamatok lényegessé válnak, a rendszernek nem lesz többé karakterisztikus hossza, minden hossz–skála átfésülése fontossá válik. Ez a folyamat, mely a Kadanoff-féle blokk-transzformáció segítségével megvalósítható. A T_c közvetlen közelében a Kadanoff-konstrukció a fizikai képen nem változtat, így a rendszer skálainvariáns. Továbbmenőleg, a Kadanoff-konstrukció az általánosított homogenitási tulajdonságot eredményezi Φ–re és G–re nézve ami a kritikus exponensekre vonatkozó skálatörvényekhez vezet melyek univerzális jellegű törvények.

Nézzük meg, milyen kritikus jelenségekkel találkoztunk eddig.

Az egyik jelenségcsoport, mely a kritikus jelenségek kategoriájába sorolható, a folytonos fázisátalakulások csoportjára vonatkozik. Ezen esetben úgy gondolkodhatunk, hogy mivel a skálainvarianciánk végül is a geometriai térben áll fenn, valamilyen fajta térbeli, hosszútávú rendeződés jöhet létre a rendszerben (HTR). Ennek jellemzésére bevezethetünk egy Δ mennyiséget, ami a ,,rendezett" fázisban folytonosan zérótól különbözővé válik, s melynek megjelenésével egy adott T_c pontban, Φ másodrendű deriváltjai divergálnak. A Δ ,,rendparamétert" itt, amint láttuk, egy szimmetriasérülés indukálja a termodinamikai potenciálban másodrendű invariánsain keresztül, automatikusan, a termodinamikai potenciálban, a kapcsolt, szimmetriasérülést előidézni képes tér hiányában (h=0) spontán módon.

A rendparaméter folytonosan változik T_c alatt, és $T = T_c$–ben vett $\Delta = 0$ értékéről folytonosan nő fel zérótól különböző értékekre. A Δ-t, a $T \to T_c$ határesetben végtelen hatótávolságú korrelációk hozzák létre, így lesz ezen folyamat kritikus jelenség. A ξ korrelációs hossz divergenciája hatványszerű t^{-1}-ben a $t = (T - T_c)/T_c \to 0$ határesetben. Így kritikus exponensek definiálhatók, melyekre skálatörvények levezethetők, amint láttuk, a Kadanoff-transzformáció alapgondolatából kiindulva, az általánosított homogenitási tulajdonságon keresztül. Mindezek mellett, T_c közvetlen közelében a rendszer skálainvaráns tulajdonságokat mutat. Így tehát a folytonos fázisátalakulás, $h = 0$-ban és T_c közelében ,,kritikus jelenség", melyet a rendparamétert létrehozó végtelen korrelációk hoznak létre.

Fontos észrevenni viszont, hogy a kritikus jelenség definíciójában, a ,,szimmetriasérülés" sehol sem szerepel, azaz szükségtelen. Itt a korrelációs hossz divergenciája a fontos, így, az előbbi példa, csak egy lehetőség a kritikus jelenségek létrejöttére, de nem az egyetlen. Egy másik jelenség, mely során a korrelációk végtelenné válnak $T \to T_c$ határesetben ($T > T_c$), az elsőfajú fázisátalakulások kritikus pontja körül jön létre. Ez esetben, a kritikus pontnál a ,,rendezett" és ,,rendezetlen" fázisok közötti különbség eltűnik, a fázisátalakulási görbe ezen pontnál véget ér, és közben szimmetriaváltozás nincs jelen. A korrelációs hossz divergenciája itt a sűrűség-korrelációs függvényben jelentkezik. A Landau-értelemben vett rendparaméter azonban (amit szimmetriasérülés indukál), nem értelmezhető. Viszont ξ divergenciája miatt ez is kritikus jelenség, melynek lényegi jellemzője újból a skálainvariancia kell legyen. Így ezen jelenség is a folytonos fázisátalakulásoknál használt matematikai úton leírható kell legyen. Ez viszont azt jelenti, hogy puszta matematikai analógiákra építve, itt is egy Δ–szerű mennyiség vezethető be, melynek segítségével kritikus exponensek definiálhatók, amelyekre skálatörvények vezethetők le.

Ezen problémát, például a folyadék-gáz fázisátalakulás kritikus pontja esetében, a következő képpen oldjuk meg: azt mondtuk, hogy az elsőrendű fázisátalakulások esetében a kritikus pontban a két fázis (ez esetben folyadék és gáz) közötti különbség megszűnik, s mindez sűrűségkorrelációkon keresztül nyomonkövethető. Azonban ha valami ,,megszűnik" (történetesen két fázis közötti különbség), ezt egy Δ-szerű mennyiség definiálására fel lehet használni anélkül, hogy itt folytonos fázisátalakulás értelmében vett szimmetriasérülésről lenne szó. Ekkor például a tanulmányozott folyadék–gáz fázisátmenetnél:

$$\Delta = \rho_{\text{folyadék}} - \rho_{\text{gáz}} \, . \tag{7.108}$$

Ez esetben a kritikus ponton ténylegesen $\Delta = 0$, és a kritikus ponttól távolodva, Δ folytonosan felnő zérótól különböző értékekre. Mindezek során a β kritikus exponens értelmezhető, éspedig:

$$\Delta = \rho_{\text{folyadék}} - \rho_{\text{gáz}} \ \sim (-t)^{\beta} \ , \tag{7.109}$$

ahol a kritikus pontot a $T < T_c$ tartományból közelítettük meg.

A δ kritikus exponens értelmezéséhez a matematikai analógiák alapján azt kell eldönteni, hogy ez esetben milyen mennyiség játsza h szerepét. E célból emlékeznünk kell arra a tényre, hogy a folytonos fázisátalakulások esetében, amint azt már említettük, h jelenléte Φ–ben elsőrendű invariánsokat indukál, ezért a fázisátalakulást elsőrendűvé teszi. Ez meg is látszik a $h = 0$–ban folytonos fázisátalakulást mutató rendszer (h, T) fázisdiagramjában, melyben a $(h = 0, T = T_c)$ pontban a fázisátmeneti görbe megszakad, olyan kritikus pontot mutatván, ami az elsőrendű fázisátalakulások sajátja. Hasonló viselkedés a folyadék–gáz fázisátalakulásnál a (p, T) diagramban történik. Így ez esetben egy nyomás jellegű mennyiség kell h

szerepét felvegye. Ez viszont a kritikus nyomástól mért távolság lesz a (p) skálán, tehát itt

$$h = p - p_c \tag{7.110}$$

Mivel ez esetben $p - p_c$ előjele nem triviális, pl. a mágneses rendszerekre vett $H \sim |M|^\delta(M)$ hasonlatára, a folyadék–gáz rendszer kritikus pontjára értelmezett δ kritikus exponens definiciója:

$$p - p_c \sim |\rho_{\text{folyadék}} - \rho_{\text{gáz}}|^\delta(\rho_{\text{folyadék}} - \rho_{\text{gáz}}) \tag{7.111}$$

Mindezek után világossá válik, hogy a χ szuszceptibilitás szerepét, mely definiciója pl. a mágneses rendszerekre (izoterm esetben):

$$\chi_T = \left(\frac{\partial M}{\partial H}\right)_T = -\left(\frac{\partial^2 G}{\partial H^2}\right)_T \quad , \tag{7.112}$$

a folyadék–gáz rendszerekre az izoterm kompresszibilitás veszi át:

$$K_T = -\frac{1}{V}\left(\frac{\partial V}{\partial p}\right)_T = \frac{1}{\rho}\left(\frac{\partial \rho}{\partial p}\right)_T = -\frac{1}{V}\left(\frac{\partial^2 G}{\partial p^2}\right)_T , \tag{7.113}$$

ahol $\rho = m/V$ a sűrűség. Az is megfigyelhető, hogy a $h = p - p_c$ szerinti derivált, a p szerinti deriválttal ekvivalens, hiszen $\partial h/\partial p = 1$. Továbbá a K_T definíciójában szereplő $1/V$, mivel $T \to T_c$-ben divergenciákat nem okoz, lényegtelen járulék a kritikus exponensek meghatározása szempontjából.

Mindezek után a γ kritikus exponens definíciója $(t \to 0)$:

$$K_T \sim |t|^{-\gamma} . \tag{7.114}$$

A fajhő kritikus exponensének meghatározása változatlan marad:

$$C_V \sim |t|^{-\alpha} , \tag{7.115}$$

továbbá ν és η értelmezése sem változik.

Hangsúlyozni kell, hogy a matematikailag analog leírási lehetőség fizikai háttere itt nem a szimmetriasértés, hanem a korrelációs hossz divergenciája.

Amint bemutattuk tehát, egy másik jelenségcsoportot is sorolhatunk a kritikus jelenségek sorába. Ez az elsőrendű fázisátalakulás a kritikus pont körül. Tulajdonképpen az első mérések ezen területről származtak, itt érett meg legelőször az ,,univerzalitás gondolata". Így például, 1945–ben Guggenheim, 8 különböző anyagi minőségű (Ne, Ar, Xe, N_2, O_2, CO, CH_4) rendszerre ábrázolta $(T/T_c, \rho/\rho_c)$ diagramban, a folyadék–gáz mért koegzisztencia görbéjét, és tökéletesen ugyanazt a vonalat kapta. A görbe asszimmetrikus volt, és $\rho_L - \rho_G \sim (-t)^\beta$-ból, $\beta = \frac{1}{3}$-ot kapta eredményül, és nem a $\beta = \frac{1}{2}$ értéket, mint ahogy azt a molekuláris–tér elmélete tanította[24]. Ez volt az első jelek egyike, amely megmutatta, hogy a molekuláris-tér

[24]Mágneses rendszereknél a *Weiss*-elmélet, folyadék-gáz átmenetnél a *van der Waals*-elmélet

típusú elméletekkel távolról sincs vége a fázisátalakulások elméletének. Hadd jegyezzük meg, hogy a másik jel az egydimenziós Ising modell egzakt megoldása volt: Weiss szerint T_c-nek lényegi dimenzió függése nincs, de Ising (és Lentz) azt kapta, hogy d=1–ben egyszerűen nincs fázisátalakulás.

Mindezek nyomán érzékelhető, hogy pontosan az univerzalitási tulajdonság miatt, a kritikus jelenségek fogalma olyan területeket kapcsol össze koherens módon, amelyek között első látásra semmi kapcsolat nincs. Ezen tény is mutatja, hogy fázisátalakulások jellemzőit, olyan ismeretek határozzák meg, melyek messze túlnövik az egyes konkrét rendszerek specifikus tulajdonságait.

A bemutatott két példa nyomán nem szabad, hogy az a kép maradjon bennünk, miszerint a kritikus jelenségek csupán a HTR típusú rendezettséggel kapcsolatosak (szimmetria sérüléssel vagy szimmetriasérülés nélkül). A bemutatásra kerülő ismeretek előrevetítésével, mindez például érzékeltethető a KTB fázisátalakulás esetével. Amint említettük, hosszútávú térbeli rendezettség a Kosterlitz–Thouless–Berezinski fázisátalakulásnál nincs, a rendezettség topologikus formájú. A rendezett fázist egymáshoz csatolt vortexpárok alkotják, melyek a kritikus hőmérséklet felett szabad vortexekké alakulnak. A korrelációs hossz ez esetben azon távolságként fogható fel, melyen túl, a párosan csatolt vortex–tagok közötti kötöttség lazulni kezd. Ezen korrelációs hossz divergenciája T_c közelében eredményezi ez esetben a kritikus jelenséget, mely a Kadanoff-féle blokk-transzformáció eljárásával (amint majd látni fogjuk) szintén leírható, mindannak ellenére, hogy a KTB esetben nincs hosszútávú térbeli rend[25]. A HTR hiánya csupán abban nyilvánul majd meg, hogy a kritikus tartomány divergenciái nem hatványfüggvényszerűek, hanem exponenciális jellegűek lesznek, így skálatörvények csak szigorú értelemben lesznek alkalmazhatóak. A Kadanoff-konstrukció, (és majd az ebből eredő renormálási csoport) azonban ez esetben is tisztán használható [1].

[25] A két-dimenziós XY klasszikus spin-modellben például a rendszert jellemző dinamikus változó a spin, és $G(r) =< \vec{S}(0)\vec{S}(r) >$ az $r \to \infty$ határesetben mindig zéró, függetlenűl attól hogy a hőmérsékleti skálán T_c felett vagy alatt helyezkedünk el. Így a spin-spin korrelációs függvényhez rendelt korrelációs hossz sohasem divergál ez esetben

7.8 Szakirodalmi jegyzék 7.

[1] J. M. Kosterlitz, D. J. Thouless, *Ordering, metastability and phase transitions in two-dimensional systems*, Jour. of Physics, C6, 1182, (1973); J. M. Kosterlitz, *The critical properties of two-dimensional XY model*, Jour. of Physics, C7, 1046, (1974).

[2] N. Goldenfeld, Frontiers in Physics Vol. 85, *Lectures on Phase Transitions and the Renormalization Group*, Addison-Wesley, 1992, 207. oldal.

[3] N. Goldenfeld, Frontiers in Physics Vol. 85, *Lectures on Phase Transitions and the Renormalization Group*, Addison-Wesley, 1992, 169. oldal.

[4] L. D. Landau, E. M. Lifsic, Elméleti Fizika V., Statisztikus Fizika I., Tamkönyvkiadó, Budapest, 1981, 553 oldal, 47.-es lábjegyzék.

[5] J. J. Binney, N. J. Dowrick, A. J. Fisher, M. E. Newmann, *The Theory of Critical Phenomena and an Introduction to the Renormalization Group*, Oxford Science Publications, Clarendon Press, Oxford, 1995, 30. oldal.

[6] N. Goldenfeld, Frontiers in Physics Vol. 85, *Lectures on Phase Transitions and the Renormalization Group*, Addison-Wesley, 1992, 55. oldal.

8 A folytonos fázisátalakulások Landau-elmélete

Ezen fejezetben a folytonos fázisátalakulások első, nem rendszerspecifikus elméletét fogjuk tanulmányozni, mely Landau nevéhez fűződik. A Landau-elmélethez kapcsolódóan, már több információt ismerünk, melyet röviden a következőkben foglalunk össze.

8.1 A termodinamikai potenciál T_c közelében

A folytonos fázisátalakulások tanulmányozásánál láttuk, hogy lényegi jellemzőjük a kritikus hőmérsékleten fellépő szimmetriasérülés. Ennek direkt következménye a rendparaméter megjelenése a Φ termodinamikai potenciálban. Azt is láttuk, hogy a fázisátalakulási görbe közvetlen közelében Φ sorbafejtésére a következő összefüggés áll fenn (homogén rendszer, és $h = 0$ esetében):

$$\Phi = \Phi_0 + a\Delta^2 + b\Delta^4 + \dots \tag{8.1}$$

Ezen összefüggésben, $a = a(p,T)$, $b = b(p,T)$, továbbá a következő tudnivalók mérvadóak:

- A Φ termodinamikai potenciálból a Δ–ban lineáris rész hiányzik, mert elsőfokú szimmetria-invariáns nem képezhető a tanulmányozott rendszerben.
- A Φ–ben, a Δ^3 tag zéró kell legyen ahhoz, hogy a T_c közelében és $T < T_c$–re, a rendezett ($\Delta \neq 0$) fázis stabil formában létezhessen [26].
- A $a(p,T)$ koefficiens előjelet vált $T = T_c$–ben, azaz $a(p,T) > 0$, ha $T > T_c$; $a(p,T) < 0$, ha $T < T_c$; továbbá $a(p,T) = 0$ ha $T = T_c$. Továbbá $a(p,T)$ folytonos függvény T_c–ben, és a hőmérséklet reguláris függvénye.
- A $b(p,T)$ koefficiens a fázisátalakulási pontban ($T = T_c$) pozitív kell legyen, továbbá $b(p,T) > 0$ a $T < T_c$ esetben is, és T_c–ben folytonos függvény.

Az inhomogén esetben $\Delta = \Delta(r)$, és (**??**) szerepét egy lokális termodinamikai potenciálsűrűség $\bar{\Phi}(r)$ veszi át, mely térfogati integrálja adja Φ–t. Ekkor

- Inhomogén rendszerben, mikor $\Delta = \Delta(r)$, a $\bar{\Phi}(r)$–ben, a (**??**)–hez képest, egy inhomogenítási tag, $g(p,T)\left(\frac{\partial\Delta}{\partial T}\right)^2$ is megjelenik, (itt $\partial/\partial r$ gradienst jelöl) ahol $g(p,T) > 0$.

[26] Megjegyezzük, hogy vannak esetek amikor harmadrendű invariáns képezhető [1]. Viszont ekkor is a $C\,\Delta^3$ tag C koefficiense zéró kell legyen ahhoz hogy folytonos fázisátalakulás létrejöjjön (lásd 5. Fejezet 5.4 paragrafusát). Ha $C \neq 0$, kis Δ értékekre a szimmetriasérült fázis nem stabil. Megtörténhet viszont hogy Δ növekedésével stabillá válik és ekkor a rendezett fázis Δ-ban ugrással jelenik meg, azaz elsőrendű fázisátalakulás formájában jelentkezik.

- Továbbmenőleg, külső tér jelenlétében, $\bar{\Phi}(r)$ egy $-\Delta(r)h(r)$ járulékot is kap. Ekkor viszont az elsőrendű $\Delta(r)$ tag nem egyeztethető össze a szimmetriasérülés fogalmával, így ez esetben folytonos fázisátalakulás nem lehetséges. Ezen észrevételt sok esetben úgy fogalmazzák meg, hogy külső tér jelenlétében nincs másodrendű fázisátalakulás. Ez a megállapítás *Ehrenfest*-törvény néven ismeretes.

Továbblépés előtt, néhány megjegyzést sorakoztatunk fel.

Az összes fenntebb megemlített jellemzők Φ–nek a Δ szerinti sorfejtésére vonatkoznak T_c körül. A levont következtetések (a sorfejtések koefficienseinek folytonosságát kivéve) mind egyértelműen a szimmetriasértés következményei. Több esetben viszont a Δ^{2n+1} tagok hiányát, kevésbé szigorúan, azzal indokolják, hogy Φ invariáns kell maradjon a $\Delta \to -\Delta$ transzformációra. Ezen állítás mágneses rendszerekre általában igaz (ekkor $\Delta = M$), de általános érvként nem fogadható el (példákkal később foglalkozunk).

Ami a páratlan hatványú rendparaméter tagok Φ–ben való jelenlétét illeti, azt kell megjegyeznünk, hogy $\Delta^1 \neq 0$ esetében a fázisátalakulás nem folytonos (másodrendű), továbbá $\Delta^3 \neq 0$, $T = T_c$ fennállása mellett, a folytonos fázisátalakulás nem hoz létre stabil fázist (azaz folytonos fázisátalakulás nem jöhet létre csak legfeljebb elsőrendű[27].)

Landau felhasznált még egy nagyon lényeges feltételezést, mely nem a szimmetriasértés következménye, s mely külön említést érdemel. A Landau-elméletben a sorbafejtés $a(p,T), b(p,T), \ldots$, koefficiensei a hőmérséklet reguláris függvényei (azaz T–nek analitikus függvényei, miszerint az értelmezési tartomány bármely pontja körül sorbafejthetők). Ezen feltételezés lényegében ahhoz a tényhez kapcsolódik, hogy Φ-nek Δ szerinti sorfejtését konvergensnek tekintjük T_c közelében. Amint majd látni fogjuk, ezen feltételezés következtében marad majd a Landau-elmélet egy egyszerű molekuláris–tér típusú leírás.

Az elkövetkezőkben célunk az lesz, hogy a felsorolt kiindulópontokat felhasználva, vezessük le a tanulmányozott modell kritikus exponenseit.

8.2 A kritikus exponensek termodinamikai potenciálhoz tartozó csoportjának levezetése

A következőkben a termodinamikai potenciál általánosított homogenitásából származtatott skálatörvényekben szereplő kritikus exponensek kiszámítása lesz a cél $(\alpha, \beta, \gamma, \delta)$. Ezen csoport elemzésekor, mivel a szóban forgó kritikus exponensek nem kapcsolódnak a korrelációs függvényhez, a $G(r,r')$–re jellemző hely függéseket

[27] Érdekes a harmadrendű invariánsok esete nem-HTR fázisátalakulások esetében. Igazolható pl. hogy nemtriviális ergodicitás-sérülést szenvedő spin-üveg fázis esetében, köbös tag jelenlétében, az nxn rendezett fázist jellemző rendparaméter, $n \to \infty$ határesetben a folytonos fázisátalakulásokra jellemző viselkedést mutat [2]

nem szükséges figyelembe venni, így elégséges, ha levezetésünk a homogén eset Φ termodinamikai potenciáljával történik.

Így feltételezzük, hogy $\frac{\partial \Delta}{\partial r} = 0$, tehát:

$$\Phi = \Phi_0 + a(p,T)\Delta^2 + b(p,T)\Delta^4 - h\Delta \tag{8.2}$$

A számításokat Δ változóban visszük végig, de könnyebb megértés céljából az összefüggések mindig konkretizálhatóak $\Delta = M$ helyettesítéssel egy mágneses fázisátalakulásra, mely esetben az elnevezések és összefüggések is intuitíven érthetőek.

Figyelembe vesszük a következőkben $a(p,T)$ előjelváltását T_c–ben, továbbá a rá vonatkozó regularitási feltételt, és azon megállapítást, miszerint Φ használt sorbafejtése T_c körül valójában csak $|T - T_c|/T_c \ll 1$–re érvényes. Ekkor az $a(p,T)$ kifejezésében $T - T_c$ szerinti sorfejtés alkalmazható, melyben megállhatunk a $T - T_c$–ben elsőrendű tagnál a lényeg elvesztése nélkül. Tehát:

$$a(p,T) = a(p)(T - T_c) \quad . \tag{8.3}$$

A $b(p,T)$ koefficiensre csak azt kell figyelembe vennünk hogy pozitív, és semmi különleges viselkedést nem mutat T_c körül.

A kiindulópontok tisztázása után, vezessük le először is a β kritikus exponenst. Első lépésben figyelembe vesszük, hogy a rendezett fázisban a $\Delta \neq 0$ megoldás Φ–nek minimuma kell legyen. Így, a $\frac{\partial \Phi}{\partial \Delta} = 0$ feltételből, a (**??**) egyenlőségből, a h tér jelenléte nélkül:

$$2a(p,T)\Delta + 4b(p,T)\Delta^3 = h = 0 \quad . \tag{8.4}$$

Ezen összefüggésből, (**??**) felhasználásával, a következő egyenlőséget kapjuk:

$$\Delta^2 = -\frac{a(p,T)}{2b(p,T)} = \frac{a(p)}{2b(p,T)}\,(T_c - T) \quad . \tag{8.5}$$

A levezetett összefüggésben a feltételezés szerint $b(p,T)$ nem zéró, és $T \approx T_c$ fennállása esetében $b(p,T) \approx b(p,T_c)$ használható. A Δ^2–ben lévő negatív előjel az $a(p,T)$–ben $(T_c - T)$ járulékot idéz elő, jelezvén, hogy $\Delta \neq 0$ megoldásunk csak $T < T_c$–re van, ami helyes. Végeredményként,

$$\Delta \sim (T_c - T)^{1/2} \sim |t|^{1/2} \;\Rightarrow\; \beta = \frac{1}{2} \tag{8.6}$$

Tehát a β kritikus exponensünk $1/2$.

Elemezzük most a γ exponenst. Az előző pontban kapott minimumfeltételből kiindulva, ezúttal h jelenlétében:

$$2a(p,T)\Delta + 4b(p,T)\Delta^3 = h \; . \tag{8.7}$$

Mivel Δ–nak h szerinti deriválja adja a szuszceptibilitást, deriváljuk a kapott kifejezésünket h szerint. Bevezetve a

$$\chi = \left(\frac{\partial \Delta}{\partial h}\right)_{h=0} \tag{8.8}$$

jelölést
$$2a(p,T)\chi + 12b(p,T)\Delta^2\chi = 1 \ , \tag{8.9}$$
adódik. Ebből viszont
$$\chi = \frac{1}{2a(p)(T-T_c) + 12b(p,T)\Delta^2} \ . \tag{8.10}$$
Most, ha a rendezetlen fázisból közelítjük meg a kritikus hőmérsékletet, azaz $\Delta = 0$ és $T > T_c$, akkor
$$\chi \sim \frac{1}{T-T_c} \ \Rightarrow \ \gamma = 1. \tag{8.11}$$
Ha viszont a rendezett fázisból mozgunk T_c felé a hőmérséklet skálán, azaz $\Delta \neq 0$, akkor figyelembe kell venni hogy β kifejezéséből $\Delta^2 \sim (T_c - T)$, így a nevezőben újból $T - T_c$ dominál, tehát a γ exponens $T < T_c$–re sem változik meg ($\gamma = \gamma'$). Így tehát:
$$\chi \sim |t|^{-\gamma} \quad \gamma = 1 \ . \tag{8.12}$$
A levezetettek értelmében, a szuszceptibilitás kritikus exponense $\gamma = 1$.

Foglalkozzunk a továbbiakban a δ kritikus exponens tanulmányozásával. Szintén a levezetett minimum feltételből kiindulva:
$$2a(p,T)\Delta + 4b(p,T)\Delta^3 = h \ . \tag{8.13}$$
Most viszont $T = T_c$–be kell helyezkednünk ami azt jelenti, hogy $a(p,T_c) = 0$. Mindezek után:
$$\Delta^3 = \frac{1}{4b(p,T_c)} \ h \ . \tag{8.14}$$
Figyelembe véve a δ kritikus exponens definícióját, következik
$$\Delta_{|T=T_c} \sim h^{1/\delta} \ ; \quad \delta = 3. \tag{8.15}$$
Tehát $\delta = 3$ a Landau elmélet következtetése.

A tanulmányozott csoport utolsó kritikus exponense α, a fajhő exponense. Definíció szerint:
$$C_h = -T \left(\frac{\partial^2\Phi}{\partial T^2}\right)_h \tag{8.16}$$
Látható tehát, hogy α kiszámításához elemeznünk kell a Φ-ben előforduló minden tag T függését. Az első járulékunk a Φ_0–n túlmenőleg $a\Delta^2$. Erre viszont:
$$\left.\begin{array}{ll} a(p,T) & \sim (T-T_c) \\ \Delta^2 & \sim (T-T_c) \end{array}\right\} \ a(p,T)\Delta^2 \sim (T-T_c)^2 \ . \tag{8.17}$$
A Φ–ben szereplő következő tag $b\Delta^4$. Ez szintén hasonló hőmérséklet függést mutat, mert:
$$\Delta^4 \ \sim (T-T_c)^2 \tag{8.18}$$

Tehát a termodinamikai potenciálban kapott T függés:

$$\Phi = \Phi_0 + K(T - T_c)^2 + \mathcal{O}(T - T_c)^3 \,, \tag{8.19}$$

ahol K egy numerikus konstans. Mindezek után Φ–t kétszer deriválva T szerint:

$$\frac{\partial^2 \Phi}{\partial T^2} = 2K + \mathcal{O}[(T - T_c)^1] \,. \tag{8.20}$$

Tehát

$$C|_{T \to T_c} \sim 2KT_c + \mathcal{O}([T - T_c]) = 2KT_c = \text{const} \,. \tag{8.21}$$

Azaz

$$\alpha = 0. \tag{8.22}$$

A Φ_0–ból származó járulékot nem követtük nyomon, mert tudvalevőleg a belőle származó fajhő T_c–ben folytonos.

Mindezek után tehát, az első kritikus exponens csoport tanulmányozásából eredő összefüggések:

$$\alpha = 0 \,, \quad \beta = \frac{1}{2} \,, \quad \gamma = 1 \,, \quad \delta = 3 \,. \tag{8.23}$$

Ezen exponens halmazt nevezzük Φ csoportjának, mert levezetésüknél csupán a termodinamikai potenciálra vonatkozó információk voltak szükségesek.

A kritikus exponensek ismeretében ellenőrizzük a csoportra jellemző skálatörvények helytállását:

$$\begin{aligned}
\gamma = \beta(\delta - 1) \quad &\to 1 = \tfrac{1}{2}(3 - 1); && \text{helyes} \\
\alpha + \beta(\delta + 1) = 2 \quad &\to 0 + \tfrac{1}{2} \cdot 4 = 2; && \text{helyes} \\
\alpha + 2\beta + \gamma = 2 \quad &\to 0 + 2 \cdot \tfrac{1}{2} + 1 = 2; && \text{helyes}
\end{aligned} \tag{8.24}$$

Látható tehát, hogy az első csoporthoz tartozó skálatörvények ki vannak elégítve, tehát a leírás belsőleg ellentmondásmentes.

8.3 A kritikus exponensek korrelációs függvényhez tartozó csoportjának levezetése

A korrelációs függvény csoportjának kritikus exponensei ν és η. Ezen mennyiségek levezetését mutatjuk be most a Landau-elmélet keretein belül.

Mivel a korrelációs függvényhez csatolt kritikus exponensekről van szó, és a korrelációs függvényben explicit r függés szerepel, ez esetben az inhomogenitások lehetséges jelenlétének figyelembevétele is szükséges. Így tehát a gondolatmenet csupán a termodinamikai potenciálsűrűség figyelembevételével vihető végig. Ekkor viszont fel kell tételezni, hogy Δ nem homogén, hanem $\Delta = \Delta(x)$ lokális függést mutat, ahol x egy tetszőleges d dimenziós geometriai-tér koordináta. Így ez esetben:

$$\overline{\Phi}(x) = \overline{\Phi}_0(x) + a(p,T)\Delta^2(x) + b(p,T)\Delta^4(x) + g(p,T)\left(\nabla\Delta(x)\right)^2 - h(x)\Delta(x) \ . \quad (8.25)$$

Továbbá, a termodinamikai potenciál:

$$\Phi = \int d^dx[\Phi_0(x) + a(p,T)\Delta^2(x) + b(p,T)\Delta^4(x) + g(p,T)(\nabla\Delta(x))^2 - h(x)\Delta(x)] \quad (8.26)$$

ahol, a tanulmányozott tartományban $g(p,T) > 0$.

8.3.1 A rendparaméter fluktuációk hatása

Az első problémánk az, hogy Φ minimumát meghatározzuk. E célból beviszünk a rendszerbe egy $\Delta(x) \to \Delta(x) + \delta\Delta(x)$ perturbációt, és megnézzük, mi a feltétele annak, hogy rendszerünk ennek hatására ne távolodjon el az eredeti egyensúlyi állapotából. Nyilvánvalóan feltételezzük, hogy $\delta\Delta(x)$ lokális perturbáció értéke kicsi.

A $\delta\Delta(x)$ hatására a termodinamikai potenciál értékében egy $\delta\Phi$ variációt kapunk eredményül, melynek értéke:

$$\begin{aligned}\delta\Phi &= \int d^dx\left[-h(x)\delta\Delta(x) + 2a(p,T)\Delta(x)\delta\Delta(x) + 4b(p,T)\Delta^3(x)\delta\Delta(x)\right.\\ &\quad \left.+ 2g(p,T)(\nabla\Delta(x))(\nabla(\delta\Delta(x)))\right]\end{aligned} \quad (8.27)$$

Mindezek után integráljuk parciálisan az utolsó tagot:

$$\int(\underbrace{\nabla\Delta}_{v})(\underbrace{\nabla[\delta\Delta]d^dx}_{du}) = A_S - \int(\nabla^2\Delta)(\delta\Delta)d^dx \ , \quad (8.28)$$

ahol a standard eljárást alkalmaztuk

$$v = \nabla\Delta; \quad dv = \nabla^2\Delta d^dx; \quad (8.29)$$

$$du = \nabla(\delta\Delta)d^dx; \quad u = \delta\Delta \ , \quad (8.30)$$

és $A_S = \int(\delta\Delta)(\nabla\Delta)\cdot d\vec{S}$ a tanulmányozott d dimenziós térfogatot határoló felület menti integrált jelöli. Feltételeztük, hogy rendparaméterünk gradiensének (termodinamikai határesetben) a végtelenben elhelyezkedő határfelületen vett értéke nem bír fizikai jelentéssel, így értéke zérónak választható, azaz $A_S = 0$. A levezetett összefüggés segítségével a termodinamikai potenciál $\delta\Delta(x)$ hatására történő változása kifejezhető

$$\delta\Phi = \int d^dx[-h(x) + 2a(p,T)\Delta(x) + 4b(p,T)\Delta^3(x) - 2g(p,T)\nabla^2\Delta(x)]\delta\Delta \quad (8.31)$$

formában. Mindezek után $\delta\Phi = 0$ lesz az egyensúly feltétele. Ezen összefüggés minden $\delta\Delta(x)$ fluktuációra fenn kell álljon, ami viszont azt jelenti, hogy maga az integrandus kell zéró legyen, azaz:

$$2a(p,T)\Delta(x) + 4b(p,T)\Delta^3(x) - 2g(p,T)\nabla^2\Delta(x) = h(x) \ . \tag{8.32}$$

A továbbhaladás előtt megfigyelhető, hogy ezen összefüggés $h(x) = h = konst.$ és $\Delta(x) = \Delta = konst.$ feltételezésekkel visszaadja a homogén rendparaméter esetében $\partial\Phi/\partial\Delta = 0$ alapján levezetett feltételt, melyből az első csoport kritikus exponenseit származtattuk.

A levezetett egyenletből az általánosított szuszceptibilitás

$$\chi(x,x') = \frac{\delta\Delta(x)}{\delta h(x')}; \tag{8.33}$$

kifejezhető egy $h(x')$ szerinti funkcionális deriválás segítségével. Figyelembe véve, hogy ezen operáció a ∇^{2_x}–el kommutál, a következő egyenlőséget kapjuk:

$$[2a(p,T) + 12b(p,T)\Delta^2(x) - 2g(p,T)\nabla_x^2]\chi(x,x') = \delta(x-x'). \tag{8.34}$$

Hogy mi a kapcsolat az általánosított szuszceptibilitás és a korrelációs függvény között, azt a következőkben világítjuk meg.

8.3.2 Az általánosított szuszceptibilitás és a korrelációs függvény kapcsolata

A következőkben igazoljuk, hogy a $G(x,x')$ korrelációs függvény és $\chi(x,x')$ között a következő összefüggés áll fenn:

$$\chi(x,x') = \frac{1}{k_B T}\, G(x,x') \ . \tag{8.35}$$

Hogy mindez világos legyen, vizsgáljunk meg egy közismert konkrét esetet. Legyen egy lokalizált spin rendszer Hamilton operátora $\mathcal{H}$ a z tengely irányába mutató H mágneses tér jelenlétében

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 - \bar{\mu}H\sum_{i=1}^{N} S_i^z \ , \tag{8.36}$$

ahol $\mathcal{H}_0$ a Hamilton operátor külső tértől független része, továbbá $\bar{\mu} = g\mu_B$, g a Landé faktor, és μ_B a Bohr magneton. Ekkor az állapotösszeg, illetve egy tetszőleges A mennyiség termodinamikai átlaga:

$$Z = \mathrm{Tr}e^{-\beta\mathcal{H}}; \quad \langle A\rangle = \frac{1}{Z}\,\mathrm{Tr}(Ae^{-\beta\mathcal{H}}). \tag{8.37}$$

A rendszer mágnesessége definíció szerint:

$$M = \bar{\mu}\left\langle \sum_i S_i^z \right\rangle = \bar{\mu}\frac{1}{Z}\,\mathrm{Tr}\left(\sum_i S_i^z e^{-\beta\mathcal{H}}\right) \ . \tag{8.38}$$

Továbbá a mágneses szuszceptibilitás:

$$\chi = \left(\frac{\partial M}{\partial H}\right)_{H\to 0} . \tag{8.39}$$

Mindezek után, M–nek H szerinti deriválása nyomán:

$$\begin{aligned}\chi &= \bar{\mu}\left[\left(-\frac{1}{Z^2}\frac{\partial Z}{\partial H}\right)\mathrm{Tr}\left(\sum_i S_i^z e^{-\beta\mathcal{H}}\right)\right.\\ &+ \left.\frac{1}{Z}\,\mathrm{Tr}\left(\sum_i S_i^z \frac{\partial e^{-\beta\mathcal{H}}}{\partial H}\right)\right]_{|H\to 0}\end{aligned} \tag{8.40}$$

Itt felhasználtuk azon tényt, hogy $\frac{\partial}{\partial H}$ felcserélhető Tr és $\sum_i$ operációkkal. Most elemezzük egy kicsit a χ kifejezésében szereplő két deriváltat. Ezek közül az első:

$$\frac{\partial Z}{\partial H} = \mathrm{Tr}\left(+\bar{\mu}\beta\sum_i S_i^z e^{-\beta\mathcal{H}}\right) . \tag{8.41}$$

Ekkor viszont a (**??**) összefüggés két tagját $\chi = \chi_1 + \chi_2$ formában jelölve, az első járulék

$$\chi_1 = -\beta\bar{\mu}^2\sum_{i,j} < S_i^z >< S_j^z > . \tag{8.42}$$

A második derivált viszont χ–ben[28]

$$\frac{\partial}{\partial H}\, e^{-\beta\mathcal{H}} = +\beta\bar{\mu}\sum_j S_j^z e^{-\beta\mathcal{H}} . \tag{8.43}$$

Így viszont a szuszceptibilitás második tagja:

$$\chi_2 = \beta\bar{\mu}^2\sum_{i,j} < S_i^z S_j^z > \tag{8.44}$$

Tehát

$$\begin{aligned}\chi &= \beta\bar{\mu}^2\left[\sum_{ij}\langle S_i^z S_j^z\rangle - \sum_{ij}\langle S_i^z\rangle\langle S_j^z\rangle\right]\\ &= \frac{\bar{\mu}^2}{k_B T}\sum_{ij}\left[\underbrace{\langle S_i^z S_j^z\rangle - \langle S_i^z\rangle\langle S_j^z\rangle}_{\frac{1}{\bar{\mu}^2}G(i,j)}\right]\end{aligned} \tag{8.45}$$

[28]Kvantum-rendszerekben ezen összefüggés szigorúan véve csak akkor áll fenn ha a teljes spin tengelyvetület $S^z_{teljes} = \sum_j S_j^z$ a Hamilton operátorral felcserélhető. Spin-modellekben ez mindig helytálló feltételezés. Lásd Ref.[3].

Megfigyelhető, hogy a lokális mágneses momentum ($M_i = \bar{\mu} S_i^z$) definicióját felhasználva, a kettős összeg alatt pontosan a korrelációs függvényt ismerjük fel:

$$G(i,j) = \langle M_i M_j \rangle - \langle M_i \rangle \langle M_i \rangle \; . \tag{8.46}$$

A kiszámított szuszceptibilitás viszont mindig

$$\chi = \sum_{(i,j)} \chi(i,j) \tag{8.47}$$

formában felírható. Tehát ténylegesen:

$$\chi(x,x') = \frac{1}{k_B T} \, G(x,x') \tag{8.48}$$

Tanulmányozva a levezetést, megfigyelhető, hogy a végeredmény a Hamilton operátor

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 - h \sum_i X_i \tag{8.49}$$

formájának köszönhető, ahol a lokális rendparamétert

$$\Delta(x_i) =< X_i > \tag{8.50}$$

adja, és h a hozzá csatolt absztrakt külső tér. Ekkor úgyanis, a

$$\Delta = \sum_i \Delta(x_i) \tag{8.51}$$

értelmezés mellett, a h–val arányos Φ–ben megjelenő járulék a h szerint vett első rendben mindig

$$\Phi = \Phi(h=0) - h\Delta \tag{8.52}$$

formájú[29]. Így tehát, amennyiben a párkorrelációs függvény az X_i viszonylatában értelmezett

$$G(i,j) =< X_i X_j > - < X_i >< X_j > \tag{8.53}$$

a levezetett összefüggés az említett körülmények között mindig használható. Az egyenlőség tulajdonképpen a lineáris válasz elméletével kapcsolatos, mely esetben a tér hatását lineáris formában vesszük figyelembe. A végeredmény lényege az, hogy a válaszfüggvény (azaz a szuszceptibilitás), az említett körülmények között, mindig a korrelációs függvénnyel arányos.

[29] Az állítás csak kis terek esetében helytálló, és klasszikus rendszerek esetében mindig helyes. Kvantum rendszerekben az (??) megjelenéséhez $[\mathcal{H}_0, \sum_i X_i] = 0$ elégséges feltétel. Ha ez utóbbi kommutátor nem zéró, akkor kis h-ra $\Phi - \Phi(h=0)$ első rendben h-val arányos és az arányossági tényező Δ-nak függvénye.

8.3.3 A korrelációs függvény formája a Landau elméletben.

Tételezzük fel a továbbiakban, hogy a rendszerünk transzláció invariáns, így tehát $G(x,x') \equiv G(x-x')$. Az előbbi két paragrafus eredményeit felhasználva, a korrelációs függvényre a következő összefüggés adható:

$$[a(p,T) + 6b(p,T)\Delta^2(x) - g(p,T)\nabla_x^2]G(x-x') = \frac{k_B T}{2}\,\delta(x-x') \tag{8.54}$$

A gondolatmenetet $T > T_c$–re folytatva, figyelembe vesszük, hogy $T > T_c$–re $\Delta(x) = 0$, továbbá $g(p,T) \simeq g(p,T_c) \equiv g(p) > 0$. Ekkor tehát:

$$[a(p)(T-T_c) - g(p)\nabla^2]G(r) = \frac{k_B T}{2}\,\delta(r); \tag{8.55}$$

ahol $r = x - x'$ jelölést vezettük be, és felhasználtuk $a(p,T)$ konkrét formáját.

A megoldást legkönnyebb Fourier transzformált formájában kifejezni. Ekkor ugyanis

$$G(r) = \int \frac{d^d q}{(2\pi)^d}\, G(q) e^{iq\cdot r}\,, \tag{8.56}$$

$$\delta(r) = \int \frac{d^d q}{(2\pi)^d}\, e^{iq\cdot r}\,. \tag{8.57}$$

Ezen összefüggéseket a $G(r)$ (**??**) egyenletébe helyettesítve, majd a

$$\nabla^2 e^{iq\cdot r} = -q^2 e^{iq\cdot r} \tag{8.58}$$

egyenlőséget felhasználva, a következő eredmény adódik:

$$G(q) = \frac{k_B T}{2} \cdot \frac{1}{g(p)q^2 + a(p)(T-T_c)}\,. \tag{8.59}$$

Megfigyelhető, hogy az eredmény $T < T_c$–re is hasonló, hiszen $\Delta^2 \sim (T-T_c)$ miatt csupán $a(p)$ renormálásában módosul. Tehát a korrelációs függvényre vonatkozó végeredmény

$$G(q) = \frac{k_B T}{2g(p)} \cdot \frac{1}{q^2 + \tilde{a(p)}\,(T-T_c)}\,, \tag{8.60}$$

ahol $\tilde{a(p)} = a(p)/g(p)$. Ezen kifejezésből kell meghatároznunk a még megmaradt két kritikus exponens, ν és η értékét. Hadd jegyezzük meg, hogy az így kapott $G(q)$ formát még Ornstein–Zernike-féle korrelációs függvény formának is nevezik a szakirodalomban. Tehát a Landau elméletben a párkorrelációs függvény Ornstein–Zernike-féle viselkedést mutat. Ezen megállapítás fizikai hátterére és konkrét jelentésére a későbbiekben visszatérünk.

8.3.4 Az η és ν kritikus exponensek levezetése

Kezdjük az elemzést az η kritikus exponenssel. A definíció szerint $T = T_c$–ben

$$G(r) \sim \frac{1}{r^{d-2+\eta}} \; . \tag{8.61}$$

Mi viszont a korrelációs függvényt a k Fourier transzformált térben ismerjük. Ezért az η értelmező képletét a k térbe kell használnunk. Ebből a célból, a 7.4 paragrafusban bemutatottakhoz hasonlóan kifejezzük $G(q)$–t a $G(r)$ segítségével:

$$G(q) = \int \frac{d^d r}{(2\pi)^d} \, G(r) e^{-iq\cdot r} \; . \tag{8.62}$$

Ezen összefüggés integrandusába az η definíciós képletét behelyettesítve:

$$\begin{aligned} G(q) &\sim \int \frac{r^{d-1}dr}{r^{d-2+\eta}} \, e^{-iq\cdot r} = \int \frac{dr}{r^{-1+\eta}} \, e^{-iq\cdot r} \\ &= \int r^{1-\eta} dr \; e^{-iq\cdot r} \sim \int \frac{x^{1-\eta} dx e^{-ix}}{q^{2-\eta}} \sim \frac{1}{q^{2-\eta}} \end{aligned} \tag{8.63}$$

ahol, az

$$x = qr, \qquad r = \frac{x}{q} \tag{8.64}$$

változócseréket használtuk fel. Tehát a k–térben, η definíciója:

$$G(q) \sim \frac{1}{q^{2-\eta}}, \quad \text{ha} \quad T = T_c . \tag{8.65}$$

A mi esetünkben viszont a levezetett korrelációs függvény $T = T_c$–ben

$$G(q) \sim \frac{1}{q^2} \; , \tag{8.66}$$

tehát a Landau-elméletben

$$\eta = 0 \; . \tag{8.67}$$

A levezetett eredményt még Ginzburg-Landau-féle eredménynek is szokás nevezni. Ezen elnevezés onnan ered, hogy a Φ, Δ szerinti sorbafejtésének a Landau-elméletben alkalmazott formáját szokásos Ginzburg-Landau formaként emlegetni.

Láthatjuk tehát, hogy az η tulajdonképpen az Orstein-Zernike-féle (avagy Ginzburg–Landau-féle) viselkedéstől való eltérést jelöli. Tulajdonképpen ez a magyarázata az $\eta' = d - 2 + \eta$ változócserének ezen kritikus exponens definiálásakor.

Folytassuk az elemzést ν levezetésével. Ez esetben a meghatározás a $T > T_c$–re vonatkozó $G(r) \sim e^{-\frac{r}{\xi}}$ viselkedés alapján történik, ahol $\xi \sim t^{-\nu}$.

A mi konkrét esetünkben,

$$G(q) \sim \frac{1}{q^2 + x^2(t)} , \tag{8.68}$$

ahol, az $x(t)$ változóra fennálló összefüggésünk:

$$x(t) \sim \sqrt{T - T_c} \sim t^{1/2} . \tag{8.69}$$

Ezúttal $G(q)$–t transzformálva a direkt térbe, és figyelembe véve, hogy[30]:

$$\int \frac{e^{iqr}}{q^2 + x^2} \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \sim \frac{1}{r^{(d-1)/2}} e^{-xr} , \tag{8.70}$$

a következő összefüggés adódik:

$$G(r) \sim e^{-t^{1/2} r} = e^{-\frac{r}{\xi}} . \tag{8.71}$$

Tehát:

$$\xi \sim t^{-1/2} , \tag{8.72}$$

azaz

$$\nu = \frac{1}{2} . \tag{8.73}$$

A levezetésben szereplő Fourier transzformáltat részletesen Fisher tanulmányozta. A végeredmény érzékeny módon függ a levezetésnél használt határátmenetek végrehajtási sorrendjétől. A bemutatott eredmény rigurózusan, rögzített $T > T_c$–re vett $r \to \infty$ határesetben helytálló (lásd [4]).

Megvan tehát a másik két keresett kritikus exponensünk is:

$$\eta = 0 , \quad \nu = \frac{1}{2} . \tag{8.74}$$

Végeredményként, ellenőrizni szeretnénk a második csoport skálatörvényeit a levezetett kritikus exponensek segítségével.

$$\left. \begin{array}{lcl} (2-\eta)\nu = \gamma & \to & (2-0)\frac{1}{2} = 1; \\ 2 - \alpha = \nu d & \to & 2 - 0 = \frac{4}{2}; \\ 2 - \eta = d\frac{\delta - 1}{\delta + 1} & \to & 2 - 0 = 4\frac{3-1}{3+1}; \end{array} \right\} \text{ helyes ha d=4;} \tag{8.75}$$

Megfigyelhető, hogy a Fisher-összefüggés problémamentesen fennáll, de a d dimenziót tartalmazó egyenlőségek[31] $d = 4$–ben teljesülnek. Mindezek szerint érzékelhető,

[30] Ezen összefüggés csupán $t > 0$-ra igaz, lásd [4]

[31] azaz a ‚hiperskálatörvények'

hogy a kritikus exponensek szempontjából a Landau elmélet valójában $d = 4$ dimenzióban válik helyessé. Az eredmény jelentésének megértése céljából emlékeztetünk, hogy a korrelációk tanulmányozásánál láttuk: $d = 4$–től kezdődőleg végtelen hatótávolságú korrelációk (tehát hosszútávú rendezettség) könnyedén létrejöhet és a fluktuációk hatása jelentéktelenné válik. Ezáltal a $d = 4$ dimenzió egy olyan határdimenziót jelöl[32], mely felett a fluktuációs hatásokat elhanyagoló Landau elmélet (a hiperskála törvények kielégitetlenségétől eltekintve) elvileg helytálló. A viselkedés a felső kritikus dimenzió fogalmával függ össze[33], és a Ginzburg kritérium tanulmányozásánál térünk vissza rá.

8.4 A Landau elmélet jellemzése

A Landau elmélet, mint a korrelációs és fluktuációs hatásokat elhanyagoló teória, egy általános molekuláris-tér típusú elmélet. Így anélkül hogy a rendszer milyenségét explicitté tenné (Δ konkrét jelentésének értelmezése itt nem szükséges), ezen típusú elméletek általános jellemzője. Melyek ezen elmélet alapvető jellemzői, azt a következőkben foglaljuk össze:

1. Az első lényegi jellemző a fluktuációk elhanyagolhatóan kis értékének feltételezése. Az alapgondolat szerint, kell léteznie egy $\Delta(x)$ rendparaméternek a szimmetriasértés miatt, anélkül hogy ezen rendparaméter különlegesebb inhomogenitásokkal rendelkezne, és a $\delta\Delta(x)$ fluktuációk elenyészően kicsik, szerepük lényegtelen. A rendszer Φ termodinamikai potenciálja sorbafejthető ilyen körülmények között a fázisátalakulási görbe mentén, továbbá a rendezett fázisban Δ folytonosan felnő zérótól különböző értékekre (így a fázisátalakulásnak folytonosnak kell lenni). Tehát a Landau elmélet T_c közelében van definiálva, de úgy, hogy a fluktuációkat kicsinek tekinti. Ez viszont azt jelenti, hogy az elmélet T_c közelében, de nem T_c közvetlen közelében (ahol a fluktuációk végtelen nagyok), áll fenn[34].

2. Az elméletnek egy lényeges feltevése (mely a szimmetriasértés tényéből nem következik), azon álláspont, miszerint a Φ rendparaméter szerinti sorbafejtésének koefficienseit és magát $\Delta(x)$–et is regulárisnak függvénynek tekinti. Ez kezdettől fogva nem helytálló, mert tudjuk például, hogy Φ másodrendű deriváltjai között vannak olyanok, melyek divergálnak T_c–ben. Továbbá az

[32] Mindez a (??) összefüggés fennállása mellett teljesül, mely esetben a $d = 4$ a felső kritikus dimenziót jelöli. Megjegyzendő azonban, nem szükségszerű teljesen általánosan, hogy a felső kritikus dimenzió 4 legyen. Továbbmenőleg, azt a tényt miszerint a hiperskálatörvények csak $d = 4$-ben teljesülnek a Landau elmélet keretei között úgy is felfoghatjuk, hogy valójában a Landau-elméletben a skálainvariancia nem kielégitett, [5]

[33] Lásd például [6]

[34] Mindennek ellenére, a felső kritikus dimenzió feletti dimenziókban a fluktuációs hatások kis értéke miatt az elmélet elvileg használható

ismert egzakt megoldások (pl. d=2 Ising modell) mutatják, hogy a sorfejtési koefficiensek $(T-T_c)$ szerint divergálhatnak. Példaként megemlíthető, a $d=2$ dimenziós Ising modellben megjelenő $\ln(T-T_c)$ típusú viselkedés T_c körül, $T>T_c$-re

$$\Phi = \Phi_0 + a_1(T-T_c) + a_2(T-T_c)^2 \ln(T-T_c) + \dots , \tag{8.76}$$

mely nyilvánvalóan mutatja, hogy a Landau-féle gondolatmenet legnagyobb pontatlansága innen fakad.

3. Megfigyelhető, hogy a kritikus exponensek kifejezéséhez az első csoport esetében Δ=konstans, a második csoportra vonatkozólag pedig $\Delta(x)$ az x függésének végül is kis mértékben lényeges hatása volt feltételezve. Mindennek ellenére, minden poziciófüggés a $\Delta(x)$–be van tömörítve. Annak érdekében, hogy ezen álláspont fizikai hátterét megértsük, gondoljuk most végig, hogyan is lehetséges az, hogy a $\delta\Delta(x)$ fluktuációk elhanyagolhatóak legyenek az említett körülmények között. Amint láttuk, a $\Delta(x)$ tulajdonképpen, a $\mathcal{H}$–ban szereplő X_i dinamikus változók (mágneses esetben $S(x_i)$ spinek) átlagolásából származik. De, hogy $\delta\Delta(x) \ll 1$ álljon fenn, ezen átlagolást mindig nagy tartományra kell elvégezni, ami méretében sokkal nagyobb kell legyen, mint a korrelációs hossz: $L >> \xi$. Ugyanis, ha valamilyen módon $L \ll \xi$ tartományra vett átlag adná a Δ értéket, akkor ténylegesen $\Delta(x)$ lokális jellemzőket is tükrözne, és így x függvényében vett fluktuációk is szerephez jutnának. Az a tény viszont, hogy Δ csak ξ–nél sokkal nagyobb tartományokra vett átlagokat érzékel a T_c közelében, ahol ξ divergál, gyakorlatilag azt jelenti, hogy a rendszerben kvalitatív változást előidéző faktort, csupán egy átlagolt teret érzékelő faktorként kezeljük, ami a molekuláris–tér elméletek lényege. A Landau-elmélet tehát egy konkrét rendszer jellemzők nélküli molekuláris–tér jellegű elmélet, mely egyik fő jellemzője azon tény, hogy az individuális változók (általánosan X_i, spinrendszerre konkretizálva S_i) egymásközti direkt hatását visszavezeti egy globálisan létrehozott molekuláris tér érzékelésére. Ezen molekuláris tér egy, az egész rendszerre kiátlagolt tér, s melyben ezáltal, minden komponens egyenlő mértékben ad járulékot. Ezáltal vesztődik el teljes egészében a fluktuációk szerepe az ilyen leírásokban[35].

4. Skálainvariancia a Landau elméletre nem áll fenn[36]. A levezetett kritikus indexek nem dimenziófüggőek, így a második csoport skálatörvényei (melyekben a d dimenzió is szerepel), nem állnak fenn, csak $d=4$ dimenzióban. A kritikus exponensek $d=4$–ben így helyes eredményeket adnak molekuláris térelmélet (MTE) szinten. De ez nem azt jelenti, hogy az MTE egzakt $d=4$–ben. Csak

[35] A bemutatott gondolatmenet rigurozus matematikai leírása [7]-ban megtalálható

[36] Lásd például [5]

azt jelenti, hogy T_c közelében, $d = 4$–ben (és ezen dimenzió fölött) ad elfogadható eredményeket egy MTE típusú elmélet[37]. Majd meglátjuk, hogy a Wilson féle ε sorbafejtés erre a megállapításra alapszik, ahol $\varepsilon = 4 - d$, és ε kis mennyiségként kezelt. Ebből az is következik, hogy minél távolabb vagyunk (a $d < 4$ tartományban) a $d = 4$ dimenziótól, annál rosszabbak a Landau–elméletből kapott eredmények. A $d = 2$ dimenzióban egészen rosszak, $d = 3$–ban pedig „elfogadhatóaknak" nevezhetőek (habár az egzakt kritikus exponensek szempontjából a Landau-elmélet $d = 3$ eredményei nem kecsegtetőek). Ami az egzaktságot illeti, említettük, hogy lokalizált szabadságfokok esetén (tehát nem itineráns rendszerekre) a molekuláris–tér jellegű elmélet, $d = \infty$ dimenzióban válik egzaktá. Mindez a végtelen sok szomszéd miatt van így, melyek egy csomópontra vett hatása teljesen kiátlagolja a lokális fluktuációkat. Ezen kérdésre később még visszatérünk.

A későbbiekben, a Ginzburg–kritérium elemzésekor látni fogjuk, hogy a $d = 4$ dimenzió kitüntetettsége, a levezetett kritikus exponensek konkrét értékeinek a következménye.

8.5 A Landau elmélet további alkalmazásai

Az eddigiek alapján képet alkothattunk a Landau-elméletről a folytonos fázisátalakulási görbék mentén nyujtott leírás nyomán. A Landau elmélet alkalmazása azonban nemcsak ezen eset tanulmányozására korlátozódik. A következőkben néhány speciálisabb alkalmazás bemutatására kerül sor.

8.5.1 Nem azonosan zéró harmadrendű tagok a termodinamikai potenciálban

Ha Φ-nek Δ szerinti sorbafejtésében a harmadrendű tagok nem azonosan nullák, akkor ezen eset elbírálása a következőképpen történik: A szimmetriameggondolásokból kiindulva, a Δ^3 tag létezése a harmadrendű invariánsok képzésének lehetőségéhez kapcsolódik elsősorban. Igaz, hogy a legtöbb esetben a $\mathcal{G}$ csoport adott irreducibilis ábrázolásai szerint transzformálódó mennyiségekből nem lehet harmadrendű invariánsokat képezni, és ez esetben a Δ^3 tag koefficiense azonosan zéró. De ez a megállapítás nem általános érvényű. Például tércsoportok irreducibilis ábrázolásainál több esetben lehet egy harmadrendű invariánst képezni. Így nem érdektelen tanulmányozni azon lehetőségeket, amelyekben a harmadrendű tagok nem azonosan nullák. Ez esetben viszont Φ formája T_c mentén a következő képpen alakul:

$$\Phi = \Phi_0 + a(p,T)\Delta^2 + c(p,T)\Delta^3 + b(p,T)\Delta^4 + \ldots \tag{8.77}$$

[37]Megemlítendő például, hogy a Landau-elmélet által a (**??**) keretei között adott eredmények értékeihez pl. $d = 4$ dimenzióban t-ben logaritmikus korrekciók járulnak, lásd [8]. Ezen tulajdonság a felső kritikus dimenzió egy sajátossága. Megemlitendő hogy a logaritmikus járulékok a kritikus exponensek értékeit nem érintik [9]

Amint láttuk, a fázisátalakulás vonalán (ha az folytonos fázisátmenet)

$$a(p, T_c) = 0. \tag{8.78}$$

De tudjuk, hogy a folytonos fázisátalakulás során keletkezett rendezett fázis $\Delta \neq 0$–ra fennálló stabilitási feltétele:

$$c(p, T) = 0. \tag{8.79}$$

De ez már két egyenlet, mely megoldásai (p, T) síkban izolált pontok. Ezen pontok, amint már említettük, előfordulhatnak például elsőrendű fázisátalakulási vonalak metszésekor. Ezen esetekben a ,,folytonos" állapotváltozás csak egyetlen pontra jellemző tulajdonság.

8.5.2 A folytonos fázisátalakulás kritikus pontja

Amint ismerjük már, Φ sorfejtésében általában a stabilitás miatt a harmadrendű tag koefficiense azonosan zéró ($c(p, T) \equiv 0$). A harmadrendű tag hiányában azonban, amint láttuk a $b(p, T) > 0$ feltételnek kell teljesülnie. Ha most a (p, T) síkban a fázisátalakulás görbéjén végigmegyünk, akkor általában, végig a görbén az $a(p, T) = 0$; $b(p, T) > 0$ feltételek teljesülnek. Megtörténhet azonban bizonyos esetekben, hogy (p, T) változásával egy adott pontban $b(p, T)$ előjelet vált. Abban a pontban, ahol $b(p, T) = 0$, a (p, T) síkban a másodrendű fázisátalakulási görbe elsőrendűbe megy át. (Ezen lehetőséget említettük már: ezen pont a másodrendű fázisátalakulási görbe kritikus pontja, amit a szakirodalom trikritikus pontnak is nevez).

Vezessük le ez esetben a kritikus exponenseket. Ekkor, a termodinamikai potenciál kifejezésére a következő összefüggést használjuk:

$$\Phi = \Phi_0 + a\Delta^2 + b\Delta^4 + e\Delta^5 + f\Delta^6; \tag{8.80}$$

A Φ ezen egyenletben adott alakját tehát, azon pont körül vizsgáljuk, melyben a $b(p, T)$ együttható zéróvá válik. Ekkor igazolható, hogy a stabilitás érdekében $e \equiv 0$, és $f > 0$ összefüggéseknek kell fennállniuk.

Ezen állítás igazolása céljából, felírjuk a stabilitási feltételeket:

$$\Phi' = 2a\Delta + 4b\Delta^3 + 5e\Delta^4 + 6f\Delta^5 = \Delta(2a + 4b\Delta^2 + 5e\Delta^3 + 6f\Delta^4) = 0, \tag{8.81}$$

$$\Phi'' = 2a + 12b\Delta^2 + 20e\Delta^3 + 30f\Delta^4 > 0. \tag{8.82}$$

A második összefüggésből, az első egyenlet zárójelét kivonva:

$$F(\Delta) = 8b + 15e\Delta + 24f\Delta^2 > 0 \tag{8.83}$$

adódik. Ezen feltétel teljesülésének ellenőrzése céljából, fejezzük ki $F(\Delta) = 0$ gyökeit. A kapott eredmény:

$$\Delta_{1,2} = \frac{1}{48f}[-15e \pm \sqrt{(15e)^2 - 32 \cdot 24bf}\,] \,. \tag{8.84}$$

Azt tudjuk, hogy a tanulmányozott esetben, a rendezett fázisban, $b < 0$. Ekkor viszont ha $f > 0$, akkor, $\Delta_1 > 0$, $\Delta_2 < 0$ adódik, és így, létezik egy tartomány a két gyök érték között melyre $\Phi'' < 0$, azaz a rendezett fázis instabil. Hogy ez ne állhasson fenn, $e \equiv 0$ feltételezés szükséges. Megjegyzendő, hogy az $f > 0$ feltétel, az $F(\Delta) > 0$ szükségességéből ered, nagyobb Δ értékekre, mert ez esetben, az f koefficiensű tag adja a vezető járulékot[38].

Vezessük le mindezek után a kritikus exponenseket.

Kezdjük a tanulmányozást a β értékével. Ez esetben a $\Phi' = 0$ kondicióból:

$$2a + 4b\Delta^2 + 6f\Delta^4 = 0 \tag{8.85}$$

adódik. Ezen egyenlet gyökei:

$$\Delta_{1,2}^2 = \frac{-2b \pm \sqrt{4b^2 - 12fa}}{6f} = \frac{-b \pm \sqrt{b^2 - 3fa}}{3f} \tag{8.86}$$

A fázisátalakulás után $b < 0, a < 0$ lesz, továbbá a Δ rendparamétert valósnak tételezzük fel. Így a fizikai megoldásunk:

$$\Delta = \left[\frac{1}{3f}[-b + \sqrt{b^2 - 3fa}]\right]^{1/2} . \tag{8.87}$$

Most viszont a b koefficiens is zéróvá válik T_c–ben. Ez viszont azt jelenti, hogy a $b = b(t)$ redukált hőmérséklet $t = (T - T_c)/T_c$ szerinti sorfejtésében, az első tag lineáris t–ben. Ekkor viszont a T_c körüli viselkedés szempontjából

$$b \sim (T - T_c) \sim t \ , \quad a \sim (T - T_c) \sim t \ , \quad f > 0 \ . \tag{8.88}$$

Ekkor a kapott összefüggésből a t–t kiemelve $T < T_c$–re:

$$\Delta = \left(\frac{|t|}{3f}\right)^{1/4} [\sqrt{3f + |t|} + |t|]^{1/2} \ . \tag{8.89}$$

Így tehát $t \to 0$ határesetben

$$\Delta \sim |t|^{1/4} \ , \tag{8.90}$$

azaz

$$\beta = 1/4 \tag{8.91}$$

[38]Látszatra a (**??**) egyenletnek $b < 0, f > 0$ és $e = 0$ mellett is két gyöke marad. De figyelembe kell itt venni hogy a b együttható is t függő, mégpedig $b \sim t$ formában, továbbá $\Delta^2 \sim t^{1/2}$ áll fenn közvetlenül T_c közelében. Bevezetve a $\Delta = \Delta_0 |t|^{1/4}, b = b_0 t; b_0, \Delta_0 > 0$ jelöléseket (melyek $t \to 0$-ra helytállóak, lásd a (**??**,**??**) egyenlőségeket), az (**??**) összefüggés $t \to 0$ esetben $24f\Delta_0 + 8b_0|t|^{1/2} > 0$ feltételt adja, ami $f > 0$ feltétellel helytálló.

Látható, hogy a probléma nem triviális, mert a kapott kritikus exponens nem egyezik a tradicionális MTE jellegű $\beta = 1/2$ értékkel.

Folytassuk a gondolatmenetet γ kiszámításával. Ez esetben $h \neq 0$ feltételezéssel:

$$\Phi' = 2a\Delta + 4b\Delta^3 + 6f\Delta^5 - h = 0 \ . \tag{8.92}$$

Mindezek után h szerint deriválva:

$$2a\chi + 12b\Delta^2\chi + 30f\Delta^4\chi = 1 \tag{8.93}$$

adódik. Ezen összefüggésből a szuszceptibilitás kifejezhető. Mivel a vezető t függés az $a \sim t$–ben van, kapjuk:

$$\chi \sim \frac{1}{a} = t^{-1}; \tag{8.94}$$

Mivel $\chi \sim t^{-\gamma}$, következik:

$$\gamma = 1 \tag{8.95}$$

Látható, hogy γ ez esetben is megtartja a tradicionális Landau-elméletbeli értékét.

Tanulmányozzuk a következőkben a δ kritikus exponenst. Ez esetben is a kiindulópont $\Phi' = 0$, mely alapján:

$$2a\Delta + 4b\Delta^3 + 6f\Delta^5 = h \ . \tag{8.96}$$

Ekkor azonban $T = T_c$–ben kell dolgoznunk, melyre $a = b = 0$. Így viszont az egyenletünk:

$$6f\Delta^5 = h \ , \tag{8.97}$$

amiből

$$\Delta \sim h^{1/5} \ , \tag{8.98}$$

adódik. Definició szerint $\Delta \sim h^{1/\delta}$, tehát:

$$\delta = 5 \ . \tag{8.99}$$

Ezen érték újból nem triviális, és nem egyezik a hagyományos Landau-elméletbeli $\delta = 3$ eredménnyel.

A következő kritikus exponens amit tanulmányozni fogunk az α. Ezen exponenst[39] az entrópia kifejezéséből fogjuk levezetni, mely

$$S = -\frac{\partial \Phi}{\partial T} \tag{8.100}$$

[39] Az itt bemutatott gondolatmenet csupán $T < T_c$ esetre áll fenn.

útján származtatható. Mivel

$$a \sim (T - T_c), \quad b \sim (T - T_c), \quad \Delta \sim |T - T_c|^{1/4} , \tag{8.101}$$

a Φ termodinamikai potenciálban nyert t függés:

$$\Phi = \Phi_0 + K_1(T_c - T)^{3/2} + \mathcal{O}(|t|^2) , \tag{8.102}$$

ahol a K_1 koefficiensű tag az $a\Delta^2$–ből, mig a t^2–es tag a $b\Delta^2$ járulékból származik. Mivel $t \to 0$, mindig a legkisebb t hatvány játsza a vezető szerepet, amely a mi esetünkben $3/2$. Tehát:

$$S = \frac{3}{2}K_1(T_c - T)^{1/2} \tag{8.103}$$

De mivel $C \sim \frac{\partial S}{\partial T}$, következik

$$C \sim |t|^{-1/2} . \tag{8.104}$$

De az α definiciója szerint $C \sim |t|^{-\alpha}$, tehát:

$$\alpha = \frac{1}{2} . \tag{8.105}$$

Látható, hogy ezen érték sem tradicionális eredmény.

A korrelációs függvényhez csatolt kritikus exponensek maradtak még, ν és μ. A korrelációs viselkedés azonban az előbbihez képest semmiben sem változik meg. A Landau elméletben, $G(r)$ viselkedését gyakorlatilag $a(p,T)$ határozza meg, így a $\nu = \frac{1}{2}$, $\eta = 0$ értékek továbbra is fennmaradnak.

Mindezek után tehát a folytonos fázisátalakulás kritikus pontja körüli viselkedésből levezetett kritikus exponens értékek a következők:

$$\alpha = \frac{1}{2},\ \beta = \frac{1}{4},\ \gamma = 1,\ \delta = 5,\ \nu = \frac{1}{2},\ \eta = 0. \tag{8.106}$$

Most felmerül azon kérdés, hogy miért különlegesen érdekes ezen eset tanulmányozása. A válasz a következőkben rejlik: Az első csoportra vonatkozó skálatörvények

$$\gamma = \beta(\delta - 1) , \quad \alpha + \beta(\delta + 1) = 2 , \quad \alpha + 2\beta + \gamma = 2 , \tag{8.107}$$

továbbra is automatikusan fennállnak, jelezvén, hogy a leírás konzisztens. A Fisher féle egyenlőség is fennáll. A korrelációs függvénnyel kapcsolatos skálatörvények viszont, melyekben explicit szerepel a d dimenzió, ez esetben azonban nem $d = 4$, hanem $d = 3$ értékre teljesülnek. Így arra a fontos következtetésre jutunk, hogy a Landau-elmélet a folytonos fázisátalakulások „kritikus pontja" közelében sokkal jobban működik. Persze, a fluktuációs korrekciók ekkor is szerepet játszanak az elméleti leírásban, de ez esetben a közelítés sokkal erősebb, mint más körülmények között.

8.5.3 A hatodrendű tagra épített leírás

Az eddigiekből észrevehettük, hogy a Landau-elmélet következményei a levezetett kritikus exponensek szempontjából a felsorolt és az elemzésnél használt fizikai feltételezések érzékeny függvényei. Ezért megpróbálták a következtetéseket javítani, például úgy, hogy $b = 0$, $f > 0$ feltételezést használtak fel az $a(p,T)$ koefficiens standard tulajdonságainak megtartása mellett folytonos fázisátalakulások esetében. Ekkor:

$$\Phi = \Phi_0 + a\Delta^2 + f\Delta^6 \; . \tag{8.108}$$

Az ez esetben levezethető kritikus exponens értékek a következők[40]:

$$\alpha = 0 \; , \quad \beta = \frac{1}{4} \; , \quad \gamma = 1 \; , \quad \delta = 5 \; , \quad \nu = \frac{1}{2} \; , \quad \eta = 0 \; . \tag{8.109}$$

A cél ezen gondolatmenetben az volt, hogy összeegyeztessék az elmélet folytonos fázisátalakulások kritikus pontja körüli javított viselkedést az általános következtetésekkel. Megfigyelhető viszont, hogy ekkor például az $\alpha+2\beta+\gamma = 2$ egyenlőség nem áll fenn, így ezen eredmény nem konzisztens Φ–nek T_c közelében vett átalánosított homogenitásával, azaz ekkor maga a leírás belső ellentmondásokat tartalmaz, termodinamikailag inkonszisztens [10]. Így, az identikusan zéró negyedrendű tag lehetőségét, a belső ellentmondásmentesség miatt, mindig ki kell zárnunk.

A Landau-típusú elméletek alkalmazási területét pontosan megszabó Ginsburg–kritériummal a molekuláris–tér elméletek alapos tanulmányozása után foglalkozunk majd.

8.6 Szakirodalmi jegyzék 8.

[1] L. D. Landau, E. M. Lifsic, Elméleti Fizika V., *Statisztikus Fizika I.*, Tankönyvkiadó, Budapest, 1981, 526. oldal 15. lábjegyzék.

[2] N. Goldenfeld, Frontiers in Physics Vol. 85, *Lectures on Phase Transitions and the Renormalization Group*, Addison-Wesley, 1992, 146 oldal.

[3] E. Stanley, *Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena*, Clarendon Press, Oxford, 1971, Appendix A, 262 oldal.

[40] Lásd például [10]

[4] E. Stanley, *Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena*, Clarendon Press, Oxford, 1971, 106 oldal.

[5] L. D. Landau, E. M. Lifsic, Elméleti Fizika V., *Statisztikus Fizika I.*, Tankönyvkiadó, Budapest, 1981, 553. oldal 47. lábjegyzék.

[6] E. H. Hauge, *Go Critical*, Norvegian University of Science and Technology NTNU Press, 1997, pg. 47.

[7] N. Goldenfeld, Frontiers in Physics Vol. 85, *Lectures on Phase Transitions and the Renormalization Group*, Addison-Wesley, 1992, 5.6 paragrafus, 147-154 oldal.

[8] D. J. Amit, *Field Theory, the Renormalization Group, and Critical Phenomena*, International Series in Pure and Applied Physics, McGraw-Hill Inc., 1978, 239 oldal.

[9] L. D. Landau, E. M. Lifsic, Elméleti Fizika V., *Statisztikus Fizika I.*, Tankönyvkiadó, Budapest, 1981, 561 oldal.

[10] E. Stanley, *Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena*, Clarendon Press, Oxford, 1971, 173 oldal.

9 Klasszikus molekuláris–tér elmélet: Lokalizált mágneses momentumok esete.

Eddig általános jelleggel próbáltuk a fázisátalakulásokat tárgyalni, úgy jutottunk el a Landau–féle, a konkrét rendszer jellemzőit nem tartalmazó molekuláris–tér jellegű leíráshoz. Láttuk, hogy a korrelációs hatásoktól ezen modell lényegében eltekint. Továbbá, ez az első olyan eset, melyben, bizonyos mértékben, konkrét jellemzőktől független következtetésekkel találkoztunk: Δ konkrét megadása nélkül, a modell mindig ugyanazon feltételezések mellett, ugyanazon kritikus exponenseket adja vissza. Az ezen megállapításban rejlő fizikai tartalom felderítése céljából az elkövetkezőkben konkretizálni fogjuk a leírást ismertebb és konkrét modellek esetében. Nyomon követjük majd, hogy mit is jelent a molekuláris–tér közelítés közvetlen és konkrét esetekben. Az elemzést a lokalizált spinrendszerek tanulmányozásával kezdjük.

9.1 A lokalizált spinek közötti kölcsönhatás

Kezdetben a kiinduló Hamilton operátorra vonatkozó ismereteket foglaljuk össze.

9.1.1 A rendszert jellemző Hamilton-operátor

Legyen egy lokalizált spinekből álló rendszer. Láttuk már, hogy az ezen rendszert leíró Hamilton operátor:

$$H = -\sum_{\langle ij \rangle}^{N} J_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - \bar{\mu} \vec{H} \cdot \sum_{i=1}^{N} \vec{S}_i \tag{9.1}$$

Az első tag a lokalizált mágneses momentumok közti *Heisenberg*-féle kölcsönhatás nevet viseli, melyet sokszor kicserélődési kölcsönhatásként is emlegeti a szakirodalom a mágneses rendszerek esetében. Az összegzés itt az egymás melletti csomópontokra vonatkozik, ezt jelzi az összeg-jel alatti $< i, j >$ rövidítés. A csatolási állandó $J_{ij} > 0$ értéke esetében, $\vec{S}_i \parallel \vec{S}_j$ szomszédos spin állapot csökkenti H értékét, így ezt ferromágneses esetnek nevezzük. Ellenkező esetben, ha $J_{ij} < 0$, az antiferromágneses esetről beszélünk, ugyanis ekkor $\vec{S}_i \parallel (-\vec{S}_j)$ antiparalel szomszédos spin állapotok csökkentik H értékét. Ferro- és antiferromágneses esetben a lokális, energetikailag kedvező spin állapotok egész rendszerre való kiterjesztésénél beszélünk ferromágneses ($|F>$) és Néel ($|\text{Néel}>$) állapotokról (a rendszer globális hullámfüggvénye szempontjából). Az $|F>$ állapotban minden spin párhuzamos és ugyanazon irányítottságú. Általában ezen állapot jelenti az alapállapotot a ,,ferro" esetben. A $|\text{Néel}>$ állapotban minden spin antiparalel. Ezen állapot az ,,antiferro" eset tanulmányozásánál használatos, de nem mindig jelent alapállapotot.

A Hamilton-operátor második tagja a *Zeeman*-tag nevet viseli. Ezen tag írja le a külső mágneses térrel (H) való kölcsönhatást. Itt

$$\bar{\mu} = g\mu_B \ , \tag{9.2}$$

ahol g a Landé faktor, μ_B pedig a *Bohr*-magneton.

Tudvalevő, hogy rögzített S spinnel rendelkező állapot a kvantálási tengelyre eső vetület szempontjából $2S+1$-szer degenerált[41], S^z értékei pedig $-S, -S+1, \ldots + S$ értékek lehetnek, továbbá S^2 sajátértéke $S(S+1)$ (mindez a kvantum spin esetben, $\hbar = 1$ egységekben).

Egy adott spinhez rendelt $\vec{\mu}$ mágneses momentum $\bar{\mu}\vec{S}$. Az egész rendszer mágneses momentuma pedig N spin esetében:

$$\vec{M} = N\bar{\mu}\langle \vec{S}_i \rangle = \bar{\mu} \sum_{i=1}^{N} \langle \vec{S}_i \rangle \ . \tag{9.3}$$

Az átlagolás $\langle \ldots \rangle$ itt a termodinamikai értelemben vett átlagolást jelenti.

9.1.2 A Heisenberg-féle kölcsönhatás

A Heisenberg-féle kölcsönhatás eredetét illetőleg megfigyelhető, hogy a J_{ij} csatolási állandók egy egyszerű elektrosztatikus Coulomb-jellegű kölcsönhatásból származnak, amelyhez a Pauli elv (és ezáltal kvantum jellemzők) hozzáadódnak.

Az állítás igazolása céljából, tekintsük az i és j szomszédos és rögzítettnek vett csomópontok körül keringő két elektront (a spin, amint tudjuk, ez esetben $S = 1/2$). A két elektron, a és b, Hamilton operátora[42]:

$$H = \underbrace{\left(-\frac{\nabla_a^2}{2m} - \frac{\nabla_b^2}{2m} \right)}_{H_0} + \underbrace{\frac{e^2}{|r_a - r_b|}}_{H_1} \ . \tag{9.4}$$

Látható, hogy

$$H = H_0 + H_1 \ , \tag{9.5}$$

ahol H_0 jelöli a kinetikus energia tagot, és H_1 a két elektron közötti Coulomb-féle elektrosztatikus kölcsönhatást. A csomópontok jelenlétét az (**??**) kifejezésben csupán a nemkölcsönható elektronállapotok leírásában vesszük figyelembe. Így az egymással nem kölcsönható elektronok külön–külön vett és térkoordinátáktól függő hullámfüggvényei $\psi_i(r_a)$, illetve $\psi_j(r_b)$, ahol az (i,j) indexek a csomópontokat jelölik, az (a,b) pedig a rajtuk tartozkodó elektronokat. Az individuális elektron állapotokhoz tartozó energia sajátértékeket ϵ–nak tekintjük mindkét esetben. A jellemzés

[41] Itt eltekíntünk olyan anizotropikus hatásoktól melyek ezen degenerációt felbonthatják

[42] A csomóponti iontörzzsel való kölcsönhatástól itt eltekíntünk és csupán a nemkölcsönható elektronállapotokban vesszük figyelembe első közelítésben.

továbbá nem relativisztikus, a pálya-impulzusmomentumot pedig az alapállapotban zérónak tekintjük.

A két kölcsönható elektronból álló rendszer hullámfüggvénye (fermionokról lévén szó) antiszimmetrikus kell legyen. A hullámfüggvénynek viszont van r és spin-függő része is, tehát:

$$\Psi = \psi(r_a, r_b)\eta(s_a, s_b) , \tag{9.6}$$

ahol s_a és s_b a két elektron spinvetületeinek lehetséges két értékét jelölik.

A Ψ globális antiszimmetrikusságának tanulmányozása érdekében, elemeznünk kell mind a spin-függő, mind az r függő részt, külön–külön. A tanulmányozást a spinfüggő résszel kezdjük.

Lineárisan független antiszimmetrikus spin rész csak egyetlen egy képezhető:

$$\eta_{ant}(s_a, s_b) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\eta_a(+)\eta_b(-) - \eta_a(-)\eta_b(+)\right) , \tag{9.7}$$

ahol $(+),(-)$ jelölik a két lehetséges spin-vetület értéket, és η_i, $i = a, b$ az egy-elektron spin-állapot hullámfüggvényeit. A teljes spin ez esetben $S = 0$, ami szinglet állapotnak felel meg, mert multiplicitása egy $(2S + 1 = 1)$.

Továbbmenőleg, lineárisan független szimmetrikus spin rész viszont három képezhető:

$$\eta^1_{sz}(s_a, s_b) = \eta_a(+)\eta_b(+) , \tag{9.8}$$

$$\eta^2_{sz}(s_a, s_b) = \eta_a(-)\eta_b(-) , \tag{9.9}$$

$$\eta^3_{sz}(s_a, s_b) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\eta_a(+)\eta_b(-) + \eta_a(-)\eta_b(+)\right) . \tag{9.10}$$

Ez esetben a teljes spin $S = 1$, és mivel a multiplicitás $2S + 1 = 3$, triplet állapotról van szó.

Ami a koordináta-függő részt illeti, egy-egy lineárisan független szimmetrikus és antiszimmetrikus hullámfüggvény képezhető. Ezek formája a következő:

$$\psi_{ant}(r_a, r_b) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\psi_i(a)\psi_j(b) - \psi_i(b)\psi_j(a)\right) , \tag{9.11}$$

$$\psi_{sz}(r_a, r_b) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\psi_i(a)\psi_j(b) + \psi_i(b)\psi_j(a)\right) . \tag{9.12}$$

A Ψ hullámfüggvény felépítésekor, a teljes antiszimmetriát mindig szem előtt kell tartanunk. Így szimmetrikus r-függő rész esetében antiszimmetrikus spin-függřészt használhatunk csak fel, ekkor viszont a teljes spin $S = 0$, tehát szinglet állapotunk van. Jelöljük ezen teljes hullámfüggvényt Ψ_1–el:

$$\Psi_1 = \psi_{sz}(r_a, r_b) \cdot \eta_{ant}(s_a, s_b); \quad S = 0 . \tag{9.13}$$

Továbbmenőleg, antiszimmetrikus r-függő rész esetében csak szimmetrikus spin-függő részt használhatunk fel, de ekkor a teljes spin $S = 1$. Tehát ezen eset a triplet állapotnak felel meg, melyet Ψ_2–vel fogunk jelölni:

$$\Psi_2 = \psi_{ant}(r_a, r_b) \cdot \eta_{sz}(s_a, s_b); \quad S = 1\ . \tag{9.14}$$

A két hullámfüggvény a tanulmányozott Hamilton-operátor két egymásra ortogonális sajátfüggvénye. Fejezzük ki a következőkben a Ψ_1 és Ψ_2 állapotokhoz tartozó energiaértékeket. Ezen feladat a Hamilton operátor, Ψ_1 és Ψ_2 szerint vett várható értékének ($\langle H\rangle$) kiszámítására vezethető vissza. De H–ban explicit spin-függő tag nem szerepel, így a hullámfüggvény spin-függő része egyre való normáltsága miatt kiesik, és csupán az r függő rész nyomonkövetése fontos. Ekkor viszont, a jobb áttekinthetőség céljából érdemes a

$$|i, a : j, b >= \psi_i(a)\psi_j(b) \tag{9.15}$$

típusú jelölés bevezetése, mely segítségével, például, a Ψ_1–hez tartozó energiaérték formája a következő képpen alakul:

$$\begin{aligned} E_1 &= \langle\Psi_1|H|\Psi_1\rangle = \\ &= \frac{1}{2}\Big[\langle i,a;\underline{j,b|H_0|i,a;}j,b\rangle + \langle i,a;j,\underline{\underline{b|H_0|}}i,b;j,a\rangle + \\ &+ \langle i,b;\underline{j,a|H_0|i,b;}j,a\rangle + \langle i,b;j,\underline{\underline{a|H_0|}}i,a;j,b\rangle + \\ &+ \langle \underline{i,a};\underline{j,b}|\underline{H_1}|\underline{i,a};\underline{j,b}\rangle + \langle i,a;j,b|H_1|i,b;j,a\rangle + \\ &+ \langle \underline{i,b};\underline{j,a}|\underline{H_1}|\underline{i,b};\underline{j,a}\rangle + \langle i,b;j,a|H_1|i,a;j,b\rangle\Big] \end{aligned} \tag{9.16}$$

Az egyszer aláhúzott tagok mindegyike 2ϵ–t ad eredményül, a duplán aláhúzott tagok pedig zéróval egyenlőek (ezekben mindig van egy olyan tag, melyre a H_0 operátor egyik fele nem hat, és az ortogonalitás miatt zérót kapunk eredményül). A szaggatott vonallal aláhúzott tagok:

$$\int |\psi_i(r_a)|^2 \frac{e^2}{|r_a - r_b|}\, |\psi_j(r_b)|^2 d\tau_{a,b} = C_{ij} \tag{9.17}$$

formájúak. Ezen tagok, az i és j csomópontokon lévő elektronok közötti Coulomb kölcsönhatást fejezik ki. Végül a megmaradt két tagban az elektronok közti Coulomb kölcsönhatás van leírva, de úgy, hogy közben a két elektron, az i és j csomópontok között ,,kicserélődik":

$$\int \psi_i^*(r_a)\psi_j^*(r_b)\frac{e^2}{|r_a - r_b|}\, \psi_i(r_b)\psi_j(r_a) d\tau_{a,b} = \overline{J}_{ij} \tag{9.18}$$

Ez a tag ,,kicserélődési" kölcsönhatás néven ismeretes. Így az $S = 0$ állapot energiája:

$$E_1 = 2\epsilon + C_{ij} + \overline{J}_{ij}\ ; \quad (S = 0). \tag{9.19}$$

Hasonlóan eljárva, a triplet állapot esetében, a $E_2 = \langle\Psi_2|H|\Psi_2\rangle$ kiszámítása szükséges. Ekkor az E_1–ben megjelenő matrixelemek második oszlopa negatív előjellel szerepel, és így a triplet állapot energiája:

$$E_2 = 2\epsilon + C_{ij} - \overline{J}_{ij} \; ; \quad (S = 1). \tag{9.20}$$

Heisenberg ötletéből kiindulva, az $E_{1,2}$ közösen felírható

$$E(\vec{S}_1, \vec{S}_2) = 2\epsilon + C_{i,j} + \overline{J}_{i,j} F(\vec{S}_1, \vec{S}_2) \tag{9.21}$$

formában, ahol tudjuk, hogy az F bevezetett „függvény" értéke $F = +1$, ha a teljes spin $S = 0$, és $F = -1$, ha a teljes spin $S = 1$. Itt S_1 és S_2 jelenti a tanulmányozott két elektron spin nagyságát, illetve S a teljes spin értéket.

Az elkövetkezőkben az F tag meghatározása a cél. Most, mivel E_i energiák a Ψ_i állapotokban vett sajátértékek, F–et operátorként kezeljük ($\tilde{F}$), egy olyan formát próbálva felépíteni neki, melynek sajátértéke a szinglet állapotban $+1$, a triplet állapotban pedig -1. A kiindulópontunk az

$$\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 = \frac{1}{2}(\vec{S}^{\,2} - \vec{S}_1^{\,2} - \vec{S}_2^{\,2}) \,, \tag{9.22}$$

összefüggés lesz, hol $\vec{S}$ a teljes spin-operátor, $\vec{S}_i$ pedig az i elektron spin-operátora. Tudjuk továbbá, hogy egy tetszőleges spin-operátor esetében $\vec{S}^{\,2}$ sajátértéke $S(S+1)$. A mi kifejezésünkben három spin-operátor van, közülük kettő mindig állandó ($S_1 = \frac{1}{2}; S_2 = \frac{1}{2}$), míg a harmadik spinkvantumszáma $S = 0, 1$ értékeket vehet fel. Ekkor Ψ_1 esetében a jellemző spin-kvantumszámok $S = 0, S_1 = S_2 = 1/2$, tehát:

$$< \Psi_1|\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2|\Psi_1 >= \quad \frac{1}{2}\left[0 - 2 \cdot \frac{1}{2} \cdot \frac{3}{2}\right] = -\frac{3}{4} \,. \tag{9.23}$$

Továbbá Ψ_2 esetében, $S = 1, S_1 = S_2 = 1/2$, ekkor tehát:

$$< \Psi_2|\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2|\Psi_2 >= \quad \frac{1}{2}\left[1 \cdot 2 - 2 \cdot \frac{1}{2} \cdot \frac{3}{2}\right] = \frac{1}{2}\left[2 - \frac{3}{2}\right] = +\frac{1}{4} \,. \tag{9.24}$$

Ilyen körülmények között az $S = 0$–ra fennálló $F = +1$–et és az $S = 1$–re fennálló $F = -1$–et az

$$\tilde{F} = -2[1/4 + \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2] \tag{9.25}$$

operátornak a Ψ_1 és Ψ_2 állapotokban vett várható értékeivel lehet előállítani. Így, mivel egy operátor minden reprezentációja ekvivalens, a H saját reprezentációjából kapott kifejezést általánosítva, a Hamilton operátor felírható mint:

$$H = \bar{H}_0 - 2\overline{J}_{ij} \cdot \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \; ; \quad \bar{H}_0 = 2\epsilon + C_{ij} - \frac{\overline{J_{ij}}}{2} \,. \tag{9.26}$$

A kettes konstansot J_{ij}–be olvasztva ($J_{ij} = 2\overline{J}_{ij}$), és figyelembe véve, hogy a $\bar{H}_0$ tag az abszolut energiaskála origóját eltolja csupán, továbbá az összes egymás melletti csomópontra általánosítva, kapjuk a Heisenberg-féle kölcsönhatást megadó Hamilton operátor tagot:

$$H_{Heis.} = -\sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \ . \tag{9.27}$$

A $H_{Heis.}$ operátor a lokalizált mágneses momentumok közötti kölcsönhatás prototípusa. Érdekes megjegyezni, hogy ezen kölcsönhatás, mely az anyag mágneses tulajdonságainak leírását adó ,,alapkő", tulajdonképpen elektrosztatikus Coulomb eredetű, melynek tárgyalásakor a Pauli-elv (tehát kvantummechanikai jellemzők) is figyelembe voltak véve.

Hangsúlyozni kell, hogy a spinek közötti kölcsönhatás lehetőségét nem meríti ki teljes egészében a Heisenberg-féle kölcsönhatás. Sok más kölcsönhatási lehetőség is ismert, melyek közül talán a leglényegesebb a Dzsalosinszkij-Moriya-típusú kölcsönhatás, mely a spinvektorok vektoriális szorzatával arányos. A következőkben azonban a fázisátalakulások szempontjából fontos elvi kérdések tisztázása a fő célunk, így ezen lehetőségek tárgyalása itt elmarad.

9.2 A Weiss-féle molekuláris–tér elmélet

Tanulmányozzuk egy kicsit a következőkben a spin-rendszerünket. Megfigyelhető, hogy abban az esetben, ha külső mágneses tér van jelen ($\vec{H} \neq 0$), akkor a rendszer energiájának csökkentése érdekében (feltételezzük, hogy $J_{ij} > 0$), a lokális mágneses momentumok $\vec{H}$ irányába eső vetülete átlagban mindig pozitív szám lesz, így $\vec{M} \neq 0$ globális mágnesezettség lép fel. Ha a hőmérséklet elég nagy, és $\vec{H} = 0$, az $\vec{S}_i$ lokális spinek, a termikus gerjesztések hatására minden irányban beállhatnak, így $\sum_i \langle \vec{S}_i \rangle = 0$ áll fenn, azaz $\vec{M} = 0$ lesz a rendszer jellemzője. Ezen állapotot paramágneses állapotnak nevezzük[43].

A mágneses anyagok többségében viszont egy adott T_c kritikus hőmérséklet alatt, $\vec{H} = 0$ külső mágneses térben is $\vec{M} \neq 0$ állapot lép fel. Az ekkor megjelenő teljes mágneses momentumot spontán mágnesezettségnek nevezzük, s ha ez fellép, a rendszert a ,,ferromágneses" jelzővel illetjük meg. Az $\vec{M} \neq 0$ spontán mágneses momentum jelenléte, vektoriális mivolta miatt a rendszerben kitüntet egy irányt. Így a paramágnes–ferromágnes átmenetkor a rendszer paramágneses (rendezetlen) fázisban vett teljes rotációs szimmetriája megsérül és az $\vec{M} \neq 0$ ferromágneses állapotban nem teljesül[44]. A kitüntetett irányt pontosan a fellépő $\vec{M}$ határozza meg. Így a tanulmányozott jelenség, mivel szimmetriasérüléssel jár, egy folytonos fázisátalakulás, melynek rendparamétere nem más, mint $\vec{M}$, a teljes mágneses momentum[45].

[43] Megjegyzendő hogy itt a tárgyalás $T \neq 0$ feltételek mellett történik.

[44] Itt a spin-térben vett rotációs szimmetriasérülésről van konkréten szó

[45] Itt eltekíntünk azon speciális esetektől melyeknek során a ferromágneses fázis rendparamétere véges ugrást szenvedve lép be.

Feladatunk a továbbiakban ezen fázisátalakulás leírása lesz. A Hamilton-operátorunkban (mely a Heisenberg és Zeeman-tagokból áll) a Heisenberg járulék egzakt tárgyalása rendkívül bonyolult. Ezért általában közelítéseket kell alkalmaznunk. Weiss nyomán, az egyik legegyszerűbb közelítés az individuális lokális hatásoknak egy globális, kiátlagolt hatással való helyettesítése. Ezen közelítés neve: ,,molekuláris tér" közelítés:

$$\sum_{\langle ij\rangle} J_{ij}\vec{S}_i\cdot\vec{S}_j=\sum_{\langle ij\rangle} J_{ij}\left(\vec{S}_i\cdot\langle\vec{S}_j\rangle+\vec{S}_j\cdot\langle\vec{S}_i\rangle\right) \tag{9.28}$$

Egyszerűség kedvéért feltételezve, hogy minden szomszédos csomópont közötti csatolás nagysága ugyanaz, tehát $J_{ij}=J$, kifejezésünk a következőképpen alakul:

$$\sum_{\langle ij\rangle} J_{ij}\vec{S}_i\cdot\vec{S}_j=2J\sum_i\left(\sum_j\langle\vec{S}_j\rangle\right)\cdot\vec{S}_i=2J\sum_{i=1}^{N}\underbrace{\left(\sum_{j=1}^{z}\langle\vec{S}_j\rangle\right)}_{\frac{z}{N}\frac{\vec{M}}{\bar{\mu}}}\cdot\vec{S}_i \tag{9.29}$$

Megjegyzendő, hogy itt a két összegezési index közül az egyik minden egyes csomópontot érint (i), a másik pedig csak a legközelebbi szomszédokra vonatkozik (j). A jelöléseket illetőleg, z egy rögzített csomópont legközelebbi szomszédainak száma, N a rendszerben lévő összes spinek száma és $\vec{M}$ a teljes mágnesezettség. Az eredmény $\langle\vec{S}_j\rangle=\vec{M}/(N\bar{\mu})$ összefüggéssel adódik. De ekkor

$$\sum_{\langle ij\rangle} J_{ij}\vec{S}_i\cdot\vec{S}_j=\frac{2Jz}{N\bar{\mu}}\vec{M}\cdot\sum_{i=1}^{N}\vec{S}_i=\bar{\mu}\vec{H}_m\cdot\sum_{i=1}^{N}\vec{S}_i \tag{9.30}$$

A fenti egyenletben megjelenő $\vec{H}_m$ a Weiss-féle molekuláris tér. Megfigyelhető, hogy a molekuláris tér a teljes spontán mágnesezettséggel (tehát a rendparaméterrel) arányos:

$$\vec{H}_m=\lambda\vec{M}\ , \tag{9.31}$$

ahol

$$\lambda=\frac{2Jz}{N(g\mu_B)^2}\ , \tag{9.32}$$

a molekuláris tér állandója[46].

Látható, hogy a Heisenberg-féle $\sum J_{ij}\vec{S}_i\vec{S}_j$ tagot a molekuláris-tér közelítés úgy fogja fel, hogy egy adott, de tetszőleges $\vec{S}_i$, az összes többi $\vec{S}_j$, $j\neq i$ spin által együttesen létrehozott belső molekuláris teret ($\vec{H}_m$–et) érzékeli, mely minden csomópontban ugyanaz (a rendszer homogén), és amely létrehozásában az összes többi csomópont egyenlő mértékben játszik közre[47]. A Heisenberg-féle kölcsönhatás

[46] Lásd például [1].
[47] Lásd például [2].

alapján, amint láttuk, indokolható, hogy $\vec{H}_m = \lambda\vec{M}$, tehát a molekuláris tér a rendszer teljes mágneses momentumával arányos. Weiss mindezt 1907–ben már feltételezte, akkor, amikor még a Heisenberg-féle kölcsönhatás fogalma nem volt ismeretes. Ezért a lokalizált mágneses momentumokkal jellemzett rendszerek esetében $\vec{H}_m$ a Weiss–féle molekuláris tér néven ismeretes. Ezek szerint a molekuláris tér közelítésben:

$$H = -\bar{\mu}\vec{H}_{eff} \cdot \sum_{i=1}^{N} \vec{S}_i \ , \tag{9.33}$$

ahol

$$\vec{H}_{eff} = \vec{H} + \vec{H}_m = \vec{H} + \lambda\vec{M} \ . \tag{9.34}$$

Látható, hogy a molekuláris-tér közelítésben a külső tér helyett egyszerűen egy „effektív" tér jelenik meg a Hamilton-operátorban, mely a belső molekuláris tér hatását is figyelembe veszi. Ezáltal azonban a többrészecskés kölcsönható rendszerünket többrészecskés nemkölcsönható rendszerként kezeljük, így jellemzői az egyrészecskés rendszer jellemzőiből leszármaztathatóak.

A gondolatmenet folytatása előtt hadd rögzítsük a molekuláris-tér, és ezáltal a molekuláris-tér közelítés főbb jellemzőit. Először is $\vec{H}_m$ felépítésében minden spin $\vec{S}_j$ egyenlő mértékben vesz részt. Tehát annak ellenére, hogy a kiinduló Hamilton operátorban a kölcsönhatások rövid hatótávolságúak (csak egymásmelletti csomópontokra korlátozódnak), a molekuláris-tér közelítesében, minden lokális mágneses momentum minden más mágneses momentummal való egyenértékű kölcsönhatását tételezzük fel[48]. Így a kölcsönhatás hosszú hatótávolságúvá válik az approximáció során. Ez létrehoz egy globális teret, melyet minden egyes $\vec{S}_i$ egyenlően érzékel. Ez a globális tér statikus és homogén (se ω, se k függést kimutatni benne nem lehet). A végtelen hatótávolságú kölcsönhatás következtében, a globális tér megjelenésével, a kezdeti többrészecske probléma, egyrészecske problémára redukálódik.

A molekuláris tér nagysága dimenziótól független, csupán z-től, az első koordinációs számtól függ. (Így például, sík trianguláris rács és térbeli köbös rácsok esetében, ahol mindkét esetben $z = 6$, ugyanakkora J esetben ugyanakkora $\vec{H}_m$–et feltételezünk, pedig az első esetben a dimenzió $d = 2$, a másodikban pedig $d = 3$). Ezen közelítés szerint a $d = 1$ dimenzióbeli rendezettség létrejöttét semmi sem akadályozza. (Kac eredményeinek megfelelően, amint majd ezt látni fogjuk, ennek így is kell lennie, mert végtelen hatótávolságú kölcsönhatásokat tételeztünk fel).

Mivel $\vec{H}_m$ (se ω, se k függést nem mutat) konstans, így az elmélet a fluktuációktól teljesen eltekint. Következményei magas hőmérsékleten, T_c közelében (de nem közvetlen közelében), $d = 3$ dimenzióban és „első közelítésben" elfogadhatóak. Kvantummechanikai szempontból a Hartree–Fock-közelítéssel tökéletesen egyenértékű.

[48]Lásd például [3].

9.3 A külső mágneses térrel kölcsönható spinrendszer

Láttuk tehát, hogy a bevezetett közelítés következtében a Hamilton operátorunk egy szabad, lokalizált, külső mágneses térrel kölcsönható rendszer Hamilton-operátorába ment át, melyben csupán a külső tér $H \to H_{eff}$ változtatása történt. Szokásos még a kiinduló Hamilton-operátorhoz képest közelítő Hamilton operátort ,,effektív”–nek nevezni. Így az itt tanulmányozott probléma a

$$H_e = -\bar{\mu} H_{eff} \sum_i S_i \tag{9.35}$$

effektív Hamilton-operátor elemzésére redukálodott. Itt a számítások megkönnyítése céljából a koordinátarendszerünk z tengelyét a H_{eff} tér írányába fordítottuk, így a Hamilton-operátorban, az effektív tér nagysága, illetve a spin-operátorok z komponense van jelen.

Mindezek után világos, hogy matematikai szempontból a külső mágneses térrel kölcsönható spinrendszer problémája áll előttünk. Így tehát az erre vonatkozó ismereteket elevenítjük fel az elkövetkezőkben. Közben megjegyezzük, hogy a kapott végeredményekben a külső mágneses teret az effektív Weiss–féle térrel helyettesítve ($H \to H_{eff}$), a Weiss–féle molekuláris tér tanulmányozására is alkalom adódik.

A rendszer jellemzésére a kiindulópont az állapotösszeg kiszámítása. Ezen számítást párhuzamosan három esetben fogjuk végezni: kvantum-, Ising-, és klasszikus momentumok esetében.

9.4 Az állapotösszeg levezetése

Az állapotösszegünk

$$Z = \mathrm{Tr}\, e^{-\beta H_e} \ , \quad H_e = -\bar{\mu} H \sum_i S_i \tag{9.36}$$

ahol, hagyományosan, $\beta = 1/(k_B T)$. Kezdjük először számításainkat a kvantummechanikai eset tárgyalásával.

9.4.1 A kvantummechanikai eset tárgyalása

A kvantum esetben a tengelyre eső spinvetület $2S+1$ különböző értékkel rendelkezik, $-S$ és $+S$ között. Tehát

$$Z_{kv} = \mathrm{Tr} e^{-\beta \hat{H}_e} = \sum_{m_1=-S}^{S} \sum_{m_2=-S}^{S} \ldots \sum_{m_N=-S}^{S} \exp\left(x(m_1 + m_2 + \ldots + m_N)\right) \ ; \tag{9.37}$$

ahol

$$x = \beta \bar{\mu} H \ . \tag{9.38}$$

Ekkor viszont, az m_i számok függetlenek lévén,

$$Z_{kv} = \left[\sum_{m=-S}^{S} e^{xm} \right]^N = \left[e^{-Sx} + e^{-(S-1)x} + e^{-(S-2)x} + \ldots + e^{-(S-2S)x} \right]^N \tag{9.39}$$

Tanulmányozzuk a zárójelben megjelenő összeget a $y = e^x$ jelölés bevezetésével. Nyilvánvalóan, egy mértani haladvánnyal van dolgunk, tehát:

$$Z_{kv}^{1/N} = \sum_{m=-S}^{S} e^{xm} = e^{-Sx}(1 + e^x + e^{2x} + \ldots + e^{2Sx}) = e^{-Sx} \sum_{n=0}^{2S} y^n \ . \tag{9.40}$$

A mértani haladvány összege ismert, így:

$$\begin{aligned} Z_{kv}^{1/N} &= e^{-Sx} \frac{y^{2S+1} - 1}{y - 1} = \frac{e^{Sx+x} - e^{-Sx}}{e^x - 1} = \\ &= \frac{e^{\frac{x}{2}} \left(e^{Sx+\frac{x}{2}} - e^{-Sx-\frac{x}{2}} \right)}{e^{\frac{x}{2}} \left(e^{\frac{x}{2}} - e^{-\frac{x}{2}} \right)} = \frac{\sinh \left[\left(S + \frac{1}{2} \right) x \right]}{\sinh(\frac{1}{2}x)} \end{aligned} \tag{9.41}$$

Tehát a kvantummechanikai esetben:

$$Z_{kv} = \left[\frac{\sinh \left(\left(S + \frac{1}{2} \right) x \right)}{\sinh \frac{x}{2}} \right]^N \tag{9.42}$$

A következökben az Ising esettel foglalkozunk.

9.4.2 Az Ising eset tárgyalása

Az Ising-spin definíciója szerint a spin S_i^z komponense mindig csak két értéket vehet fel: $+S$ és $-S$ értékeket. Látható tehát, hogy az Ising spin egy leegyszerűsített spinváltozó, mely csupán két állapotban lehetséges. Ekkor

$$Z_{Is} = \left[e^{xS} + e^{-xS} \right]^N = 2^N \cosh^N(Sx) \tag{9.43}$$

Tehát Ising esetben:

$$Z_{Is} = 2^N \cosh^N(Sx) \ . \tag{9.44}$$

Következik a klasszikus eset tanulmányozása.

9.4.3 A klasszikus eset tárgyalása

Klasszikus esetben $\bar{\mu}S$ mágneses momentum helyét a klasszikus mágneses momentum μ_0 veszi át. Tehát a klasszikus eset $\bar{\mu}S \to \mu_0$ formájában tárgyalható, miközben a Hamilton-operátor ez esetben az egyedi momentumokra vett $-\vec{\mu}_0 \cdot \vec{H}$ járulékokból összegeződik. Továbbmenőleg, klasszikus esetről lévén szó, a $\vec{\mu}_0$ és $\vec{H}$ közötti irány tetszőleges lehet és folytonosan változhat. Ekkor:

$$Z_{kl} = \left[\frac{1}{4\pi}\int e^{+\beta\mu_0 H\cos\theta} d\omega\right]^N \quad ; \quad d\omega = \sin\theta d\theta d\varphi \ . \tag{9.45}$$

A normálási faktor a teljes térszög, mely $Z_{kl} = 1$–et kell adjon $H = 0$–ra (és ezáltal $\Phi = 0$ termodinamikai potenciált). Tehát

$$\int_0^{2\pi} d\varphi \int\limits_0^{\pi} sin(\theta) d\theta e^{+\beta\mu_0 H\cos\theta} = 2\pi \int\limits_{-1}^{1} e^{\bar{x}t} dt_{|_{\bar{x}=\beta\mu_0 H}} = 4\pi \frac{\sinh(\bar{x})}{\bar{x}} \quad . \tag{9.46}$$

Ezen kifejezésben tehát $\bar{x} = \beta\mu_0 H$. Az eddigi jelölés, melyet kvantum és Ising esetre alkalmaztunk $x = \beta\bar{\mu}H$ volt. Ehhez képest a $\bar{x}$, egy S faktor szorzótényezőt tartalmaz, ami x–ben nincs jelen. A klasszikus esetre vonatkozó végeredmény tehát:

$$Z_{kl} = (4\pi)^N \left[\frac{\sinh\bar{x}}{\bar{x}}\right]^N \frac{1}{(4\pi)^N} = \left(\frac{\sinh(\bar{x})}{\bar{x}}\right)^N \tag{9.47}$$

Érdemes mindezek után mindhárom esetet a jelölések szempontjából közös nevezőre hozni. Ekkor, az $x \cdot S = \bar{x}$ jelöléssel, mindhárom állapotösszeg felírható. Tehát:

A kvantummechanikai esetben ($\bar{x} = \beta\bar{\mu}SH$):

$$Z_{kv} = \left[\frac{\sinh\frac{2S+1}{2S}\bar{x}}{\sinh\frac{\bar{x}}{2S}}\right]^N \quad . \tag{9.48}$$

Az Ising esetben ($\bar{x} = \beta\bar{\mu}SH$):

$$Z_{Is} = 2^N \cosh^N(\bar{x}) \ . \tag{9.49}$$

A klasszikus esetben ($\bar{x} = \beta\mu_0 H$):

$$Z_{kl} = \left(\frac{\sinh(\bar{x})}{\bar{x}}\right)^N \quad . \tag{9.50}$$

Az állapotösszeg ismeretében a rendszer teljes mágneses momentuma kifejezhetővé válik. Ezt elemezzük a következő paragrafusban.

9.5 A teljes mágneses momentum kiszámítása

Az állapotösszeg ismeretében a termodinamikai potenciál könnyen kifejezhető

$$\Phi = -k_B T \ln Z \ , \tag{9.51}$$

majd ebből a mágnesezettség a H szerinti deriválás útján megkapható:

$$M = -\frac{\partial \Phi}{\partial H} \ . \tag{9.52}$$

Az ezen kifejezésben implicit megjelenő $\bar{x}$ pedig:

$$\bar{x} = \beta \mu H \ ; \quad \mu = \begin{cases} \mu_0 & \text{klasszikus eset} \\ \bar{\mu} S & \text{nem klasszikus esetek} \end{cases} \ . \tag{9.53}$$

A következőkben kifejezzük M–et, újból párhuzamosan mindhárom tanulmányozott példára.

A kvantum spinek esetében:

$$M_{kv} = N k_B T \left[\frac{2S+1}{2S} \beta\mu \frac{\cosh \frac{2S+1}{2S} \bar{x}}{\sinh \frac{2S+M}{2S} \bar{x}} - \frac{1}{2S} \beta\mu \frac{\cosh \frac{\bar{x}}{2S}}{\sinh \frac{\bar{x}}{2S}} \right] \ . \tag{9.54}$$

Tehát

$$M_{kv} = N \mu B_S(\bar{x}) \ , \tag{9.55}$$

ahol $B_S(x)$ a Brillouin-függvény:

$$B_S(x) = \frac{2S+1}{2S} \ \coth(\ \frac{2S+1}{2S} \ x) - \frac{1}{2S} \ \coth(\ \frac{1}{2S} \ x) \ , \tag{9.56}$$

melyben $\coth(x)$ a kotangens hiperbolikusz függvényt jelöli.

Az Ising spin esetében:

$$M_{Is} = N k_B T \left[\frac{\sinh(\bar{x})}{\cosh(\bar{x})} \cdot \beta\mu \right] \ . \tag{9.57}$$

Megfigyelhető tehát, hogy

$$M_{Is} = N \mu \tanh(\bar{x}) \tag{9.58}$$

ahol $\tanh(x)$ a tangens hiperbolikusz függvényt jelöli.

Végül a klasszikus esetben:

$$M_{kl} = Nk_BT\left(\frac{\cosh\bar{x}}{\sinh\bar{x}}\cdot\beta\mu - \frac{\beta\mu}{\bar{x}}\right) . \quad (9.59)$$

Tehát, ekkor

$$M_{kl} = N\mu L(\bar{x}) , \quad (9.60)$$

ahol $L(x)$ a Langevin-függvény, mely a definíció szerint

$$L(x) = \coth(x) - \frac{1}{x} . \quad (9.61)$$

Megfigyelhető azonban, hogy a Brillouin-függvényben mindhárom eset bennefoglaltatik. Ténylegesen, a $S \to \infty$ határesetben

$$\sinh(\frac{x}{2S}) \to \frac{x}{2S} , \quad (9.62)$$

továbbá

$$\cosh(\frac{x}{2S}) \to 1 , \quad (9.63)$$

feltételek mellett, a klasszikus eset visszakapható:

$$B_{S\to\infty}(x) = L(x) \quad (9.64)$$

Ezen határesetben vigyáznunk kell arra, hogy a kifejezésekben szereplő $\beta\mu H$–ban, $S \to \infty$ limeszben $\mu \to \mu_0$, (azaz μ a klasszikus mágneses momentumként értelmezendő).

Továbbmenőleg, az $S = \frac{1}{2}$ értékre az Ising esetet kapjuk vissza. Ténylegesen, ekkor:

$$\begin{aligned} B_{S=\frac{1}{2}}(x) &= 2\frac{\cosh(2x)}{\sinh(2x)} - \frac{\cosh(x)}{\sinh(x)} = \frac{\cosh^2(x)+\sinh^2(x)}{\cosh(x)\sinh(x)} - \frac{\cosh(x)}{\sinh(x)} \\ &= \frac{\sinh(x)}{\cosh(x)} = \tanh(x) . \end{aligned} \quad (9.65)$$

Ez természetes is, mert $S = 1/2$ kvantum esetben a spinvetületek száma kettő és konkrét értékük $\pm 1/2$, azaz $\pm S$, úgy ahogy azt az Ising-féle spin-absztrakció feltételezi[49].

Az elmondottak alapján, az elkövetkezőkben csupán a kvantum esetet fogjuk tárgyalni a teljes mágnesezettség elemzése során. A kapott végeredményekből $S = 1/2$, illetve $S \to \infty$ értékek mellett az Ising, illetve klasszikus határesetek mindig visszanyerhetők.

[49]Mindez viszont nem jelenti azt, hogy teljes általánosságban a kvantum spin-1/2 eset identikus az Ising-spin esettel

9.6 Fázisátalakulás a Weiss modellben

Első célunk Weiss molekuláris–tér elméletének keretei között egy esetleges kritikus hőmérséklet kimutatása lesz.

9.6.1 A kritikus hőmérséklet levezetése

A következőkben a H külső mágneses tér helyett, a kapott kifejezésekbe $H \to H_{eff}$ effektív teret helyettesítünk. Így a Weiss-féle elméletben az M mágneses momentumra levezetett összefüggés:

$$M = N\mu B_S(\beta\mu[H + \lambda M]) \ . \tag{9.66}$$

Ezen összefüggésben $\mu = \bar{\mu}S = g\mu_B S$, és a molekuláris térre jellemző állandó:

$$\lambda = \frac{2Jz}{N\bar{\mu}^2} \ . \tag{9.67}$$

Fázisátalakulást akkor kaphatunk ha $H = 0$ esetében $M \neq 0$ „spontán" mágnesezettséget kapunk megoldásként egy adott $T = T_c$ kritikus hőmérséklet alatt. Tehát a továbbiakban $H = 0$, $M \neq 0$ típusú megoldásokat keresünk.

E célból tanulmányoznunk kell egy kicsit a Brillouin függvény tulajdonságait. A $B_s(x)$–re vonatkozólag megfigyelhető, hogy páratlan függvény ($B_S(x) = -B_S(x)$). Ez nyilvánvaló, hiszen $\sinh(x)$ páratlan, $\cosh(x)$ pedig páros függvény. Továbbá az $x \to \infty$ határesetben, mivel $\coth(x)|_{x\to\infty} = 1$, következik $B_S(x)|_{x\to\infty} \to 1$. A páratlan függvény tulajdonság miatt ekkor $B_S(x)|_{x\to-\infty} \to -1$ adódik. Mivel $B_S(x = 0) = 0$, megfigyelhető tehát, hogy a $B_S(x)$ függvény grafikonja a tanh(x) függvény grafikonjához hasonló. A függvényértékek $(-1, +1)$ között mozognak, két vizszintes aszimptota van ± 1–ben, továbbá a függvény az origóban zéró.

Kis argumentumra a $B_S(x)$ függvény viselkedése a coth(x) függvény $x = 0$ körül vett sorfejtéséből

$$\coth(x) = \frac{1}{x} + \frac{x}{3} - \frac{x^3}{45} + \dots \tag{9.68}$$

meghatározható. Így:

$$B_S(x) = \frac{S+1}{3S}\, x - \frac{S+1}{3S} \cdot \frac{2S^2 + 2S + 1}{30S^2}\, x^3 + \dots . \tag{9.69}$$

Megjegyzendő, hogy ezen sorfejtésből az $S \to \infty$ határesetben visszakapjuk a Langevin-függvény kis argumentumra vett sorfejtését:

$$L(x) = \frac{x}{3} - \frac{1}{3 \cdot 15}\, x^3 + \dots \ , \tag{9.70}$$

továbbá $S = 1/2$ esetre a tanh(x) kis x–re vett Taylor sorát:

$$\tanh(x) = x - \frac{x^3}{3} + \dots \ . \tag{9.71}$$

A továbblépés előtt jegyezzük meg, hogy a $B_S(x)$ függvény origóban vett iránytangense (amint az a kis x–re vett sorfejtésből látszik (??) egyenlőségből):

$$\mathrm{tg}(\alpha_B) = \frac{S+1}{3S} \ . \tag{9.72}$$

Mindezek után folytatható a Weiss-elméletből kapott mágneses momentumra vonatkozó egyenlet tanulmányozása. Ebből $H = 0$–ra:

$$M = M_0 B_S(\beta\mu\lambda M) \tag{9.73}$$

Ezen egyenletben $M_0 = \mu N$ a rendszerben levő összes mágneses momentum abszolut értékben vett összege, továbbá M a T hőmérsékleten vett teljes (azaz N darab spinre vonatkozó) spontán mágneses momentum. Megjegyzendő továbbá, hogy μ az egyspinnek megfelelő mágneses momentum.

A levezetett összefüggést a teljes kiátlagolt mágneses momentum egy részecskére vett $m = M/N$ értékével felírva:

$$m = \mu B_S(\beta\mu\lambda N m) \tag{9.74}$$

adódik. Ezen egyenlet a Weiss–féle elméletben a rendparaméter egyenlete. Ténylegesen, ha $m = 0$, ezen megoldás paramágneses állapotot jelöl, melyben a spontán mágneses momentum értéke zéró. Ez a rendezetlen, magasszimmetriájú fázisunk, továbbá a (??) egyenlet $m = 0$ megoldását ,,triviális" megoldásnak nevezzük. Megfigyelhető, hogy mivel $B_S(x = 0) = 0$, a rendparaméter egyenlete mindig ad triviális megoldást függetlenül a T és λ értékétől.

Amennyiben a rendparaméter egyenletének $m \neq 0$ megoldásai is vannak, ezek jellemzik a spontán mágneses momentummal rendelkező fázist, azaz a ferromágneses állapotot. Ez itt a rendezett fázisunk, mely a rotációs szimmetria elvesztése miatt, az alacsonyszimmetriájú fázis. Megfigyelhető, hogy a rendparaméter egyenletébe a teljes mágneses momentum abszolut értéke kerül bele, hiszen ez egy skaláris egyenlet. Hogy mi a spontán mágnesezettség iránya, azt maga a rendszer választja ki (a pillanatnyi körülményeknek megfelelően). A rendparaméter egyenlete szempontjából (és ezáltal a termodinamikai makroszkópikus viselkedés szempontjából is) teljesen mindegy, hogy ezen kiválasztott irány milyen.

Ezen probléma egyáltalán nem triviális a következő okokból kifolyólag: $H = 0$ esetben a Z állapotösszeg, H_{eff} jelenlétében, valójában rögzített m irányítás mellett volt elvégezve. Ez viszont azt jelenti, hogy az állapottérnek csupán egy részét használtuk fel a particiófüggvény kiszámítására, mégpedig egy ergodikusan zárt tartományát (melyből a rendezett fázis fennállása mellett véges időn belül kijutni nem lehetséges). A folytonos fázisátalakulások esetében ez egy lényeges jellemző, melynek néhány következményére a későbbiekben részletesebben visszatérünk.

Folytassuk most a Weiss-elméletben a rendparaméter egyenletének tanulmányozását. A nem-triviális ($m \neq 0$) megoldásokat legkönnyebb grafikus módon meghatározni. A (??) egyenlet mindkét oldalát egy $(f(m), m)$ koordinátarendszerbe képzelve, a bal oldal $f_{bal}(m) = m$ az első szögfelező. Az $f_{bal}(m)$ függvény iránytangense minden m-re, és így az origóban is

$$\mathrm{tg}(\alpha_b) = 1\,. \tag{9.75}$$

A (**??**) egyenlet jobboldala viszont $f_{jobb}(m) = \mu B_S(\beta\mu\lambda N m)$. A Brillouin-függvény origóban vett iránytangense alapján (lásd (**??**), $f_{jobb}(m)$ origóban vett iránytangense:

$$\mathrm{tg}(\alpha_j) = \frac{S+1}{3S}\beta\mu^2\lambda N\,. \tag{9.76}$$

Mivel a rendparaméter egyenletének így a baloldala egy, az origón átmenő egyenes, és jobboldala (szintén az origón átmenő) tangens hiperbolikusz formájú függvény, következik, hogy az $m = 0$ triviális megoldáson kívül akkor kapunk más megoldást, ha

$$\mathrm{tg}(\alpha_j) \geq \mathrm{tg}(\alpha_b)\,, \tag{9.77}$$

azaz:

$$\frac{S+1}{3S}\beta\mu^2\lambda N \geq 1\,. \tag{9.78}$$

A kapott egyenlőtlenség $\beta = 1/(k_B T)$ miatt

$$\frac{T_c}{T} \geq 1 \tag{9.79}$$

formába írható fel. Itt a T_c hőmérséklet értéke:

$$T_c = \frac{S+1}{3S}\frac{\mu^2\lambda N}{k_B}\,. \tag{9.80}$$

Mivel a (**??**) egyenlőtlenség $T < T_c$–re áll fenn, amelytől kezdve $m \neq 0$ spontán mágnesezettségünk van a rendszerben, T_c jelenti a kritikus hőmérsékletet, és $T < T_c$ a ferromágneses fázis hőmérsékleti tartományát. Megjegyzendő viszont, hogy T_c alatt a rendparaméter egyenlete mindig két megoldást szolgáltat: $m = 0$ és $m \neq 0$. A két megoldás közül mindig az valósul meg, mely energetikailag[50] stabilizálja a rendszert. Ezen kérdésre a fejezet utolsó paragrafusában visszatérünk. Most a zökkenőmentes gondolatmenet felfejlesztése érdekében fogadjuk el, hogy T_c alatt a nemtriviális megoldás valósul meg fizikailag a rendszerünkben.

A ferromágneses fázis kritikus hőmérséklete a Curie-hőmérséklet nevet viseli. A Weiss modellben tehát a Curie-hőmérséklet:

$$T_c = \frac{S+1}{3S}\cdot\mu^2\left(\frac{2Jz}{N\bar{\mu}^2}\right)\frac{N}{k_B} \tag{9.81}$$

[50] Amint majd később látni fogjuk, mindez azt jelenti, hogy azon fázis valósul meg mely termodinamikai potenciálja kisebb.

A felírt kifejezésben felhasználtuk λ értékét. Most figyelembe véve, hogy $\mu = \bar{\mu} S$, a kritikus hőmérséklet kifejezése a következő képpen alakul (lásd [1]):

$$k_B T_c = 2Jz \frac{S(S+1)}{3} \tag{9.82}$$

Látható tehát, hogy a Weiss elmélet keretei között a paramágnes–ferromágnes fázisátalakulás létrejötte megmagyarázható. A levezetett kritikus hőmérséklet csupán a csatolási állandótól, spin-értéktől és a legközelebbi szomszédok számától függ.

9.6.2 A rendparaméter viselkedése

A következőkben a spontán mágneses momentum hőmérséklet szerinti viselkedését szeretnénk tanulmányozni.

Elemezzük először a T_c körüli viselkedést a $T < T_c$ tartományban. A kiindulópont a mágnesezettség egyenlete

$$m = \mu B_S(\beta \mu \lambda N m) \ , \tag{9.83}$$

melyben $T \to T_c$, azaz $m \to 0$ miatt, felhasználhatjuk a Brillouin függvény kis argumentumra vett sorbafejtését, ezuttal az argumentumban harmadik rendig (lásd (**??**)). Ekkor

$$m \left(1 - \frac{S+1}{3S} \, \beta \mu^2 \lambda N \right) = -K(\beta) m^3 \ , \tag{9.84}$$

ahol a $K(\beta)$, m-től független mennyiség mely értéke

$$K = \mu \frac{S+1}{3S} \, \frac{2S^2 + 2S + 1}{30 S^2} \, (\beta \mu \lambda N)^3 \ . \tag{9.85}$$

Az m egyenletének baloldalán szereplő zárójelben azonban

$$1 - \frac{T_c}{T} = - \left(\frac{T_c}{T} - 1 \right) \ , \tag{9.86}$$

összefüggés alakult ki. Így tehát (**??**) alapján:

$$m^2 K(\beta_c) = \left(\frac{T_c}{T} - 1 \right) \ . \tag{9.87}$$

Itt felhasználtuk, hogy T_c közelében vagyunk, így, K folytonos lévén T_c körül (anélkül, hogy T_c–ben zéróvá válna), elegendő a $K = K(\beta_c)$ kifejezés használata[51].

[51]Ellenkező esetben, a végeredmény szintjén kapott m^2 kifejezésében, a t redukált hőmérséklet függvényében adott másodrendű koefficiens szorzó faktora változik csak meg. Ezen járulék $t \to 0$ határesetben az m^2-ben megjelenő lineáris t tag mellett elhanyagolható, így a végeredmény változatlan marad.

Látható tehát, hogy a rendparaméter viselkedése közvetlenül T_c alatt:

$$m = K^{-1/2}(\beta_c)(\frac{T_c}{T} - 1)^{1/2} \,. \tag{9.88}$$

Ennek megfelelően, $T \to T_c$ határesetben

$$m \sim |t|^{1/2} \,. \tag{9.89}$$

Tehát a rendparaméter β kritikus exponense meghatározható:

$$\beta = \frac{1}{2} \,. \tag{9.90}$$

Most a $T \to 0$ viselkedést illetőleg figyeljük meg, hogy $T \to 0$–ra $B_S(x \sim 1/T)$ argumentuma végtelen felé tart. Ekkor viszont $B_S(x) \to 1$, és $M(T = 0) = M_0$ áll fenn, azaz egy részecskére számolva

$$m(T = 0) = \mu \tag{9.91}$$

A $T \to 0$ viselkedés megítélése céljából a kiindulópont a cosh(x) függvény $x >> 1$ szerinti sorfejtése:

$$\coth(x) = 1 + 2e^{-2x} + \dots \,, \tag{9.92}$$

mely segítségével a Brillouin-függvény sorfejtése nagy argumentumra (azaz a $T \to 0$ határesetben) levezethető. Az eredmény:

$$B_S(x >> 1) = 1 - \frac{1}{S} \exp\left[-\frac{x}{S}\right] + \dots \,. \tag{9.93}$$

Az m egyenletében szereplő Brillouin függvény x argumentuma a (**??**, **??**) felhasználásával

$$x = \beta\mu\lambda N m = \frac{3S}{S+1}\frac{T_c}{T} \,. \tag{9.94}$$

Így a rendparaméter $T \to 0$ határesetben vett viselkedése:

$$m(T) = \mu - \frac{\mu}{S} \exp\left[-\frac{3}{S+1}\frac{T_c}{T}\right] + \dots \,. \tag{9.95}$$

Látható tehát, hogy $T \sim 0$ közelében a mágnesezettség exponenciális „lassúsággal" távolodik csupán a $T = 0$–ban felvett értékétől.

A két határeset ($T \to 0$, és $T \to T_c$) között a rendparaméter folytonosan változik. A T_c pontban folytonosan válik zérótól különbözővé, majd függőleges aszimptotával távolodik el a T_c értéktől:

$$\lim_{T \to T_c} \frac{\partial m}{\partial T} \sim \lim_{T \to T_c} \frac{-1}{\sqrt{T_c - T}} \to -\infty \,. \tag{9.96}$$

A rendparaméter meredeksége $T = 0$ felé tartó hőmérséklet mellett csökken, és $T \to 0$ határesetben pontosan zéró, azaz vizszintes aszimptotával rendelkezik:

$$\lim_{T\to 0} \frac{\partial m}{\partial T} \sim \lim_{T\to 0} \left[-\frac{3\mu T}{S(S+1)} \frac{T_c}{T} \exp\left[-\frac{3}{S+1} \frac{T_c}{T} \right] \right] = 0. \tag{9.97}$$

Mindez egy tipikus rendparaméter viselkedés, melyet a számítások sok más modell esetében is molekuláris-tér jellegű közelítésben visszaadnak[52].

9.6.3 A mágneses szuszceptibilitás

A mágneses szuszceptibilitás (χ) levezetéséhez most külső mágneses tér jelenlétében kell felírnunk a rendparaméter egyenletét. Ekkor

$$m = \mu B_S(\beta\mu[H + \lambda N m]) \ . \tag{9.98}$$

Mivel a $T \to T_c$ viselkedés érdekes χ szempontjából, újból sorbafejtjük a Brillouin-függvényt zéró argumentum körül. Ekkor m egyenlete a következő képpen alakul:

$$m \left(1 - \frac{T_c}{T} \right) = \mu^2 \beta H \frac{S+1}{3S} - K m^3 + \mathcal{O}(H^2) \ , \tag{9.99}$$

ahol a $K = K(\beta)$ mennyiséget a $H = 0$ esetből már ismerjük.

A kapott kifejezést először a δ kritikus exponens meghatározására fogjuk felhasználni. Így $T = T_c$–re

$$K m^3 = \mu \frac{S+1}{3S} \beta\mu H \ , \tag{9.100}$$

tehát $T = T_c$–ben

$$m \sim H^{1/3} \ . \tag{9.101}$$

Mivel $\Delta \sim h^{1/\delta}$ adja a δ kritikus exponens értékét, következik:

$$\delta = 3 \ . \tag{9.102}$$

Mindezek után visszatérünk a (**??**) egyenletre, melyből a χ viselkedését vezetjük le $T \to T_c$ határesetben. A statikus mágneses szuszceptibilitás definíció szerint:

$$lim_{H\to 0} \frac{\partial M}{\partial H} = \lim_{H\to 0} \left[N \frac{\partial m}{\partial H} \right] = \chi \ . \tag{9.103}$$

Mivel $T \to T_c$ közelében vagyunk, csak a domináns, legkisebb hatványú t függés mérvadó, így (**??**) egyenletből az m^3 járulék elhanyagolható[53]. Most H szerint deriválva:

$$\chi = \frac{S+1}{3S} \frac{N \ \beta\mu^2 T}{T - T_c} = \frac{\mathcal{C}}{T - T_c} \ . \tag{9.104}$$

[52] Lásd például a szupravezető esetében [4].

[53] Ellenkező esetben, az egyenletben szereplő t függés mellett, egy $t^{3/2}$ tag is megjelenne, melynek járuléka $t \to 0$ esetében t mellett jelentéktelen.

A kapott kifejezés Curie–Weiss-törvény néven ismeretes. A benne megjelenő $\mathcal{C}$ konstans, a Curie-konstans, melynek értéke:

$$\mathcal{C} = \frac{N\bar{\mu}^2 S(S+1)}{3k_B} \ . \tag{9.105}$$

Itt felhasználtuk a $\mu = \bar{\mu}S$ egyenlőséget, majd egyszerűsítettünk egy S faktorral.

A Curie–Weiss-törvényből továbbá a szuszceptibilitás γ kritikus exponensének értéke megkapható. A levezetett összefüggésből ugyanis:

$$\chi = t^{-1} \ , \tag{9.106}$$

tehát

$$\gamma = 1 \ . \tag{9.107}$$

Megjegyzendő, hogy a lokalizált ferromágneses rendszerekre vonatkozó mérési adatok $T > T_c$ tartományban és T_c közelében[54] eléggé jól visszaadják a Curie-Weiss féle viselkedést. A kísérleti eljárás szerint a mért χ-ből ábrázolják $1/\chi$ értéket T függvényében. A kapott egyenes iránytangenséből a Curie-konstans, $\mathcal{C}$ meghatározható, melyből a rendszerben levő mágneses momentumok nagysága megkapható. Továbbá az ábrázolt egyenes T tengelymetszete adja a T_c kritikus hőmérséklet értéket, melyből a csatolási állandó értéke vezethető le. Tipikus lokalizált ferromágnesek esetében, mint például a ritkaföldfém rendszerek, a kísérleti adatok eléggé jól visszaadják az a Curie-Weiss törvényt. Ennek volt köszönhető a Weiss-féle molekuláris-tér elméletnek a sikere.

Ezen tárgykörben mozogva megemlítendő, hogy a $T_c = 0$ esetben a

$$\chi = \frac{\mathcal{C}}{T} \tag{9.108}$$

egyenlőség Curie-törvény néven ismeretes, és a tisztán paramágneses rendszerek leírására alkalmazható. Ez esetben az $1/\chi$ a T szerint ábrázolva az origón áthaladó egyenest ad[55]. Továbbá antiferromágneses rendszerek esetében a szuszceptibilitás T_c körüli vett viselkedése:

$$\chi = \frac{\mathcal{C}}{T + T_N} \tag{9.109}$$

formájú. Mindez természetes, mert a kritikus hőmérséklet kifejezésében szereplő csatolási állandó ezúttal negatív előjelű. Ekkor a kritikus hőmérséklet neve „Néel" hőmérséklet. A szuszceptibilitás (**??**)-ben megadott összefüggésére támaszkodva, a lokalizált antiferromágnesek kísérleti kimutatása χ mérések alapján elvégezhető. Ekkor a T függvényében ábrázolt χ^{-1} egyenesének $\chi^{-1} \to 0$ határesetre vett extrapolálása, a hőmérsékleti tengelyt negatív tartományban metszi, és a metszéspont pontosan a Néel hőmérséklet.

[54] De nem T_c közvetlen közelében

[55] Kisérleti mérések kiértékelésekor ilyen eredmény utal arra hogy nemkölcsönható lokalizált spinrendszerrel van dolgunk, mely elemeinek spin-értéke az ábrázolt egyenes iránytangenséből (az $1/\mathcal{C}$ konstans) meghatározható.

9.6.4 A fajhő kiszámítása

A fajhőt elemezve, a Weiss-model kiinduló Hamilton-operátorból látható, hogy rögzített i indexű spin energiajáruléka

$$E_i = -\mu H_{eff} S_i \tag{9.110}$$

Így külső mágneses tér hiányában, azaz $H = 0$ esetében, mivel a probléma egyrészecske jellegű:

$$U \sim -N\langle E_i \rangle \sim -Nm\langle S_i \rangle \sim -m^2 \ . \tag{9.111}$$

Ténylegesen a Weiss-elmélet keretei között az effektív Hamilton operátor átlaga $H = 0$–ban:

$$< H_e >= -\mu H_{eff} < \sum_i S_i >= -\mu\lambda M(\frac{1}{\mu}M) = -\lambda M^2 \ , \tag{9.112}$$

azaz

$$< H_e >= -N(\lambda N)^2 m^2 = -N\frac{2Jz}{(\bar{\mu})^2}m^2 \ . \tag{9.113}$$

Ezen összefüggés elemzése két szempontból is érdekes.

Először is a fajhő kritikus exponensének meghatározására ad alkalmat. Tudjuk ugyanis, hogy

$$C = \frac{\partial U}{\partial T} \ . \tag{9.114}$$

Ekkor viszont

$$C \sim -\frac{\partial m^2}{\partial T} \sim -\frac{\partial m^2}{\partial t} \ . \tag{9.115}$$

Tudjuk, hogy a $T \to T_c$ esetben $m^2 \sim t$, azaz a $t \to 0$ határesetben $C =$ konstans, tehát

$$\alpha = 0 \ . \tag{9.116}$$

Megfigyelhető továbbá, hogy $T \to 0$–ban $C \to 0$ kéne teljesűljön. A pontosság kedvéért megemlítendő, hogy a Weiss-modell keretei között a klasszikus spin esetében ez az eredmény nem áll fenn. Látható továbbá hogy a Weiss-modellben $T > T_c$–re $C = 0$, és $T \nearrow T_c$–re $C =$ kontans $\neq \infty$. Azaz, végül is T_c–ben C véges ugrást szenved, tehát egyértelműen $\alpha = 0$.

Ezáltal a Weiss-féle molekuláris–tér elmélet a Landau-elmélet kritikus exponenseit rendre visszaadja:

$$\alpha = 0 \ ; \quad \beta = \frac{1}{2} \ ; \quad \gamma = 1 \ ; \quad \delta = 3 \ . \tag{9.117}$$

A korrelációs függvényhez csatolt ν, és η kritikus exponens a Landau-elméletben bemutatott úton számítandó[56]. Ugyanolyan típusú közelítésekről lévén szó[57], ugyanazon végeredményt kapjuk vissza (ezért külön bemutatásra nem kerül itt rá sor).

[56]Lásd például [5].
[57]Lásd például [6]

Megfigyelhető tehát, hogy a molekuláris–tér elmélet specifikus exponenseit viszszakaptuk. Mindez mutatja, hogy kritikus exponensek segítségével, approximáció típust lehet sok esetben megállapítani, és segítségével a közelítés jellegéről véleményt mondani (ez legalábbis a Hartree–Fock formájú közelítésekre mindig fennáll). Konkrét jellemzőktől függetlenül, ekkor egy bizonyos típusú közelítés mindig ugyanazokat a kritikus exponenseket adja vissza. Ennek oka az, hogy egy jól meghatározott approximáció típus a tanulmányozott modellt mindig egy jól meghatározott univerzalitási osztályba sodorja. Ennek viszont jellemző kritikus exponensei vannak, melyek a modelleket (az egzakt megoldásaikon keresztül) univerzalítási osztályokba sorolják. Ha viszont közelítés volt alkalmazva, megtörténhet, hogy az univerzalitási osztályt nem a modell, hanem a közelítés határozza meg, és így a kritikus exponensek nem a konkrét rendszert, hanem az approximációt jellemzik. Ez a tényállás a MTE esetében is.

9.6.5 Az egyensúlyi állapot stabilitásának problémája

A (**??**) összefüggésben adott energiával kapcsolatos második észrevételt a következőkben mutatjuk be.

A rendparaméter Weiss-féle egyenletéből láttuk, hogy tetszőleges T hőmérsékleten mindig kapunk triviális megoldást is. Kezdve a T_c hőmérséklettől, azaz $T_c \geq T$–re, a triviális megoldás mellett megjelenik egy új megoldás melyre $m \neq 0$. Fontos megjegyezni viszont, hogy az $m \neq 0$ megoldáson kívül a rendparaméter egyenlet $m = 0$ triviális megoldása mindig megmarad. Azaz, T_c alatt mindig két rendparaméter megoldásunk van (teljesen általánosan: legalább kettő). Ezen megállapítás nemcsak a Weiss-modell sajátja, hanem minden rendparaméter-egyenlet esetében helytálló. Most a kérdés az, hogy T_c alatt a két lehetséges ($m = 0$ és $m \neq 0$) megoldás közül melyiket választja ki a rendszer. Ezen kérdés nem válaszolható meg soha csupán a rendparaméter egyenlete alapján, hanem eldöntéséhez mindig egy energetikai-jellegű elemzés szükséges. Mindig azon fázis valósul meg a modellen belül, amely a két lehetséges T_c alatti megoldás közül energetikailag a legkedvezőbb[58]. Tehát az a tény, hogy a rendparaméter egyenlete nemtriviális megoldást ad, még nem jelenti azt, hogy a modell (vagy az általa jellemzett rendszer) keretei között fázisátalakulás megy végbe. A nemtriviális megoldás létezése mellett mindig stabilitási elemzés is szükséges, melynek biztosítania kell a nemtriviális megoldás megvalósulását, a triviális megoldással szemben.

A levezetett $< H_e >\sim -m^2$ azt sugallja, hogy a Weiss-féle molekuláris–tér elméletben a nemtriviális $m \neq 0$ megoldás az, mely energetikailag a rendszert stabilizálja, mert hiszen $m \neq 0$ megjelenésével az alapállapoti energia csökken. Ez viszont csak egy „jel", mert az alapállapoti energia csupán $T = 0$–ban jellemzi a

[58]Ezen jellemző konkrét tartalmát már az első fejezetben bemutattuk. A rendszerben $T \neq 0$ hőmérsékleten mindig az a fázis jelenik meg mely termodinamikai potenciálja Φ a lehető legkisebb. A $T = 0$ esetben az energetikai stabilitást a legkisebb alapállapot energia biztosítja.

rendszer stabilitását, $T \neq 0$–ban nem. Zérótól különböző hőmérsékleten az energetikai stabilitást a jellemző termodinamikai potenciál segítségével lehet csak pontosan tárgyalni. Ezt tanulmányozzuk az elkövetkezőkben.

Amint láttuk, a levezetett kvantummechanikai állapotösszeg alapján a termodinamikai potenciálunk:

$$\Phi = -Nk_BT \ln \left(\frac{\sinh(\frac{(2S+1)}{2S}\bar{x})}{\sinh(\frac{\bar{x}}{2S})} \right) , \tag{9.118}$$

ahol $\bar{x} = \beta\mu H_{eff}$, és $\mu = \bar{\mu}S$.

Most $H = 0$ esetében, $m = 0$ rendparaméter értékre

$$\Phi_0 = \Phi(m = 0) = -Nk_BT \ln(2S + 1) , \tag{9.119}$$

mely a Φ kifejezéséből az $\bar{x} \to 0$ határesetben kapható. Nyilvánvalóan, Φ_0 a paramágneses fázist jellemzi.

Az energetikai stabilitás elemzése érdekében, ki kell számítanunk a

$$\delta\Phi = \Phi - \Phi_0 = -Nk_BT \ln \left[\frac{\sinh(\frac{(2S+1)}{2S}\bar{x})}{(2S+1)\sinh(\frac{\bar{x}}{2S})} \right] , \tag{9.120}$$

értéket. A $T \sim T_c$ kritikus hőmérsékleti tartományban a rendparaméter egyenlete által adott két lehetséges megoldás közül a nemtriviális ($m \neq 0$) megoldás valósul meg a modell keretei között, ha $\delta\Phi < 0$. Ez esetben lesz ugyanis a rendezett fázis a rendszer számára termodinamikailag kedvezőbb (azaz stabil).

A Weiss-modell esetében mindez megvalósul. Például, kis $m \neq 0$ esetében, $\delta\Phi$ értéke könnyen kifejezhető. A $\sinh(x)$ függvény kis-argumentumú sorfejtését alkalmazva

$$\sinh(x) = x + \frac{x^3}{6} + \dots , \tag{9.121}$$

a $\delta\Phi$ logaritmusa alatti argumentum, $\bar{x}$–ben másodrendű pontosságig, a következőképpen alakul:

$$\mathcal{J} = \left[\frac{\sinh(\frac{(2S+1)}{2S}\bar{x})}{(2S+1)\sinh(\frac{\bar{x}}{2S})} \right] = \left[1 + \frac{(2S+1)^2}{(2S)^2}\frac{\bar{x}^2}{6} + \dots \right] \cdot \left[1 + \frac{\bar{x}^2}{(2S)^2}\frac{1}{6} + \dots \right]^{-1} . \tag{9.122}$$

Kis x–re:

$$1/(1 + x) \sim (1 - x + \dots) , \tag{9.123}$$

tehát $\bar{x}^2$ pontosságig

$$\mathcal{J} = 1 + \frac{\bar{x}^2}{6(2S)^2}[(2S+1)^2 - 1] + \ldots \tag{9.124}$$

A $\delta\Phi$ kifejezésébe $\ln(\mathcal{J})$ kerül bele. Ekkor figyelembe véve, hogy kis x–re

$$\ln(1+x) \sim x \ , \tag{9.125}$$

következik:

$$\delta\Phi = -Nk_BT\frac{\bar{x}^2}{24S^2}[(2S+1)^2 - 1] + \mathcal{O}(\bar{x}^4) \ . \tag{9.126}$$

Mivel $\bar{x} \sim m$ áll fenn $H = 0$ esetén, a spontán mágneses momentummal rendelkező ferromágneses rendezett fázis megjelenésére vonatkozólag, az $m << 1$ esetben, azt kapjuk, hogy

$$\delta\Phi \sim -m^2 \ . \tag{9.127}$$

Mindez igazolja, hogy a Weiss-modell keretei között az $m \neq 0$ nemtriviális megoldás nemcsak matematikai megoldás, hanem egyben fizikai is.

Érdemes tehát megjegyezni azt az észrevételt, miszerint a rendezett fázis megjelenésének kimutatása érdekében a rendparaméter egyenletét mindig $\delta\Phi$ kifejezésével párhuzamosan kell tárgyalni. Minden esetben $\delta\Phi < 0$ biztosítja, hogy a rendparaméterre kapott nemtriviális megoldás stabil rendezett fázis fellépését idézze elő.

A fejezet lezárása előtt megemlítjük, hogy az itt bemutatott elméleti eredményeket háromdimenziós rendszerekre vonatkozó kísérleti adatokkal összevetve tiszta szigetelő jellegű anyagokban, melyekben a vezetési elektronok[59] szerepe a mágneses tulajdonságok kialakításában kevésbé mérvadó (mint pl. EuS esetében), a molekuláris-tér elmélete által megadott kritikus hőmérséklet körülbelűl 50%–al nagyobb a mért T_c értéknél. Tehát ezen típusú elmélet mindig túlértékeli a T_c értékét. Egy- és két-dimenziós rendszerekben az eltérés sokkal drasztikusabb.

Ezen pontatlanságok okainak kiderítésével foglalkozunk a következő fejezetben.

9.7 Szakirodalmi jegyzék 9.

[1] H. E. Stanley, *Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena*, Clarendon Press, Oxford, 1971, 90 oldal.

[2] N. Goldenfeld, Frontiers in Physics Vol. 85, *Lectures on Phase Transitions and the Renormalization group*, Addison-Wesley, 1992, 105 oldal.

[3] H. E. Stanley, *Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena*, Clarendon Press, Oxford, 1971, 6.5 paragrafus, 91 oldal.

[4] A. A. Abrikosov, L. P. Gorkov, I. E. Dzyaloshinski, *Methods of Quantum*

[59] Teljesen általánosan: itineráns alrendszer

Field Theory in Statistical Physics, Dover Publications Inc., New York, Revised Edition, 1975, pg. 304.

[5] N. Goldenfeld, Frontiers in Physics Vol. 85, *Lectures on Phase Transitions and the Renormalization group*, Addison-Wesley, 1992, 3.7.2. paragrafus, 108 oldal.

[6] N. Goldenfeld, Frontiers in Physics Vol. 85, *Lectures on Phase Transitions and the Renormalization group*, Addison-Wesley, 1992, 108 és 112 oldal.

10 Molekuláris–tér elmélet kiértékelése

A molekuláris–tér elmélet termodinamikai rendszerekre vonatkozólag sok esetben fontos szerepet játszik hiszen az újonnan megjelent rendezett fázisok leírásának legtöbbször kiindulópontja. Ezért alapos kiértékelése az értékének pontos megértése szempontjából elengedhetetlen. Ezen programot valósítjuk meg a következőkben, úgy, hogy a Weiss-modell eredményeit egzakt megoldásokkal hasonlítjuk össze. Hasonló programot valósitunk meg majd egy másik konkrét rendszer esetében. Az összegyüjtött információk birtokában tárgyaljuk mindezek után, külön fejezetben, a Ginzburg-kritériumot.

A molekuláris–tér elméletének egyik lényegi állítása, hogy T_c csak z–től függ, és a dimenziótól nem, így $d = 1$–ben is lehet fázisátalakulás. Ez a feltételezés *Pierre Weiss* hatására született. Ebből kiindulva a Heisenberg modell megjelenése előtt *Wilhelm Lenz* egy *Ising* nevű doktoranduszának ajánlott egy $d = 1$ dimenziós, egyszerűsített spin-változóval rendelkező modellt egzakt megoldás céljából. Az elképzelés az volt, hogy ezen modell keretén belül, egy egzakt–megoldással támasszák alá a *Weiss* elméletet. Később a modell *Ising*-modell néven vált ismeretessé.

10.1 A d=1 dimenziós Ising-modell egzakt megoldása

Az Ising-spin jellemzője az az egyszerűsítés, miszerint az $\vec{S}$ vektornak csak két tengelyvetülete lehetséges: $\pm S$. Ha ezen spinek között rövidhatótávolságú kölcsönhatásokat veszünk figyelembe (azaz csatolás csak egymásmelletti csomópontokon elhelyezkedő spinek között van), kapjuk az Ising modellt. Ez $d = 1$ dimenzióban a következő Hamilton-operátorral rendelkező modell:

$$H = -\sum_{i=1}^{N-1} J S_i S_{i+1} \; ; \quad S_i = \pm 1 \; , \tag{10.1}$$

ahol az egyszerűség kedvéért $|S_i| = 1$, továbbá N a $d = 1$ dimenziós láncban szereplő spinek száma. Ez a nyitott Ising lánc $d = 1$–ben.

10.1.1 Az állapotösszeg kiszámítása

Az állapotösszeg mindezek után a következőképpen írható fel:

$$Z_N = \mathrm{Tr} e^{-\beta H} = \sum_{S_1=-1}^{+1} \sum_{S_2=-1}^{+1} \dots \sum_{S_N=-1}^{+1} \exp\left[x \left(\sum_{i=1}^{N-1} S_i S_{i+1} \right) \right] \; , \tag{10.2}$$

ahol $x = \beta J$. Tehát

$$Z_N = \sum_{\{S_i\}} \exp\left[\sum_{i=1}^{N-1} \beta J_i S_i S_{i+1} \right] \; . \tag{10.3}$$

Most megfigyelhető, hogy az exponensben az S_N tag egyetlen helyen szerepel éspedig az exponensbe megjelenő összeg legutolsó tagjában. Így

$$Z_N = \left[\left(\sum_{S_1=\pm 1} \dots \sum_{S_{N-1}=\pm 1}\right) \exp\left[x\left(\sum_{i=1}^{N-2} S_i S_{i+1}\right)\right]\right]\left(\sum_{S_N=\pm 1} \exp[\beta J S_{N-1} S_N]\right) \quad (10.4)$$

A Z_N utolsó tényezőjében a leválasztott S_N változó szerepel. Az e szerinti összegzés a $2\cosh(\beta J S_{N-1})$ tagot adja eredményül. Mivel $S_{N-1} = \pm 1$, és a $\cosh(x)$ páros függvény, a $2\cosh(\beta J)$ tag kiemelhető minden összeg alól, mert értéke S_{N-1}–től független. Mindezek után az $N-1$–edik spin lesz az utolsó, és ezzel az eljárás megismételhető, és így tovább. Most N spin esetén, mindezt $N-1$–szer végezhetjük el, mely során $(2\cosh J\beta)^{N-1}$ lesz az eredmény, és még megmarad a $\sum_{S_1=\pm 1}$ összeg, alatta egy 1-es faktorral (azaz exponenciális függvény nélkül). Így $\sum_{S_1=\pm 1} 1 = 2$, tehát:

$$Z_N = 2^N \cosh^{N-1}(\beta J) \ . \quad (10.5)$$

Ez az eljárás akkor is működik, ha minden egymásmelletti csomópont között a J_i csatolás más:

$$H = -\sum_{i=1}^{N-1} J_i S_i S_{i+1} \ . \quad (10.6)$$

Ez esetben, analóg módon:

$$Z_N = 2^N \prod_{i=1}^{N-1} \cosh(\beta J_i) \quad (10.7)$$

adódik.

10.1.2 A termodinamikai jellemzők

Mindezek után, Z_N alapján minden termodinamikai jellemző meghatározható. Legyen például a $J_i = J$ homogén esetet. A Gibbs potenciál ekkor

$$\Phi = -N k_B T \ln 2 - (N-1) k_B T \ln\left[\cosh\frac{J}{k_B T}\right] \ . \quad (10.8)$$

Nyilvánvalóan, ez esetben a külső mágneses tér $H = 0$. Az entrópia kifejezése:

$$\begin{aligned} S &= -\frac{\partial\Phi}{\partial T} = N k_B \ln 2 + (N-1) k_B \ln\left(\cosh\frac{J}{KT}\right) \\ &\quad +(N-1) k_B T \tanh\frac{J}{k_B T}\left(-\frac{J}{k_B}\frac{1}{T^2}\right) \ , \end{aligned} \quad (10.9)$$

tehát

$$S = Nk_B \ln 2 + (N-1)k_B \ln(\cosh\frac{J}{k_BT}) - (N-1)k_B\frac{J}{k_BT}\tanh\frac{J}{k_BT}\ . \qquad (10.10)$$

Ezen összefüggés alapján, a fajhő könnyen kifejezhető:

$$\begin{aligned} C &= T\frac{\partial S}{\partial T} = k_B(N-1)T\left[(\mathrm{th}\frac{J}{k_BT})\left(\frac{J}{k_B}\right)\left(-\frac{1}{T^2}\right) - \frac{J}{k_B}\left(-\frac{1}{T^2}\right)\mathrm{th}\frac{J}{k_BT}\right. \\ &- \left.\frac{J}{k_BT}\frac{1}{\cosh^2(\frac{J}{k_BT})}\left(-\frac{J}{k_B}\frac{1}{T^2}\right)\right]\ , \end{aligned} \qquad (10.11)$$

tehát

$$C = k_B(N-1)\left(\frac{J}{k_BT}\right)^2\frac{1}{\cosh^2(\frac{J}{k_BT})}\ . \qquad (10.12)$$

10.1.3 A korrelációs függvény

A korrelációs[60] függvények egzakt kiszámítása is lehetséges. Így például az $\langle S_iS_{i+n}\rangle$ korrelációs függvény az értelmezés szerint:

$$G(i,i+n) = \langle S_iS_{i+n}\rangle = \frac{1}{Z}\,\mathrm{Tr}(S_iS_{i+n}e^{-\beta H}). \qquad (10.13)$$

A számítások szempontjából előnyösebb a különböző J_i csatolásokat tartalmazó kifejezést használni. Ekkor a $\beta J_i = \tilde{J}_i$ jelölést bevezetve:

$$\langle S_iS_{i+n}\rangle = \frac{1}{Z_N}\sum_{\{S_i\}} S_iS_{i+n}e^{\sum_{i=1}^{N-1}\tilde{J}_iS_iS_{i+1}} = \frac{1}{Z_N}\frac{\partial}{\partial\tilde{J}_i}\frac{\partial}{\partial\tilde{J}_{i+1}}\cdots\frac{\partial}{\partial\tilde{J}_{i+n-1}}Z_N\ , \qquad (10.14)$$

kifejezés adódik. Mivel $S_i^2 = 1$, a deriválás soran kapott spinszorzat formája a következő:

$$S_iS_{i+1}^2S_{i+2}^2\ldots S_{i+n-1}^2S_{i+n} = S_iS_{i+n} \qquad (10.15)$$

Eddig tehát az értelmező képlet alapján fejeztük ki az $< S_iS_{i+n} >$ értéket. Ennek alapján viszont levezettük a (**??**) képletet, amit mostmár az állapotösszeg

$$Z_N = 2^N\prod_{i=1}^{N-1}\cosh\tilde{J}_i \qquad (10.16)$$

végső formájára alkalmazni lehet. Megfigyelhető, hogy

$$\frac{\partial Z_N}{\partial\tilde{J}_i} = (\tanh\tilde{J}_i)\cdot Z_N\ . \qquad (10.17)$$

[60] Az itt használt korrelációs függvény fogalom pár-korrelációs függvényt, azaz kétpont-függvényt jelent.

Ebből következik viszont, hogy:

$$G(i, i+n) = \prod_{j=i}^{i+n-1} \tanh \tilde{J}_j \ , \tag{10.18}$$

továbbá, ha $J_i = J$ minden i–re, akkor:

$$G(i, i+n) = \langle S_i S_{i+n} \rangle = \tanh^n \left(\frac{J}{k_B T} \right) \ . \tag{10.19}$$

Elég információnk gyült össze, hogy a hosszútávú térbeli rendezettség fellépésének lehetőségét is megvizsgáljuk.

10.1.4 A hosszútávú térbeli rendezettség lehetősége

Mindezek után, a hosszútávú térbeli rendezettség definiciója szerint HTR típusú fázisátalakulást akkor kapunk, ha

$$\lim_{n \to \infty} G(i, i+n) \neq 0 \ . \tag{10.20}$$

Megfigyelhető viszont, hogy $\tanh(x) < 1$ mindig, ha x véges. Tehát (**??**) egyenletben az $n \to \infty$ határesetben és $T \neq 0$–ban, végtelen sok egynél kisebb számot szorzunk össze. Ekkor viszont ($T \neq 0$) esetében:

$$\lim_{n \to \infty} G(i, i+n) = 0 \ . \tag{10.21}$$

Tehát a rendszer véges hőmérsékleten nem mutat fázisátalakulást. Megjegyzendő viszont, hogy $T = 0$–ban

$$\tanh(x)|_{x \to \infty} = 1 \ , \tag{10.22}$$

tehát ekkor

$$\lim_{n \to \infty} G(i, i+n) = 1 \ . \tag{10.23}$$

Így a $d = 1$ dimenziós Ising láncot szokták úgy is emlegetni, hogy $T_c = 0$ kritikus hőmérséklettel rendelkező rendszer.

10.1.5 A mágneses szuszceptibilitás

A mágneses szuszceptibilitás kiszámítása a korrelációs függvényen keresztül történik. Tudjuk ugyanis[61], hogy

$$\chi = \sum_{ij} \chi_{ij} \ , \tag{10.24}$$

[61] Lásd 8.3.2 paragrafus

ahol

$$\chi_{ij} = \beta\bar{G}(i,j)\ . \tag{10.25}$$

A felülvonással hangsúlyozott jelölés a korrelációs függvényben azt jelzi, hogy most nem spin korrelációról van szó, hanem lokális mágneses momentum korrelációról. Azaz

$$\bar{G}(i,j) = \langle M_i M_j \rangle\ , \tag{10.26}$$

ahol

$$M_i = \bar{\mu} S_i\ . \tag{10.27}$$

Mindezek után a mágneses szuszceptibilitás formája:

$$\chi = \frac{\bar{\mu}^2}{k_B T} \sum_{i,j=1}^{N} \langle S_i S_j \rangle\ . \tag{10.28}$$

Ekkor viszont a spinkorrelációs függvényre vonatkozó ismereteinket felhasználhatjuk a következő képpen. Legyen:

$$v = \tanh \frac{J}{k_B T}\ . \tag{10.29}$$

Ekkor

$$\langle S_i S_j \rangle = v^{|i-j|}\ . \tag{10.30}$$

Így tehát

$$\chi = \frac{\bar{\mu}^2}{k_B T} \sum_{i,j=1}^{N} v^{|i-j|}\ . \tag{10.31}$$

Ez esetben, a szuszceptibilitás kiszámításakor csupán azt kell nyomon követni, hogy a lánc mentén hány csomópont pár van, mely elemei közötti távolság, egy rőgzitett $|i-j|$ értékkel egyenlő.

Az összeg kiértékelésében vegyük először figyelembe, hogy N csomópont lévén, N olyan eset van, amikor δ_{ij} áll fenn, azaz $|i-j| = 0$. Ez ad az elemzett összegben egy $Nv^0 = N$ járulékot. Most, ha az i és j pontosan a lánc két végén van, ez két esetet ad (i és j felcserélhető). Ekkor $|i-j| = N-1$, tehát v^{N-1}, és a neki megfelelő járulék az összegben $2v^{N-1}$. Továbbmenőleg, ha $|i-j| = n$, és az n távolság rögzített és $1 \leq n \leq N-2$ között mozog, akkor a következő helyzet áll fenn: a lánc első n darab, és utolsó n darab csomópontján csak egy-egy szomszéd akad n távolságra. Ezzel ellentétben, a közbülső $(N-2n)$ csomópont esetében, minden csomópontnak összesen két darab szomszédja van n távolságra. Tehát az összegben van $1 \cdot (2n) \cdot v^n$

járulék a $2n$ darab, két szélen fekvő csomópontokból, és van $2 \cdot (N-2n) \cdot v^n$ járulék a középen fekvő csomópontokból [62]. De viszont, $2(N-2n)+2n = 2(N-n)$, így, a χ kifejezése a következő formában adható meg

$$\chi = \frac{\bar{\mu}^2}{k_B T}\left(N + 2v^{N-1} + 2\sum_{n=1}^{N-2}(N-n)v^n\right) . \tag{10.32}$$

Az utolsó tagban, n felső határa $N-2$, mert azon esetet, mikor i, j a lánc két szélén van (ekkor $n = N-1$), már a második tagban figyelembe vettük. Mindezek után, a χ két utolsó tagjának összeolvasztásával, a szuszceptibilitás formája a következő képpen alakul:

$$\chi = \frac{\bar{\mu}^2}{k_B T}\left(N + 2\sum_{n=1}^{N-1}(N-n)v^n\right) . \tag{10.33}$$

Ekkor viszont

$$\chi = \frac{\bar{\mu}^2}{KT}\left(N + 2NK_A - 2K_B\right) , \tag{10.34}$$

ahol

$$K_A = \sum_{n=1}^{N-1} v^n = \sum_{n=0}^{N-1} v^n - 1 = \frac{1-v^N}{1-v} - 1 , \tag{10.35}$$

továbbá

$$K_B = \sum_{n=1}^{N-1} n v^n = v\frac{\partial}{\partial v}\sum_{n=1}^{N-1} v^n = v\frac{\partial}{\partial v}K_A . \tag{10.36}$$

Mindezek után

$$K_B = \frac{v}{(1-v)^2}[1 - Nv^{N-1} + (N-1)v^N] \tag{10.37}$$

Megfigyelhető továbbá, hogy mivel tetszőleges kis rögzített hőmérsékleten $v < 1$, az $N \to \infty$ határesetben

$$\lim_{N\to\infty} N v^N = 0 . \tag{10.38}$$

Tehát az $N \to \infty$ termodinamikai határesetben

$$K_A \to \frac{v}{1-v} , \quad K_B \to \frac{v}{(1-v)^2} . \tag{10.39}$$

[62] A könnyebb megértés céljából, képzeljük el, hogy van egy botunk, mely hossza pontosan n. Most abból a célból, hogy megállapítsuk, hogy az i rögzített csomópontnak hány darab n távolságra lévő szomszédja van a láncon, a bot egyik végét az i csomópontba helyezzük, majd a botot jobbra és balra elforgatjuk a lánc irányába. Ha a bot másik vége csomópontba ér a forgatás után, akkor van szomszéd, ha nem, akkor nincs.

Ezen egyenlőségeket χ-be helyettesítve, és az $N \to \infty$ határesetet véve a szuszceptibilitásban is, a következő összefüggés adódik:

$$\chi = \frac{N\bar{\mu}^2}{k_B T}\left(1 + 2K_A - \frac{2}{N}K_B\right)|_{N\to\infty} , \tag{10.40}$$

azaz

$$\chi = \frac{N\bar{\mu}^2}{k_B T}\left(1 + 2K_A\right) . \tag{10.41}$$

Tehát a mágneses szuszceptibilitásra vonatkozó végeredmény:

$$\chi|_{N\to\infty} = \frac{\bar{\mu}^2 N}{k_B T}\frac{1+v}{1-v} = \frac{\bar{\mu}^2 N}{k_B T}\exp(2\beta J) . \tag{10.42}$$

A χ kiértékelése szempontjából figyeljük meg, hogy a $T \gg 1$ esetben

$$\chi = \frac{\mathcal{C}}{T} \tag{10.43}$$

Curie-formájú kifejezést kapunk, azaz a rendszer úgy viselkedik, mind ha nemkölcsönható spinek építenék fel. Viszont ha a hőmérséklet csökken, a $T \to 0$ határesetben az $1/\chi$–nek T függvényében adott egyenes grafikonja lefelé görbül, és vizszintes érintővel halad be az origóba. Közben, a viselkedése:

$$\chi(T)|_{T\to 0} \sim \frac{1}{T}\exp\left(+\frac{konst}{T}\right) , \tag{10.44}$$

típusú szingularitást mutat. Amint látható, nyoma sincs fázisátalakulásnak $T \neq 0$ hőmérsékleten az egzakt megoldás szintjén, ellentétben a Weiss-féle elmélet következtetéseivel.

10.1.6 A fajhő tanulmányozása

A fajhőt (**??**) adja meg. A termodinamikai határesetben vett kifejezése

$$\frac{C}{k_B N} = \left(\frac{J}{k_B T}\right)^2 \cosh^{-2}\left(\frac{J}{k_B T}\right) . \tag{10.45}$$

A fajhő viselkedését elemezve megfigyelhető, hogy a $T \to 0$, illetve a $T \to \infty$ határesetekben $C \to 0$. A két hőmérsékleti határeset között így egy maximumnak kell lenni. Ez mindig véges nagyságú, és nem eredményez divergenciát. Ezen maximumnak nincs köze fázisátmenethez, és okát tekíntve *Schottky* eredetű. Tudvalevő ugyanis, hogy abban az esetben, ha a rendszernek egy jól meghatározott δE gerjesztési energiája van, ezen típusú viselkedés mindig megjelenik. A mi esetünkben δE értékét egyértelműen definiálja az Ising-spin jelleg: egy rögzített spin tengelyvetületének -1–ről $+1$–re való átugrása, minden egyes csomóponton ugyanazon $2J$ lokális energiajárulékot igényel.

Tehát a korrelációs függvény, a fajhő és a szuszceptibilitás viselkedése igazolja, hogy zérótól különböző hőmérsékleten a $d = 1$ dimenziós Ising modell nem ad fázisátalakulást. Tehát ez esetben a rendszer termodinamikai potenciálja $T \neq 0$ értékekre és termodinamikai határesetben nem mutat semmilyen fajta rendellenes viselkedést.

10.2 A transzfer mátrix módszer

A tanulmányozott modell $H \neq 0$ külső tér jelenlétében a bemutatott módszerrel nem oldható meg egzaktul. Ez esetben olyan eljárást alkalmazunk, mely nagy jelentőséggel bír fázisátalakulások kimutatásában, ezért a következőkben ismertetjük. A módszer bemutatása során látni fogjuk, hogyan is történik a fázisátalakulás hiányának szigorú igazolása.

Hamilton operátorunk ezúttal:

$$H = -J \sum_i S_i S_{i+1} - \bar{\mu} H \sum_i S_i \tag{10.46}$$

A kiszámítandó állapotösszeg ezúttal

$$Z_N = \mathrm{Tr} e^{-\beta H} = \sum_{S_1=-1}^{+1} \sum_{S_2=-1}^{+1} \dots \sum_{S_N=-1}^{+1} \exp\left[x \left(\sum_i S_i S_{i+1} \right) + h \left(\sum_i S_i \right) \right] , \tag{10.47}$$

ahol $x = \beta J$ és $h = \beta \bar{\mu} H$.

Az eljárás lényege abból áll, hogy a Tr–ből származó és a dinamikus változókból álló összegből, kétindexes tagok szorzatát alakítsunk ki. A mi esetünkben ez úgy valósítható meg, ha a

$$h \sum_i S_i = \frac{h}{2} \sum_i (S_i + S_{i+1}) \tag{10.48}$$

átalakítást alkalmazzuk a Zeeman tagban. Ekkor az állapotösszeg:

$$\begin{aligned} Z_N &= \sum_{S_1} \sum_{S_2} \dots \sum_{S_N} \left[\exp[\frac{h}{2}(S_1 + S_2) + x S_1 S_2] \right] \cdot \\ &\cdot \left[\exp[\frac{h}{2}(S_2 + S_3) + x S_2 S_3] \right] \dots \left[\exp[\frac{h}{2}(S_N + S_1) + x S_N S_1] \right] , \end{aligned} \tag{10.49}$$

alakban írható. Nyilvánvalóan az eljárás csupán periodikus határfeltételek mellett $(S_{N+1} = S_1)$ tartható fenn.

Most viszont Z_N kifejezésben kétindexes skalárok szorzata szerepel, melyeket természetes módon tekinthetünk mátrixelemeknek. Legyen tehát

$$M_{i,j} = \left[\exp[\frac{h}{2}(S_i + S_j) + x S_i S_j] \right] . \tag{10.50}$$

Ekkor viszont

$$Z_N = \sum_{i_1} \sum_{i_2} \dots \sum_{i_N} M_{i_1,i_2} M_{i_2,i_3} \dots M_{i_N,i_1} \tag{10.51}$$

összefüggés adódik. Mindezek után a mátrixszorzat definícióját figyelembe véve:

$$\sum_{i_2} M_{i_1,i_2} M_{i_2,i_3} = (M^2)_{i_1,i_3} \ , \tag{10.52}$$

a következő eredmény írható:

$$Z_N = \sum_{i_1} (M^N)_{i_1,i_1} = \mathrm{Tr}(M^N) \ . \tag{10.53}$$

Tehát az állapotösszeg kiszámításához az M mátrixot N–edik hatványra kell emelnünk, majd a kapott eredmény diagonális elemeit összegeznünk. Az így kapott kifejezésben az M mátrix neve *transzfermátrix*.

Tudvalevő viszont, hogy valós és szimmetrikus mátrixok esetében (amilyen M), mindig van egy $S^t = S^{-1}$ transzformáció, mely az M mátrixot diagonális formára hozza. Azaz

$$M' = S^{-1} M S \ , \quad (M')_{i,j} = \lambda_i \delta_{i,j} \ . \tag{10.54}$$

Itt hagyományosan λ_i jelöli a transzfermátrix sajátértékeit.

Tudvalevő viszont, hogy a Tr(...) operáció alatt megjelenő mátrixok mindig cirkulárisan permutálhatók. Ekkor viszont cirkuláris permutációk segítségével, egy $(M')^N$ szorzatban szereplő összes S^{-1} tag S mellé vihető, és $S^{-1}S = 1$ alapján (1-lévén itt egységmátrix) kiejthető. Így:

$$\mathrm{Tr}[(M')^N] = \mathrm{Tr}(M^N) \ , \tag{10.55}$$

tehát

$$Z_N = \sum_i (\lambda_i)^N \tag{10.56}$$

A rendszer tulajdonságaira, fázisátalakulás kimutatása céljából (például), az $N \to \infty$ termodinamikai határesetben vagyunk kíváncsiak. Ekkor viszont:

$$\begin{aligned} Z_N|_{N\to\infty} &= (\lambda_{max})^N \left(1 + (\frac{\lambda_1}{\lambda_{max}})^N + (\frac{\lambda_2}{\lambda_{max}})^N + \dots + (\frac{\lambda_p}{\lambda_{max}})^N \right) |_{N\to\infty} \\ &= (\lambda_{max})^N \ , \end{aligned} \tag{10.57}$$

ahol p a transzfermátrix dimenziója, és λ_{max} az M mátrix legnagyobb sajátértéke. Látható tehát, hogy az állapotösszeg meghatározásához $N \to \infty$ esetben, a transzfermátrix felírása után, annak legnagyobb sajátértékét kell csupán kiszámítanunk.

A mi esetünkben M_{S_i,S_j} egy 2×2 matrix, mely elemeinek értékét $S_i, S_j=\pm 1$ határozza meg. Tehát sajátértékegyenletünk:

$$\det\begin{bmatrix} e^{h+x}-\lambda & e^{-x} \\ e^{-x} & e^{-h+x}-\lambda \end{bmatrix}=0\ . \tag{10.58}$$

Ebből a sajátértékek:

$$\lambda_{1,2}=e^{x}\left[\cosh(h)\pm\left(\sinh^2(h)+e^{-4x}\right)^{\frac{1}{2}}\right]\ . \tag{10.59}$$

Tehát

$$(Z_N)|_{N\to\infty}=-k_BTN\ln\left(e^{x}\left[\cosh(h)+\left(\sinh^2(h)+e^{-4x}\right)^{\frac{1}{2}}\right]\right)\ . \tag{10.60}$$

Megfigyelhető, hogy $N\to\infty$ határesetben, és $h=0$ értékre Φ–re visszakapjuk a nyitott lánc esetében levezetett eredményt. Tehát a termodinamikai határesetben a határfeltételek a jellemző termodinamikai potenciál értékét nem befolyásolják.

Mindezek után a *Perron-tétel* kerül alkalmazásra[63]: Egy $N\times N$–es A matrix esetében, melyre N véges, és minden $A_{i,j}>0$, a legnagyobb sajátérték mindig: a) valós és pozitív; b) nem-degenerált; c) analitikus függvénye az $A_{i,j}$ elemeknek.

A mi esetünkben a Perron-tétel feltételei minden véges hőmérsékleten fennállnak, tehát a termodinamikai potenciál $T\neq 0$-ra analitikus függvény, azaz fázisátalakulás nincs.

10.3 A $T\to 0$ viselkedés tanulmányozása

A $d=1$ Ising modell tanulmányozása során láttuk, hogy véges hőmérsékleten fázisátalakulásunk nincs. Mégis említettük, hogy a $T\to 0$ határesetben χ divergál, így $T_c=0$ kritikus hőmérséklettel állunk szemben. Elemezzük a következőkben a $T\to 0$ határesetben megjelenő divergenciákat. Mindez azt fogja jelenteni, hogy a $T_c=0$ kritikus hőmérséklethez való közeledés „kritikus exponenseit" próbáljuk meghatározni.

Jellemezzük először a korrelációs hossz $\xi(T)$ kifejezését. Tudjuk, hogy $T>T_c$–re a $G(r)\sim e^{-\frac{r}{\xi(t)}}$ viselkedést kéne visszakapni. Ha a rácsállandót $a=1$–nek választjuk, akkor $n=r$ áll fenn a $G(i,i+n)$–ben. Így $T_c=0$; $T-T_c=T=t$ jelölésekkel:

$$G(r)\ =\ \tanh^r\frac{J}{k_BT}=\exp\left[r\ln\tanh\frac{J}{k_BT}\right]=e^{-\frac{r}{\xi(t)}}\ , \tag{10.61}$$

tehát

$$\xi(t)\ =\ +\frac{1}{\ln\coth\frac{J}{k_BT}}\ . \tag{10.62}$$

[63] Lásd például [1]

Tudvalevő viszont, hogy $t \to 0$ esetében $\frac{J}{k_B T} \to \infty$, és ekkor az $x \to \infty$ határesetben:

$$\coth x|_{x\to\infty} = 1 + 2e^{-2x} + \ldots \tag{10.63}$$

Figyelembe véve továbbá, hogy kis $y = e^{-2x}$ argumentumra

$$\ln(1+y)|_{y\to 0} \simeq y \ , \tag{10.64}$$

a ξ–ben szereplő nevező értéke:

$$\ln \mathrm{cth}\frac{J}{k_B t}|_{t\to 0} \simeq \ln\left[1 + 2e^{-\frac{2J}{k_B t}}\right]|_{t\to\ 0} \simeq 2e^{-\frac{2J}{k_B t}} \ . \tag{10.65}$$

Tehát:

$$\xi(t)|_{t\to 0} \simeq \frac{1}{2}e^{\frac{2J}{Kt}} \ , \tag{10.66}$$

azaz

$$\xi(t)|_{t\to 0} \sim e^{+\frac{K}{t}} \ ; \quad K = \frac{2J}{k_B} \ . \tag{10.67}$$

Látható tehát, hogy ξ nem írható fel hatványfüggvény formájában, mert $\xi(t) \to \infty$ divergenciája sokkal ,,erősebb" mint bármely hatványfüggvény. Az előbbi tanulmányaink alapján viszont tudjuk, hogy ez esetben a szigorú értelemben vett kritikus exponensek és skálatörvények alkalmazandók. Továbbá ilyen eset általában akkor áll fenn, ha a hosszútávú térbeli rendezettséggel járó fázisátalakulás tiltott, és ez általában a rendszerben fellépő nagymértékű fluktuáciok miatt van így. (A KTB topologikus fázisátalakulás esetében van például hasonló viselkedés). Mégis, amint láttuk, ξ divergenciája miatt a szigorú értelemben vett és ξ segítségével értelmezett kritikus exponensek alkalmazhatóak.

A szuszceptibilitásra vonatkozólag a $t \to 0$ határesetben:

$$\chi \sim e^{\frac{2J}{k_B t}} \sim \xi^1 \ , \tag{10.68}$$

azaz

$$\chi \sim \xi^{\bar{\gamma}} \ ; \quad \bar{\gamma} = 1 \ . \tag{10.69}$$

Látható tehát, hogy a szuszceptibilitás szigorú értelemben vett kritikus exponense $\bar{\gamma} = 1$.

A fajhő esetében, hasonlóan a $t \to 0$ határesetben:

$$C \sim \frac{1}{\cosh^2 \frac{J}{k_B t}} \sim \frac{1}{e^{\frac{2J}{k_B t}}} \sim e^{-\frac{2J}{k_B t}} \sim \xi^{-1} \ . \tag{10.70}$$

Tehát

$$C \sim \xi^{\bar{\alpha}} \; ; \quad \bar{\alpha} = -1 = -d \, . \tag{10.71}$$

Megfigyelhető tehát, hogy a fajhő szigorú értelemben vett kritikus exponense $\bar{\alpha} = -1$, és a rá vonatkozó (szintén szigorú értelemben vett) skálatörvény fennáll.

Az η–ra vonatkozólag megemlítendő, hogy $T = T_c$–ben $G(r) \sim \frac{1}{r^{d-2+\eta}}$ viselkedés kell fennálljon. A mi esetünkben azonban $G(r) = 1 =$ konstans $T = T_c = 0$–ban. Mindez csak úgy helytálló, ha

$$\eta = 1 \tag{10.72}$$

ugyanis ez esetben lesz $d = 1$-re $d - 2 + \eta = 0$. Megfigyelhető ekkor, hogy a szigorú értelemben vett Fisher-skálatörvény szintén fennáll, mert:

$$\bar{\gamma} = 2 - \eta = 1 \tag{10.73}$$

adódik.

A δ kritikus exponens értéke a mágnesezettségből meghatározható. A mágnesezettség viszont a transzfermátrix módszerrel levezetett termodinamikai potenciálból egzaktul meghatározható, mert ez estben a Φ explicit h függése is ismert. Ekkor az egyrészecskére eső mágnesezettség m:

$$m = -\frac{1}{N}\frac{\partial \Phi}{\partial h} = \frac{\sinh(h)}{(\sinh^2(h) + e^{-4\beta J})^{\frac{1}{2}}} \tag{10.74}$$

Továbblépés előtt érdemes megfigyelni, hogy a $\Delta = m$ „rendparaméter” értéke a $h, T \to 0$ határesetben a limesz operációk elvégzési sorrendjétől függ. Ha $T \neq 0$, és $h \to 0$, az $m = 0$ összefüggés adódik, jelezvén, hogy véges hőmérsékleten a hosszútávú térbeli rendezettséget jellemző rendparaméter értéke mindig zéró. Ha viszont $h \neq 0$ mellett $T \to 0$, akkor a végeredmény $m = 1$, és a h értékétől független. Mindez mutatja, hogy $T = 0$ egy olyan szinguláris pont, melyben (és kizárólagosan csak ebben) a rendszer rendezett. Ezért tekinthető a $T_c = 0$ pont kritikus pontnak matematikai értelemben.

Fejezzük ki a következőkben δ értékét. Tudjuk, hogy δ értelmezése $m \sim h^{1/\delta}$ összefüggésből ered, melyet $T = T_c$-ben kell venni δ levezetésekor. De amint láttuk, $T = 0$–ban, $m = 1$, tehát $\delta \to +\infty$. Ez az eredmény kissé meglepő, mert itt már szigorú értelemben vett skálatörvényekről van szó. De megfigyelhető, hogy a konszisztencia betartása mellett ez az egyedüli lehetséges érték. Mindez azért, mert a szigorú értelemben vett skálatörvények esetében, amint már említettük, az első Buckingham-Gunton összefüggés kötelezően fenn kell álljon, azaz

$$2 - \eta = d\frac{\delta - 1}{\delta + 1} \, . \tag{10.75}$$

Mindez, olyan körülmények között, mikor $\eta = 1$, és $d = 1$, azaz:

$$1 = \frac{\delta - 1}{\delta + 1} \,. \tag{10.76}$$

Innen látható, hogy nincs olyan véges δ érték, mely ezen összefüggést kielégíti, és az egyedüli lehetséges megoldás $\delta \to \infty$.

Végeredményként azonban látható, hogy a $T_c = 0$ pont közelében a szigorú értelemben vett skálatörvények teljesülnek.

10.4 Rövid kiértékelés

A levezetett egzakt eredményekből megfigyelhető, hogy a „homogén" molekuláris tér Weiss-féle elmélete a fluktuációk elhanyagolása miatt értékeli túl a T_c hőmérsékletet drasztikus módon. Így olyan esetben, amikor a fluktuációk nagyon nagyok (például $d = 1$ dimenzióban), kvalitatíve is teljesen hibás eredményt ad.

Ising a modell egzakt megoldása után azt a következtetést vonta le, hogy ha $d = 1$ dimenzióban a modell nem ad fázisátalakulást, akkor $d > 1$-ben sem fog adni, tehát az „Ising spin" túl erős absztrakció ahhoz, hogy rendszertulajdonságokat lehetne vele tanulmányozni. Az Onsager-féle egzakt megoldás $d = 2$ dimenzióban viszont bebizonyította, hogy ez teljesen téves felfogás[64].

Visszatérve a molekuláris–tér elméletéhez, egy egzakt megoldáson keresztül igazoltuk, hogy fő problémái a fluktuációk elhanyagolásából erednek. Továbbra sem tudjuk viszont, hogy a Weiss-féle modell eredményei miért pont azok, amelyek. Ezen kérdésre adja meg a választ a következő paragrafus, szintén egy egzakt megoldás tükrében.

10.5 A Kac modell egzakt megoldása

A Weiss-féle molekuláris–tér elméletet tanulmányozva láttuk, hogy a $\sum_{,i,j>} S_i S_j \to \sum_{<i,j>} S_i \langle S_j \rangle$ jellegű közelítés miatt gyakorlatilag a rövid hatótávolságú kölcsönhatásokat hosszú hatótávolságú kölcsönhatásokká alakítottuk át[65]. Ebből kifolyólag azt feltételezzük, hogy a MTE levezetett eredményei lényegében ezen lépésnek köszönhetőek. Ezen sejtést a Kac-modell egzakt megoldásán keresztül fogjuk igazolni.

A Kac modell-keretei között a rendszert úgy definiáljuk, hogy benne hosszú hatótávolságú kölcsönhatások vannak jelen. A jellemzés egyszerűsítése értelmében legyen a tanulmányozott spin Ising-jellegű, és minden spin minden spinnel ugyanolyan mértékben hasson kölcsön. Ekkor kapjuk a Kac-modellt értelmező Hamilton

[64] Lásd például [2]

[65] A bemutatottakon kívül lásd például [3]

operátort, melynek kifejezése:

$$H = -\frac{2J}{N} \sum_{1 \le i < j \le N} S_i S_j \; , \tag{10.77}$$

Ezen kifejezésben a $2J$ csatolási állandó matematikai egyszerűsítési okokból kifolyólag van ilyenformában megválasztva. Legyen továbbá $S_i = \pm 1$. Az első dolog, ami észrevehető, hogy itt a dimenzió nem fontos. Minden S_i minden más S_j–vel kölcsönhat egyenlő mértékben, így d nem releváns, csak N, a teljes részecskeszám. Látható tehát, hogy a Kac-modell már kiindulópontjában hasonlít a Weiss–féle következtetésekhez, ahol a d dimenzió szintén lényegtelen paraméter volt.

A Hamilton operátorban szereplő összeg $i < j$ formában van felírva. Ezen olyan formában változtatunk, hogy figyelembe vesszük az

$$(\sum_{i=1}^{N} S_i)^2 = \sum_{i=1}^{N} S_i^2 + \sum_{i \neq j}^{N} S_i S_j = \sum_{i=1}^{N} S_i^2 + 2\sum_{i<j}^{N} S_i S_j = N + 2\sum_{i<j}^{N} S_i S_j \tag{10.78}$$

összefüggést, hol $S_i^2 = 1$ egyenlőséget használtuk fel az utolsó lépésben. Ekkor

$$2\sum_{i<j}^{N} S_i S_j = (\sum_{i=1}^{N} S_i)^2 - N \; , \tag{10.79}$$

tehát Hamilton-operátorunk új formája

$$H = -\frac{J}{N} \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}} S_i S_j = J - \frac{J}{N} \left(\sum_{i=1}^{N} S_i \right)^2 . \tag{10.80}$$

A következő lépésben az állapotösszeget szeretnénk meghatározni. Ez standard módon $Z_N = \mathrm{Tr} e^{-\beta H}$, melynek formája

$$Z_N = e^{-\beta J} \sum_{\{S_i = \pm 1\}} \exp \left\{ \beta J \left(\sum_{i=1}^{N} S_i N^{-1/2} \right)^2 \right\} . \tag{10.81}$$

Most megfigyelhető, hogy a következő

$$\exp(a^2) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left(-\frac{x^2}{2} + \sqrt{2} a x \right) dx \; , \tag{10.82}$$

integrál egyenlőség mindig fennáll. Ezen képletnél megemlítjük, hogy jobbról balra alkalmazva a neve Gauss-integrál, míg balról jobbra alkalmazva a használatos neve Hubbard-Stratonovich-transzformáció. Az utóbbi irányban alkalmazva, az

$$a^2 = \beta J (\sum_{i=1}^{N} S_i N^{-1/2})^2 \tag{10.83}$$

jelöléssel, Z_N kifejezése a következőképpen alakul:

$$Z_N = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\beta J} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2/2} dx \sum_{\{S_i=\pm 1\}} \exp\left(\sqrt{2}\left(\frac{\beta J}{N}\right)^{1/2} x \sum_{i=-1}^{N} S_i\right) . \quad (10.84)$$

Láttuk viszont az Ising modellnél számítottak alapján, hogy

$$\sum_{\{S_i=\pm q\}} e^{K\sum_{i=1}^{N} S_i} = (2\cosh k)^N . \quad (10.85)$$

Mindezek után az állapotösszeg kifejezése a következőképpen alakul:

$$Z_N = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\beta J} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{x^2}{2}} dx \left[2\cosh(\sqrt{\frac{2\beta J}{N}} x)\right]^N . \quad (10.86)$$

Most az $x = y\sqrt{N}$ változócserét alkalmazva,

$$Z_N = \sqrt{\frac{N}{2\pi}} 2^N e^{-\beta J} \int_{-\infty}^{+\infty} \left[e^{-\frac{y^2}{2}} \cosh(\sqrt{2\beta J} y)\right]^N dy . \quad (10.87)$$

Megfigyelhető, hogy az $N \to \infty$ határesetben csupán a $[\ldots]$ zárójelben szereplő integrandus maximális értéke ad járulékot. Valóban, ez esetben az integrált *Darboux*-összegre bontva, és abból a legnagyobb függvényértéket kiemelve, mindig felírható:

$$[f(x)]^N = [f(x)|_{max}]^N (1 + \alpha_1^N + \alpha_2^N + \ldots) ; \quad (10.88)$$

ahol $\alpha_i < 1$, és így $\alpha_i^N|_{N\to\infty} = 0$.

Ténylegesen az integrál definíciója szerint

$$\int_a^b dy\, f^N(y) = \sum_{i=i_a}^{i_b} \Delta y_i f^N(\xi_i)|_{\Delta y \to 0} , \quad (10.89)$$

ahol a *Darboux*-összegben ξ_i értékét mindig a Δy_i felbontáson belül kell választani, továbbá a felbontás maximuma $\Delta y = \max \Delta y_i$ zéró felé kell tartson.

Ekkor a felbontást $\Delta y_i = \frac{1}{\sqrt{N}}$–nek választva, az $N \to \infty$ határesetben:

$$\begin{aligned} \int dy f^N(y)_{|N\to\infty} &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{i=i_a}^{i_b} f^N(\xi_i)_{|N\to\infty} \\ &= \frac{1}{\sqrt{N}} [\max f(y)]^N \left(1 + \left[\frac{f(y_1)}{\max f}\right]^N + \left[\frac{f(y_2)}{\max f}\right]^N + \ldots\right)_{|N\to\infty} \\ &= \frac{1}{\sqrt{N}} [\max f(y)]^N \end{aligned} \quad (10.90)$$

Megfigyelhető továbbá, hogy termodinamikai határesetben a

$$\frac{\Phi}{N} = -\frac{k_B T}{N} \ln Z \tag{10.91}$$

termodinamikai potenciálban, $N \to \infty$ miatt, csupán a Z_N–ben szereplő a^N típusú járulékok mérvadóak és maradnak meg. Így a $\Delta y_i = \frac{1}{\sqrt{N}}$ tényező az $N \to \infty$ határesetben semmi járulékot nem ad Φ/N–ben.

Mindezek után visszatérve az állapotösszeg kifejezésére, a következő egyenlőséget kapjuk:

$$Z_N|_{N\to\infty} = \sqrt{\frac{1}{2\pi}} 2^N e^{-\beta J} \left[\max \left(e^{-\frac{y^2}{2}} \cosh(\sqrt{2\beta J} y) \right) \right]^N . \tag{10.92}$$

Így tehát:

$$Z_N = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} 2^N e^{-\beta J} \left[\max \left(e^{-\frac{y^2}{2}} \cosh \left(\frac{2J}{k_B T} \right) \right) \right]^N . \tag{10.93}$$

Mi itt, az egy részecskére eső termodinamikai potenciált keressük:

$$\varphi_1 = \frac{\Phi}{N}|_{N\to\infty} = -k_B T \left[\frac{1}{N} \ln Z_N \right] |_{N\to\infty} \tag{10.94}$$

Ekkor az $N \to \infty$ határesetben:

$$\varphi_1 = -k_B T \ln 2 - k_B T \ln \left[\max \left(e^{-\frac{y^2}{2}} \cosh \left[\left(\frac{2J}{k_B T} \right)^{1/2} y \right] \right) \right] . \tag{10.95}$$

Most megfigyelhető viszont, hogy $T \to \infty$–re $\cosh 0 = 1$, továbbá $\max(e^{-\frac{y^2}{2}}) = 1$ és így $\varphi_1^0 = -k_B T \ln 2$. Ekkor viszont a megoldásunk y–ra $y = y_0 = 0$. Pontosan ugyanezt a megoldást kapjuk $J = 0$–ra is. Ténylegesen, ha $J = 0$, akkor:

$$\varphi_1^0 = \frac{\Phi^0}{N} = -k_B T \ln 2 . \tag{10.96}$$

Ezen eredmény magyarázata a következő: Mint hagyományosan

$$Z = \mathrm{Tr} e^{-\beta H} = \sum_{\{S_i\}} e^{-\beta H} ; \quad H = -\frac{2J}{N} \sum_{i\neq j} S_i S_j . \tag{10.97}$$

Ha azonban $J = 0$, akkor $H = 0$, azaz nincs ,,kölcsönhatás". Ekkor viszont

$$Z = \sum_{\{S_i\}} 1 = 2^N , \tag{10.98}$$

tehát

$$\Phi^0 = -k_B T N \ln 2 . \tag{10.99}$$

Mindezen magyarázatok igazolják, hogy az $y = 0$ megoldás a „paramágneses" megoldást jelöli, azaz a rendezetlen fázist. Az $y \neq 0$ megoldás ehhez képest, egy folytonosan belépő új tagot ad φ–ben, így y rendparaméterként kezelhető. Mindezt érzékelteti a következő észrevétel is: a Z_N értelmező képletéből (**??**):

$$\frac{\partial}{\partial(\beta J)}(Z_N e^{\beta J}) \sim \frac{1}{N}\left\langle\left(\sum_i S_i\right)^2\right\rangle \sim \frac{1}{N}M^2 \ , \tag{10.100}$$

ahol M a teljes mágneses momentum. Továbbá, a (**??**) összefüggésből látható ekkor, hogy

$$\frac{\partial}{\partial(\beta J)}(Z_N e^{\beta J}) \sim y\sinh(y) \sim M^2 \ . \tag{10.101}$$

De kis y–ra $\sinh(y) \sim y$, tehát $y \to 0$ határesetben

$$y \sim M \ , \tag{10.102}$$

azaz ténylegesen, y szemléletesen is egy rendparaméter jellegű mennyiség. Mindezek után tehát az $y = 0$ megoldás az $M = 0$ eredményt adja, míg $y \neq 0$ az $M \neq 0$ értéket eredményez.

Továbblépés céljából, hogy a Z_N–ben szereplő zárójeles kifejezés maximumát meghatározzuk, munkánk könnyítése végett a kifejezés logaritmusának maximumát keressük. Ez megtehető, mert $\ln(x)$ monoton növekvő függvény. Így a feladat:

$$f(y) = -\frac{y^2}{2} + \ln[\cosh(y\sqrt{2\beta J})] \tag{10.103}$$

maximumának meghatározására redukálódik. Ha ez a maximum $y = 0$-ban van, akkor paramágneses, ha $y \neq 0$-ban van, akkor ferromágneses (azaz rendezett) megoldást jelöl. Ekkor az $f'(y) = 0$ összefüggésből a

$$y = \sqrt{2\beta J}\tanh(\sqrt{2\beta J}y) \tag{10.104}$$

egyenletet kapjuk. Figyelembevéve, hogy a $B_S(x)$ Brillouin-függvény az Ising-esetben $\tanh(x)$ függvénybe megy át, az egyenlet, amit levezettünk, tulajdonképpen a Weiss-féle MTE jellegű összefüggés, az őt jellemző megoldástípusokkal. Kis x–re $\tanh(x) \simeq x$ így az $y \neq 0$ nemtriviális megoldás fennállásának feltétele:

$$\frac{1}{\sqrt{2\beta J}} \leq \sqrt{2\beta J} \ , \tag{10.105}$$

azaz

$$k_B T \leq 2J \ . \tag{10.106}$$

Tehát a rendezett fázist adó $y \neq 0$ megoldás kritikus hőmérséklete

$$T_c = \frac{2J}{k_B} \,. \tag{10.107}$$

Látható tehát, hogy itt $T_c \sim J$, és független d–től, akár a molekuláris–tér eredményekben.

A Kac-modell tárgyalásából kitűnik, hogy a direkt dimenzió–függetlenség, továbbá a molekuláris–tér elméletből kapott végeredmény a kölcsönhatások feltételezett hosszútávú jellegével van összefüggésben. Végtelen hatótávolságú kölcsönhatások esetében egy adott mágneses momentum végtelen sok más mágneses momentum hatását egyidejűleg érzi, így a fluktuációk átlagolódnak és egymást semlegesítik. Ilyen körülmények között az a hatás, ami megmarad, a kollektíven létrehozott molekuláris tér hatása csupán. Az MTE eredménye tehát ezen felfogás tükörképe.

Még egy érdekes dolgot kell itt megemlítenünk a Weiss-féle elmélettel kapcsolatban. A rácstípus rögzítésével a legközelebbi szomszédok z száma (az első koordinációs szférában levő rácspontok száma) is rögzítésre kerül. Azonban z a d dimenzióval mindig kapcsolatba hozható, ha a rácstípus rögzített. Például, hiperköbös rács esetében $z = 2d$. Most, a $d \to \infty$ végtelen dimenziós határesetben, az eredeti Hamilton-operátor szintjén is (melyben $\sum_{\langle ij \rangle} \vec{S}_i \vec{S}_j$ szerepel), egy rögzített spin az első koordinációs szférájában lévő végtelen sok spin hatását érzi. Ily módon $d = \infty$–ben a végtelen sok közeli szomszéddal való kölcsönhatás ugyanúgy hat, mint véges d-ben a hosszú hatótávolságú kölcsönhatások közvetítésével a rendszerben lévő összes spinnel való kölcsönhatás. Így ez alkalmommal is, végtelen sok (ezáltal közeli szomszéd) spin hatásának egymás közötti átlagolásával, a fluktuációk egymást kompenzálják és irrevelánsakká válnak. Ennek alapján igazolható, hogy a lokalizált spin rendszerekre vonatkozólag a MTE, $d = \infty$ dimenzióban egzakttá válik. Tehát a molekuláris-tér elméletnek lokalizált rendszerekre nézve két egzakt határesete van: a végtelen hatótávolságú kölcsönhatások és a végtelen dimenzió esete.

Nemlokalizált (azaz itineráns) rendszerekben a MTE $d = \infty$–ben sem egzakt. Ez esetben a kinetikus energia közvetítésével az egyedi részecskék által érzékelt tér ω függővé válik $d = \infty$–ben, azaz dinamikus jelleget ölt[66]. Megtörténhet, hogy ekkor a molekuláris–tér elméletének egy dinamikus változata válik egzakt leírássá $d \to \infty$ dimenzióban.

Ezen fejezetben a molekuláris–tér elméletét, a Weiss-modell konkrét esetére támaszkodva értékeltük ki. A kérdésre egy általánosabb szinten, a Ginzburg kritérium bemutatásakor később visszatérünk.

[66]Lásd [4]

10.6 Szakirodalmi jegyzék 10.

[1] T. Yanagisawa, Y. Shimoi, Int. Jour. Mod. Phys. **B10**, 3383, (1996).

[2] L. D. Landau, E. M. Lifsic *Elméleti Fizika V.*, Staisztikus Fizika, Tankönyvkiadó, Budapest, 1981, 563 oldal.

[3] H. E. Stanley, *Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena*, Clarendon Press, Oxford, 1971, 6.5 paragrafus: *Equivalence of the mean-field theory and an infinite interaction range*, 91 oldal.

[4] D. Vollhardt, *Investigation of Correlated Electron Systems Using the Limit of High Dimensions* fejezet, *Correlated Electron Systems* Vol. 9., ed. V. J. Emery, World Scientific, 1993, 57 oldal.

11 A Van der Waals gáz

Az előbbiekben a molekuláris–tér elmélet egy konkrét, spin rendszerekre vonatkozó megvalósítását mutattuk be. A leírás szemléltette a kritikus tartomány MTE–beli jellemzőit egy folytonos fázisátalakulás esetében.

11.1 Bevezetés

Láttuk viszont, hogy a kritikus jelenségek sokkal tágabb fogalomkört alkotnak és nincsenek a szimmetriasérülés jelenlétéhez kötve. Ezen észrevételből kiindulva, az alábbiakban egy merőben különböző esetben elemezzük az MTE alapgondolatainak egy megvalósítását, mely a reális gázok témaköréhez tartozik. Amint már említettük, ez esetben a kritikus tartományt a folyadék–gáz fázisdiagram kritikus pontjának közelsége definiálja. Ezen példa azért is fontos, mert konkrétan érzékelteti, hogy a kritikus jelenségek leírásában nem a folytonos fázisátalakulás, illetve a szimmetriasértés az alapvető koncepciók, hanem a korrelációs hossz divergálása és a végtelen sok egyenértékű szabadságfok ezzel járó megjelenése. Ezek ugyanis azok az alapgondolatok, melyek a skálainvariancia és az általánosított homogenitáson keresztül a skálatörvényekhez vezetnek.

Amint említettük, a kritikus exponensek univerzális jellegűek. Mindez azt jelenti, hogy egy univerzalitási osztály keretein belül értékük változatlan, azaz nem függenek konkrét modell jellemzőitől[67]. Egy konkrét modellre levezetett kritikus exponens értékek, amennyiben a megoldás egzakt, az univerzalitási osztályra jellemző értékeket adják vissza. Amennyiben azonban közelítést alkalmaztunk (például molekuláris–tér jellegű közelítést), a kritikus exponensek az illető közelítéses elméleti leírás alapfeltevéseit is tükrözik. Ezáltal a mért értékekkel való összehasonlításban jelzik, hogy az alkalmazott közelítő feltételekkel mennyire állunk közel a valósághoz. A molekuláris–tér elmélet esetében a közelítés jellemzői annyira erősek, hogy teljesen átveszik a kritikus exponensek meghatározását, melyek most már az approximáció által adott univerzalitási osztály tükörképei lesznek, és nem a kiinduló rendszeré. Ilyen értelemben lehet „jellemzésbeli univerzalitás”–ról beszélni. Ez esetben, teljesen mindegy a konkrét alkalmazási terület milyensége, az alkalmazott közelítés dominál. Így lesz a spin-rendszer és a reális gáz, a Weiss- illetve a Van der Waals-elméletek szintjén teljesen hasonló (és szolgáltat hasonló kritikus jelenségeket is) a standard Landau elmélethez tartozó közös kritikus exponensekkel (MTE kritikus exponensek) együtt.

Ezen észrevételeknek viszont nem szabad azt a képet kelteniük, miszerint az univerzalitási osztályok és a kritikus jelenségek elmélete egy bizonyos approximáció kérdését jelentik. A kritikus jelenségeket, mint már említettük, modelltől és közelítéstől függetlenül a korrelációs hossz divergenciája határozza meg, míg az univerzalitási osztályokat olyan általános jellemzők adják meg (szintén approximációtól

[67] Természetesen, itt a „konkrét” jellemzők, az univerzalitási osztályt meghatározó jellemzőkön kívül értendők.

függetlenül), mint például a dimenzió, a dinamikus változó komponenseinek száma és a kölcsönhatás hosszú vagy rövid hatótávolsága. Nyilvánvalóan egy univerzalitási osztályba fognak tartozni azon modellek is, melyekről igazolható, hogy egyértelműen egymásba transzformálhatók. Az említett reális gáz és a spin-rendszerek viszonylatában ilyen példa is ismert. Ez az Ising modell és a „rács-gáz” egzakt ekvivalenciája[68]. Ezen kérdéssel azonban itt részletesen nem foglalkozunk.

11.2 A klasszikus reális gáz

Tárgyaljuk a továbbiakban a reális gázokat egy egyszerű, klasszikus közelítésben. Ennek lényege az, hogy a kinetikus és potenciális energiát klasszikus mennyiségeként kezeljük. Ezen elképzelés előfeltétele az

$$e^{-\beta(\hat{T}+\hat{V})} - e^{-\beta\hat{T}} \cdot e^{-\beta\hat{V}} = K(\hat{T},\hat{V}) = 0\ , \tag{11.1}$$

ahol a Hamilton-operátorunk a $\hat{T}$ kinetikus és a $\hat{V}$ potenciális energia operátorok összege:

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V}\ . \tag{11.2}$$

Nyilvánvalóan, $K(\hat{T},\hat{V}) = 0$ fennállása $\hat{T}$ és $\hat{V}$ egymással való felcserélhetőségét feltételezi.

Megfigyelhető, hogy

$$K(\hat{T},\hat{V}) = -\frac{\beta^2}{2}[\hat{T},\hat{V}] + \ldots; \quad \beta = \frac{1}{k_B T}\ . \tag{11.3}$$

Ezen egyenlőségből viszont látszik[69], hogy közelítésünk akkor helytálló, ha a T hőmérséklet nagy, vagy a kölcsönhatás ($\hat{V}$) a részecskék között nagyon kicsi, azaz a részecske koncentráció alacsony.

A rendszer jellemzése az állapotösszeggel kezdődik:

$$Z = \mathrm{Tr} e^{-\beta\hat{H}} = \int e^{-\beta(\hat{T}+\hat{V})} d\Gamma \tag{11.4}$$

Kanonikus rendszerben dolgozunk, ahol az N részecskeszám rögzített, és így az F szabad energiát szeretnénk meghatározni. Az állapotösszegben szereplő statisztikus integrál ($d\Gamma$) a részecskék impulzusai és térkoordinátái szerint történik, és a klasszikusnak tekintett $\hat{H}$ is ezen változók függvénye. Belső szabadságfokoktól eltekintünk (a rendszerünk így egyatomos reális gáz), és a potenciális energiát csupán $|r_i - r_j|$ függvényeként kezeljük. Így $\hat{V}$–ben p_i függés nem szerepel, rendszerünk párkölcsönhatásos[70], izotróp és homogén közeg. Tehát:

$$F = -k_B T \ln Z = F_{id} - k_B T \ln \left[\frac{1}{V^N} \int e^{-\hat{V}/(k_B T)} d\vec{r}_1 \ldots d\vec{r}_N \right]\ , \tag{11.5}$$

[68] Lásd [1]

[69] Általában a kinetikus energia és potenciális energia operátorai nem kommutálnak

[70] Azaz hármas és nagyobb részecskeszám kölcsönhatást elhanyagolhatónak tekíntünk

ahol F_{id} az ideális gáz ($\hat{V}=0$) szabadenergiája, és V a rendszer térfogata. Megjegyzendő továbbá, hogy a kifejezésben, az $1/V^N$ eredete az F–et megadó képletben a következő: Az ideális gáznál ($\hat{V}=0$ esetében) az F logaritmikus tagja alatti zárójelben a térfogati integrálok V^N–et adnak eredményül. Ekkor érdemes a kifejezést V^N–el normálni, amit úgy érünk el, hogy osztunk és szorzunk a V^N tényezővel, majd a számlálóban szereplő V^N járulékkal alakítjuk ki F_{id} kifejezését. Ezen eljárás F_{id} értékén nem változtat, mert F_{id}-t szintén $d\Gamma$ fázistérbeli integrál adja meg, tehát benne az innen származó V^N–nek szerepelnie kell[71].

Mivel $\hat{V}$ kicsi (vagy a T hőmérséklet nagy), az F–ben lévő logaritmus függvény argumentuma nagyon közel van egyhez. Ekkor viszont érdemes a következő átalakítást végrehajtani:

$$\frac{1}{V^N}\int e^{-\frac{\hat{V}}{k_BT}}d\vec{r}_1\ldots d\vec{r}_N=\frac{1}{V^N}\int[e^{-\frac{\hat{V}}{k_BT}}-1]d\vec{r}_1\ldots d\vec{r}_N+1=x+1\ , \tag{11.6}$$

ahol

$$x=\frac{1}{V^N}\int[e^{-\frac{\hat{V}}{k_BT}}-1]d\vec{r}_1\ldots d\vec{r}_N<<1\ . \tag{11.7}$$

Mindezek után, figyelembe véve, hogy

$$\ln(1+x)|_{x<<1}\simeq x\ , \tag{11.8}$$

a reális gázok szabadenergiájára, az említett közelítések mellett, a következő összefüggés adódik:

$$F=F_{id}-\frac{k_BT}{V^N}\int\left[e^{-\frac{\hat{V}}{k_BT}}-1\right]d\vec{r}_1\ldots d\vec{r}_N\ . \tag{11.9}$$

A kapott kifejezést a következő gondolatmenettel alakítjuk tovább. Alacsony koncentrációjú rendszerben az F második tagjában szereplő integrál akkor lesz lényegesen zérótól különböző, ha részecskéink párosan hatnak kölcsön egymással. Tekintsük ezen kölcsönhatást $\hat{V}$ feltételezett erős lecsengése miatt ütközésnek. Alacsony koncentráció esetében, adott pillanatban a párkölcsönhatás feltételét csak egy részecskepár elégíti ki. Ekkor, N részecske esetében ezt az ütköző párt $N(N-1)/2$ féle képpen választhatjuk ki. Így $N-2$ térfogatintegrál elvégezhető, és V^{N-2} eredményt ad. Továbbá az $N(N-1)$ szorzófaktort nagy N–re (azaz a termodinamikai határesetben) N^2–ként kezelve, és a megmaradt két integrált explicit feltüntetve:

$$F=F_{id}-\frac{k_BT}{2}\frac{N^2}{V^2}\int\left(e^{-\frac{U_{12}}{k_BT}}-1\right)d\vec{r}_1d\vec{r}_2\ , \tag{11.10}$$

ahol, U_{12} a párkölcsönhatás potenciális energiája. Mindezek után $d\vec{r}_1d\vec{r}_2$–t a tömegközéppont és a relatív koordináták szerinti integrállá alakítjuk át. Mivel a

[71]Matematikailag, $F_{id}=V^N\int\exp(-\beta\hat{T})\prod_i d\vec{p}_i$.

tömegközéppont koordinátái az U_{12} tagban nem szerepelnek, az első változó szerinti integrál elvégezhető, és $\int d\vec{r}_t = V$ eredményt ad. A megmaradt relatív koordináták szerinti integrál segítségével definiáljuk a második viriálegyütthatót:

$$v_{i2} = \frac{1}{2}\int\left(1 - e^{-\frac{U_{12}}{k_B T}}\right) dV \tag{11.11}$$

Így eredményünk a következőképpen alakul:

$$F = F_{id} + k_B T N \frac{N}{V}\, v_{i2}(T)\ . \tag{11.12}$$

Továbblépés előtt megfigyelhető, hogy $p = -\partial F/\partial V$ alapján, a nyomást a

$$p = k_B T \frac{N}{V}\left(1 + \frac{N}{V} v_{i2}(T)\right)\ , \tag{11.13}$$

összefüggés adja meg, melyben v_{i2} a reális gázok elméletéből ismert második viriál együttható. Az elnevezés, történelmi szempontból a nagykanonikus potenciál, $\Omega(T, V, \mu_i) = -pV$, részecskeszám–sűrűség hatványai szerinti sorfejtes[72] együtthatóinak megnevezéséből ered. A viriálsorfejtés klasszikus gáz esetén, közelítés nélkül a

$$pV = k_B T N \sum_{n=0}^{\infty} v_{i,n+1}\left(\frac{N}{V}\right)^n \tag{11.14}$$

formát ölti. Látható, hogy a mi esetünkben $v_{i,n} = 0,\ n > 2$, továbbá a sorfejtés első tagja az ideális és klasszikus gázt jellemzi

$$p_{id} = -\frac{\partial F_{id}}{\partial V} = k_B T \frac{N}{V}\ . \tag{11.15}$$

A teljesség kedvéért továbbá megemlítjük, hogy:

$$F_{id} = -k_B T N \ln\frac{eV}{N} + N f(T)\ , \tag{11.16}$$

ahol $f(T)$ csupán egy hőmérsékletfüggő járulék, melynek a továbbiakban nem lesz fontos szerepe.

Amint látható, a vizsgált reális gáz szabadenergiájának és állapotegyenletének további jellemzéséhez a $v_{i2}(T)$ viriál együttható kiszámítása szükséges.

[72] az ugynevezett viriálsorfejtés

11.3 A Van der Waals gáz

A reális gáz elkezdett jellemzésének folytatása céljából a második viriál együttható tanulmányozása szükséges. A definíció szerint v_{i2} kifejezése:

$$v_{i2} = \frac{1}{2}\int \left(1 - e^{-\frac{U_{12}}{k_B T}}\right) dV \; ; \qquad dV = 4\pi r^2 dr \; , \tag{11.17}$$

ahol a dV formáját az izotropia feltételezése adja. A párkölcsönhatás tanulmányozásakor, kis távolságokon merev gömbként viselkedő részecskéket tételezünk fel. Ekkor U_{12} értéke rendkívül nagy és pozitív a $0 < r < 2r_0$ tartományban, ahol r_0 a részecskék sugara. Így a v_{i2}–ben szereplő integrált az $r = D = 2r_0$ pontban érdemes két részre bontani, és így:

$$v_{i2} = 2\pi \int_0^D \left(1 - e^{-\frac{U_{12}}{k_B T}}\right) r^2 dr + 2\pi \int_D^\infty \left(1 - e^{-\frac{U_{12}}{k_B T}}\right) r^2 dr. \tag{11.18}$$

Az első tagban $U_{12} \to \infty$, így itt az exponenciális 1 mellett elhanyagolható. A tag értékét b–vel jelölve:

$$b = 2\pi \int_0^D \left(1 - e^{-\frac{U_{12}}{k_B T}}\right) r^2 dr \simeq 2\pi \int_0^{D=2r_0} r^2 dr = 2\pi \frac{r^3}{3}|_0^{2r_0} = 16\frac{\pi r_0^3}{3} \; , \tag{11.19}$$

azaz

$$b = 4V_0 \; . \tag{11.20}$$

Ezen kifejezésben V_0 jelöli egy részecske térfogatát. Amint látható, b a részecskék térfogatának négyszerese.

A második integrálban U_{12} értékét $r > 2r_0$–ra kicsinek, és a kölcsönhatást vonzó jellegűnek tételezzük fel, ugyanis általában $U_{12} \to -0$ teljesül az $r \to \infty$ határesetben. Ekkor viszont $|U_{12}|/T \ll 1$ miatt, az exponenciális tag sorbafejthető. Az első releváns tagot megtartva, a következő kifejezést kapjuk eredményül:

$$2\pi \int_D^\infty \left(1 - e^{\frac{-U_{12}}{k_B T}}\right) r^2 dr = -\frac{2\pi}{k_B T}\int_D^\infty |U_{12}| r^2 dr = -\frac{a}{k_B T} \; . \tag{11.21}$$

Itt a egy konstans, melynek értéke

$$a = 2\pi \int_D^\infty |U_{12}| r^2 dr \; . \tag{11.22}$$

Tehát Van der Waals elképzeléseit követve,

$$v_{i2} = b - \frac{a}{k_B T} \; . \tag{11.23}$$

Mindezek után a szabadenergia a következő formában írható fel:

$$F = F_{id} + \frac{k_B N^2}{V}(bT - \frac{a}{k_B}) \; . \tag{11.24}$$

Mivel, amint láttuk, F_{id} ismert

$$F_{id} = -k_B T N \ln \frac{eV}{N} + N f(T) \;, \tag{11.25}$$

az F értéke a következőképpen adható meg:

$$F = F_0(T) - k_B T N \left[\ln V - \frac{Nb}{V} \right] - \frac{aN^2}{V} \;. \tag{11.26}$$

Ezen összefüggésben $F_0(T)$ foglalja magába a térfogattól független járulékot, amely

$$F_0(T) = N f(T) - k_B T N \ln \frac{e}{N} \;. \tag{11.27}$$

A rendszerre vonatkozólag azonban alacsony sűrűségű állapotot tételeztünk fel. Ekkor $N/V \ll 1$, és így:

$$\ln(V - Nb) = \ln V + \underbrace{\ln\left(1 - \frac{Nb}{V}\right)}_{\simeq -\frac{Nb}{V}} \simeq \ln V - \frac{Nb}{V} \quad , \tag{11.28}$$

ahol a $\ln(1-x) \simeq -x$ összefüggést használtuk $x << 1$ esetére. Ezen összefüggést felhasználva, az

$$F = F_0(T) - k_B T N \ln(V - Nb) - \frac{aN^2}{V} \tag{11.29}$$

egyenlőség adódik. Ebből viszont a nyomás kifejezhető:

$$p = -\frac{\partial F}{\partial V} = \frac{N k_B T}{V - Nb} - \frac{aN^2}{V^2} \;. \tag{11.30}$$

Ekkor az állapotegyenletünk

$$\left(p + a\frac{N^2}{V^2}\right)(V - Nb) = N k_B T \tag{11.31}$$

formában adható meg. A kapott összefüggés a Van der Waals-állapotegyenlet. A szakirodalom sok esetben a reális gázok Van der Waals-féle interpolációs egyenlete néven emlegeti. Ezen egyenlet az eddig ismert nagyszámú interpolációs képletek egyike, melyet azért részesítünk előnyben a többihez képest, mert egyszerű és fizikai szempontok érzékeltetésére alkalmas. A fizikai kiértékelésnél ugyanis az fontos, hogy a végeredmény milyen, és hogy a teljesen megérthető és koherens levezetésben a végeredmény milyen feltételezéseket tükröz.

A következőkben megmutatjuk, hogy a Van der Waals-állapotegyenlet tökéletesen visszaadja a molekuláris–tér elméletének alapjellemzőit. Mindezt a *Reif*-modellen keresztül igazoljuk.

11.4 A Reif modell és kapcsolata a Van der Waals állapotegyenlettel

A továbbiakban Reif gondolatmenetét követve próbálunk információkat gyűjteni a Van der Waals-féle modell jellegéről.

Tételezzük fel, hogy egy olyan rendszerünk van, amelyben minden részecske minden részecskével egyenlő mértékben kölcsönhat. Azaz a potenciális energia párkölcsönhatás jellegű, mely a minden részecske pár között fellépő kölcsönhatási járulékokból egyenlő mértékben épül fel. A kölcsönhatás csupán a részecskék közötti D távolság felett jöhet létre, ahol D a részecskék véges és merev térfogatához kapcsolodó mennyiség.

Legyen a kölcsönhatási potenciál ilyen körülmények között:

$$U = \sum_{i,j=1}^{N} u_i u_j D(i,j)\,. \tag{11.32}$$

Továbbá, minden részecske, minden más részecskét ugyanolyan mértékben érzékeljen a D–nél nagyobb részecskeközi távolságon felül. Azaz, egyrészt legyen

$$u_i = u(r_i) = \bar{u}\,, \tag{11.33}$$

ahol $\bar{u}$ egy konstans, továbbá

$$D(i,j) = \begin{cases} \infty; & \text{ha} \quad |r_i - r_j| \le D\,; \\ -1/V\,; & \text{ha} \quad |r_i - r_j| > D\,. \end{cases} \tag{11.34}$$

Az eddig bemutatott jellemzők definiálják a Reif-modellt.

Az adott körülmények között a kölcsönhatási potenciál a következő formába írható:

$$U = \sum_i u_i u^i_{eff}\,, \tag{11.35}$$

ahol az egy részecske által érzékelt tér

$$u^i_{eff} = \sum_j u_j D(i,j) = \bar{u} \sum_j D(i,j)\,. \tag{11.36}$$

Nyilvánvalóan ezen összegben $j \ne i$ áll fenn, és ezen túlmenőleg a j index az összes lehetséges értéket felveszi. Tehát:

$$u^i_{eff} = \sum_{\substack{j=1 \\ (j\ne i)}}^{N} u(r_j) D(i,j) = \bar{u} \sum_{\substack{j=1 \\ (j\ne i)}}^{N} D(i,j) \tag{11.37}$$

Megjegyzendő még, hogy a $|r_i - r_j| > D$ értékek mellett $D(i,j)$ kifejezésének V–vel való normálása a termodinamikai határeset értelmezhetőségével van összefüggésben. Ekkor ugyanis az U potenciális energiának egységnyi térfogatra vett értéke (avagy rögzitett sűrűség mellett egységnyi részecskére vett értéke) véges kell legyen. Ténylegesen,

$$U \sim \int' dr_1 \int' dr_2 (\bar{u})^2 D(1,2) \sim (\bar{u})^2 V^2 \frac{1}{V} \sim V(\bar{u})^2 \ , \tag{11.38}$$

azaz

$$\frac{U}{V} \sim (\bar{u})^2 = konstans \ . \tag{11.39}$$

Ezen kifejezésekben az $\int'$ jelölés a megengedett r távolságokra való integrálást jelenti.

Látható tehát, hogy a Reif-modellben az egyrészecskére ható effektív tér egyenlő mértékben tevődik össze az összes többi részecske által keltett hatásból. Ezen hatás végtelen hatótávolságú, távolságtól nem függő erőkön alapszik, és így az általa létrehozott ,,molekuláris tér" tökéletesen egyezik a Weiss-féle molekuláris térrel, amit a lokalizált mágneses momentumok rendszerének leírásakor használtunk fel. Itt az egész fizikai kép úgy fest, mintha egy ,,lyukacsos puding"–szerű rendszerünk lenne, melyben N darab $D/2$ sugarú lyuk mozogna. Egy kiválasztott részecske (azaz egy lyuk) bárhol van a ,,puding"–ban, ugyanazon $\bar{u} \cdot N/V$ effektív teret érez, kivéve ha egy másik ,,lyukkal" össze ütközik. Ekkor a kölcsönhatási potenciál $+\infty$ értéket venne fel, jelezvén, hogy a részecskék merevek. Ezért tiltott két ,,lyuk" egymásba hatolása, azaz a D–nél kisebb részecskék közti távolság. Tehát

$$u^i_{eff} = \begin{cases} -\bar{u} \cdot N/V \ ; & \text{összes} \quad |r_i - r_j| > D \ , \\ +\infty \ ; & \text{ha legalább egy } j \neq i\text{–re} \quad |r_i - r_j| \leq D \ . \end{cases} \tag{11.40}$$

Mindezek után a Hamilton-operátor formája:

$$H = \sum_i (E^i_{kin} + \bar{u} u^i_{eff}) \ . \tag{11.41}$$

Most abból a feltételből kiindulva, hogy minden $\vec{r}_i$ térkoordináta számára $V_t = NV_0$ térrész tiltott, ahol V_0 egyetlen részecske térfogata, az integrálási változók teljesen függetlenné válnak, és így:

$$Z_N \sim \left[\int d\vec{p} \int d\vec{r} e^{-\beta\left(\frac{p^2}{2m} + \bar{u} u_{eff}(r)\right)} \right]^N \ . \tag{11.42}$$

Ezen kifejezésben az $\vec{r}$ változó befutja az egész teret, kivéve egy V_t térfogatot. A V_t–nek pozíciója lényegtelen, mert a megmaradt $u_{eff}(r)$ független r értékétől.

A Z_N összefüggését elemezve látható, hogy a benne szereplő momentum integrál V–től független eredményt ad, így a nyomásban járulékot nem eredményez, azaz a nyomás kiszámításánál elhanyagolható. Ekkor viszont:

$$Z^{1/N} \sim e^{+\beta \bar{u}^2 \frac{N}{V}} \int_{V-V_t} d\vec{r} = (V - NV_0) e^{\beta \bar{u}^2 \frac{N}{V}} \ . \tag{11.43}$$

Ezen összefüggés alapján $p = k_B T \partial \ln Z / \partial V$–ből következik, hogy

$$p = N k_B T \frac{\partial}{\partial V} \left[\beta \bar{u}^2 \frac{N}{V} + \ln(V - N V_0) \right] = \frac{N k_B T}{V - N V_0} - \bar{u}^2 \frac{N^2}{V^2} \,. \tag{11.44}$$

Megfigyelhető, hogy $V_0 = b$ és $\bar{u}^2 = a$ jelöléssel pontosan a Van der Waals-állapotegyenletet kaptuk vissza, ami igazolja, hogy az itt használt ,,elmélet" tökéletesen megfelel a Weiss–féle molekuláris–tér elméletének.

11.5 A kritikus tartomány Van der Waals-féle jellemzése

A Van der Waals-egyenlet egy folyadék–gáz fázisátalakulást ír le. Ennek kritikus pontjában a folyadék és gáz közötti különbség eltűnik, azaz a két ,,fázis" sűrűsége egyenlővé válik.

A kritikus pontot a (p, V) fázisdiagramban a

$$\frac{\partial p}{\partial V} = \frac{\partial^2 p}{\partial V^2} = 0 \tag{11.45}$$

összefüggések adják meg. Így a kritikus p_c, V_c, T_c értékek meghatározására az állapotegyenlet és a (**??**)-ben említett két feltétel használható fel. Tehát:

$$\frac{\partial p}{\partial V} = -\frac{N k_B T}{(V - Nb)^2} + \frac{2aN^2}{V^3} = 0 \tag{11.46}$$

$$\frac{\partial^2 p}{\partial V^2} = \frac{2 N k_B T}{(V - Nb)^3} - \frac{6aN^2}{V^4} = 0 \tag{11.47}$$

$$p = \frac{N k_B T}{V - Nb} - \frac{aN^2}{V^2} \,. \tag{11.48}$$

Ezen egyenletrendszer megoldásai adják a kritikus paraméterek értékeit:

$$p = p_c, \; V = V_c, \; T = T_c \,. \tag{11.49}$$

Az első két egyenlet arányából $V = V_c$ helyettesítéssel

$$\frac{V_c - Nb}{2} = \frac{1}{3} V_c \;\Rightarrow\; \frac{1}{3} V_c = Nb \;\Rightarrow\; V_c = 3Nb \tag{11.50}$$

adódik. A kapott eredményt az első egyenletbe behelyettesítve:

$$\frac{N k_B T_c}{4N^2 b^2} = \frac{2aN^2}{27 b^3} \;\Rightarrow\; k_B T_c = \frac{8a}{27b} \tag{11.51}$$

Most V_c és T_c értékeit a Van der Waals-állapotegyenletbe helyettesítve:

$$p_c = \frac{8a}{27b} \frac{N}{2Nb} - \frac{aN^2}{9N^2 b^2} = \frac{a}{b^2} \left(\frac{4}{27} - \frac{1}{9} \right) = \frac{a}{27 b^2} \,. \tag{11.52}$$

Mindezek szerint tehát a kritikus paraméterek:

$$V_c = 3Nb\ , \quad p_c = \frac{a}{27b^2}\ , \quad k_B T_c = \frac{8a}{27b}\ . \tag{11.53}$$

Az elkövetkezőkben vezessük be a

$$\tilde{p} = \frac{p}{p_c},\ \tilde{T} = \frac{T}{T_c},\ \tilde{V} = \frac{V}{V_c} \tag{11.54}$$

jelöléseket. Ekkor:

$$p = \tilde{p} \cdot \frac{a}{27b^2}\ ; \quad k_B T = \tilde{T} \cdot \frac{8a}{27b}\ ; \quad V = \tilde{V} \cdot 3Nb\ . \tag{11.55}$$

Ezen összefüggéseket az állapotegyenletbe helyettesítve:

$$\tilde{p}\frac{a}{27b^2} = \frac{N\tilde{T}\frac{8a}{27b}}{Nb(3\tilde{V}-1)} - \frac{aN^2}{\tilde{V}^2 \cdot 9N^2b^2} \ \Rightarrow\ \frac{\tilde{p}}{3} = \frac{8\tilde{T}}{3(3\tilde{V}-1)} - \frac{1}{\tilde{V}^2}\ , \tag{11.56}$$

egyenlőség adódik. Ebből viszont a

$$\left(\tilde{p} + \frac{3}{\tilde{V}^2}\right)(3\tilde{V}-1) = 8\tilde{T}\ , \tag{11.57}$$

egyenletet kapjuk eredményül. Ez a Van der Waals-állapotegyenlet univerzális formája, mely a kritikus paraméterekkel normált mennyiségekre (a levezetés megkötésein belül) gáz–típustól független viselkedést ad meg.

A folytonos fázisátalakulás kritikus hőmérsékletéhez alulról közeledve, a rendparaméter fluktuációi válnak végtelenné. A tanulmányozott esetben viszont, amint már említettük, a sűrűségfluktuáció veszi fel a rendparaméter fluktuáció szerepét. Így a kritikus ponthoz való közeledést $\Delta = \varrho - \varrho_c$–vel fogjuk jellemezni, anélkül, hogy ezen mennyiségnek valami köze is lenne szimmetriasértéshez. Mindennek ellenére, ez esetben is $\Delta \to 0$ azon ponthoz való közeledést jelenti, melyben a skálainvariancia fennáll, és így a kritikus jelenségek leírására használandó elméletek alkalmazhatóak.

Vezessük be a továbbiakban a „redukált" jelöléseket:

$$t = T - T_c,\ v = V - V_c,\ P = p - p_c\ . \tag{11.58}$$

Ekkor viszont

$$\tilde{T} = \frac{t + T_c}{T_c}\ ; \quad \tilde{p} = \frac{P + p_c}{p_c}\ ; \quad \tilde{V} = \frac{V}{V_c} = \frac{\varrho_c}{\varrho} = \frac{\varrho_c}{\Delta + \varrho_c} \tag{11.59}$$

Ezen összefüggésben a $\varrho = m/V$, sűrűséget jelöli. A kapott tagokat az állapotegyenletbe helyettesítve:

$$\left[\frac{P + p_c}{p_c} + 3\frac{(\Delta + \varrho_c)^2}{\varrho_c^2}\right] \cdot \left[3\frac{\varrho_c}{\Delta + \varrho_c} - 1\right] = 8\frac{t + T_c}{T_c}\ . \tag{11.60}$$

Ebből viszont

$$\frac{P}{p_c} = -1 - 3(\frac{\Delta}{\varrho_c} + 1)^2 + 8\frac{(\frac{t}{T_c} + 1)(\frac{\Delta}{\varrho_c} + 1)}{2 - \frac{\Delta}{\varrho_c}} \ , \tag{11.61}$$

melyből

$$\frac{P}{p_c} = -4 - 3(\frac{\Delta}{\varrho_c})^2 - 6\frac{\Delta}{\varrho_c} + 4\frac{(\frac{t}{T_c} + 1)(\frac{\Delta}{\varrho_c} + 1)}{1 - \frac{\Delta}{2\varrho_c}} \ . \tag{11.62}$$

A továbbiakban ezen kifejezés utolsó tagjában figyelembe vesszük, hogy Δ értéke kicsi a kritikus tartományban. Ekkor, mivel $x = \Delta/(2\varrho_c) << 1$, és ez esetben

$$\frac{1}{1-x} = 1 + x + x^2 + \dots \ , \tag{11.63}$$

a következő közelítő képletet kapjuk:

$$\left(1 - \frac{\Delta}{2\varrho_c}\right)^{-1} \simeq 1 + \frac{\Delta}{2\varrho_c} + \frac{\Delta^2}{4\varrho_c^2} + \dots \ . \tag{11.64}$$

Ezen összefüggést a P/p_c kifejezés nevezőjére alkalmazva

$$\begin{aligned} \frac{P}{p_c} &= -4 - 3\left(\frac{\Delta}{\varrho_c}\right)^2 - 6\left(\frac{\Delta}{\varrho_c}\right) + \left[\left(4 + 4\frac{\Delta}{\varrho_c} + 4\frac{t}{T_c} + 4\frac{t}{T_c}\frac{\Delta}{\varrho_c}\right)\right. \\ &+ \left(2\frac{\Delta}{\varrho_c} + (\frac{\Delta}{\varrho_c})^2 + 2\frac{\Delta}{\varrho_c}\frac{t}{T_c} + 2(\frac{\Delta}{\varrho_c})^2\frac{t}{T_c}\right) + \\ &+ \left.\left((\frac{\Delta}{\varrho_c})^2 + (\frac{\Delta}{\varrho_c})^3 + \frac{t}{T_c}(\frac{\Delta}{\varrho_c})^2 + \frac{t}{T_c}(\frac{\Delta}{\varrho_c})^3\right) + \left(\frac{4}{8}(\frac{\Delta}{\varrho_c})^3 + \dots\right)\right] . \end{aligned} \tag{11.65}$$

Ebből viszont

$$\frac{P}{p_c} = 4\frac{t}{T_c} + 6\frac{t}{T_c}\frac{\Delta}{\varrho_c} + 3\frac{t}{T_c}(\frac{\Delta}{\varrho_c})^2 + \frac{3}{2}(\frac{\Delta}{\varrho_c})^3 + \dots \ . \tag{11.66}$$

Ezen összefüggésből végül:

$$P = at + bt\Delta + c\Delta^3 + \mathcal{O}(t\Delta^2) \ , \tag{11.67}$$

ahol a megjelenő konstansok mind pozitívak, és értékük:

$$a = 4\frac{p_c}{T_c}; \quad b = 6\frac{p_c}{T_c\varrho_c}; \quad c = \frac{3P_c}{2\varrho_c^3} \ . \tag{11.68}$$

A levezetett (**??**) egyenlet a Van der Waals-gáz kritikus tartományának jellemzője.

Továbblépés előtt még néhány, a továbbiakban használatra kerülő összefüggést vezetünk le. Mivel $\Delta = \varrho - \varrho_c$, és $v = V - V_c$, a következő egyenlőség írható fel:

$$\frac{\Delta}{\varrho_c} = \frac{\varrho}{\varrho_c} - 1 = \frac{V_c}{V} - 1 = \frac{V_c - V}{V} = -\frac{v}{v + V_c} \tag{11.69}$$

Tehát

$$\Delta = -\frac{v\varrho_c}{v + V_c} \, , \tag{11.70}$$

amelyből

$$v = -\frac{\Delta V_c}{\varrho_c + \Delta} \, . \tag{11.71}$$

A következőkben vezessük le a Van der Waals-gáz kritikus exponenseit.

11.6 A Van der Waals gáz kritikus exponensei

Mindezek után tanulmányozzuk a kritikus ponthoz közeli viselkedés jellemzőit a Van der Waals-gáz esetében. Tudvalevő, hogy a Van der Waals-állapotegyenlet a (p, V) diagramban a $T < T_c$ hőmérsékleteken, egy „nemfizikai" tartományt eredményez, melyben p növekszik V növekedésével állandó hőmérsékleten. Ezen viselkedés magának a modellnek a hibája, mely azért lép fel, mert a Van der Waals-állapotegyenlet ebben a tartományban nem állitja elő a termodinamikai potenciál minimumát. Amint ismeretes, ezt a hibát a Maxwell-féle konstrukcióval küszöböljük ki. Ezen konstrukció lényege, hogy a folyadék-gáz koegzisztencia tartományában (nyilvánvalóan $T < T_c$-re) a Van der Waals-izotermát egy vízszintes egyenessel helyettesítjük, mely konstans p, T értékek mellett a V_1 és V_2 térfogatértékek között mozog. A V_1 és V_2 értékek a koegzisztencia tartomány kiterjedését határozzák meg a rögzített p, T paraméterek mellett. Az említett egyenes helyzetét az állapotegyenlet által nem teljesített egyensúlyi feltétel határozza meg, miszerint V_1 és V_2 között az egyenes mentén a folyadék és gáz egyensúlya fennáll. Ez a feltétel szerint az egyenes minden pontjában a két fázis termodinamikai potenciálja egyenlő $\Phi_1 = \Phi_2$. Ezt globálisan az egész V_1–től V_2–ig terjedő szakaszra felírva (és ez a Maxwell konstrukció lényege):

$$\int_{V_1}^{V_2} d\Phi = 0 \tag{11.72}$$

Mivel izotermán vagyunk $d\Phi = V dp$, és így a Maxwell konstrukcióból eredő összefüggés a következőképpen alakul:

$$\int_{V_1}^{V_2} V dp = 0 \, . \tag{11.73}$$

Mivel

$$V = v + V_c \ , \tag{11.74}$$

és a nyomás rögzített, így

$$\int_{p_1}^{p_2} V_c dp = V_c(p_2 - p_1) = 0 \tag{11.75}$$

következik. Így, teljes egészében redukált paraméterekre térve, $dP = dp$ felhasználásával:

$$\int_1^2 v dP = 0 \ . \tag{11.76}$$

A (??) összefüggésből azonban v-nek a rendparaméter szerinti kifejezése T_c közelében ismert:

$$v = -\frac{\Delta V_c}{\varrho_c + \Delta} \ .$$

Ebből a $\Delta \to 0$ határesetben, amit vizsgálni szeretnénk,

$$v \simeq -\Delta \frac{V_c}{\varrho_c} \tag{11.77}$$

adódik. Ekkor viszont a Maxwell konstrukcióból adódó képlet a következő formában írható:

$$\int_1^2 \Delta dP = 0 \ . \tag{11.78}$$

A T_c közelében azonban az izotermán, a (??) egyenletből,

$$dP = \frac{\partial P}{\partial \Delta} d\Delta \ , \tag{11.79}$$

mivel t állandó. Most (??) konkrét kifejezését felhasználva a Δ szerinti derivált kiszámítására,

$$\int_{\Delta_1}^{\Delta_2} (\Delta b t + 3c\Delta^3) d\Delta = 0 \ . \tag{11.80}$$

Visszatérve a (??) egyenlethez, a Maxwell-konstrukció értelmében a Δ_1 és Δ_2 értékek között[73] P értékét konstansra akarjuk beállítani úgy, hogy (??) fennálljon. Mivel azonban (??) integrandusa ($I(\Delta) = \Delta bt + 3c\Delta^3$) páratlan függvény, (??) egyenlőség úgy elégíthető ki, hogy a Maxwell-konstrukció vonalát a (p, V) diagramban a $\Delta = 0$

[73] Rögzítve lévén a tömeg, V_1 és V_2 pontok között

pont által meghatározott vizszintes szerint vesszük fel. Ilyen körülmények között a (refxdelta)-ben adott integrál a Maxwell-konstrukció által meghatározott vizszintes egyenes és az $I(\Delta)$ által közrezárt területet jelenti Δ_1 és Δ_2 értékek között, melyek pontosan $I(\Delta)$ zérótól különböző gyökei. Az $I(\Delta) = 0$ összefüggésből viszont $\Delta_1 = -\Delta_2 = \sqrt{-bt/3c}$. Most a (**??**) egyenlet szerint T_c közvetlen közelében, Δ csak p és T-től függ. Viszont a Maxwell konstrukcióban szereplő egyenes, melyen Δ_1 és Δ_2 rajta van, konstans p, T paraméterek mellett adott. Így, T_c közelében és a Maxwell konstrukcióból adodó P-re $\Delta_1^2 = \Delta_2^2 = \Delta^2$ írható, azaz:

$$\Delta = \sqrt{\frac{-bt}{3c}} \ . \tag{11.81}$$

Mivel a hőmérsékleti skálán T_c alatt vagyunk, így $-t = |t| > 0$, tehát

$$\Delta \sim |t|^\beta \ , \quad \beta = \frac{1}{2} \ . \tag{11.82}$$

Látható, hogy a β kritikus exponens értéke a MTE–ből jólismert 1/2.

A következőkben a δ kritikus exponens értékével foglalkozunk. A kritikus jelenség fogalmának tárgyalásakor láttuk, hogy a folyadék–gáz rendszerben a külső tér szerepét a p nyomás veszi át. Így δ meghatározására $t = 0$–ban véve a (**??**) egyenletet,

$$P = c\Delta^3 \tag{11.83}$$

adódik, amelyből

$$\Delta \sim p^{1/3} \ , \tag{11.84}$$

tehát

$$\delta = 3 \ . \tag{11.85}$$

Látható, hogy újból az MTE eredményt kaptuk vissza.

A γ kritikus exponenst illetőleg láttuk, hogy a tanulmányozott esetben a szuszceptibilitás szerepét az izoterm kompresszibilitás veszi át. Mivel $v \sim -\Delta$, ha $\Delta \to 0$, a következő összefüggések állnak fenn T_c közelében:

$$K_T = -\frac{1}{V}\left(\frac{\partial V}{\partial p}\right)_T \sim +\left(\frac{\partial \Delta}{\partial P}\right)_T \ . \tag{11.86}$$

Ekkor viszont, a (**??**) egyenlet felhasználásával,

$$K_T^{-1} \sim \frac{\partial P}{\partial \Delta} = bt + \mathcal{O}(\Delta^2) \ . \tag{11.87}$$

Mindezek után a kritikus pont ($\Delta \to 0$) közelében

$$K_T \sim t^{-1} \tag{11.88}$$

adódik[74], melyből

$$\gamma = 1 \; . \tag{11.89}$$

Újból a Landau-elméletből ismert értéket kaptuk vissza.

A következőkben a fajhő kritikus exponensével foglalkozunk. A Van der Waals féle gázra vonatkozólag láttuk azonban hogy a tanulmányozott körülmények között

$$F = F_{id} + \frac{k_B N^2}{V}(bT - \frac{a}{k_B}) \; .$$

A szabadenergia kifejezését vizsgálva látható, hogy

$$C_V = -T\frac{\partial^2 F}{\partial T^2} \tag{11.90}$$

értéke ugyanaz marad mint az ideális gáz esetében, ugyanis az F_{id} tag melletti Van der Waals-járulék csupán T első hatványáig menő tagokat tartalmaz. Tehát C_V ugyanaz mint az ideális gáz esetében, ahol tudvalevőleg fázisátalakulás nem létezik. Tehát[75]

$$\alpha = 0 \; . \tag{11.91}$$

A korrelációs függvényhez tartozó kritikus exponensek a Landau-elméletnél bemutattakhoz hasonlóan számíthatók ki[76], és így az ismert

$$\eta = 0 \; , \quad \nu = \frac{1}{2} \; , \tag{11.92}$$

eredményeket kapjuk vissza. Ennek kapcsán megemlítjük, hogy az elkövetkezőkben a korrelációs függvény kérdésével részletesen foglalkozunk, továbbá koherens leírás esetében a skálatörvények a már levezetett kritikus exponensek η és ν értékét egyértelműen a MTE jellemzőkre állítják be.

A kiszámított kritikus exponensek,

$$\alpha = 0 \; , \quad \beta = \frac{1}{2} \; , \quad \gamma = 1 \; , \quad \delta = 3 \tag{11.93}$$

tisztán tükrözik a Van der Waals leírás molekuláris–tér elmélet jellegét.

[74]Megfigyelhető, hogy a $\mathcal{O}(\Delta^2)$ tag figyelembevétele $\Delta^2 \sim t$ értelmében ezen összefüggésen nem változtat.

[75]Lásd [2]

[76]Megjegyzendő, hogy rács-gáz esetben az Ising modellel vett analogiák - lásd [1] -, kontinuum modell esetén a 13. Fejezetben végigvitt gondolatmenet is alkalmazható e célra

11.7 Analógia a Landau elmélettel

Mivel a Van der Waals-elmélet a molekuláris–tér koncepcióira épül, nyilvánvalóan ekvivalens a Landau-elmélettel[77]. A következőkben azt szeretnénk megmutatni, hogy hogyan mutatkozik meg ez az ekvivalencia T_c közelében a termodinamikai potenciál szintjén.

Tételezzük fel, hogy egy általános jellemzés szintjén Δ felfogható p-től és T–től független változónak. Továbbmenőleg tételezzük fel, hogy van egy olyan Φ termodinamikai potenciál, amelynek Δ szerinti minimalizálása a (**??**)–ban szereplő Van der Waals-féle kritikus tartományra jellemző P–t adja vissza. Ekkor Φ keresett formája:

$$\Phi = \Phi_0 + (P - at)\Delta - \frac{bt}{2}\Delta^2 - \frac{c}{4}\Delta^4 + \dots \tag{11.94}$$

kellene legyen. Most a (**??**) összefüggést felhasználva (ezáltal T_c közelébe helyezkedünk):

$$P - at = bt\Delta + c\Delta^3 + \dots\ . \tag{11.95}$$

Ennek megfelelően Φ kifejezése a következőképpen alakul:

$$\Phi = \Phi_0 + \bar{a}\Delta^2 + \bar{b}\Delta^4 + \dots\ , \tag{11.96}$$

amely ténylegesen a Landau-elméletnek felel meg, Δ^4-nél magasabb rendű tagok elhanyagolása erejéig[78], és ahol

$$\bar{a} = \frac{b}{2}t\ , \quad \bar{b} = \frac{3}{4}c > 0\ . \tag{11.97}$$

A kapott összefüggésből megfigyelhető, hogy a Landau-elmélet $\bar{a}$ és $\bar{b}$ együtthatókra vonatkozó előírásai is teljesülnek. Az analógia csupán a kritikus pont közvetlen közelében áll fenn, tehát csak egy pont közelében igaz. A folytonos fázisátalakulásokhoz képest a különbség ebben az értelemben az, hogy ott kritikus pontok folytonos görbéjével van dolgunk. A kritikus pont itt izolált pont két egyforma szimmetriájú fázis diagramjában. Ezzel ellentétben a folytonos fázisátalakulásnál a kritikus tartomány a két különböző szimmetriájú fázist elválasztó görbe két oldalán helyezkedik el.

---

[77] Pontosabban annak egy konkret rendszerre vett alkalmazásával

[78] A P-ben elhanyagolt tag $P \sim \mathcal{O}(t\Delta^2)$ a Φ-ben $t\Delta^3 \sim \Delta^5$ járulékot ad.

11.8 Szakirodalmi jegyzék 11.

[1] N. Goldenfeld, *Lectures on Phase Transitions and the Renormalization Group*, Frontiers in Physics vol. 85., Addison-Wesley Publ. Company, 1992, 74 oldal.

[2] H. E. Stanley, *Introduction to Phase transitions and Critical Phenomena*, Clarendon Press, Oxford, 1971, 75 oldal.

12 A Ginzburg-kritérium

A molekuláris–tér típusú elméleteket az előbbiekben részletesen tárgyaltuk. Láttuk, hogy ezen elméleteket – a modellek sajátosságaitól független módon – a Landau-elmélet foglalja össze. Az eddig bemutatott tapasztalatok alapján a Landau-féle leírások létjogosultságára vonatkozólag, Ginzburg egy matematikai kritériumot dolgozott ki, mely ma az ő nevét viseli. Ezen kritériummal foglalkozunk a következőkben.

12.1 A korrelációk és fluktuációk globális hatása

A Landau-féle elméletek fenomenológikus elméletek, melyek lényegében arra az elgondolásra épülnek, hogy a korrelációs hatások globálisan elhanyagolhatóak (a konstans molekuláris–tér értéken túlmenőleg), azon térfogaton belül, melyre a lokális jelleggel bíró $\Delta(r)$ rendparaméter kiátlagolt. Ezen gondolatot kell matematikai formában megragadnunk.

Ginzburg, ezen kérdést a következőképpen oldotta meg. Mivel T_c közelében dolgozunk, ahol a ξ korrelációs hossz divergál, a minimális térfogat, melynek tanulmányozása mérvadó lehet a molekuláris–tér típusú elméletek kiértékelésére, legalább ξ–vel összemérhető kiterjedésű kell legyen. Így ellemzésünkhez válasszunk ki egy tetszőleges,

$$V = \xi^d \tag{12.1}$$

térfogatú d dimenziós tartományt T_c közelében. Ezen tartományban a korrelációs hatások összességéről a

$$Z_1 = \left| \int_V d^d r G(r) \right| \tag{12.2}$$

számfaktor segítségével tudnánk képet alkotni, ahol $G(r)$ a korrelációs függvény. Ténylegesen, ha az adott T hőmérsékleten melyen az elemzés történik Z_1 egy nagy szám, akkor a korrelációk hatása nagynak könyvelhető el.

A Z_1 nagyságáról azonban, csak valamilyen más mennyiséghez viszonyítva beszélhetünk. Ehhez be kell vezetnünk még egy mennyiséget, legyen ez Z_2, melyhez képest, Z_1 nagyságát értelmezni fogjuk. Ginzburg szerint ezen mennyiség

$$Z_2 = \int_V d^d r \Delta^2(r) \, . \tag{12.3}$$

Lényegében Z_2 a Landau-elméletben szereplő nem-lokális rendparaméter négyzetével arányos mennyiség $Z_2 \sim \Delta^2$. Ilyen értelemben Z_2 a fluktuációk kiátlagolásának mértékét jellemzi a rendparaméter szintjén.

Visszatérve a Hamilton-operátor $\rightarrow$ effektív Hamilton-operátor átalakítás mozzanatára[79], a következő észrevételek tehetők: A lokális rendparamétert

$$\Delta(r_i) = \langle X_i \rangle \tag{12.4}$$

[79] Azaz a közelítés lépésére

formában értelmezzük, valamilyen jellemző X_i mennyiség segítségével. Ekkor a korrelációs függvény izotróp rendszerre

$$G(r = |r_i - r_j|) = \langle X_i X_j \rangle - \langle X_i \rangle \langle X_j \rangle \,. \tag{12.5}$$

Az MTE jellegű közelítés mely közben lényegében a korrelációs hatásokat hanyagoljuk el

$$2X_i X_j \to X_i \langle X_j \rangle + X_j \langle X_i \rangle \,. \tag{12.6}$$

Bevezetve a

$$G(|r_i - r_j|) \equiv \langle\langle X_i X_j \rangle\rangle \tag{12.7}$$

jelölést, a két jellemző mennyiségünk:

$$Z_1 = \left| \int_V \langle\langle X_i X_j (r = |r_i - r_j|) \rangle\rangle d^d r \right| \,, \tag{12.8}$$

illetve

$$Z_2 = \int_V \left(\langle\langle X_i (r = r_i) \rangle\rangle \right)^2 d^d r|;. \tag{12.9}$$

Mindezek után Ginzburg alapgondolata az[80], hogy a (**??**) közelítés elfogadható, ha a (**??**) reláció két oldalának vett átlaga, a „mérvadó” $V = \xi^d$ térfogaton közel áll egymáshoz[81]. Azaz Z_1 kicsi a Z_2 skálán nézve (dimenziótlan értékelés esetében).

12.2 A Ginzburg-feltétel

A bemutatott gondolatok matematikai formába öntve a következő feltételhez vezetnek, mely a Landau-féle molekuláris–tér elméletek alkalmazhatósági területét megszabja:

$$\varepsilon_G = \left. \frac{Z_1}{Z_2} \right|_{T \to T_c} << 1 \,. \tag{12.10}$$

A megadott feltétel a Ginzburg-kritérium néven ismeretes. Explicit formában kiírva

$$\varepsilon_G = \left. \frac{|\int_V d^d r G(r)|}{\int_V d^d r \Delta^2(r)} \right|_{T \to T_c} << 1 \,. \tag{12.11}$$

Az ε_G kiértékelésekor figyelembe vesszük a Landau-elmélet bemutatásakor levezetett kapcsolatot a χ szuszceptibilitás és $G(r)$ korrelációs függvény között

$$\int_V d^d r G(r) = k_B T \chi \,, \tag{12.12}$$

ahol χ ezúttal a teljes izoterm szuszceptibilitás. Azonban az egész elmélet csupán T_c közelében helytálló a fázisátalakulás szempontjából. Így a $T \to T_c$ határesetben

$$\chi = C_1 |t|^{-\gamma} \,, \tag{12.13}$$

[80] Lásd [1]

[81] Avagy, a korrelációs hatások kicsik. A „kicsik” jelző z Z_2 skálán értendő.

ahol C_1 egy arányossági tényező, és t a redukált hőmérsékleti változó. Ezek szerint a tanulmányozott tartományban

$$\int_V d^d r G(r) = k_B T_c C_1 |t|^{-\gamma} \,. \tag{12.14}$$

Ezen összefüggésben figyelembe vettük, hogy a χ előtt megjelenő T szorzófaktor folytonosan változik, így a nagyságrendi elemzés szempontjából a kritikus hőmérséklet közelében T_c–vel helyettesíthető.

A Ginzburg-feltételben szereplő nevező kiértékelésekor figyelembe vesszük, hogy Z_2 a Δ^2-el arányos tagot ad eredményül. De T_c közelében

$$\Delta \sim |t|^{\beta} \,. \tag{12.15}$$

Ekkor

$$\int_V d^d r \Delta^2(r) = C_2 (\xi)^d |t|^{2\beta} \,, \tag{12.16}$$

ahol C_2 egy konstans. A (**??**) összefüggésben a tanulmányozott térfogat, a Ginzburg-feltételnek megfelelően, $V = \xi^d$. Azonban $\xi \sim |t|^{-\nu}$. Az arányossági tényezőt szokásos $\xi(1)$ formában felírni, tehát

$$\xi = \xi(1) |t|^{-\nu} \,. \tag{12.17}$$

Ekkor viszont a keresett feltétel

$$\varepsilon_G = k_B T_c \frac{C_1}{\xi^d(1) C_2} \frac{1}{|t|^{2\beta + \gamma - \nu d}} << 1 \tag{12.18}$$

formában adható meg.

A kapott összefüggés értelmezésének két fontosabb vetülete van. Egyrészt, a (8.3) paragrafusban ismertetett Landau-elmélet érvényességi területe tanulmányozható segítségével. Ekkor

$$\beta = \frac{1}{2} \,, \quad \gamma = 1 \,, \quad \nu = \frac{1}{2} \,, \tag{12.19}$$

amelyre

$$2\beta + \gamma - \nu d = \frac{4 - d}{2} \,. \tag{12.20}$$

Ennek alapján a Ginzburg-kritériumból

$$\varepsilon_G = \mathcal{C} \frac{1}{|t|^{(4-d)/2}} << 1 \,, \tag{12.21}$$

ahol

$$\mathcal{C} = k_B T_c \frac{C_1}{\xi^d(1) C_2} \,. \tag{12.22}$$

Látható tehát, hogy a

$$|t|^{\frac{4-d}{2}} >> \mathcal{C} \tag{12.23}$$

feltételnek kell teljesülnie ahhoz, hogy a molekuláris–tér jellegű közelítés eredményei elfogadhatóak legyenek. Ezen feltétel mutatja, hogy a $d < 4$ esetben, ahogy már említettük, a hőmérséklet T_c közelében kell legyen, de nem T_c közvetlen közelében. Ebből ered a molekuláris–tér elméletek T_c–re vonatkozó következtetéseinek pontatlansága. Továbbmenőleg, ha $d > 4$, akkor a Landau-típusú elmélet a kritikus tartományban helytállónak könyvelhető el. A $d = 4$ érték egy különleges eset. Ezen dimenzió esetében ugyanis a Ginzburg-kritérium szerint a releváns hőmérsékleti tartomány megítélésében a $\mathcal{C}$ numerikus koefficiens értéke is fontos. Általában ezen konstans kicsi, így a következtetések, mint $d < 4$–ben, a T_c közelében, de nem közvetlen közelében helytállóak. Továbbá, amint már láttuk, $d = 4$–ben, a tanulmányozott eset kielégíti a skálatörvényeket, azaz skálainvariáns jellegű viselkedést mutat (ez viszont csak a „kitüntetett” $d = 4$–ben igaz). Szintén $d = 4$ esetre vonatkozólag megemlítendő, hogy ekkor a Landau-típusú elmélet eredményei mellé logaritmikus t korrekciók figyelembevétele szükséges az eredmények kvalításának növelése érdekében[82].

A Ginzburg–kritérium értelmezésének másik fontosabb vetületével, külön paragrafusban foglalkozunk.

12.3 A felső kritikus dimenzió

A Ginzburg–kritérium tanulmányozásakor megfigyelhető, hogy a megadott feltétel

$$\varepsilon_G = \mathcal{C}\frac{1}{|t|^{\nu(\frac{2\beta+\gamma}{\nu}-d)}} \sim \frac{1}{|t|^{\nu(d_c-d)}} << 1 \tag{12.24}$$

formában is megadható, ahol

$$d_c = \frac{2\beta+\gamma}{\nu} \,. \tag{12.25}$$

A d_c mennyiség, a „felső kritikus dimenzió” nevet viseli. Ezen felírásban a Ginzburg–kritérium mindig fennáll a $t \to 0$ kritikus tartományban, ha a

$$d > d_c \tag{12.26}$$

követelmény fennáll. Tehát ha adott egy rendszer mely leírására egy Landau-típusú elméletet alkalmazunk és az elméletből adodó kritikus exponensek (**??**) szerint egy d_c értéket határoznak meg. Ekkor a rendszerünk a d_c dimenzió felett, a szóban forgó elméleti leírással jellemezhető a Ginzburg–kritérium szerint szelfkonzisztens módon a kritikus tartományban. A másod- és negyedrendű tagra építő standard Landau-leírás esetében $d_c = 4$, míg a hatodrendű tag figyelembevételekor és $b(p, T)$ előjelváltását feltételezve $d_c = 3$. A d–re vonatkozó (**??**) szigorúan vett

[82] Lásd például [1])

egyenlőtlenség fennállása esetében a következtetések tetszőleges kis t értékre kiterjeszthetőek. A $d \leq d_c$ esetében a t változó alsó határát mindig a $\mathcal{C}$ koefficiens konkrét értéke adja meg.

12.4 Szakirodalmi jegyzék 12.

[1] N. Goldenfeld, *Lectures on Phase Transitions and the Renormalization Group*, Frontiers in Physics vol. 85., Addison-Wesley Publ. Company, 1992, 169 oldal.

13 Az Orstein-Zernike-féle korrelációs elmélet

Ezen fejezetben, a korrelációk Landau elmélet témaköréhez kapcsolódó fizikai értelmezését fogjuk tanulmányozni.

13.1 Bevezetés

Az előbbiekben két konkrét alkalmazását mutattuk be a molekuláris–tér elméletének, majd az alkalmazási általános kritériumát elemeztük. Visszatérve a bemutatott modellekre megjegyzendők a következők.

A Weiss- és a Van der Waals-modell segítségével pontoztuk a termodinamikai mennyiségeket jellemző $\alpha, \beta, \gamma, \delta$ kritikus exponensek Landau–elméletbeli értékét. Ez megmutatta, hogy ezen elméletekben az alapkő lényegében a lokális kölcsönhatásoknak egy kevésbé változó, de végtelen hatótávolságú kölcsönhatással való helyettesítése volt. A korrelációkat jellemző kritikus exponensek konkrét példázása esetekben, a Landau elmélet keretei között, $\Delta \to \Delta(x)$ feltételezéssel, majd $\Delta(x) \to \Delta(x) + \delta\Delta(x)$ átvitellel éltünk, ahol $\delta\Delta(x)$ kis változásokat jelölt. Mindez viszont ν és η exponenseket meghatározza ugyan, de a kapott „klasszikus" (azaz MTE) értékeik fizikai tartalmára vonatkozólag kevés információt szolgáltat. Hogy a Landau elmélet témaköréről alkotott kép teljes legyen, ezen hiányosságot itt pótolni fogjuk egy klasszikus, korrelációkat megadó elmélet aprólékos elemzésén keresztül.

13.2 Az Orstein-Zernike-egyenlet

Az Ornstein–Zernike elméletben sűrűség–sűrűség korrelációt számolunk, egy klasszikus folyadék jellegű rendszerben. A részecskeszám sűrűségét ekkor a

$$n(r) = \sum_{i=1}^{N} \delta(r - r_i) \tag{13.1}$$

összefüggés adja meg. Az $n(r)$ átlagértékét

$$\langle n(r) \rangle = \frac{N}{V} = n\,' \tag{13.2}$$

a geometriai térben egyenletesnek feltételezzük. A sűrűség–sűrűség korrelációs függvény, meghatározás szerint,

$$G(r, r') = \langle [n(r) - \langle n(r) \rangle] \cdot [n(r') - \langle n(r') \rangle] \rangle = \langle n(r) n(r') \rangle - n^2 \ . \tag{13.3}$$

Továbbá a rendszert homogén és izotrópnak tételezzük fel, azaz:

$$G(r, r') = G(r - r') \ . \tag{13.4}$$

Íly módon:

$$G(r-r') = \langle \sum_{\substack{i=1\\j=1}}^{N} \delta(r-r_i)\delta(r'-r_j)\rangle - n^2 \,. \tag{13.5}$$

Ezen kifejezésben, az $i=j$ esetben az átlagban a

$$\sum_{i=j=1}^{N} \delta(r-r_i)\delta(r'-r_j) = \sum_{i=1}^{N} \delta(r-r')\delta(r-r_i) \tag{13.6}$$

egyenlőség használható, így n definícióját felhasználva

$$\langle \sum_{i=j=1}^{N} \delta(r-r_i)\delta(r'-r_j)\rangle = n\delta(r-r') \,. \tag{13.7}$$

Ekkor viszont a korrelációs függvényből megmaradt rész

$$G(r-r') - n\delta(r-r') = \langle \sum_{i\neq j}^{N} \delta(r-r_i)\delta(r'-r_j)\rangle - n^2 \tag{13.8}$$

formába ölthető. Most viszont a következők figyelhetők meg: a kapott egyenlet baloldala csak $r-r'$–től függ. Ez azt jelenti, hogy a jobboldal is ezzel a tulajdonsággal kell rendelkezzen. Továbbá, a megmaradt dupla összegben két $\delta(..)$ függvény szerepel, míg n definíciójában egy $\delta(..)$ van. Ez arra utal, hogy (**??**) jobboldalán álló tag globálisan n^2–el arányos. Ezen információkat összevetve, (**??**) jobboldala $n^2\Gamma(r-r')$ formában írható fel, azaz a korrelációs függvényünk

$$G(r-r') = n\delta(r-r') + n^2\Gamma(r-r') \,. \tag{13.9}$$

Itt $\Gamma(r-r')$ egy ismeretlen függvény, melyet a továbbiakban meg kell határoznunk.

A kifejezés Fourier-transzformálása[83],

$$\Gamma(q) = \int \Gamma(r) e^{-iqr} \frac{d^3r}{(2\pi)^3} \tag{13.10}$$

mintájára, a következő egyenlőséget eredményezi:

$$G(q) = n + n^2\Gamma(q) \,. \tag{13.11}$$

Ezen összefüggésben, most már a hullámszám térben, $\Gamma(q)$ egy ismeretlen, meghatározandó függvény.

A következőkben tételezzük fel, hogy rendszerünkben egy kritikus pont található. Ennek következtében $T \to T_c$ közelében, így végtelen hatótávolságú korrelációk

[83] azaz a k-térben való felírása

léphetnek fel melyeket jellemző k-térben vett $\Gamma(q)$ értékeket elvi szempontból nincs mi korlátozza. Így $T \to T_c$ határesetben Γ divergálhat. Mivel nagy r értéknek kis k érték felel meg, így ezt az esetet

$$\Gamma(q \to 0) \to \infty \quad \text{ha} \quad T \to T_c \ . \tag{13.12}$$

formában jellemezhetjük.

Másfelől pedig, ha T nagyon távol áll T_c–től, $\Gamma(q)$ véges, sőt zéró felé tart[84]. Mindennek következtében, mivel $\Gamma(q)$ értékei nagy intervallumon mozognak, ($\Gamma(q) \in (0, +\infty)$, $\Gamma(q)$–ra nagyon nehéz egy egyszerű feltételezést tenni úgy, hogy az a teljes tartományon jó közelítést jelentsen. Ezért, Ornstein és Zernike nyomán, tételezzük fel, hogy $\Gamma(q)$–t egy ismeretlen $C(q)$ függvény határozza meg, melyet $\Gamma(q)$–val az alábbi összefüggése köti össze:

$$\Gamma(r - r') = C(r - r') + n \int C(r - r'')\Gamma(r'' - r')dr'' \ . \tag{13.13}$$

Ezen egyenlet Ornstein–Zernike-egyenlet néven ismeretes. Az összefüggést felfoghatjuk úgy, mint ami egy ismeretlen függvényt, $\Gamma(r - r')$–t, egy másik ismeretlen függvénnyel, $C(r - r')$-rel, definiál.

13.3 Az Orstein-Zernike-féle korrelációs függvény

Annak oka, hogy miért értelmezték a Γ–ban szereplő C ismeretlen függvényt éppen ily módon, a következő: Fourier-transzformálva az Orstein–Zernike-egyenletet,

$$\Gamma(q) = C(q) + nC(q)\Gamma(q) \tag{13.14}$$

adódik, amelyből $C(q)$-t kifejezve a

$$C(q) = \frac{\Gamma(q)}{1 + n\Gamma(q)} \tag{13.15}$$

egyenlőség kapható. Most azonnal észrevehető, hogy $C(q)$ nagyon kicsit változik T függvényében. Ténylegesen, ha T távol van T_c-től, $\Gamma(q)$ kicsi, és így $C(q)$ alsó határa zéró. Ha viszont $T \to T_c$, és $\Gamma \to \infty$, akkor is $C(q) \to 1/n$, így $C(q)$ ez esetben is kicsi marad.

Mindennek eredményeként, $C(r)$ lényegében mindig kis hatótávolságú korrelációt jelől. Mindez azért, mert $T \to T_c$–ben is, ahol $q \to 0$ a determináló mennyiség (a fluktuációk tanulmányozásakor láttuk, hogy a hosszútávú rendezettség legfontosabb megakadályozói a hosszúhullámú perturbációk):

$$C(q \to 0) \sim \frac{1}{n} \tag{13.16}$$

[84] Ha $T >> T_c$ a korrelációs függvény zéróra cseng le.

Ekkor viszont,

$$C(q=0) \sim \int C(r)dr \sim < C(r) > \sim \frac{1}{n} \, . \tag{13.17}$$

Az elmondottak következtében $C(r)$ egy ,,direkt" korrelációs függvényként értelmezhető fizikailag, amely egy adott részecskének a közvetlen környezetével való korrelációját írja le. Így tehát, az Ornstein–Zernike felfogásban, a korreláció direkt lokális korrelációk egymás közti továbbításával és egymásratevődő láncolatával jön létre. A $C(r)$ korreláció általában a kölcsönhatási potenciál $U(r)$ hatótávolságával jellemezhető (és ez, a reális esetek többségében kis hatósugarú). Ezen szemléletben $\Gamma(r)$, végtelen hatótávolságú lesz T_c közelében azért, mert a $C(r)$ direkt korrelációk valamilyen módon propagálódnak, egyik pontról a másikra összekapcsolódnak, létrehozván a globális, hosszúhatótávolságú $\Gamma(r)$ korrelációkat, melyek a fázisátalakulás előidézéséhez szükségesek.

Mivel $C(q)$ a T függvényében keveset változik, rá vonatkozólag könnyebb feltevéseket tenni. A $C(q)$ legnagyobb értékét $q = 0$ körül éri el, így feltételezzük, hogy $C(q)$–nak $q = 0$ körüli Taylor-sorbafejtését véve, és abban egy adott alacsony hatványnál megállva, a T_c körüli jelenségek leírhatókká válnak. Továbbá, mivel $C(q)$ hőmérsékletfüggése kicsi, feltételezhetjük, hogy az említett sorbafejtés koefficiensei a hőmérsékletnek és a sűrűségnek ,,sima", nem divergáló reguláris függvényei. Ekkor:

$$C(q) = C_0(n,T) + C_1(n,T)q + C_2(n,T)q^2 + \ldots = \int C(r)e^{-iqr}d^3r \, . \tag{13.18}$$

Ezen összefüggésben feltesszük, hogy $C_0(n, T_C) = 1/n$. Továbbá, hogy valami többlet információt szerezzünk a $C_l(n,T)$ koefficiensekre vonatkozólag, figyeljük meg, hogy $C(q)$-t, l–szer deriválva, a következő összefüggés adódik:

$$\mathcal{I}_l = \left.\frac{\partial^l C(q)}{\partial q^l}\right|_{q=0} = (l)!C_l(n,T) = \int [(-i\cos\theta)r]^l C(r)(\sin\theta d\theta \cdot 2\pi r^2 dr) \, , \tag{13.19}$$

azaz a $\mu = \cos\theta$ változócserével

$$\mathcal{I}_l \sim \int_{-1}^{1} \mu^l d\mu \int_0^\infty r^{l+2}C(r)dr \, . \tag{13.20}$$

Most tudjuk, hogy $C(r)$ kis hatótávolságú. Ennek alapján, tételezzük fel, hogy $C(r)$ lecsengése olyan, hogy az r szerinti integrálok melyek $\mathcal{I}_l$–ben szerepelnek, nem divergálnak. Ekkor viszont, páratlan l–re a μ (azaz a θ szög) szerinti integrálok zéróvá válnak, így

$$C_{2n+1} = 0 \, . \tag{13.21}$$

A gondolatmenetben implicit az is benne volt, hogy a $C(r)$ tagokban nincs θ függés, és ez természetes is, mert a rendszert izotrópnak képzeltük el. Így tehát a keresett ismeretlen függvényünk formája:

$$C(q) = C_0(n,T) + q^2 C_2(n,T) + \mathcal{O}(q^4) \, . \tag{13.22}$$

Mindezek után a korrelációs függvényt is kifejezhetjük. A Γ értéke:

$$\Gamma(q) = \frac{C(q)}{1 - nC(q)} \,, \tag{13.23}$$

tehát

$$G(q) = n + n^2\Gamma(q) = n + \frac{n^2 C(q)}{1 - nC(q)} \,. \tag{13.24}$$

Ekkor viszont $G(q)$–nak $C(q)$ függvényében megadott formája

$$G(q) = \frac{n}{1 - nC(q)} \,. \tag{13.25}$$

Ezen egyenlőségbe $C(q)$ levezetett kifejezését behelyettesítve:

$$G(q) = \frac{n}{(1 - nC_0(n,T)) + (-n)C_2(n,T)q^2} \,, \tag{13.26}$$

tehát

$$G(q) = \left(\frac{1 - nC_0(n,T)}{n} + (-C_2(n,T))q^2 \right)^{-1} \,. \tag{13.27}$$

Megfigyelhető, hogy $T = T_c$–ben $C_0 = 1/n$, tehát bevezetve a

$$\frac{1 - nC(0)}{n} = a_1(n,T) \,, \tag{13.28}$$

jelölést, $G(q)$ formája a következőképpen alakul:

$$G(q) = \frac{1}{a_1(n,T) + q^2 b_1(n,T)} \,, \tag{13.29}$$

ahol

$$a_1(n,T) \to 0 \,, \quad \text{ha} \quad T \to T_c \,, \tag{13.30}$$

és

$$b_1(n,T) = -C_2(n,T) = \frac{-1}{2!} \frac{\partial^2 C(q)}{\partial q^2}\bigg|_{q=0} = -\frac{1}{2} \int (-ir)^2 C(r) e^{-iqr} d^3 r \bigg|_{q \to 0} \,. \tag{13.31}$$

Ekkor viszont

$$b_1(n,T) = -C_2(n,T) \sim \int_0^\infty r^4 C(r) dr \,, \tag{13.32}$$

ahol a mínusz előjelet $(i)^2$ kompenzálja. Tehát

$$b_1(n,T) = -C_2(n,T) > 0 \ . \tag{13.33}$$

Mindezek után bevezetve a

$$A(n,T) = \frac{a_1(n,T)}{b_1(n,T)} \ , \tag{13.34}$$

jelölést, $G(q)$–ra a következő végeredményt kapjuk:

$$G(q) = \frac{1}{b_1(n,T)} \cdot \frac{1}{A(n,T) + q^2} \ . \tag{13.35}$$

Ez az Orstein–Zernike korrelációs függvény. Megjegyzendő, hogy $A(n, T = T_c) = 0$, és $b_1(n, T = T_c) > 0$ ‚síma' függvény $T = T_c$ körül, továbbá $G(q)$–nak q szerinti függése Lorentz-típusú. A Landau-elmélet tanulmányozásából tudjuk, hogy ezen eredmény megegyezik a korrelációs függvényre ott kapott eredménnyel. Ekkor viszont az η kritikus exponens értéke:

$$\eta = 0 \ . \tag{13.36}$$

Mindamellett, hogy az Orstein–Zernike-elmélet megmagyarázza a molekuláris–tér elméletből származó korrelációs függvényhez csatolt kritikus exponens fizikai hátterét[85], megemlítendő, hogy történelmileg ezen elmélet a kritikus opaleszcencia megmagyarázására született. Ezt a jelenséget mutatjuk be a következő paragrafusban.

13.4 A kritikus opaleszcencia

Ha fénnyel sugározzuk be a kritikus pont közelében lévő gázunkat, amely hullámhossza a rendszer gerjesztési hullámhosszaitól távol van, T_c–ben a rendszer tejszerűvé válik, azaz a gáz elveszti átlátszóságát. Ezen jelenséget nevezik kritikus opaleszcenciának. A folyamat megmagyarázása érdekében megmutatható[86], hogy a $G(q)$ korrelációs függvény a szórt fény $I(q)$ intenzitásával egyenesen arányos, ahol $\vec{q} = \vec{k}_v - \vec{k}_b$ a szort és a beeső fény hullámvektorainak különbsége.

Az összefüggés alapja, a szórt fény intenzitását megadó összefüggés

$$I(q) = \langle | \sum_{j=1}^{N} a_j(q) |^2 \rangle \ , \tag{13.37}$$

ahol $a_j(q)$ a j részecskéröl történő szórást jellemző amplitúdó. Két különböző részecskéről történő szórás egy fázisfaktor különbséget ad, azaz

$$a_j(q) = a_1(q) e^{-i\vec{q}\cdot(\vec{r}_j - \vec{r}_1)} \ . \tag{13.38}$$

[85] Lásd [1]
[86] Lásd [1]

Ekkor $r_j - r_1$ átjelölésével

$$I(q) \sim \langle | \sum_{j=1}^{N} e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}_j} |^2 \rangle \sim \langle \sum_{i,j}^{N} e^{-i\vec{q}\cdot(\vec{r}_i - \vec{r}_j)} \rangle \ . \tag{13.39}$$

Ezen összefüggés viszont két delta függvény bevezetésével folytonos formában felírható:

$$\begin{aligned} I(q) &\sim \frac{1}{N} \int d^3r \int d^3r' e^{-iq(r-r')} \langle \left(\sum_{i=1}^{N} \delta(r - r_i) \right) \left(\sum_{j=1}^{N} \delta(r' - r_j) \right) \rangle \\ &= \frac{1}{N} \int d^3r \int d^3r' e^{-iq(r-r')} \left(G(r - r') + n^2 \right) \\ &= \frac{V}{N} \int d^3r e^{-iqr} G(r) + \frac{V^2 n^2}{N} \delta(q) \ , \end{aligned} \tag{13.40}$$

ahol q és r vektor jellege magától értendő. Mivel az utolsó tag csupán $q = 0$-ban ad járulékot, véges, de tetszőleges kis q hullámszámok esetében elhagyjuk, és így

$$I(q)|_{q \neq 0} \sim G(q) \tag{13.41}$$

A kísérletileg mért adatok alapján[87] I–nek q^2 függvényében történő ábrázolása T_c közelében, nagyon hosszú szakaszon egyenes vonalat ad (kivéve $q \simeq 0$ tartományt), igazolva az Ornstein–Zernike elmélet elfogadhatóságát. Ugyanakkor $T = T_c$–ben a $q \to 0$ határesetben (de $q \neq 0$-ra is) $I(q)$ rendkívül nagy értékeket vesz fel, így az ,,előre szórás" nagyon megnő, és a rendszer átlátszatlanná válik. Ez a folyamat lényege.

Mindezen eredmények hangsúlyozzák, hogy az η kritikus exponens,

$$G(r) \sim \frac{1}{r^{d-2+\eta}} \ , \quad T = T_c \tag{13.42}$$

definíciója szerint, azt jelzi, hogy a valóságos rendszerünk milyen mértékben tér el az Ornstein–Zernike-viselkedéstől. A valódi korrelációk esetében η mindig egy kis, zérótól különböző szám. Ez jelzi, hogy T_c közelében a ,,kishatótávolságú" korrelációkat nem tüntethetjük ki, és nem kezelhetjük preferenciális módon a hosszútávú korrelációkhoz képest. Mindennek ellenére, amint majd látni fogjuk, az $\eta = 0$ a molekuláris–tér elméletének egyik legjobb eredménye.

[87] Lásd például [2]

13.5 Szakirodalmi jegyzék 13.

[1] H. E. Stanley, *Introduction to Phase transitions and Critical Phenomena*, Clarendon Press, Oxford, 1971, 94 oldal.

[2] H. E. Stanley, *Introduction to Phase transitions and Critical Phenomena*, Clarendon Press, Oxford, 1971, 105 oldal.

14 A Goldstone módusok

Hogy megérthessük a jellemzésre kerülő jelenség fizikai hátterét, tanulmányunk elkezdése elött vissza kell térnünk egy kicsit a korrelációs függvény tanulmányozásához. A következő paragrafus erre vonatkozik.

14.1 A kollektív gerjesztések kimutatása

Amint láttuk az előbbiekben, adva lévén egy $A(r_i)$ lokálisan r_i-től függő mennyiség,

$$G(i,j) = \langle A(r_i)A(r_j)\rangle - \langle A(r_i)\rangle\langle A(r_j)\rangle \tag{14.1}$$

az A mennyiség i és j-ben vett értékeinek korrelációját fejezi ki. Az előbb megadott korrelációsfüggvény a direkt (r) térben adott és izotróp rendszerben csupán az $r_{ij} = |r_i - r_j|$ távolságoktól függ. Most tételezzük fel, hogy a korrelációs függvényünket áttranszformáljuk a k térbe, nem felejtve el, hogy k fizikai tartalommal rendelkezik, azaz hullámvektor jellegű mennyiség. Tételezzük továbbá fel, hogy a rendszerünket tanulmányozva, azt tapasztaljuk, hogy $G(k)$ egy fizikai értelemmel bíró $\vec{k}_0$-ra divergál. Mindez azt fogja jelenteni, hogy az adott $\vec{k} \to \vec{k}_0$-ra vett $G(\vec{k})$ érték minden $G(r_{ij})$-ben megjelenik függetlenül r_{ij} nagyságától. Ez a megfigyelés azon fizikai tényt fedi, miszerint a rendszer egésze a tanulmányozott körülmények között koherens módon viselkedik, azaz, plasztikusan szólva, egy adott lokális $A(i)$ a tőle nagyon nagy távolságra lévő $A(j)$ viselkedéséről is információval rendelkezik. Mindez azért jön létre, mert a rendszer egy gerjesztési spektrumát találtuk meg, melynek kialakításában az egesz rendszer részt vesz, azaz kollektív gerjesztésről van szó.

Továbbmenőleg, ha egy gerjesztési spektrumnak különböző ágai vannak, ezeket módusoknak nevezzük. A következőkben egy ilyen módus tanulmányozása lesz a célunk, melynek a fázisátalakulások szempontjából kitüntetett szerepe van, s mely bizonyos fajta rendezett fázisban megjelenő gerjesztéseket jellemez.

14.2 Folytonos szimmetriával rendelkező rendszerek szuszceptibilitása a kritikus tartományban

A következőkben kizárólagosan olyan rendszereket fogunk tanulmányozni, melyek valamilyen fajta folytonos szimmetriával rendelkeznek, s amelyek fázisátalakulást szenvednek oly módon, hogy szimmetriájuk sérül. Az információk könnyebb rögzítése céljából egy konkrét esetet fogunk tanulmányozni, mely $\mathcal{O}(n)$ szimmetriával rendelkezik. Álljon például a rendszerünk olyan $\vec{S}$ lokalizált spinekből, melyek n vektorkomponenssel rendelkeznek, és ebből kifolyólag a rendszer a rendezetlen fázisban $\mathcal{O}(n)$ folytonos rotációs szimmetriával rendelkezik.

Most tételezzük fel, hogy a rendszerben fázisátalakulás jön létre melynek során a rendszerünk spontán ferromágnessé alakul $H = 0$ külső térben. Mindez azt jelenti, hogy a rendszer folytonos rotációs szimmetriája sérül, spontán mágneses momentum jelenik meg, melyet jelöljünk tetszőleges d dimenzióban $\vec{M}(x)$–nek, megtartva lokális jellemzőit is. Ekkor a rendszer termodinamikai potenciálja a Landau elmélet alapján:

$$\Phi = \frac{1}{V}\int d^dx[\Phi_0(x) + aM^2(x) + bM^4(x) + g(\nabla\vec{M}(x))^2]\,, \tag{14.2}$$

ahol $\Phi_0(x)$ az egyensúlyi termodinamikai potenciálsűrűség a rendezetlen fázisban[88]. Azon elvi kérdések tisztázásához, melyeket itt tárgyalni szeretnénk, Φ-nek ezen előállítása elegendő.

A rendszerünk folytonos rotációs szimmetriája sérül, mert $\vec{M}(x)$ megjelenésével, a tér pontosan $\vec{M}(x)$ által definiált iránya kitüntetetté válik, ahol $\vec{M}(x)$ nyilvánvalóan, egy rögzített irányítású n komponensű vektor. Hogy miért választja ki a rendszer pontosan az $\vec{M}(x)$ irányt, arra azt mondtuk a molekuláris–tér elméletek tanulmányozásakor, hogy mindezt a fázisátalakulás pillanatában éppen fennálló külső körülmények határozzák meg. A elemzés során azonban nyilvánvaló volt, hogy bármilyen (rögzített) irányítással is rendelkezik $\vec{M}(x)$, a rendszer rendezett fázisban való viselkedése ugyanaz. Mindez viszont mostmár azt jelenti, hogy a rendezett fázis alapállapota a rendparaméter vektorterében végtelenül degenerált. Ezek szerint, kell létezzen egy olyan lehetőség, mely végtelen kis energiabefektetés mellett a rendszert egyik alapállapotából egy másik (az előbbivel ,,degenerált", azaz ugyanolyan energiaértékhez tartozó) alapállapotba vigye át, a rendezett fázis fázisdiagram területén. Tanulmányozzuk a következőkben, hogy mindezt mi valósítja meg a mi konkrét rendszerünk esetében. E célból vegyünk figyelembe a (**??**)-ben adott $\Phi(x)$ kifejezésben egy külső teret tartalmazó tagot is:

$$-\vec{h}(x)\cdot\vec{M}(x) = -\sum_{\alpha=1}^{n} h_\alpha(x)M_\alpha(x) \tag{14.3}$$

ahol az α index a vektorkomponenseket jelöli. Legyen továbbá $\vec{h}(x)$ homogén, azaz $\vec{h}(x)\equiv\vec{h}$. Így a mágnesezettség α komponense

$$M_\alpha = -\frac{\partial\Phi}{\partial h_\alpha}\,, \tag{14.4}$$

továbbá a szuszceptibilitás α,β komponense

$$\chi_{\alpha\beta} = \frac{\partial M_\alpha}{\partial h_\beta} = -\frac{\partial^2\Phi}{\partial h_\alpha h_\beta}\,. \tag{14.5}$$

Mivel rendszerünk anizotrop, ezt explicit itt a jellemzésünkben figyelembe veszszük. A $\chi_{\alpha\beta}$ szuszceptibilitás tenzor-komponens leírja, hogy a rendparaméter (azaz itt a

[88] Az adott kifejezésben $M^4 = (\vec{M}^2)^2$, illetve $(\nabla M)^2 = \sum_{i=1}^{n}(\nabla M_i)^2$

mágnesezettség) α komponensét hogyan változtatja meg a külső tér β komponense. Most h abszolút értékét illetőleg

$$h = \left[\sum_{\alpha=1}^{n} h_\alpha^2 \right]^{1/2} \tag{14.6}$$

összefüggés áll fenn. Ebből következik, hogy

$$\frac{\partial}{\partial h_\alpha} = \frac{\partial h}{\partial h_\alpha} \cdot \frac{\partial}{\partial h} = \frac{h_\alpha}{h} \frac{\partial}{\partial h} . \tag{14.7}$$

Mindezek után χ tanulmányozott komponenseit a következő formában írhatjuk fel:

$$\begin{aligned}
\chi_{\alpha\beta} &= -\frac{\partial h}{\partial h_\alpha} \left(\frac{\partial}{\partial h_\beta} \Phi \right) = -\frac{\partial}{\partial h_\alpha} \left(\frac{h_\beta}{h} \frac{\partial \Phi}{\partial h} \right) \\
&= -\delta_{\alpha\beta} \frac{1}{h} \frac{\partial \Phi}{\partial h} - \frac{h_\alpha h_\beta}{h} \frac{\partial}{\partial h} \left(\frac{1}{h} \frac{\partial \Phi}{\partial h} \right) \\
&= -\delta_{\alpha\beta} \frac{1}{h} \frac{\partial \Phi}{\partial h} - \frac{h_\alpha h_\beta}{h} \left[-\frac{1}{h^2} \frac{\partial \Phi}{\partial h} + \frac{1}{h} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial h^2} \right] \\
&= -\frac{h_\alpha h_\beta}{h^2} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial h^2} - \frac{1}{h} \frac{\partial \Phi}{\partial h} \left(\delta_{\alpha\beta} - \frac{h_\alpha h_\beta}{h^2} \right)
\end{aligned} \tag{14.8}$$

A továbbiakban $\vec{e}$-vel jelölve $\vec{h}$ irányának egységvektorát:

$$\vec{h} = h\vec{e} \; ; \quad \vec{e} = (e_1, e_2, \dots e_n) \; , \tag{14.9}$$

az

$$M = -\frac{\partial \Phi}{\partial h} \; , \tag{14.10}$$

felhasználásával[89], a szuszceptibilitás formája a következőképpen alakul:

$$\chi_{\alpha\beta} = e_\alpha e_\beta \left(-\frac{\partial^2 \Phi}{\partial h^2} \right) + (\delta_{\alpha\beta} - e_\alpha e_\beta) \left(\frac{M}{h} \right) \tag{14.11}$$

Megfigyelhető, hogy ezen kifejezés első tagja $\chi_\parallel$, a második $\chi_\perp$:

$$\chi_\parallel = -\frac{\partial^2 \phi}{\partial h^2} \; ; \quad \chi_\perp = \frac{M}{h} \tag{14.12}$$

Itt a párhuzamos és merőleges index a külső tér irányára vonatkozik. Ténylegesen, ha a külső mágneses tér és a mágneses momentum iránya megegyező, és például α, akkor $e_\alpha = 1, e_{\beta \neq \alpha} = 0$, és $\chi_{\alpha\beta}$–ban az egyedüli járulék: $\chi_{\alpha\alpha} = \chi_\parallel$. Ellenkező

[89]Itt az M mágnesezettség abszolút értéket jelent. A $\vec{M}$ komponenseire vonatkozólag $M_\alpha = \int d^d x M_\alpha(x)$ áll fenn.

esetben, ha M és h egymásra merőlegesek, azaz M az α irányba mutat, de h-nak nincs α komponense, azaz $e_\alpha = 0$, a χ komponenseit a második tag, azaz $\chi_\perp$ határozza meg.

Lényeges kihangsúlyoznunk, hogy az elemzés rendezett fázisban folyik, azaz $\vec{M} \neq 0$ és $T < T_c$. Ekkor látszik viszont, hogy

$$\chi_\perp \to \infty \,, \quad \text{ha}\, h \to 0\,. \tag{14.13}$$

Mindez azt jelenti, hogy a rendszerünk az $\vec{M}$-re merőleges irányba „végtelenül" érzékeny (szuszceptibilis). Végtelen kis, $\vec{M}$-re merőleges $\vec{h}$, $\vec{M}$-nek véges, nemzéró elforgatását idézheti elő.

Fizikailag mindez a következőképpen is jellemezhető: Ha a rendszernek az $\mathcal{O}(n)$ folyotonos szimmetriája sérül, és rendezett fázisba megy át, ez nem jelenti azt, hogy fluktuációk nem léphetnek fel benne. A fellépő fluktuációk két típusúak lehetnek: longitudinálisak (azaz $\vec{M}$ irányával párhuzamosak) és transzverzálisak (azaz $\vec{M}$ irányára merőlegesek). Most a fluktuációk $\vec{M}$, és ezúttal Φ megváltoztatását idézik elő. Mindezek szerint a fluktuációk létrehozása energiabefektetéssel jár. A két megemlített, különböző típusú fluktuáció energiaigénye viszont különböző. A longitudinális fluktuációk $\vec{M}$ nagyságát (i.e. hosszát) változtatják meg, és ahogy (??)-ből látszik, ez véges energiaértéket igényel. Ezzel ellentétben a transzverzális fluktuációk csupán $\vec{M}$ irányát változtatják meg, így pl. (??)-ben $g = 0$ esetén, Φ-t változatlanul hagyják, semmi energiabefektetést nem igényelve. Ha most a $(\nabla\vec{M})^2$ tagot is figyelembe vesszük, a transzverzális fluktuációk is energiaigényesek lesznek, de sokkal kisebb mértékben, mint a longitudinális fluktuációk.

Látjuk tehát, hogy a $(\nabla\vec{M})^2$ tag a transzverszális fluktuációk energiamérlege szempontjából fontos. Ezen gradiens tag viszont annál kisebb, minél nagyobb a fluktució hullámhossza (ekkor ugyanis kis távolságokon kis változás észlelhető $\vec{M}(x)$-ban). Mindez, a hullámvektor szinten kis k értékeket jelent, és $k \to 0$, határesetben $\epsilon \to 0$ gerjesztési energiaértékeket jellemez. Fizikailag szemlélve a folyamatot tehát, ha a transzverzális fluktuációk egy kollektív gerjesztésbe tömörülnek, ennek energiaspektruma

$$\epsilon(k) \to 0\,, \quad \text{ha} \quad k \to 0 \tag{14.14}$$

tulajdonsággal kell rendelkezzen. Most kollektív gerjesztésbe való tömörülésről úgy győződhetünk meg, hogy megmutatjuk, hogy a transzverzális spin korrelációs függvénynek tényleg pólusa van $k \to 0$-ban. Ha ezt sikerül megmutatni, egy olyan gerjesztési spektrumot kapunk, mely rendezett fázisban jön létre, tisztán az $\mathcal{O}(n)$ folytonos szimmetria sérülése miatt. Mivel n vektorkomponens esetén, és rögzitett $\vec{M}$ irány mellett, $n-1$ transzverzális irány van, ezen energiaspektrum összesen $n-1$ módusba kell tömörüljön. Ezen módusoknak a neve: Goldstone módusok[90].

[90]Lásd például [1]

14.3 A spinkorrelációs függvény pólusai

Ellenőrizzük a következőkben, hogy ténylegesen, a transzverzális spin–korrelációs függvénynek pólusa van $k \to 0$ határesetben.

14.3.1 A homogén mágneses momentum esete

Legyen a következőkben $\vec{M}(x)$ homogén, azaz

$$\vec{M}(x) = \vec{m} \; , \tag{14.15}$$

így, a (**??**) egyenletből:

$$\Phi = \Phi_0 + am^2 + bm^4 \; . \tag{14.16}$$

Itt, amint tudjuk, a szélsőérték feltételből m^2 értékét a

$$\partial\Phi/\partial m = 0 \tag{14.17}$$

összefüggés határozza meg a rendezett fázisban, azaz:

$$2am + 4bm^3 = 0 \; , \tag{14.18}$$

tehát

$$m^2 = -\frac{1}{2b} \; ; \quad (a < 0 \, , \quad \text{ha} \quad T < T_c) \; . \tag{14.19}$$

Megjegyzendő hogy itt,

$$\vec{m} = m \cdot \vec{n} \; ; \quad \vec{n} = (1, 0, 0, 0, \ldots 0) \tag{14.20}$$

feltételezett, azaz a $\vec{m}$ az 1-es irányba jön létre[91]. Az eddig bemutatott eredmények ismertek. A következőkben az így nyert állapotot perturbáljuk meg.

14.3.2 A homogén állapot lokális perturbációinak hatása

Most perturbáljuk meg az $\vec{m}$ mágnesezettséget $\vec{\phi}(x)$ fluktuációkkal, melyeket bontsunk fel $\vec{m}$-el párhuzamos és $\vec{m}$-re merőleges komponensekre a következőképpen:

$$\frac{\vec{M}(x)}{m} \;=\; \vec{n} + \phi_1(x)\vec{n} + \vec{\phi}_\perp(x) \; ; \quad \vec{\phi}_\perp = (0, \phi_{\perp_2}, \phi_{\perp_3}, \ldots \phi_{\perp_n}) \; . \tag{14.21}$$

[91] A $\vec{m}$ tetszöleges írányba beállhat. Mindemellett azonban a koordinátarendszert úgy választjuk meg, hogy $\vec{m}$ az 1. tengely irányába essék.

Megfigyelhető, hogy $\phi_1(x)$ az $\vec{m}$ irányával párhuzamos longitudinális fluktuáció, míg $\vec{\phi}_\perp(x)$ az $\vec{m}$ irányára merőleges transzverzális fluktuációkat jelenti. Tehát

$$\delta M_{\|} = m\phi_1 \ , \tag{14.22}$$

továbbá

$$\delta \vec{M}_\perp = m\vec{\phi}_\perp \ . \tag{14.23}$$

Most a (??) kifejezéseivel visszatérünk a (??) összefüggésbe. Ekkor felhasználva, hogy

$$\begin{aligned} \vec{M}^{\,2}(x) &= m^2[(1+\phi_1(x))^2 + \phi_\perp^2(x)] \\ &= m^2(1 + 2\phi_1(x) + \phi_1^2(x) + \phi_\perp^2(x)) \ , \end{aligned} \tag{14.24}$$

és ennek alapján, egész a négyzetes tagokig menő pontossággal:

$$\vec{M}^{\,4}(x) \ = \ m^4(1 + 4\phi_1(x) + 2\phi_\perp^2 + 2\phi_1^2(x) + 4\phi_1^2(x) + \mathcal{O}(\phi^3)) \tag{14.25}$$

kapható. A továbbiakban térjünk vissza a (??) egyenlőséghez, melyet írjunk a következő formába:

$$\Phi = \frac{1}{V}\int d^dx[(aM^2(x) + bM^4(x) + \frac{1}{2}(\nabla\vec{M})^2) + \phi_0(x)] \ . \tag{14.26}$$

Itt, az egyszerűség kedvéért a $g = 1/2$ értéket választottuk. Mindez nem jelenti a probléma leegyszerűsítését, mert kezdettől fogva $2g$-vel osztva (??)-et, a normált termodinamikai potenciál ugyanazon fizikát fogja tükrözni.

Tanulmányozzuk most $aM^2 + bM^4$ kifejezését.

$$\begin{aligned} aM^2 + bM^4 &= am^2(1 + 2\phi_1 + \phi_1^2 + \phi_\perp^2) + bm^4(1 + 4\phi_1 + 6\phi_1^2 + 2\phi_\perp^2 + \mathcal{O}(\phi^3)) \\ &= m^2(a + bm^2) + 2\phi_1 m^2(a + 2bm^2) + m^2\phi_1^2(a + 6bm^2) + \\ &\quad + m^2\phi_\perp^2(a + 2bm^2) + \mathcal{O}(\phi^3) \end{aligned} \tag{14.27}$$

Tudjuk viszont, hogy (??) értelmében $2bm^2 = -a$, tehát

$$aM^2 + bM^4 = -\frac{a}{2b}\cdot\frac{a}{2} + m^2\phi_1^2(a - 3a) = -\frac{a^2}{4b} - 2am^2\phi_1^2 \tag{14.28}$$

A továbbiakban Φ elemzéséhez, a $(\nabla\vec{M})^2$ kiszámítása szükséges. A longitudinális ϕ gradiense mint vektor szintén longitudinális marad, a transzverzális ϕ gradiense, mint vektor szintén transzverzális marad. Ennek következtében a négyzetes tag $(\nabla\vec{M})^2$-ben nem keveri ϕ_1 és $\phi_\perp$ tagokat, tehát:

$$(\nabla\vec{M})^2 = m^2((\nabla\phi_1)^2 + (\nabla\phi_\perp)^2) \tag{14.29}$$

Mindezek után, a nem mérvadó konstans tagokat (??)-ből leválasztva, a ϕ lokális fluktuációk által előidézett termodinamikai potenciál változás értéke:

$$\Delta\Phi = \frac{m^2}{2}\frac{1}{V}\int d^d r \left[(\nabla\phi_1)^2 + (\nabla\phi_\perp)^2 + (4|a|\phi_1^2)\right] + \mathcal{O}(\phi^3)\ . \tag{14.30}$$

A gondolatmenet folytatása érdekében, a következőkben ϕ_1 és $\phi_\perp$ Fourier transzformáltjaira térünk rá. Így:

$$\phi_1(r) = \sum_k e^{ikr}\phi_{1k}\ , \tag{14.31}$$

és

$$\phi_{\perp_\alpha} = \sum_k e^{ikr}\phi_{\perp_\alpha k} \tag{14.32}$$

Ezen összefüggések[92] ismeretében, a (??) integrandusának járulékai kifejezhetőek:

$$\begin{aligned} (\nabla\phi_1)^2 &= \sum_{kk'}(i)^2 kk'\phi_{1k}\phi_{1k'}e^{ir(k+k')} \\ (\nabla\phi_\perp)^2 &= \sum_{kk'\alpha}(i)^2 kk'\phi_{\perp_\alpha k}\phi_{\perp_\alpha k'}e^{ir(k+k')} \\ \phi_1^2 &= \sum_{kk'}\phi_{1k}\phi_{1k'}e^{ir(k+k')} \end{aligned} \tag{14.33}$$

A kapott kifejezések egy r szerinti integrál alatt szerepelnek. Ezen integrál elvégzése, az

$$\frac{1}{V}\int d^d r e^{ir(k+k')} = \delta_{k,-k'} \tag{14.34}$$

eredményhez vezet. Ennek következtében a dupla k összeg egyetlen k szerinti összegezésé alakul, miközben minden járulékba a $k' = -k$ helyettesítés kerül bele. Tovvábbá $\phi(r)$ valós lévén, $\phi_{-k} = \phi_k^*$, tehát[93]

$$\Delta\Phi = \frac{m^2}{2}\sum_k (k^2|\phi_{1k}|^2 + k^2|\phi_{\perp k}|^2 + 4|a||\phi_{1k}|^2) \tag{14.35}$$

A (??) alapján azonban

$$\delta M_{||k} = m\phi_{1k}\ ; \quad \delta M_{\perp k} = m\phi_{\perp k}\ . \tag{14.36}$$

A továbbiakban bevezetjük a következő jelöléseket:

$$A^{\perp}_{kk} = k^2\ ; \quad A^{||}_{kk} = k^2 + 4|a|\ ; \quad A^{\perp,||}_{k,k'} = \delta_{k,k'}A^{\perp,||}_{k,k}\ . \tag{14.37}$$

[92] Az α index az $\vec{M}$ vektorra lehetséges merőleges irányokat jelöli

[93] A merőleges komponensre az α szerinti összeget elvégezettnek tekíntjük

A kapott $\delta\Phi$ kifejezés így sűrített formában felírható egy i index bevezetésével, mely $i = \|, \perp$ értékeket vehet fel. Ekkor, a duplán megjelenő k és i-re az összegezési konvenciót használva, a következő egyenlőséget kapjuk

$$\Delta\Phi = \frac{1}{2} A^i_{kk'} \delta M^i_k \delta M^{i*}_{k'} \tag{14.38}$$

Továbbá a

$$y^i_k = \delta M^i_k \tag{14.39}$$

jelölés bevezetésével

$$\Delta\Phi = \frac{1}{2} A^i_{kk'} y i_k y^{i*}_{k'} \tag{14.40}$$

A továbbiakban, a kapott összefüggést a korrelációs függvények jellemzésére szeretnénk felhasználni.

14.4 A korrelációs függvények jellemzése

A fluktuációk és korrelációk natulmányozásánál azonban láttuk, hogy amennyiben $\Delta\phi$ a (**??**) szerinti összefüggésben adható meg, akkor

$$\langle y^i_k y^{i*}_k \rangle \sim \frac{1}{A^i_{kk}} \tag{14.41}$$

Mindez tehát azt jelenti, hogy megkaptuk a korrelációs függvények kifejezését. Definiáljuk a longítudinális és transzverszális lokális mágneses momentum fluktuációkat jellemző korrelációs függvényeinket a következő képpen:

$$G_{\|}(k) = \langle \delta M_{\|k} \delta M^*_{\|k} \rangle \tag{14.42}$$

és

$$G_{\perp_\beta}(k) = \langle \delta M_{\perp_\beta k} \delta M^*_{\perp_\beta k} \rangle \,. \tag{14.43}$$

Ekkor a végeredményeink, a következő formában írhatók fel:

$$G_{\|}(k) \sim \frac{1}{k^2 + 4|a|} \,; \tag{14.44}$$

és

$$G_{\perp_\beta}(k) \sim \frac{1}{k^2} \,; \tag{14.45}$$

Ténylegesen megfigyelhető, hogy $G_\perp(k)$-nak pólusa van $k \to 0$ határesetben. Ezen pólus megfelel a Goldstone-módusoknak. A β vektorkomponens az eredeti rendparaméter vektorterének a $(2, 3, 4 \ldots n)$ értékeit veheti fel, tehát $n - 1$ ilyen módus létezik.

Az előző tanulmányainkból viszont tudjuk, hogy egy $(k^2+\xi^{-2})^{-1}$ típusú kifejezés a direkt térbe visszatranszformálva $\sim e^{-\frac{r}{\xi}}/r$ összefüggést ad, ahol ξ, a kifejezés jellegéből kifolyólag, korrelációs hosszként értelmezhető. Látható ezek szerint, hogy a (**??**)-ben megadott longitudinális korrelációk a direkt térben $T < T_c$ alatt exponenciálisan lecsengenek, tehát a longitudinális fluktuációk mindig véges hatótávolságúak. Így a longitudinális fluktuációk mindig rövid hatótávolságúak maradnak T_c alatt és nem tartozik hozzájuk egy kollektív gerjesztési spektrum[94].

Ezzel ellentétben viszont a transzverzális korrelációs függvény nevezőjében nincs ξ^{-2} tag. Ebből kifolyólag, ezen korrelációs függvény csupán hatványfüggvényszerű lecsengést mutat, melynek korrelációs hossza (az $\exp(-r/\xi)$ hiánya miatt) végtelen nagy. Ezen végtelen nagy korrelációs hossz idézi elő a kollektív viselkedést, a kollektív gerjesztési spektrum megjelenését. Megjegyzendő továbbá, hogy a Goldstone-módusok mindig kis energiájú gerjesztési ágakat jelölnek melyek tisztán a folytonos szimmetriasérülés következményei. Ezen gerjesztési módusok az $\epsilon(k) \to 0$, ha $k \to 0$ jellemzővel rendelkeznek és ezen módusokba ezáltal a rendszer az alapállapotból gap-nélkül gerjeszthető[95].

Megjegyzendő továbbá, hogy ezen gerjesztési spektrum a fluktuációs eredete miatt mindig bozon jellegű kvázirészecskéket definiál. Ki kell azt is hangsúlyozni, hogy az itteni levezetés (a Φ–re vonatkozó Landau-féle alakból kiindulva, és csupán másodrendű tagokig menő sorfejtéseket figyelembe véve), a perturbációszámítás második rendjéig helytálló. Igazolható viszont, hogy a (**??**)-ban adott transzverzális korrelációsfüggvény formája a perturbációszámítás végtelen rendjéig helytálló[96]. Ugyanazon rendben a longitudinális (pár)-korrelációs függvény, a tanulmányozott körülmények között, valós k pólussal nem rendelkezik T_c alatt. Látható tehát, hogy a fizikai lényeg szemléltetése céljából az alkalmazott gondolatmenet elégséges volt.

Kvantumtérelméleti vetületeket vizsgálva, megemlítendő, hogy a ϕ szabad bozon tér $G_0(k)$ propagátora $\sim \frac{1}{k^2+m^2}$ formába írható fel, ahol m a tömeg. Így, látható tehát, hogy a részecske tömeg, a statisztikus fizikai vetületben, a korrelációs hossz inverzének felel meg. Zéró tömeg ezen szempontból végtelen korrelácios hosszal ekvivalens (matematikai értelemben). Így a részecskefizikában a Goldstone-módusokat tömeg nélküli bozon terekként emlegetik[97].

Megjegyzendő továbbá, hogy a Goldstone módusok száma csak az $\mathcal{O}(n)$ rotációs szimmetria sérülés esetében $n-1$. Más folytonos szimmetria sérülés esetén a tanulmányozott módusok száma más. Továbbá ezen jelenség minden egyes folytonos szimmetria sérülés esetében fennáll.

[94]Lásd [2]

[95]Mivel a gerjesztési energia tetszölegesen kicsi lehet tiltott energiasáv (,,gap") jelenlétét nem gátolja. Lásd [3]

[96]Lásd [4]

[97]Lásd [5]

14.5 A Goldstone-tétel

A bemutatott jelenséget és fellépésének körülményeit Goldstone tételesen fogalmazta meg, melyet ma Goldstone-tétel néven emlegetnek. A tétel állítása a következő:
Ha egy folytonos szimmetriával rendelkező rendszer folytonos fázisátalakulást szenved úgy, hogy a folytonos szimmetriája spontán sérül, akkor a rendezett fázisban, T_c alatt alacsony energiájú kollektív gerjesztési spektrum keletkezik az alapállapot rendparaméter-térbeli degeneráltsága miatt, melynek ágait Goldstone-módusoknak nevezzük. Ezen gerjesztési spektrum gap-nélküli és mindig az $\epsilon(k) \to 0$, ha $k \to 0$ tulajdonsággal rendelkezik, és nyugalmi tömeg nélküli bozont ír le. A tétel általánosan igaz, ha spontán módon folytonos szimmetriasérülés történik mely következtében fellépő rendezett fázis nem-skalár rendparaméterrel írható le[98]. A jelenség a T_c alatt beállt rendparaméterre ortogonális gerjesztések végtelen korrelációs hosszának köszönhető[99]

A Goldstone tétel ma már hétköznapi megnyilvánulásai például: a folytonos transzlációs szimmetria elvesztése során kialakult rácsban (mind rendezett fázisban) fellépő fononok (az akusztikus ág), vagy lokalizált mágneses momentummal rendelkező rendszerek esetében a mágneses rendezett fázisban fellépő spin-hullámok (ezen fogalom teljesen különbözik az itineráns rendszerben fellépő spin-sűrűség-hullámoktól). Vetülete van továbbá a szupravezető fázis leírásában (ott gauge-szimmetria sérülés lép fel), ahol a véges mágneses behatolási hossz fellépése köthető hozzá.

14.6 A folytonos szimmetriasértés további következményei

A következőkben a folytonos szimmetriával rendelkező rendszerekre vonatkozó néhány tulajdonságot említünk még meg.

14.6.1 A rendparaméter-merevség

A folytonos szimmetriasértés másik fontos következménye (szintén spontán szimmetriasértésről lévén szó) a rendezett fázis kialakulásával nyert merevség. Mindez a (**??**)-ben megjelenő

$$\Delta\Phi = \text{ longitudinális tag } + \frac{1}{2}\int d^d r R(\nabla\phi_\perp(r))^2 \tag{14.46}$$

járuléknak köszönhető, ahol R a ,,rendparaméter–merevség'' néven ismeretes[100]. Igazolható, hogy az R járulék nemcsak hosszútávú térbeli rendezettség esetében

[98] Ellentétes esetben a rendparaméterre ,transzverzális' gerjesztés nem értelmezhető és rendparaméter-térbeli degeneráltség sincs jelen.

[99] Lásd [5].

[100] Az angol szakirodalomban ,,stiffness'' vagy ,,rigidity''.

lép fel (amellyel itt foglalkozunk), hanem más rendeződés esetében is (pl. a KTB átmenetnél). Ha viszont, HTR típusú rendezettség van, a Landau-elmélet keretei között amint az (??)–ből is látható

$$R \sim m^2 \tag{14.47}$$

ahol m a rendparaméter[101].

A (??) összefüggés azt mutatja, hogy a rendparaméternek bármilyen a rendezési irányra merőleges inhomogén térbeli változtatása növelni fogja a rendszer termodinamikai potenciálját, azaz instabilizálja a rendszert. Ebből kifolyólag, egy ilyen változtatásra a rendszer mindig a régi konfigurációt vissza állítani kívánó erőkkel válaszol, melyeket kísérletileg mi merevségként észlelünk. Ezen ,,bemerevedés", $m \neq 0$ zérótól különböző rendparaméter esetén lép fel (hosszútávú térbeli rendezettség esetében) és m-nek (??)-kapcsán említett hatványával arányos . Amint említettük, ezen arányosság alól kivételt képeznek bizonyos $d = 2$ dimenziós rendszerek, melyekben topologikus fázisátalakulás jön létre, mint pl. a Kosterlitz-Thouless-Berezinski fázisátalkulás.

Ezen folyamatban, a longitudinális fluktuációk azért nem relevánsak[102], mert a longitudinális járulék a rendezett és rendezetlen fázisban a fázisátalakulási pont környékén folytonosan változik, és ugyanazon értékű. Ezzel ellentétben, a $(\nabla\phi_\perp^2$-es tag kontribuciója a rendezett fázisban nagymértékben megnő, így kísérletileg könnyen észlelhető.

Mindez alkalmat ad arra, hogy merevségi méréseken keresztül a folytonos fázisátalakulás nagyon pontosan, kísérletileg kimutathatóvá váljon. Megjegyzendő ennek kapcsán, hogy például egy paramágneses fázis mindig képlékeny, míg egy ferromágneses rendszer mindig sokkal merevebb. (Ez esetben, sokszor spin-hullám merevségről beszélnek). Folytonos folyadék-szilárdtest átmenet esetében a fellépő merevség nyilvánvaló. A (??)-ben adott kifejezés rugalmasságtanbeli megfelelője az izotrop szilárdtest szabad energiája:

$$F = \frac{1}{2}\int d^d r \left[2\mu u_{ij}^2(r) + \lambda u_{ii}^2(r)\right] \tag{14.48}$$

ahol $u_{ij}(r)$ a deformációs tenzor, λ és μ pedig a Lamé-koefficiensek. A deformáció során létrejött térfogatváltozást tudvalevőleg mindig az u_{ii} tag határozza meg. Ha ez a tag zéró, a deformáció során nincs térfogatváltzoás, csak alakváltozás. A térfogatváltozással nem járó deformációkat ,,nyírásnak" nevezzük, melyeket a μ torziós modulusz jellemez. A szilárd állapot létezese pont abban nyílvánul meg, hogy $\mu \neq 0$.

14.6.2 A Mermin–Wagner tétel

Szintén a spontán folytonos szimmetriasérüléssel kapcsolatos tétel, amely a rendszer alsó kritikus dimenzióját állítja be. Ha ezen dimenziót d_a-val jelöljük,

[101] Az R pontos viselkedését a kritikus tartományban $t < 0$ esetében $R \sim |t|^{2\beta-\eta\nu}$ adja [6].
[102] Azaz nem dominánsak így elhanyagolhatóak

akkor definíció szerint, amint már ezt említettük, $d > d_a$-ra a rendezett fázis stabil a termikus fluktuációval szemben, azaz $d > d_a$ dimenzióban léphet fel HTR típusú rendezettség. Ezen jelenség vizsgálatában a ,,legveszedelmesebb" módussal szembeni stabilitást, azaz a transzverzális fluktuációkkal szembeni stabilitást kell megvizsgálnunk. Ezt úgy végezzük, hogy a direkt terben elemezzük $G_\perp(r)$ kifejezését. Ekkor:

$$G_\perp(r) = \int_0^\Lambda \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \frac{e^{ikr}}{k^2} \, . \tag{14.49}$$

A kifejezésben bevezetett Λ a rendszer által meghatározott levágási hullámszám. A $G_\perp(r)$, a négyzetes fluktuációk átlagához kapcsolódik egy (feltételezetten) létező rendezett fázis rendezettségi irányára merőlegesen és a benne szereplő integrál alsó határában infravörös divergenciát mutat $d \leq 2$-re. Lokális fluktuáció rendezett fázisban azonban nem divergálhat, így $d \leq 2$-re a tanulmányozott esetben a rendezett fázis nem létezhet. Megjegyzendő, hogy ezen eredmény itt (**??**)-re, azaz négyzetes (Gauss) közelítésre volt levezetve. Mermin és Wagner viszont teljesen általánosan igazolta ezen állítást[103]. Így, a Mermin–Wagner-tétel állítása:
Folytonos szimmetriával rendelkező rendszerek alsó kritikus dimenziója $d_a = 2$.
Így ezen rendszerekben, $d \leq d_a = 2$ dimenziókban HTR rendezettséggel járó fázisátalakulás nem jöhet létre.

14.7 Szakirodalmi jegyzék 14.

[1] J. Cardy, *Scaling and Renormalization in Statistical Physics*, Cambridge Lecture Notes in Physics Vol. 5., eds. P. Goddard, J. Yeomans, Cambridge University Press, 1996, 113 oldal.

[2] N. Goldenfeld, *Lectures on Phase Transitions and the Renormalization Group*, Frontiers in Physics Vol. 85., Addison-Wesley Publishing Co., 1992, 342 oldal.

[3] P. W. Anderson, *Concepts in Solids*, Lectures on the Theory of Solids, Frontiers in Physics Vol. 10., The Benjamin/Cummings Publishing Co., Reading Massachusetts, 1963, 169 és 182 oldal.

[103] Lásd [7]

[4] D. J. Amit, *Field Theory, the Renormalization Group, and Critical Phenomena*, International Series in Pure and Applied Physics, McGraw-Hill Inc., 1978, 94 oldal.

[5] D. J. Amit, *Field Theory, the Renormalization Group, and Critical Phenomena*, International Series in Pure and Applied Physics, McGraw-Hill Inc., 1978, 96 oldal.

[6] N. Goldenfeld, *Lectures on Phase Transitions and the Renormalization Group*, Frontiers in Physics Vol. 85., Addison-Wesley Publishing Co., 1992, 344 oldal.

[7] N. D. Mermin, H. Wagner, Phys. Rev. Lett. 17, 1133, (1966).

15 A renormálási csoport

A renormálási csoport alapgondolatának megértése céljából, az elemzésünket, a Kadanoff konstrukcióhoz kapcsolódó jellemzők rövid áttekintésével kezdjük.

15.1 Bevezetés

Kiindulunk egy kezdeti rácsból, és Kadanoff elképzelése nyomán, ebből ,,blokkok" kialakításával egy új rácsot építünk fel. A blokkokat új szerkezeti egységként felfogva a csomópontok helyett, gyakorlatilag egy új rácsot kapunk eredményül, melyben a blokkok játsszák a csomópontok szerepét.

A kezdeti rácsban (melynek rácsállandóját egységnyinek tekintjük, $a = 1$), L^d számú csomópontunk van, ahol L a d dimenziójú test csomópontjainak száma egy adott dimenzióban vett kiterjedése mentén. Most a kialakított blokkok egy dimenzióban vett kiterjedése legyen S, így egy blokkban van S^d számú csomópont. Ennek eredményeként az eredeti L^d csomópontból a blokkok szintjén L^d/S^d számú csomópontot kapunk, a rács formáját megtartva. Ezt a lépést Kadanoff-konstrukciónak, vagy ,,blokktranszformációnak" nevezzük.

Ezen átalakítás során mind a Hamilton operátorunk H, mind a termodinamikai potenciálunk Φ megváltozik:

$$\begin{aligned} H &\to H' , \qquad & H' &= K_S H , \\ \Phi &\to \Phi' , \qquad & \Phi' &= P_S \Phi . \end{aligned} \tag{15.1}$$

A blokk szintet jellemző H' és Φ' tagokat egy K_S transzformáció hatásaként létrejött mennyiségekként foghatjuk fel ($P_S = P_S(K_S)$), melyet Kadanoff-transzformációnak nevezünk[104]. Megfigyelhető, hogy $K_1 = 1$, továbbá

$$K_S K_{S'} = K_{S''} , \tag{15.2}$$

tehát az $S'' = SS'$–el jellemzett $K_{S''}$ a Kadanoff-transzformáció-halmaz egy új elemének felel meg. Ha az inverz transzformációt nem definiáljuk (erre általában nincs szükség), akkor a $\{K_S\}$ transzformációk együttesen félcsoportot alkotnak. A $\{K_S\}$ neve: renormálási csoport (RG). Az elnevezés történelmi jellegű, és ma is használatos, mindannak ellenére, hogy a felépített transzformáció halmaz csoportelméleti szempontból félcsoportot alkot.

Teljesen általánosan a renormálási csoport elemeinek alkalmazása során H megváltozhat[105]. Mindennek ellenére a kritikus hőmérsékleten ezen transzformáció során H invariáns marad, azaz a a fázisátalakulást $\{K_S\}$ fixpontja jellemzi[106].

[104] A Hamilton-operátorra vonatkozólag a blokktranszformációt mindig úgy kell végeznünk, hogy a dinamikus változók milyensége se változzon. Azaz például, egyre normált spinváltozóból kiindulva szintén egyre normált spinváltozót kell kialakítanunk, stb.

[105] Itt a változást nemcsak rögzitett formájú Hamilton-operátor tag elötti csatolási állandó változásként kell érteni, hanem teljesen új típusú Hamilton-operátor tag megjelenéseként is.

[106] a továbbiakban bemutatott módon

Már láttuk, hogy ezen feltételezés alapján a termodinamikai potenciálok általánosított homogenitása áll fenn és így, a ,,statikus skála hipotézis" megalapozható. Ezen tulajdonság alapján aztán a skálatörvények (a kritikus exponensek közötti összefüggések) levezethetőek. Mindennek a fizikai alapja a T_c közvetlen közelében fennálló ,,skálainvariancia". Ennek lényege az, hogy a kritikus tartományban mindegy milyen skálán nézzük a rendszert, ugyanazt a fizikát kell tapasztalnunk, miközben a rendszer karakterisztikus hossz nélkül viselkedik, azaz minden hossz skála egyenlően fontossá válik.

15.2 A Kadanoff-féle blokktranszformáció

A tanulmányozott tetszőleges d dimenziós rendszer Hamilton-operátorát a következő (Ginzburg–Landau-funkcionálnak nevezett) alakban fogjuk reprezentálni[107]:

$$\beta H[\sigma] \;=\; \int d^dx[a_0 + a_2\sigma^2 + a_4\sigma^4 + \ldots + \frac{c}{2}(\nabla\sigma)^2 - h\sigma] \; ; \qquad (15.3)$$

vagy egyszerűen, külső tér jelenléte nékül:

$$\beta H[\sigma] \;=\; \int d^dx[\frac{c}{2}(\nabla\sigma)^2 + U(\sigma)] \; , \qquad (15.4)$$

ahol

$$U(\sigma) = \sum_{m=1}^{\infty} U_m\sigma^m \; . \qquad (15.5)$$

Ezen kifejezésben, általában m páros szám, de ez nem szükségszerű, és kivételes esetek tárgyalása is lehetséges. Amint a későbbiekben világossá válik, a H ezen formájának használata azon alapszik, hogy ez a forma a lehető legegyszerűbb tükrözési módja egy univerzalitási osztály lényegi jellemzőinek, melyek a d dimenzió d, a rendparaméter vektorkomponenseinek n száma[108], és a kölcsönhatások milyensége[109]. Ezen kifejezésekben $\sigma \equiv \sigma(x)$ a rendszerre jellemző lokális vektormennyiség. A következőkben, konkretizálás céljából, a σ–t ,,spin"–változónak fogjuk nevezni, de természetesen mindez nem szükségszerű. Továbbá:

$$\sigma^2 = \sigma(x)\cdot\sigma(x) = \sum_{i=1}^{n}(\sigma_i(x))^2 \; , \qquad (15.6)$$

ahol i a ,,spin"–komponens indexe, és n a spinkomponensek száma. Továbbmenőleg

$$\sigma^4 = (\sigma^2)^2 \; , \qquad (15.7)$$

[107] Matematikai szempontból itt a $Z = \mathrm{Tr}\exp -\beta H$ állapotösszegben szereplő βH mennyiségről van szó. A használt kifejezést pedagogiai okok indokolják, lásd [1]

[108] Teljesen általánosan, HTR esetében, a rendparamétert megadó független változók száma. Topologikus fázisátalakulásoknál ahol rendparaméter nem értelmezhető a jellemző dinamikus változó független komponenseinek száma veszi át ezt a szerepet.

[109] Itt a hosszú vagy rövid hatótávolság a fő jellemző.

és

$$(\nabla\sigma)^2 = \sum_{\alpha=1}^{d}\sum_{i=1}^{n}\left(\frac{\partial\sigma_i}{\partial x_\alpha}\right)^2 . \tag{15.8}$$

A $\beta H[\sigma]$-ban megjelenő a_i, c, u_m együtthatók a $\beta = 1/k_B T$–vel való beszorzás miatt mind a hőmérséklet függvényei. Hangsúlyozandó, hogy a (??) forma használata nem jelenti azt, hogy a bemutatásra kerülő elmélet Landau-elmélet jellegű, ugyanis amint majd meglátjuk, a modell tárgyalása a Landau-féle fogalomrendszertől és feltételezésektől teljesen különböző módon történik majd.

A (??) összefüggés formájával kapcsolatban megfigyelhető, hogy $\nabla\sigma = 0$ esetében $H[\sigma]$ egymástól teljesen független spin változókat ír le, melyek egymással nem hatnak kölcsön. A különböző m hatványok, a független spinek különböző lokális energia járulékait modellezik. A spinek közti kölcsönhatást írja le (a diszkrét megközelítéssel élve), a

$$(\nabla\sigma)^2 \sim (\sigma_x - \sigma_{x+r})^2 \tag{15.9}$$

jellegű tag, mely $-\sigma_x\sigma_{x+r}$ Heisenberg-típusú járulékokat reprodukál. Gyakorlatilag ebben jut kifejezésre a tanulmányozás során a figyelembe vett kölcsönhatások rövid hatótávolsága. Ezen túlmenőleg $\beta H[\sigma]$ expliciten tartalmazza a d dimenziót és az n vektorkomponens számot.

A gondolatmenet folytatása érdekében tanulmányoznunk kell a K_S transzformáció konkrét megvalósításának módját. Amint említettük, ezen transzformációk összességét nevezzük renormálási csoport (RG) transzformációknak. A Hamilton-operátor H a Z állapotösszegen keresztül a Φ termodinamikai potenciált definiálja. Mindez azt jelenti, hogy a Φ–t közvetlenül meghatározó mennyiség a Z állapotösszeg, a Z-ben pedig a mikroállapotok valószínűségi eloszlását $e^{-\beta H[\sigma]}$ adja meg.

Most tételezzük fel, hogy van egy valószínűségi eloszlás függvényünk (legyen P), amely a $\{g_i\}$ független valószínűségi változóktól függ, azaz $P = P(g_1, g_2, \dots g_n)$. Most, ha definiálunk egy $g = f(g_1, \dots g_n)$ új változót, és ki akarjuk fejezni a $P(g, g_{l+1}, g_{l+2}, \dots g_n)$ valószínűségi eloszlás függvényt, akkor

$$P(g; g_{l+1}, \dots g_n) = \int dg_1 \dots \int dg_l P(g_1, g_2, \dots g_n)\delta(g - f(g_1, \dots g_l)) \tag{15.10}$$

összefüggést kell használnunk. Ennek alapján, ha σ_{ix} az x–pontban lévő $\sigma(x)$ spin i-edik komponense, és az X indexű „blokk" spin i-edik komponense:

$$\sigma_{iX} = \frac{1}{S^d}\sum_{x\in X}\sigma_{ix} , \tag{15.11}$$

akkor

$$e^{-\beta H'[\sigma_X]} = \int e^{-\beta H[\sigma_x]}\left[\prod_{i,X}\delta\left(\sigma_{iX} - \frac{1}{S^d}\sum_{x\in X}\sigma_{ix}\right)\right](\prod_{j,x} d\sigma_{jx}) \tag{15.12}$$

A megadott képletből megfigyelhető, hogy a blokkokra való transzformálás során a blokkon belüli állapotokat összegezzük ki, azaz olyan σ_{jx} értékekre integrálunk melyek a $\sigma_{i,X}$ blokkváltozóval kompatibilisek[110] és amelyek a rendszer valóságos mikróállapotai[111].

Teljesen általánosan H' formája H-hoz képest (??) transzformáció során megváltozhat. Fázisátalakulást viszont csak akkor kapunk a rendszerben ha bizonyos körülmények között[112] H' és H a (??) alkalmazása nyomán ugyanolyan formájú marad. Fizikailag, a képletben szereplő integrálás elvégzése után, a Hamilton operátorban csak σ_X szerinti függés marad, tehát H' az S távolság alatti jelenségekre már nem érzékeny. Tehát ha az eredeti H térbeli felbontása mondjuk egységnyi, akkor H' térbeli felbontása S lesz (azaz a felbontóképesség[113] csökken, mert most már H'–el az S alatti jelenségek „nem érzékelhetők"). Ilyen formában, K_S hatása után a felbontóképességünk gyakorlatilag S–el csökken. Ezzel párhuzamosan, ha H formája a H'–ben megmarad a blokk szinten, csupán a csatolási állandók értéke változhat meg. Továbbmenőleg, ha H'-ben H-hoz képest új tagok jelennek meg, ezt úgy értelmezhetjük, hogy (??) nyomán az új tagok csatolási állandója zéróról egy zérótól különböző értékre változik meg. Látjuk tehát, hogy K_S hatása során lényegében a Hamilton-operátort jellemző csatolási állandók „renormálódnak". Ebből ered a „renormálási csoport" elnevezés, ami tehát matematikai szempontból, a K_S blokk-transzformációk halmazán értelmezett félcsoport.

A számítási könnyebbség miatt sok esetben a k Fourier-transzformált térben dolgozunk. Ezért tanulmányoznunk kell, hogyan valósítjuk meg a K_S transzformációt a k–térben. A $\sigma(x)$ változónkat Fourier transzformálva:

$$\sigma(x) = \frac{1}{\sqrt{L^d}} \sum_{k<\Lambda} \sigma_k e^{ikx} \tag{15.13}$$

kifejezést kapjuk, ahol

$$\Lambda \sim \frac{1}{a} \tag{15.14}$$

a „levágási" hullámszám értéke.

Kis távolságok „érzékelésének" elveszítése a Fourier-transzformált térben a nagy k értékek érzékelésének elveszítését jelenti. Mivel a K_S transzformáció egyben

[110] Azaz (??) fennáll.

[111] A blokk Hamilton-operátorra térve, a mikróállapotok összegzésekor csak a $\sigma_{i,X}$ lehetséges állapotaira összegezhetünk az állapotösszeg kiszámításakor. A blokkon belüli járulékok azonban kiösszegzett formában megmaradnak. Ezáltal a kiinduló Hamilton-operátor és a blokkváltozós Hamilton-operátor esetében számított állapotösszegekbe pontosan ugyanazon járulékok kerülnek bele. Ennek az a következménye, hogy ha a blokk-változós H-ban a blokk transzformáció során megjelenő minden tagot megtartunk (belelértve a konstansokat is, lásd 16.5 paragrafust) a renormálási csoport transzformáció az állapotösszegen nem fog változtatni.

[112] lásd a későbbiekben

[113] azaz „rezolúció"

S felbontóképesség csökkentést jelent, a levágási hullámszám értéke $\Lambda \to \Lambda/S$–sé alakul H' szintjén. Így (**??**)–ből, a k térben:

$$e^{-\beta H'} = \int e^{-\beta H} \prod_i \prod_{\Lambda > k > \frac{\Lambda}{S}} d\sigma_{ik} \tag{15.15}$$

összefüggés adódik. Tehát, mivel H'–ben a nagy k értékek „látását" elveszítjük, H' csak Λ/S–nél kisebb k értékektől függ majd, és azokról képes információkat szolgáltatni.

Sok esetben a nagy k–s tagok kiintegrálását úgy oldjuk meg, hogy a $\sigma(x)$ változót két tagra bontjuk fel. Ekkor:

$$\sigma_i = \sigma'_i + \not\sigma_i \ , \tag{15.16}$$

ahol

$$\sigma'_i = \frac{1}{L^{d/2}} \sum_{\frac{\Lambda}{S} > k > 0} \sigma_{ik} e^{ikx} \ , \tag{15.17}$$

és

$$\not\sigma_i = \frac{1}{L^{d/2}} \sum_{\Lambda > k > \frac{\Lambda}{S}} \sigma_{ik} e^{ikx} \ . \tag{15.18}$$

Ez esetben a Kadanoff-konstrukció konkrét megvalósítási módja:

$$e^{-\beta H'} = \int e^{-\beta H} \prod_j \prod_i d \not\sigma_i(r_j) \tag{15.19}$$

Ezen utóbbi módszert alkalmazta Wilson is a rekurziós képletének levezetése során.

15.3 A Wilson-féle képlet

A renormálási csoport első, felesleges modell–konkrétumokat nem tartalmazó, analitikus megvalósítása a Wilson-féle képleteken keresztül történt meg. Továbbmenőleg, a Kadanoff-konstrukció első konkrét megvalósítása ezen képletekben látott napvilágot. Ebből kifolyólag, a következőkben a Wilson-féle képletek levezetésének részletes bemutatására kerül sor.

15.3.1 A Hamilton-operátor blokkfelbontása

Az előbbi paragrafusban bemutatottak alapján legyen tehát a kiindulópontként választott $\beta H[\sigma]$ értékünk

$$\beta H = \int d^d x \left[\frac{c}{2} (\nabla \sigma(x))^2 + U(\sigma(x)) \right] \ . \tag{15.20}$$

Ezen képletben x a d dimenziós térkoordináta szerepét tölti be.

A megadott képletet tanulmányozva, az első megfigyelés a gradienses tagra vonatkozik:

$$\int d^d x (\nabla\sigma)^2 = \int d^d x [(\nabla\sigma')^2 + (\nabla \not\sigma)^2] \, . \tag{15.21}$$

Ezen összefüggés annak a ténynek a következménye, miszerint

$$\int d^d x (\nabla\sigma')(\nabla \not\sigma) \sim \int e^{ix(k_1-k_2)} d^d x \ , \tag{15.22}$$

ahol k_1 a σ'–ből, míg k_2 pedig $\not\sigma$–ból származik a Fourier-transzformálás nyomán. Így

$$\int e^{ix(k_1-k_2)} d^d x \sim \delta_{k_1 k_2} = 0 \, , \tag{15.23}$$

ugyanis k_1 nem lehet k_2–vel egyenlő, mert diszjunkt tartományokból származnak. Itt és a továbbiakban a két k sokaság érintkezési tartományát zéró mértékű halmazként kezeljük[114].

Mindezek után:

$$\beta H = \int d^d x \frac{c}{2} (\nabla\sigma'(x))^2 + \int d^d x \left[\frac{c}{2} (\nabla \not\sigma(x))^2 + U(\sigma' + \not\sigma) \right] \, . \tag{15.24}$$

A kifejezés további kiértékelése céljából a $\not\sigma(x)$ tagokat valamilyen bázis szerint sorba kell fejteni. Amint láttuk, $\not\sigma(x)$ a $\sigma(x)$–nek azon járulékát jelenti, mely S–nél kisebb skálákon végbemenő folyamatokra érzékeny. Ezen S-nél kisebb skálákat olyan függvények jellemeznék, melyek csupán a ,,blokkok" belsejében vannak értelmezve. Legyen X a S oldalú blokkok középpontja. Így

$$\not\sigma(x) = \sum_X \not\sigma_X W_X(x) \, . \tag{15.25}$$

A $W_X(x)$ függvények a blokkok szintjén létrejött rács Wannier-függvényei, amelyeket erősen lokalizáltaknak tekintünk. Továbbá feltételezzük, hogy W_X–nek az értéke az X blokkon kívül elhanyagolható, azaz:

$$\int d^d x W_X(x) W_{X'}(x) = \delta_{XX'} \ , \tag{15.26}$$

továbbá

$$W_X(x) \mid_{x \in X' \neq X} = 0 \, . \tag{15.27}$$

Ekkor viszont

$$W_X(x) W_{X'}(x) = \delta_{XX'} \tag{15.28}$$

[114] A K_S-et megvalósitó integrál szintjén és termodinamikai határesetben vett zéró mértékű halmazról van szó

következik. A bemutatott Wannier-függvényekre vonatkozó összefüggések közül az integrállal kifejezett ortogonalitási képlet szigorúan igaz, míg a második kifejezés (a blokkra centrált Wannier-függvény blokkon kívüli elhanyagolása) csupán közelítés.

Most vizsgáljuk meg, hogy a felírt összefüggések milyen következménnyel járnak. Figyelembe vesszük ugyanakkor, hogy:

$$\int d^d x = \sum_X \int_X d^d x \ , \tag{15.29}$$

ahol $\int_X d^d x$ az x változónak az X blokkra vett integrálását jelenti.

A Hamilton-operátor kifejezésére visszatérve, a bemutatott összefüggések nyomán látható, hogy két különböző blokkhoz tartozó W_X szorzata automatikusan zéró, továbbá a $\sigma \cdot \not\sigma$ szorzat $\int d^d x$ integrál alatt mindig zérót ad eredményül, a két komponens k térben vett ortogonálisa miatt. Így βH–nak a második integrálban szereplő és $\not\sigma$–t tartalmazó járulékai különálló X blokkokban értelmezett tagokra esnek szét, azaz:

$$\begin{aligned} \beta H \ &= \ \int d^d x \frac{c}{2} (\nabla \sigma'(x))^2 + \sum_X \left[\frac{c}{2} \not\sigma_X^2 \int_X d^d x (\nabla W_X(x))^2 \right. \\ &\quad \left. + \int_X d^d x U(W_X(x) \not\sigma_X + \sigma'(x)) \right] \end{aligned} \tag{15.30}$$

A továbbiakban az lesz a célunk, hogy a leírás matematikai koherenciájának megtartása mellett a lehető legegyszerűbb módon fejezzük ki a W_X-et és $\sigma'(x)$-et tartalmazó tagokat. Először is $\sigma'(x)$ a $\sigma(x)$–nek az a része, amely az S hossz alatti változásokat nem érzékeli. Így nem durva közelítés a $\sigma'(x) \equiv \sigma'_X =$ konstans feltételezés egy blokkon belül. Mindezek után $\not\sigma(x)\sigma'(x)$–nek az $\int d^d x$ integrálja a k-térbeli különböző hovatartozás miatt zéró kell legyen. Továbbá, mivel $\int d^d x = \sum_X \int_X d^d x$, a következő egyenlőségeket kapjuk:

$$\int \sigma'(x) \not\sigma(x) d^d x \ = \ 0 \ , \tag{15.31}$$

azaz

$$\sum_X \int_X d^d x \sigma'_X \not\sigma_X W_X(x) = \sum_X \sigma'_X \not\sigma_X \int_X d^d x W_X(x) = 0 \ . \tag{15.32}$$

Ezen összefüggéseket a feltételezésekből vezettük le, tehát a belső ellentmondásmentesség érdekében fenn kell álljanak. A $W_X(x)$–re fellépő követelmények sűrített formában:

$$\int_X d^d x W_X(x) = 0 \ , \tag{15.33}$$

és

$$\int_X d^d x W_X^2(x) = 1 \ , \tag{15.34}$$

ahol a második összefüggés a Wannier-függvények ortonormáltságának következménye. Számunkra a levezetett W_X–re vonatkozó összefüggések azért fontosak mert a tanulmányozott konkrét esetben a Wannier-függvények egzakt formáját nem ismerjük, így közelítenünk kell. A közelítés megvalósításának fő motivációja pedig, az adott körülmények között, a belső matematikai koherencia kell legyen (és a tárgyalás általánossága miatt, nem is lehet más).

A két W_X–re vonatkozó reláció közelítés szintjén a lehető legkönnyebben úgy valósítható meg, ha az X blokk felében

$$W_X(x) = +\frac{1}{\sqrt{\Omega}}\ , \tag{15.35}$$

míg a másik felében

$$W_X(x) = -\frac{1}{\sqrt{\Omega}}\ , \tag{15.36}$$

ahol Ω a blokk térfogata. Így

$$\int_X d^d x U(W_X(x)\ \not\sigma_X + \sigma'(x)) = \frac{\Omega}{2}\, U\left(\frac{\not\sigma_X}{\sqrt{\Omega}} + \sigma'_X\right) + \frac{\Omega}{2}\, U\left(-\frac{\not\sigma_X}{\sqrt{\Omega}} + \sigma'_X\right) . \tag{15.37}$$

Mindezek után a

$$\bar{q}^2 = \int d^d x (\nabla W_X(x))^2 \tag{15.38}$$

jelölés bevezetésével, βH értéke a következőképpen alakul:

$$\begin{aligned} \beta H \ &= \ \int d^d x \frac{c}{2} (\nabla \sigma'(x))^2 + \sum_X \left[\frac{c}{2} \bar{q}^2\ \not\sigma_X^2 \right. \\ &\left. + \frac{\Omega}{2} \left\{ U\left(\frac{\not\sigma_X}{\sqrt{\Omega}} + \sigma'_X\right) + U\left(-\frac{\not\sigma_X}{\sqrt{\Omega}} + \sigma'_X\right) \right\} \right] . \end{aligned} \tag{15.39}$$

Látható tehát, hogy a levezetett képletben sikerült βH-t blokk–felbontásban megadni. A következő lépés a konkrét renormálási lépés végrehajtása lesz.

15.3.2 A renormálási lépés konkrét végrehajtása

A célunk a következőkben a $H \to H'$ lépés konkrét végrehajtása lesz.

Ne feledjük el, hogy a renormálásra vonatkozó alapképletünk, mely $H' = K_S H$ konkrét operációt megvalósítja, a következő:

$$e^{-\beta H'} = \int e^{-\beta H} \prod d\ \not\sigma\ . \tag{15.40}$$

A tanulmányozott konkrét esetben:

$$\int \prod d\ \not\sigma = \int \prod_X d\ \not\sigma_X\ . \tag{15.41}$$

Így eredményünk a következőképpen alakul:

$$e^{-\beta H'} = \left[\exp\left(-\int d^d x \frac{c}{2}(\nabla\sigma'(x))^2\right)\right]\prod_X \cdot$$
$$\left[\int d\ \not\sigma_X \exp\left(-\frac{c}{2}\bar{q}^2\ \not\sigma_X^2 - \frac{\Omega}{2}\left\{U\left(\frac{\not\sigma_X}{\sqrt{\Omega}} + \sigma'_X\right) + U\left(-\frac{\not\sigma_X}{\sqrt{\Omega}} + \sigma'_X\right)\right\}\right)\right] .$$

Most jelölje az X blokk integrálási változóját

$$y = \frac{\not\sigma_X}{\sqrt{\Omega}} . \tag{15.42}$$

Így a szögletes zárójel kifejezése

$$I(\sigma'_X) = \int d\ \not\sigma_X \exp\left[-\frac{c}{2}\bar{q}^2\ \not\sigma_X^2 - \frac{\Omega}{2}\left\{U\left(\frac{\not\sigma_X}{\sqrt{\Omega}} + \sigma'_X\right) + U\left(-\frac{\not\sigma_X}{\sqrt{\Omega}} + \sigma'_X\right)\right\}\right]$$

a következőképpen alakul:

$$I(\sigma'_X) = \sqrt{\Omega}\int dy \exp\left(-\frac{c}{2}\bar{q}^2\Omega y^2 - \frac{\Omega}{2}\{U(y+\sigma'_X) + U(-y+\sigma'_X)\}\right) . \tag{15.43}$$

A továbbiakban írjuk fel $I(\sigma'_X)$–et a következő formában:

$$I(\sigma'_X) = \exp\left(-\Omega\bar{U}'(\sigma'_X) - \Omega A\right) . \tag{15.44}$$

Így a blokkok szerinti szorzat értéke

$$\prod_X I(\sigma'_X) = \exp\left[-\Omega\sum_X(\bar{U}'(\sigma'_X)) - \overbrace{\Omega A\sum_X 1}^{AL^d}\right] . \tag{15.45}$$

Továbbá

$$\Omega\sum_X \to \int d^d x \tag{15.46}$$

alkalmazható, mely az egész térre való összegzést jelenti. Ekkor viszont,

$$e^{-\beta H'} = \exp\left(-\int d^d x\left[\frac{c}{2}(\nabla_x\sigma'(x))^2 + \bar{U}'(\sigma')\right] - AL^d\right) . \tag{15.47}$$

Ezen eredmény sűríti a renormálási csoport transzformáció konkrét megvalósítását. Alkalmazható formába való öntése azonban még további munkát igényel majd. Ez előtt azonban a következőket kell még kihangsúlyoznunk:

Az A konstans egy normálási konstans, melynek értelme a következő: Ha $\sigma'_X = 0$, akkor a H'-ben szereplő $\bar{U}'$, ami az U helyébe lépő mennyiség, szintén zéró kell legyen, mivel a H' a H formáját megtartja. Ekkor viszont $I(\sigma'_X = 0)$ egy konstanst ad, és ezt foglaljuk az A mennyiségbe:

$$e^{-\Omega A} = I(0). \tag{15.48}$$

Az elemzés folytatása céljából aláhuzzuk, hogy a blokk-transzformáció során nyert kifejezés teljes egészében blokk-változók függvénye kell legyen. Ebből a célból a (**??**) kifejezésben az általunk levezetett $\beta H'$ tagot a következő formára kell hoznunk:

$$\beta H' = \int d^d x' \left[\frac{c'}{2} (\nabla_{x'} \sigma(x'))^2 + U'(\sigma(x')) \right] . \tag{15.49}$$

A (**??**) forma kialakításának még egy fontos akadálya van, melyet a következő paragrafusban tárgyalunk.

15.3.3 A blokk-koordinátákra való áttérés

A blokkok szintjén $\beta H'$ ugyanolyan formájú kell legyen mint βH volt a kiinduló csomópont szinten (ami a Kadanoff-konstrukció alapötlete). Legyen x' a blokkok szintjén felépített rács független változója. A mi levezetett képletünkben az a rossz, hogy az integrálási változóban megmaradt az eredeti rács x független változója. A Kadanoff-transzformáció megvalósításánál figyelembe kell vegyük azt a tényt, hogy egy adott rácsban dolgozva az illető rács rácsállandóját kell egységnek tekinteni. Így, míg az eredeti rácsnál egy adott irányban $x \in [1, L]$, a blokk-rácsban, ugyanazon irányban a csomópontok száma S–részre csökkent, így $x' \in [1, \frac{L}{S}]$, azaz

$$x' = \frac{x}{S} . \tag{15.50}$$

Mindez a korrelációs függvényen keresztül a σ változókra is kihat. Ugyanis definíció szerint az eredeti rácsban (és a kritikus pontban)

$$G(x) = \langle \sigma(0)\sigma(x) \rangle \sim \frac{1}{x^{d-2+\eta}} . \tag{15.51}$$

A blokk-rácsban a korrelációs függvény hasonlóan

$$G(x') = \langle \sigma(0)\sigma(x') \rangle \sim \frac{1}{(x')^{d-2+\eta}} \tag{15.52}$$

szerint kell változzon. Másrészt $G(x)$-be $x = x'S$–et helyettesítve,

$$G(x') \sim \frac{1}{S^{d-2+\eta}} \cdot \frac{1}{x'^{d-2+\eta}} = S^{2-d-\eta} \frac{1}{x'^{d-2+\eta}} \tag{15.53}$$

adódik. Mindez úgy lehetséges csak, ha a

$$\sigma(x) \to S^{1-\frac{d+\eta}{2}} \sigma(x') \tag{15.54}$$

transzformációt alkalmazzuk az $x \to x'$ transzformációval egyidejűleg, hiszen csak így lesz a $G(x')$–ben megjelenő együttható helyes. A mi képletünkben σ' az $\sigma(x)$-nek azon része amely a blokk-transzformációs lépés után megmarad, tehát σ'–re is ugyanilyen átalakítási szabály kell fennáljon[115]. Figyelembe vettük továbbá azon tényt is, miszerint $G(x)$–ben két σ változó szorzata szerepel, azaz G a σ–ban négyzetes kifejezés.

Mindezek szerint a következő lépés az lesz, hogy a levezetett (??) képletünk baloldalán az

$$x \to Sx' \ , \quad \sigma' \to S^{1-\frac{d+\eta}{2}}\sigma(x') \tag{15.55}$$

helyettesítéseket kell végrehajtanunk. Az integrálási és differenciálási lépések

$$d^dx \to S^d d^dx' \ , \quad \nabla_x = \frac{\partial}{\partial x} = S^{-1}\frac{\partial}{\partial x'} \ , \tag{15.56}$$

szerint történnek, és így

$$\begin{aligned}
&\int d^dx \left[\frac{c}{2}(\nabla_x\sigma')^2 + \bar{U}'(\sigma')\right] \\
= &\int d^dx' \left[S^dS^{-2}\cdot S^{2-(d+\eta)}\frac{c}{2}(\nabla'_x\sigma(x'))^2 + S^d\bar{U}'\left(S^{1-\frac{d}{2}-\frac{\eta}{2}}\sigma(x')\right)\right] = \\
= &\int d^dx' \left[\frac{c}{2}\cdot S^{-\eta}(\nabla_{x'}\sigma(x'))^2 + S^d\bar{U}'\left(S^{1-\frac{d}{2}-\frac{\eta}{2}}\sigma(x')\right)\right] \ .
\end{aligned} \tag{15.57}$$

Tehát a levezetett összefüggésünk a következőképpen alakul:

$$e^{-\beta H'} = K\exp\left(-\int d^dx'\left[\frac{c}{2}S^{-\eta}(\nabla'_x\sigma(x'))^2 + S^d\bar{U}'(S^{1-\frac{d}{2}-\frac{\eta}{2}}\sigma(x'))\right]\right) \ , \tag{15.58}$$

ahol

$$K = e^{-AL^d} = \text{konstans}. \tag{15.59}$$

A következőkben néhány megjegyzést kell tennünk. Amint azt a (??) összefüggés is mutatja, a renormálási csoport transzformáció során nyert konstansok, mint például e^{-AL^d}, a csatolási állandók renormálásában nem játszanak szerepet[116]. Ezen tagok majdnem minden konkrét esetben megjelennek, és a blokk szinten értelmezett termodinamikai potenciálban AT–vel arányos járulékot eredményeznek[117]. Ezen tagok az S-nél kisebb skálákhoz kötött fluktuációkhoz tartoznak (azokból erednek), melyeket H' már nem érzékel, de H, amiből kiindultunk, igen. Tehát K_S fixpontjaiban a K_S transzformáció a $H \to H'$-t a funkcionális forma szempontjából pontosan, H' kifejezését azonban csupán egy összegzési konstans erejéig adja meg. Megfigyelhető továbbá, hogy egy fázis instabilizálását hosszútávú fluktuációk fellépéséhez

[115]Lásd [2]

[116]Azaz konkréten a csatolási állandókra felírt rekurziós képletekbe – lásd később – nem lépnek be, [3]

[117]Lásd [3], és ugyanazon bibliográfiai anyag 151 oldala.

köthetjük, és ezért az RG-ben, a csatolási állandók renormálása szempontjából az előbb említett konstansok elhanyagolhatóak. Mindezt az is indokolja, hogy termodinamikai átlagolásnál

$$\hat{\varrho} = \frac{e^{-\beta H}}{Tre^{-\beta H}} \tag{15.60}$$

sűrűségmátrix számít, de ebből a konstansok kiesnek[118].

A Φ' szintjén megjelenő konstans faktor azonban, a termodinamikai potenciál értékének meghatározása szempontjából fontos és különböző alkalmazások során feldolgozható. A Kosterlitz-Thouless-Berezinskij (KTB) fázisátalakulás elemzése során látunk majd egy konkrét példát erre vonatkozólag.

15.3.4 A Wilson-féle rekurziós összefüggések

Visszatérve levezetésünkre, a (??) és (??) összefüggések alapján a

$$\left.\begin{aligned} c' &= c \cdot S^{-\eta} \,, \\ U'(\sigma) &= S^d \bar{U}' \left(S^{1-\frac{d+\eta}{2}} \sigma \right) \end{aligned}\right\} \tag{15.61}$$

egyenlőségek adódnak. Az egyenlőségek, a H'–nak (??)–ben feltételezett, és az általunk, a Kadanoff blokkolás során konkréten levezetett (??)–ben kapott kifejezés összehasonlításából erednek.

Most meg kell említenünk, hogy ezt a képletet Wilson nyomán nem egzaktul vezettük le. A W_X-ről és σ'-ról feltételeztük, hogy σ' a blokkban állandó, és $W_X = \pm 1/\sqrt{\Omega}$, azaz a blokkban abszolut értékben állandó. Ez csak kis blokkokra állhat a valósághoz közel, ezért (Wilson kikötése szerint) csak $S = 2$–re alkalmazható[119] .

A továbbhaladás érdekében $\bar{U}'$ kifejezésének tanulmányozása szükséges. Ekkor a (??)–ben adott definíció szerint:

$$I(\sigma) = \exp[-\Omega \bar{U}'(\sigma)] \cdot I(0) \,, \tag{15.62}$$

tehát

$$-\Omega \bar{U}'(\sigma) = \ln \frac{I(\sigma)}{I(0)} \,. \tag{15.63}$$

Ekkor viszont (??) második összefüggését Ω–val megszorozva, a következő egyenlőségek írhatók:

$$c' = 2^{-\eta} c \tag{15.64}$$

[118]Lásd ezzel kapcsolatban még a 16.5 paragrafust.

[119]Azaz, pontosabban $S > 2$-re az összefüggés pontatlanságokat okoz. A 17. Fejezetben látjuk majd, hogy a differenciális rekurziós összefüggések levezetésekor a Wilson-féle összefüggések $S \to 1$ határesetben is alkalmazhatóak.

$$-\Omega U'(\sigma) = 2^d \ln \frac{I\left(2^{1-\frac{d}{2}-\frac{\eta}{2}}\sigma\right)}{I(0)} , \tag{15.65}$$

ahol a $H \to H'$ transzformációt a K_2 adja és

$$I(\sigma) = \sqrt{\Omega}\int dy \exp\left(-\frac{c}{2}\bar{q}^2\Omega y^2 - \frac{\Omega}{2}[U(y+\sigma)+U(-y+\sigma)]\right) . \tag{15.66}$$

Megfigyelhető tehát, hogy a renormálási csoport végül is az eredeti rácsszinten értelmezett csatolási állandók és a blokkszint csatolási állandói közötti összefüggéseket eredményez. A K_2 többszöri alkalmazása $c' = 0$ vagy $c' = \infty$ értékekhez vezetne[120] a levezetett képletekben. Mindez a Hamilton operátor eredeti formáját nem konzerválná, így véges hőmérsékleten vett fázisátalakuláshoz nem vezetne[121]. Hogy $c' = c$ fennálhasson, az egyedüli lehetőség $\eta = 0$ feltételezése.

Mindezek után, vezessük be a $Q = \Omega U$ jelölést. Mivel $c' = c$, ezen konstans értéke változatlan marad. Így a fizikai lényeg megváltoztatása nélkül c úgy megválasztható, hogy az összefüggések matematikailag a lehető legegyszerűbbek legyenek. Ennek érdekében, például az energiaskála egységének helyes megválasztásával, feltételezzük, hogy

$$\frac{c}{2}\bar{q}^2\Omega = 1 . \tag{15.67}$$

Továbbá bevezetjük a

$$J(\sigma) = \frac{I(\sigma)}{\sqrt{\Omega}} \tag{15.68}$$

jelölést. Ekkor, mivel a levezetett képletekben csupán az I/I_0 arány fordul elő, a K_2 transzformáció során nyert csatolási állandók renormálását megadó képletekben J teljes egészében átveszi I szerepét, ugyanis $I/I_0 = J/J_0$. Az íly módon nyert végeredmény, a következő:

$$\begin{aligned} Q'(\sigma) &= -2^d \ln \frac{J(\sigma \cdot 2^{1-\frac{d}{2}})}{J(0)} \; ; \quad Q = \Omega U \\ J(\sigma) &= \int dy \exp\left[-y^2 - \frac{1}{2}(Q(\sigma+y) + Q(\sigma-y))\right] \end{aligned} \tag{15.69}$$

ahol

$$H' = K_2 H \; ; \quad c' = c \; ; \quad \eta = 0 \; ; \quad \Omega = 2^d \tag{15.70}$$

$$\beta H = \int d^d x \left[\frac{c}{2}(\nabla\sigma)^2 + U(\sigma)\right] \tag{15.71}$$

A (**??**) egyenlőségek a „Wilson-féle rekurziós képlet” nevet viseli. Ez a hetvenes évek elején jelenik meg, és magáért a renormálási csoport gondolatáért Wilson 1982–ben Nobel-díjat kap[122].

[120] attól függően, hogy $\eta \neq o$ előjele milyen

[121] Lásd [2]

[122] Lásd [4]

A bemutatott levezetésben σ egykomponensű spinnek volt tekintve. Ha σ egy n–komponensű vektor, akkor egyszerűen y-t is n komponensű vektornak kell tekinteni, és a

$$dy \to \prod_{i=1}^{n} dy_i \tag{15.72}$$

kifejezést kell használni.

A Wilson-féle képlet a H és H' Hamilton-operátorokban megjelenő csatolási állandókat köti össze az $S = 2$ érték mellett. Általában a konkrét modellt U definiálja:

$$U(\sigma) = a_2\sigma^2 + a_3\sigma^3 + a_4\sigma^4 + \dots \tag{15.73}$$

Továbbmenőleg, ha a csatolási állandók összességét vektorként fogjuk fel, például H szintjén:

$$V = (c, a_2, a_3, a_4 \dots) \tag{15.74}$$

formájában, akkor a renormálási csoport egyenletek nem tesznek mást, mint a $H' = K_S H$–val értelmezett V' vektort kötik össze a H segítségével értelmezett V vektorral, azaz:

$$V' = K_S V \ , \tag{15.75}$$

ahol

$$V' = (c', a'_2, a'_3, a'_4 \dots) \ . \tag{15.76}$$

A Wilson-féle képletek konkrétan ezen transzformációt valósítják meg K_2 esetében. Ekkor viszont K_S felírható tetszőleges $S = 2^n$ esetre is mint

$$K_S = (K_2)^n \ , \tag{15.77}$$

azaz, a megadott képletek n szeres alkalmazásával K_S reprodukálható. Ebből ered a ,, rekurziv" jelző.

A Wilson-féle képletek fontossága abban rejlik, hogy nem egyetlen modell osztályra alkalmazható csupán, hanem a kezdeti $U(\sigma)$ formájának megválasztásával, rendkívül sok rendszer elemzésére felhasználható, és ezen szempont szerint általános jellegű.

15.4 A renormálási csoport megvalósításának konkrét lépései

Foglaljuk össze a továbbiakban, hogyan vezettük le a renormálási csoport egyenleteket a Wilson-féle közelitésben. Ezen lépések alkalmazásával minden más konkrét renormalizációs csoport transzformáció megvalósítható (esetleg a Wilson-féle közelítések nélkül, vagy más esetekben a modell sajátosságait figyelembe véve.

A KTB átmenet bemutatásakor egy ilyen, a modell-sajátosságokat követő levezetés elemzésére kerül majd sor.).

1. A modellt rögzítő H megadása után, $e^{-\beta H}$–ből kiintegráljuk az S–nél kisebb skálát jellemző szabadságfokokat. Amennyiben a csatolási állandókra vonatkozó rekurziós képletek érdekelnek, a kapott konstansokat elhanyagolva, a végeredményt $e^{-\beta H'}$–vel tesszük egyenlővé. Az eljárás egyik lehetséges megvalósítása például:
$$e^{-\beta H'} = \int e^{-\beta H} d \not\sigma$$
szerint történhet. Szokásos ezen lépést a Kadanoff-féle blokk-transzformációs lépésként is emlegetni, ahol a blokk nagyságát S jellemzi.

2. Az egyenlet baloldalán az integrálás elvégzése után H–ban maradt x, σ változókat átskálázzuk (azaz H' skálájához igazítjuk): $x' = x/S$, és $\sigma'(x) \to S^{(2-d-\eta)/2}\sigma(x')$ helyettesítések segítségével.

3. H'–ben lévő csatolási állandókat a H csatolási állandóival kifejezve, megkapjuk az $V' = R_S V$ renormálási csoport egyenleteket.

Ezt a programot számolja végig Wilson, első ízben adván meg explicit módon egy renormálási csoport-transzformációt megvalósító egyenleterendszert[123]. Ezen egyenletek három fontosabb közelítésre (feltételezés jellegű közelítésre) alapulnak.

a.) $W_X(x)W_{X'}(x) = \delta_{XX'}$, azaz a W hullámfüggvények átfedését elhanyagoljuk;

b.) $\sigma'(x)$-et állandónak tekíntjük egy blokkon belül (ezért lesz $\eta = 0$);

c.) $W_X = \pm 1/\sqrt{\Omega}$ egy blokkon belül.

Ezen levezetési módón sokszor próbáltak változtatni (úgymond javítani), de a próbálkozások nem jártak sikerrel a Wilson-féle képletekre jellemző nagyfokú modellfüggetlenség megtartása mellett. Ennek az az oka, hogy Wilson, a megadott képletek levezetésének pillanatáig nagyon sok magas rendig sorbafejtett esetet tanulmányozott végig numerikusan, mely esetek numerikusan egzaktnak tekinthető megoldásait ismerte. Erre támaszkodva írta fel az egyenleteit, melyek sok esetben nagyon jó közelítést jelentenek[124].

Konkrét megoldásokkal az elkövetkező fejezetekben foglalkozunk majd.

[123] Lásd [5].

[124] Az itt leírt megjegyzések [6]-ból származnak.

15.5 A renormálási csoport és a fázisátalakulás kapcsolata

A továbbiakban arra vagyunk kiváncsiak hogy mi tulajdonképpen a kapcsolat a renormálási csoport és a fázisátalakulások között. Amint láttuk, a K_S transzformáció általában kapcsolatot teremt V és V' különböző komponensei között rekurzív formában. Ebből viszont még nem látható a fázisátalakulásokkal való kapcsolat. Hogy ezen kapcsolat megérthető legyen, vissza kell térni a Kadanoff-konstrukció mögött álló fizikai vonatkozásokhoz.

Az, ami a kritikus tartományt, azaz T_c közvetlen közelségét jellemzi, az a skálainvariancia. Mindez matematikailag egyrészt azt jelenti, hogy H és $H' = K_S H$ ugyanazon funkcionális formával kell rendelkezzen. Másrészt viszont, az identikus funkcionális forma mellett a csatolási állandókat tartalmazó V vektor sem szabad megváltozzon K_S hatására. Így a skálainvariancia miatt

$$V^* = K_S V^* \tag{15.78}$$

összefüggés kell fennálljon ahol V^* azon speciális V vektor érték, mely K_S hatására invariáns marad, és így K_S „fixpontja” nevet viseli. Ha viszont $V^* = K_S V^*$ összefüggés fennáll egy rögzített de tetszőleges $S > 1$–re, akkor $(R_S)^n$–re is fenn kell állnia, ami $S' = S^n$–t jelent, így $S \to \infty$–re is igaz kell legyen. Ez azon mozzanat, mely megragadásával nem csak elvi, hanem kalkulatív módon is kapcsolat teremthető a renormálási csoport és a fázisátalakulások elmélete között. A kalkulatív jelleg viszont megköveteli hogy a kritikus pont környezetéből legyen lehetőségünk magát a kritikus pontot megközelíteni[125]. A bonyodalmat itt az okozza, hogy a kiindulópontunkat a csatolási állandók paraméterterében V^*-on kívül valahol tetszőlegesen megválasztva lehetőségünk van arra, hogy $V' = K_S V$ hatására eltávolodjunk a fixponttól. Hogy ez ne történhessen meg, figyelembe véve hogy K_S a hosszértékeket, és ezáltal a korrelációs hosszat is (**??**) értelmében átskálázza (azaz csökkenti), a rendszer viselkedésének milyenségét[126] csak $\xi = \infty$-re tarthatjuk meg[127]. Ezért eleve rögzítjük a hőmérséklet értékét a kritikus hőmérsékletre. A bemutatottak szellemében látható tehát, hogy a tökéletes skálainvariancia (a Kadanoff féle ötlet) szigorú értelemben csak $T = T_c$-re áll fenn[128], és T_c tetszőleges környezetében csupán hosszútávú viselkedésre alkalmazható[129] Mindezek után az alapgondolat a következő:

---

[125]Amint a későbbiekben kiderül ez nemcsak kalkulatív, hanem lényeges fizikai információkat is hordoz.

[126]Vegyük figyelembe hogy itt a fázisátalakulás szempontjából vett viselkedés érdekel, olyan kritikus jelenségekről lévén szó melyekkel divergáló korrelációs hossz jár.

[127]Amint a következő fejezetben említésre kerül majd, $\xi = 0$ érték is fixponthoz vezet bizonyos esetekben, de kritikus viselkedéshez ezen fixpontérték nem társul, így a kritikus felület értelmezéséből ezen érték kimarad.

[128]Lásd például [7]

[129]Mindez viszont a kritikus exponensek között fennálló skálatörvények levezetésére elegendő, lásd a következő fejezet 16.5 paragrafusát.

Ha a V által leírt térben létezik K_S–re vonatkozólag egy V^* fixpont, akkor kell létezzen V^* környezetében egy felület[130], mely azzal a tulajdonsággal rendelkezik, hogy a rajta lévő V vektorra mindig teljesül a

$$\lim_{S\to\infty} K_S V = V^* \tag{15.79}$$

tulajdonság. Ez akkor van így, ha fázisátalakulás létezik[131] és az említett felületen végig a hőmérséklet T_c értékű[132]. Az előbbi egyenlettel definiált sokaság a „kritikus felület" nevet viseli. Ezek szerint, a kritikus felületen lévő V vektorok azzal a tulajdonsággal rendelkeznek, hogy K_S hatására, $S \to \infty$ határátmenetben, V^*–ba mennek át. Ha pedig V nincs a kritikus felületen, $S \to \infty$ határesetben eltávolodik a fixponttól. Tehát, a fázisátalakulással való kapcsolat a következő[133]:

Ha V–t fizikai mennyiségek függvényében értelmezzük, akkor külső tér (h) jelenlétében és T hőmérsékleten, $V \equiv V(T,h)$. Nos, az alapösszefüggés a következő:

$$\lim_{S\to\infty} K_S V(T,h) = \begin{cases} V^*(T_c, 0)\ ; & \text{ha} \quad T = T_c,\ h = 0 \\ \neq V^*\ ; & \text{ha} \quad T \neq T_c \quad \text{vagy} \quad h \neq 0 \end{cases} \tag{15.80}$$

Mindez azt jelenti hogy külső tér hiányában, $T = T_c$–re, a Hamilton operátor csatolási állandóinak megfelelő konfigurációs pont, a csatolási állandók terében, rajta van a kritikus felületen (feltéve hogy az létezik). Ha pedig $T \neq T_c$, vagy $h \neq 0$, akkor ezen tulajdonság nem áll fenn. Megjegyzendő, hogy egyensúlyi rendszerekre (amelyekkel itt foglalkozunk) V^* mindig véges[134]. Az itt definiált V^* neve „kritikus fixpont", és ez az a fixpont amely a rendszer kritikus viselkedését jellemzi. Minden egyes kritikus fixponthoz jólmeghatározott kritikus felület tartozik.

Az elmondottak egyben azt is jelentik, hogy ha a kiinduló H-nak megfelelő V érték a kritikus felületen van, akkor a K_S transzformáció folyamatos (azaz újra meg újra történő) alkalmazásával[135] az aktuális V-vektornak megfelelő pont a V^* kritikus fixpontba „mozog". Ilyen szempontból tehát a kritikus felület a kritikus fixpont „vonzási tartománya", egy olyan sokaság amelyből kiindulva K_S folyamatos alkalmazásával a konfigurációs pontunk a V^* kritikus fixpontba „folyik"[136]. Ezen

[130]Az elnevezés „történelmi" jellegű, és nem feltétlenül 2-dimenziós sokaságot jelent. Ha például a V által leírt tér két dimenziós, akkor a szóban forgó „felület" egy görbe a csatolási állandók terében. Szokásos az említett „felület" helyett a „sokaság" fogalom használata.

[131]Ezen jegyzetben a fázisátalakulás véges és zérótól különböző hőmérsékleten vett fázisátalakulást jelent. Az itt használt fázisátalakulási fogalom nemcsak HTR-re vonatkozik hanem tetszőleges fázisátalakulásra mely valamilyenfajta korrelációs hossz divergenciával kapcsolatos.

[132]Ezen felület mindennek ellenére nem egy izoterma. A felület mentén T_c konkrét értéke változhat és a felület adott pontjának megfelelő csatolási állandók értéke által meghatározott, lásd [8]

[133]Lásd [9]

[134]Vagy egy változócserével mindig végessé tehető, lásd [8].

[135]és ez $S \to \infty$-vel ekvivalens

[136]Megemlítjük, hogy ezen jegyzetben a kritikus felületet folytonosnak, továbbá a (**??**)

tulajdonságnak megfelelően, a kritikus fixpont a kritikus felületről nézve „vonzó" fizpont nevet viseli[137].

Az elmondottak alapján érzékelhető, hogy a fázisátalakulások elemzésében fontos szerep jut a V paramétertérben a rendszerünket jellemző pont K_S hatására történő mozgásának. Az így kialakult görbéket RG-traektóriáknak nevezzük. Ezen traektoriák a V térben vett irányitott görbék[138] melyek irányitottságát S növekedése határozza meg. Az RG-traektoriákon való végighaladás (azaz rendszerünket jellemző paramétertérbeli pont K_S folyamatos alkalmazásának hatására történő mozgása) az RG-áramlást definiálja. Ezen elnevezéseket használva, (**??**) azt jelenti, hogy a kritikus felület bármely pontjából elindulva, a kiinduló (azaz Kadanoff blokk-transzformáció elötti) rendszert jellemző V-pont $S \to \infty$ határesetben a kritikus fixpontba végződő áramlási görbét követ[139]. Abban az esetben viszont ha a kiinduló rendszert jellemző V pontunk nincs a kritikus felületen, áramlási görbéje mentén $S \to \infty$ határesetben eltávolodik a kritikus fixponttól. Mindennek alapján tehát érzékelhető, hogy a kritikus fixpont csupán a kritikus felületről vonzó, a kritikus felületen kívül „taszító" jellegű. Egy fixpontot taszító-jellegű fixpontnak[140] nevezünk egy adott tartományra vonatkozólag, ha azon tartományban szereplő összes áramlási görbe tőle eltávolodik.

Látható tehát, hogy a (**??**) által értelmezett kritikus-fixpont érdekes tulajdonsággal rendelkezik. A teljes V által leírt paramétertér szempontjából se nem vonzó (azaz stabil) se nem taszító (azaz instabil) hanem „vegyes fixpont"[141]. Fázisátalakulások renormálási csoporton keresztüli kimutatása tehát ezen tulajdonságokkal rendelkező kritikus-fixpontok megkeresését jelenti. A kritikus-fixponthoz tartozó kritikus felület paramétertérben vett egyenlete, (**??**) szerint, egyben megadja a kritikus hőmérséklet T_c egyenletét a csatolási állandók függvényében[142]. A kritikus-fixpont körüli viselkedés tanulmányozása pedig[143] a rendszer T_c körüli viselkedésének jellemzésére (a kritikus exponensek levezetésére) ad alkalmat. Megjegyzendő

összefüggést helytállónak tekíntjük. A pontosság kedvéért azonban hangsúlyozzuk, hogy vannak olyan esetek amikor habár kritikus felület létezik, az $S \to \infty$ határesetben ciklikus viselkedés, kaotikus viselkedés stb. észlelhető mely határértéke nem értelmezhető, így a kritikus fixpont nem elérhető a kritikus felületről sem (pl. kritikus dinamikai példákban, lásd [8]; vagy rendezetlen rendszerekre vonatkozó esetekben, lásd [10]). Olyan példák is ismertek mikor a kritikus felület fraktál jellegű, lásd [8]. Ezen esetekkel a jelen jegyzetben nem foglalkozunk.

137 Más elnevezéssel, stabil fixpont a kritikus felületről nézve.

138 Ezért „folyási" vagy „áramlási" görbéknek is szokásos öket nevezni.

139 Vannak olyan speciális esetek, melyekben a kritikus felület a kritikus fixponton kívül instabil fixpontokat is tartalmaz. Az itt megadott (**??**) definiciónak ez nem tesz eleget, hiszen ezen speciális pontokból a fixpontot nem érhetjük el. Ezen esetekkel itt nem foglalkozunk

140 vagy instabil fixpontnak

141 Az angol szakirodalomban „mixed"

142 Hangsúlyozni szeretnénk hogy itt a „fázisátalakulás" divergens korrelációs hosszt jelent, hiszen a hőmérséklet kritikus értéke miatt a kritikus felület mentén végig $\xi = \infty$, lásd elöbb és [11]. Elsőrendű fázisátalakulások kimutatására így RG szinten speciálisabb eljárást kell alkalmazni, lásd [12]

143 Lásd a következő fejezetet

továbbá, hogy azon tény miszerint a kritikus felület minden pontjából induló áramlási görbe ugyanazon kritikus-fixpontba végződik, azaz ugyanazon kritikus viselkedéssel jellemzett függetlenül a kiinduló csatolási állandó értékektől[144], alkotja az univerzalitás alappillérét. Maga az univerzalitási osztályt pedig a kritikus fixpont jellemzi[145].

A következőkben arra szeretnénk fényt deriteni, hogy a kritikus-fixpont miért ilyen különös viselkedésű. Tételezzük fel ebből a célból, hogy egy olyan Hamilton-operátort vizsgálunk amelyről biztosan tudjuk hogy fázisátalakulást nem ad, például az egydimenziós Ising modellt leíró H-t $T \neq 0$ és külső tér $h = 0$ körülmények között. A paramétertér tetszőleges pontjából kiindulva[146] és Kadanoff blokk-transzformációt végrehajtva a következőket tapasztaljuk: Rendezetlen fázisba lévén a kiinduló rendszer korrelációs hossza véges, a kölcsönhatások rövid hatótávolságuak. A blokk-transzformációt végrehajtva mind nagyobb és nagyobb hosszskálákat fésülünk át, a kialakitott blokkok mind kevésbé és kevésbé lesznek korreláltak. A Kadanoff-transzformáció tehát ez esetben mind kevésbé és kevésbé korrelált blokk-spin változókat állit elő, és egy adott hosszskálán túl teljesen korrelálatlan spin-blokk-rendszert teljesen korrelálatlan spin-blokk rendszerbe visz át. Ezáltal az S blokkméret növekedésével teljesen rendezetlen és korrelálatlan blokk-spin változókból kiindulva, a renormálási csoporttranszformációt végrehajtva tökéletesen hasonló blokk-spin változókat kapunk eredményül mely következtében a mikróállapotok valószinűségi eloszlása K_S hatására, $S \to \infty$ határesetben változatlan marad. Azaz a $T \neq 0, h = 0$ körülmények között vett paramétertér bármelyik pontjából kiindulva, az áramlási görbék egy vonzó fixpontba folynak bele[147], mely neve ,,magashőmérsékleti" fixpont[148] ($V^*_{T\to\infty}$). Habár ezen fixpont vonzó, (??) értelmében nem kritikus, tehát fázisátalakulást nem jellemez. Jelenléte és az áramlási görbék beletorkolása csupán azt jelzi, hogy a kiinduló rendszer állapota rendezetlen, azaz (itt) paramágneses.

Most vegyünk egy olyan rendszert amely biztosan ad egy (korrelációs hossz divergenciával járó) fázisátalakulást, például a kétdimenziós Ising modellt. Ez esetben is, a V által leírt paramétertér tetszőleges $T > T_c$-vel jellemzett pontjából kiindulva az áramlási görbéink $V^*_{T\to\infty}$ magashőmérsékleti fixpontba folynak bele, jelezve hogy kiinduló állapotunk rendezetlen fázisban volt. Azonban, ha a paramétertér egy olyan pontjából indulunk ki melyre $T < T_c$, a következő viselkedést tapasztaljuk: Mivel a kiinduló állapot rendezett, a kiinduló spinváltozók átlaga zérótól különböző értéket ad hiszen spontán mágneses momentum van jelen. A Kadanoff blokk-transzformáció nyomán mind nagyobb és nagyobb blokkokat előállítva mind nagyobb

144 amennyiben ezek a kritikus felületen helyezkednek el

145 Általában különböző kritikus fixpontokhoz tartozó univerzalitási osztályok különbözőek. Ez azonban nem szükségszerű, ugyanis ismertek olyan esetek amikor három különböző kritikus fixponthoz ugyanazon univerzalitási osztály tartozik hozzá, lásd [13].

146 Szem előtt kell tartanunk hogy ezen ponthoz egyben egy $T \neq 0$ hőmérsékletérték is hozzátartozik

147 hiszen az állapotösszeg változatlan marad a Hamilton-operátor paramétereivel együtt

148 Ez a $T \to \infty$ fixpont.

és nagyobb tartományokra átlagolunk, olyan blokk-spin változókat előállítva ezáltal melyek a blokkméret növekedésével egyenlőkké válnak. Tehát blokkméret $S \to \infty$ határesetében, az áramlási görbéink a teljesen rendezett fázisnak megfelelő $V^*_{T\to 0}$ fixpontba folynak bele. Ezen fixpont neve az ,,alacsonyhőmérsékleti" fixpont[149], mely vonzó jellegű, de (??) értelmében szintén nem kritikus, tehát fázisátalakulást explicit nem jellemez[150]. Jelenléte arra utal, hogy a paramétertérben választott kiindulópontunk a rendezett fázisban volt[151]. Azt azonban, hogy a rendezetlen fázisból hogyan jutottunk át a rendezett fázisba, milyen a kritikus hőmérséklet, mik a fázisátalakulás jellemzői, nem tudjuk belőle megállapítani[152].

Minden rendszerre amelyben egyetlen[153] fázisátalakulás fellép, az előbb bemutatott viselkedés tipikus. A V által leírt paramétertér két különbözö pontjában megtalálható az előbb említett magashőmérsékleti és alacsonyhőmérsékleti fixpont. Igy a renormálási csoport traektoriák egy része a $V^*_{T\to\infty}$ vonzó fixpontba, mig egy másik része a $V^*_{T\to 0}$ vonzó fixpontba áramlik. Ennek megfelelően, kell legyen a V vektorok által leírt paramétertérben egy ,,felület" amely a két viselkedéstípust elmálassza egymástól. Ez a kritikus felület, mely mentén mindenütt a hőmérséklet T_c értékkel rendelkezik[154]. A kritikus felületen lévő áramlási görbék értelemszerűen se $V^*_{T\to\infty}$, se $V^*_{T\to 0}$ fixpontokba nem folyhatnak bele. Ezeket a kritikus fixpont V^* gyüjti össze. Ezen tulajdonságnak megfelelően a kritikus-felület egy ,,elválasztó-felület" szerepét tölti be amely szétválasztja a paramétertérben $V^*_{T\to 0}$ illetve $V^*_{T\to\infty}$ fixpontok hatáskörébe[155] tartozó alacsonyőmérsékleti illetve magashőmérsékleti viselkedést. Ezen okból kifolyólag szokásos még a kritikus felületet ,,szeparatrix"[156]-nak nevezni[157].

---

[149] A $T \to 0$ fixpont

[150] Lásd [8]

[151] A következő fejezetben, a kodimenzió fogalmának tárgyalásakor látni fogjuk, hogy az alacsonyhőmérsékleti fixpont viselkedése $h = 0$ és $h \neq 0$ esetekben különböző. Továbbá a $V^*_{T\to\infty}$ és $V^*_{T\to 0}$ viselkedésében is különbségeket lehet felmutatni mindannak ellenére hogy mindkettő vonzó fixpont. Az itteni gondolatmenet megértése szempontjából azonban az itt bemutatott információ elegendő.

[152] Megemlítjük, hogy azokban az esetekben amikor a rendszer $T = 0$ alapállapota nem teljesen rendezett állapot az alacsonyhőmérsékleti viselkedés sokkal bonyolultabb, lásd [8], a 3-as lábjegyzék. Ezen speciális esetekkel itt nem foglalkozunk.

[153] és korrelációs hossz divergenciával járó

[154] A kétdimenziós Ising modell esetében olyan Hamilton-operátort használhatunk például mely $h = 0$ esetében első és másodszomszéd kölcsönhatásokat is figyelembevesz. Ekkor a paramétertér két dimenziós, míg a kritikus felület egy kétdimenziós térben lévő görbe.

[155] azaz vonzáskörébe

[156] azaz ,,választófelületnek", lásd [14]

[157] A pontosság kedvéért ki kell hangsúlyozzuk azonban, hogy a (??) szerint értelmezett kritikus felület és a szeparatrix fogalma teljes általánosságban nem fedi egymást. A szeparatrixot ugy definiálhatjuk mint egy olyan ,,felület" mely különböző vonzó (és általában nem kritikus) fixpontok vonzási tartományait elválasztja. Amennyiben a rendszerünknek $V^*_{T\to\infty}$ és $V^*_{T\to 0}$ fixpontokon kívül egyetlen fázisátalakulást jelző fixpontja van (mint az előbbiekben bemutatott példában) akkor a szeparatrix egyezik a kritikus felülettel. Megtörténhet viszont bizonyos esetekben hogy egyetlen szeparatrix két (az elválasztófelület különböző részhalmazairól nézve) vonzó jellegű fixpontot tartalmaz. Ezen két fixpont szeparatrixon lévő vonzási tartománya élesen el kell legyen választva egy taszító jellegű ,,határfelülettel". (Például ha a szeparatrix egy görbe, akkor egy ilyen pont lehet

A bemutatott tulajdonság világosan mutatja azt is, hogy miért vegyes fixpont a kritikus fixpont. Ezen fixpontnak a szeparatrix jelenléte miatt természetszerüleg vonzónak kell lennie a kritikus felületen és taszító jelleggünek kell lennie a kritikus felületen kívül.

A bemutatott példákon keresztül érzékelni lehet, hogy egy rendszer teljes fázisdiagramja renormálási csoporton keresztül teljes egészében megszerkezthető. Ha kiváncsiak vagyunk arra hogy a paramétertér adott pontjában a rendszerünk milyen fázisban van, nem kell mást tenni mind megfigyelni, hogy az illető pontból kiinduló renormálási csoport áramlási görbe milyen fixpontba torkol, és az említett fixpontnak környezetével együtt milyen tulajdonságai vannak. Ezt egy egyszerű egyetlen kritikus fixpontot tartalmazó példán keresztül tettük, csupán lábjegyzékekben jelezve a speciálisabb esetek által okozott bonyodalmakat. Az elemzésből kitünt, hogy a renormálási csoport utján nyert csatolási állandokra vonatkozó rekurziós képletek fixpontjai a hozzájuk tartozó áramlási görbékkel együtt segítenek a fázisdiagram megszerkeztésében. A fázisátalakulások szempontjából viszont[158] a megjelenő fixpontok között vannak ,,triviális" és ,,nemtriviális" fixpontok. Triviálisnak nevezhetőek például a $V^*_{T\to\infty}$ magashőmérsékleti, és $V^*_{T\to 0}$ alacsonyhőmérsékleti fixpontok melyek csupán a rendezetlen, illetve a rendezett fázishoz való hozzátartozást jelzik[159]. Nemtriviális viszont a kritikus fixpont mely magát a fázisátalakulást jelzi és jellemzi (**??**) összefüggésen keresztül.

A triviális, nem-kritikus, fázist jelző és vonzó fixpontok megjelenésének oka abban rejlik, hogy a blokk transzformáció nyomán a szeparatrixon kívül lévő kezdeti állapotból kiindulva a rendszer kis távolságokon vett viselkedését kiintegráljuk és ugyanakkor a hosszútávú viselkedést változatlanul megtartjuk. A blokktranszformáció sorozatos alkalmazása során ezáltal a nagyon nagy távolságokon vett viselkedés jellemzői domborodnak ki és pont ezek azok a tulajdonságok amelyek a rendszer egészének a viselkedését adják egy létező fázis keretén belül. Az áramlási görbéink ezért visznek ilyenkor be egy ,,fázis-jelző" vonzó fixpontba.

Amint az elkövetkezőkben majd látni fogjuk a (**??**) reláció kalkulatív szinten is kapcsolatot teremt a renormálási csoport és a kritikus tartomány tulajdonságai között. Hogy mindez hogyan valósul meg, azt a következő fejezetben tárgyaljuk, amelyben azt is meglátjuk majd, hogy a bevezetett fogalmak matematikai szemszögből hogyan közelíthetőek meg.

egy trikritikus pont). Ilyen esetben egy adott kritikus ponthoz tartozó kritikus felület a szeparatrixnak csak az a része amely a kritikus fixpont vonzási tartományát jelenti az elválasztófelületen, lásd [15]. Ezen speciális esetekkel itt nem foglalkozunk.

[158] Itt csupán a divergens korrelációs hosszal jellemezhető fázisátalakulásokról volt szó

[159] A paramétertérben választott kiindulópont adott fázishoz való hozzátartozásáról van itt szó.

15.6 Szakirodalmi jegyzék 15.

[1] Shang-keng Ma, *Modern Theory of Critical Phenomena*, Frontiers in Physics: A Lecture Note and Reprint Series Vol. 46., W. A. Benjamin Inc., London, 1976, 67 oldal.

[2] Shang-keng Ma, *Modern Theory of Critical Phenomena*, Frontiers in Physics: A Lecture Note and Reprint Series Vol. 46., W. A. Benjamin Inc., London, 1976, 234 oldal.

[3] Shang-keng Ma, *Modern Theory of Critical Phenomena*, Frontiers in Physics: A Lecture Note and Reprint Series Vol. 46., W. A. Benjamin Inc., London, 1976, 125 oldal.

[4] K. G. Wilson, *The Renormalization Group and Critical Phenomena*, Rev. Mod. Phys. 55, 583, (1983).

[5] Shang-keng Ma, *Modern Theory of Critical Phenomena*, Frontiers in Physics: A Lecture Note and Reprint Series Vol. 46., W. A. Benjamin Inc., London, 1976, 229 oldal.

[6] Shang-keng Ma, *Modern Theory of Critical Phenomena*, Frontiers in Physics: A Lecture Note and Reprint Series Vol. 46., W. A. Benjamin Inc., London, 1976, 238-239 oldalak.

[7] F. David, *Field Theory, Topology and Condensed Matter Physics*, Lecture Notes in Physics, Ed. H. Geyer, Springer-Verlag, Berlin, 1995, 2-4 oldal.

[8] J. J. Binney, N. J. Dowrick, a. J. Fisher, M. E. J. Newman, *The Theory of Critical Phenomena, An Introduction to the Renormalization Group*, Oxford Science Publication, Clarendon Press, Oxford, 1995, 122 oldal.

[9] Shang-keng Ma, *Modern Theory of Critical Phenomena*, Frontiers in Physics: A Lecture Note and Reprint Series Vol. 46., W. A. Benjamin Inc., London, 1976, 140 oldal.

[10] N. Goldenfeld, *Lectures on Phase Transitions and the Renormalization Group*, frontiers in Physics Vol. 85., Addison-Wesley Publishing Co., 1992, 241 oldal.

[11] N. Goldenfeld, *Lectures on Phase Transitions and the Renormalization Group*, frontiers in Physics Vol. 85., Addison-Wesley Publishing Co., 1992, 242-243 oldal.

[12] N. Goldenfeld, *Lectures on Phase Transitions and the Renormalization Group*, frontiers in Physics Vol. 85., Addison-Wesley Publishing Co., 1992, 247 oldal.

[13] J. Cardy, *Scaling and Renormalization in Statistical Physics*, Cambridge Lecture Notes in Physics Vol. 5., Eds. P. Goddard, Y. Yeomans, Cambridge University Press, 1996, 66 oldal.

[14] J. Cardy, *Scaling and Renormalization in Statistical Physics*, Cambridge Lecture Notes in Physics Vol. 5., Eds. P. Goddard, Y. Yeomans, Cambridge University Press, 1996, 43 oldal.

[15] J. Cardy, *Scaling and Renormalization in Statistical Physics*, Cambridge Lecture Notes in Physics Vol. 5., Eds. P. Goddard, Y. Yeomans, Cambridge University Press, 1996, 64 oldal.

16 A renormálási csoport és a kritikus exponensek közötti összefüggés

Mindeddig a $V' = K_S V$ renormálási csoport egyenleteket tanulmányoztuk, és a Wilson-féle képlet formájában példáztuk őket. Nézzük meg a következőkben, hogy a kritikus exponenseket hogyan vezethetjük le ezen egyenletek alapján. Vizsgálni szeretnénk továbbá azt is, hogy a renormálási csoportból kiindulva hogyan juthatunk el a skálázás fogalmához[160].

16.1 A linearizált renormálási csoport egyenletek

Feltételezzük a következőkben, hogy a fixpont létezik, és V–vel helyezkedjünk el közvetlenül a közelébe. Ekkor:

$$\begin{aligned} V &= V^* + \delta V \,, \\ V' &= V^* + \delta V' \end{aligned} \tag{16.1}$$

írható. Ez tulajdonképpen V és V'–ben egy V^* körüli sorbafejtést jelent az első rendig. Ha V^*–hoz elég közel vagyunk, akkor ezen elsőrendű közelítés, amint látni fogjuk, a kritikus exponensek levezetése szempontjából legtöbb esetben elegendő[161].

16.1.1 A linearizált renormálási csoport transzformáció

Ilyen körülmények között az eredeti renormálási csoport egyenletek most a

$$\delta V' = R_S^L \delta V \tag{16.2}$$

összefüggésbe mennek át, ahol R_S^L nem más, mint K_S–nek V^* körüli lineáris formája. Ha a V vektor komponenseket V_α–val jelöljük, akkor R_S^L egy mátrix, melynek komponenseit:

$$(R_S^L)_{\alpha\beta} = \left(\frac{\partial V'_\alpha}{\partial V_\beta} \right) \Bigg|_{V=V^*} \tag{16.3}$$

összefüggés adja meg, és

$$\delta V'_\alpha = \sum_\beta (R_S^L)_{\alpha\beta} \delta V_\beta \,. \tag{16.4}$$

Mindezzel azt nyertük, hogy V^* közelében lévén, a lineáris algebra területére helyeztük át a matematikai leírást, ahol sok alkalmazható törvényszerűséget ismerünk és használhatunk fel.

[160] A jegyzetben a történelmi útat jártuk végig, hisz a skálatörvények bevezetése után jutottunk el a renormálási csoport elméletéig. Ezen fejezet végén azt szemléltetjük, hogy adottnak tekíntve a renormálási csoport elméletét, ebből a skálázási összefüggések hogyan származtathatóak.

[161] A későbbiekben meglátjuk, hogy V^* körüli elsőrendű közelítésnek bizonyos esetekben korlátai vannak. Gondolatmenetünket itt pedagogiai okokból elsőrendű közelítésre alapozzuk a lényegi jellemzők továbbadása céljából, lábjegyzékekben pontozva a nehézségeket.

Hogy a matematikai alapgondolatot megértsük, vigyük végig a következő gondolatmenetet: a $V' = K_S V$ egyenletet, amint említettük, ,,rekurziós" összefüggésnek is nevezik. Ez azért van így, mert ezen egyenletet úgy is elképzelhetjük, hogy $(l+1)$–edik blokkszint vektorkomponenseit fejezi ki az l–edik blokkszint vektorkomponenseinek függvényében. Így $\delta V' = R_S^L \delta V$ formája a következőképpen alakul:

$$\begin{pmatrix} V_1^{l+1} - V_1^* \\ V_2^{l+1} - V_2^* \\ \vdots \\ V_n^{l+1} - V_n^* \end{pmatrix} = (R_S^L) \begin{pmatrix} V_1^{l} - V_1^* \\ V_2^{l} - V_2^* \\ \vdots \\ V_n^{l} - V_n^* \end{pmatrix} , \tag{16.5}$$

azaz

$$(V_\alpha^{l+1} - V_\alpha^*) = (R_S^L)_{\alpha\beta}(V_\beta^l - V_\beta^*) . \tag{16.6}$$

Most m–szer alkalmazva az R_S^L transzformációt, azt kapjuk, hogy

$$(V^{l+m} - V^*) = (R_S^L)^m (V^l - V^*) . \tag{16.7}$$

Mivel a számítás során V^*–ot nem ismerjük, és csupán V^* környezetéből indulunk ki, $S \to \infty$, azaz $m \to \infty$ visz majd a V^* fixpontba ha esetleg a kritikus felületen vagyunk. Itt figyelembe kell vennünk azt a tényt, hogy K_S-nek a $K_S K'_S = K_{SS'}$ csoporttulajdonsága miatt[162], S növelése vagy m növelése, ekvivalens hatású. Mindebből az következik, hogy $(R_S^L)^m$, az $m \to \infty$ határesetben közelít majd (esetleg) a tanulmányozott fixponthoz, tehát számításunk során ezen lépés lesz ,,mérvadó" a fixpont megközelítésében. Tudvalevő viszont, hogy minden mátrix, így $(R_S^L)_{\alpha\beta}$ is, felírható sajátértékeinek bizonyos mátrixokkal vett szorzatának mátrixösszege formájában a spektrálfentontásnak megfelelően. Ezen állítás megértése céljából, a következőkben egy kis matematikai kiegészítésre lesz szükség.

16.1.2 Egy mátrix spektrális felbontása

Legyen $\hat{M}$ egy tetszőleges mátrix, melyről még azt sem tételezzük fel, hogy szimmetrikus ($\hat{M} \neq \hat{M}^T$). Ekkor minden λ_i sajátértékhez[163] tartozik egy jobboldali és egy baloldali sajátvektor:

$$\hat{M} e_i^J = \lambda_i e_i^J \; ; \quad e_i^B \hat{M} = \lambda_i e_i^B , \tag{16.8}$$

[162] Ezen transzformáció a blokkméretet nveli hiszen S és S' egynél nagyobb számok. Igy ,,blokkkicsinyités" a tanulmányozott reláción keresztül nem lép fel, tehát a tulajdonság félcsoportra is fennáll

[163] Megjegyzendő hogy általában az $\hat{M}$ mátrix elemei valósak, de a mátrix elvileg nem szükségszerűen szimmetrikus, így az is előfordulhat hogy ne legyen diagonalizálható, sőt komplex sajátértékei is lehetnek különleges esetekben. A gyakorlatban azonban (néhány ismert különlegesebb esettől eltekíntve – pl. rendezetlen rendszerekben – amelyekkel itt nem foglalkozunk), $\hat{M}$ diagonalizálható és valós sajátértékekkel rendelkezik, lásd [1].

ahol

$$e_i^B e_j^J = \delta_{ij} \; . \tag{16.9}$$

Ekkor igazolható hogy:

$$\hat{M} = \sum_l \lambda_l e_l^J e_l^B \; . \tag{16.10}$$

Itt meg kell említenünk, hogy általában

$$e_i^B e_j^J \neq e_j^J e_i^B \; . \tag{16.11}$$

Visszatérve a (??) állítás igazolására, ténylegesen

$$\hat{M} e_i^J = \sum_l \lambda_l e_l^J \underbrace{e_l^B e_i^J}_{\delta_{il}} = \lambda_i e_i^J \; , \tag{16.12}$$

és

$$e_i^B \hat{M} = \sum_l \lambda_l \underbrace{e_i^B e_l^J}_{\delta_{il}} e_l^B = \lambda_i e_i^B \; . \tag{16.13}$$

Tehát figyelembe véve, hogy

$$\hat{M} e_i^J = (\hat{M}) \cdot e_i^J = (\sum_l \lambda_l e_l^J e_l^B) \cdot e_i^J \tag{16.14}$$

minden e_i^J–re fenn kell álljon, az állítás igazolva van.

Továbbá az is megfigyelhető, hogy

$$\hat{M}^2 = \sum_l \lambda_l^2 e_l^J e_l^B \; . \tag{16.15}$$

Ténylegesen

$$\hat{M}^2 = \sum_l \sum_n \lambda_l \lambda_n e_l^J e_l^B e_n^J e_n^B = \sum_l \sum_n \lambda_l \lambda_n e_l^J \delta_{l,n} e_n^B = \sum_l \lambda_l^2 e_l^J e_l^B \; . \tag{16.16}$$

Hasonlóan, a hatványozást tetszőleges egész hatványkitevőig folytatva

$$\hat{M}^m = \sum_l \lambda_l^m e_l^J e_l^B \; . \tag{16.17}$$

Ilyenformán látható, hogy $\hat{M}^m$ (a mi esetetünkben $(R_S^L)^m$) viselkedését az $m \to \infty$ határesetben a legnagyobb sajátérték fogja meghatározni. Ténylegesen, ha $m \to \infty$, és $\max(\lambda_l) = \lambda_{l_M}$, akkor

$$\hat{M}^m = \lambda_{l_M}^m (e_{l_M}^J e_{l_M}^B) + \sum_{l \neq l_M} \left(\frac{\lambda_l}{\lambda_{l_M}} \right)^m e_l^J e_l^B \; ; \tag{16.18}$$

és ha $m \to \infty$, mivel

$$\frac{\lambda_l}{\lambda_{l_M}} < 1 \;, \tag{16.19}$$

következik, hogy

$$\lim_{m\to\infty} \hat{M}^m = \lambda_{l_M}^m e_{l_M}^J e_{l_M}^B \Big|_{m\to\infty} \;. \tag{16.20}$$

Mindebből az következik, hogy a fizikai képhez való kapcsolódás érdekében K_S–et lineáris operátorrá kell alakítani V^* körül, meg kell határozni sajátértékeit, és ezek közül a legnagyobb pozitív λ sajátérték fog majd valamilyen módon a fizikai jellemzőkhöz kapcsolódni.

16.1.3 A linearizált renormálási csoport transzformáció mátrixának sajátértékei

Az R_S^L sajátértékeire vonatkozólag azt állapíthatjuk meg, hogy pozitívak, és egy jellegzetes formával is rendelkeznek. Mindezt a következő gondolatmenettel láthatjuk be:

Mivel R_S^L sajátértékében S egy változó, a j–edik sajátértékhez tartozó sajátértékegyenlet:

$$R_S^L e_j^J = \lambda_j(S) e_j^J \;. \tag{16.21}$$

Ha S helyett S'–et írunk, akkor:

$$R_{S'}^L e_j^J = \lambda_j(S') e_j^J \tag{16.22}$$

adódik. De

$$R_{SS'}^L e_j^J = \lambda_j(SS') e_j^J \;, \tag{16.23}$$

és tudvalevő $K_S K_{S'} = K_{SS'}$ alapján, hogy

$$R_S^L R_{S'}^L = R_{SS'}^L \;. \tag{16.24}$$

Mindebből következik viszont:

$$\lambda_j(S)\lambda_j(S') = \lambda_j(SS') \;, \tag{16.25}$$

tehát

$$\lambda_j(S) = S^{y_j} \;. \tag{16.26}$$

Így látható, hogy a sajátértékek tényleg pozitívak és sajátos formájuk is van, mégpedig

$$\lambda_j = S^{y_j} \;. \tag{16.27}$$

A λ_j levezetett alakja, amint majd látni fogjuk, nagymértékben segít a leírás matematikai oldalának kiépítésében.

16.1.4 A fixpont körül linearizált renormálási csoport transzformáció paraméterei

A következőkben csak olyan esetekkel foglalkozunk amelyekben az $\hat{M}$ mátrix szimmetrikus[164], így csak jobboldali sajátvektorokkal és sajátértékekkel dolgozunk. Tanulmányozzuk a továbbiakban a

$$V' = K_S V \tag{16.28}$$

kifejezést a fixpont körül a következő módon:

$$V' = K_S V = V^* + R_S^L \delta V \ . \tag{16.29}$$

De δV a bázisvektorok szerint sorbafejthető

$$\delta V = \sum_j t_j e_j^J \ . \tag{16.30}$$

Az ezen kifejezésben megjelenő t_j tagokat nevezzük a linearizált renormálási csoport transzformáció paramétereinek[165].

Továbbá az

$$R_S^L e_j^J = \lambda_j e_j^J = S^{y_j} e_j^J \tag{16.31}$$

összefüggést felhasználva, és δV előbbi kifejtését alkalmazva

$$V' = V^* + \sum_j S^{y_j} t_j e_j^J \tag{16.32}$$

adódik, mely V'–nek V^* körüli, lineáris tagokig menő sorfejtésének felel meg.

Továbbmenőleg, δV–hez hasonlóan $\delta V'$-is sorbafejthető:

$$\delta V' = \sum_j t'_j e_j^J \ , \tag{16.33}$$

és mivel $V' = V^* + \delta V'$, kapjuk, hogy:

$$t'_j = t_j S^{y_j} \ . \tag{16.34}$$

A következőkben néhány fontos fogalmat rögzitünk.

---

[164]Amennyiben ez nem áll fenn (és ez csak különleges esetekben lép fel melyekkel itt nem foglalkozunk) a bemutatásra kerülő eredmények lényegében átmenthetőek, lásd [2]

[165]Elvileg δV felírásában az R_S^L-et kifeszítő lineáris tér tetszőleges bázisa felhasználható. Ez esetben is használatos a ,,paraméter” kifejezés. Ha azonban δV megadásakor, úgy mint (**??**)-ben, olyan bázist használunk amely R_S^L-et diagonalizálja, a t_j mennyiségeket szokásos még ,,skála”-paramétereknek is nevezni.

16.2 A releváns, irreleváns és marginális jellemzők, kodimenzió

Láttuk, hogy a számítás során az $S \to \infty$ határesetben kell V^*–ot megtalálnunk. A kapott képlet alapján V'–el közeledünk vagy távolodunk V^*–tól attól függően, hogy a sajátértékekben szereplő y_j kitevők pozitívak vagy negatívak. Ebből a szempontból, egy rögzített V^* esetében, beszélhetünk releváns, irreveláns és marginális paraméterekről, sajátértékekről és kitevőkről[166].

A V^* fixpont szempontjából relevánsnak nevezzük azon paramétereket (t_j mennyiségeket), melyek R_S hatására (az S növekedésével) eltávolítják V–t a V^*–tól, azaz a nekik megfelelő $\lambda_j = S^{y_j}$–ben $y_j > 0$. Továbbá, a t_j–hez tartozó $\lambda_j > 1$ sajátértékeket, vagy y_j kitevőket szintén „releváns” sajátértékeknek, vagy kitevőnek nevezzük[167].

Ha viszont $y_j < 0$ azaz $\lambda_j < 1$, akkor amint azt V' kifejezéséből is látjuk, K_S hatására (az S növekedésével[168]) V–vel közeledünk V^*–hoz. Ezen j értéknek megfelelő t_j paramétert irreleváns paraméternek nevezzük, továbbá $y_i < 0$ és $\lambda_j < 1$ irreleváns kitevő és sajátérték.

Ha $\lambda_j = 1$ (és így $y_j = 0$), akkor ez „marginális” sajátérték, y_j kitevő, a t_j pedig marginális paraméter. Például, a Wilson képlet szintjén $c' = c$ (azaz a $(\nabla\sigma)^2$ koefficiense), marginális paraméter[169]. A marginális tagok, a fixponttól mért távolságot önmagukban nem változtatják és csupán a tőbbi paraméterekkel együtt játszodnak szerepet[170].

A bemutatott fogalmak a sajátvektorokra is kiterjeszthetőek. Egy releváns, irreleváns vagy marginális λ_j sajátértékhez tartozó e_j^J-k releváns, irreleváns vagy marginális sajátvektorok[171]. Továbbmenőleg, mivel egy e_j^J sajátvektor a paramétertérben egy írányt jelöl, beszélünk releváns, irreleváns és marginális paramétertér-

[166] Itt az y_j „exponensekről” van szó, lásd [3]. Ez nem tévesztendő össze a kritikus exponens fogalmával.

[167] Az elnevezés történelmi jellegű, amelynek oka valójában a 16.5 és 16.6 paragrafusokban derül ki. A fixponttól távolító skálaparaméterek ugyanis azon paraméterek amelyek a kritikus fixpont (lásd később) körül érvényes termodinamikai potenciál szinguláris részére vonatkozó statikus-skála-„hipotézis”-t, illetve a korrelációs függvény skálázását megadó összefüggésekben explicit szerepet játszanak.

[168] Ezt hangsúlyozni azért kell, mert még a kritikus felületen is megtörténhet az, hogy a blokktranszformációnak alávetett Hamilton-operátornak megfelelő paramétertérbeli pont a kritikus fixpont különböző oldalaira mozog el, miközben a fixponttól mért távolsága lassan csökken [4]. Különlegesebb esetekre vonatkozólag lásd az előző fejezet utolsó paragrafusának megjegyzéseit.

[169] Lásd [3], második bekezdés

[170] Marginális paraméterek esetében általában a renormálási csoport transzformáció linearizált formája a viselkedés megitélésében nem elegendő, s így a sorfejtésben második rendig kell elmenni [5]. Bizonyos esetekben a marginális paraméterek logaritmikus korrekciókhoz kötöttek [6], vagy fixpont-vonalak megjelenését jelölik [7]. Az előbbi eset általában az alsó és felső kritikus dimenzió sajátja [8]. Az utobbi eset általában a nem-HTR tipusú fázisátalakulások bizonyos eseteiben észlelhetők amelyek topologikus jellegüek.

[171] Megjegyzendő, hogy ezeket mindig egymásra ortogonális formában használjuk

ben vett irányokról[172]. A (??) összefüggés értelmében ekkor megfigyelhető, hogy a blokktranszformáció nyomán nyert V' változásához kötött $\delta V'$ vektor vetíthető az e_j^J irányokra. Ennek megfelelően, egy releváns sajátvektor olyan irányt értelmez a paramétertérben melyen haladva, S növekedésével távolodunk a fixponttól. Mindez azért, mert ez esetben (??) értelmében $\delta V'$ változását egy releváns (t_j') paraméter határozza meg, így S növekedésével a $V' - V^*$ vektor hossza nő.

Ezzel ellentétben az irreleváns sajátértékek olyan paramétertérbeli irányokat definiálnak amelyek mentén közeledünk a fixponthoz. Ezek szerint azon egymásra ortogonális sajátvektorok amelyek irreleváns sajátértékekhez tartoznak feszitik ki a kritikus felületet. Mivel a kritikus fixpont ,,vegyes fixpont", értelemszerüen releváns sajátértékek is kell tartozzanak hozzá, hiszen a kritikus felületen kivűl a kritikus fixpont taszító. Ezek szerint a kritikus felületből való kilépést biztosító irányokat a releváns sajátértékek sajátvektorai határozzák meg. Az egymásra ortogonális releváns sajátvektorok száma határozza meg a kritikus felület kodimenzióját. A kodimenzió tehát a paramétertér dimenziója minusz a kritikus felület[173] dimenziójának a különbsége.

Hangsúlyoznunk kell, hogy a releváns, irreleváns és marginális jelzőknek mindig csak akkor van értelmük ha megadjuk a fixpontot amelyre vonatkoznak. Megtörténhet ugyanis, hogy egy bizonyos mennyiség releváns egy adott fixpontra nézve, de irreleváns más fixpontra nézve[174].

A kodimenzió lehetőséget ad a fixpontok osztályozására is. A zéró kodimenziós fixpont az a fixpont melynek egyetlen releváns sajátértéke sincs[175]. Ez egy olyan vonzó fixpont amely környezetéből, minden irányból, minden konfigurációs pontot magába vonz[176]. Egy ilyen fixpontnak külön neve van: gyüjtő (összehuzó) fixpont[177] A gyüjtő fixpontok (mivel nem kritikus fixpontok) nem fázisátalakulást jelölnek, hanem stabil, a tanulmányozott rendszerben létező[178] fázisokat. A csatolási állandók milyensége a gyüjtő fixpontnál jellemzi az illető fázist. Gyüjtő fixpont például az alacsonyhőmérsékleti fixpont[179].

Egy kodimenzióval rendelkező fixpont például a magashőmérsékleti fixpont. A különbséget az alacsonyhőmérsékleti fixponthoz képest az okozza, hogy külső tér jelenlétében a magashőmérsékleti fixpont másképp viselkedik mint $V^*_{T\to 0}$, mégpedig taszitó fixponttá vállik. A HTR esetében például ez az információ kapcsolható azon észrevételhez miszerint a rendparaméterrel konjugált külső tér mindig rendezett

[172]Lásd például [8].

[173]mint kritikus sokaság

[174]Lásd például [8]

[175]Ezt úgy kell érteni, hogy az illető fixpont körül lenearizált renormálási csoport mátrixának egyetlen sajátértéke sem releváns

[176]az S növekedésének irányába.

[177]Az elnevezés az angol ,,sink" terminologia tölem származó szabad forditása, [8], mivel magyar megfelelőjével a magyar szakirodalomban még nem találkoztam.

[178]általában rendezett fázisokról van itt szó, lásd [8]

[179]Amint a későbbiekben kiderül, a $h \neq 0$ körülmények között fennálló alacsonyhőmérsékleti fixpontokról van itt szó.

fázist indukál (azaz hoz létre). Példaadás végett megemlítjük, hogy a háromdimenziós Ising modellnek külső tér jelenlétében két ,,gyüjtő" fixpontja van[180], mely két alacsonyhőmérsékleti fixpontot jelent: ($h = +\infty, T = 0$) és ($h = -\infty, T = 0$). Ezen két fixpont azt mutatja, hogy pozitív vagy negatív külső térben minden hőmérsékleten a rendszerben zérótól különböző pozitív vagy negatív globális mágneses momentummal jellemezhető rendezett fázis van jelen. A ($T, h \neq 0$) paramétertér tetszőleges pontjából ekkor kiindulva, a renormálási csoport egyenletek az S blokknagyság növekedésével valamelyik gyüjtő fixpontba visznek bele attöl függően, hogy a külső tér milyen előjelű. Ezzel ellentétben, a magashőmérsékleti fixpont csak $h = 0$ esetben vonzó, és $h \neq 0$ egy releváns írányt definiál. Ez az írány adja a magashőmérsékleti fixpont egy kodimenzió értékét. Ezen fixpont ($h = 0$, $T = \infty$) pontban van és a paramétertér tetszőleges ($h = 0, T > T_c$) pontjából kiinduló áramlási görbét magába vonz. Infinitézimálisan kicsi h térre azonban az áramlási görbék valamelyik gyüjtő fixpontba áramlanak (a h előjelének megfelelően)[181].

Az egy kodimenzióval rendelkező fixpontoknak általános tulajdonsága, hogy a gyüjtő fixpontra nézve instabilok[182]. Azaz amennyiben ezen fixpontokból a releváns írányra vetületet adó írányba kilépünk, áramlási görbénk egy gyüjtő fixpontba visz (az S nővekedésével). Ezen fixpontok mégse kritikus fixpontok mert általános tulajdonságuk, hogy nem tartozik hozzájuk végtelen korrelációs hossz. Kétféle egy kodimenziós fixpont ismeretes. Az egyik a ,,folytonos" egy kodimenziós fixpont[183], mely jellemzője hogy áthaladva a fixponton minden makroszkopikus mennyiség folytonosan változik. Ilyen a magashőmérsékleti fixpont is. Ezen fixponttípus a rendszer egy fázisát jellemzi, mely viszont olyan fázis amely semmilyen módon nem köthető divergáló korrelációs hosszhoz. Ilyen fázis a rendezetlen magashőmérsékleti fázis melyet $V^*_{T\to\infty}$ jellemez.

Egy másik típusú egy kodimenziós fixpontot, a ,,diszkontinuitási" egy kodimenziós fixpontok jelölnek[184]. Egy releváns írányuk van, ennek írányába a gyüjtő fixpontokra instabilok[185]. Nem rendelhető divergens korrelációs hossz hozzájuk, valamilyen jellemző mennyiség[186] diszkontinuitásához kapcsolodnak és általában elsőrendű

[180] Lásd például [9]

[181] Megemlítjük, hogy a h jelenléte miatt akozott bonyodalmak pontos tárgyalása végett szokásos az ,,invariáns" sokaság fogalmának a bevezetése. A paramétertér $h = 0$ tartománya invariáns sokaság, mert benne lévén, K_S hatására továbbra is benne maradunk. Az invariáns sokaságon a magashőmérsékleti fixpont egy egyszerű vonzó (azaz az invariáns sokaságon releváns paraméterekkel nem rendelkező) fixpont.

[182] Lásd [9]

[183] Az angol elnevezése: continuity codimension one fixpoint.

[184] Angol elnevezésük: discontinuity codimension one fixpoints.

[185] Azaz ez írányba taszítóak, és a töllük eltávolodó áramlási görbék egy gyüjtő fixpontba futnak bele.

[186] A HTR esetében ez egy rendparaméter

fázisátalakulást jelőlnek[187]. Mivel $\xi \to \infty$ hiánya miatt kritikus tartomány hozzájuk nem tartozik, részletesen itt ezen fixpontokkal nem foglalkozunk.

Az elmondottak alapján látható, hogy egy kodimenzióig, nem találkozunk olyan fixponttal melyhez kapcsolodó korrelációs hossz divergáló lenne[188]. Így, a kodimenzió kettes értékétől felfele válhat a fixpont kritikussá[189]. A kritikus fixpont kettes kodimenzióval rendelkezik. A következő paragrafustól rá koncentrálunk.

16.3 A kritikus fixpont és a ν kritikus exponens

A továbbhaladás érdekében, még egy fontos fogalom matematikai tisztázása szükséges.

16.3.1 A kritikus fixpont fogalma

A kritikus fixpontra vonatkozólag eddig is több információt gyüjtöttünk össze. Tudjuk hogy a kritikus felület vonzó fixpontja, és tudjuk hogy kettes kodimenzió tartozik hozzá, azaz teljesen általánosan[190] két releváns sajátértékkel rendelkezik[191]. Tudjuk, hogy vegyes fixpont, azaz a kritikus felületről nézve (melyet az egymásra ortogonális irreleváns sajátvektorok feszítenek ki) vonzó jellegű, míg a kritikus felületen kívülről (azaz legalább egy irreleváns vektorra eső zérótól különböző vetülettel rendelkező vektor által meghatározott írányba) taszító jellegű.

Az összegyüjtött ismeretek alapján a kritikus fixpont matematikai definicióját szeretnénk megadni. Ezt fokozatosan tesszük meg, és legelöször a külső tér hiányában

[187] Például említettük, hogy külső tér jelenlétében folytonos fázisátalakulás (azaz másodrendű fázisátalakulás) nem létezhet. Ennek megfelelően például, a $h = 0, T < T_c$ körülmények között létező ferromágnes (mely általában a rendezetlen fázisból folytonos fázisátalakulással elérhető), $h \neq 0$, $T < T_c$ paramétertérbeli pontba átvíve olyan ferromágneses fázissá alakul amely csak elsőrendő fázisátalakulással érhető el $h \neq 0$ körülmények között. Ennek megfelelően a $h = 0, T < T_c$ paramétertartományból minden áramlási görbe a $(h = 0, T = 0)$ fixpontba folyik, de infinitézimális $h \neq 0$ hatására gyüjtő fixpontba kerülünk bele S növekedésével. Így a $(h = 0, T = 0)$ fixpont 1-kodimenzióval rendelkező diszkontinuitási fixpont, lásd [9]. Szokásos még a $h = 0, T < T_c$ invariáns tartomány részt diszkontinuitási vonalnak, vagy elsőrendű fázisátalakulási vonalnak nevezni, mert HTR esetében rajta áthaladva a rendparaméter ugrást szenved. Az 1-kodimenziós diszkontinuitási fixpont jelenlétét az jelzi, hogy $\lambda_h = S^d$, (Nienhuis-Nanenberg kritérium), miközben minden más magasabb kodimenziós fixpontnál $y_h < d$ (a $\lambda_h = S^{y_h}$ fogalmát lásd később).

[188] A pontosság kedvéért, ha a kodimenzió egy vagy zéró a korrelációs hossz érték a fixpontban zéró

[189] Megemlítjük, hogy kettes kodimenzió esetében is találunk olyan fixpontot amelyhez nem tartozik végtelen korrelációs hossz, lásd [9]. Ezen esetekkel itt nem foglalkozunk részletesen.

[190] Azaz $h \neq 0$ külső tér jelenlétében

[191] Azaz, a tanulmányozott kritikus fixpont körül linearizált renormálási csoport egyenlethez rendelt R_S^L mátrixnak két releváns sajátértéke van.

vett esetet tárgyaljuk.

A zéró külső tér esete:

A zéró külső tér esetében, a V^* fixpontot kritikus fixpontnak[192] nevezzük, ha a környezetében linearizált R_S^L transzformációnak egyetlen releváns sajátértéke létezik csupán, és így egyetlen releváns paramétere. Ezt

$$\lambda_1 = S^{y_1} \,, \quad y_1 > 0 \tag{16.35}$$

formában szokás jelölni. Továbbá, a sajátértékek y_i kitevőit csökkenő sorrendbe téve, az

$$y_1 > 0 > y_2 > y_3 > \ldots y_i > \ldots \tag{16.36}$$

összefüggéssorozat áll ekkor fenn. Megemlítjük, hogy szokásos λ_1 sajátértéket ,,termikus sajátértéknek” nevezni [10] és λ_t-vel jelölni.

Zérótól különböző külső tér esete:

Külső tér jelenlétében Hamilton-operátorunk egy új tagot fog tartalmazni és ezáltal paraméterterünk dimenziója egyel megnő. Ezt az esetet csak Zeeman taggal bővitett spinrendszerekre tárgyaljuk részletesen hiszen csak az eset szemléltetése a célunk[193]. A kritikus felület előző fejezetben megadott definiciója szerint $h \neq 0$ esetében a kritikus felületen kívül helyezkedünk el, tehát áramlási görbéink a blokknagyság növekedésével távolodnak a kritikus fixponttól. Ezáltal a $h \neq 0$ értéknek egy releváns paraméter kell megfeleljen. Mostmár csupán az a kérdés, hogy ezen releváns paraméter független e a $h = 0$ előbbi esetben már értelmezett termikus releváns paramétertől. A válasz erre a kérdésre: igen. Mindennek az az oka, hogy a Zeeman tag az egyedüli spin-változóban lineáris tag a Hamilton-operátorban és ezáltal a Kadanoff blokktranszformáció során semmilyen más taggal nem keveredik[194]. Mindez a 7.3 paragrafus gondolatmenetéből illetve a (7.51) összefüggésből is látszik, miszerint a blokktranszformáció elötti Zeeman tag h külső tér szorzófaktora mint csatolási állandó, a blokktranszformáció utáni Zeeman tag h' külső tér csatolási állandójába megy át úgy, hogy a h' kifejezésébe h lineárisan épül

[192] Szokásos a kritikus fixpontot a kritikus felületről (azaz a kritikus fixpont vonzási tartományáról) nézve stabil fixpontnak is nevezni.

[193] Az általánosítás ,,páros” és ,,páratlan” változók bevezetését igényli [10]. Lásd még a 16.4 paragrafust.

[194] Lásd például [10] és ugyanazon bibliográfiai adat 129-es oldala.

bele, az arányossági tényező pedig a blokknagyság hatványa, azaz

$$h' = hS^{y_h} = h\lambda_h \tag{16.37}$$

ahol λ_h a Hamilton-operátor többi csatolási állandójától független. Ezen összefüggésben a külső tér jelenlétéhez kapcsolt sajátértéket jelöltük λ_h-val kitevőjét pedig y_h-val. Szokásos a λ_h sajátértéket „mágneses” sajátértéknek is nevezni [10]. Megjegyzendő továbbá, hogy mivel a renormálási csoporttranszformáció során h más csatolási állandóval nem keveredik, a (**??**) összefüggésben $h \neq 0$ értéknek egy a többitől független és rögzített j összegzési változó érték felel meg, j_h. Ekkor a $j = j_h$-ra felírt (**??**) összefüggés pontosan a (**??**) egyenlőség. Ebből eredőleg tehát, (**??**, **??**, **??**) alapján, a tanulmányozott fixpont körül $h \neq 0$ esetében

$$\delta V' = t_1 S^{y_1} e_1^J + hS^{y_h} e_h^J + \sum_{j \geq 2} t_j S^{y_j} e_j^J \tag{16.38}$$

összefüggés teljesül. Kritikus fixpont esetében $h \neq 0$-ra a kritikus felületen kívül kell elhelyezkednünk és az S blokkméret növekedésével távolodnunk kell a kritikus fixponttól. Ehhez viszont kötelezően, $y_1 = y_t$-től függetlenül

$$y_h > 0 \tag{16.39}$$

kell fennáljon.

Tehát, ha a külső tér $h \neq 0$ van jelen két releváns sajátérték esetében lesz a fixpontunk kritikus. Ekkor a (**??**) és (**??**) összefüggések a következő képpen modosúlnak:

A két releváns sajátértékre vonatkozó összefüggés:

$$\begin{aligned} \lambda_t &= S^{y_t} \,, \qquad y_t > 0 \,, \\ \lambda_h &= S^{y_h} \,, \qquad y_h > 0 \,. \end{aligned} \tag{16.40}$$

Továbbá, a kitevőket csökkenő sorrendbe téve úgy, hogy y_t és y_h egymáshoz viszonyitott arányát nem rögzítjük

$$y_t, y_h > 0 > y_3 > y_4 > \ldots y_i > \ldots \,. \tag{16.41}$$

Így, $h \neq 0$ esetben a fixpont kritikus, ha (**??**) és (**??**) összefüggések fennállnak.

16.3.2 A korrelációs hossz szerepe a linearizált renormálási csoport transzformációban

A matematikai leírást közelebbről követve, tanulmányozzuk először a $h = 0$ esetet és elemezzük a következő konfigurációt: $y_1 = y_t > 0$; $y_2 < 0$; (így az esetleges többi $y_i < 0$, $(i > 2)$ is negatív).

Ekkor V'–nek (**??**)–al jelölt összefüggéséből kapott értéke (**??**) alapján

$$V' = V^* + t_t^{y_t} e_1^J + \mathcal{O}(S^{y_2}) \,, \tag{16.42}$$

ahol V^* feltételezésünk szerint kritikus fixpont. A felírt összefüggésből látszik, hogy amennyiben a fixpont nem kritikus, nincs kritikus felület. Ténylegesen ha a többi $y_{i\geq 2}$-vel együtt y_t-is negatív, szeparatrix nincs, azaz vegyes fixpontunk sincs és ekkor V^* „gyüjtő" fixpont és nem kritikus fixpont.

Rögzítve tekíntjük tehát y_t-et egy pozitív értékre. Ekkor a (**??**)–ben adott kifejezésből látható, hogy mivel $y_i < 0 \quad i \geq 2$–re, akkor V'–nek az $S \to \infty$ határteseteben vett viselkedését az első V^* utáni t_t–vel arányos tag határozza meg. Alapfeltételezésünk szerint $T = T_c$–ben rajta kell legyünk a kritikus felületen, azaz az $S \to \infty$ feltétel mellett a K_S transzformáció V-t V^*–ba viszi át. Mivel t_t releváns, azaz V^*–tól távolít, mindez csak úgy lehetséges, ha t_t paraméter a hőmérséklettől függ és értéke $T = T_c$-re zéró[195]. Feltételezve ekkor, hogy t_t sima függvénye T-nek, T_c körül vett Taylor sorfejtéséből az első vezető tagot megtartva $t_t \sim |T - T_c|$ ered és így $T = T_c$–ben $V' = V^*$ adódik[196]. Mindez azért, mert az $\mathcal{O}(S^{y_2})$ tagok, $S \to \infty$ határesetben zéróvá válnak $y_i < 0, (i \geq 2)$ miatt.

Így legyen

$$t_t = |T - T_c|K \tag{16.43}$$

ahol K itt egy konstans szám[197]. Ekkor $V' = K_S V$ transzformációnak a kritikus fixpont körül linearizált formájára a következő összefüggést kapjuk:

$$V' = V^* + K|T - T_c|S^{y_t}e_1^J + \mathcal{O}(S^{y_2})\ . \tag{16.44}$$

Tudjuk viszont, hogy T_c az a hőmérséklet, ahol a ξ korrelációs hossz végtelenné válik. Így $T - T_c$–t fizikailag ξ–vel kontrolláljuk, és

$$\xi \sim |T - T_c|^{-\nu} \tag{16.45}$$

írható fel mely egyben a ν kritikus exponens értelmezőképlete. Így

$$|T - T_c| \sim \frac{1}{\xi^{1/\nu}}\ , \tag{16.46}$$

azaz:

$$V' = V^* + K\frac{S^{y_t}}{\xi^{1/\nu}}e_1^J + \mathcal{O}(S^{y_2})\ . \tag{16.47}$$

A levezetett összefüggés adja meg a renormálási csoport transzformáció fixpont körül linearizált formája és a korrelációs hossz közötti kapcsolatot.

---

[195]Ezért nevezik λ_t-t termikus sajátértéknek

[196]Megemlítendő, hogy *a priori* a Taylor sorfejtés lineáris tagjának hiányát semmi sem indokolja

[197]Megemlítjük, hogy $(T - T_c)$ nem abszolút értékben vett tárgyalása lehetővé tenné a korrelációs hossz exponensének külön-külön T_c alatt és felett vett meghatározását. A két eredmény között azonban nincs különbség, azért számolunk itt $|T - T_c|$-vel.

16.3.3 A termikus releváns sajátérték és ν kapcsolata

A levezetett V'–re vonatkozó összefüggést vizsgálva, figyelembe kell vennünk, hogy S, úgy mint ξ, szintén egy hosszúság dimenziójú mennyiség. De a korrelációs függvények tanulmányozásából tudjuk, hogy $T - T_c \sim 0$ környezetében, minden hossz csak ξ viszonylatában releváns, azaz $T \to T_c$–ben csak (l/ξ) hossz–függésünk lehetséges csupán. Mindez ekkor azt jelenti, hogy

$$y_t = 1/\nu \tag{16.48}$$

egyenlőségnek kell fennállnia.

A levezetett eredmény a következő képpen is felfogható[198]: A (**??**) összefüggés egy T_c-hez közeli de a kritikus hőmérséklettel nem egyező hőmérsékleten olyan V' paramétertérbeli pontot határoz meg amely nincs a kritikus felületen. Ezen pontból kiindulva[199] az áramlási görbénk kezdetben a kritikus fixpont felé mozog, $T - T_c$ értékétől függően megközeliti V^*-ot, majd egy V^t ponttól kezdődőleg eltér V^*-tól és eltávolodik töle (általában egy magas- vagy alacsonyhőmérsékleti fixpont irányába). Pontosan ez az V^t „kitérési" pont[200] az amely lehetőséget ad a ν kritikus exponens meghatározására a következő képpen. A blokktranszformáció során, mint minden hossz, a korrelációs hossz is $\xi' = \xi/S$ formájában renormálodik. A V^t kitérési pontba akkor kerülünk be amikor a K_S nyomán csökkentett ξ' a rácsállandó nagyságát eléri, azaz ekkor

$$\frac{\xi}{aS} = C_1 \tag{16.49}$$

ahol C_1 egy $\mathcal{O}(1)$ nagyságrendű konstans és a a rácsállandó. Ha most a (**??**) összefüggést nézzük akkor látható, hogy ezen kifejezés szintjén a kitérési pontot akkor érjük el amikor az egyedüli releváns sajátvektor koefficiense szintén egy $\mathcal{O}(1)$ értékű mennyiséggé válik, azaz

$$K|T - T_c|S^{y_t} = C_2 \tag{16.50}$$

ahol $C_2 = \mathcal{O}(1)$ értékű konstans. Ekkor viszont (**??**)-ból S-et kifejezve és (**??**)-be helyettesítve

$$\xi = aC_1 \left(\frac{C_2}{K}\right)^{1/y_t} |T - T_c|^{-1/y_t} \tag{16.51}$$

ered. Tudjuk viszont hogy T_c közelében (**??**) összefüggés teljesűl amely (**??**)-el összehasonlítva (**??**) egyenlőséget visszaadja.

[198]Lásd például [11].

[199]Feltéve hogy a kiindulópont T-je közel áll T_c-hez, úgy ahogy az itt adott, hiszen K_S hatását R_S^L segítségével vizsgáljuk a tanulmányozott kritikus fixpont körül

[200]Az angol szakirodalomban „turning point"

Az elmondottak alapján (??) egyenlőségből a következő összefüggés ered

$$V'|_{S\to\infty} = K_S V|_{S\to\infty} = V^* + K\left(\frac{S}{\xi}\right)^{1/\nu} e_1^J + t_2 S^{y_2} e_2^J + \ldots \qquad (h=0)\,. \qquad (16.52)$$

Mindebből látható, hogy ha $T = T_c$, akkor $\xi = \infty$, és ez esetben a V'–ben lévő, V^* utáni első tag zéróvá válik, és

$$K_S V|_{S\to\infty} = V^* + t_2 S^{y_2} e_2^J + \ldots\,. \qquad (16.53)$$

Mivel $y_2 < 0$ az $S \to \infty$ határesetben az áramlási görbénk bevisz a kritikus fixpontba.

A levezetett összefüggésből megfigyelhető, hogy ha $y_2 > 0$ (tehát λ_t–en kívül, $h = 0$ esetében, még van egy releváns sajátértékünk), akkor $S \to \infty$–ben, V^*–tól eltávolodunk, és így V^* nem lesz megközelíthető. Azaz V^* nem lesz kritikus fixpont többé és ezáltal kritikus felület sem rendelhető hozzá[201]. Nem lévén kritikus felület $V(T_c)$ nincs min rajta legyen, tehát nincs kritikus jelenség, nincs divergáló korrelációs hosszal járó fázisátalakulás.

Megjegyzendő továbbá[202], hogy t_2 nem tekinthető $T - T_c$–vel arányosnak, mert ekkor újból ξ bevezethető, és $1/\nu = y_2$ adódna, ahol $y_t = y_1 \neq y_2$, igy ν határozatlan lenne.

16.3.4 A mágneses releváns sajátérték és η kapcsolata

Ezen paragrafusban a teljesség kedvéert az η kritikus exponens renormálási csoporton keresztül történő egyik elvi kiszámítási módját mutatjuk be (habár ebben a jegyzetben részletesen az RG keretei között ezen exponens közvetlen kifejezésével nem foglalkozunk).

A következőkben a $h \neq 0$ esetet tárgyaljuk és a mágneses sajátérték kifejezéséből indulunk ki. A (??) összefüggésben szereplő $h' = hS^{y_h}$ taggal a 7.3 paragrafusban foglalkoztunk részletesen a Kadanoff blokktranszformáció tanulmányozása során[203]. Ennek megfelelően megállapitottuk, hogy a korrelációs függvényre $T = T_c$-ben

$$G(\frac{l}{S}) = S^{2(d-y_h)} G(l) \qquad (16.54)$$

teljesül ahol l tetszőleges távolság. Bevezetve az $r = l/S$ hosszértéket, (??) alapján

$$G(r) = S^{2(d-y_h)} G(rS) \qquad (16.55)$$

[201] Az előbbi fejezetben elmondottak alaján itt nem foglalkozunk olyan speciális esetekkel melyekben a kritikus felületről a kritikus felületen található fixpont nem érhető el.

[202] Hangsúlyozzuk,hogy $h = 0$ esetben vagyunk

[203] Aláhuzzuk, hogy a 7.3 paragrafusban az itteni fogalomkörben bevezetett mágneses kitevőnek az x jelölés ($y_h = x$), míg a blokknagyságnak az S jelölés ($S = L$) volt használatos.

írható[204]. De mivel $T = T_c$-ben

$$G(r) \sim r^{-(d-2+\eta)} \tag{16.56}$$

összefüggés teljesül, ezt (??)-be helyettesítve, a

$$S^{2(d-y_h)} S^{-(d-2+\eta)} = 1 \tag{16.57}$$

egyenlőség ered. Ennek alapján

$$\eta = d + 2 - 2y_h, \quad \lambda_h = S^{y_h} , \tag{16.58}$$

tehát a mágneses sajátérték és az η kritikus exponens kapcsolata

$$\eta = d + 2 - 2\frac{\ln \lambda_h}{\ln S} \tag{16.59}$$

Megjegyzendő, hogy sok renormálási eljárással (a Wilson képlet is ilyen) a λ_h nem számolható. Ennek az az oka, hogy általában η értéke nagyon közel áll legtöbb esetbe zéróhoz, így értékét legtöbbször másodrendű járulékok adják meg[205].

16.4 A kritikus fixponthoz rendelt kritikus exponensek meghatározása

Az alábbiakban gyakorlatilag az előző két paragrafusban ismertetett információt foglaljuk össze sűrített formában, az alkalmazási lehetőségeket is kihangsúlyozva.

Az eddigi gondolatmenet világosan szemlélteti miért szükséges a kritikus fixpontot pontosan a bemutatott módon értelmezni. A $h = 0$ esetében a kritikus fixpontnak egyetlen releváns sajátértéke kell legyen. Ha ez nem áll fenn, maga a fixpont nem kritikus és így divergáló korrelációs hosszal járó fázisátalakulást nem jellemezhet. Ha $h \neq 0$, akkor két releváns mennyiségünk kell legyen ahhoz, hogy V^* kritikus fixpont legyen, hiszen ekkor a termikus sajátérték mellett a mágneses sajátérték is szükséges (mint releváns sajátértékek) úgy, hogy a többi sajátérték irreleváns maradjon. Így általánosan, a V^* kritikus mivoltát az határozza meg, hogy létezik e releváns y_t és y_h, és rajtuk kívül van e más releváns paraméter vagy nincs.

A továbbiakban foglaljuk össze, hogy az eddig bemutatott eljárást követve mit kell tennünk a renormálási egyenletek levezetése után kritikus fixpontok kimutatására és az általuk jellemzett fázisátalakulás kritikus exponenseinek kifejezése céljából:

a.) Linearizáljuk a K_S transzformációt a hipotetikus V^* fixpont körül, R_S^L mátrixát megkapva ezen művelet során.

[204] Lásd pl. [12].

[205] Az η pontos kifejezéséhez legtöbbször nem elegendő a rekurziós képletek fixpont körül vett linearizált formája, lásd [10].

b.) R_S^L sajátértékeit meghatározzuk[206] és sorrendbe tesszük őket. A $h = 0$ fennállásakor, azaz a külső tér jelenléte nélkül,

$$y_1 > y_2 > \ldots > y_i > \ldots \tag{16.60}$$

sorrendbe állítással, és

$$y_1 > 0\ , \quad y_2 < 0\ , \tag{16.61}$$

esetben, V^* kritikus fixpont. A V^* jelenléte igazolja, hogy a tanulmányozott rendszerben létezik egy fázisátalakulás melyhez divergáló korrelációs hossz rendelhető hozzá és amelyet a V^*, mint kritikus fixpont jellemez. Jelöljük a továbbiakban a releváns y_1 kitevőt y_t-vel ($y_1 = y_t$).

Ha $h \neq 0$ szintén meghatározzuk R_S^L sajátértékeit és sorrendbe állitanánk őket. Ekkor, mivel az y_t és y_h egymás közötti viszonya általában nem rögzíthető, első látásra bonyodalmat okoz, hogy két releváns sajátérték létezése esetében melyik a termikus és melyik a mágneses sajátérték. Ez viszont csak látszatprobléma, mert amint említettük, a Zeeman tag jelenléte esetében h' más Hamilton-operátor paraméterrel nem keveredik a blokktranszformáció során. Teljesen általánosan az eljárás az, hogy a Hamilton-operátor paraméterterét ketté választjuk páros és páratlan paraméterekre. A páratlan (páros) paraméterek azon paraméterek melyek a βH szorzatban a blokkváltozók olyan függvényeit szorozzák melyek előjelet váltanak (nem váltanak előjelet) az összes blokkolt változók előjelváltoztatásakor. Például, lokalizált spinrendszerekben a blokkolt változó a spin[207] és a Zeeman-tag páratlan paraméternek számító h-val szorzódik. A kölcsönhatási tagok páros számú spinváltozót tartalmaznak, így az őket szorzó csatolási állandók a paramétertér páros paramétereihez tartoznak.

A páros és páratlan változók renormálási csoport egyenletei nem keverednek egymással[208]. Ekkor R_S^L diagonalizálásában a páros és páratlan paraméterek sajátértékeinek meghatározása két különálló problémára szakad. A páros kitevők (jelöljük y_i^e) és páratlan kitevők (jelöljük y_i^o) külön-külön vett sorbaállításával

$$y_1^e > y_2^e > \ldots > y_i^e > \ldots \tag{16.62}$$

illetve

$$y_1^o > y_2^o > \ldots > y_i^o > \ldots \tag{16.63}$$

ered. Ekkor

$$y_1^e > 0\ , \quad y_2^e < 0\ , \quad y_1^o > 0\ , \quad y_2^o < 0 \tag{16.64}$$

[206] Amint a következő fejezetben látni fogjuk, technikai szempontból mindez úgy valósúl meg, hogy a jelölt, de ismeretlen fixpont értékeket is lehetőségünk van kifejezni.

[207] ez a dinamikus változója a Hamilton-operátornak

[208] Ezt az állítást explicit szemléltettük az y_h bevezetésekor olyan esetben amikor a Hamilton-operátor egyetlen páratlan tagot tartalmazott a Zeeman-tag formájában. A teljesen általános esetet részletesen itt nem tárgyaljuk, így feltételezzük a továbbiakban, hogy csak olyan rendszerekkel foglalkozunk melyekre ezen állítás fennáll. Az előforduló rendszerek elnyomó többsége ilyen, lásd [10] és [13].

fennállásakor lesz V^* kritikus fixpont, a termikus és mágneses sajátértékek kitevőit pedig

$$y_t = y_1^e\ , \quad y_h = y_1^o \tag{16.65}$$

összefüggések adják meg.

c.) Mindezek után a kritikus exponensek meghatározása következik. Ekkor $h = 0$ esetében felhasználjuk, hogy

$$\lambda_t = S^{y_t}\ , \tag{16.66}$$

tehát

$$y_t = \frac{\ln \lambda_t}{\ln S} = \frac{1}{\nu} \tag{16.67}$$

Mindezek szerint a ν kritikus exponens értéke tehát

$$\nu = \frac{\ln S}{\ln \lambda_t}. \tag{16.68}$$

Ha viszont $h \neq 0$ akkor tudjuk, hogy

$$\lambda_t = S^{y_t}\ , \quad \lambda_h = S^{y_h} \tag{16.69}$$

tehát

$$y_t = \frac{\ln \lambda_t}{\ln S}\ , \quad y_h = \frac{\ln \lambda_h}{\ln S} \tag{16.70}$$

és

$$y_t = \frac{1}{\nu}\ , \quad \eta = d + 2 - 2y_h\ . \tag{16.71}$$

Mindezek szerint a ν és η kritikus exponensek értékei

$$\nu = \frac{\ln S}{\ln \lambda_t}\ , \quad \eta = d + 2 - \frac{2 \ln \lambda_h}{\ln S}\ . \tag{16.72}$$

A renormálási csoport egyenleteken keresztül két kritikus exponens tudunk közvetlen úton kiszámítani. Olyan esetekben mikor a használt közelítések y_h meghatározását nem teszik lehetővé (a Wilson-féle közelítés is ilyen) $\eta = 0$ érték beállított, így szintén két kritikus exponens ismert. Ekkor, a többi kritikus exponens a skálatörvényeken keresztül meghatározható.

d.) A további kritikus exponensek levezetése a skálatörvények segítségével történik. Általában az első lépés a Fisher-összefüggés, mely a legbiztosabb híd $(\nu, \eta) \to (\alpha, \beta, \gamma, \delta)$ között, egyszerűen azért, mert a d dimenziótól független, és így esetleges számítástechnikai problémák kisebb mértékben befolyásolják:

$$\gamma = (2 - \eta)\nu. \tag{16.73}$$

A továbbiakban δ egy Buckingham–Gunton összefüggésből meghatározható:

$$\delta = \frac{d+2-\eta}{d-2+\eta} \tag{16.74}$$

Az α–t általában a közvetlenül számított ν–hez kötött összefüggésből fejezik ki:

$$\alpha = -\nu d + 2\,. \tag{16.75}$$

A β kritikus exponens mindezek után $\alpha + 2\beta + \gamma = 2$ skálatörvényből megkapható:

$$\beta = \frac{\nu}{2}(d-2+\eta). \tag{16.76}$$

Mindezek után a kritikus exponensek értékei alapján a rendszert egy jellemző univerzalitási osztályba sorolhatjuk. Az univerzalitási osztály fogalmára a későbbiekben még visszatérünk.

16.5 A kritikus pont környezetében vett általánosított homogenitás és a renormálási csoport kapcsolata

Az előbbi fejezet végén két közvetlenül levezetett kritikus exponensből kiindulva, a skálatörvények felhasználásával fejeztük ki a többi kritikus exponenst. Feltevődik viszont a kérdés, hogy a renormálási csoport keretei között létjogosult e ez a lépés vagy sem. A továbbiakban megmutatjuk, fogy a kritikus fixpont létezéséből kiindulva a statikus skála hipotézis[209] levezethető. Végeredményben ez természetes is, mert a kritikus tartomány és renormálási csoport közötti kapcsolat megvalosításának a skálainvariancia[210] szerves része.

16.5.1 A termodinamikai potenciál viselkedése a renormálási csoport transzformáció hatására

A renormálási csoport $V' = K_S V$ transzformációs képlet, amint említettük, rekurziv formában is megadható az egymásutáni K_S transzformációk alkalmazása során. Legyen ezáltal az l-edik renormálási csoport transzformáció után kapott V vektor $V^{(l)}$, a neki megfelelő Hamilton operátor $H^{(l)}$, állapotösszeg $Z^{(l)}$, termodinamikai potenciál (dimenzió nélküli kifejezésben) $\Phi^{(l)} = \phi^{(l)} N^{(l)}/\beta$ és blokk-változó $\sigma^{(l)}$, továbbá $N^{(l)}$ az l-edik blokk-transzformáció nyomán kapott blokkok száma. A renormálás ezen l-edik lépése után a következő összefüggések állnak fenn:

$$\phi^{(l)} = -\frac{1}{N^{(l)}} \ln Z^{(l)} \tag{16.77}$$

[209] Azaz a Φ termodinamikai potenciálra (pontosabban annak „szinguláris" részére) vonatkozó átalánosított homogenitási tulajdonság

[210] melyre a statikus skálahipotézis gondolata is alapult

ahol

$$Z^{(l)} = \sum_{\{\sigma^{(l)}\}} \exp\left[-\beta H^{(l)}(\sigma^{(l)})\right] = \mathrm{Tr}_{\{\sigma^{(l)}\}} \exp\left[-\beta H^{(l)}(\sigma^{(l)})\right] . \tag{16.78}$$

Megjegyzendő az is, hogy annak a valószínűsége, hogy a $\sigma^{(l)}$ blokk változók a konkrét $\{\sigma^{(l)}\}$ értékeiket felvegyék az l-edik RG transzformáció után kapott rendszerben

$$P(\{\sigma^{(l)}\}) = \frac{1}{Z^{(l)}} \exp\left[-\beta H^{(l)}(\{\sigma^{(l)}\})\right] . \tag{16.79}$$

Megváltoztatva az l indexet $(l+1)$-re, hasonló összefüggéseket írhatunk fel az $(l+1)$-edik renormálási transzformáció után is. Például az $(l+1)$-edik transzformáció után nyert rendszer egy csomópontjára eső termodinamikai potenciálja

$$\phi^{(l+1)} = -\frac{1}{N^{(l+1)}} \ln Z^{(l+1)} \tag{16.80}$$

ahol, S lévén a blokk-méret

$$N^{(l+1)} = \frac{N^{(l)}}{S^d} \tag{16.81}$$

Hasonlóan

$$Z^{(l+1)} = \sum_{\{\sigma^{(l+1)}\}} \exp\left[-\beta H^{(l+1)}(\sigma^{(l+1)})\right] = \mathrm{Tr}_{\{\sigma^{(l+1)}\}} \exp\left[-\beta H^{(l+1)}(\sigma^{(l+1)})\right] . \tag{16.82}$$

Mindezek után megfigyelhetők a következők. Kikötve, hogy a rendszert mindig olyan Hamilton-operátorral írjuk le amelyben a σ dinamikus változót nem tartalmazó additiv konstans nem szerepel[211], azaz az összes $\{\sigma^{(l)}\}$ értéket zéróra állítva be

$$H^{(l)}(\{0\}) = 0 \tag{16.83}$$

teljesül, (**??**) alapján

$$P^{(l)}(\{0\}) = \frac{1}{Z^{(l)}} \tag{16.84}$$

írható. Ekkor viszont a csomópontszámra normált termodinamikai potenciálok kifejezése a következő módon adható meg

$$\phi^{(l)} = \frac{1}{N^{(l)}} \ln P^{(l)}(\{0\}) \tag{16.85}$$

[211] Megfigyelhető, hogy a Wilson-féle képletben tulajdonképpen ez a lépés vezetett a K konstans renormálási csoport transzformáció utáni megjelenéséhez.

illetve, (??) kondiciót $(l+1)$-re is felhasználva

$$\phi^{(l+1)} = \frac{1}{N^{(l+1)}} \ln P^{(l+1)}(\{0\}) \,. \tag{16.86}$$

Ezen összefüggések mellett az is észrevehető, hogy $P^{(l+1)}(\{0\})$ kifejezhető $P^{(l)}(\{\sigma^{(l)}\})$ ismeretében egyszerüen úgy, hogy összegezzük az összes $P^{(l)}$ valószínűséget amely argumentumában szereplő $\{\sigma^{(l)}\}$ értékek együttesen mind $\{\sigma^{(l+1)}\} = \{0\}$ értékeket adnak[212]. Azaz, (??) egyenlőséget is felhasználva

$$P^{(l+1)}(\{0\}) = \sum_{\{\sigma^{(l+1)}\}=\{0\}} P^{(l)}(\{\sigma^{(l)}\}) = \frac{1}{Z^{(l)}} \sum_{\{\sigma^{(l+1)}\}=\{0\}} \exp\left[-\beta H^{(l)}(\{\sigma^{(l)}\})\right] \tag{16.87}$$

A kapott kifejezést (??)-be helyettesítve

$$\phi^{(l+1)} = -\frac{1}{N^{(l+1)}} \ln Z^{(l)} + \frac{1}{N^{(l+1)}} \ln \sum_{\{\sigma^{(l+1)}\}=\{0\}} \exp\left[-\beta H^{(l)}(\{\sigma^{(l)}\})\right] \tag{16.88}$$

egyenlőség ered. Ebben az első tag, (??) és (??) alapján $S^d\phi^{(l)}$. A második tag hasonlóan $-S^d g^{(l)}$ alakban felírható amennyiben bevezetjük a

$$g^{(l)} = -\frac{1}{N^{(l)}} \ln \sum_{\{\sigma^{(l+1)}\}=\{0\}} \exp\left[-\beta H^{(l)}(\{\sigma^{(l)}\})\right] \tag{16.89}$$

jelölést[213]. A kapott összefüggések alapján (??) a következőképpen adható meg:

$$\phi^{(l+1)} = S^d\left(\phi^{(l)} - g^{(l)}\right) \,. \tag{16.90}$$

A levezetett egyenlőséggel kapcsolatos néhány észrevételt mutatunk be a továbbhaladás elött a következő paragrafusban.

16.5.2 A renormálási csoport transzformáció mint egy részlegesen elvégzett állapotösszeg

Hozzá kell tennünk a bemutatott gondolatmenethez, hogy az elmondottak tükrében a RG transzformáció gyakorlatilag egy részben elvégzett Tr operációt jelent a kinduló rendszer állapotterén[214]. A szakirodalomban ezen lépés tárgyalása különböző féle képpen történik, ezért térünk ki rá itt. A (??)-ből kiindulva, a $\{\sigma^{(l)}\}$ szerinti összeget két lépésre bonthatjuk fel: Először a $\sigma^{(l)}$ változókat $\sigma^{(l+1)}$

[212]Ez gyakorlatilag egy $\sigma^{(l)}$ tagok szerinti összegezést jelent a felírt $\sigma^{(l+1)}$-re vonatkozó megkötés mellett.
[213]Hangsúlyozni szeretnénk, hogy (??) jobboldalán $\{\sigma^{(l)}\}$ szerinti összegezés szerepel a $\sigma^{(l+1)}$ blokkváltozók zéró értékének megkötésével.
[214]melyet aztán egy átskálázás követ

blokkokba tömörítve és ezen utóbbiak értékét rögzítve a rögzített blokkváltozókat visszaadó $\sigma^{(l)}$-k szerint összegzünk. Ezek után, ezt a müveletet a $\sigma^{(l+1)}$ halmaz összes lehetséges értékkére megtesszük, majd az így kapot eredményeket összegezzük. Ennek megfelelően[215]

$$\mathrm{Tr}_{\{\sigma^{(l)}\}} = \mathrm{Tr}_{\{\sigma^{(l+1)}\}}\mathrm{Tr}_{\{\sigma^{(l)}\}}\mathcal{P}(\{\sigma^{(l)}\},\{\sigma^{(l+1)}\}) \tag{16.91}$$

ahol a blokkváltozók előző fejezetben használt értelmezése szerint[216]

$$\mathcal{P}(\{\sigma^{(l)}\},\{\sigma^{(l')}\}) = \prod_{l'} \delta\left(\sigma^{l'} - \frac{1}{S^d}\sum_{l\in l'}\sigma^{l}\right) . \tag{16.92}$$

Megjegyezzük, hogy diszkrét σ változók esetében (**??**) egy Kronecker-delta függvényekből álló szorzat. Így, értéke egyetlen egy esetben 1, éspedig ha a jobboldalon megjelenő minden argumentum zéró. A többi esetben $\mathcal{P} = 0$ áll fenn. Ennek megfelelően, ha egy rögzített $\{\sigma^{(l)}\}$ konfigurációt választunk és e mellet $\mathcal{P}$-t az összes lehetséges $\{\sigma^{(l')}\}$ blokkváltozóra összegezzük, 1-et kell kapnunk eredményül:

$$\sum_{\{\sigma^{(l')}\}} \mathcal{P}(\{\sigma^{(l)}\},\{\sigma^{(l')}\}) = 1 . \tag{16.93}$$

Egy teljesen általános blokkváltozó bevezetésekor ezt az összefüggést mindig szem elött kell tartanunk. Tetszöleges esetre fennálló formáját (**??**) általánosításából kapjuk[217].

$$\mathrm{Tr}_{\{\sigma^{(l')}\}}\mathcal{P}(\{\sigma^{(l)}\},\{\sigma^{(l')}\}) = 1 . \tag{16.94}$$

Visszatérve (**??**) kifejezéshez, a renormálási csoport transzformációt mindig, mint részállaportösszeg, a (**??**) összefüggés $\mathrm{Tr}_{\{\sigma^{(l)}\}}P(\{\sigma^{(l)}\},\{\sigma^{(l+1)}\})$ komponensének $\exp\left[-\beta H^{(l)}(\{\sigma^{(l)}\})\right]$-re történő alkalmazása adja, amelyből az eredménynek megfeleltetett $\exp\left[-\beta H^{(l+1)}(\{\sigma^{(l+1)}\})\right]$ összefüggésen keresztül az $(l+1)$-edik blokktranszformáció és átskálázás utáni $H^{(l+1)}$ Hamilton-operátor kifejezését nyerjük. Összehasonlítva $H^{(l+1)}$ és $H^{(l)}$ csatolási állandóit a

$$V^{(l+1)} = K_S V^{(l)} \tag{16.95}$$

rekurziós képlet azonnal megkapható. Azonban a termodinamikai potenciál nyomonkövetése céljából pontosan meg kell mondani hogy mit tekíntünk Hamilton-operátornak.

---

[215] Diszkrét σ változók esetében továbbra is $\mathrm{Tr}_{\{\sigma\}} = \sum_{\{\sigma\}}$ áll fenn.

[216] Megjegyezzük, hogy teljesen általánosan a blokkváltozók értelmezése nem szükségszerűen (15.11) képlet alapján kell törtémjen, lásd később.

[217] Ez a forma folytonos σ változóra is helytálló. A pontosság kedvéért hozzá kell még tennünk, hogy $\mathcal{P} \geq 0$ kell teljesüljön és a blokkok megalkotása során a rendszer szimmetriáján változtatnunk nem szabad (pl. köbös rácsból kiindulva köbös rácsot kell kapnunk eredményül, $\sigma^{(l)}$ és $\sigma^{(l')}$ értékkészlete ugyanaz kell maradjon).

Az elmondottak megértése szempontjából tekíntsük először a következő esetet: Ha a Hamilton-operátorba a σ dinamikus változót nem tartalmazó additív konstansokat is beleszámolunk, a csatolási állandók vektora $\bar{V}^{(l)}$ lesz amely $V^{(l)}$-beli komponensek mellett az additív konstansot (jelöljük A_0-val) is tartalmazza[218]

$$\bar{V} = (A_0, V)\,. \tag{16.96}$$

Ekkor (??) nem áll fenn, az RG transzformációt[219]

$$\begin{aligned}&\exp\left[-\beta H^{(l+1)}_{N^{(l+1)}}(\{\sigma^{(l+1)}\},\bar{V}^{(l+1)})\right] = \\ &\mathrm{Tr}_{\{\sigma^{(l)}\}}\mathcal{P}(\{\sigma^{(l)}\},\{\sigma^{(l+1)}\})\exp\left[-\beta H^{(l)}_{N^{(l)}}(\{\sigma^{(l)}\},\bar{V}^{(l)})\right]\end{aligned} \tag{16.97}$$

adja és (??),(??) és (??) alapján

$$\begin{aligned}Z^{(l)}_{N^{(l)}} &= \mathrm{Tr}_{\{\sigma^{(l)}\}}\exp\left[-\beta H^{(l)}_{N^{(l)}}(\{\sigma^{(l)}\},\bar{V}^{(l)})\right] \\ &= \mathrm{Tr}_{\{\sigma^{(l+1)}\}}\exp\left[-\beta H^{(l+1)}_{N^{(l+1)}}(\{\sigma^{(l+1)}\},\bar{V}^{(l+1)})\right] = Z^{(l+1)}_{N^{(l+1)}}\end{aligned} \tag{16.98}$$

áll fenn, azaz az állapotösszeg változatlan. Mivel a $\bar{V}$-be szereplő Hamilton operátorból eredő additív konstans V-n nem változtat, (??) igaz marad, de a (??) hiánya miatt a (??)-ban szereplő g függvény[220] az f tagba olvad. Ezzel egyidőben, a sűrűségmátrix $\exp(-\beta H)/Z$ konstrukciója miatt A_0 jelenlétét nem érzi, így a termodinamikai átlagokban sem játszik szerepet az additív konstans. Megjegyzendő továbbá[221], hogy (??) transzformációs képlet konstansokat is termel, tehát az $A_0^{(l)}$ értéket $A_0^{(l+1)}$ értékre változtatja.

Ha viszont a Hamilton operátorban esetlegesen szereplő additív konstansot nem tartjuk $H^{(l)}$ hozzátartozójának, akkor $\bar{H} = A_0 + H$ és $\bar{Z} = \mathrm{Tr}\exp(-\beta\bar{H})$ jelölések bevezetésével a (??)-nek $\bar{H}$-ra való megtartása mellett $\bar{Z}$-re (??) teljesül. Ekkor $\bar{Z} = \exp(-\beta A_0)Z$ miatt

$$C^{(l+1)}Z^{(l+1)}_{N^{(l+1)}} = C^{(l)}Z^{(l)}_{N^{(l)}}\,, \tag{16.99}$$

ahol $C = \exp(-\beta A_0)$. Ez esetben tehát az RG transzformáció $\bar{H}$-ra (??) formában vett betartása mellett[222] a $Z^{(l)} = \mathrm{Tr}\exp(-\beta H^{(l)})$ állapotösszeg nem marad változatlan, multiplikatív konstansok jelenhetnek meg benne, mindannak ellenére, hogy (??) formáját változatlanul megőrzi. Ekkor (??) helyes marad, a termodinamikai átlagok pedig továbbra sem változnak. Megjegyezzük, hogy ez esetben, mivel $C^{(l)}$ a Hamilton-operátor σ-ban páros[223] rendű tagja, a külső térből eredő járulék[224] benne

[218] Az [1]-es bibliográfiai adat könyve ilyen
[219] A csomópontszám és csatolási állandókat is feltüntetjük a pontosság kedvéért
[220] A termodinamikai potenciál leválasztott nemszinguláris része, lásd később.
[221] Amint azt már az elöbbi fejezetben is hangoztattuk
[222] Ez itt azt jelenti, hogy (??)-ben H-t $\bar{H}$-val helyettesítjük.
[223] A zérórendű tag a változóban páros hatványon szereplő járulékot jelent.
[224] ez σ-ban páratlan rendű járulékot jelent

nem szerepelhet. Ezáltal megfigyelhető, hogy a renormálási csoporton keresztül levezetett állapotösszeg logaritmusának külső tér szerinti deriváltja, függetlenül A_0 jelenlététől változatlan marad[225]. Például

$$\frac{\partial}{\partial h^{(l+1)}} \ln Z^{(l+1)} = \frac{\partial}{\partial h^{(l+1)}} \ln Z^{(l)} \, . \tag{16.100}$$

Az elmondottak tükrében, (??) rögzítése esetében a renormálási csoport egyenleteket szolgáltató (??) típusú összefüggésbe mindig figyelembe kell venni az $A_0^{(l+1)}$ konstans tag megjelenését. Az energiaskála origójának megválasztásával elérhető, hogy egy adott l érték esetében $A_0^{(l)} = 0$ álljon fenn. Ekkor azonban általában $A_0^{(l+1)}$ konstans faktor az $(l+1)$ blokkolási transzformáció után megjelenik (lásd a K konstansot a Wilson-féle képletben). Ezért a (??) kondició $(l+1)$ esetre való alkalmazása megköveteli, hogy (??) renormálási csoport transzformációt megadó összefüggést[226]

$$\begin{aligned} & \exp(-\beta A_0^{(l+1)}) \exp\left[-\beta H^{(l+1)}_{N^{(l+1)}}(\{\sigma^{(l+1)}\}, V^{(l+1)})\right] \\ = \; & \mathrm{Tr}_{\{\sigma^{(l)}\}} \mathcal{P}(\{\sigma^{(l)}\}, \{\sigma^{(l+1)}\}) \exp\left[-\beta H^{(l)}_{N^{(l)}}(\{\sigma^{(l)}\}, V^{(l)})\right] \end{aligned} \tag{16.101}$$

formában kell modósítani. A megjelent $A_0^{(l+1)}$ konstansot a felírt egyenlőség alapján kifejezhetjük, ha a (??) baloldalába $\{\sigma^{(l+1)}\} = \{0\}$ értékeket helyettesítünk be és (??) összefüggést $(l+1)$-re használjuk

$$\begin{aligned} & \exp(-\beta A_0^{(l+1)}) = \\ & \mathrm{Tr}_{\{\sigma^{(l)}\}} \mathcal{P}(\{\sigma^{(l)}\}, \{\sigma^{(l+1)} = 0\}) \exp\left[-\beta H^{(l)}_{N^{(l)}}(\{\sigma^{(l)}\}, V^{(l)})\right] \end{aligned} \tag{16.102}$$

A kapott egyenlőséget logaritmálva és $g^{(l)} N^{(l)} = \beta A_0^{(l+1)}$ jelölést bevezetve[227] pontosan a (??) kifejezést kapjuk vissza. A (??)-ban szereplő g függvény eredete tehát pontosan az A_0 konstans.

A tanulmányozott eset állapotösszegének változására vonatkozó információ megszerzése érdekében (??) egyenlöség mindkét oldalára a $\mathrm{Tr}_{\{\sigma^{(l+1)}\}}$ blokkváltozókra vett összegezést elvégezve, figyelembe véve hogy $A_0^{(l+1)}$ nem függ a $\sigma^{(l+1)}$ változóktól, (??) jobboldala (??) vagy (??), illetve (??) alapján éppen $Z^{(l)}_{N^{(l)}}$, a (??) baloldala pedig (??) szerint $Z^{(l+1)}_{N^{(l+1)}}$ az A_0-t tartalmazó koefficienssel szorozva,

$$C^{(l+1)} Z^{(l+1)}_{N^{(l+1)}} = Z^{(l)}_{N^{(l)}} \, , \tag{16.103}$$

[225] Ezen észrevételnek a korrelációs függvény skálázásának tanulmányozásakor lesz jelentősége.

[226] Az egésznek itt akkor van értelme, ha nemcsak (??) rekurziós képleteket, hanem a termodinamikai potenciált is helyesen akarjuk nyomon követni

[227] Ezen jelöléssel jelezzük, hogy (??) jobboldalából láthatóan $A_0^{(l+1)}$ mennyiség $N^{(l)}$ és $V^{(l)}$ függvénye. A termodinamikai potenciál extenzív mivolta miatt $A_0^{(l+1)}$ az $N^{(l)}$-el arányos (lásd (??)-at is) és egy l-blokkra vett kifejezése $V^{(l)}$-től függ.

egyenlőség ered, ahol $C^{(l+1)} = \exp(-\beta A_0^{(l+1)})$ és (**??**)-hez képest $C^{(l)} = 1$. Látható tehát, hogy a renormálási csoport egyenletet (**??**)-re alapozva, a Hamilton-operátorra vonatkozó (**??**) feltétel betartása mellett az állapotösszeg (**??**)-nak megfelelően változik meg, továbbá a termodinamikai potenciál (**??**), a rekurziós képletek (**??**), illetve a $\ln Z$ külső tér szerinti deriváltaira vonatkozó (**??**) összefüggések helytállóak maradnak[228]. A termodinamikai átlagok kiszámitásakor az A_0 konstans ez esetben sem számít[229].

A szakirodalomban ,,vegyes" esetek is előfordulnak, amikor $H^{(l)}$ teljesíti a (**??**) kikötést, de $H^{(l+1)} = \bar{H}^{(l+1)}$ nem. Mindezek mellett a (**??**) rekurziós képletekbe csak a $H^{(l+1)}$-ben szereplő csatolási állandókat sorolják be. Ennek eredményeként az állapotösszeg az RG transzformáció során változatlan marad, (**??**) rekurziós képletek helytállóak, miközben a termodinamikai potenciál (**??**) formában tárgyalt[230].

16.5.3 A termodinamikai potenciál skálázása

Térjünk vissza a következőkben a (**??**) összefüggéshez. Itt a felső index gyakorlatilag azt jelzi, hogy a csatolási állandók $V^{(l+1)}$ vagy $V^{(l)}$ vektorától függ a felírt mennyiség. Ezek szerint, az l blokkokat a kiinduló csomópontoknak választva, és $l+1 = l'$ jelölést használva, a renormálási csoport transzformáció egy lépése után (**??**)-ből

$$\phi(\{V_i'\}) = S^d \left[\phi(\{V_i\}) - g(\{V_i\})\right] \tag{16.104}$$

összefüggés ered. Megjegyzendő, hogy (**??**) egy fixpont környezetében igaz. Levezetésekor ugyanis a kiinduló H Hamilton-operátorban additív konstansot nem vettünk figyelembe, a g megjelentetésével H' sem tartalmaz additív konstansot és fixpont közelében léve funkcionális formája sem változhat H-hoz képest. Az RG transzformáció során a rendszer jellemző szimmetriái megmaradtak, a σ és σ' értékkészlete is változatlan maradt, így a $\mathrm{Tr}_{\{\sigma\}} \exp(-\beta H)$ és $\mathrm{Tr}_{\{\sigma'\}} \exp(-\beta H')$ funkcionális formái sem változhatnak meg, azaz ϕ és ϕ' funkcionális formái is identikusak. Ez jut kifejezésre a (**??**) egyenlőségben mely explicit tartalmazza, hogy a funkcionális forma szempontjából ϕ és ϕ' kifejezése megegyezik és csupán a csatolási állandókat tartalmazó argumentumaik különbözőek.

A fixpont közvetlen közelében azonban a V' és V vektorok közötti kapcsolatot az R_S^L mátrix adja meg $V' = R_S^L V$ formában. Az R_S^L mátrixot diagonalizálva a λ_i sajátértékeket kapjuk meg, miközben R_S^L-et diagonális formára hozzuk. Ennek

[228] A Wilson-féle képlet, a [3] és [4]-es bibliográfiai adatok könyve ilyen.
[229] Ez az állítás minden RG transzformációs képlet esetében igaz.
[230] Például a [6] bibliográfiában szereplő könyv ilyen.

megfelelő bázisban a V' elemeit t'_j, a V elemeit pedig t_j-vel jelölve

$$\begin{pmatrix} t'_1 \\ t'_2 \\ \vdots \\ t'_n \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & \lambda_2 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \lambda_3 & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} t_1 \\ t_2 \\ \vdots \\ t_n \\ \vdots \end{pmatrix} \tag{16.105}$$

összefüggés áll fenn, melynek alapján az j index szerinti összegezés fennállása nélkül (lásd az (**??**) egyenlőséget is)

$$t'_j = \lambda_j t_j \tag{16.106}$$

teljesül[231]. A kapott összefüggést (**??**)-be helyettesítve és a $\lambda_i = S^{y_i}$ egyenlőségeket felhasználva

$$\phi(S^{y_1}t_1, S^{y_2}t_2, \dots, S^{y_i}t_i, \dots) = S^d\left[\phi(t_1, t_2, \dots, t_i, \dots) - g(t_1, t_2, \dots, t_i, \dots)\right] \tag{16.107}$$

adódik. Megfigyelhető viszont, hogy g az S blokkméret alatti skálák kiintegrálásából ered, így fizikai okokból kifolyólag semmi sem indokolja azt hogy a g csatolási állandóktól vett függésében (akár a kritikus ponton is) valamilyenfajta nem-analitikus viselkedés fellépjen. Ennek megfelelően a $g(t_1, t_2, \dots, t_i, \dots)$ függvényt amely a (**??**) egyenlőségnek a ϕ szempontjából vett inhomogén tagja az elemzésből elhagyjuk. Mindennek az az oka, hogy a kritikus tartományban vett viselkedés érdekel, és ez a termodinamikai potenciál szinguláris[232] viselkedését tartalmazó tagja által meghatározott[233]. Az elmondottak alapján a kritikus pont körül a termodinamikai potenciál szinguláris viselkedést ϕ tartalmazza, ami (**??**) alapján változatlan marad, tehát maga a K_S transzformáció új szingularitásokat nem visz be a kifejezésbe, azaz reguláris transzformáció kell legyen. A renormálási csoport transzformáció regularitása feltételezés. Az igazolt tény, hogy amennyiben a renormalizált blokk változók az eredeti dinamikus változók lineáris függvényei, a K_S transzformáció reguláris[234]. Amennyiben a blokkváltozókra ez nem áll fenn, a regularitást mindig feltételezzük.

Az elmondottaknak megfelelően tehát, az egycsomopontra eső termodinamikai potenciál szinguláris részére a fixpont körül

$$\phi(S^{y_1}t_1, S^{y_2}t_2, \dots, S^{y_i}t_i, \dots) = S^d \phi(t_1, t_2, \dots, t_i, \dots) \tag{16.108}$$

[231]Itt a degenerált sajátértékek fellépésének lehetőségét kizárjuk. A végeredmény szempontjából ez a feltétel a releváns sajátértékre fontos, és kritikus fixpontra amelyet tanulmányozunk fennáll.

[232]Szinguláris viselkedésen itt nem ϕ-ben megjelenő pólusokat kell érteni, hiszen tudjuk, hogy a termodinamikai potenciál folytonosan változik a fázisátalakulások során. Itt olyan tagokról van szó amelyek a termodinamikai potenciálban a t redukált hőmérséklet nem-egész számú hatványaként viselkednek $t \to 0$ határesetben.

[233]Ténylegesen, a kritikus exponensek kifejezése során a kritikus exponenset tartalmazó t hatvány mellett a többi járulék $t \to 0$ határesetben elhanyagolható.

[234]Lásd például [14] és az ott megadott bibliográfiai adatokat.

egyenlőség áll fenn. A fixpont viszont nem akkármilyen fixpont hanem kritikus fixpont. Ennek két kodimenzió értéke miatt, amint láttuk, általánosan két releváns sajátértéke van. Az irreleváns tagok S blokknagyság növekedésével (azaz a kritikus fixponthoz való esetleges közeledés során) zéróvá válnak, így (??)-ben T_c közvetlen közelében zéróra állíthatók be[235]. Ezek szerint (??) alapján, a kritikus fixpont közelében

$$\phi(S^{y_t}t_1, S^{y_h}t_h, 0, 0, \ldots) = S^d\phi(t_1, t_h, 0, 0, \ldots) \tag{16.109}$$

Tudjuk viszont hogy a két releváns paraméter elemzéséből, hogy $t_1 \sim t$ és $t_h \sim h$, tehát (??) alapján (az irreleváns paraméterek zéró értékeinek kiírását elhagyva)

$$\phi(S^{y_t}t, S^{y_h}h) = S^d\phi(t, h) \, . \tag{16.110}$$

Az $S^d = \lambda$, $a_t = y_t/d, a_h = y_h/d$ jelöléseket bevezetve, (??) pontosan a (6.37) egyenlőséggé alakul amely a statikus skála hipotézis néven[236] volt a jegyzetbe bevezetve, s amelyből a skálatörvényeket (pontosabban ezek első csoportját) levezettük.

Megjegyzendő, hogy (??) más formában is használatos. Mivel λ egy tetszőleges szám, konkrét értéke megválasztható például $1 = S^{y_t}t = t\lambda^{y_t/d}$ módon. Ebből viszont $(1/|t|)^{1/y_t} = S$ egyenlőség ered, amelyet (??)-ba visszahelyettesítve és $\phi(1, x) = \Psi(x)$ jelölést bevezetve

$$\phi(t, h) = |t|^{\frac{d}{y_t}}\Psi(h|t|^{-\frac{y_h}{y_t}}) \tag{16.111}$$

adódik. Ezen egyenlőségben szereplő Ψ függvény skálafüggvény nevet viseli. A (??) segítségével a fajhő kritikus exponens y_t ismeretében könnyen kifejezhető. Mivel $h = 0$-ra

$$\phi(t, 0) = |t|^{\frac{d}{y_t}}\Psi(0) \tag{16.112}$$

és a fajhő $C \sim \partial^2/\partial t^2\phi(t, 0) \sim |t|^{-\alpha}$ viselkedést mutat a kritikus tartományban,

$$\alpha = 2 - \frac{d}{y_t} \tag{16.113}$$

összefüggés teljesül, és külső tér hiányában ϕ skálázása

$$\phi(t) = |t|^{2-\alpha}\Psi(0) \tag{16.114}$$

formában is felírható[237].

[235] Amint az előző paragrafusban összegeztük, az irreleváns paraméterek amúgy sem lépnek be a kritikus exponens értékekbe, így elhagyásuk a kritikus exponens értékeket nem befolyásolja. A helyzet viszont bonyolultabb, mert fel kell téteJeznünk, hogy a termodinamikai potenciálba nem lépnek fel szingularitások az irreleváns változók zéró határértékében. Amennyiben ez fellép, ,,veszélyes" irreleváns változókról beszélünk, lásd [15]. Ezen esetekkel itt nem foglalkozunk.

[236] vagy általánosított homogenitási tulajdonság

[237] A jellemzést $|t|$-ben végeztük mert α értékében $T > T_c$ vagy $T < T_c$ feltétel változást nem hoz.

16.6 A korrelációs függvény skálázása a renormálási csoport tükrében

A skálatörvények második csoportjának levezetéséhez a korrelációs függvény skálázási összefüggése is szükséges[238]. E célból figyelembe vesszük, hogy nemlokális tér bevezetésével a Hamilton-operátorba (egy nemlokális Zeeman tag formájában)

$$H_h = H - \sum_r h(r)\sigma(r) \,, \tag{16.115}$$

a korrelációs függvény az állapotösszeg alapján meghatározható:

$$G(r_1 - r_2, H) = \left.\frac{\partial^2 \ln Z(\{h\})}{\partial h(r_1)\partial h(r_2)}\right|_{h(r)=0} = \frac{1}{Z}\mathrm{Tr}\left(\sigma(r_1)\sigma(r_2)\exp[-\beta H]\right) \,, \tag{16.116}$$

ahol $H = H_h(\{h(r) = 0\})$. Itt, a G kifejezésében jeleztük, hogy az átlagolás benne a H szerint történik. A renormálási csoport transzformáció viszont az állapotösszeget úgy változtatja[239], hogy az állapotösszeg logaritmusának külső tér szerinti deriváltai változatlanok maradnak (lásd (**??**) egyenlőséget). Így a renormálás elötti ($Z(h)$) és utáni ($Z'(h')$) értékek logaritmusának $h'(r_1')$ és $h'(r_2')$ szerint vett deriváltaira

$$\frac{\partial^2 \ln Z'(\{h'\})}{\partial h'(r_1')\partial h'(r_2')} = \frac{\partial^2 \ln Z(\{h\})}{\partial h'(r_1')\partial h'(r_2')} \tag{16.117}$$

egyenlőség áll fenn. Ebben a baloldal $G(r_1' - r_2', H') = G((r_1 - r_2)/S, H')$ az RG transzformáció utáni korrelációs függvény, amelyben figyelembe vettük, hogy a távolságok az S blokkmérettel $r' = r/S$ formájába renormálodnak, és $H' = K_S H$.

A jobboldal tárgyalása egy kicsit bonyolultabb[240]. Feltételezzük ebből a célból, hogy $h(r)$ pozició szerinti változása kicsi és csupán az S blokkméretnél sokkal nagyobb távolságokon változik mérvadóan[241]. A renormálást végrehajtva egy létező kritikus fixpont körül, a Hamilton-operátor funkcionális formájának megmaradása miatt[242], (**??**)-nak megfelelően

$$H_h' = H' - \sum_{r'} h'(r')\sigma'(r') \,, \tag{16.118}$$

kifejezést kapjuk eredményül, ahol mindent blokkváltozókra átrenormálva tüntettünk fel. Mivel $h(r)$ egy blokkméreten belül kicsit változik és a kölcsönhatásokat

[238] Ez vezet a hiperskálatörvényekhez melyekben a d dimenzió is szerepel. Ezt az összefüggést (**??**) formájában felhasználtuk az η meghatározására, tehát ezt is indokolni kell az RG keretei között

[239] Amint a 16.5.2 paragrafusban ezt megmutattuk, ez minden renormálási eljárás esetében helytálló.

[240] Lásd például [16].

[241] Lényegében $h(r)$ egy külső tér tag melyet lokálisan mi vezetünk be és teszünk zéróval egyenlővé a számítás végén, ezért ez a kikötés feltehető ha nincsenek hosszútávú kölcsönhatások jelen.

[242] Ne feledjük, kritikus fixpont közvetlen közelében, azaz kritikus tartományban vagyunk.

rövid hatósúgarúaknak tételeztük fel, egy r_1 kiinduló rácspont körüli renormálási transzformáció nyomán, az r'_1 blokkra melybe r_1 is beletartozik,

$$h'(r'_1) = S^{y_h} h(r_1) \tag{16.119}$$

fennállása továbbra is helytálló (lásd [16]). Pontosság kedvéért hangsúlyozzuk, hogy itt r_1 a tanulmányozott blokk középpontjának poziciója a kiinduló rácsban vett egységekben, mig r'_1 ugyanazon pozició a blokktranszformáció után vett renormált egységekben kifejezve. Ha a h-t egy blokkon belül állandónak választottuk, akkor (??) kiterjeszthető minden rácspontra ami az r_1 középpontú blokkban szerepel, s melyek pozicióit $r_1(l)$-el fogjuk jelölni:

$$h'(r'_1) = S^{y_h} h(r_1(l)) , \quad h(r_1(l)) = h(r_1) . \tag{16.120}$$

Most visszatérve (??) jobboldalához, vegyük figyelembe, hogy a kiinduló rácsot jellemző $Z(h)$-nak Tr alatti exponensébe a Zeeman-féle tag $\sum_r h(r)\sigma(r)$ formájú. Ezt blokkokra majd blokkon belüli változók összegére átalakítva, $h(r)$-et egy blokkon belül konstans értéken tartva, majd (??)-et alkalmazva

$$\begin{aligned} \sum_r h(r)\sigma(r) &= \sum_{r_1} \sum_{r_1(l)\in r_1} h(r_1(l))\sigma(r_1(l)) = \sum_{r_1} h(r_1) \sum_{r_1(l)\in r_1} \sigma(r_1(l)) \\ &= \sum_{r_1} S^{-y_h} h'(r'_1) \sum_{r_1(l)\in r_1} \sigma(r_1(l)) , \end{aligned} \tag{16.121}$$

összefüggés ered, amelyben minden egyes r_1 blokk-középpontnak (a kiinduló rács egységeiben megadva) egyetlen egy r'_1 blokk-középpont (a renormált egységekben megadva) felel meg, tehát $h'(r'_1) = h'(r'_1(r_1))$ áll fenn, amelyben $r'_1 = r_1/S$. Újból (??) egyenlőség jobboldalára tekíntve megfigyelhető ekkor, hogy (??) alapján, mivel két rögzített, egymástól nagy távolságra elhelyezett két pontban vett h' változó szerint deriválunk

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2}{\partial h'(r'_1)\partial h'(r'_2)} \exp\left(-\sum_r h(r)\sigma(r)\right) &= S^{-2y_h} \cdot \\ \sum_{r_1(l)\in r_1} \sigma(r_1(l)) \sum_{r_2(l)\in r_2} \sigma(r_2(l)) \exp\left(-\sum_r h(r)\sigma(r)\right) \end{aligned} \tag{16.122}$$

A (??) alapján, a (??) jobboldala

$$\frac{\partial^2 \ln Z(\{h\})}{\partial h'(r'_1)\partial h'(r'_2)} = S^{-2y_h} \langle \left(\sum_{r_1(l)\in r_1} \sigma(r_1(l)) \right) \left(\sum_{r_2(l)\in r_2} \sigma(r_2(l)) \right) \rangle_H \tag{16.123}$$

Itt a H index azt jelőli, hogy a kiinduló Hamilton-operátor szerint történik az átlagolás[243]. A kapott (??) egyenlőség jobboldalán a kezdeti rácsban felvett két

[243]Megjegyzendő, hogy (??) egyenlőség felírásakor, a deriválás végrehajtása után a $h' \sim h \to 0$ müveletet is végrehajtottnak tekíntjük már.

nagyon távoli blokk összes blokkon belüli változója szorzódik össze. Mivel egy blokkban S^d tag van, a szorzat S^{2d} darab

$$G(i,j;H) = G(r_1(l_i) - r_2(l_j), H) \tag{16.124}$$

kezdeti rácsban vett korrelációs függvényt tartalmaz. Amennyiben az r_1 és r_2 blokk-középpontok távolsága végtelen felé tart, a kapott $G(i,j;H)$ korrelációs függvények között nem lehet különbséget tenni, így minden (i,j)-re

$$G(i,j;H) = G(r_1 - r_2, H) \tag{16.125}$$

azaz, (**??**) konkrét formája

$$G(\frac{r_1 - r_2}{S}, H') = S^{2(d-y_h)} G(r_1 - r_2, H) \tag{16.126}$$

A skálatörvények második csoportjának levezetésére a korrelációs függvény blokk-transzformáció előtti és utáni formájának kapcsolatára[244] $h = 0$ esetben van szükség (lásd a 7.3 paragrafust). A (**??**) egyenlőségben már a külső tér zéró, így mostmár azt kell figyelembe vennünk, hogy kritikus fixpont közvetlen közelében vagyunk. A termodinamikai átlagolást (**??**)-ban már végrehajtottuk, így a korrelációs függvényekben explicit már csak V' és V komponensei szerepelnek. Ezt figyelembe véve, (**??**) helyett

$$G(\frac{r_1 - r_2}{S}, \{V_j'\}) = S^{2(d-y_h)} G(r_1 - r_2, \{V_j\}) \tag{16.127}$$

írható. Fixpont közelében lévén $V' = R_S^L V$ alkalmazható, amelyben R_S^L diagonalizált formáját használva és (**??**)-t figyelembe véve, a (**??**) összefüggés a következő formára hozható:

$$G(\frac{r_1 - r_2}{S}, \{S_j^y t_j\}) = S^{2(d-y_h)} G(r_1 - r_2, \{t_j\})\ . \tag{16.128}$$

Azonban a fixpontot kritikus fixpontnak tételeztük fel. Ekkor, amint már láttuk, $h = 0$ esetében egyetlen releváns paraméterünk van amely $t_1 \sim t$ és amely kitevője $y_1 = y_t$. Az irreleváns paramétereket a kritikus fixponthoz közvetlen közelében zéróra beállítva[245], (**??**) a $r_1 - r_2 = r$ átjelöléssel a következő formában írható fel

$$G(\frac{r}{S}, S^{y_t} t) = S^{2(d-y_h)} G(r,t)\ . \tag{16.129}$$

A kapott összefüggés azonban (7.56) egyenlőséggel egyezik amelyet a skálatörvények második csoportjának levezetésére használtunk fel a 7.4 paragrafusban. Látható

[244] Azaz G skálázására

[245] Fel kell itt tételeznünk a termodinamikai potenciál esetéhez hasonlóan, hogy a korrelációs függvény egyetlen irreleváns paraméter zéró határértékében sem viselkedik szingulárisan, azaz nincs „veszélyes” irreleváns paraméterünk jelen.

tehát, hogy rövid hatótávolságú kölcsönhatások jelenlétében és kizárva a veszélyes irreleváns paramétereket, a korrelációs függvény skálázása is levezethető a renormálási csoporton keresztül a kritikus fixpont létezéséből.

Említettük a skálatörvények ismertetésekor, hogy a G skálázása alapján nyert kritikus exponensek közötti összefüggésekbe a d dimenzió is bekerül, így a hiperskálatörvényeket kapjuk eredményül amelyek bizonyos esetekben nem kielégítettek. Ez általában akkor történik meg ha[246] hosszútávú kölcsönhatások vannak jelen, vagy veszélyes irreleváns paraméterek kerülnek be az irreleváns paraméter halmazba. Ez utobbi eset általában a felső kritikus dimenzió felett lép fel[247]. Így általában a hiperskálatörvények hosszútávú kölcsönhatások esetében, rendezetlen rendszerekben, vagy a felső kritikus dimenzió feletti dimenziókban sérülnek.

Az irreleváns paraméterekre visszatérve megjegyezzük, hogy speciális esetekben a termodinamikai potenciálok deriváltaiban is szerepet játszódhatnak[248].

A kritikus fixpont körül érvényesülő skálázási összefüggések tanulmányozása után meg kell említenünk, hogy bizonyos esetekben a paramétertér egy V^* fixpont körüli pontjából kiindulva a rendszerünk nem éri el a V^* körül létező $\mathcal{V}$ tartományt amelyen belül az adott fixpontra jellemző skálázási összefüggések teljesülnek. Ez olyan körülmények között jönhet például létre, amikor a paramétertérben több kritikus fixpont van jelen és legalább egyik közüllük multikritikus, azaz kodimenziója legalább három[249]. A jelenség ,,cross-over" néven ismeretes[250]. A teljesség kedvéért a következő paragrafusban röviden ezen esetet tárgyaljuk.

16.7 A skálázási viselkedés változás (A ,,Cross-over" típusú viselkedés).

Az eddigiek során a rendszer paraméterterében mindig egy kritikus fixpont jelenlétét téteteleztük fel és e körül vett viselkedést elemeztük. Vannak azonban olyan esetek amikor az alacsonyhőmérsékleti és magashőmérsékleti fixpontok vonzási tartományait bonyolultabb viselkedés választja el egymástól. Olyan példával élve fogjuk a jelenséget szemléltetni itt amelyben az alacsony- illetve magashőmérsékleti fixpontokat elválasztó szeparatrix több kritikus fixpontot tartalmaz. Ekkor, amint

[246] Lásd például [17]

[247] Ismeretesek olyan esetek is amelyekben rendezetlen rendszerekre veszélyes irreleváns paraméterek lépnek fel a felső kritikus dimenzió alatt is, lásd [17].

[248] Ilyen irreleváns paramétereket ,,konfluens"-nek nevezünk. Például, rendezetlen rendszerek mágneses szuszceptibilitásában fellépő szögpont szerű viselkedést konfluens szingularitás okozza, lásd [18]. Ilyen különleges esetekkel itt nem foglalkozunk.

[249] A jelenség akkor is felléphet ha a kritikus fixpont környezetében a folyamatos renormálásnak alávetett rendszert jellemző pontunk egy alacsonyhőmérsékleti gyüjtő fixpont hatáskörébe kerül. Ez az eset fordulhat elő például kis reziduális külső terek jelenléte esetében ha a kiinduló paramétertérbeli pontunk nincs elég közel a kritikus fixponthoz.

[250] Az angol szakkifejezést szabadon forditva ,,skálázási viselkedés változás"-ként fogalmazhatnánk.

már említettük, a szeparatrixon lévő és különböző fixpontokhoz tartozó kritikus felületek élesen el kell legyenek választva egymástól[251].

A jelenség megértése céljából tételezzük fel hogy egy H Hamilton-operátor V paraméterterében van egy V^* kritikus fixpontunk. Adjunk hozzá a H-hoz most egy új tagot mely csatolási állandója legyen w, operátoriális része pedig $\mathcal{H}$. Ezáltal Hamilton-operátorunk $H_w = H + w\mathcal{H}$-ra változik és paraméterterünk $W = (w, V)$ lesz, azaz egy dimenzióval bővül. Tételezzük azt fel, hogy ez esetben a V térben vett V^* kritikus fixpontnak a W paramétertérben egy $W_0^* = (0, V^*)$ fixpont felel meg amely kodimenziója a V^* kettes kodimenziójához képest eggyel megnő. Mindez azt jelenti, hogy a H-mellett $w\mathcal{H}$ figyelembevételével egy olyan új w paramétert vezettünk be, amely V^*-tól távolít, azaz egy új, w-vel arányos, a többitől független releváns paramétert ad hozzá V^* már meglévő két releváns paraméteréhez[252]. A W_0^*-nak van egy $\mathcal{V}$ környezete (melyre $w = 0$) amelybe bekerülve a V^*-ra mint kritikus fixpont környezetére jellemző skálázási viselkedést tapasztalunk[253]. Ha viszont $w \neq 0$, hiába indulunk W_0^* környezetéből, a W_0^*-hoz viszonyitott kezdeti közeledés után a w-vel arányos releváns paraméter hatása érvényesül, W_0^*-tól távolodni fogunk, és egy más (legtöbbször kritikus) fixpont fele vezetnek áramlási görbéink. Ez a jelenség a ,,cross-over". A w beiktatásával általában a rendszer W paraméterterében új kritikus fixpont vagy kritikus fixpontok jelennek meg[254], melyeket jelöljünk W_i^*-vel. A jelenség lényege abban áll, hogy ameddig az áramlási görbe W_0^* közelében tartozkodik a skálázási összefüggések a V^* kritikus fixpontnak megfelelő összefüggések lesznek, míg W_i^* közelében a skálázás az új kritikus fixpontra jellemző adatokat fogja tartalmazni[255]. A két fixpont között mozogva tehát a skálázási jellemzők megváltoznak. Ezért beszélünk itt skálázási viselkedés változásról.

Szemléltetés céljából vizsgáljunk egy olyan lokalizált háromdimenziós rácsban elhelyezkedő spinrendszert melynek H Hamilton-operátora Heisenberg tipusú (háromkomponensű vektoriális σ változót veszünk itt figyelembe) és kölcsönhatásai rövid hatósugarúak:

$$H = -\sum_{i,j} J(|r_i - r_j|)\sigma(r_i) \cdot \sigma(r_j) \tag{16.130}$$

Tételezzük fel továbbá az egyszerüség kedvéért, hogy a kölcsönhatás csupán a legközelebbi csomópontok között hat és a rendszer köbös tehát a $J = J(|r_i - r_j| = a) \neq 0$

[251] Például kétdimenziós paramétertérbe vetített szeparatrix görbe esetében az elválasztást egy taszító fixpont valósíthatja meg amely a teljes paramétertérben lehet például egy nagyobb mint két kodimenziós multikritikus fixpont.

[252] Ezért nő meg W^* kodimenziója a V^* kodimenziójához képest eggyel.

[253] A ,,cross-over" jelenségek tanulmányozása során ez esetben használatos az a kifejezés, hogy a rendszer eléri az aszimptotikus skála viselkedés tartományát.

[254] Olyan eset is ismert amelyben $w \neq 0$ gyüjtő fixpontokat indukál. Ez okozza például a kis reziduális terek által előidézett ,,cross-over" jelenséget, lásd [19].

[255] Ezen azt kell érteni, hogy például a termodinamikai potenciál szinguláris részére felírt általánosított homogenitási tulajdonságot kifejező összefüggésben szereplő konstansok, mint például y_t, megváltoznak.

az egyedüli nemzéró csatolás, ahol a a rácsállandó. Ezen egyszerüsítés során, külső tér hiányában, az egyszerű szemléltetés céljából paraméterterünk dimenzióját egyre csökkentettük. Legyen ez esetben a V vektor egyetlen komponense $V_1 \sim T/J$.

Egy ilyen rendszernek $h = 0$ esetében a $V^*_{T\to 0}$ alacsonyhőmérsékleti és $V^*_{T\to\infty}$ magashőmérsékleti vonzó fixpontjai mellett egy V^* kritikus fixpontja van[256] (a Heisenberg fixpont) mely a paramágnes–ferromágnes fázisátalakulást jelzi. A V^* környezetében a termodinamikai potenciál szinguláris részére vonatkozó skálázási összefüggés (**??**)-nak megfelelően és $h = 0$-ra

$$\phi(t) = S^{-d}\phi(tS^{y_t^H})\,. \tag{16.131}$$

Ezen összefüggésben, az y_t^H termikus kitevőn egy felső indexben jeleztük, hogy a Heisenberg fixpont körüli kritikus viselkedés jellemzőit hordozza.

Adjunk a következőkben a (**??**) hamilton operátorhoz egy $w\mathcal{H}$ járulékot egy uniaxiális anizotropikus tag formájában

$$H_w = H - w\sum_i [\sigma^z(r_i)]^2 \tag{16.132}$$

A Hamilton-operátor új tagja lokális, z irányba mutató anizotrópia jelenlétét tükrözi, amely megpróbálja az egyedi csomópontokon a σ vektorokat a z tengely írányába beállítani. Ha w pozitív és értéke elég nagy, a H_w-vel adott rendszer alapállapotenergiája úgy lesz a legkisebb, ha minden σ változó a z tengely írányába áll be. Ez a rendezett fázis egy Ising-ferromágnes. A paramágnes-Ising ferromágnes fázisátalakulást ekkor a $W = (w, V)$ paramétertérben egy W_I^* kritikus fixpont (az Ising fixpont) fogja leírni. A $(w, V \sim T)$ paramétertérben a W_I^* kritikus fixpont valahol az ox tengelynek választott $V \sim T$ tengely felett helyezkedik el $w > 0$ tartományban. A V-térben vett Heisenberg kritikus fixpont a W paramétertérben az $0x$ tengelyen elhelyezkedő W_0^* fixpontban található. Ezen fixpont trikritikus pont, kodimenziója három[257], hiszen egy új

$$t'_w = t_w S^{y_w^H} \tag{16.133}$$

releváns paramétere van, ahol $t_w \sim w$, és mivel w hatása W_0^*-hoz képest taszító, $y_w^H > 0$. Itt felső indexben jelöltük hogy a kitevő a Heisenberg fixpontra nézve releváns sajátértékhez tartozik.

Abban az esetben ha $w < 0$ és abszolút értéke elég nagy, a rendszer energiája nagyon megnőne ha a σ változók a z tengely írányába állnának be. Ezért alapállapotban minden σ változó az $x0y$ síkban van. Ez szintén egy rendezett fázis amelybe a paramágneses rendezetlen fázisból való átmenetet a W_{XY}^* kritikus fixpont

[256] Nyilvánvalóan V^* kritikus fixpont kritikus felülete egy többdimenziós paramétertérben van, amelybe V_1 mellett például a másodszomszéd kölcsönhatások is beletartoznak s melyeket ferromágneses típusúaknak kell tekíntenünk. Itt viszont egy multikritikus pont körüli viselkedést szeretnénk kiemelni, ezért ezen aspektusoktól eltekíntünk.

[257] Ez az állítás $h \neq 0$ általános esetre vonatkozik.

jellemzi. Ez a kritikus-fixpont a W paramétertér $(w < 0, V > 0)$ alsó félsíkjában helyezkedik el.

Az elmondottaknak megfelelően a W paramétertérben a magashőmérsékleti és alacsonyhőmérsékleti viselkedést olyan szeparatrix választja el egymástól amelyen három fixpont található. Ezek közül kettő kritikus fixpont (W_I^* a $w > 0$ félsíkban és W_{XY}^* a $w < 0$ félsíkban) és egy trikritikus fixpont (W_0^* a V_1 tengelyen, $w = 0$ mellett a $V_1 = V_1^*$ pontban). A szeparatrix a $W = (w, V_1)$ kétdimenziós paramétertérben egy, a W_I^*, W_{XY}^*, W_0^* pontokat tartalmazó görbe, amelyen két kritikus ,,felület" helyezkedik el. A görbe $w > 0$ része a W_I^*, a $w < 0$ része pedig a W_{XY}^* fixpontok kritikus ,,felülete". A két kritikus felületet egymástól élesen elválasztja a W_0^* fixpont amely a (w, V_1) térben teljesen taszító.

Amint azt a (??) levezetésekor láttuk a termodinamikai potenciál szinguláris részének skálázási összefüggésébe a kritikus fixpont körül az illető fixpont releváns paraméterei lépnek be. Ennek megfelelően, W_0^* környezetében, (??) figyelembevételével és $h = 0$ esetben, (??) a következő képpen módósúl

$$\phi(t, w) = S^{-d}\phi(tS^{y_t^H}, wS^{y_w^H}) \tag{16.134}$$

Ebben a kifejezésben azonban S egy tetszőleges 1-nél nagyobb pozitív szám. Értékét $tS^{y_t^H} = 1$ szerint választva, ebből a blokkméretet kifejezve majd (??)-be visszahelyettesítve[258]

$$\phi(t, w) = |t|^{\frac{d}{y_t^H}}\phi(1, w|t|^{-\frac{y_w^H}{y_t^H}}) \tag{16.135}$$

ered. Bevezetve ekkor a $\Psi(x) = \phi(1, x)$ és $\psi = y_w^H/y_t^H$ jelöléseket (??) egyenlőséget a következő formába írhatjuk fel

$$\phi(t, w) = |t|^{\frac{d}{y_t^H}}\Psi(w|t|^{-\psi}) \tag{16.136}$$

A tanulmányozott esetben a W_0^* környezetében fellépő ,,cross-over" folyamatot (??) írja le. A Ψ függvény, úgy mint (??) esetében a ,,skálafüggvény". Szokásos továbbá a ψ kitevőt ,,cross-over" exponensnek nevezni. Megfigyelhető továbbá, hogy mivel (??) jobboldali részének argumentumában szereplő mindkét paraméter releváns, $\psi > 0$ áll fenn. Az α_H kritikus exponenset bevezetve (??) egyenlőség alapján[259], (??) a következő formára írható

$$\phi(t, w) = |t|^{2-\alpha_H}\Psi(w|t|^{-\psi}) \tag{16.137}$$

[258] A számolást $|t|$ szerint végezzük mert általában elvi különbség $T > T_c$ illtve $T < T_c$ között nincs habár a bevezetésre kerülő Ψ skálafüggvény formája megváltozhat. Itt T_c a szeparatrixon lévő kritikus hőmérsékletet jelenti.

[259] Itt a H index jelzi, hogy a Heisenberg fixpont kritikus exponenséről van szó.

Összehasonlítva (??)-at a (??) egyenlőséggel látható, hogy a Heisenberg fixpontra jellemző skálaviselkedést csak $|t|^{-\psi} << 1$ esetében kapjuk vissza[260]. Ekkor ugyanis $\phi(t,w) \simeq |t|^{2-\alpha_H}\Psi(0)$, azaz pontosan olyan mintha a V^* kritikus fixpont közelében lennénk és w nem volna jelen. Ezzel ellentétben, ha $|w||t|^{-\psi} >> 1$, a $\phi(t,w)$ függvény $|t|$ szerinti viselkedése teljesen megváltozik, nem lesz többé a Heisenberg fixpontnak megfelelő, és w előjelének függvényében vagy az Ising fixpont ($w > 0$) vagy az XY fixpont ($w < 0$) jellemzőit várjuk visszakapni[261].

A skálázási viselkedésben tapasztalt átmenet $x = |w||t|^{-\psi} \simeq 1$ környékén történik. Ennek alapján

$$t_\psi = |w|^{\dfrac{1}{\psi}} \tag{16.138}$$

mennyiséget szokásos ,,cross-over" hőmérsékletnek nevezni[262]. Megfigyelhető, hogy az x változó t-nek csökkenő függvénye, tehát $|t| >> t_\psi$ eredményezi a Heisenberg viselkedést a skálázásban. Ha $|w|$ kicsi, t_ψ egy nagyon kicsi redukált hőmérsékletet jelent általában. Azonban $|t| << t_\psi$-re, például $w > 0$ esetében (??)-ban Ising típusú viselkedést tapasztalunk[263].

Általánosan, ha egy V^* kritikus fixpont már meglévő két t és h-val arányos releváns paraméterei mellett különböző $w_i\mathcal{H}_i$ új járulékok Hamilton-operátorba való bevezetésével új releváns t_{w_i} paraméterek jelennek meg melyek száma p (azaz $i = 1,2,...,p.$), az új $W = (w_1,...,w_p,V)$ paramétertérben a V^*-nak megfelelő W_0^* fixpont $(p+2)$-kritikus fixponttá változik és $(p+2)$ kodimenziója van. Mindenen egyes új releváns paraméterhez egy-egy ,,cross-over" exponens vezethető be $\psi_i = y_{w_i}/y_t$ módón, ahol $y_{w_i} > 0$. Ekkor (??),(??) alapján a W_0^* közelében, a releváns tagokat feltüntetve

$$K_S W = W_0^* + t_1 S^{y_t} e_1^J + t_h S^{y_h} e_2^J + \sum_{j=3}^{p+2} t_{w_j} S^{y_{w_i}} e_j^J + \ldots \tag{16.139}$$

egyenlőség áll fenn. A tetszőleges S blokkméretet $tS^{y_t} = 1$ szerint választva, innen S-et kifejezve és (??)-be visszahelyettesítve

$$K_S W = W_0^* + e_1^J + t_h|t_1|^{-\nu y_h} e_2^J + \sum_{j=3}^{p+2} t_{w_j}|t_1|^{-\psi_i} e_j^J + \ldots \tag{16.140}$$

egyenlőség ered, ahol $\nu = 1/y_t$ további $\psi_i = y_{w_i}/y_t$ a w_i által létrehozott új releváns paraméter ,,cross-over" exponense. A ,,cross-over" exponens tehát úgy is felfogható, hogy megmutatja az áramlási görbék W_0^* körüli viselkedésében mennyire lényeges a

[260] Feltételezzük itt, hogy $|w|$ értéke kicsi

[261] Mindez egy részletesebb elemzés keretei között igazolható módon meg is történik.

[262] Megjegyezzük, hogy t_ψ egy nagyságrendi érték csupán és így egy nagyságrendi hőmérséklet tartományt jelöl nem egy éles elhatároló T értéket.

[263] Részletes bemutatás érdekében lásd például [20].

t_{w_i} paraméter hatása a $t_1 \sim t$ termikus paraméter hatásához képest. Látható, hogy minél kisebb t_1, annál fontosabb a t_{w_i} jelenléte. A t_{w_i} hatása W_0^* körül lényegessé válik ha $t << t_{\psi_i}$ ahol az i változóhoz tartozó ,,cross-over" hőmérsékletet $t_{w_i}|t|^{-\psi} = 1$ egyenlőség adja[264].

Megjegyezzük, hogy a ,,cross-over" tulajdonság legtöbbször kis reziduális külső terek, anizotropiák, rendezetlenség és hosszú hatósugarú kölcsönhatások fellépése esetében tapasztalhatók[265].

A következő fejezetben a Wilson-féle képleten keresztül példázzuk a kritikus exponensek kiszámítását.

16.8 Szakirodalmi jegyzék 16.

[1] N. Goldenfeld, *Lectures on Phase Transitions and the Renormalization Group*, Frontiers in Physics, Vol. 85., Addison-Wesley Publishing Co., 1992, 244 oldal és ugyanezen oldalon az 5-ös lábjegyzék.

[2] N. Goldenfeld, *Lectures on Phase Transitions and the Renormalization Group*, Frontiers in Physics, Vol. 85., Addison-Wesley Publishing Co., 1992, 255 oldal.

[3] Shang-keng Ma, *Modern Theory of Critical Phenomena*, Frontiers in Physics: A Lecture Note and Reprint Series, Vol. 46., 179 oldal.

[4] J. J. Binney, N. J. Dowrick, A. J. Fisher, M. E. J. Newman, *The Theory of Critical Phenomena, An Introduction to the Renormalization Group*, Oxford Science Publication, Clarendon Press, Oxford, 1995, 124 oldal, 6-os lábjegyzék.

[5] J. J. Binney, N. J. Dowrick, A. J. Fisher, M. E. J. Newman, *The Theory of Critical Phenomena, An Introduction to the Renormalization Group*, Oxford Science Publication, Clarendon Press, Oxford, 1995, 121 oldal, 2-es lábjegyzék.

[6] J. Cardy, Scaling and Renormalization in Statistical Physics, Cambridge Lecture Notes in Physics Vol. 5., Eds. P. Goddard, J. Yeomans, Cambridge University Press, 1996, 103 oldal.

[264] Felhasználtuk itt, hogy $t_1 \sim t$ áll fenn.
[265] Lásd a Gauss-fixpont környezetében vett elemzést is a következő fejezetben.

[7] J. Cardy, Scaling and Renormalization in Statistical Physics, Cambridge Lecture Notes in Physics Vol. 5., Eds. P. Goddard, J. Yeomans, Cambridge University Press, 1996, 114 oldal.

[8] N. Goldenfeld, *Lectures on Phase Transitions and the Renormalization Group*, Frontiers in Physics, Vol. 85., Addison-Wesley Publishing Co., 1992, 246 oldal.

[9] N. Goldenfeld, *Lectures on Phase Transitions and the Renormalization Group*, Frontiers in Physics, Vol. 85., Addison-Wesley Publishing Co., 1992, 247 oldal.

[10] J. J. Binney, N. J. Dowrick, A. J. Fisher, M. E. J. Newman, *The Theory of Critical Phenomena, An Introduction to the Renormalization Group*, Oxford Science Publication, Clarendon Press, Oxford, 1995, 130 oldal.

[11] J. J. Binney, N. J. Dowrick, A. J. Fisher, M. E. J. Newman, *The Theory of Critical Phenomena, An Introduction to the Renormalization Group*, Oxford Science Publication, Clarendon Press, Oxford, 1995, 126 oldal.

[12] J. J. Binney, N. J. Dowrick, A. J. Fisher, M. E. J. Newman, *The Theory of Critical Phenomena, An Introduction to the Renormalization Group*, Oxford Science Publication, Clarendon Press, Oxford, 1995, 134 oldal.

[13] N. Goldenfeld, *Lectures on Phase Transitions and the Renormalization Group*, Frontiers in Physics, Vol. 85., Addison-Wesley Publishing Co., 1992, 252 oldal.

[14] J. J. Binney, N. J. Dowrick, A. J. Fisher, M. E. J. Newman, *The Theory of Critical Phenomena, An Introduction to the Renormalization Group*, Oxford Science Publication, Clarendon Press, Oxford, 1995, 142 oldal.

[15] N. Goldenfeld, *Lectures on Phase Transitions and the Renormalization Group*, Frontiers in Physics, Vol. 85., Addison-Wesley Publishing Co., 1992, 254 oldal.

[16] J. Cardy, Scaling and Renormalization in Statistical Physics, Cambridge Lecture Notes in Physics Vol. 5., Eds. P. Goddard, J. Yeomans, Cambridge University Press, 1996, 50 oldal.

[17] J. Cardy, Scaling and Renormalization in Statistical Physics, Cambridge Lecture Notes in Physics Vol. 5., Eds. P. Goddard, J. Yeomans, Cambridge University Press, 1996, 52 oldal.

[18] N. Goldenfeld, *Lectures on Phase Transitions and the Renormalization Group*, Frontiers in Physics, Vol. 85., Addison-Wesley Publishing Co., 1992, 279 oldal.

[19] N. Goldenfeld, *Lectures on Phase Transitions and the Renormalization Group*, Frontiers in Physics, Vol. 85., Addison-Wesley Publishing Co., 1992, 271 oldal.

[20] J. Cardy, Scaling and Renormalization in Statistical Physics, Cambridge Lecture Notes in Physics Vol. 5., Eds. P. Goddard, J. Yeomans, Cambridge University Press, 1996, 70 oldal.

17 A Wilson-féle képlet alkalmazása

A következőkben azt mutatjuk be, hogyan is működik ez a formalizmus a Wilson-féle képlet esetében.

17.1 A (σ^2, σ^4) modell

Válasszunk egy egyszerű kölcsönhatási operátort:

$$U(\sigma) = a_2\sigma^2 + a_4\sigma^4 \ . \tag{17.1}$$

Ezt a modellt a szakirodalomban egyszerűen (σ^2, σ^4) elméletnek nevezik, ugyanis amint említettük, a Hamilton-operátorban megjelenő lokális ,,tér" spin-változókkal történő reprezentálása nem szükségszerű. A modell egyszerű, de az általa képviselt univerzalitási osztály nem triviális, és kitűnően alkalmas a renormálási csoport gondolatmenetének konkrét alkalmazására és bemutatására.

Tekintsük továbbá, a σ mennyiséget (vagy ,,teret") az egyszerűség kedvéért egykomponensű vektornak, azaz skalárnak.

A Wilson-féle képletek alkalmazása során az első kifejezés, amit mindig ki kell számítanunk, a J integrálokban szereplő

$$\frac{1}{2}(Q((\sigma+y) + Q(\sigma-y)) = \frac{\Omega}{2}(U_{(\sigma+y)} + U_{(\sigma-y)}) \tag{17.2}$$

tag. Legyen továbbá $\Omega a_i = \tilde{a}_i$. Így

$$Q(\sigma+y) = \tilde{a}_2(\sigma^2 + y^2 + 2\sigma y) + \tag{17.3}$$
$$\tilde{a}_4(\sigma^4 + y^4 + 6\sigma^2 y^2 + 4\sigma^3 y + 4\sigma y^3) \ , \tag{17.4}$$

$$Q(\sigma-y) = \tilde{a}_2(\sigma^2 + y^2 - 2\sigma y) + \tag{17.5}$$
$$\tilde{a}_4(\sigma^4 + y^4 + 6\sigma^2 y^2 - 4\sigma^3 y - 4\sigma y^3) \ . \tag{17.6}$$

Ezen összefüggések alapján,

$$\frac{1}{2}(Q(\sigma+y) + Q(\sigma-y)) = \tilde{a}_2(\sigma^2 + y^2) + \tilde{a}_4(\sigma^4 + y^4 + 6\sigma^2 y^2) \ . \tag{17.7}$$

Így a J integrál konkrétan kifejezhető:

$$J(\sigma) = \int_{-\infty}^{+\infty} dy \exp[-y^2 - y^2(\tilde{a}_2 + 6\tilde{a}_4\sigma^2) - \tilde{a}_4 y^4 - (\tilde{a}_2\sigma^2 + \tilde{a}_4\sigma^4)] \ . \tag{17.8}$$

Az integrál argumentumából a konstans tagokat kiemelve, J formája a következőképpen alakul:

$$J(\sigma) = \exp[-\tilde{a}_2\sigma^2 - \tilde{a}_4\sigma^4] \int_{-\infty}^{+\infty} dy \exp[-y^2(1 + \tilde{a}_2 + 6\tilde{a}_4\sigma^2) - \tilde{a}_4 y^4] \ . \tag{17.9}$$

Vezessük be a következő integrálási változót:

$$x = y[1 + \tilde{a}_2 + 6\tilde{a}_4\sigma^2]^{1/2} \,. \tag{17.10}$$

A változócsere után

$$J(\sigma) = \frac{\exp[-\tilde{a}_2\sigma^2 - \tilde{a}_4\sigma^4]}{\sqrt{1 + \tilde{a}_2 + 6\tilde{a}_4\sigma^2}}\, I(\sigma) \,, \tag{17.11}$$

ahol $I(\sigma)$ kifejezése a következő:

$$I(\sigma) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \exp\left[-x^2 - x^4 \cdot \frac{\tilde{a}_4}{[1 + \tilde{a}_2 + 6\tilde{a}_4\sigma^2]^2}\right] \,. \tag{17.12}$$

Hasonlóan, a zéró argumentumú J esetében:

$$J(0) = \frac{1}{\sqrt{1 + \tilde{a}_2}}\, I(0) \,, \tag{17.13}$$

amelyben

$$I(0) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \exp\left[-x^2 - x^4 \cdot \frac{\tilde{a}_4}{[1 + \tilde{a}_2]^2}\right] \tag{17.14}$$

áll fenn. A Wilson-féle rekurziós képletekben $Q'(\sigma)$ kifejezésébe a $J(\sigma)/J(0)$ arányt kell behelyettesítenünk. A megadottak alapján ezen arány értéke:

$$\frac{J(\sigma)}{J(0)} = e^{-\tilde{a}_2\sigma^2 - \tilde{a}_4\sigma^4} \sqrt{\frac{1 + \tilde{a}_2}{1 + \tilde{a}_2 + 6\tilde{a}_4\sigma^2}} \cdot \frac{I(\sigma)}{I(0)} \,, \tag{17.15}$$

ahol

$$\frac{I(\sigma)}{I(0)} = \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} dx \exp\left(-x^2 - x^4 \frac{\tilde{a}_4}{(1 + \tilde{a}_2 + 6\tilde{a}_4\sigma^2)^2}\right)}{\int_{-\infty}^{+\infty} dx \exp\left(-x^2 - x^4 \frac{\tilde{a}_4}{(1 + \tilde{a}_2)^2}\right)} \,. \tag{17.16}$$

Most ezt a kifejezést $\tilde{a}_4 \to 0$ határesetben vizsgáljuk itt csupán, feltételezve, hogy az $U(\sigma)$ negyedrendű tagja kis értékű. Ekkor $I(\sigma)/I(0)$–ban lévő és $\tilde{a}_4$-el arányos exponenciális integrandus miatt $I(\sigma)/I(0) \simeq 1$–nek adódik[266]. Így tehát, a

$$\frac{\tilde{a}_4}{1 + \tilde{a}_2} = q \tag{17.17}$$

jelölés bevezetésével:

$$\frac{J(\sigma)}{J(0)} \simeq e^{-\tilde{a}_2\sigma^2 - \tilde{a}_4\sigma^4} \frac{1}{\sqrt{1 + 6\sigma^2 q}} \,, \tag{17.18}$$

[266]Igazolható, hogy e közelítés mellett az $\tilde{a}_2$-re és $\tilde{a}_4$-re levezetett rekurziós összefüggések $\mathcal{O}(\tilde{a}_4^2)$, illetve $\mathcal{O}(\tilde{a}_4^3)$ rendig helytállóak.

ahol feltételezésünk szerint

$$q \ll 1 \; . \tag{17.19}$$

A következő feladatunk az lesz, hogy $\frac{1}{\sqrt{1+6\sigma^2 q}}$ tagot a $q \to 0$ határesetben $e^{x\sigma^2+y\sigma^4}$ formában írjuk fel. Azaz H és H' formájának későbbi egyeztetése érdekében a

$$\frac{1}{\sqrt{1+6\sigma^2 q}} \to e^{x\sigma^2+y\sigma^4} \tag{17.20}$$

átalakítás megvalósítása szükséges. Mindez a kis q határesetben Taylor-sorfejtések segítségével lehetséges. Kiindulunk a

$$\frac{1}{\sqrt{1+x}} \simeq 1 - \frac{x}{2} + \frac{1}{2}\cdot\frac{3}{4}x^2 + \dots \; , \tag{17.21}$$

ismert sorfejtés kifejezéséből. Ezt a mi esetünkre alkalmazva:

$$\frac{1}{\sqrt{1+6\sigma^2 q}} = 1 - 3\sigma^2 q + \frac{3\cdot 6\cdot 6}{8}\,\sigma^4 q^2 + \dots \; , \tag{17.22}$$

azaz

$$\frac{1}{\sqrt{1+6\sigma^2 q}} = 1 - 3\sigma^2 q + \frac{27}{2}\,\sigma^4 q^2 + \dots \; , \tag{17.23}$$

ami $\mathcal{O}(q^3)$ pontosságig helytálló. Most az exponenciális függvény kis argumentumára érvényes

$$e^z = 1 + z + \frac{1}{2}z^2 + \dots \tag{17.24}$$

sorfejtésből a miáltalunk tanulmányozott exponenciális tag

$$e^{x\sigma^2+y\sigma^4} \simeq 1 + (x\sigma^2 + y\sigma^4) + \frac{1}{2}(x^2\sigma^4 + \mathcal{O}(\sigma^6)) = \tag{17.25}$$

$$1 + x\sigma^2 + \left(\frac{x^2}{2} + y\right)\sigma^4 + \mathcal{O}(\sigma^6) \; , \tag{17.26}$$

formában írható. Így, a két sorfejtés együtthatóinak egyeztetéséből:

$$x = -3q \; ; \quad \frac{27}{2}q^2 = \frac{x^2}{2} + y \; , \tag{17.27}$$

azaz

$$y = \frac{27}{2}q^2 - \frac{9q^2}{2} = 9q^2 \; . \tag{17.28}$$

Tehát, $q \to 0$ határesetben:

$$\frac{1}{\sqrt{1+6\sigma^2 q}} \simeq e^{-3q\sigma^2+9q^2\sigma^4} \; . \tag{17.29}$$

A kapott összefüggés alapján, a $J(\sigma)/J(0)$ arány kifejezhető:

$$\frac{J(\sigma)}{J(0)} \simeq \exp[-\sigma^2(\tilde{a}_2 + 3q) - \sigma^4(\tilde{a}_4 - 9q^2)] \ . \tag{17.30}$$

Mindezek után Q' elemzése következik. A két lényegi összefüggés ezúttal:

$$Q' = \tilde{a}_2'\sigma^2 + \tilde{a}_4'\sigma^4 \tag{17.31}$$

és a rekurziós képletből adódó

$$Q' = -2^d \ln\left(\frac{J(\sigma \cdot 2^{1-\frac{d}{2}})}{J(0)}\right) \ . \tag{17.32}$$

Így tehát a csatolási állandók renormálása a következő módon történik:

$$\tilde{a}_2'\sigma^2 + \tilde{a}_4'\sigma^4 = -2^d[-(\tilde{a}_2 + 3q) \cdot 2^{2-d}\sigma^2 - (\tilde{a}_4 - 9q^2)2^{4-2d}\sigma^4] \ . \tag{17.33}$$

Ebből viszont:

$$\tilde{a}_2' = 4(\tilde{a}_2 + 3q) \ , \tag{17.34}$$

$$\tilde{a}_4' = 2^{4-d}(\tilde{a}_4 - 9q^2) \ , \tag{17.35}$$

ahol

$$q = \frac{\tilde{a}_4}{1 + \tilde{a}_2} \tag{17.36}$$

Ezen egyenletek a tanulmányozott modell végső rekurziós összefüggéseinek tekinthetőek. Itt $\tilde{a}_2, \tilde{a}_4$ megfelelnek az l-edik blokkszintnek, továbbá $\tilde{a}_2', \tilde{a}_4'$ pedig az $l+1$-edik blokkszintnek.

A szakirodalomban szokás $\tilde{a}_2 = r$ és $\tilde{a}_4 = u$ jelöléseket használni. Ezt bevezetve, végül is azt kapjuk a Wilson-féle képletekből, hogy a (σ^2, σ^4) modell renormálási csoport egyenletei, kis negyedrendű tag esetében az alábbiak:

$$\begin{aligned} r_{l+1} &= 4\left(r_l + \frac{3u_l}{1 + r_l}\right) \ , \\ u_{l+1} &= 2^{4-d}\left(u_l - \frac{9u_l^2}{(1 + r_l)^2}\right) \ . \end{aligned} \tag{17.37}$$

A modell további tanulmányozását az ϵ sorfejtés keretei között folytatjuk. Mindezt azért tesszük így, mert ezúton alkalom adódik az ϵ sorfejtés alapgondolatainak megismerésére is. Megfigyelhető, hogy (**??**) összefüggések alapján az u változót csak úgy tarthatjuk meg kicsinek[267], ha $\epsilon = 4 - d$ mennyiség kicsi. Ezen észrevétel alkotja az ϵ sorfejtés egyik kiindulópontját.

[267]Itt nem szabad elfelejteni, hogy (**??**) levezetése során a $\tilde{a}_4 = u$ paramétert kicsinek tételeztük fel.

17.2 Az ϵ sorfejtés

A (σ^2, σ^4) modell további elemzésében a következő lépés az lenne, hogy R_S^L–et, tehát a linearizált renormálási csoport transzformációnak megfelelő mátrixot levezessük. Az $\epsilon = 4 - d$ jelölés bevezetésével ekkor:

$$\left.\frac{\partial r_{l+1}}{\partial r_l}\right|_{V=V^*} = 4 - \left.\frac{12u_l}{(1+r^*)^2}\right|_{V=V^*} = 4 - \frac{12u^*}{(1+r^*)^2} \ ; \tag{17.38}$$

$$\left.\frac{\partial r_{l+1}}{\partial u_l}\right|_{V=V^*} = \frac{12}{1+r^*} \ ; \tag{17.39}$$

$$\left.\frac{\partial u_{l+1}}{\partial r_l}\right|_{V=V^*} = 2^\epsilon \frac{18(u^*)^2}{(1+r^*)^3} \ ; \tag{17.40}$$

$$\left.\frac{\partial u_{l+1}}{\partial u_l}\right|_{V=V^*} = 2^\epsilon \left(1 - \frac{18u^*}{(1+r^*)^2}\right) \ . \tag{17.41}$$

Az $\partial/\partial u_l$ tagokat a második matrix-oszlopba helyezve, a fixpont körül linearizált renormálási csoport transzformációra a következő kifejezést kapjuk:

$$R_{S=2}^L = \begin{bmatrix} 4 - \dfrac{12u^*}{(1+r^*)^2} & \dfrac{12}{1+r^*} \\ \dfrac{2^\epsilon \cdot 18(u^*)^2}{(1+r^*)^3} & 2^\epsilon \left[1 - \dfrac{18u^*}{(1+r^*)^2}\right] \end{bmatrix} \tag{17.42}$$

Az $\epsilon = 4 - d$ mennyiségnek a következő jelentősége van. A számítás során ϵ-t kicsinek kell tekintenünk. A számítást végig így végezzük, majd a végeredmények szintjén, a $d = 3$ dimenziós eredmények levezetésénél, $\epsilon \to 1$ extrapoláción keresztül értékét $\epsilon = 1$–nek vesszük fel. A módszer Wilson nevéhez fűződik, és ezen eljárás az ϵ sorfejtés lényege. Az így kapott végeredmények, a kísérleti összevetésekben, aránylag jó minőségűeknek tekínthetőek[268].

Nem szabad elfelejteni azt sem, hogy a kritikus exponensek egy jól meghatározott fixponthoz kötöttek. Az eljárás tehát úgy folytatható, hogy először a lehetséges fixpont értékeket kell meghatároznunk, majd ezek ismeretében kell elemezzük az R_S^L kifejezését minden egyes fixpont körül külön–külön.

A rekurziós képleteket megfigyelve, észrevehető, hogy van egy triviális megoldásunk:

$$u^* = r^* = 0 \ . \tag{17.43}$$

Létezik továbbá nemtriviális $u^* \neq 0, r^* \neq 0$ megoldás is.

A tanulmányunkat a triviális fixpont körüli viselkedés elemzésével kezdjük.

[268] Lásd például [1]

17.2.1 A triviális megoldás: a Gauss-fixpont

Ez esetben, amint láttuk, $u^* = r^* = 0$. Ezen fixpontot Gauss–fixpontnak nevezik a szakirodalomban[269]. Amint a levezetett $R^L_{S=2}$–ből megfigyelhető[270], a Gauss-fixpont környezetében a linearizált RG transzformáció mátrixa

$$R^L_{S=2} = \begin{bmatrix} 4 & 12 \\ 0 & 2^{4-d} \end{bmatrix} . \tag{17.44}$$

Most a sajátértékek meghatározása következik. A sajátértékegyenlet

$$\mathrm{Det} \begin{bmatrix} 4-\lambda & 12 \\ 0 & 2^{4-d}-\lambda \end{bmatrix} = 0 , \tag{17.45}$$

azaz

$$(4-\lambda_1)(2^{4-d}-\lambda_2) = 0 . \tag{17.46}$$

Látható ekkor, hogy az első sajátérték:

$$\lambda_1 = 4 = 2^2 \; ; \quad y_1 = 2 > 0 , \tag{17.47}$$

azaz λ_1 releváns sajátérték, továbbá:

$$\lambda_2 = 2^{4-d} \; ; \quad y_2 = 4-d \; ; \quad y_2 < 0, \quad \text{ha} \quad d > 4 . \tag{17.48}$$

Tehát λ_2 releváns, ha $d < 4$, és irreleváns, ha $d > 4$. A kritikus exponensek meghatározása céljából:

$$\nu = \frac{\ln S}{\ln \lambda_1} = \frac{\ln 2}{2 \ln 2} = \frac{1}{2} . \tag{17.49}$$

Továbbá $\eta = 0$, így a Wilson-féle képlet végeredményeként a Gauss-fixpont esetében

$$\nu = \frac{1}{2}, \quad \eta = 0 \tag{17.50}$$

adódik. A (**??**) összefüggés alapján az is látható, hogy a Gauss fixpont kritikus fixpont mivoltát a λ_2 dönti el[271]. Az elemzésből az világosan látszik, hogy $d < 4$ esetében a Gauss-fixpont nem kritikus többé, így (divergáló korrelációs hosszal jellemezhető) fázisátalakulást nem jelez $d < 4$-re. A $d = 4$ eset különleges, (**??**)-ből ekkor ugyanis csak az látszik, hogy az alkalmazott közelítések keretei között

[269] Ennek az az oka, hogy ez esetben a fixpont közvetlen közelében vett Hamilton-operátor csupán $(\nabla\sigma)^2$-ből vett integrált tartalmazza, és ekkor az állapotösszeg Gauss integrálon keresztül egyszerűen kifejezhető.

[270] ne feledjük el, hogy itt a Wilson-féle képlet esetében a blokknagyság $S = 2$

[271] Ne feledjük el, hogy itt $h = 0$ körülmények között történik az elemzés, így a termikus $\lambda_1 = \lambda_t$ releváns paraméter mellett egy h-tól független új releváns paraméter megjelenése a Gauss-fixpont kodimenzióját háromra emeli.

λ_2 marginális. Igazolható viszont, hogy magasabb rendekig menve a Gauss-fixpont kritikus marad $d = 4$-ben így továbbra is fázisátalakulást jelöl[272]. A Gauss-fixpont tehát $d \geq 4$-re kritikus. Már ebből megsejthető, hogy $d = 4$ egy határdimenzió, mely jelentése a későbbiekben világossá válik majd.

A többi kritikus exponens értékét a 16.4 paragrafus alapján fejezhetnénk ki. A végeredmény ekkor

$$\gamma = (2-\eta)\nu = 1 \; ; \quad \alpha = 2 - \nu d = 2 - \frac{d}{2} \; ; \tag{17.51}$$

és

$$\beta = \frac{\nu}{2}(d-2+\eta) = \frac{1}{4}(d-2) \; ; \quad \delta = \frac{d+2}{d-2} \tag{17.52}$$

lenne. Ezen összefüggésekből megfigyelhetnénk, hogy $d = 4$–ben (??) és (??) visszaadná a molekuláris–tér elméletének kritikus exponenseit

$$\nu = \frac{1}{2}, \quad \eta = 0, \quad \alpha = 0, \quad \beta = \frac{1}{2}, \quad \gamma = 1, \quad \delta = 3. \tag{17.53}$$

Sajnos azonban ebben a gondolatmenetben hiba van. Mindennek oka az, hogy a skálázási összefüggésekben amelyek (??) és (??)-hez vezettek feltételeztük a veszélyes irreleváns paraméterek hiányát, azaz a skálafüggvények nemszinguláris viselkedését irreleváns paraméterek zéró határértékében. Ez a feltételezés itt nem állja meg a helyét ugyanis u veszélyes irreleváns paraméter.

17.2.2 Veszélyes ireleváns paraméter szerepe a Gauss-fixpont kritikus exponenseinek kialakításában

Hogy az elöbb tett állítást be lehessen látni térjünk vissza a Ginzburg-Landau termodinamikai potenciál (8.26) kifejezéséhez amely formája[273]

$$\Phi = \int d^dx \left[g(\nabla\Delta(x))^2 + a\Delta^2(x) + b\Delta^4(x) - h\Delta(x) \right] \; . \tag{17.54}$$

A rendparaméter szerinti minimalizálás során láttuk (lásd például a (8.4) egyenlőséget), hogy $h = 0$ esetében

$$\Delta^2 = -\frac{a}{2b} \tag{17.55}$$

egyenlőség áll fenn. Ezen túlmenőleg, $T = T_c$-re (lásd (8.14))

$$\Delta^3 = \frac{h}{4b} \tag{17.56}$$

[272] Lásd például [2]. A bonyodalmat itt az is okozza, hogy $d = 4$-re a Gauss-fixpont és a Wilson-Fisher fixpont (lásd később) egybeesnek így fixpont degeneráció is fellép. Ezen tulmenőleg, mivel $d = 4$ a felső kritikus dimenzió (lásd később), logaritmikus korrekciók is megjelennek.

[273] A T változóknak az együtthatókban való bevitele mellett

teljesül. Továbbá, mivel Δ a rendparaméter, a térváltozóra átlagolt formáját

$$\Delta =< \Delta(x) >= - \left.\frac{\partial \Phi}{\partial h}\right|_{h \to 0} \tag{17.57}$$

adja vissza. Másfelöl, az általunk tanulmányozott esetben (15.4) és (17.1) alapján, a bevezetett átjelöléseket használva és $h \neq 0$ esetében

$$\beta H[\sigma] = \int d^d x \left[\frac{c}{2} (\nabla \sigma)^2 + r\sigma^2 + u\sigma^4 - h\sigma \right] \tag{17.58}$$

teljesül. A $k_B T$ szorzófaktornak a Φ termodinamikai potenciálba való bevitele mellett ekkor

$$\exp(-\Phi) = \mathrm{Tr} \exp(-\beta H[\sigma]) \tag{17.59}$$

áll fenn. A renormálási csoport transzformáció során a fixpont közelében H formája nem változik, és ugyanakkor az RG transzformáció, amint láttuk, egy részleges Tr müvelet, amelyet az S blokknagyság fokozatos növelésével a teljes dinamikus változó térre[274] elvégzünk. Ebböl viszont (**??**) alapján az következik, hogy Φ funkcionális formája is[275] (**??**)-nek megfelelő lesz. Ekkor, (**??**) és (**??**) összevetésével látható, hogy

$$c \sim g \,, \quad r \sim a \,, \quad u \sim b \,, \tag{17.60}$$

mellett, a Ginzburg-Landau termodinamikai potenciálban szereplő $\Delta(x)$ szerepét itt $\sigma(x)$ játsza miközben a termodinamikai potenciálunk pontosan (**??**) formájú.

Mindezek után írjuk fel a termodinamikai potenciál szinguláris részére vonatkozó skálázási összefüggést az u irreleváns paraméter megtartásával. Ekkor (**??**) alapján

$$\phi(t, h, u) = S^{-d} \phi(tS^{y_t}, hS^{y_h}, uS^{y_u}) \tag{17.61}$$

A Gauss fixpont körül λ_1 a termikus sajátérték, míg λ_2 az u paraméternek megfelelő sajátérték, azaz (figyelembe véve, hogy a Wilson-féle képlet esetében $S = 2$) $y_t = 2$ és $y_u = \epsilon = 4 - d$. Az y_h értéke egyszerüen meghatározható, figyelembe véve hogy h jelenléte (a Zeeman tag σ-ban páratlan mivolta miatt) a (**??**) egyenleten nem változtat és önmagában alkot transzformációs összefüggést. Így ezt egyszerüen megkaphatjuk a Zeeman tagon vett $x \to Sx'$ és $\sigma \to S^{1-d/2}\sigma'$ átskálázások figyelembevételével[276] melyeket a Wilson-féle képlet levezetésekor mutattunk be. Ezt alkalmazva és figyelembe véve hogy x átskálázása miatt $d^d x \to S^d d^d x'$ ered

$$\int d^d x h \sum \sigma = \int S^d d^d x' h \sum S^{1-\frac{d}{2}} \sigma' = \int d^d x' (hS^{1+\frac{d}{2}}) \sum \sigma' \tag{17.62}$$

[274]Azaz a σ változók teljes értékkészletére

[275]additiv konstansok leszámítása mellett

[276]Nem szabad elfelejteni, hogy a tanulmányozott esetben $\eta = 0$ áll fenn

áll fenn, amelyből

$$h' = hS^{1+\frac{d}{2}} \tag{17.63}$$

tehát $y_h = 1 + d/2$. Összefoglalva a levezetett y_i értékeket a Gauss-fixpontra vonatkozólag

$$y_t = 2\,, \quad y_h = 1 + \frac{d}{2}\,, \quad y_u = 4 - d\,. \tag{17.64}$$

A levezetett eredmények tükrében visszatérhetünk a (??) skálázási összefüggéshez amely h szerinti deriváltja (??)-nek megfelelően az $M \sim < \sigma >$ rendparamétert, avagy a spin-példával élve, mágnesezettséget adja vissza[277]. Ekkor (??)-ból

$$M(t,h,u) = -\frac{\partial\phi}{\partial h} = S^{-d+y_h} M(tS^{y_t}, hS^{y_h}, uS^{y_u}) \tag{17.65}$$

egyenlőség származtatható. Az M mint rendparaméter segítségével két kritikus exponenst származtatunk. Egyrészt, $h = 0$ esetében, az S értékét $tS^{y_t} = 1$ egyenlőségen keresztül rögzítve $S = |t|^{-1/y_t}$ ered, amely alapján (??)-ból

$$M(t,0,u) = |t|^{\frac{d-y_h}{y_t}} M(1,0,u|t|^{-\frac{y_u}{y_t}}) \tag{17.66}$$

írható. Ekkor kiindulva u irreleváns mivoltából és feltételezve hogy $u \to 0$ határesetben $M(1,0,0)$ véges

$$\lim_{u\to 0} M(1,0,u) = M(1,0,0) < \infty\,, \quad h = 0\,, \tag{17.67}$$

a (??) egyenlőség alapján, $M(t,0,0) \sim t^{\beta}$ összefüggésből és (??) felhasználásával

$$M(t,0,u\to 0) \sim |t|^{\frac{d-y_h}{y_t}} = |t|^{\beta}\,, \quad \beta = \frac{d-y_h}{y_t}\,, \quad \beta = \frac{d-2}{4}\,. \tag{17.68}$$

Másfelöl, $t = 0$-ra (??)-ban az S értékét $hS^{y_h} = 1$ szerint rögzítve $h > 0$ feltételezéssel $S = h^{-1/y_h}$ ered amelyet (??)-ba visszahelyettesítve

$$M(0,h,u) = h^{\frac{d-y_h}{y_h}} M(0,1,uh^{-\frac{y_u}{y_h}}) \tag{17.69}$$

írható. Újból u irreleváns mivoltából kiindulva és feltételezve, hogy $u \to 0$ határesetben $M(0,1,0)$ véges

$$\lim_{u\to 0} M(0,1,u) = M(0,1,0) < \infty\,, \quad t = 0\,, \tag{17.70}$$

[277]Pontosabban az M szinguláris részét kapjuk ezáltal meg.

felhasználva (??) egyenlőséget és $M(0,h,0) \sim h^{1/\delta}$ értelmezőképletet valamint a (??) kifejezéseket,

$$M(0,h,u\to 0) \sim h^{\frac{d-y_h}{y_h}} = h^{\frac{1}{\delta}}\,, \quad \delta = \frac{y_h}{d-y_h}\,, \quad \delta = \frac{d+2}{d-2}\,. \tag{17.71}$$

Megfigyelve a (??)-ban levezetett β és (??)-ban levezetett δ kritikus exponens értékeket láthatjuk, hogy pontosan a (??) eredményeit kapjuk vissza. Mindez viszont a termodinamikai potenciál szinguláris részére fennáló (??) skálázási összefüggésen kívül (??) és (??) feltételezéseknek is következménye. Ezen feltételezések viszont itt helytelenek. Felhasználva ugyanis a (??) és (??) analógiája alapján kapott (??) relációkat, kis u esetében egyrészt $h=0$ és $t\neq 0, \quad |t|<<1$ esetében (??)-ból

$$M(1,0,u) \sim u^{-\frac{1}{2}}\,, \tag{17.72}$$

másrészt pedig $t=0$ és $h\neq 0, \quad |h|<<1$ esetében (??)-ból

$$M(0,1,u) \sim u^{-\frac{1}{3}} \tag{17.73}$$

áll fenn[278].

A (??) és (??) relációk világosan mutatják, hogy habár a tanulmányozott esetben u irreleváns, nem elhanyagolható, hiszen veszélyes irreleváns paraméter, azaz $M(1,0,u)$ és $M(0,1,u)$ az $u\to 0$ határesetben divergál. Ezen tulajdonság miatt, habár a termodinamikai potenciál szinguláris részére vonatkozó skálázási reláció (??) formájában fennáll, a Wilson-féle képletek (??) eredményeiből (??) és (??) nem következik. Ez alól az egyedüli kivétel a $\gamma = 1$ eredmény amely a direkt levezetett $\eta = 0$ és $\nu = 1/2$ értékhez kapcsolódik d-t nem tartalmazó (azaz nem szuperskálatörvény szerű) összefüggésen keresztül.

Az elmondottak tükrében a Wilson-féle képlet alapján levezetett Gauss-fixpontra vonatkozó eredmények β és δ kritikus exponenseinek helyes értékeit a következő képpen kapjuk meg.

A $h=0$ esetben (??) alapján (??) jobboldalában szereplő függvényre

$$M(1,0,u|t|^{-\frac{y_u}{y_t}}) \sim u^{-\frac{1}{2}}|t|^{\frac{y_u}{2y_t}}\,. \tag{17.74}$$

[278]Itt felmerülhet az a kérdés, hogy vajon nem visszük e ezáltal be számításainkba a Landau elmélet pontatlan eredményeit ? Megfigyelhető viszont, hogy (??) és (??) nem tartalmaz semmit a (??) termodinamikai potenciál együtthatóinak T szerinti regularitásáról, illetve az $a\sim t$ feltételezésröl, melyek együttesen a Landau elmélet eredményeinek pontatlanságát idézik elő, lásd a 8.4 paragrafust.

Ekkor $h=0$ esetében, $u \neq 0$ megtartásával és a Wilson-féle képlet (??) eredményét felhasználva, (??)-ből

$$\begin{aligned} M(t,0,u\neq 0) &\sim |t|^{\frac{d-y_h}{y_t}} |t|^{\frac{y_u}{2y_t}} = |t|^{\beta}\,, \quad \beta = \frac{d-y_h}{y_t} + \frac{y_u}{2y_t}\,, \\ \beta &= \frac{d-2}{4} + \frac{4-d}{4} = \frac{1}{2}\,. \end{aligned} \tag{17.75}$$

Másfelől $t=0$ esetében (??) alapján (??) jobboldalában szereplő függvényre ($h>0$ feltételezése mellett)

$$M(0,1,uh^{-\frac{y_u}{y_h}}) \sim u^{-\frac{1}{3}} h^{\frac{y_u}{3y_h}}\,. \tag{17.76}$$

Ezt $u \neq 0$ körülmények között (??)-be felhasználva majd a (??) eredményeket alkalmazva

$$\begin{aligned} M(0,h,u\neq 0) &\sim h^{\frac{d-y_h}{y_h}} h^{\frac{y_u}{3y_h}} = h^{\frac{1}{\delta}}\,, \quad \frac{1}{\delta} = \frac{d-y_h}{y_h} + \frac{y_u}{3y_h}\,, \\ \frac{1}{\delta} &= \frac{d-2}{d+2} + \frac{2(4-d)}{3(d+2)} = \frac{1}{3}\,. \end{aligned} \tag{17.77}$$

Megjegyzendő, hogy a kritikus exponensek $u \neq 0$ melletti értelmezése problémamentes, hiszen (lásd a 7. fejezetet) a kritikus exponensek rögzitésekor csupán a t és h szerinti viselkedést kell megadnunk a termodinamikai potenciál szinguláris részében és annak deriváltaiban, a csatolási állandók szerinti viselkedést nem.

A (??), (??) és (??) alapján $\eta=0$, $\nu=1/2$, $\beta=1/2$, $\delta=3$ írható. Most csak a termodinamikai potenciál általánositott homogenitásából származó skálatörvényeket használva (kizárva ezáltal a hiperskálatörvényeket) α és γ levezethetőek. A Widom-féle összefüggésből $\gamma = \beta\delta - \beta = 3/2 - 1/2 = 1$ kapható[279], továbbá a Rusbrooke féle egyenlőségből $\alpha = 2 - 2\beta - \gamma = 2 - 1 - 1 = 0$ áll fenn. Látható tehát, hogy a Gauss-fixpontra kapott (??) molekuláris-tér elmélet típusú eredmények nemcsak $d=4$-ben, hanem $d \geq 4$-re állnak fenn, és erre a dimenziótartományra a Gauss-fixpont egyben kritikus fixpont is. Összefoglalásképpen:

$$\nu = \frac{1}{2}, \quad \eta = 0, \quad \alpha = 0, \quad \beta = \frac{1}{2}, \quad \gamma = 1, \quad \delta = 3. \tag{17.78}$$

Ugyanakkor $d=4$ egy olyan dimenzióérték amely felett a hiperskálatörvények nem teljesülnek többé és mindez a veszélyes irreleváns paramétereknek köszönhető. Ugyanakkor $d=4$ felett a kritikus viselkedés az MTE kritikus exponenseivel helyesen leírható, tehát $d=4$ egyben a tanulmányozott rendszer felső kritikus dimenziója is. Ugyanezt az eredményt vezettük le a Ginzburg-feltételt tanulmányozásakor a 12.2 paragrafusban.

[279]Látható, hogy a Fisher-féle egyenlőség is ugyanezt eredményezi

17.2.3 A Ginzburg-feltétel mint a Gauss-fixpont körül vett skálázási viselkedés változás („cross-over”) következménye

Érdemes megjegyezni, hogy a $d = 4$ felső kritikus dimenziót eredményező Ginzburg-feltétel a renormálási csoporton keresztül is levezethető. A gondolatmenet a következő[280]:

Ha az u változó relevánsá válik, az elöző fejezet utolsó paragrafusának értelmében a Gauss-fixpont körül vett hatása (amennyiben olyan áramlási görbén vett viselkedést vizsgálunk amely kiindulópontja a Gauss-fixpont környezetében található de nem a kritikus felületen) „cross-over” folyamatként is felfogható. Az u releváns paraméter Gauss-fixpont közelében értelmezett cross-over exponense ekkor $\psi = y_u/y_t$ és u hatása akkor lesz mérvadó az $r^* = u^* = 0$ fixpont közelében ha $t << t_\psi$, ahol $ut_\psi^{-\psi} = 1$ adja a „cross-over” hőmérsékletet[281]. A „cross-over” exponens értéke

$$\psi = \frac{y_u}{y_t} = \frac{4-d}{2} \tag{17.79}$$

és a t_ψ értékét

$$t_\psi = |u|^{\dfrac{2}{4-d}} \tag{17.80}$$

adja. Az elöbbiekben bemutatott elemzésből kitünik, hogy a Gauss-fixpont kritikus exponensei a molekuláris-tér elmélet kritikus exponenseit adják vissza. Hogy az áramlási görbénk a Gauss-fixpont jellemzőit tükrözze az kell, hogy

$$t >> t_\psi = |u|^{\dfrac{2}{4-d}}\,, \tag{17.81}$$

Figyelembe véve ekkor, hogy a csatolási állandó véges szám (??) alapján

$$t^{\dfrac{4-d}{2}} >> \mathcal{C} \tag{17.82}$$

egyenlötlenség ered ami (12.23) alapján pontosan a Landau-típusú elméletek kritikus tartományban vett helyességét megadó Ginzburg-feltétel. Ebből látható, hogy $t \to 0$ határesetben a Ginzburg-feltételünk akkor teljesül ha $d > 4$, tehát a tanulmányozott rendszer felső kritikus dimenziója $d = 4$.

Mindez jelzi, hogy a molekuláris–tér elmélet, a kritikus tartomány jellemzése szempontjából gyakorlatilag egy eléggé durva közelítés. A kritikus exponensei ugyanis egy olyan exponens-családba tartoznak bele, amely a $d = 1, 2, 3$ 'fizikai' dimenziókban nem tartozik kritikus fixponthoz, azaz nem ad fizikai fázisátalakulást.

---

[280] Lásd például [3].

[281] Ez esetben a valós hatványon szereplő negatív t elkerülése végett $t = |T - T_c|/T_c$ értékkel számolunk.

17.2.4 A Gauss-modell

A Gauss-fixpont elnevezésre vonatkozólag a következőket jegyezhetjük még meg:

A (σ^2) modellben az $U(\sigma)$ kifejezése

$$U(\sigma) = a_2 \sigma^2 \,, \tag{17.83}$$

tehát a rendszer, úgymond csupán a négyzetes „kölcsönhatási" taggal rendelkezik. Ez a modell a Gauss-modell néven ismeretes. A bemutatott Wilson-féle képlet alapján végzett számítást ez esetben megismételve, egyetlen csatolási állandóra (az r-re) felírt rekurziós összefüggést kapjuk eredményül:

$$r_{l+1} = 4 r_l \,. \tag{17.84}$$

Továbbá, mivel U-ban csak σ^2-es tagunk van, az összes integrálunk Gauss-típusúvá alakul, így ezen modell egzaktul megoldható. Az u-s tag jelenléte nélkül $h = 0$-ra rendezett fázist a rendszerben nem kapunk, így modelünk csupán $T > T_c$ tartomány elemzésére lesz alkalmas. Egyetlen kritikus fixpontunk[282] van $r^* = 0$-ban, amely kritikus exponenseire

$$\eta = 0 \,; \quad \nu = \frac{1}{2} \,; \quad \gamma = 1 \,; \quad \delta = \frac{d+2}{d-2} \,; \quad \alpha = 2 - \frac{d}{2} \,, \tag{17.85}$$

eredmények adódnak[283]. Ezek pontosan egyeznek a (**??**) és (**??**)-ben kapott értékekkel. A Wilson-féle képletnek egy jó pontja, hogy a Gauss-modell kritikus exponenseit egzaktul visszaadja.

Mindezek után a bemutatottak tükrében megfigyelhető, hogy infinitézimális kis u-val az $r^* = 0$, $u^* = 0$ fixpont továbbra is megmarad, de kritikus fixpont formájában (azaz $d \geq 4$-re) kritikus exponensei megváltoznak. Ez példázza, hogy egy elmélet adott g csatolási állandó szempontjából vett $g = 0$, illetve $g \to 0$ kritikus viselkedése teljesen különböző is lehet.

Az elmondottak tükrében, ha azt szeretnénk elérni, hogy a Gauss-modell kritikus exponensei a Gauss kritikus-fixpont kritikus exponenseit adják vissza, δu infinitézimális u változóval kell dolgoznunk a Gauss-modellben a véges r érték mellett, majd csak a számítás legvégén tehetjük meg a $\delta u \to 0$ határétmenetet. Ez a különös viselkedés indokolja az ϵ sorfejtés használatát.

Egy mennyiség, mondjuk g, adott g_0 értéke körül vett Taylor sorfejtés akkor létjogosult ha $g \to g_0$ határesetben a sorfejtett kifejezés, legyen $f(g)$, folytonosan változik, azaz az $f(g_o)$ behelyettesítési érték egyezik $lim_{g \to g_0} f(g)$-vel. A Gauss-modell példája mutatja, hogy az u csatolásra az $u_0 = 0$ környezetében vett viselkedés szempontjából mindez nem áll fenn, ezért más mennyiségre van szükség a sorfejtés

[282] Olyan értelemben használt itt a kritikus jelző, hogy a fixpont kodimenziója kettő.

[283] Mivel nincs u tagunk jelen, veszélyes irreleváns paraméterünk sincs.

(azaz perturbatív jellegű megközelítés) végrehajtásakor. Amint a következő paragrafusban látni fogjuk, a kritikus exponensek $d < 4$ esetében vett ilyenfajta levezetésére az $\epsilon = 4 - d$ mennyiség megfelelő, hiszen a renormálási csoporton keresztül közvetlenül számított ν és η értékeket $\epsilon \to 0$ határesetben helyesen visszaadja, továbbá a kis ϵ feltételezés alapján a (??) használatának létjogosultsága (amint azt említettük) helytálló.

17.2.5 A nemtriviális megoldás: a Wilson-Fisher fixpont

Kiindulópontként tételezzük fel, hogy a tanulmányozott esetben $r^* \neq 0$, $u^* \neq 0$. Amint már hangsúlyoztuk, első lépésben a fixpont értékét kell meghatározni. Ekkor a rekurziós képletekbe mindenütt $r = r^*$ és $u = u^*$ értékeket helyettesítve, a következő egyenletrendszer adódik:

$$\begin{cases} r^* = 4(r^* + \left(\dfrac{3u^*}{1+r^*}\right)) \; ; \\ \\ u^* = 2^\epsilon \left(u^* - \dfrac{9u^{*2}}{(1+r^*)^2}\right) \; ; \end{cases} \tag{17.86}$$

Most már, mivel $u^* \neq 0, r^* \neq 0$, így a második egyenletben u^*-gal egyszerűsítünk és így:

$$u^* = \frac{2^\epsilon - 1}{9 \cdot 2^\epsilon}(1+r^*)^2 \tag{17.87}$$

adódik. Ezt az első egyenletbe helyettesítve:

$$3r^* = -\frac{4}{3}(1 - 2^{-\epsilon})(1 + r^*) \; . \tag{17.88}$$

Innen:

$$r^* = \frac{-\frac{4}{9}(1 - 2^{-\epsilon})}{1 + \frac{4}{9}(1 - 2^{-\epsilon})} \; ; \tag{17.89}$$

Így a fixpont értékek:

$$1 + r^* = \frac{1}{1 + \frac{4}{9}(1 - 2^{-\epsilon})} \; , \tag{17.90}$$

és

$$u^* = \frac{1 - 2^{-\epsilon}}{9} \cdot \frac{1}{\left(1 + \frac{4}{9}(1 - 2^{-\epsilon})\right)^2} \; . \tag{17.91}$$

Most az R_S^L–ből a sajátértékeket határozzuk meg. E célból megfigyelhető u^* kifejezéséből, hogy

$$\frac{u^*}{(1+r^*)^2} = \frac{1 - 2^{-\epsilon}}{9} \; . \tag{17.92}$$

Ezen összefüggést R_S^L mátrixában felhasználva, a nemtriviális fixpont körüli lineáris renormálási csoport transzformáció konkrét formája a következőképpen alakul:

$$R_S^L = \left[\begin{array}{cc} 4 - \frac{12}{9}(1-2^{-\epsilon}) & \frac{12}{1+r^*} \\ \frac{2^\epsilon \cdot 18(1-2^{-\epsilon})^2}{81}(1+r^*) & 2^\epsilon \left[1 - \frac{18}{9}(1-2^{-\epsilon})\right] \end{array} \right] . \tag{17.93}$$

Így az ezen esetben fennálló sajátértékegyenlet:

$$\left[4 - \frac{4}{3}(1-2^{-\epsilon}) - \lambda\right] \left[2^\epsilon(1-2(1-2^{-\epsilon})) - \lambda\right] - \frac{8}{3}2^\epsilon(1-2^{-\epsilon})^2 = 0 . \tag{17.94}$$

Az R_S^L levezetésével közelítettünk, mert $J(\sigma)/J(0)$-ban az integrálok arányát 1-nek számítottuk az u kicsisége miatt. Hogy ennek a feltételezésnek a keretei között maradjunk a további elemzés $\epsilon = 4 - d$ sorfejtéssel történik, mely során $\epsilon \ll 1$ egyenlötlenséget tételezzük fel. Ekkor viszont, az „ϵ" sorfejtés korlátai között mozgunk. Ennek a lényege az, hogy $\epsilon \ll 1$–el számolunk, majd a számítás végén $\epsilon = 1$–et extrapolálunk a $d = 3$-ban keresett kritikus exponensek kifejezésekor. Az elgondolás motivációiba az is beletartozik (lásd például [2]), hogy ha a kritikus fixpontunk az (r, u) paramétertér origójában van $d \geq 4$-re, akkor a $d = 4 - \epsilon$ dimenzióra is kis $\epsilon > 0$ esetében az origó közelében kell lennie egy kritikus fixpontnak, azaz $u^* \sim \mathcal{O}(\epsilon)$, $r^* \sim \mathcal{O}(\epsilon)$ összefüggéseknek kell fennállniuk. A linearizált RG-n túlmenő számítások ezen feltételezést alátámasztják[284].

Így, ha ϵ kicsi:

$$1 - 2^{-\epsilon} = 1 - e^{-\epsilon \ln 2} \simeq \epsilon \ln 2 . \tag{17.95}$$

A kifejezések $\mathcal{O}(\epsilon^2)$ szintjéig egzaktak csupán, így r^* és u^*–ból a nevezők elhanyagolhatók. A fixpontokra kapott értékek:

$$u^* \simeq \frac{1}{9}\epsilon \ln 2 \, ; \quad r^* \simeq -\frac{4}{9}\epsilon \ln 2 . \tag{17.96}$$

A levezetett (u^*, r^*), a Wilson-Fisher fixpont néven ismeretes[285] (az u^* és r^* értéke itt ϵ–ban lineáris tagokig helytálló csupán).

Továbbá a sajátértékegyenletben a λ–át nem tartalmazó tag szintén ϵ^2–tel arányos, és így ϵ–ban lineáris tagokig menőleg:

$$\begin{aligned} \lambda_1 &= 4 - \frac{4}{3}\epsilon \ln 2 + \mathcal{O}(\epsilon^2) , \\ \lambda_2 &= (1 + \epsilon \ln 2)(1 - 2\epsilon \ln 2) + \mathcal{O}(\epsilon^2) = 1 - \epsilon \ln 2 + \mathcal{O}(\epsilon^2) . \end{aligned} \tag{17.97}$$

[284] Meg kell azt is emliteni, hogy az $\epsilon = 1$ extrapoláció a végeredmények szintjén nem nevezhető matematikailag argumentált módon jogosnak. A levezetett eredmények viszont jó minöségüek, lásd [4].

[285] Lásd [1], és ugyanazon bibliográfiai adat 353 oldala.

Most megfigyelhető, hogy $\lambda_1 > 1$, tehát releváns sajátérték. Továbbá, $\lambda_2 < 1$; $(y_2 < 0)$ áll fenn, ha $\epsilon = 4 - d > 0$. Tehát, a Wilson-Fisher fixpont $d < 4$–re, azaz a fizikai esetre lesz kritikus fixpont.

A Gauss-fixponttal ellentétben tehát, a Wilson-Fisher fixpont $d < 4$ re kritikus, és $d > 4$-re instabil, így a triviális fixpont egyfajta „tükörképének" tekinthető.

Most határozzuk meg a kritikus exponensek értékeit ($S = 2$):

$$\nu = \frac{\ln S}{\ln \lambda_1} = \frac{\ln 2}{\ln[4(1 - \frac{1}{3}\epsilon \ln 2)]} = \frac{\ln 2}{2\ln 2 + \ln(1 - \frac{1}{3}\epsilon \ln 2)} \ . \tag{17.98}$$

Figyelembe véve, hogy

$$\ln(1 - x) \simeq -x + \dots \ , \quad x \ll 1 \ , \tag{17.99}$$

és

$$\frac{1}{1 - x} \simeq 1 + x + \dots \ , \tag{17.100}$$

a ν kritikus exponens értéke a következőképpen alakul:

$$\nu = \frac{\ln 2}{2\ln 2 - \frac{1}{3}\epsilon \ln 2} = \frac{1}{2\left(1 - \dfrac{\epsilon}{6}\right)} = \frac{1}{2}\left(1 + \frac{\epsilon}{6}\right) = \frac{1}{2} + \frac{\epsilon}{12} \ . \tag{17.101}$$

Tehát a renormálási csoport egyenletek végeredménye ez esetben:

$$\nu = \frac{1}{2} + \frac{\epsilon}{12} + \mathcal{O}(\epsilon^2) \ ; \quad \eta = \mathcal{O}(\epsilon^2) \ . \tag{17.102}$$

A további kritikus exponens értékek mindezek után a skálatörvényekből kaphatók meg[286]. Az első lépésben a Fisher–összefüggést használva:

$$\gamma = (2 - \eta)\nu = 2\left(\frac{1}{2} + \frac{\epsilon}{12}\right) + \mathcal{O}(\epsilon^2) = 1 + \frac{\epsilon}{6} + \mathcal{O}(\epsilon^2) \ , \tag{17.103}$$

azaz a szuszceptibilitás kritikus exponense:

$$\gamma = 1 + \frac{\epsilon}{6} + \mathcal{O}(\epsilon^2) \ . \tag{17.104}$$

A következő exponens, amit levezetünk, δ lesz. Erre, amint említettük, egy Buckingham–Gunton-egyenlőség használata a legcélszerűbb:

$$\delta = \frac{d + 2 - \eta}{d - 2 + \eta} = \frac{d - 4 + 6 - \eta}{d - 4 + 2 + \eta} = \frac{6 - \varepsilon - \eta}{2 - \varepsilon + \eta} \ . \tag{17.105}$$

[286] Ez esetben nincs veszélyes ireleváns paraméterünk jelen.

Ez a kifejezés felel meg az ε-sorfejtés első rendjének. Most mivel $\eta = \mathcal{O}(\varepsilon^2)$, ezért δ egyenletében az η–t elhanyagoljuk, és a kifejezést $\varepsilon \ll 1$–re, ε első hatványáig menőleg, lineáris formába átírjuk. Így:

$$\begin{aligned}\delta \simeq \frac{6\left(1-\frac{\varepsilon}{6}\right)}{2\left(1-\frac{\varepsilon}{2}\right)} + \mathcal{O}(\epsilon^2) &\simeq 3\left(1-\frac{\varepsilon}{6}\right)\left(1+\frac{\varepsilon}{2}\right) + \mathcal{O}(\epsilon^2) \simeq 3\left(1-\frac{\varepsilon}{6}+\frac{\varepsilon}{2}+\mathcal{O}(\varepsilon^2)\right) \\ &= 3\left(1+\frac{\varepsilon}{3}+\mathcal{O}(\varepsilon^2)\right) = 3+\varepsilon+\mathcal{O}(\varepsilon^2) \end{aligned} \qquad (17.106)$$

Tehát, a δ–ra vonatkozó végeredmény:

$$\delta = 3+\varepsilon+\mathcal{O}(\varepsilon^2)\ . \qquad (17.107)$$

Mindezek után a Widom-egyenlőségből β értéke meghatározható:

$$\gamma = \beta(\delta-1)\ \Rightarrow\ \beta = \frac{\gamma}{\delta-1} = \frac{1+\frac{\varepsilon}{6}}{2+\varepsilon}\ . \qquad (17.108)$$

Tehát az ϵ sorfejtés első rendjéig menőleg:

$$\begin{aligned}\beta &\simeq \frac{1}{2}\left(1+\frac{\varepsilon}{6}\right)\left(1-\frac{\varepsilon}{2}\right) = \frac{1}{2}\left(1+\frac{\varepsilon}{6}-\frac{\varepsilon}{2}\right) \\ &= \frac{1}{2}\left(1-\frac{\varepsilon}{3}\right) = \frac{1}{2}-\frac{\varepsilon}{6}\ . \end{aligned} \qquad (17.109)$$

Azaz

$$\beta = \frac{1}{2}-\frac{\varepsilon}{6}+\mathcal{O}(\varepsilon^2)\ . \qquad (17.110)$$

Most már a Rushbrooke-egyenlőséget felhasználva α értéke meghatározható:

$$\alpha+2\beta+\gamma = 2\ \Rightarrow\ \alpha = 2-\gamma-2\beta = 2-1-\frac{\epsilon}{6}-1+\frac{\varepsilon}{3}\ , \qquad (17.111)$$

Tehát

$$\alpha = \frac{\varepsilon}{6}+\mathcal{O}(\varepsilon^2)\ . \qquad (17.112)$$

Összefoglalva a levezetett értékeket:

$$\alpha = \frac{\varepsilon}{6}+\mathcal{O}(\varepsilon^2)\ ; \quad \beta = \frac{1}{2}-\frac{\varepsilon}{6}+\mathcal{O}(\varepsilon^2)\ ; \quad \nu = \frac{1}{2}+\frac{\varepsilon}{12}+\mathcal{O}(\varepsilon^2)\ ; \qquad (17.113)$$

$$\gamma = 1+\frac{\varepsilon}{6}+\mathcal{O}(\varepsilon^2)\ ; \quad \delta = \frac{1}{2}+\frac{\varepsilon}{12}+\mathcal{O}(\varepsilon^2)\ ; \quad \eta = 0+\mathcal{O}(\varepsilon^2)\ . \qquad (17.114)$$

A bemutatott kifejezések az $\varepsilon = 4-d$ szerinti sorfejtés eredményei $n = 1$–re (egy vektorkomponenst vettünk figyelembe a Wilson–féle képletben). Ezen eredményből $\varepsilon = 1$ extrapolációval $d = 3$ dimenziónak megfelelő értékeket számolhatunk:

$$\alpha = \frac{1}{6}\ , \quad \beta = \frac{1}{3}\ , \quad \gamma = \frac{7}{6}\ , \qquad (17.115)$$

$$\delta = \frac{7}{12}\,, \quad \nu = \frac{7}{12}\,, \quad \eta = 0\,. \tag{17.116}$$

Megjegyzendő, hogy ugyezeket a képleteket kapjuk akkor is vissza, ha nem a Wilson-féle képletet alkalmazzuk a kritikus exponensek és sajátértékek kifejezésére, ϵ-ban első rendig[287].

A levezetett fixpontok további elemzését a következő paragrafusban folytatjuk.

[287]Lásd például [3],[4].

17.3 A fixpontokkal kapcsolatos információk elemzése

Eddigi vizsgálataink során gyüjtött ismereteink tükrében, a Wilson-Fisher kritikus fixpont környezetében vett renormálási csoport traektóriákat szemléltetjük, majd az univerzalitási osztályok fogalmát tárgyaljuk.

17.3.1 Renormálási csoport traektóriák

Amint láttuk a (σ^2, σ^4) elméletben összesen három csatolási állandónk van, amelyek $h = 0$ esetben a modellt jellemzik:

$$V = (c, r, u)\ . \tag{17.117}$$

Ezen konkrét esetben, mivel c állandó, a fixpontok helyét az (r, u) diagramban ábrázolhatjuk. Ezen diagram egy pontjából kiindulva és az iterációs összefüggést (avagy a rekurziós összefüggést) alkalmazva, S növekedésével a V vektornak megfelelő konfigurációs pont mozogni fog, így minden iterációs sorozatnak egy irányított görbe fog megfelelni, a konfigurációs pont áramlási görbéje. Az így kapott görbéket felrajzolva kapjuk meg a renormálási csoport traektóriákat (áramlási görbéket). Például $d < 4$–re, a tanulmányozott esetben a következő ábra adódik:

17.1. Ábra.
A (σ^2, σ^4) modell renormálási csoport traektóriái $d < 4$ esetében.

Látható itt, hogy a V_G^* Gauss–fixpont instabil, továbbá hogy a V^* Wilson-Fisher fixpont kritikus fixpont. Kritikus felülete az (OA) félegyenes. Ha a c tengelyt is figyelembe vesszük, mely (r, u) síkra merőleges lesz, akkor az OA–vonal egy teljes síkká alakul át. Ezen sík alkotja ekkor a Wilson-Fisher fixpont kritikus felületét a V vektortérben.

Megjegyzendő még, hogy az (r, u) síkban az (OA) „kritikus-felületet” az irreleváns sajátértékhez tartozó sajátvektor feszíti ki, így, amint már azt említettük, a V^* közvetlen környezetében az áramlási görbék viselkedését az R_s^L sajátvektorai határozzák meg. Továbbá, $d > 4$–re V^* lesz instabil, V_G^* pedig stabil. Mindez úgy történik, hogy V^* átcsúszik az órigón keresztül az $u < 0$ nemfizikai tartományba miközben V_G^* helyben marad. Megjegyzendő ezenkívül, hogy $d = 4$–ben a két fixpont egybeesik de a kritikus viselkedést továbbra is a Gauss-fixpont jellemzi[288]. A $d = 4$-ben megjelenő logaritmikus korrekciók példázatát a 17.6 paragrafusban melléklet formájában mutatjuk be.

17.3.2 Az univerzalitás fogalma

A továbbiakban elemezzük egy kicsit az univerzalitás fogalmát.

Az univerzalitás azon tény, miszerint látszólag teljesen független kritikus jelenségek ugyanazon kritikus exponensekkel rendelkeznek, melyek konkrét értékei csupán n–től, d–től, és a kölcsönhatás milyenségétől[289] függenek.

Ezen tulajdonságot úgy értelmezhetjük, hogy általában a kritikus felület nagy, és így rajta nagyon sok jelenséget leíró Hamilton-operátor, különböző V vektorokban sűrített konfigurációs pontja megtalálható. Az egész kritikus felület egyetlen fixponthoz tartozik[290], és amint láttuk már, a kritikus exponenseket csupán a fixpont határozza meg. Ebben a megfogalmazásban tehát, egy ,,univerzalitási osztályt" ugyanazon kritikus felülethez hozzátartozó kritikus modellek[291] sokasága alkot.

Az előbbiekben adott megfogalmazás alapján azonban csak $T = T_c$-ben vett modellek univerzalitásáról beszélhetnénk, ez viszont az univerzalitás fogalmának a szükítését jelentené. Az univerzalitás teljesen általánosan különböző modellek kritikus tartományban vett identikus viselkedését jelenti, olyan modellekről lévén szó amelyek a kritikus tartományban (azaz T_c közelében vannak ugyan) de nem szükségszerüen kell a kritikus felületen (azaz $T = T_c$-ben) elhelyezkedjenek. Az univerzalitási osztályt az univerzális (modellsajátosságoktól független) mennyiségek halmaza, a kritikus exponensek együttese határozza meg[292]. Ezek egyértelmüen egy adott kritikus-fixponthoz rendelhetőek, de többségük $t \to 0$ határesetben és nem kizárólag $t = 0$-ban van értelmezve. Ezért, az univerzalitás fogalmát nem szabad kizárolagosan a kritikus felülethez kötnünk, hanem a kritikus-fixpont jellemzőihez kell kapcsolnunk. Ilyen értelemben emlékeztetünk arra, hogy végeredményben a kritikus exponensek kiinduló két értékének meghatározásához a kritikus-fixpont releváns paraméterei vezettek.

Az elmondottaknak megfelelően[293] az univerzalitás annak köszönhető, hogy

[288] Mindez azonban logaritmikus korrekciók megjelenésével történik.

[289] Pontosan, itt a kölcsönhatás hatótávolságáról van szó.

[290] Ebben a pontban rendkívül lényeges a szeparatrix és kritikus felület közötti különbség megtétele, ugyanis amint már említettük, olyan eset is előfordulhat amelyben egy szeparatrixon több, egymástól élesen elhatárolt kritikus felület található.

[291] Azaz $T = T_c$-ben vett modellek

[292] Megjegyzendő, hogy nemcsak kritikus exponens lehet univerzális. Igazolható például, hogy skálamennyiségek amplitudóinak aránya is univerzális mennyiség lehet, lásd például [5].

[293] Lásd például [6].

minden azonos univerzalitási osztályba tartozó, egymástól *különböző* de ugyanazon kritikus-fixpont közelében lévő[294] rendszert, *ugyanazon* két releváns sajátérték tóvolítja el a kritikus-fixponttól.

17.4 A végtelen sok vektorkomponens határesete

Mindazon kritikus exponensek, melyeket az előbbiekben levezettünk, az $n = 1$ esetre vonatkoztak. Vizsgáljuk meg a továbbiakban, hogy az $n \to \infty$, „ellentétes" határesetben milyen következtetéseket kapunk eredményül. A szakirodalomban ezen esetet szférikus megoldásként tartják számon.

17.4.1 A rekurziós képletek levezetése a szférikus határesetben

A tanulmányozott modellben σ és y nagyon nagyszámú ($n >> 1$) komponensel rendelkező vektoroknak felelnek meg[295]. Tételezzük fel továbbá, hogy $Q \equiv Q(\sigma^2)$, azaz Q csupán σ^2 függvénye.

A Wilson-féle képletben $Q(\sigma \pm y)$ szerepel, így ha Q csak σ^2 függvénye, akkor $(\sigma \pm y)^2$ tagokból összeálló kifejezés adja a „kölcsönhatási" tagnak megfelelő járulékot. Ekkor,

$$(\sigma \pm y)^2 = \sigma^2 + y^2 \pm 2\sigma \cdot y \; , \tag{17.118}$$

ahol

$$\sigma^2 = \sum_{i=1}^{n} \sigma_i^2 \; ; \quad y^2 = \sum_{i=1}^{n} y_i^2 \; . \tag{17.119}$$

Az utóbbi két négyzetes mennyiség mindegyike $\mathcal{O}(n)$ nagyságrendűnek tekinthető. Ezzel ellentétben, $\sigma \cdot y = \mathcal{O}(1)$ lesz, hiszen e skaláris szorzatban csupán y–nak σ–ra eső egyetlen komponense szerepel. Tudvalevő viszont, hogy $\mathcal{O}(1)$–es tagok, az $\mathcal{O}(n)$ tagok mellett mindig $\mathcal{O}(1/n)$ járulékot adnak, és így $n \to \infty$–ben elhanyagolhatók. Ténylegesen,

$$\mathcal{O}(n) + \mathcal{O}(1) = \mathcal{O}(n)\left(1 + \mathcal{O}(\frac{1}{n})\right) \; . \tag{17.120}$$

Tehát az $n \to \infty$ határesetben:

$$\frac{1}{2}[Q(\sigma + y) + Q(\sigma - y)] \equiv Q(\sigma^2 + y^2) \; . \tag{17.121}$$

Mindezek után a Wilson-féle képletben szereplő $J(\sigma^2)$ a következőképpen alakul:

$$\begin{aligned} J(\sigma^2) &= \int d^n y e^{-y^2 - Q(\sigma^2+y^2)} \sim \int_0^\infty y^{n-1} dy e^{-y^2 - Q(\sigma^2+y^2)} \\ &= \int_0^\infty dy e^{(n-1)\ln y - y^2 - Q(\sigma^2+y^2)} \; . \end{aligned} \tag{17.122}$$

---

[294] Általánosan: a kritikus-fixpont kritikus felülete közelében lévő

[295] A modell a szférikus határesetbe mindemellett akkor kerül, ha a végeredmények szintjén $n \to \infty$ áll fenn.

Továbbá, ha $n \to \infty$, akkor $n - 1 \simeq n$, és így ($K =$ konstans):

$$J(\sigma^2) = K \int_0^\infty dy \exp[n \ln y - y^2 - Q(\sigma^2 + y^2)] \ . \tag{17.123}$$

Mivel az integrandusban $n \to \infty$ szerepel, az integrál értéke gyakorlatilag egyenlő az integrandus maximum-értékével (ezen tag mellett a Darboux-összeg többi tagja exponenciálisan kicsi). Így tehát:

$$J(\sigma^2)|_{n\to\infty} = K \exp[n \ln y_M - y_M^2 - Q(\sigma^2 + y_M^2)] \ , \tag{17.124}$$

ahol

$$\frac{\partial}{\partial y}[n \ln y - y^2 - Q(\sigma^2 + y^2)]|_{y=y_M} = 0 \ , \tag{17.125}$$

tehát:

$$y_M^2(\sigma^2) = \frac{n}{2} \frac{1}{1 + t(\sigma^2 + y_M^2(\sigma^2))} \ . \tag{17.126}$$

Ezen kifejezésben a $t(x)$ függvényt

$$t(x) = \frac{\partial Q(x)}{\partial x} \ , \tag{17.127}$$

összefüggés definiálja. Ténylegesen, (**??**) megadásakor

$$t(\sigma^2 + y_M^2) = \frac{\partial Q(\sigma^2 + y_M^2)}{\partial y_M^2} = \frac{\partial Q(\sigma^2 + y_M^2)}{\partial(\sigma^2 + y_M^2)} \tag{17.128}$$

ahol, a második egyenlőség felírásakor figyelembe vettük, hogy a σ változó az y_M meghatározása pillanatában konstansnak tekíntett. Az is megfigyelhető (**??**) alapján, hogy $n >> 1$ fennállása mellett

$$\frac{\partial J(\sigma^2)}{\partial \sigma^2} = J(\sigma^2) \left[-\frac{\partial Q(\sigma^2 + y_M^2)}{\partial(\sigma^2 + y_M^2)} \cdot \frac{\partial(\sigma^2 + y_M^2)}{\partial \sigma^2} + \left(\frac{n}{y_M} - 2y_M \right) \frac{\partial y_M^2}{\partial \sigma^2} \right] \tag{17.129}$$

Itt figyelembe vettük, hogy (**??**) alapján az y_M is σ^2 függő. A kapott összefüggés első tagjában $\partial(\sigma^2 + y_M^2)/\partial\sigma^2 = 1 + \partial y_M^2/\partial\sigma^2$. Ennek első, a Q deriváltját tartalmazó tagja (**??**) figyelembevételével $-t(\sigma^2 + y_M^2)$ függvényt adja eredményül, míg a második tagja a (**??**) többi járulékaival az (**??**,**??**) értelmében zéró. Ennek megfelelően tehát (**??**) alapján a

$$\frac{\partial J(\sigma^2)}{\partial \sigma^2} = -J(\sigma^2) t(\sigma^2 + y_M(\sigma^2)) \tag{17.130}$$

egyenlőség írható.

Mindezek után térjünk vissza a Wilson-féle rekurziós összefüggéshez amely szerint[296]

$$Q'(\sigma^2) = -2^d \ln \frac{J(\sigma^2 \cdot 2^{2-d})}{J(0)} \; . \tag{17.131}$$

Ilyen formában, a rekurziós képletet nagyon nehéz lesz elemezni. Próbáljuk ezért a képleteket a $t = t(\sigma^2)$ változóval kifejezni. Ez okból kifolyólag deriváljuk Q'–et σ^2 szerint:

$$\begin{aligned} \frac{\partial Q'(\sigma^2)}{\partial \sigma^2} &= t'(\sigma^2) = -2^d \frac{1}{J(\sigma^2 \cdot 2^{2-d})} \frac{\partial J(\sigma^2 \cdot 2^{2-d})}{\partial \sigma^2} \\ &= -2^d \frac{(-2^{2-d} t(\sigma^2 \cdot 2^{2-d} + y_M^2))}{J(\sigma^2 \cdot 2^{2-d})} J(\sigma^2 \cdot 2^{2-d}) \; . \end{aligned} \tag{17.132}$$

A (??) összefüggésben először a deriválási változót $\partial/\partial\sigma^2 = 2^{2-d}\partial/\partial(\sigma^2 \cdot 2^{2-d})$ formában változtattuk meg, felhasználtuk a (??) összefüggést, majd figyelembe vettük, hogy (??)-ben szereplő J argumentumában a (??)-hoz képest $\sigma^2 \cdot 2^{2-d}$ van jelen. Tehát:

$$\begin{cases} t'(\sigma^2) = 2^2 t(\sigma^2 \cdot 2^{2-d} + y_M^2) \; ; \\ \\ y_M^2 = \frac{n}{2} \, \left[1 + t(\sigma^2 \cdot 2^{2-d} + y_M^2)\right]^{-1} \; . \end{cases} \tag{17.133}$$

A rekurziós képletek levezetése ezennel megtörtént. A (??) első egyenlete (??)-ből származik, a második egyenlete pedig (??) alapján íródott. Ennek felírásakor figyelembe vettük, hogy y_M a $J(\sigma^2)$ paramétere a (??) összefüggésben, tehát függ σ^2-től. A (??)-ben szereplő J argumentumában $\sigma^2 \cdot 2^{2-d}$ van jelen, így a (??) egyenletekben megjelenő y_M a $J(\sigma^2 \cdot 2^{2-d})$ paramétere. Ezért szerepel (??) második egyenlőségében lévő $t(...)$ függvény argumentumában σ^2 helyett $\sigma^2 \cdot 2^{2-d}$.

A következőkben a fixpontok meghatározásával foglalkozunk.

17.4.2 A fixpontok meghatározása

Hogy a levezetett rekurziós összefüggéseket megoldjuk, a következő matematikai fogáshoz folyamodunk:

a.) Az y_M^2 kifejezésébe $t(\sigma^2 \cdot 2^{2-d} + y_M^2) = t'(\sigma^2)/4$–et helyettesítünk az első összefüggésből, ami szerint a rekurziós képletünk a következőképpen alakul:

$$\begin{cases} t'(\sigma^2) = 4t(\sigma^2 \cdot 2^{2-d} + y_M^2) \\ \\ y_M^2 = \frac{n}{2} \, \left[1 + \frac{t'(\sigma^2)}{4}\right]^{-1} \; . \end{cases} \tag{17.134}$$

b.) A továbbiakban, induljunk ki $t \equiv t(\sigma^2)$–ből, és fejezzük ki ivertálással a σ^2 tagot. Ekkor:

$$\sigma^2 = f(t) \equiv f(t(\sigma^2)) = f([\sigma^2]) \; . \tag{17.135}$$

[296]Itt figyelembe kell venni, hogy $Q = Q(\sigma^2)$ esetet vizsgálunk.

Ezek szerint tehát, az f azon számmal egyenlő, ami t argumentumában van.
Így $t(\sigma^2 \cdot 2^{2-d} + y_M^2) = t'/4$–ből:

$$(\sigma^2 \cdot 2^{2-d} + y_M^2) = f(t(\sigma^2 \cdot 2^{2-d} + y_M^2)) = f\left(\frac{t'}{4}\right) \; ; \tag{17.136}$$

Itt y_M^2 helyett (**??**) második képletét felhasználva:

$$f\left(\frac{t'}{4}\right) = \sigma^2 \cdot 2^{2-d} + \frac{n}{2}\frac{1}{1+\frac{t'}{4}} \; ; \quad t' \equiv t'(\sigma^2) \; . \tag{17.137}$$

c.) Hasonlóan $t \equiv t(\sigma^2)$–hez, $t' \equiv t'(\sigma^2)$–ből is kifejezhető σ^2, mely összefüggésre $\sigma^2 = f'(t')$ adódik. Ezt az előbb kapott $f(t'/4)$ összefüggésben σ^2 helyére téve, és $f'(t')$–t kifejezve, a következő egyenlőséget kapjuk:

$$f'(t') = 2^{d-2} f\left(\frac{t'}{4}\right) - \frac{n}{2} \cdot 2^{d-2}\left[1 + \frac{t'}{4}\right]^{-1} \; . \tag{17.138}$$

A kapott egyenlőség tulajdonképpen a kiinduló $t' \to t$ rekurzió inverzfüggvényeire felírt $f' \to f$ rekurziós összefüggés, ahol f jellemzi a kiinduló rácsot, és f' a blokktranszformáció után kapott rácsot.

Ilyen körülmények között a keresett fixpontot $f' = f = f^*$ egyenlőség határozza meg. Most ezen összefüggés alkalmazásakor figyelembe kell venni, hogy a rekurziós képletünkben f' argumenumában t', míg f argumentumában $t'/4$ szerepel.

Továbbmenőleg, az f^* ,,fixpont" függvényt úgy próbáljuk kifejezni, hogy hatványsorának ,,fixpont" együtthatóit határozzuk meg. Ekkor első lépésben

$$f^*(t') = \sum_{m=1}^{\infty} b_m^* (t')^{m-1} \; . \tag{17.139}$$

Most (**??**) jobboldalának második tagjára

$$\frac{1}{1+x} = \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^{k-1} x^{k-1} \; . \tag{17.140}$$

Ezen összefüggéseket (**??**)–be visszahelyettesítve, a következő egyenlet adódik:

$$\sum_{m=1}^{\infty} b_m^* t'^{m-1} = \sum_{m=1}^{\infty} 2^{d-2} b_m^* \left(\frac{1}{4}\right)^{m-1} \cdot t'^{m-1} - \frac{n}{2} 2^{d-2} \sum_{m=1}^{\infty} (-1)^{m-1} \left(\frac{1}{4}\right)^{m-1} t'^{m-1} \tag{17.141}$$

Ebből viszont

$$\sum_{m=1}^{\infty} \left[(1 - 2^{d-2m}) b_m^* + \frac{n}{2}(-1)^{m-1} \cdot 2^{d-2}\right] t'^{m-1} = 0 \; , \tag{17.142}$$

azaz

$$b^*_m = \frac{n}{2} \, \frac{(-1)^m \cdot 2^{d-2m}}{1 - 2^{d-2m}} \; . \qquad (17.143)$$

A kapott b^*_m koefficiensek segítségével az f függvény segítségével kifejezett fixpont egyszerüen megadható. Ennek megfelelően

$$b^*_m = \frac{n}{2} \, \frac{(-1)^{m+1}}{1 - 2^{2m-d}} \; ; \quad m \geq 1 \qquad (17.144)$$

továbbá

$$f^*(t') = \sum_{m=1}^{\infty} b^*_m t'^{m-1} \qquad (17.145)$$

A levezetett egyenlőségek határozzák meg az $f^*(t')$ fixpont-függvény értékét.

17.4.3 A csatolási állandókra vonatkozó rekurziós összefüggések

A levezetett összefüggésekből valamilyen formában a rács és a blokk szintnek megfelelő csatolási állandók közötti renormálási csoport egyenleteket is meg kell kapnunk. E célból megfigyelhető, hogy az $f(t')$ függvényben t' játsza ugyanazt a szerepet, amit a σ játszik a Q–ban. Tehát a csatolási állandókra vonatkozó renormálási csoport egyenleteket ezúttal úgy kapjuk meg, hogy t'–nek különböző hatványai előtt szereplő koefficienseket az f függvényre vonatkozó rekurziós összefüggés két oldalán egyenlővé tesszük.

Ezek szerint

$$f'(t') = \sum_{m=1}^{\infty} b'_m (t')^{m-1} \; , \qquad (17.146)$$

és hasonló módon $f(t')$ esetében

$$f(t') \;\; = \;\; \sum_{m=1}^{\infty} b_m (t')^{m-1} \; . \qquad (17.147)$$

Az utóbbi egyenlőségből viszont

$$f\left(\frac{t'}{4}\right) = \sum_{m=1}^{\infty} b_m \cdot 2^{-2m+2} (t')^{m-1} \; . \qquad (17.148)$$

Tudjuk továbbá, hogy

$$\left[1 + \frac{t'}{4}\right]^{-1} = \sum_{m=1}^{\infty} (-1)^{m-1} \left(\frac{t'}{4}\right)^{m-1} = \sum_{m=1}^{\infty} (-1)^{m-1} 2^{-2m+2} (t')^{m-1} \; . \qquad (17.149)$$

Mindezen eredményeket a (??)-ben f-re adott rekurziós összefüggésekbe helyettesítve a

$$\begin{aligned}\sum_{m=1}^{\infty} b'_m (t')^{m-1} &= 2^{d-2} \sum_{m=1}^{\infty} 2^{-2m+2} b_m (t')^{m-1} \\ &- \frac{n}{2} 2^{d-2} \sum_{m=1}^{\infty} (-1)^{m-1} 2^{-2m+2} (t')^{m-1} \end{aligned} \tag{17.150}$$

egyenlőség adódik. Ebből a jobb- és baloldalon lévő $(t')^{m-1}$ hatványok együtthatóinak egyenlőségét felírva, a következő relációk erednek:

$$b'_m = 2^{d-2m} b_m + \frac{n}{2} (-1)^m 2^{d-2m} , \qquad m = 1, 2, \ldots \infty . \tag{17.151}$$

Ezen egyenletek jelentik az $n \to \infty$ határesetben a csatolási állandókra felírt renormálási csoport egyenleteket, amelyeket a Wilson-féle rekurziós összefüggések adnak $S = 2$ értékre.

17.4.4 A linearizált rekurziós összefüggések

Most az R_S^L linearizált operátor levezetése következik. Az előbbiekben megkapott b_m tagokra vonatkozó rekurziós képletek mindkét oldalából vonjuk ki a b_m^* tagot. Ekkor:

$$b'_m - b_m^* = 2^{d-2m} b_m - \underbrace{2^{d-2m} b_m^* + 2^{d-2m} b_m^*}_{=0} - b_m^* + \frac{n}{2} (-1)^m 2^{d-2m} . \tag{17.152}$$

Most a

$$\delta b'_m = b'_m - b_m^* \; ; \quad \delta b_m = b_m - b_m^* \tag{17.153}$$

jelölések bevezetésével, a következő egyenlőség írható fel:

$$\delta b'_m = 2^{d-2m} \delta b_m + b_m^* (2^{d-2m} - 1) + \frac{n}{2} (-1)^m 2^{d-2m} . \tag{17.154}$$

Ezen összefüggésbe behelyettesíthetjük b_m^* értékeit, amelyeket ismerünk:

$$b_m^* (2^{d-2m} - 1) = \frac{n}{2} \, \frac{(-1)^m 2^{d-2m}}{1 - 2^{d-2m}} \, (2^{d-2m} - 1) = -\frac{n}{2} (-1)^m 2^{d-2m} . \tag{17.155}$$

Így a jobboldalon, a (??) rekurziós képlet két utolsó δb_m után álló tagja zérót eredményez, és a megmaradt összefüggés:

$$\delta b'_m = 2^{d-2m} \delta b_m . \tag{17.156}$$

Ezen relációk jelentik a fixpont körül linearizált renormálási csoport egyenleteket.

Látható, hogy R_S^L diagonális, és formája aránylag egyszerű:

$$R_S^L|_{S=2} = \begin{pmatrix} 2^{d-2} & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 2^{d-4} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 2^{d-6} & 0 & \dots \\ & & \vdots & & \end{pmatrix} \tag{17.157}$$

Ugyanezen kifejezést meg lehetett volna közvetlenül K_S–ből is kapni a már ismert szabály szerint:

$$(R_S^L)_{nm} = \left.\frac{\partial b'_n}{\partial b_m}\right|_{b_i=b_i^*} , \tag{17.158}$$

a (**??**) összefüggésből kiindulva.

17.4.5 A kritikus exponensek meghatározása

A sajátértékek, R_S^L ismeretében, ez esetben közvetlenül leolvashatók:

$$\lambda_1 = 2^{d-2},\ \lambda_2 = 2^{d-4},\ \lambda_3 = 2^{d-6},\ \dots \text{ stb.} \tag{17.159}$$

Megfigyelhető továbbá, hogy $\lambda_i = S^{y_i}$ definíció automatikusan fennáll. A λ_1 releváns, ha $y_1 > 0$, amiből következik, hogy

$$d > 2\ . \tag{17.160}$$

Továbbá a fixpont kritikus fixpont, ha $y_2 < 0$, azaz

$$d < 4\ . \tag{17.161}$$

Tehát azt a következtetést vonhatjuk le, hogy az $n \to \infty$ határesetben levezetett eredmények $2 < d < 4$–re adnak kritikus felületet, azaz stabil fixpontot, tehát pontosan $d = 3$ dimenzióban alkalmazhatóak. A Wilson-féle képlet nagy érdeme, hogy a Gauss-fixpont, továbbá a (σ^2, σ^4) modell nemtriviális fixpontja körül vett ϵ sorfejtés első rendjeihez hasonlóan, itt is egzakt eredményt ad λ_i–re. (Az $n \to \infty$ eset egzakt megoldása is ugyanezt a végeredményt adja).

Most számítsuk ki a kritikus exponenseket:

A Wilson-féle képlet alapján levezetett két exponens

$$\nu = \frac{\ln 2}{\ln \lambda_1} = \frac{\ln 2}{(d-2)\ln 2} = \frac{1}{d-2}\ , \tag{17.162}$$

és

$$\eta = 0\ . \tag{17.163}$$

A többi kritikus exponens, a szokásos módon, a skálatörvények segítségével származtatható.

$$\gamma = (2-\eta)\nu = \frac{2}{d-2}\,, \tag{17.164}$$

$$\delta = \frac{d+2-\eta}{d-2+\eta} = \frac{d+2}{d-2}\,, \tag{17.165}$$

$$\alpha = 2-\nu d = 2-\frac{2d-4-d}{d-2} = \frac{d-4}{d-2}\,, \tag{17.166}$$

$$\beta = \frac{\gamma}{\delta-1} = \frac{\frac{2}{d-2}}{\frac{d+2}{d-2}-1} = \frac{2}{d+2-d+2} = \frac{1}{2}\,. \tag{17.167}$$

Tehát az $n\to\infty$–ben kapott végeredmények:

$$\begin{array}{ll} \alpha = \dfrac{d-4}{d-2} & \delta = \dfrac{d+2}{d-2} \\ \beta = \dfrac{1}{2} & \nu = \dfrac{1}{d-2} \\ \gamma = \dfrac{2}{d-2} & \eta = 0 \end{array} \tag{17.168}$$

A levezetett kritikus exponensek kifejezésébe $d=3$-at helyettesítve[297]

$$\alpha=-1\,,\quad \beta=\frac{1}{2}\,,\quad \gamma=2\,,\quad \delta=5\,,\quad \nu=1\,,\quad \eta=0 \tag{17.169}$$

értékek adódnak. Ezek tökéletesen egyeznek a $d=3$-ban egzaktúl megoldott szférikus modell kritikus exponenseivel. Ezen modell érdekessége az, hogy talán az egyedüli fizikai világhoz közelálló $d=3$ dimenzióban egzaktúl megoldott modellek közé tartozik.

Néhány megjegyzés füzhető még a „szférikus" jelzőhöz. A fizikai szempontot illetőleg megemlítendő ennek kapcsán, hogy Stanley mutatta meg, hogy az $n\to\infty$ határeset ugyanazt a termodinamikát adja vissza, mint a szférikus modell. Magát az eredeti szférikus modellt Kac és Berlin vezette be jóval a renormálási csoport megjelenése előtt[298] A modell eredeti változatának kiindulópontja egy n vektorkomponensű dinamikus változót tartalmazó és legközelebbi szomszédkölcsönhatásokat figyelembevévő, rácson értelmezett Heisenberg modell

$$H = -J\sum_{<i,j>}\sigma_i^{(n)}\cdot\sigma_j^{(n)} \tag{17.170}$$

[297] Végeredményben ez az egyedüli fizikai dimenzió amelyre a (??) által adott $t^*\neq 0$ nemtriviális fixpont kritikus fixpont szerepet játszik, azaz fizikai fázisátalakulást jelől.

[298] A $d=2$ Ising modell Onsager által szolgáltatott megoldása után, Uhlenbeck hatására Kac foglalkozni kezdett a $d=3$ Ising modell tanulmányozásával. Miután ezen modell megoldásában előrehaladás nem történt Kac alakította ki a szférikus modellt mely úgy tünt hogy $d=3$-ban megoldható és a háromdimenziós Ising modellhez látszólag közelálló. Miután Kac a megoldásba Feynmant is bevonta, egy előadást tartott melyen T. H. Berlin is résztvett, majd ennek hatására dolgozni kezdett a modellen. A megoldást végül is Kac és Berlin szolgáltatta, lásd [7].

amelyben $J > 0$, a megjelenő skaláris szorzat $\sum_{\alpha=1}^{n} \sigma_i^\alpha \sigma_j^\alpha$ formában értendő és $\sum_{\alpha=1}^{n} (\sigma_i^\alpha)^2 = \sigma^2$ áll fenn minden egyes $1 \leq i \leq N$ csomópontra. Ezen felírásban az $n = 1$ eset az Ising-modell, az $n = 2$ eset az XY–modell, és az $n = 3$ eset a Heisenberg-modell nevet viseli, ha σ_i-t egy spin jellegű változónak tekíntjük. A szférikus modellt[299] (??) alapján[300] $n \to \infty$, $\sigma^2 = 1$ megkötésekkel kapjuk. Ez a modell $d = 2$ dimenzióban, az Ising modellel ellentétben, rendezett fázist zérótól különböző hőmérsékleten nem ad[301], de $d = 3$-ban véges T_c értékben ferromágneses fázist eredményez mely kritikus exponensei a (??)-ben feltüntetett értékek.

A szférikus modell tulajdonképpen egy Gauss modellként is felfogható[302], amely Hamilton operátora:

$$\beta H = \frac{1}{2} \int d^d x [c(\nabla \sigma)^2 + r\sigma^2] \,, \tag{17.171}$$

ahol viszont σ–nak végtelen sok vektor komponense (n) van, azaz:

$$\sigma^2 = \sum_{i=1}^{n} \sigma_i^2 |_{n\to\infty} \,. \tag{17.172}$$

Hogy a számítások során σ^2 átlaga véges maradjon a végtelen sok komponens mellett, ki kell még kötni, hogy $\int d^d x(\sigma^2) = \text{konst.}$ áll fenn. Érdemes megjegyezni, hogy ez utóbbi megkötés szerepe az, hogy σ nagyságának növekedését korlátozza. Ebből a szempontból hatása hasonló a Ginzburg-Landau $\beta H[\sigma]$ kifejezés σ^4 tagjának hatásához, de a megkötés resztriktív ereje kisebb mint a σ^4 tagé[303].

Megfigyelhető, hogy (??) $d = 4$–re a

$$\alpha = 0 \,, \quad \beta = \frac{1}{2} \,, \quad \gamma = 1 \,, \delta = 3 \,, \quad \nu = \frac{1}{2} \,, \quad \eta = 0 \,, \tag{17.173}$$

molekuláris–tér kritikus exponens értékeket adja vissza. De a $t^* \neq 0$ nemtriviális fixpont $d = 4$-re, amint már láttuk instabil, megszünik kritikus fixpontnak lenni. A $d \geq 4$ esetében ezúttal is a Gauss-fixpont a kritikus fixpont[304] amely a t-re felírt rekurziós összefüggés triviális fixpont megoldását képezi. Ténylegesen a

$$t'(\sigma^2) = 4t(\sigma^2 \cdot 2^{2-d} + y_m^2) \,, \tag{17.174}$$

rekurziós összefüggés a

$$t' = t = t^* = 0 \tag{17.175}$$

[299] Az eredeti változatban $\sum_{i=1}^{N} \sigma_i^2 = N$ szerepelt $N \to \infty$ határesetben

[300] Lásd például [7].

[301] A $d = 2$ esetben $T_c = 0$ eredményt szolgáltat a szférikus modell, egzakt megoldáson keresztül jelezve, hogy $n > 1$-re hosszútávú térbeli rendezettség $d = 2$-ben nincs jelen.

[302] Kontinuum határesetben, lásd [8].

[303] A szférikus modellben fellépő $\int d^d x \sigma^2 = \text{konst.}$ megkötés csupán egy, a teljes rendszerre vett átlagot korlátozza, míg a σ^4 tag minden spinértéket, lásd [8].

[304] Lásd például [8].

triviális megoldást is visszaadja, mely ezúttal is a Gauss-fixpontot jelenti. A jellemző exponensei (??)-al egyeznek.

Látható tehát, hogy úgy, mint $n = 1$–re, $n \to \infty$–ben is, a $d \geq 4$ dimenziókat a kritikus Gauss fixpont uralja, amely a neki megfelelő kritikus exponenseket eredményezi. Ha viszont $2 < d < 4$ és $n \to \infty$, a kritikus fixpont a (??) nemtriviális fixpontnak felel meg a hozzá tartozó (??) kritikus exponens értékekkel.

17.5 Összehasonlítás a kisérleti adatokkal

A következőkben vessük össze kisérleti adatokkal a kiszámított értékeket. A kísérleti adatok, az első táblázatban (lásd a 17.1 Táblázatot) mind $d = 3$ dimenzióra vonatkoznak és melléjük helyezve elméleti eredmények találhatók.

Az első oszlopban feltüntetett kisérleti adatok legtöbbjüke $n = 1$–ként értelmezhető, és a következő területekről származnak: folyadék–gáz; antiferromágnes; ferromágnes; ferrimágnes; He^4 λ-átmenet; bináris ötvözetek; stb[305] A második oszlopban található kisérleti adatok szigorúan a 3d Ising-modell univerzalitási osztályába sorolható folyadék rendszereken végzett kisérletekből származnak[306] Ezen két oszlop után elméleti adatok következnek. Az LE-vel jelölt harmadik oszlop a Landau elmélet eredményeit tartalmazza. Az SzM-3d-vel jelölt negyedik oszlop a szférikus-modell ($d = 3$) eredményeit mutatja be. A következő két oszlop $d = 3$ dimenzióban és $n = 1$ vektorkomponensre vett ϵ sorfejtés eredményeit tartalmazza külön első rendig (1r-ϵ), és külön második rendig (2r-ϵ). Végül, az utolsó oszlop olyan kritikus exponenseket tartalmaz amelyeket $\alpha = \eta = 0$ feltételezésből kiindulva csupán a skálatörvények figyelembevételével számítottunk ki.

Az Ising-modellre vonatkozó elméleti adatokat a 17.2 Táblázat tartalmazza. Itt a $d = 2$ értékek az Onsager-féle egzakt megoldásból, míg a $d = 3$ esetben vett értékek szimulációs adatokból és magashőmérsékleti sorfejtésekből származnak[307]. Az LE oszlop, a Landau-elmélet eredményeit felmutató oszlop után az Ising-modellre $d = 2$ és $d = 3$-ban végzett ϵ sorfejtés eredményei találhatóak külön első (1r-ϵ) és külön ötöd (5r-ϵ) rendig[308].

[305] A feltüntetett adatok forrása [9] és az ott adott bibliográfiai adatok.

[306] Lásd [10].

[307] Az adatok a [10] 3.1-Táblázatából valók.

[308] Az ötödrendig vett adatok forrását [11]-ben adott ν és η értékek képezik amelyekből a skálatörvények segítségével voltak a többi kritikus exponensek kifejezve.

A $d=3$ dimenziót jellemző adatok a következőek:

Exp.	Kís. $3d$	Kís. $f3d$	LE	SzM $3d$	1r-ϵ 3d1n	2r-ϵ 3d1n	SkT 3d
α	0–0.1	0.110–0.116	0	1	0.16	0.077	0
β	0.3–0.38	0.316–0.327	0.5	0.5	0.34	0.340	0.33
γ	1.2–1.4	1.230–1.250	1	2	1.16	1.244	1.33
δ	4.2–4.4	4.600–4.900	3	5.0	4.0	4.46	5.0
ν	0.6–0.7	0.615–0.635	0.5	1	0.58	0.626	0.66
η	0–0.1	0.016–0.060	0	0	0	0.037	0

17.1 Táblázat

Látható, hogy a molekuláris–tér elmélet α es η kivételével elég erős eltéréseket ad a kísérleti adatok viszonylatában.

Az $n \to \infty$ szférikus-modell egzakt megoldás γ, δ, ν exponensekre az MTE–hez képest növel (és pontosan azon MTE kritikus exponenseknél, melyeket növelve kéne a kísérleti adatokhoz közelíteni). Viszont a kapott növekedés túl nagy értékű. Hangsúlyozni szeretnénk itt, hogy mivel a szferikus modell egzakt megoldásáról van itt szó mindez a modell valóságosságát tükrözi és nem a modellkörülmények között számított kritikus exponensek helyességét. A megállapítás tehát az, hogy a szférikus-modell mint modell, a háromdimenzióban lejátszodó és $n = 1$-gyel jellemezhető fizikai kritikus jelenségeket jobban adja vissza mint a Landau-elmélet. Nyilvánvaló azonban, hogy egy $n \to \infty$ feltételezést magába fogló matematikailag pontos leírás az $n = 1$-nek megfelelő viselkedést nem adhatja vissza hibamentesen $d = 3$-ban.

Ehhez képest az ϵ sorfejtés, első rendig és $\epsilon = 1$ értékkel, szembetűnően jó eredményeket ad a kisérleti mérések viszonylatában, melyek másod (ϵ^2) rendben, majd magasabb rendekben még jobban fokozhatók, lásd a 17.2 Táblázat adatait[309].

Amint említettük, a Landau-elmélet $\alpha = \eta = 0$ értékei elfogadhatóak $d = 3$-ban. Erre alapozva meglepően jó eredményt adnak a skálatörvények $\alpha = \eta = 0$–ra támaszkodva (ehhez egyetlen d–t tartalmazó hiperskálatörvényt kell csak használni, ami általában a Josephson $\alpha = 2 - \nu d$–féle egyenlőség.). Amint láttuk, a skálatörvények a renormálási csoport elméletből a kritikus fixpont tulajdonságokon keresztül származtathatóak. Végeredményben azonban a skálatörvények a RG nélkül is megkaphatóak a Kadanoff blokk–konstrukció alapján, amint azt a 7. fejezetben bemutattuk. De a skálatörvények önmagukban nem alkalmasak kritikus exponensek meghatározására. Mellettük kell még legyen valami, ami 2 kritikus exponenset meghatározzon. Ezt a szerepet a renormálási csoport tölti be, mégpedig olyan formában, hogy egyben a skálatörvényeket is visszaadja.

[309] Az ϵ sorfejtés egy aszimptotikus sort eredményez, mely $\epsilon < 1$ esetben rigurózus. Így meglepőek kicsit ezen eredmények, mihez az is hozzájárul, hogy $\epsilon = 2$ eredmények is szembetünően jók, lásd a 17.2 Táblázatot. Megjegyzendő viszont, hogy magasabbrendű ϵ-sorfejtéses számítások Borel-féle összegzéssel történnek.

Érdekesség kedvéért a következő táblázat az Ising-modellre vonatkozó eredményeket foglalja össze $d = 2$ és $d = 3$ dimenzióban:

Exp.	Ising $2d$	Ising $3d$	LE	1r-ϵ 2d	$5r - \epsilon$ 2d	1r-ϵ 3d	5r-ϵ 3d
α	0	0.110	0	0.33	0.02	0.16	0.108
β	1/8=0.125	0.325	0.5	0.16	0.128	0.34	0.32
γ	7/4=1.75	1.240	1	1.33	1.72	1.16	1.23
δ	15.0	4.820	3	5.0	14.4	4.0	4.78
ν	1.0	0.630	0.5	0.65	0.99	0.58	0.63
η	0.25	0.032	0	0	0.26	0.0	0.037

17.2 Táblázat

A táblázatban az LE oszlop a MTE elmélet eredményeinek felel meg, és amint azt láttuk ez $d \geq$ 4-ben jellemez valóságos fázisátalakulást. Így az LE oszloptól oszloponként balra haladva[310] a kritikus exponensek dimenziófüggésére lehet következtetni. Először is, a felső kritikus dimenzió felett, hol a hiperskálafüggvények nem teljesűlnek, a kritikus exponensek állandóak, d-től függetlenek és értékük az MTE értékekkel egyezik. Ezen tulmenőleg, a 17.2 táblázat alapján látható, hogy a felső kritikus dimenzió alatt, γ–tól η–ig a kritikus exponensek a dimenzió csökkenésével mind nőnek[311].

Ezzel ellentétben, a β kritikus exponens a felső kritikus dimenzió alatt a dimenzió csökkenésével csökken. Az α kritikus exponens pedig maximumot mutat $d =$ 3-ban.

A dimenzió függvényében vett ,,síma" viselkedés[312] jelenlétéről a 17.3 Táblázatban bemutatott Ising-modellre vonatkozó szigorú értelemben vett kritikus exponensek is tanúskodnak (lásd 7.6 paragrafust).

[310] Legalábbis $n = 1$ esetében

[311] Ha figyelembe vesszük az egydimenziós Ising modellnél bemutatottakat, miszerint ez esetben $T =$ 0-nak megfelelő ,,matematikai" kritikus hőmérséklet lép fel $d =$ 1-ben $n = 1$ esetében, mely $T \to T_c = 0$ divergenciái többnyire exponenciális jellegüek, az említett kritikus exponens növekedést divergensnek tekínthetnénk $d =$ 1-ben bizonyos exponenseknél. Az η értéke például (7.107) alapján egy, és így (7.102) értelmében $d =$ 1-ben $\delta = \infty$. A χ és ξ exponenciális t függése miatt $t \to$ 0-ban, γ és ν is divergensnek tekínthető $d =$ 1-ben.

[312] Itt ezen egyszerüen csak azt kell érteni, hogy a bemutatott mennyiségek d függése nem rendezetlen.

Exp.	$d=1$	$d=2$	$d=3$	$d\geq 4$
$\overline{\alpha}$	-1	0	0.17	0
$\overline{\beta}$	0	0.125	0.51	1
$\overline{\gamma}$	1	1.75	1.96	2
η	1	0.25	0.032	0
δ	∞	15	4.820	3
ν	∞	1	0.63	0.5

17.3 Táblázat

Itt a táblázat első három sorában felülvonással jellemzett kritikus exponenseket ν osztja, míg a következő két sor kritikus exponense szigorú értelemben is értelmezhető. Az utolsó sor a korrelációs hossz kritikus exponense. Ez $d=1$-ben ξ exponenciális divergenciája miatt végtelennek tekíthető. Szintén $d=1$-ben a δ és $\overline{\beta}$ értékeket a (7.102), illetve (7.103) szigorú értelemben vett skálatörvényekkel határoztuk meg[313].

Valószinűleg, a 17.3 táblázat által is tükrözött ,,síma" d szerinti viselkedés következtében ad meglepően az ϵ sorfejtés elfogadható értékeket még $d=2$-ben is.

Mindezek után azonban nem szabad azon kép alakuljon ki, hogy a renormálási csoport csupán a kritikus exponensek levezetésére alkalmas. A renormálási csoport igazi nagy értéke a divergáló korrelációs hosszal járó fázisátalakulások létezésének kimutatása. Ezen tulajdonság, amint már említettük, messzemenően túlszárnyalja a HTR típusú rendezettség kereteit. Mindezt szemléltetni fogjuk a következőkben, a Kosterlitz–Thouless–Berezinski-féle fázisátalakulás tanulmányozása során.

[313] Itt $\overline{\beta}$ csupán matematikai értelemben értelmezett (7.103) alapján.

17.6 Melléklet: A felső kritikus dimenzió esetében fellépő logaritmikus korrekciók

A rendelkezésünkre álló összefüggéseken keresztül példázni szeretnénk a marginális paraméterek felső kritikus dimenzió esetében fellépő hatását. A Gauss-fixpont tanulmányozása során láttuk, hogy $d = 4$-re $\lambda_u = S_u^y = 1$ hiszen ez esetben $y_u = 4 - d = 0$, azaz az u marginális paraméterként fogható fel[314].

A logaritmikus korrekciók $d = 4$-re vett elemzése érdekében előnyösebb a 17.1 paragrafusban bemutatott Wilson-féle rekurziós összefüggéseket differenciális formában kezelni. A kiinduló és minimálinformációt tartalmazó összefüggések amelyeken keresztül még lehetséges a logaritmikus korrekciók megjelenésének a szemléltetése, a következő:

$$\frac{du}{dS} = \epsilon u - au^2 + \dots\ ,$$
$$\frac{dr}{dS} = 2r - bur + \dots\ , \tag{17.176}$$

ahol az a és b két numerikus konstansot jelől amelyek aránya $b/a = 1/3$. A (??) differenciális formában felírt Wilson-féle rekurziós összefüggések a $Q' = \tilde{a}_2'\sigma^2 + \tilde{a}_4'\sigma^4 = -S^d \ln[J(\sigma S^{1-d/2})/J(0)]$ (lásd a 17.1 paragrafust) egyenlőség alapján kaphatók meg ha ezen kifejezésben $S \to S + \delta S$ blokkméret változócserét hajtunk végre, a baloldal csatolási állandóit $(S + \delta S)$, míg a jobboldal csatolási állandóit (S) függőknek tekíntjük, a jobboldalt $f(S + \delta S) \simeq f(S) + \delta S[\partial f(S)/\partial S]$ formában sorfejtjük, majd δS-el osztunk. Az így kapott eredmény

$$\frac{\delta \tilde{a}_2'}{\delta S}\sigma^2 + \frac{\delta \tilde{a}_4'}{\delta S}\sigma^4 = \frac{d}{S}\left(-S^d \ln\frac{J(\sigma S^{1-d/2})}{J(0)}\right)$$
$$-S^{d/2}(1 - fracd2)\left.\frac{\partial \ln[J(x)/J(0)]}{\partial x}\right|_{x=\sigma S^{1-d/2}} . \tag{17.177}$$

Az így levezetett egyenlőségben $\delta S \to 0$ határesetet és $S = 1$ helyettesítést kell vennünk (??) levezetése érdekében. A jobboldal első tagjának kiemelt zárójele a 17.1 paragrafusban kapott rekurziós összefüggést eredményezte. Ugyanazon kifejezést itt is felhasználva, a $\delta S \to 0$ határátmenet után

$$\sigma^2\frac{d\tilde{a}_2}{dS} + \sigma^4\frac{d\tilde{a}_4}{dS} = \frac{d}{S}\left[\sigma^2 S^2(\tilde{a}_2 + 3q) + \sigma^4 S^{4-d}(\tilde{a}_4 - 9q^2)\right]$$
$$-(1 - \frac{d}{2})\left.\left[x\frac{\partial \ln(J(x)/J(0))}{\partial x}\right]\right|_{x=\sigma S^{1-d/2}} \tag{17.178}$$

egyenlőség írható. A (??) egyenlőség a 17.1 paragrafusban használt közelítések mellett a (??)-ben szereplő lineáris tagokat helyesen visszaadja, és a $b/a = 1/3$ arány

[314] Lásd például [12].

fennállásának szemléltetése érdekében elegendő a $\ln[J(x)/J(0)] \simeq -(\tilde{a}_2 x^2 + \tilde{a}_4 x^4)$ használata[315]. Ennek megfelelően (??)-ban S-el átszorozva, $dS/S = d(\ln S) = dl$ jelölést bevezetve, ahol $l = \ln S$, a nemdifferenciális tagokban az $S = 1$ helyettesítés után (??)-ból kapott összefüggés

$$\frac{d\tilde{a}_4}{dl} = (4-d)\tilde{a}_4 - 9d\tilde{a}_4^2 + \dots ,$$
$$\frac{d\tilde{a}_2}{dl} = (d-2)\tilde{a}_2 - 3d\tilde{a}_4\tilde{a}_2 + \dots . \tag{17.179}$$

Látható tehát, hogy az alkalmazott közelítések mellett $a = 9d$ és $b = 3d$ tehát[316] $b/a = 1/3$. Mindennek ellenére $d = 4$ dimenzióban (??)-et a szakirodalomban használt formára lehet hozni[317]. Ténylegesen, a $\tilde{a}_4 = 2u$, $\tilde{a}_2 = r = t\cdot$konstans a következő összefüggéseket eredményezi[318].

$$\frac{du}{dl} = -72u^2 + \dots ,$$
$$\frac{dt}{dl} = 2t - 24ut + \dots . \tag{17.180}$$

A továbbiakban ezen egyenlőségeket fogjuk használni[319].

A (??) első egyenletének integrálása után az $u = u(l)$ függvény meghatározható:

$$u(l) = \frac{u(0)}{1 + 72lu(0)} . \tag{17.181}$$

Mindezek után a $\ln(t_0/t) = \int_t^{t_0} dt'/t'$ identitás integrál alatti részében dt'-et a (??) összefüggésből behelyettesítjük, majd az u kifejezésére (??)-et használjuk. Az így kapott eredmény

$$\ln\frac{t_0}{t} = 2\int_{l(t)}^{l(t_0)} \left[1 - \frac{12u(0)}{1 + 72lu(0)}\right] dl . \tag{17.182}$$

Figyelembe kell vennünk, hogy t a kiinduló rács redukált hőmérséklete amely blokknagysága $S = 1$, így az l változója zéró. Az $l_o = l(t_0)$ jelölést bevezetve az l

[315]Emlékeztetünk, hogy $J(x)/J(0) = \exp(-\tilde{a}_2 x^2 - \tilde{a}_4 x^4)(1 + 6x^2 q)^{-1/2} I(x)/I(0)$ a pontos összefüggés a Wilson-féle levezetés keretei között.

[316]A pontos együttható értékek $d = 4$ dimenzióban $a = 72$ és $b = 24$, lásd [12]. Megemlítendő, hogy (??) második egyenletének jobboldalán lévő második járulék $3dq = 3d\tilde{a}_4(1 - \tilde{a}_2 + \dots) = -3d\tilde{a}_4\tilde{a}_2 + 3d\tilde{a}_4 + \dots \simeq -3d\tilde{a}_4\tilde{a}_2 + 3d\tilde{a}_4^* + \dots$ alapján származik.

[317]Lásd például [12].

[318]Itt figyelembe vettük, hogy a Gauss-fixpont közelében az r változóból ered a t-vel arányos termikus paraméter.

[319]Az itt bemutatott levezetés mindannak ellenére hogy a (??)-ben kapott eredmény pontos, csak szemléltető jellegű.

változóra vonatkozó integrálási tartomány zéró és l_0 között helyezkedik el. Az integrált elvégezve

$$\ln \frac{t_0}{t} = 2l_0 - \frac{1}{3}\ln[1 + 72u(0)l_0] \tag{17.183}$$

eredmény írható. Ebből az l_0 egyenlete:

$$l_0 = \frac{1}{2}\ln \frac{t_0}{t} + \frac{1}{6}\ln[1 + 72u(0)l_0] \tag{17.184}$$

A kapott összefüggésből l_0 első közelítésben meghatározható úgy, hogy a jobboldalon szereplő l_0 helyébe a teljes kifejezést behelyettesítjük[320]. Az így nyert összefüggés

$$l_0 = \frac{1}{2}\ln \frac{t_0}{t} + \frac{1}{6}\ln[1 + 36u(0)\ln \frac{t_0}{t}] + \ldots \tag{17.185}$$

Most a termodinamikai potenciál szinguláris részére vonatkozó skálázási összefüggést kell felhasználnunk. Ennek

$$\phi(t, u) = S^{-d}\phi(tS^{y_t}, uS^{y_u}) \tag{17.186}$$

formáját azonban a differenciális rekurziós összefüggéseknek megfelelően kell átalakítanunk. Ezt úgy tesszük, hogy $S^{-d} = \exp[\ln S^{-d}] = \exp[-d \ln S] = \exp(-ld)$ egyenlőséget alkalmazzuk a (**??**) jobboldalán a ϕ elé kiemelt S^{-d} szorzófaktorra, majd az $S \to 1$ határátmenettel, a baloldalt $l = 0$ változónak megfelelő t és u paramétereket, míg a jobboldalt $t(l)$ illetve $u(l)$ paramétereket tartalmazó kifejezések formájában kezeljük. Amint említettük, a kezdeti rácsot jellemző redukált hőmérséklet t, így $t(l = 0) = t(S = 1) = t$ jelölés megtartásával (**??**) differenciális blokktranszformáció esetében alkalmazható formája

$$\phi[t, u(0)] = \exp(-ld)\phi[t(l), u(l)]\ . \tag{17.187}$$

Mindezek után figyelembe vesszük, hogy $d = 4$ esetet vizsgáljuk, és (**??**) jobboldalában szereplő l változót $l = l_0$-ra állítjuk be. Ekkor az (**??**) exponensében (**??**)-öt alkalmazva, figyelembe véve, hogy $t(l_0) = t_0$

$$\phi[t, u(0)] = \exp\left(-2\ln \frac{t_0}{t} - \frac{2}{3}\ln[1 + 36u(0)\ln \frac{t_0}{t}] + \ldots\right)\phi(t_0, u(l_0)) \tag{17.188}$$

egyenlőség ered. Ennek alapján viszont

$$\phi[t, u(0)] = \left(\frac{t}{t_0}\right)^2 \left[1 + 36u(0)\ln \frac{t_0}{t}\right]^{-2/3} \phi[t_0, u(l_0)] \tag{17.189}$$

[320] Ez az iterativ aszimptótikus l_0 megoldás formája az első iterációs lépés után.

összefüggés írható. A Gauss-fixpont kritikus exponenseinek tárgyalásakor viszont láttuk, hogy az u paraméterben a ϕ függvény $\phi[t(l_0), u(l_0)] \sim t(l_0)/u^2(l_0)$ függést mutat. Ezt (**??**)-be behelyettesítve és $u(l_0)$-ra (**??**) összefüggést felhasználva

$$\phi[t, u(0)] \sim \left(\frac{t}{t_0}\right)^2 \left[1 + 36u(0) \ln \frac{t_0}{t}\right]^{-2/3} t_0^2 u^{-1}(0) \left[1 + 72u(0) l_0\right] \qquad (17.190)$$

reláció ered. Ebben l_0 helyébe (**??**) kifejezését helyettesítve és csupán a vezető $l_0 \sim 1/2 \ln(t_0/t)$ tagot megtartva (**??**) a következő formára írható

$$\phi[t, u(0)] \sim t^2 \left[1 + 36u(0) \ln \frac{t_0}{t}\right]^{1/3} \qquad (17.191)$$

A kapot kifejezést kétszer deriválva a fajhő t függését kapjuk meg, amely $t \to 0$ határeset vezető tagjában

$$C \sim \left|\ln \frac{t}{t_0}\right|^{1/3} \qquad (17.192)$$

alakú. A divergencia logaritmikus lévén, az α kritikus exponenset továbbra is zérónak tekíntjük.

A bemutatott eset típuspéldaként szemlélteti a logaritmikus járulékok felső kritikus dimenzió esetében vett megjelenését.

17.7 Szakirodalmi jegyzék 17.

[1] N. Goldenfeld, *Lectures on Phase Transitions and the Renormalization Group*, Frontiers in Physics, Vol. 85., Addison-Wesley Publishing Co., 1992, 352 oldal.

[2] Shang-keng Ma, *Modern Theory of Critical Phenomena*, Frontiers in Physics: A Lecture Note and Reprint Series, Vol. 46., 188 oldal.

[3] J. Cardy, Scaling and Renormalization in Statistical Physics, Cambridge Lecture Notes in Physics Vol. 5., Eds. P. Goddard, J. Yeomans, Cambridge University Press, 1996, 94 oldal.

[4] J. Cardy, Scaling and Renormalization in Statistical Physics, Cambridge Lecture Notes in Physics Vol. 5., Eds. P. Goddard, J. Yeomans, Cambridge University Press, 1996, 99 oldal.

[5] J. Cardy, Scaling and Renormalization in Statistical Physics, Cambridge Lecture Notes in Physics Vol. 5., Eds. P. Goddard, J. Yeomans, Cambridge University Press, 1996, 57 oldal.

[6] N. Goldenfeld, *Lectures on Phase Transitions and the Renormalization Group*, Frontiers in Physics, Vol. 85., Addison-Wesley Publishing Co., 1992, 248 oldal.

[7] H. E. Stanley, *Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena*, Clarendon Press, Oxford, 1971., 128 oldal.

[8] Shang-keng Ma, *Modern Theory of Critical Phenomena*, Frontiers in Physics: A Lecture Note and Reprint Series, Vol. 46., 221 oldal.

[9] Shang-keng Ma, *Modern Theory of Critical Phenomena*, Frontiers in Physics: A Lecture Note and Reprint Series, Vol. 46., 24 oldal.

[10] N. Goldenfeld, *Lectures on Phase Transitions and the Renormalization Group*, Frontiers in Physics, Vol. 85., Addison-Wesley Publishing Co., 1992, 111 oldal.

[11] J. Cardy, Scaling and Renormalization in Statistical Physics, Cambridge Lecture Notes in Physics Vol. 5., Eds. P. Goddard, J. Yeomans, Cambridge University Press, 1996, 99-100 oldalakon szereplő 5.2 és 5.3 táblázat.

[12] J. Cardy, Scaling and Renormalization in Statistical Physics, Cambridge Lecture Notes in Physics Vol. 5., Eds. P. Goddard, J. Yeomans, Cambridge University Press, 1996, 103 oldal.

18 A Kosterlitz–Thouless–Berezinski fázisátalakulás

18.1 Bevezetés

A renormálási csoport bemutatása után első pillantásra úgy tűnik, hogy nyert ismereteket csupán a kritikus exponensek kiszámítására lehet felhasználni. Ezen álláspont azonban, amint már említettük, nem helytálló. A stabil fixpont, és ezáltal a kritikus felület létezésének kimutatásán keresztül a renormálási csoport egyik lényegi felhasználhatósága abban rejlik, hogy segítségével fázisátalakulások létezését mutathatjuk ki. Mindennek bemutatására a következőkben egy önmagában is fontos, Kosterlitz–Thouless–Berezinski (KTB) nevet viselő fázisátalakulás tanulmányozását kezdjük el. A KTB átmenet jellemzése továbbá példázza majd egy nem hosszútávú térbeli rendezettségre alapuló rendezett fázis létezését, és bevezet a topologiai rendezettség fogalomkörébe.

18.2 A Kosterlitz–Thouless–Berezinski fázisátalakulás lényege

Képzeljünk el egy $d = 2$ dimenziós rendszert, amelyet xy típusú, lokalizált spinek építenek fel. A fázisátalakulások elméletéből tudjuk, hogy $d = 2$–ben $n \geq 2$ spinkomponensű rendszerre (jelen esetben $n = 2$) térbeli hosszútávú rendezettség nem lehetséges véges hőmérsékleten, tehát itt konvencionális értelemben vett fázisátalakulás nem létezik. Spin rendszerekre vonatkozólag, ahol $n \geq 2$, ez azt jelenti, hogy a rendszerben spontán mágneses momentum nem lehetséges, azaz

$$M = \frac{\bar{\mu}}{N} \sum_i \langle S_i \rangle = 0 \tag{18.1}$$

tetszőleges $T \neq 0$ hőmérsékleten, ha a külső mágneses tér értéke $h = 0$.

Berezinski, illetve Kosterlitz és Thouless mutatta meg a hetvenes évek első felében, hogy mindennek ellenére a $d = 2$, $n = 2$ rendszerben lehetséges egy fázisátalakulás, melynek rendezett fázisa (a T_c alatti fázis) $M = 0$ mágneses momentummal rendelkezik, és amelyet nem hosszútávú térbeli rendezettség jellemez, hanem topologikus rendezettség. Hogy ezen átmenet lényegét megértsük, vizsgáljuk meg az xy modellt $d = 2$ dimenzióban.

A rendszer Hamilton-operátorát, mint hagyományosan, a Heisenberg-féle

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} \vec{S}_i \vec{S}_j \tag{18.2}$$

kifejezés adja, ahol az egyszerűség kedvéért legyen

$$|\vec{S}_i| = S = 1 \; . \tag{18.3}$$

Továbbá, az xy modellben lévén, $\vec{S}_i$ kétkomponensű vektor, és a csatolási állandó pozitív, $J > 0$.

A tanulmányozott síkban felveszünk egy derékszögű koordinátarendszert, melynek egységvektorait, mint szokásosan, $(\vec{i}, \vec{j})$–nek választjuk. Ha ϕ_i–vel jelöljük azt a szöget, amelyet egy tetszőleges $\vec{S}_i$ spin az (Ox) tengellyel bezár, akkor:

$$\vec{S}_i = S \cos\phi_i \, \vec{i} + S \sin\phi_i \, \vec{j} \tag{18.4}$$

összefüggés fennáll. Továbbá

$$\vec{S}_i \vec{S}_j = |S|^2 (\cos\phi_i \cos\phi_j + \sin\phi_i \sin\phi_j) \, . \tag{18.5}$$

Mivel $|\vec{S}_i| = 1$, minden csomóponton azonos nagyságú spint tételeztünk fel,

$$\vec{S}_i \vec{S}_j = \cos(\phi_i - \phi_j) \tag{18.6}$$

adódik. Ezek szerint a Hamilton-operátorunk a következőképpen alakul:

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} \cos(\phi_i - \phi_j) \ , \tag{18.7}$$

ahol $\langle ij \rangle$ egymás melletti csomópontokat jelöl.

A Hamilton-operátort tanulmányozva, első látásra azt mondhatnánk, hogy $\phi_i - \phi_j = 0$ konfiguráció teremti meg az alapállapotot, és ezen állapot lesz az alacsonyhőmérsékleti fázis meghatározója is. Viszont a fluktuációk, amint már láttuk, oly nagyok $d = 2$ dimenzióban tetszőleges kis hőmérsékleten, hogy a fázisátalakulások törvényei tiltják a rendezett „ferromágnes” típusú fázis létrejöttét. Mégis, szimmulációs és kísérleti adatok[321] arra utalnak, hogy a tanulmányozott rendszerben egy bizonyos kritikus hőmérséklet alatt valamilyen fajta rendezett fázis alakul ki.

A rendezett fázis milyenségének feltárása céljából tételezzük fel, hogy a felépülő spin–konfiguráció vortex (örvény) formájú.

18.1 Ábra.
Spin-vortex az xy modellben $d = 2$ dimenzióban.

Jobb megértés céljából rendeljünk hozzá az eredeti rácshoz egy duális rácsot, melynek csomópontjait az eredeti rács elemi celláinak középpontjai alkotják. Például, egyszerű négyzetes rács esetében a négyzetközéppontok alkotják a duális rács

[321] Lásd például [1]

csomópontjait. A vortexközéppontok egy duális rács-csomópontban helyezkednek el. A vortexközéppont körül a spinek zárt körök mentén $2m\pi$ szöggel végigfordulnak, ahol m a vortex úgynevezett ,,vorticitása". Egy ilyen vortexkör középpontja mindig a vortex középpontjával egyezik meg. A vortexkört körüljárva, egy kezdeti spin irányból kiindulva, csomópontról csomópontra haladva, az egymás melletti spinek fokozatosan elfordulnak, míg a kezdeti helyzetbe visszaérve a kiinduló spinirányítást vissza nem kapjuk. Ezen állapotban a következő tulajdonságokat figyelhetjük meg:

a.) A globális mágneses momentum $M = 0$, tehát ezen rendezettség nem tekinthető a spin rendszerekben egy klasszikus hosszútávú térbeli rendezettségnek.

b.) A spinek elrendezése vortexes formát mutat, amely topológiai rendeződésre utal[322].

c.) Egy vortexkör mentén haladva[323] a szomszédos csomópontokon elhelyezkedő spinek közötti szögeltérés nagyon kicsi, így

$$\phi_i - \phi_j \approx 0 \ , \tag{18.8}$$

ha i, j szomszédos csomópontok.

Szeretnénk tudni, milyen energia felel meg egy ilyen vortex elrendeződésnek. Egyszerűség kedvéért tételezzük fel, hogy a rács négyzetes, és rácsállandója a, egy kis érték. Legyen a vortexből kiválasztva egy vortex–kör, melynek sugarát jelőlje r, úgy hogy $r \gg a$. Megfigyelhető, hogy minden vortex-kör mentén

$$r = na - \frac{a}{2} \ ; \quad n = 1, 2, \ldots \tag{18.9}$$

Jelőlje továbbá N_n az n–edik vortex–körön lévő spinek számát.

Most egy nagysugarú vortex–kör mentén

$$\Delta\phi = \phi_i - \phi_j \approx 0 \tag{18.10}$$

szomszédos spinekre nézve, így elegendő, ha a $\cos(\Delta\phi)$ kifejezések Taylor-sorfejtésében csak a négyzetes tagokig menő járulékokat vesszük figyelembe. Így,

$$\cos(\Delta\phi) \simeq 1 - \frac{(\Delta\phi)^2}{2} + \ldots \ , \tag{18.11}$$

azaz:

$$H \ = \ -J \sum_{\langle ij \rangle} 1 + \frac{J}{2} \sum_{\langle ij \rangle} (\phi_i - \phi_j)^2 = E_0 + \frac{J}{2} \sum_{\langle ij \rangle} (\phi_i - \phi_j)^2 \ . \tag{18.12}$$

[322] Azaz térbeli rendezettség, anélkül hogy hosszútávú térbeli rendezettség lenne.

[323] A nagyobb sugarú vortexkörök mentén haladva igaz ez az állítás. Nagyobb sugarú vortexkörökből az örvényben sokkal több van mint kissugarú vortexkörökből, így az örvények alaptulajdonságait az előbbiek határozzák meg.

Tehát

$$H - E_0 = \frac{J}{2} \sum_{\langle ij \rangle} (\phi_i - \phi_j)^2 \tag{18.13}$$

Mikor H konkrét értékét becsülni szeretnénk, figyelembe kell vennünk, hogy két szomszédos vortex–körív mentén, két szomszédos spin gyakorlatilag párhuzamos, így az energiához lényegi járulékot adó tagok mind ugyanazon vortex–körről származnak.

Továbbmenőleg, egy r sugarú vortex–kör mentén két szomszédos spin közötti szögeltérés

$$\Delta\phi = \phi_i - \phi_j = \frac{2\pi}{N_n} \ . \tag{18.14}$$

Itt, N_n általános meghatározásához, legyen az n-edik r sugarú vortex–kör kerülete

$$K_r = 2\pi r \tag{18.15}$$

és átlagban, az a rácsállandót véve két spin közötti távolságnak, N_n–re a következő kifejezést kapjuk:

$$N_n \simeq \frac{K_r}{a} \simeq \frac{2\pi n a}{a} = 2\pi n \ . \tag{18.16}$$

Így tehát

$$\phi_i - \phi_j \simeq \frac{1}{n} \ , \tag{18.17}$$

azaz

$$(\phi_i - \phi_j)^2 \simeq \frac{1}{n^2} \ . \tag{18.18}$$

Ezt egy vortex–kör mentén összegezve, amely mentén $N_n = 2\pi n$ tag van:

$$\sum_{\text{egy körre}} (\phi_i - \phi_j)^2 \simeq \frac{1}{n^2} \cdot 2\pi n = \frac{2\pi}{n} = \frac{2\pi a}{na} \simeq 2\pi a \frac{1}{r} \ , \tag{18.19}$$

ahol r a tanulmányozott vortexkör sugara.

Most a kapott eredményt a vortexkörökre összegezve:

$$\sum_{\text{vortexkörök}} 2\pi a \frac{1}{r_n} = 2\pi \underbrace{\left[a \sum_n \frac{1}{r_n} \right]}_{I} \ , \tag{18.20}$$

ahol a bevezetett I mennyiség integrál formában kifejezhető

$$I = \int_a^R \frac{dr}{r} \ . \tag{18.21}$$

Ténylegesen, az eredmény megértése céljából vegyük figyelembe, hogy I pontosan $\frac{1}{r}$ integrandusból származik, az a rácsállandóval kifejezett minimál–felbontással vett Darboux összegen keresztül, továbbá R a teljes rendelkezésre álló felület sugara.

Így egyetlen, egyedülálló vortex teljes energiája:

$$E = H - E_0 \simeq \pi J \ln \frac{R}{a} \tag{18.22}$$

Most értelmezhetjük fizikailag a kapott kifejezést. Az E_0, a H–nak egy minimuma, melyre

$$\Delta\phi_{ij} = \phi_i - \phi_j \tag{18.23}$$

abszolut értékben elhanyagolhatóan kicsi. Ha ezen minimum környezetében perturbáljuk az alapállapoti energiát egyetlen izolált vortex létrehozásával, a következő energiaváltozást kapjuk eredményül:

$$\delta H = E = H - H_0 = \pi J \ln \frac{R}{a} > 0 \,, \tag{18.24}$$

tehát gerjesztett állapotot kapunk eredményül. Itt, a jelölések szempontjából

$$H_0 = E_0 = H(\phi_i - \phi_j \approx 0) \,. \tag{18.25}$$

Látható, ha H minimuma környezetében egyetlen izolált vortexet létrehozunk, akkor az állapotunk energiája megnő. Ez azt jelenti, hogy $T = 0$–ban (vagy annak közvetlen közelében) egyetlen izolált vortex stabil állapotban vett létrejötte nem lehetséges, mert megnőveli az állapot energiáját.

Nőveljük most meg a hőmérsékletet $T = 0$–ról, $T > 0$–ra egy véges, neminfinitézimális értékre. Jegyezzük meg továbbá, az elkövetkezendő gondolatmenet megértése céljából, hogy

$$H = H_0 + \delta H \,, \tag{18.26}$$

ahol

$$\delta H|_{1\text{vortex}} \simeq \pi J \ln \frac{R}{a} > 0 \,, \tag{18.27}$$

és itt, H_0 a rendszer alapállapotenergiája.

Ha a rendszert kanonikusnak tekintjük és így N =konst., a termodinamikai potenciál

$$F = H - TS \,, \tag{18.28}$$

ahol F a szabadenergia. Látható, hogy a rendszer fázisát ez esetben H mellett az S entrópia tag is befolyásolja. Most már tudvalevő, hogy

$$S = k_B \ln P \,, \tag{18.29}$$

ahol P nem más, mint a makroállapot megvalósulásának ,,fizikai valószínűsége". Egy vortex jelenléte esetében ez egyrészt tartalmazza azt a valószínűségi eloszlást, amely az alapállapotot megvalósítja (S_0–t adó P_0)[324]. Erre, rátevődik még az egy–vortex

[324] A gondolatmenetben, itt teljesen lényegtelen, hogy S_0 konkrét értéke mekkora.

állapot megvalósulási valószínűsége. Ezt mi kreáltuk az alapállapotnak megfelelő minimum körül, és így ez P_0–tól független P_1, úgyhogy a teljes fizikai valószínűség

$$P = P_0 \cdot P_1 \,. \tag{18.30}$$

De P_1–et egyetlen paraméter határozza meg, éspedig azon tény, hogy hol van a vortex középpontja. A rendszerünk felülete πR^2, és ebben egy elemi cella (azaz 1 csomópontnak megfelelő terület) a^2, tehát az összes csomópontok száma $\pi \frac{R^2}{a^2}$. Ugyanennyi helyen lehetséges a vortex központja is, tehát

$$P_1 \sim \left(\frac{R}{a}\right)^2 \tag{18.31}$$

Így tehát

$$S = S_0 + \delta S \,, \tag{18.32}$$

ahol

$$S_0 = k_B \ln P_0 \,, \tag{18.33}$$

és nagyságrendileg

$$\delta S \simeq k_B \cdot \ln \frac{R}{a} \,. \tag{18.34}$$

Így a szabadenergiánk, az elmondottak tükrében, egy vortex jelenlétében

$$F = F_0 + \delta F \,, \tag{18.35}$$

amelyben az alapállapot járuléka

$$F_0 = H_0 - T S_0 \,. \tag{18.36}$$

Továbbá az egyetlen vortex létrejöttekor megjelenő tag

$$\delta F = \delta H - T \delta S \,, \tag{18.37}$$

melynek konkrét (nagyságrendi) értéke

$$\delta F = (\pi J - k_B T) \ln \frac{R}{a} \,. \tag{18.38}$$

A megadott kifejezésekre vonatkozólag megjegyzendők a következők.

Az F_0 az alapállapotot jellemzi, mely körül egy vortex keletkezésével perturbáltuk a rendszert, kapva a δF termodinamikai potenciál érték változást. Így abban a pillanatban, mikor δF negatívvá válik, a rendszer alapállapota instabilizálódik, és a rendszerben egy izolált vortex keletkezik. Feltételezzük, hogy T elég kicsi, így a keletkezett vortex szabályos, tehát T jelenlétében a belső energia változás[325] a

[325] Most a δH-nak ez a jelentése

$T = 0$-ban számolt δH–val közelíthető. Ekkor viszont, δH–ra a $T = 0$–ban levezetett érték használható.

De δF akkor válik negatívvá, ha

$$\delta F = 0 \ , \tag{18.39}$$

és így a kritikus hőmérsékletet meghatározó egyenlőség

$$T_c \simeq \frac{\pi J}{k_B} \ . \tag{18.40}$$

Tehát nagyságrendileg

$$k_B T_c \sim \pi J \ . \tag{18.41}$$

Mindebből láttuk tehát, hogy T_c felett, (T növekedése miatt lesz $\delta F < 0$), egy individuális vortex keletkezik és ezáltal csökken a szabadenergia. Mindezek után felmerül a kérdés, hogy mi történik fizikailag T_c alatt?

Ezen kérdés megválaszolására, meg kell vizsgálni azt a fázist, mely infinitezimálisan kicsi T esetében az E_0–ból ered. Ezen fázis belső energiája az itteni kvalitatív vizsgálatban $E_0 = -J \sum_{\langle ij \rangle} 1$ és az első fizikai válasz az ennek megfelelő képre az lenne, hogy T_c alatt az összes spin párhuzamos ($\phi_i - \phi_j = 0$) és ebben a fázisban a rendszer ferromágneses. Igen ám, de $d = 2$, $n = 2$–ben vagyunk és ez esetre egzaktul tudjuk, hogy ferromágneses állapot $T \neq 0$–ban nem lehetséges.

Kosterlitz és Thouless, illetve Berezinski szerint a T_c alatti állapotot egymással párosával kötött vortexek (vortexpárok) alkotják, melyek középpontjai nagyon közel vannak egymáshoz, és melyek ellentétes vorticitásúak, azaz ellentétes irányba forgatnak. Így T_c alatt a spontán mágnesezettség, M továbbra is zéró, továbbá az egymáshoz közel álló és egymással ellentétes irányba forgató vortexpárok szuperponálódó közös hatással, már elég közel a két vortex középpontjához, $\phi_i - \phi_j \approx 0$ szögeltérést eredményeznek.

18.3 A diszlokációelmélettel való kapcsolat

A Kosterlitz-Thouless-Berezinski-féle rendezett fázis leírásának ötlete, tulajdonképpen Nabarro nyomán, az olvadás elméletéből ered.

Ezen elmélet az olvadást úgy képzeli el, hogy közeledve az olvadásponthoz, a rendszernek még megvan a szilárdtest struktúrája, de a rendszerben bizonyos koncentrációban szabad diszlokációk jelennek meg (közvetlenül T_c felett). Lokálisan a struktúra megmarad, de a szabad (nem párosával kötött diszlokációk) könnyen mozognak, és viszkózus folyást eredményeznek. A T_c hőmérséklet alatt egyensúlyi állapotban nincs szabad diszlokáció. A diszlokációk csupán párosával kötödve fordulnak elő, mégpedig úgy, hogy a pár két komponense egymással ellentétes rácstorzulást hoz létre, melynek hatása nagyobb távolságokra már nem érzékelhető. Ezen diszlokáció pár, T_c alatt csak együtt mozoghat, így a szilárd anyag merev és nem folyik. Izolált diszlokációk nem jelenhetnek meg a rendszerben alacsony hőmérsékleten, mert energiájuk logaritmikusan nő a rendszer méretével (épp úgy, mint a vortexek energiája), így energetikailag nem adnak kedvezőbb állapotot. Azonban két, nagyon közeli, egymással ellentétes deformáló erővel létrehozott diszlokáció csupán lokálisan deformálja a rácsot, a pár energiája véges, így szilárd állapotban is létrejöhetnek. Ily módon a szilárd test → folyékony anyag fázisátalakulás tulajdonképpen: diszlokáció pár → izolált diszlokáció folyamatként értelmezhető. Az entrópia itt is az individuális diszlokáció megjelenésének multiplicitásától függ, ami újból a felülettel (A) arányos:

$$S = k_B \ln \frac{A}{A_0}\ ; \qquad E\ = \text{const}\ \cdot \ln \frac{A}{A_0}\ . \tag{18.42}$$

Tehát újból (az E–ben szereplő konstansot $\mathcal{C}$–vel jelölve)

$$\delta F = (\mathcal{C} - K_B T) \ln \frac{A}{A_o} \tag{18.43}$$

az egyetlen diszlokáció megjelenítéséhez kapcsolt szabadenergia. Ezen összefüggésből a kritikus hőmérsékletet

$$\delta F = 0 \tag{18.44}$$

adja, tehát

$$k_B T_c = \mathcal{C}\ . \tag{18.45}$$

A problémánk most már az, hogy hogyan állapítsuk meg ilyen rendezettség esetében, hogy T_c alatt vagy felett vagyunk–e (ez esetben ugyanis nincs Landau-féle értelemben vett rendparaméter). Hogy ezt meg lehessen érteni, maradjunk a diszlokációs példánál.

Egy teljesen általános diszlokáció mindig két elemi típusú diszlokációból építhető fel. Ez a két elemi diszlokáció az ,,éldiszlokáció" és a ,,csavardiszlokáció". Mindkettőt úgy hozzuk létre, hogy először is egy kristálysík mentén bevágunk a kristályba. Így egy vágási félsíkot kapunk, melyet határoló egyenes a diszlokáció vonala nevet viseli. Most, a vágás egyik oldalát változatlanul hagyjuk, míg a másik oldalt $\vec{b}$ vektorral eltoljuk úgy, hogy a diszlokáció vonala változatlan pozícióban maradjon. Mindennek során, a vágási sík egyik oldalán a rács-csomópontok egyensúlyi állapotukból kimozdított helyzetbe kerülnek. Ha $\vec{b}$, a diszlokáció vonalára merőleges, akkor a vágási felület mentén történő csúsztatással kapjuk az éldiszlokációt. Ha viszont $\vec{b}$ a diszlokáció vonalával párhuzamos, csavardiszlokációt kapunk eredményül.

A $\vec{b}$ vektort, mely a diszlokációt létrehozza, *Burgers*–vektornak nevezzük. Mivel $\vec{b}$ mindig felbontható a diszlokáció vonalára merőleges, illetve a diszlokáció vonalával párhuzamos két összetevőre, következik, hogy minden diszlokáció felbontható éldiszlokáció és csavardiszlokáció komponensek szuperponálódása formájában. Mi síkrendszereket tanúlmányozunk, így a $\vec{b}$ Burgers-vektorunk a síkban található.

Jelöljük a továbbiakban u_i-vel az i csomópontnak a diszlókációmentes rácsban vett egyensúlyi helyzetétől mért kitérését. Tételezzük továbbá fel, hogy rendszerünkben egy diszlokáció található. Ha létrehozunk a rács csomópontjai mentén egy nagy zárt görbét, mely a diszkolációt tartalmazza, és ezen görbe mentén összegezzük az u_i értékeket, az összeg a Burgers vektort eredményezi. Ha viszont a görbén belül csak közeli páros diszlokációk vannak jelen, melyek egymással ellentétes irányba forgatnak, és így egymás hatását semlegesítik, zérót kapunk eredményül. Mindez sugallja, hogy egy nagy zárt görbe menti összegezés (vagy folytonos esetben integrálás) az, amely kimutatja az egyedi diszlokáció megjelenését, azaz a fázisátalakulás tényét.

Így, definiálható a „*topologikus rendezettség*" fogalma:

A topologikus rendezettség, egy olyan rendezettségi forma, amely Landau-féle értelemben vett rendparaméterrel nem rendelkezik, de egy nagy, zárt görbe mentén történő összegezés segítségével kimutatható[326]. Az összegzést valamilyen helyesen megválasztott mennyiség szerint végezzük, mely „vorticitási" tulajdonsággal kapcsolatos[327].

Ezért lesz fontos elem a vorticitás ezen típusú fázisátalakulásban, mely a Kosterlitz–Thouless–Berezinski nevet viseli.

Hogy hol jelenik meg ilyen típusú fázisátalakulás, és megjelenése fizikailag miben nyilvánul meg, azt a következő példákkal lehet szemléltetni:

1. Kétdimenziós szilárdtestben, ahol a rugalmas viselkedést viszkózus folyás típusú viselkedés cseréli fel a kritikus hőmérséklet felett, miközben ellentétes írányítású és egyenlő nagyságú Burgers vektorokkal jellemzett kötött diszlokáció párok egyedi diszlokációkra szakadnak fel.

2. Szintén $d = 2$ dimenzióban, $n = 2$–re, xy spin–modellben, ahol tetszőleges hőmérsékleten a spontán mágnesezettség zéró, de T_c alatt összekapcsolt, ellentétes vorticitású vortex párok léteznek, melyek T_c felett felbomlanak.

   Megjegyzendő, hogy a Heisenberg–modellben, ahol $H \neq -J\sum_{\langle ij\rangle}\cos(\phi_i - \phi_j)$ és $n = 3$, nincs ilyenfajta fázisátlakulás $d = 2$ dimenzióban (izotrop Heisenberg–modell).

3. A $d = 2$ dimenziós plazmában, hol a T_c alatt rendezetlenül irányított dipóluspárokat T_c felett szabad töltések váltják fel, minek következtében T_c felett a rendszer szigetelőből elektromos vezetővé válik.

4. $d = 2$ dimenziós semleges szuperfolyadékban, T_c alatt ellentétes vorticitású vortexpárok (összekapcsolt állapotban) stabilizálják a szuperflolyékony áramlást, amely T_c felett metastabil áramlássá alakul át az ellentétes vorticitású vortex–párok felszakadásának következtében. Töltött szuperfolyadékra, ami a

[326] A megfogalmazás $d = 2$-re vonatkozik. Az általános esetet lásd [2]-ben.

[327] Például a diszlokációk által leírt olvadás esetében az összegzett mennyiség a csomópontok egyensúlyi állapotukhoz mért u_i kitérése, míg az xy kétdimenziós spinmodell esetében az összegzett mennyiség az előző csomoponthoz mért spin-szög eltérés.

szupravezető, ezen tulajdonság nem áll fenn. Ez azért van így, mert a behatolási hossz véges lévén, egy szupravezetőben létrejött vortex véges energiájú és nem $\ln(r)$ szerint viselkedik.

5. Felületi fizikában szintén több példa ismert. Megemlítendő például az e kategóriába sorolható ,,roughening", (síma-érdes) átalakulás.

6. A $d = 1$ térdimenziójú Heisenberg antiferromágneses lánc esetében (mely az egzakt elemzés szempontjából $1 + 1$ dimenziós rendszernek számít), a fázisdiagram $\Delta = -1$ pontja Kosterlitz-Thouless-Berezinski-féle átmenetnek felel meg. Itt az azonositás általában a korrelációs függvények viselkedése nyomán történik.

18.4 A rendszert jellemző Hamilton–operátor

Az eddigi leírásmódunk fizikailag szemléletes volt, de matematikailag elég durva közelítéseket tartalmazott (pl. a vortexek közötti kölcsönhatást nem vette figyelembe, stb.). Ezért próbáljunk a következőkben a matematikai leírást javítani, és egzaktabbá tenni.

Elemezzük tehát a tanulmányozott spin–rendszerre felírt Hamilton–operátorunkat kontinuum határesetben

$$H = H_0' - E_0 = \frac{1}{2} J \sum_{\langle ij \rangle} (\phi_i - \phi_j)^2 = J \int d^2 r (\nabla \phi(r))^2 \ , \tag{18.46}$$

melynek kiindulópontját az itteni jelőlés szerint

$$H_0 = -J \sum_{\langle ij \rangle} \cos(\phi_i - \phi_j) \tag{18.47}$$

szolgáltatta. Ezen kifejezésben, hogy könnyebben számolni lehessen, a ϕ_i szöget folytonos $\phi(r)$ változóként fogtuk fel.

Legyen továbbá

$$\phi(r) = \bar{\phi}(r) + \psi(r) \ , \tag{18.48}$$

ahol $\bar{\phi}(r)$ jelölje a tiszta vortexes felépítést jellemző szögváltozásokat, továbbá $\psi(r)$ az ettől való lokális eltéréseket, különböző gerjesztések hatására (például spin–hullámoknak köszönhetően). A következőkben matematikailag kell a vorticitást kifejeznünk. E célból, mint az előbbiekben, egyszerűen az

$$\circlearrowleft\!\!\!\!\sum \Delta \bar{\phi}_i = 2\pi q \ ; \quad (q = 1, 2, \ldots) \qquad \circlearrowleft\!\!\!\!\sum \Delta \psi_i = 0 \tag{18.49}$$

összefüggésekre alapozunk, ahol q egy egész szám. Egyszerű vortex esetén, ha a zárt kör mentén, hol az összegzés történik, csak egyszeri ,,kört" (2π) forognak a spinek, akkor a körforgási iránynak megfelelően $q = \pm 1$. Ezzel ellentétben, ha többszöri teljes átfordulás van jelen egy zárt kör mentén, akkor $q = \pm n$, ahol n egész szám. Tehát $n \geq 1$.

Ezen reláció folytonos szögváltozóra:

$$\oint_c d\bar{\phi}(r) = 2\pi q \tag{18.50}$$

formában írható át, ahol q a vorticitás a választott c zárt kontúron belül. Továbbá, mivel ψ rendezetlen járulékokat tartalmaz:

$$\oint_c d\psi(r) = 0 \tag{18.51}$$

tetszőleges zárt c görbe mentén.

Tételezzük most fel, hogy van egy vortexünk, melynek központja r_i-ben található. Ha r_i körül egy tetszőleges c zárt kontúr mentén integrálunk, mindig ugyanazt a $2\pi q_i$ értéket kapjuk eredményül. Mindez azt jelenti, hogy q_i nem az integrálási görbe tulajdonsága, hanem a vortexé, és gyakorlatilag a tanulmányozott vortex egy jellemzőjét („erősségét") méri, melyet „vorticitás"–nak nevezünk. Ha most több vortex van jelen, és az r_i–ben centrált vortexek „erőssége" (vagy „vorticitása") q_i, akkor az egész rendszerre a vorticitás sűrűség:

$$\rho(r) = \sum_i q_i \delta(r - r_i) \ . \tag{18.52}$$

Ha a rendszerünk több vortexet tartalmaz, akkor (**??**) egyenlőség jobboldalán a teljes vorticitási töltés jelenik meg, azaz ekkor

$$q = \sum_i q_i \tag{18.53}$$

Mindezek után a matematikai leírás kezd a felületen lévő töltések jellemzéséhez hasonlítani. Az utóbbi esetben elektromos töltésekkel van dolgunk, és ϱ a töltéssűrűség. A matematikai leírás továbbfejlesztése céljából ésszerű lesz ezen analógiát kihasználni. Az elektrosztatikában, ha $\vec{E}$ az elektromos térerősség, és φ a skalár potenciál, akkor

$$\vec{E} = -\nabla\varphi \ , \quad \nabla^2\varphi = -2\pi\varrho \ ; \tag{18.54}$$

továbbá,

$$\varrho = \sum_i q_i \delta(r - r_i) \ , \quad \oint_c \vec{E} d\vec{l} = 2\pi q \ , \tag{18.55}$$

ahol

$$q = \sum_i q_i \tag{18.56}$$

azon töltés, mely a zárt c görbe belsejében található.

Most

$$d\bar{\phi}(r) = \nabla\bar{\phi}(r) dr \tag{18.57}$$

alapján, ami az elektrosztatikai analógiában az $\vec{E}d\vec{l}$ szerepét játsza, látható[328], hogy a vortexekre vonatkozó matematikai képben $\bar{\phi}$ fog megfelelni a skalár potenciálnak, így az analógia alapján fennáll rá a Poisson–egyenlet:

$$\nabla^2\bar{\phi}(r) = -2\pi\varrho(r) . \tag{18.58}$$

Ezúttal $\varrho(r)$ a vorticitás sűrűséget jelöli. Ezen összefüggés alapján mostmár $\bar{\phi}(r)$ a kétdimenziós potenciál matematikai Green–függvényének segítségével kifejezhető:

$$\bar{\phi}(r) = \int G(r-r')(-2\pi\varrho(r'))dr' , \tag{18.59}$$

ahol az ismert módon:

$$G(r-r') = \frac{1}{2\pi}\ \ln\frac{|r-r'|}{a} \tag{18.60}$$

a $d=2$ dimenziós rendszer Poisson–egyenletének matematikai Green–függvénye. A jelöléseinkben, a a rácsállandó.

A továbbiakban r_0 fogja jelölni azon minimális távolságot, melyre két vortex–középpont egymást megközelítheti. Megfigyelhető továbbá, hogy mivel, amint említettük,

$$\oint d\psi(r) = 0 , \tag{18.61}$$

a $\psi(r)$–hez tartozó vorticitás ,,töltés” $q=0$, így a neki megfelelő ,,Poisson-egyenlet”:

$$\nabla^2\psi(r) = 0 . \tag{18.62}$$

Térjünk vissza a Hamilton–operátorunkra, mely az elmondottak szerint:

$$H = J\int d^2r(\nabla\phi(r))^2 ; \qquad J > 0 . \tag{18.63}$$

Mivel

$$\phi(r) = \bar{\phi}(r) + \psi(r) , \tag{18.64}$$

így

$$H = J\int d^2r(\nabla\bar{\phi}(r))^2 + J\int d^2r(\nabla\psi)^2 + 2J\int d^2r(\nabla\bar{\phi}(r))(\nabla\psi(r)) . \tag{18.65}$$

[328] Az állítás megértése céljából megfigyelhető, hogy (??), illetve (??) vortex esetből vett egyenlőségek egyeznek a töltésekre vonatkozó (??) első egyenlete, illetve (??) egyenlőségekkel. Továbbá (??) a (??)-be helyettesítve a töltésekre vonatkozó (??) második egyenlőségének felel meg, ha abba (??) első egyenletét helyettesítjük be. Az utobbi vortex, illetve töltésekre vonatkozó egyenletek összehasonlításánál csak egy negatív előjelbeli különbség jelentkezik, amely viszont a pozitív vorticitási töltés konvencionális megválasztásának megváltoztatásával eltüntethető, tehát nem mérvadó.

Elemezzük az utolsó tagot egy parciális integrálással átalakítva:

$$\int d^2r \underbrace{(\nabla\bar{\phi})}_{d\nu}\underbrace{(\nabla\psi)}_{u} = \bar{\phi}\nabla\psi|_{\substack{\text{felület}\\ \text{határán}}} - \int d^2r\bar{\phi}\underbrace{\nabla^2\psi}_{=0} = 0\ . \qquad (18.66)$$

Itt a teljes tanulmányozott felület határán $\bar{\phi}\nabla\psi$ zérónak tekinthető, mivel semmi fizikai információt nem hordoz.

Hasonló parciális integrálást végezve az első tagon:

$$\begin{aligned}\int d^2r \underbrace{(\nabla\bar{\phi})}_{d\nu}\underbrace{(\nabla\bar{\phi})}_{u} &= \bar{\phi}\nabla\bar{\phi}|_{\substack{\text{felület}\\ \text{határán}}} - \int d^2r\bar{\phi}\nabla^2\bar{\phi} = 0 - \int d^2r(\bar{\phi}(r))(-2\pi\varrho(r)) \\ &= 2\pi\int d^2r\varrho(r)(\underbrace{\int d^2r'G(r-r')(-2\pi\varrho(r'))}_{\bar{\phi}(r)} \\ &= -4\pi^2\int d^2r\int d^2r'\varrho(r)\varrho(r')G(r-r') \qquad (18.67)\end{aligned}$$

Megjegyzendő, hogy ezen elektrosztatikával vett analógia $|r-r'|\leq a$–ra nem áll fenn, mert itt a q_i vortexek nem pontszerűek, és nem kerülhetnek végtelen közel egymáshoz. Így $\varrho(r)=\sum_i q_i\delta(r-r_i)$ kifejezést felhasználva, a két integrál alatt szereplő ϱ nyomán, a kifejezésünkben $\sum_{ij}$ összeg jelenik meg. Ezen összegbe, az $i=j$ estre, $G(r-r')$ helyébe $G(r_0)$–t írunk. Itt, amint az előbbiekben említettük, r_0 az a minimális távolság, melyre két vortex–középpont egymáshoz kerülhet. Most $G(R)=(2\pi)^{-1}\ \ln(R/a)$, így:

$$J\int d^2r(\nabla\bar{\phi})^2 = -2\pi J\sum_{i\neq j}q_iq_j\ln\left|\frac{r_i-r_j}{a}\right| + \mu\sum_i q_i^2\ . \qquad (18.68)$$

Ezen egyenletben

$$\mu = -2\pi J\ln\frac{r_0}{a} = 2\pi J\ln\frac{a}{r_0} \qquad (18.69)$$

egy kémiai potenciál jellegű mennyiségként jelentkezik.

Mindezek után, Hamilton–operátorunk formája:

$$H = J\int d^2r(\nabla\psi)^2 - \sum_{i\neq j}^{2n}p_ip_j\ln\frac{|r_i-r_j|}{a} + \mu\sum_i q_i^2\ . \qquad (18.70)$$

Ezen kifejezésben megjelenő

$$p_i = \sqrt{2\pi J}q_i \qquad (18.71)$$

mennyiségeket vorticitási töltésnek nevezzük. Megjegyzendő továbbá, hogy a

$$|r_i-r_j| > a\ , \qquad (18.72)$$

feltétel fenn áll a vortexközéppont távolságokra vonatkozólag.

Megfigyelhető tehát, hogy a rendszert jellemző Hamilton–operátor

$$H = J \int d^2r(\nabla\psi)^2 + H_{2n}(r_1, \ldots r_{2n}) \tag{18.73}$$

formában írható fel, ahol

$$H_{2n}(r_1, \ldots r_{2n}) = -\sum_{i \neq j}^{2n} p_i p_j \ln \frac{|r_i - r_j|}{a} + 2n\mu \ . \tag{18.74}$$

Ezen Hamilton–operátor H_{2n} tagja segítségével vortexpárokból alkotott állapotunkat szeretnénk jellemezni. Ezért itt feltételezzük, hogy $2n$ darab (páros számú) vortexünk van, és mindegyik vorticitása az egyszerűség kedvéért moduluszban egységnyi $|q_i| = 1$, azaz

$$\sum_i q_i^2 = 2n \ . \tag{18.75}$$

Az eredményül kapott H Hamilton–operátorban az első, ψ–t tartalmazó tag pozitív járulékot ad, továbbá nem kötött a vorticitáshoz, így az alapállapot energia minimuma körül ezt a tagot elhanyagoljuk (legkisebb értéke $\psi(r)$ konstansra adódik, és értéke zéró). Így a fázisátalakulas szempontjából, csupán a $H = H_{2n}$ tagot tanulmányozzuk a továbbiakban.

Mindenek elött arra szeretnénk rávilágítani hogy tulajdonképpen mit is ír le a levezetett Hamilton operátor.

Megfigyelhető hogy $p_i = \pm p$ töltés jelleggel bír, továbbá a $\ln \frac{|r_i - r_j|}{a}$ egy kétdimenziós Coulomb potenciálnak felel meg. Így H_{2n}, ha $\mu = 0$ akkor egy $d = 2$ dimenziós, klasszikus és semleges ($\sum_i p_i = 0$) plazmát ír le matematikai szempontból. A mi konkrét esetünkben $\mu \neq 0$ lévén (a „töltések” véges mérete miatt) egy kémiai potenciál jellegű járulékunk is jelen van, így matematikai szempontból H_{2n} egy zérótól különböző kémiai potenciállal rendelkező, kétdimenziós és semleges plazma Hamilton–operátoraként fogható fel.

18.5 Szakirodalmi jegyzék 18.

[1] N. Goldenfeld, *Lectures on Phase Transitions and the Renormalization Group*, Frontiers in Physics, Vol. 85., Addison-Wesley Publishing Co., 1992, 350 oldal.

[2] Zs. Gulácsi, M. Gulácsi: *Theory of phase transitions in two-dimensional systems*, Advances in Physics 47, 1-89, (1998).

19 Kadanoff-féle blokktranszformáció a Kosterlitz-Thouless-Berezinski fázisátalakulás esetében

A továbbiakban a rendszerünket a renormálási csoport szellemében fogjuk tanulmányozni. A blokktranszformáció ezúttal az $a \to a+da$ átmenetet fogja jelenteni, amit a Z állapotösszegben fogunk elvégezni (itt a a rácsállandó).

Hamilton–operátornak $H = H_{2n}$–et tekíntjük. A blokktranszformáció után nyert Z–ből transzformált Hamilton–operátor csatolási állandóit a kiinduló H csatolási állondóival összevetve, H funkciónális formáját megtartva, kapjuk a renormálási csoport egyenleteket[329]. Ha ezeknek kritikus fixpontjuk van, akkor ezt fázisátalakulás jelzéseként értelmezzük. Az elemzés során célunk elsősorban a fázisátalakulás létezésének kimutatása és a kritikus hőmérséklet egzakt meghatározása lesz, valamint a kritikus tartomány jellemzése. Mindezek során alkalom adódik arra is, hogy megismerjük a renormálási csoport tágabb értelmű használhatóságát és valódi horderejét a fázisátalakulások leírásában.

19.1 Az állapotösszeg kifejezése

A Z állapotösszeg kiszámítására a jólismert

$$Z = \mathrm{Tr}\, e^{-\beta H_{2n}} \tag{19.1}$$

képletet alkalmazzuk. Elsősorban a Tr pontos jelentését szeretnénk tisztázni a konkrét esetünkben. Figyelembe véve, hogy H_{2n}–ben a vortexek száma nem '*a priori*' meghatározott (csupán a párosság rögzített tény), így az n index változhat, azaz a Tr–nek tartalmaznia kell egy n szerinti összeget is. Továbbmenőleg, mivel $\sum_i p_i = 0$, a $2n$ vortexből van n darab + és n darab − vorticitású tagunk. A vorticitás rögzítése mellett egy $1/n!$ szorzótényező lép fel[330], mivel például a + vorticitású tagok egymás közötti felcserélése ugyanazon mikroállapotot eredményezi. Plusz és minusz vorticitás lévén jelen, mindez az n változó szerint egy $\sum_{n=1}^{\infty} 1/(n!)^2$ tagot eredményez.

A H_{2n} állapotterébe továbbá az r_i vertexközéppontok is beletartoznak. Ezek nyomán a Tr kifejezésében $\sum_{r_i}$ összegek jelennek meg. Az r_i szerinti összegeket Darboux–összegekként kezelve, integrállá alakíthatjuk őket, figyelembe véve hogy

$$\Delta s \cdot \sum_{r_i} \to \int d^2 r_i \ , \tag{19.2}$$

azaz

$$\sum_{r_i} \to \frac{1}{a^2} \int d^2 r_i \ , \tag{19.3}$$

[329] a feltételezett és rendezett fázisból nézett kritikus tartományban

[330] multiplicitás csökkentés gyanánt

ahol $\Delta s = a^2$ az elemi terület mértéke, azaz a Darboux–összeg felbontása. Így tehát minden egyes H_{2n}–ben szereplő r_i, a Tr műveletében egy $\frac{1}{a^2}\int d^2r_i$ integrálást jelentet meg. Megfigyelhető továbbá, hogy a $\tilde{K} = e^{-\beta\mu}$ kifejezésre a spur nem hat, így ez kiemelhető az integrálok elé. Mivel μ a H_{2n}–ben $2n$–el szorzódik, ezen kiemelt tag $\tilde{K}^{2n}$ formájú. Mindezek után, bevezetve a

$$K = \frac{1}{a^2}\tilde{K} = \frac{1}{a^2}e^{-\beta\mu} \tag{19.4}$$

jelölést, az állapotösszegünk kiinduló formája:

$$Z = \sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{(n!)^2}K^{2n}\int\limits_{D_{2n}} d^2r_{2n}\ldots\int\limits_{D_1} d^2r_1 \exp\left[\beta\sum_{i\neq j}^{2n} p_ip_j \ln\frac{|r_i - r_j|}{a}\right]. \tag{19.5}$$

Az r_i szerinti integrálok esetében nem szabad elfelejtenünk, hogy $|r_i - r_j|$–vel sohasem mehetünk az a rácsallandónak megfelelő távolság alá. Ezt a feltételt úgy vesszük figyelembe, hogy az r_i változók szerinti integrálási tartományt D_i–vel jelölve, az integrálási sorrendet rögzítjük az $r_1, r_2, r_3 \ldots r_{2n}$ sorrendbe, a következő konvenció alapján:

A D_1 tartomány jelöli az egész síkot, amelyből ki vannak vágva az $|r_k - r_1| < a$; $k \geq 2$; egyenlőtlenség által meghatározott r_k középpontú körök. Hasonlóan, a D_2 tartomány jelöli az egész síkot, elhagyva belőle az $|r_k - r_2| < a$ és $k \geq 3$ egyenlőtlenség által meghatározott r_k–ra centrált körterületeket. Végül, tetszőleges j–re, a D_j tartomány jelöli a teljes síkot, elhagyva belőle az $|r_k - r_j| < a$ és $k \geq j+1$ körterületeket, stb. A D_i tartományokból kívágott körök koherens módon biztosítják az $|r_i - r_j| \geq a$ feltételek teljesülését.

Az elkövetkezőkben a fő feladatunk a $a \to a + da$ Kadanoff-féle transzformáció végrehajtása lesz, melynek nyomán arról kell képet alkotnunk, hogy a Z állapotösszeg kifejezése hogyan változik meg a blokktranszformáció során.

19.2 Az integrálási tartományokon végrehajtott Kadanoff-féle blokktranszformáció

Megfigyelhető, hogy az a rácsállandó megváltozásával elsősorban a D_i tartományok változnak meg. Ezért első feladatunk az lesz, hogy a D_i tartományok változását az állapotösszegben nyomonkövessük.

Így például a Z állapotösszegben lévő integrálok közül, az m–ediket kiemelve[331], ahol $2n \geq m \geq 1$, és az integrált végezve, a D_m tartomány rögzített a rácsállandóra egy ,,puding"–ként néz ki: tartalmazza a teljes V kétdimenziós ,,térfogat"–ot, melyből az $r_{m+1}, r_{m+2}, \ldots r_{2n}$ rögzített pontok körüli a sugarú körterületek ki vannak vágva[332]. Nagyságrendileg tehát a D_m tartomány területe nem más, mint az egész

[331] Itt az $\int d^2r_m$ integrálról van szó.

[332] Ne feledjük, hogy az r_m szerinti integrál végzésekor az r_k, $k > m$ vortexközéppontok rögzitettek.

kétdimenziós V „térfogat”, melyből kivonjuk $2n-m$ számú, rögzített központú és a sugarú kör területét.

Az $a \to a+da$ blokktranszformáció nyomán, a D_m tartományok D'_m tartományokká alakulnak át. A D'_m tartományok formára ugyanúgy neznek ki, mint D_m tartományok, de most a rögzített és kivágott körterületek nagyobbak. Mindez azért, mert a kivágott korongok sugarai a–ról, $a+da$–ra nőttek meg a blokktranszformáció során. Mindez azt jelenti, hogy

$$\int\limits_{D_{2n}} d^2r_{2n} \ldots \int\limits_{D_1} d^2r_1 = \int\limits_{D'_{2n}} d^2r_{2n} \ldots \int\limits_{D'_1} d^2r_1 + I_A \,, \tag{19.6}$$

egyenlőség kell fennálljon, ahol I_A egy „adalék” érték. Ez azért lép fel, mert a D'_i tartományokon végzett integrálás esetében, a D_i-n végzett integráláshoz képest, kimarad egy bizonyos tartomány, ami éppen a kivágott korongok régi és új felülete közötti különbség.

A továbbiakban az I_A kifejezésénél a következő approximációt alkalmazzuk: annak a valószínűsége, hogy három vagy több „részecske” (itt vortex középpont) legyen egyszerre a távolságnál közelebb, nagyon kicsi, és ezen eseteket elhanyagoljuk. Mindez matematikailag abban jut kifejezésre, hogy a (**??**) egyenletben az r_m szerinti integrál végzésekor, miközben r_m–el a D_m tartományon mozgunk, a rögzitett $r_k \quad (k>m)$ pontok körüli kivágott körterületek mind diszjunkt területeket jelölnek (azaz két kivágott kör metszete zéró). Mindezen kép alkalmat ad az I_A adalékérték konkrét kiszámítására. Az alábbiakban a kifejezést megadjuk, majd részletesen megindokoljuk:

$$I_A = \frac{1}{2}\sum_{i\neq j} \int\limits_{D'_{2n}} d^2r_{2n} \ldots \int\limits_{D'_{j+1}} d^2r_{j+1} \int\limits_{D'_{j-1}} d^2r_{j-1} \ldots \tag{19.7}$$

$$\ldots \int\limits_{D'_{i+1}} d^2r_{i+1} \int\limits_{D'_{i-1}} d^2r_{i-1} \ldots \int\limits_{D'_{r_1}} d^2r_1 [\int\limits_{\bar{D}_j} d^2r_j \int\limits_{\delta_i(j)} d^2r_i] \tag{19.8}$$

Először is, I_A kifejezése érdekében, az összes lehetséges módon párosítjuk vortexközéppontjainkat. Az $\frac{1}{2}\sum_{i\neq j}$ összeg ezen párosítást tükrözi, ahol i és j az egymással párositott vortexközéppontok indexe. Ezen összegben, i és j lefedi az összes lehetséges vortexközéppontokat, egymástól függetlenül és $i \neq j$ kikötés mellett. Az $1/2$ osztófaktor biztosítja, hogy egy vortexpárt csak egyszer vegyünk figyelembe. A párosítás során csupán az i és j egymáshoz viszonyított helyzetére fogunk figyelni, a többi vortexközéppont koordinátája szerinti integrál $\int_{D_l} d^2r_l;\ l \neq i, j$ érintetlen, és változatlan marad[333]. Mindezek után a konkréten kiválasztott $d^2r_i d^2r_j$ integrálókat a következő képpen végezzük el:

[333]Megjegyzendő, hogy ezen leírás akkor elfogadható, ha a „vortexek” koncentrációja kicsi, azaz μ/k_BT nagy szám.

a.) Rögzítjük a j vortex ,,központját" a síkban, azaz az első elvégzendő integrál r_i szerint történik, miközben r_j rögzített marad. Mindezek után az r_i változót végigjáratjuk egy $\delta_i(j)$ területen, mely az r_j középpontú és a, illetve $a+da$ sugarú körök közötti területrészt jelöli. Ezen integrál során tehát r_j rögzített és $r_i - r_j \in [a, a+da]$. Ezen $\delta_i(j)$ tartományokon keresztül vesszük figyelembe I_A–ban a D_j és D'_j tartományok közötti különbséget.

I_A–ban az ezen integrálokból eredő járulékokat nevezzük a továbbiakban, képletesen, ,,rögzített elemű" vortexpár járuléknak.

b.) Az r_i szerinti integrál elvégzése után az r_j szerinti integrál elvégzése következik. Ennek során r_j–t végigmozgatjuk az egész felületen, kivéve a $2n-2$ rögzített körterületet, amely a többi $l \neq i, j$,,vortexközéppont" helyét jelöli (megjegyzendő, hogy az r_l, $\quad (l \neq i, j)$ pozíciók rögzitettek az r_i és r_j szerinti integrálok elvégzése során). Az így kapott, r_j–re vonatkozó integrálási tartományt jelöltük $\bar{D}_j$–vel. Az ez esetben számított járulékot nevezzük a továbbiakban, szintén képletesen, a ,,felületen végigmozgatott" vortexpárok járulékának.

c.) Mindezek után a $d^2 r_l$, $\quad (l \neq i, j)$ integrálok végezhetők el a D'_{r_l} tartományokon. Az eljárást minden egyes i, j párra meg kell ismételni, mégpedig kétszer: egyszer külön $D_j, \delta_i(j)$–ra, és egyszer külön a $D_i, \delta_j(i)$ tartományokra.

Az I_A adalék tag integráljainak argumentumában továbbá a

$$\exp\left[\beta \sum_{i \neq j}^{2n} p_i p_j \ln \frac{|r_i - r_j|}{a}\right] \tag{19.9}$$

kifejezés szerepel, mely mint integrandusz, a járulékok konkrét meghatározásában játszik fontos szerepet.

Mindezek után látható, hogy a feladat további megoldásához legelőször is az I_A integrálok elvégzése lesz szükséges. Ezek után fogjuk tudni felépíteni a KTB fázisátalakulást jellemző renormálási csoport egyenleteket. Ami itt jellemző lesz, az az a tény, hogy a Kadanoff–konstrukciót ezúttal közvetlenül a direkt térben differenciális formában kapjuk, hisz az $a \to a + da$ változtatáson alapszik. Mindennek következtében a renormálási csoport egyenleteket is direkt térben, differenciális formában fogjuk megkapni.

19.3 Rögzített elemű vortexpár járuléka

Amint az előző paragrafusban láttuk, az I_A integrálok elvégzésével kell kezdenünk a renormálási csoport egyenletek levezetését. Tanulmányozzuk e célból először a $\delta_i(j)$ tartományon vett integrált:

$$\tilde{J}_1 = \int\limits_{\delta_i(j)} d^2 r_i \exp\left[\beta \sum_{k\neq n} p_k p_n \ln \frac{|r_n - r_k|}{a}\right] . \qquad (19.10)$$

A jelölés egyszerűsítése végett az $|r_i - r_j| = |\vec{r}_i - \vec{r}_j|$ konvenciót használjuk. Tehát az r_i tagok vektorok, amit csak szükségesség esetén fogunk explicíten jelölni.

Ha a kiválasztott (i,j) pár indexei pont k-val és n–nel lesznek egyenlőek, ezen tag $\tilde{J}_1$–ben zéró járulékot ad eredményül mivel ez esetben $|r_i - r_j| \simeq a$ a $\delta_i(j)$ tartományon. Így az (i,j) tagok viszonylatában csak azon esetek maradnak meg, amelyeknél $\tilde{J}_1$–ben a dupla (k,n) indexből egyetlen összegzési index marad, míg a másik index egyenlővé válik i-vel vagy j–vel.

Természetesen az említett eshetőség mellett, azon lehetőség is megmarad, miszerint a (k,n) pár teljesen különböző (i,j)–től. Ezen járulékokat viszont leválasztjuk $\tilde{J}_1$–ből:

$$\tilde{J}_1 = J_1 \cdot \exp\left[\beta \sum_{n\neq l;n,l\neq i,j} p_n p_l \ln \frac{|r_n - r_l|}{a}\right] , \qquad (19.11)$$

ahol

$$J_1 = \int\limits_{\delta_i(j)} d^2 r_i \exp\left[2\beta\left(\sum_k p_i p_k \ln \frac{|r_i - r_k|}{a} + \sum_k p_j p_k \ln \frac{|r_j - r_k|}{a}\right)\right] . \qquad (19.12)$$

A továbbiakban tehát J_1 tanulmányozása szükséges. Az exponensben megjelenő 2–es szorzót az indokolja, hogy a rögzített i,j indexek n és k pozíciójában is megjelenhetnek (például az exponens első tagjában $i = n$, illetve $i = k$). A J_1–ben továbbá i és j mint index rögzített, és k végigfut az összes többi $2n - 2$ vortex-középpont indexen. Továbbmenőleg a

$$\sum_i p_i = 0 \qquad (19.13)$$

egyenlőség miatt, az (i,j)–n kívüli $2n - 2$ vortex, melyeket k lefed, gyakorlatilag fele $+$ és fele $-$ vorticitású, továbbá feltételezésünk szerint minden vorticitási töltés nagyságban egyenlő, $|p_i| = p$.

Megfigyelhető továbbá, hogy ha a J_1–ben rögzitett i,j indexpár olyan, hogy p_i és p_j megegyező előjelűek, ezen tagok exponensben adott járuléka megközelítőleg zérót ad eredményül. Ténylegesen ez esetben az exponens:

$$2\beta|p| \sum_k p_k \ln\left[\frac{|r_i - r_k|}{a} \frac{|r_j - r_k|}{a}\right] \sim 0. \qquad (19.14)$$

Az eredmény azzal magyarázható, hogy a logaritmus alatt lévő számok mind egynél nagyobbak, így a logaritmus mindig pozitiv számokat eredményez, melyek r_k értékei miatt rendezetlen eloszlásúak, továbbá $p_k = \pm|p|$ miatt rendezetlen előjelűek is, így nagy számuk miatt összegük zéró.

Ezért Kosterlitz és Thouless feltételezik, hogy J_1–ben azon (i,j) párokból kapjuk a lényegi járulékot, melyek előjele különböző. Mivel mi a $|p_i| = p$ esetre szorítkoztunk csupán, ez azt jelenti, hogy J_1 lényegi része olyan (i,j) párokból származik amelyekre $p_i = -p_j$. Ezen feltételezésben jut kifejezésre azon fizikai kép, miszerint két vortex nagyobb valószínűséggel csak akkor kerül egymáshoz közel, ha vorticitásuk ellenkező előjelű. Mindezt azon alapfeltételezés is alátámasztja, miszerint ellentétes vorticitású vortexpárok építik fel az alacsonyhőmérsékletű rendezett fázist.

Így $p_i = -p_j$–vel, J_1 formája a következőképpen alakul:

$$J_1 = \int\limits_{\delta_i(j)} d^2 r_i \exp\left[2\beta \sum_k p_i p_k \ln \frac{|r_i - r_k|}{|r_j - r_k|}\right] \tag{19.15}$$

A következőkben ki szeretnénk használni azt a tényt, hogy $|\vec{r}_i - \vec{r}_j| = |\vec{a}| = a$ az $|r_i - r_k|$, illetve az $|r_j - r_k|$ mennyiségekhez képest kis szám. Így:

$$J_1 = \int\limits_{\delta_i(j)} d^2 r_i \exp\left[2\beta \sum_k p_i p_k \ln \frac{|\overbrace{r_i - r_j}^{\vec{a}} + r_j - r_k|}{|r_j - r_k|}\right] \tag{19.16}$$

Továbbá, mivel $\delta_i(j)$–ben $|r_i - r_j| = a$ rögzített, a következő összefüggést kapjuk:

$$J_1 = \int\limits_{\delta_i(j)} d^2 r_i \exp\left[\beta \sum_k p_i p_k \ln \left(\vec{1} + \frac{\vec{a}}{|r_j - r_k|}\right)^2\right] . \tag{19.17}$$

Itt $\vec{1}$ a $\vec{r}_j - \vec{r}_k$ irányába mutató egységvektor. A továbbiakban a következő matematikai átalakításokat hajtjuk végre[334]:

$$\begin{aligned} J_1 &= \int\limits_{\delta_i(j)} d^2 r_i \exp\left[\sum_k \ln \left(\vec{1} + \frac{\vec{a}}{|r_j - r_k|}\right)^{2\beta p_i p_k}\right] \\ &= \int\limits_{\delta_i(j)} d^2 r_i \exp\left[\ln \prod_k \left(\vec{1} + \frac{\vec{a}}{|r_j - r_k|}\right)^{2\beta p_i p_k}\right] \\ &= \int\limits_{\delta_i(j)} d^2 r_i \prod_k \left[\left(\vec{1} + \frac{\vec{a}}{|r_j - r_k|}\right)^2\right]^{\beta p_i p_k} . \end{aligned} \tag{19.18}$$

[334] Lásd például [1]

Ezen kifejezésben a kerek zárójelben lévő tag tulajdonképpen:

$$\left.\left(\frac{\vec{a}+(\vec{r}_j-\vec{r}_k)}{|\vec{r}_j-\vec{r}_k|}\right)^2\right|_{\vec{a}=\vec{r}_i-\vec{r}_j} = \frac{(r_j-r_k)^2}{|r_j-r_k|^2}+\frac{2\vec{a}\cdot(\vec{r}_j-\vec{r}_k)}{|r_j-r_k|^2}+\frac{a^2}{|r_j-r_k|^2}$$

$$= 1+\frac{2\vec{a}\cdot(\vec{r}_j-\vec{r}_k)}{|r_j-r_k|^2}+\frac{a^2}{|r_j-r_k|^2} \qquad (19.19)$$

formát ölt.

Végül is, a levezetett eredményeknek megfelelően

$$J_1 = \int\limits_{\delta_i(j)} d^2r_i \prod_k \left[1+\frac{2\vec{a}\cdot(\vec{r}_j-\vec{r}_k)}{|r_j-r_k|^2}+\frac{a^2}{|r_j-r_k|^2}\right]^{\beta p_i p_k} . \qquad (19.20)$$

Ezen J_1 integrál esetében a j csomópont rögzített. Így a koordinátarendszer origóját, melyben az $\vec{r}_i$ vektort leírjuk, választhatjuk pontosan a $\delta_i(j)$ tartomány középpontjába, ahol $\vec{r}_j = 0$ (ez a pont a j ,,vortex" középpontját jelöli). Ezen koordinátarendszerben $\vec{r}_i = \vec{a}$, és így

$$d^2r_i = a\; da\; d\theta\;, \qquad (19.21)$$

ahol mostmár $|\vec{a}| = a$ a rácsállandó nagysága. Igen ám, de $\delta_i(j)$ integrálási tartományban $a = |\vec{a}|$ nem változik, így maga az integrál csupán θ szerinti integrálást jelent. Az alkalmazott ($\mathcal{O}(da)^2$) közelítésben tehát:

$$J_1 = ada \int\limits_0^{2\pi} d\theta \prod_k \left[1+\frac{2\vec{a}\cdot(\vec{r}_j-\vec{r}_k)}{|r_j-r_k|^2}+\frac{a^2}{|r_j-r_k|^2}\right]^{\beta p_i p_k} . \qquad (19.22)$$

Kis koncentráció határesetében $a/|r_i - r_j|$ kis mennyiségnek tekinthető, és így a kifejezés Taylor sorba fejthető. A sorfejtést négyzetes tagokig figyelembe véve

$$(1+x)^g \simeq 1+gx+\frac{g(g-1)}{2!}\,x^2+\ldots \qquad (19.23)$$

szerint végezzük. Így:

$$\prod_k \left[1+\frac{2\vec{a}\cdot(\vec{r}_j-\vec{r}_k)}{|r_j-r_k|^2}+\frac{a^2}{|r_j-r_k|^2}\right]^{\beta p_i p_k} =$$

$$= \prod_k \left[1+\beta p_i p_k\left(\frac{2\vec{a}\cdot(\vec{r}_j-\vec{r}_k)}{|r_j-r_k|^2}+\frac{a^2}{|r_j-r_k|^2}\right)\right.$$

$$\left. +\,\beta p_i p_k \frac{\beta p_i p_k - 1}{2}\left(\frac{4[\vec{a}\cdot(\vec{r}_j-\vec{r}_k)]^2}{|r_j-r_k|^4}+\mathcal{O}(a^3)\right)\right] . \qquad (19.24)$$

A továbbiakban figyelembe vesszük hogy:

$$\prod_k (1+x_k) = 1+\sum_k x_k + \sum_{k_1<k_2} x_{k_1}x_{k_2}+\ldots\;. \qquad (19.25)$$

Így, $\prod_k$ elvégzésekor, az első tag egységnyi. Továbbá, minden felsorolt tag minden k–ra 1–el szorozva, a felsorolt tagokat adja k szerint összegezve. Most, különböző k–s tagokból csak $\beta p_i p_k \frac{2\vec{a}\cdot(\vec{r}_j-\vec{r}_k)}{|r_j-r_k|^2}$ ad járulékót a^2–el arányosan, a többi tag mind $\mathcal{O}(a^3)$ típusú, tehát elhanyagolható. Így, ($\prod_k$–ban a dupla szuma $\sum_{k_1<k_2}$ típusú lévén):

$$\begin{aligned}
&\prod_k \left[1+\frac{2\vec{a}\cdot(\vec{r}_j-\vec{r}_k)}{|r_j-r_k|^2}+\frac{a^2}{|r_j-r_k|^2}\right]^{\beta p_i p_k} = \\
= \quad & 1+\sum_k \beta p_i p_k \frac{2\vec{a}\cdot(\vec{r}_j-\vec{r}_k)}{|r_j-r_k|^2}+\sum_k \beta p_i p_k \cdot \frac{a^2}{|r_j-r_k|^2} \\
& +2\sum_k \beta p_i p_k(\beta p_i p_k-1)\frac{[\vec{a}\cdot(\vec{r}_j-\vec{r}_k)]^2}{|r_j-r_k|^4} \\
& +\sum_{k_1<k_2} \beta p_i p_{k_1}\beta p_i p_{k_2}\frac{4[\vec{a}\cdot(\vec{r}_j-\vec{r}_{k_1})][\vec{a}\cdot(\vec{r}_j-\vec{r}_{k_2})]}{|r_j-r_{k_1}|^2|r_j-r_{k_2}|^2}+\mathcal{O}(a^3)\,. \qquad (19.26)
\end{aligned}$$

Mostmár J_1 számításához csupán a $\int_0^{2\pi} d\theta$ integrál elvégzése maradt hátra. A síkbeli polártengelyt $(\vec{r}_j-\vec{r}_k)$ irányába választva:

$$\int_0^{2\pi} d\theta[\vec{a}\cdot(\vec{r}_j-\vec{r}_k)] \;=\; a|r_j-r_k|\int_0^{2\pi} d\theta\cos\theta = 0 \qquad (19.27)$$

$$\begin{aligned}
\int_0^{2\pi} d\theta[\vec{a}\cdot(\vec{r}_j-\vec{r}_k)]^2 &= a^2|r_j-r_k|^2\int_0^{2\pi} d\theta\cos^2\theta \qquad (19.28)\\
&= a^2|r_j-r_k|^2\left[\left(\frac{\sin 2\theta}{4}+\frac{\theta}{2}\right)\Bigg|_0^{2\pi}\right] \\
&= \pi a^2|r_j-r_k|^2\,. \qquad (19.29)
\end{aligned}$$

Végül az utolsó tag esetében, az áttekinthetőség kedvéért a következő szögjelöléseket vezetjük be (melyek ezúttal is az $\vec{r}_j-\vec{r}_k$ polártengelyhez vannak viszonyítva): θ jelöli továbbra is az $\vec{a}$ és $\vec{r}_j-\vec{r}_k$ közötti szöget; θ_1 jelöli az $\vec{r}_j-\vec{r}_k$ és az $\vec{r}_j-\vec{r}_{k_1}$ közötti szöget; végül θ_2 jelöli az $\vec{r}_j-\vec{r}_k$ és $\vec{r}_j-\vec{r}_{k_2}$ közötti szöget. Mindennek során:

$$\begin{aligned}
&\mathcal{I} = \int_0^{2\pi} d\theta\,[\vec{a}\cdot(\vec{r}_j-\vec{r}_{k_1})]\,[\vec{a}\cdot(\vec{r}_j-\vec{r}_{k_2})] \\
= \quad & a^2\cdot|r_j-r_{k_1}|\cdot|r_j-r_{k_2}|\cdot\int_0^{2\pi} d\theta\cos(\theta-\theta_1)\cos(\theta-\theta_2) \\
= \quad & a^2\cdot|r_j-r_{k_1}|\cdot|r_j-r_{k_2}|\cdot\left[\cos\theta_1\cos\theta_2\int_0^{2\pi}\cos^2\theta d\theta+\sin\theta_1\sin\theta_2\int_0^{2p}\sin^2\theta d\theta\right. \\
& \left.+\frac{1}{2}\sin(\theta_1+\theta_2)\int_0^{2\pi}\sin 2\theta d\theta\right]\,. \qquad (19.30)
\end{aligned}$$

Tehát

$$\begin{aligned}\mathcal{I} &= a^2 \cdot |r_j - r_{k_1}| \cdot |r_j - r_{k_2}| \cdot \pi(\cos\theta_1 \cos\theta_2 + \sin\theta_1 \sin\theta_2) \\ &= a^2 \cdot |r_j - r_{k_1}| \cdot |r_j - r_{k_2}| \cdot \pi \cos(\theta_1 - \theta_2) \ , \end{aligned} \tag{19.31}$$

azaz

$$\mathcal{I} = a^2 \pi (\vec{r}_j - \vec{r}_{k_1}) \cdot (\vec{r}_j - \vec{r}_{k_2}) \ . \tag{19.32}$$

Így, a bemutatott számítás során, a J_1–re kapott érték:

$$\begin{aligned} J_1 &= ada \Bigg[2\pi + 2\pi \sum_k \beta p_i p_k \frac{a^2}{|r_j - r_k|^2} + 2\pi \sum_k \beta p_i p_k (\beta p_i p_k - 1) \frac{a^2}{|r_j - r_k|^2} \\ &+ 4\pi \sum_{k_1 < k_2} \beta^2 p_i^2 p_{k_1} p_{k_2} \frac{a^2 (|r_j - r_{k_1}| \cdot |r_j - r_{k_2}| \cos(\theta_1 - \theta_2))}{|r_j - r_{k_1}|^2 |r_j - r_{k_2}|^2} + \mathcal{O}(a^3) \Bigg] \end{aligned} \tag{19.33}$$

Figyelembe véve, hogy $p_i^2 = p^2, p_k^2 = p^2$, és $2 \cdot \sum_{k_1 < k_2} = \sum_{k_1 \neq k_2}$, kapjuk a $\delta_i(j)$ tartományon vett integrál végső értékét:

$$\begin{aligned} J_1 &= 2\pi ada \Bigg[1 + \beta^2 p^4 a^2 \sum_k \frac{1}{|r_j - r_k|^2} \\ &+ \beta^2 p^2 a^2 \sum_{k_1 \neq k_2} \frac{(\vec{r}_j - \vec{r}_{k_1}) \cdot (\vec{r}_j - \vec{r}_{k_2})}{|\vec{r}_j - \vec{r}_{k_1}|^2 |\vec{r}_j - \vec{r}_{k_2}|^2} p_{k_1} p_{k_2} + \mathcal{O}(a^3) \Bigg] \ . \end{aligned} \tag{19.34}$$

Nem szabad elfelejtenünk, hogy mindeddig r_j rögzített érték volt. A következőkben tehát a j vortex–középpontot kell végigjáratnunk a felületen.

19.4 A felületen végfuttatott vortexpár járuléka

A következő lépés, az I_A–ban szereplő $\int_{\bar{D}_j} d^2 r_j$ integrál kiszámítása lesz. Ez esetben gyakorlatilag a figyelembe vett vortexpár j elemét kell majd a tanulmányozott felületen végigfuttatnunk. Legyen:

$$J_2 = \int_{\bar{D}_j} d^2 r_j J_1 \ . \tag{19.35}$$

Az első tag ezen kifejezésben (az $a\,da \cdot 2\pi$ járulékból)

$$\int_{\bar{D}_j} d^2 r_j = A \ , \tag{19.36}$$

ahol A a rendszer területe. Itt feltételezzük, hogy a vortexkoncentráció kicsi, így a $\bar{D}_j$–ben szereplő vortexközéppontok körül kizárt területek elhanyagolhatóan kis járulékot adnak A–hoz képest.

Következik a J_1–ben szereplő második tag kiintegrálása, amely az

$$L_1 = \int\limits_{\tilde{D}_j} d^2 r_j \frac{1}{|r_j - r_k|^2} \ , \tag{19.37}$$

elvégzését jelenti.

Tisztánlátás érdekében emlékeztetünk arra a tényre, hogy itt k direkt térbeli vortexközéppont index. Az L_1 integrál elvégzése során r_k rögzített, így a számítás megkönnyítése céljából a koordinátarendszer origóját r_k–ba helyezve, változócserét hajtunk végre: $\tilde{r}_j = |r_j - r_k|$. Az integrálás során az integrandusban csupán $\tilde{r}_j$ nagysága változik, mégpedig a–tól Λ–ig (azaz a teljes rendszer sugaráig) terjed. Ekkor viszont

$$L_1 = \int\limits_0^{2\pi} d\theta \int\limits_a^{\Lambda} \frac{\tilde{r} d\tilde{r}}{(\tilde{r})^2} = 2\pi \ln \frac{\Lambda}{a} \ . \tag{19.38}$$

A J_1–ben szereplő utolsó tag integrálásakor r_{k_1} és r_{k_2} rögzítettek. Így a koordinátarendszer origóját r_{k_1}–be helyezzük, továbbá az Ox tengelyt az $\vec{r}_{k_2} - \vec{r}_{k_1}$ vektor irányába forgatjuk. Az integrált L_2–vel jelölve:

$$L_2 = \int\limits_{\tilde{D}_j} d^2 r_j \frac{(\vec{r}_j - \vec{r}_{k_1}) \cdot (\vec{r}_j - \vec{r}_{k_2})}{|r_j - r_{k_1}|^2 |r_j - r_{k_2}|^2} \ . \tag{19.39}$$

A számítás további végzése céljából, a következő jelöléseket vezetjük be:

$$\tilde{\vec{r}}_j = \vec{r}_j - \vec{r}_{k_1} \ ; \quad \vec{R} = \vec{r}_{k_2} - \vec{r}_{k_1} \ . \tag{19.40}$$

Ekkor L_2 kifejezésére az

$$\begin{aligned} L_2 &= \int\limits_0^{2\pi} d\theta \int\limits_a^{\Lambda} \tilde{r}_j d\tilde{r}_j \frac{\tilde{\vec{r}}_j \cdot (\tilde{\vec{r}}_j - \vec{R})}{|\tilde{r}_j|^2 \cdot |\tilde{r}_j - \vec{R}|^2} \\ &= \int\limits_0^{2\pi} d\theta \int\limits_a^{\Lambda} d\tilde{r}_j \cdot \frac{\tilde{r}_j^2 - \tilde{r}_j \cdot R \cdot \cos\theta}{\tilde{r}_j (\tilde{r}_j^2 + R^2 - 2R\tilde{r}_j \cdot \cos\theta)} \\ &= \int\limits_0^{2\pi} d\theta L_2(\theta) \end{aligned} \tag{19.41}$$

összefüggést kapjuk, hol $cos\theta$ jelöli az $\vec{R}$ és $\tilde{\vec{r}}_j$ közötti szöget, továbbá:

$$L_2(\theta) = \int\limits_a^{\Lambda} \frac{x dx}{x^2 + R^2 - 2Rx\cos\theta} - R\cos\theta \int\limits_a^{\Lambda} \frac{dx}{x^2 + R^2 - 2Rx\cos\theta} \ . \tag{19.42}$$

Megfigyelhető ekkor, hogy

$$\begin{aligned} L_2(\theta) &= \int_a^\Lambda \frac{(x - R\cos\theta)dx}{x^2 + R^2 - 2Rx\cos\theta} = \int_a^\Lambda \frac{dx}{2}\frac{d}{dx}\ln|x^2 + R^2 - 2Rx\cos\theta| \\ &= \frac{1}{2}\ln|x^2 - 2Rx\cos\theta + R^2|\Big|_a^\Lambda . \end{aligned} \tag{19.43}$$

Tehát az $L_2(\theta)$–ra kapott eredmény

$$L_2(\theta) = \ln\Lambda - \frac{1}{2}\ln|a^2 - 2Ra\cos\theta + R^2| . \tag{19.44}$$

Az előbbiekbent felhasználtuk, hogy $\Lambda \gg 1$ határesetében

$$\frac{1}{2}\ln|\Lambda^2 - 2R\Lambda\cos\theta + R^2| \approx \frac{1}{2}\ln\Lambda^2 = \ln\Lambda . \tag{19.45}$$

Tehát L_2–re visszatérve:

$$L_2 = 2\pi\ln\Lambda - \frac{1}{2}\int_0^{2\pi} d\theta \ln|a^2 - 2Ra\cos\theta + R^2| . \tag{19.46}$$

Azonban

$$\int_0^{n\pi} \ln(A^2 - 2AB\cos x + B^2)dx = 2\pi n\ln|A| , \tag{19.47}$$

ha $|A| > |B|$ fenn áll.

A mi esetünkben $n = 2$, $R \gg a$, és így

$$L_2 = 2\pi\ln\Lambda - \frac{4\pi}{2}\ln|R| = 2\pi\ln\frac{\Lambda}{a} - 2\pi\ln\frac{|r_{k_2} - r_{k_1}|}{a} . \tag{19.48}$$

Mindennek alapján:

$$\begin{aligned} J_2 &= 2\pi a da\left[A + \beta^2 p^4 a^2 \sum_k \left(2\pi\ln\frac{\Lambda}{a}\right)\right. \\ &+ \beta^2 p^2 a^2 \sum_{k_1\neq k_2} p_{k_1}p_{k_2}\left(2\pi\ln\frac{\Lambda}{a}\right) \\ &- \left.\beta^2 p^2 a^2 \cdot 2\pi \sum_{k_1\neq k_2} p_{k_1}p_{k_2}\ln\frac{|r_{k_1} - r_{k_2}|}{a}\right] . \end{aligned} \tag{19.49}$$

Az eredményül kapott J_2 második tagjában, $p^4 \sum_k = p^2 \sum_k p_k^2$, mert minden k–ra $p_k^2 = p^2$, tehát:

$$\begin{aligned} & 2\pi\beta^2 a^2 p^4 \ln\frac{\Lambda}{a}\sum_k 1 + \beta^2 p^2 a^2 2\pi \ln\frac{\Lambda}{a}\sum_{k_1\neq k_2} p_{k_1}p_{k_2} \\ = \; & 2\pi a^2 p^2 \beta^2 \ln\frac{\Lambda}{a}\underbrace{\left(\sum_{k_1} p_{k_1}\right)}_{=0}\underbrace{\left(\sum_{k_2} p_{k_2}\right)}_{=0} = 0 \;, \end{aligned} \tag{19.50}$$

azaz, J_2 második és harmadik tagjának közös járuléka zéró. Tehát a J_2–re kapott végeredmény:

$$J_2 = 2\pi a da \left[A - 2\pi a^2 p^2 \beta^2 \sum_{k_1\neq k_2} p_{k_1}p_{k_2} \ln\frac{|r_{k_1} - r_{k_2}|}{a}\right] \;. \tag{19.51}$$

A gondolatmenet folytatása előtt emlékeztetünk arra, hogy a kifejezett J_2 érték az I_A adalék integrálba épül bele:

$$\begin{aligned} I_A \; = \; & \frac{1}{2}\sum_{i\neq j}\int_{D'_{2n}} d^2 r_{2n} \ldots \int_{D'_{j+1}} d^2 r_{j+1} \int_{D'_{j-1}} d^2 r_{j-1} \ldots \int_{D'_{i+1}} d^2 r_{i+1} \int_{D'_{i-1}} d^2 r_{i-1} \ldots \\ & \ldots \int_{D'_{r_1}} d^2 r_1 \left[2\cdot J_2 \cdot \exp\left[\beta \sum_{\substack{l_1\neq l_2 \\ \neq i,j}} p_{l_1}p_{l_2} \ln\frac{|r_{l_1} - r_{l_2}|}{a}\right]\right] . \end{aligned} \tag{19.52}$$

Ezen kifejezésre vonatkozóan megjegyzendő, hogy J_2 mellé bekerül egy 2–es faktor, mivel a $\delta_i(j), \overline{D}_j$ integrálási tartomány mellett ugyanazon integrálokat a $\delta_j(i), \overline{D}_i$ tartományon is el kell végeznünk, ugyanazt az értéket kapva eredményül. Továbbá az I_A adalékintegrálba J_2 mellé bekerülnek azon tagok is (ez az exponenciális járulék), melyeket $\tilde{J}_1$–ről J_1–re való áttérésnél kiemeltünk J_1 elé.

Nagyon fontos megjegyeznünk azt az észrevételt is, hogy J_2 sűríti a D_j tartományokra vonatkozó Kadanoff-féle blokktranszformáció végeredményét. Az a tény, hogy a J_2–ben kialakult funkcionális forma a kiinduló H_{2n} Hamilton–operátor formájával egyezik, adja meg az elvi lehetőséget arra, hogy a problémát renormálási csoport elemzésnek vessük alá, hiszen ez úton jut kifejezésre a Hamilton operátor formájának ,,konzerválása" a kritikus tartományban[335]. Továbblépés előtt meg kell még említenünk, hogy a tanulmányozott rendszer esetében az állapotösszeg exponensében is megjelenik a rácsálladó az I_A melletti járulékokban. Ebből következőleg, a renormálási csoport egyenletek levezetésekor a blokktranszformációnak még további következményei is lesznek. A gondolatmenet könnyebb megértése céljából

[335] Amennyiben ez az eredmény nem lenne igaz, az a feltételezésünk, miszerint kritikus tartomány jelen van bizonyulna tévesnek.

ezen következményeket a renormálási csoport egyenletek levezetésének folyamatában tárgyaljuk majd.

19.5 Szakirodalmi jegyzék 19.

[1] Zs. Gulácsi, M. Gulácsi: *Theory of phase transitions in two-dimensional systems*, Advances in Physics 47, 1-89, (1998).

20 A Kosterlitz–Thouless–Berezinski fázisátalakulás renormálási csoport egyenletei

Az elmondottak alapján az integrálási tartományokon végrehajtott Kadanoff-féle blokktranszformáció után az állapotösszeg formáját kell tanulmányoznunk. Ezen elemzés vezet majd el a renormálási csoport egyenleteihez.

20.1 Az állapotösszeg az integrálási tartományokon elvégzett Kadanoff-féle blokktranszformáció után

Az előző fejezetben a Kadanoff-féle blokktranszformáció hatásának oroszlánrészét végig elemeztük. Ennek során a Z állapotösszeg kifejezése a következőképpen alakult:

$$Z = \sum_n \frac{1}{(n!)^2} K^{2n} \left\{ \int\limits_{D'_{2n}} d^2 r_{2n} \ldots \int\limits_{D'_1} d^2 r_1 \exp\left[\beta \sum_{k \neq l} p_k p_l \ln \frac{|r_k - r_l|}{a} \right] + I_A \right\}. \tag{20.1}$$

A levezetett I_A tag, amint láttuk, a blokktranszformáció során fellépő adalékot jelentette. Ennek értékét Z–be behelyettesítve, a következő kifejezést kapjuk:

$$\begin{aligned} Z \;=\; & \sum_n \frac{1}{(n!)^2} K^{2n} \left\{ \int\limits_{D'_{2n}} d^2 r_{2n} \ldots \int\limits_{D'_1} d^2 r_1 \exp\left[\beta \sum_{k \neq l} p_k p_l \ln \frac{|r_k - r_l|}{a} \right] \right. \\ & + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \int\limits_{D'_{2n}} d^2 r_{2n} \ldots \int\limits_{D'_{j+1}} d^2 r_{j+1} \int\limits_{D'_{j-1}} d^2 r_{j-1} \ldots \int\limits_{D'_{i+1}} d^2 r_{i+1} \int\limits_{D'_{i-1}} d^2 r_{i-1} \ldots \\ & \ldots \int\limits_{D'_1} d^2 r_1 4\pi a da \left[A - 2\pi a^2 p^2 \beta^2 \sum_{\substack{k_1 \neq k_2 \\ \neq i,j}} p_{k_1} p_{k_2} \ln \frac{|r_{k_1} - r_{k_2}|}{a} \right] \\ & \left. \times \exp\left[\beta \sum_{\substack{l_1 \neq l_2 \\ \neq i,j}} p_{l_1} p_{l_2} \ln \frac{|r_{l_1} - r_{l_2}|}{a} \right] \right\}. \end{aligned} \tag{20.2}$$

A nyert állapotösszeget elemezve észrevehető, hogy az első tagban (azaz az I_A előtti járulékban) van $2n$ darab r_l integrál, míg a második tagban ebből kettőt, éspedig az i és j–ediket elvégeztük már, így itt csak $2n - 2$ darab r_l integrálunk maradt. Mindennek alapján a második tagban szereplő r_l integrálási változók átjelölésével, a Z állapotösszeget a következőképpen írhatjuk fel:

$$Z = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(n!)^2} K^{2n} \int\limits_{D'_{2n}} d^2 r_{2n} \ldots \int\limits_{D'_1} d^2 r_1 \exp\left[\beta \sum_{k \neq l} p_k p_l \ln \frac{|r_k - r_l|}{a} \right]$$

$$+\sum_{n=2}^{\infty}\frac{1}{(n!)^2}K^{2n}\int\limits_{D'_{2n-2}} d^2r_{2n-2}\ldots\int\limits_{D'_1} d^2r_1\frac{1}{2}\sum_{i\neq j}\left[2\cdot J_2\exp\left[\beta\sum_{\substack{l_1\neq l_2\\ \neq i,j}}p_{l_1}p_{l_2}\ln\frac{|r_{l_1}-r_{l_2}|}{a}\right]\right]. \tag{20.3}$$

A második, adalékintegrálból származó járulékban $n \geq 2$, mert legalább egy darab vortexpárunk kell legyen I_A kifejezésében. Továbbmenőleg, a levezetett Z második járulékában nemcsak kettővel kevesebb integrál szerepel, de exponenciális integrandusának exponenséből is hiányzik két tag, mégpedig az i és j. Habár ezen két index a $\sum_{i\neq j}$ összegzés alatti indexben szerepel, az összegezés alatt mostmár sehol sem jelenik meg. Így, mivel az i és j indexek külön–külön egy n tagot tartalmazó halmazt futnak be,

$$\frac{1}{2}\sum_{i\neq j}2\cdot J_2 = n(n-1)J_2. \tag{20.4}$$

Az állapotösszeg egy termodinamikai rendszert ír le, így lényeges értéke nagy n tartományokról származik. Ez esetben nagy n–re $n(n-1)\approx n^2$–ként közelíthető anélkül, hogy Z lényegileg megváltozna. Így Z–re a következő összefüggés írható:

$$\begin{aligned}Z &= \sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{(n!)^2}K^{2n}\int\limits_{D'_{2n}} d^2r_{2n}\ldots\int\limits_{D'_1} d^2r_1\exp\left[\beta\sum_{k\neq l}p_kp_l\ln\frac{|r_k-r_l|}{a}\right]\\ &+\sum_{n=2}^{\infty}\frac{K^{2n-2}}{[(n-1)!]^2}\int\limits_{D'_{2(n-1)}} d^2r_{2(n-1)}\ldots\int\limits_{D'_1} d^2r_1\\ &\times\frac{K^2}{n^2}\left(n^2J_2\right)\exp\left[\beta\sum_{k\neq l;k,l\neq i,j}p_kp_l\ln\frac{|r_k-r_l|}{a}\right].\end{aligned} \tag{20.5}$$

Továbbá a második összegben $n-1=m$ összegzési változócserét bevezetve, ezen kifejezés az első járulék formájára hozható:

$$\sum_{m=1}^{\infty}\frac{K^{2m}}{(m!)^2}\int\limits_{D'_{2m}} d^2r_{2m}\ldots\int\limits_{D'_1} d^2r_1J_2\cdot K^2\exp\left(\sum_{l\neq n}\ldots\right) \tag{20.6}$$

ahol mostmár $l,n\neq i,j$ nem mérvadó, mert n–nek, egy–el való csökkentésével, 2 vortex elmarad, azaz i és j csomópontok kiesnek. Így Z–ben a két tagot egybeolvasztva:

$$\begin{aligned}Z &= \sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{(n!)^2}K^{2n}\int\limits_{D'_{2n}} d^2r_{2n}\ldots\int\limits_{D'_1} d^2r_1\exp\left[\beta\sum_{l\neq m}^{2n}p_lp_m\ln\frac{|r_l-r_m|}{a}\right]\times\\ &\times\left[1+K^2\cdot 2\pi a da\left(A-2\pi a^2p^2\beta^2\sum_{l\neq m}^{2n}p_lp_m\ln\frac{|r_l-r_m|}{a}\right)\right],\end{aligned} \tag{20.7}$$

ahol, amint levezettük,

$$K = \frac{e^{\beta\mu}}{a^2} \; . \tag{20.8}$$

Egy fontos részeredményhez jutottunk, melyben A az egész rendszer felülete, és a a rácsállandó.

20.2 A blokktranszformáció hatása az állapotösszeg integrandusára

Az a rácsállandó nemcsak az állapotösszeg integrálási tartományában, hanem az integrandusában is szerepel, így a Kadanoff-féle blokktranszformáció az integrandust is érinti. Hogy konkréten mindez miben nyilvánul meg, azt a következőkben fogjuk elemezni. Ezen lépés elött azonban felhasználjuk azt a tényt, hogy da infinitezimálisan kicsi, tehát:

$$1 + xda|_{1\gg xda} \simeq e^{xda} \; , \tag{20.9}$$

Mindezek szerint a Kadanoff-féle blokktranszformációnak csupán az integrálási tartományra vonatkozó, $a \to a + da$ formában adott hatása nyomán, az állapotösszeg a következő formában írható fel:

$$\begin{aligned} Z &= \exp[2\pi K^2 aAda] \sum_{n=1}^{\infty} \frac{K^{2n}}{(n!)^2} \int\limits_{D'_{2n}} d^2r_{2n} \ldots \int\limits_{D'_1} d^2r_1 \\ & \exp\left\{\beta(1-(2\pi)^2p^2\beta K^2a^3da) \sum_{l\neq m}^{2n} p_l p_m \ln\frac{|r_l - r_m|}{a}\right\} \end{aligned} \tag{20.10}$$

Amint említettük, a blokktranszformáció az integrandust is érinti, és ezen belül, konkrétan a K és a logaritmus alatt lévő a értéket. Ezen tagokban nézzük most meg $a \to a + da$ hatását. Először is meg kell jegyezni, hogy ahol az argumentumban K vagy a, már da–val szorozva szerepel, ott a további Kadanoff-féle blokktranszformáció $a \to a + da$ nyomán $(da)^2$–es tagokat hozna létre, melyek da mellett elhanyagolhatóak. Így az integranduson végrehajtott blokktranszformáció két helyen hoz létre változást csupán, éspedig K^{2n}–ben (a K–nak a-függésén keresztül), továbbá a logaritmikus tagban (a nevezőben szereplő a változó miatt).

Mostmár a problémánk az, hogy K–ban μ lévén, K komplikált módon függ a–tól. Ennek ellenére feltételezhetjük, hogy az $a \to a + da$ Kadanoff-féle blokktranszformáció során K a

$$K \to K(1 + xda) \tag{20.11}$$

formában alakul át, ahol x közvetlen értéke egyelőre ismeretlen. Az x meghatározása céljából abból indulunk ki, hogy a Hamilton-operátor funkcionális formája a blokktranszformáció során a kritikus tartományban változatlan kell maradjon. Innen Z

integrandusának releváns részére, a blokktranszformáció nyomán nyert forma ekvivalenciájából:

$$\overline{K}^{2n} = K^{2n} \exp\left(-\beta \sum_{i\neq j}^{2n} p_i p_j \ln a\right) = (K[1+xda])^{2n} \exp\left(-\beta \sum_{i\neq j}^{2n} p_i p_j \ln(a+da)\right) . \tag{20.12}$$

A tárgyalás szempontjából csupán ez a rész lesz releváns, mert $\ln|r_i - r_j|$ nem függ az a rácsállandótól. Mostmár a logaritmus tag a következő képpen alakul:

$$\ln(a+da) = \ln a\left(1+\frac{da}{a}\right) = \ln a + \ln\left(1+\frac{da}{a}\right) \simeq \ln a + \frac{da}{a} . \tag{20.13}$$

Ez a megjelenő kiegészítő da/a járulék egy összeg alatt szerepel az exponensben p_i tagokkal szorozva. Figyelembe véve hogy $p_i^2 = p^2$, ezen exponensben lévő összeg a következőképpen alakul: Mivel

$$\sum_{i=1}^{2n} p_i^2 = 2np^2 , \tag{20.14}$$

azaz

$$\begin{aligned} -\beta \sum_{i\neq j}^{2n} p_i p_j \frac{da}{a} &= -\beta\frac{da}{a}(\underbrace{\sum_{i\neq j} p_i p_j + \sum_i p_i^2}_{(\sum_i p_i)^2=0} - \sum_i p_i^2) \\ &= \beta\frac{da}{a}\sum_{i=1}^{2n} p_i^2 = 2n\beta p^2\frac{da}{a} . \end{aligned} \tag{20.15}$$

A továbbiakban a K–ból eredő $(1+xda)^{2n}$ járulékot is, exponenciális formára hozhatjuk, da infinitezimális volta miatt :

$$(1+xda)^{2n} \simeq (e^{xda})^{2n} = e^{2nxda} . \tag{20.16}$$

Így tehát a $\overline{K}^{2n}$–re a Kadanoff-féle blokktranszformáció után kapott eredmény:

$$\overline{K}^{2n} = \overline{K}^{2n} \cdot \exp\left[2nda(\frac{\beta p^2}{a} + x)\right] , \tag{20.17}$$

ahol a jobboldolan megjelenő $\overline{K}^{2n}$ tagot a (**??**)-ből származó $\ln a$ alakítja ki. A funkcionális forma konzerválása érdekében, a megjelenő többlet exponenst zérónak kell feltételeznünk, amely relációból x meghatározható. Tehát:

$$x + \frac{\beta p^2}{a} = 0 , \tag{20.18}$$

azaz

$$x = -p^2 \frac{1}{a} \,. \tag{20.19}$$

Mindezek után, a Kadanoff-féle blokktranszformáció integrandusra vett hatása során:

$$K|_{a \to a+da} = K \left(1 - \beta p^2 \frac{da}{a}\right) \,. \tag{20.20}$$

Megfigyelhető tehát, hogy ha K a blokktranszformáció során az előbbiekben levezetett formában viselkedik, akkor a K–ból és a logaritmikus tagból eredő változások a blokktranszformáció következtében kölcsönösen kioltják egymást. Megfigyelhető továbbá, hogy

$$(1 - \beta p^2 \frac{da}{a}) = \exp(-\beta p^2 \frac{da}{a}) \,, \tag{20.21}$$

a da kicsisége miatt.

Ezen kép koherens a következő okokból kifolyólag is:

$$K \sim e^{-\beta\mu} \,, \tag{20.22}$$

ahol

$$\mu = 2\pi J \ln \frac{a}{r_o} \,. \tag{20.23}$$

Továbbá

$$p_i = \sqrt{2\pi J} q_i \,, \tag{20.24}$$

és a mi esetünkben $q_i = \pm 1$, így

$$\mu = p^2 \ln \frac{a}{r_o} \,. \tag{20.25}$$

Felhasználva ekkor, hogy

$$\ln(a + da) \sim \ln a + \frac{da}{a} \,, \tag{20.26}$$

az $a \to a + da$ blokktranszformáció nyomán,

$$K \sim e^{-\beta\mu} \sim e^{(-\beta p^2 \ln \frac{a}{r_o})} \to K \cdot e^{(-\beta p^2 \frac{da}{a})} \,, \tag{20.27}$$

amely eredmény pontosan az elöbb levezetett formával egyezik.

A probléma csupán az, hogy mindamellett, hogy $K \sim \exp(-\beta\mu)$, K–nak a nevezőjében van egy a^2–is, azaz $K = e^{-\beta\mu}/a^2$. Hogy ezen komplikációt megoldjuk, információként meg kell jegyezni, hogy a rekurziós képleteket nem K–ra, hanem $K \cdot a^2$–re kell felírni, pont azért, hogy a koherens leírás megtartása érdekében K nevezőjéből eltávolítsuk az a^2–es tagot, megőrizve így a helyes $x = -p^2/a$ értéket.

Amielőtt a renormálási csoport egyenleteket felírnánk, foglaljuk össze a blokktranszformáció végső eredményeit. E célból legyen

$$p_i = p \cdot q_i \ , \tag{20.28}$$

ahol konvenciónk szerint $q_i = \pm 1$. Így a kiindulópontúl szolgáló a rácsállandó mellett az állapotösszegünk:

$$Z = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{K^{2n}}{(n!)^2} \int_{D_{2n}} d^2 r_{2n} \ldots \int_{D_1} d^2 r_1 \exp\left[\beta p^2 \sum_{l \neq m}^{2n} q_l q_m \ln \frac{|r_l - r_m|}{a}\right] \tag{20.29}$$

volt. A $a \to a + da$ blokktranszformáció után az állapotösszeg új kifejezése:

$$Z = Z_0 \cdot \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(K')^{2n}}{(n!)^2} \int_{(D')_{2n}} d^2 r_{2n} \ldots \int_{(D')_1} d^2 r_1 \exp\left[(\beta p^2)' \sum_{l \neq m}^{2n} q_l q_m \ln \frac{|r_l - r_m|}{a}\right] . \tag{20.30}$$

Ezen információk alapján a renormálási csoport eredmények megadhatók. A levezetett kifejezéseink szerint a Hamilton–operátor formáját megtartva:

$$(\beta p^2)' = \beta p^2 \left[1 - (2\pi)^2 (\beta p^2)(K a^2)^2 \frac{da}{a}\right] \ , \tag{20.31}$$

$$(K)' = K \left(1 - \beta p^2 \frac{da}{a}\right) \ . \tag{20.32}$$

Továbbá a levezetés során sikerült az állapotösszeg formájának változását is követni:

$$Z(K, (\beta p^2)) = Z_0 \cdot Z'(K', (\beta p^2)') \ , \tag{20.33}$$

ahol

$$Z_0 = \exp(2\pi K^2 a A da) \ . \tag{20.34}$$

A (βp^2)-re és K-ra vonatkozó első két összefüggés alkotja a renormálási csoport egyenleteket, éspedig differenciális formában felírva. Az utolsó két egyenlet, mely az állapotösszegre vonatkozik, a szabadenergia blokktranszformáció következtében történő változását határozza meg.

Először is megemlítendő, hogy a kapott eredmény többet jelent, mint a renormálási csoport rekurziós képletei. Mindez azért van így, mert a blokktranszformáció során a $\mathrm{Tr}e^{-\beta H}$–ban megjelenő konstansoktól a renormálási csoport ,,csatolási állandók"-ra felírt rekurziós képleteinél általában eltekintünk, egyszerűen azért, mert ezek a csatolási állandók renormált formájába nem kerülnek bele. Amint a renormálási csoport tárgyalásakor említettük, ezen blokktranszformáció során megjelenő konstansok a termodinamikai átlagokból kiesnek, és a Hamilton–operátor formájának konzerválása alapján a csatolási állandókra felírt rekurziós képletekben nem játszanak szerepet. Viszont segítségükkel, amint látni fogjuk, fontos információkat lehet nyerni magáról a termodinamikai potenciálról. Ugyanis a rekurziós képletek mellett nyert egyenletek:

$$Z = Z_0 \cdot Z' \ , \quad Z_0 = \exp(2\pi K^2 aAda) \ , \tag{20.35}$$

melyek alapján:

$$\ln Z = \ln Z_0 + \ln Z' \ , \tag{20.36}$$

azaz

$$F = -\delta F + F' \ . \tag{20.37}$$

Itt viszont

$$\delta F = F' - F \ , \tag{20.38}$$

és

$$-\delta F = -k_B T \ln Z_0 \ . \tag{20.39}$$

Mindennek alapján tehát

$$\delta F = 2\pi\beta^{-1} K^2 aAda \ . \tag{20.40}$$

Ezen egyenlet, a renormálási csoport rekurziós képletei mellett, a szabadenergia megváltozását adja meg az $a \to a + da$ blokktranszformáció nyomán. Tanulmányozzuk sorra a két egyenlettípust és következményeit.

20.3 A renormálási csoport rekurziós összefüggései a Kosterlitz–Thouless–Berezinski fázisátalakulás esetében

A következőkben azt kell alaposan megvizsgálnunk hogy mit tekintünk a renormálási csoport egyenletek változóinak. A két vizsgált kiinduló egyenlet:

$$(\beta p^2)' = \beta p^2 \left[1 - (2\pi)^2 (\beta p^2)(Ka^2)^2 \frac{da}{a} \right] \ ,$$

$$(K)' = K \left(1 - \beta p^2 \frac{da}{a} \right) \ .$$

Mivel a Kadanoff-féle blokktranszformáció differenciális formában volt megadva, a rekurziós képletek is differenciális formában vannak matematikai szempontból értelmezve, ahol

$$K' - K = dK \;, \tag{20.41}$$

és

$$(\beta p^2)' - (\beta p^2) = d(\beta p^2) \;. \tag{20.42}$$

Tehát:

$$dK = -K\beta p^2 \frac{da}{a} \;, \tag{20.43}$$

továbbá

$$d(\beta p^2) = -(2\pi)^2(\beta p^2)^2(Ka^2)^2\frac{da}{a} \;. \tag{20.44}$$

Láttuk viszont, hogy a matematikai koherencia fenntartása érdekében (Ka^2)–re kell a rekurziós képletet használnunk. E célból az első egyenletünket mely dK–ra adott, $d(Ka^2)$–re írjuk át:

$$dK = -K\beta p^2 \frac{da}{a} \;, \quad d(Ka^2) = a^2 dK + 2aKda \;, \tag{20.45}$$

azaz

$$d(Ka^2) = -a^2 k\beta p^2 \frac{da}{a} + 2a^2 k\frac{da}{a} \;. \tag{20.46}$$

Tehát, figyelembe véve hogy $da/a = d(\ln a)$:

$$\begin{cases} d(Ka^2) = (Ka^2)(2-\beta p^2)d(\ln a) \\ d(\beta p^2) = -(2\pi)^2(\beta p^2)^2(Ka^2)^2 d(\ln a) \end{cases} . \tag{20.47}$$

Vizsgáljuk meg a következőkben a kapott összefüggéseket. Az első egyenlet

$$\frac{1}{Ka^2}\frac{d(Ka^2)}{d(\ln a)} = \frac{d(\ln(Ka^2))}{d(\ln a)} = 2 - \beta p^2 \tag{20.48}$$

alakba hozható. Így az első változónkat

$$x = \beta p^2 - 2 \tag{20.49}$$

formában választjuk. Ami a második változót illeti, az világos, hogy a matematikai könnyítés szempontjából érdemes $y \sim (Ka^2)$ formában felvenni. Az arányossági tényezőt úgy határozzuk meg, hogy a második egyenlet numerikus koefficiense legyszerüsödjön. A szakirodalomban használt jelölést követve[336], legyen

$$y = 4\pi Ka^2 = 4\pi e^{-\beta\mu} \;. \tag{20.50}$$

[336]Lásd például [1]

Így ezen jelöléseket követve, rekurziós képleteink a következő formára hozhatóak:

$$dy = -yxd(\ln a) \ , \tag{20.51}$$

$$dx = -\frac{1}{4}y^2(x+2)^2 d(\ln a) \tag{20.52}$$

A következő lépés a fixpontok meghatározása lenne. A rekurziós egyenletek fixpontjait keresve megfigyelhető, hogy az y–ra felírt egyenletünk formája:

$$\frac{d(\ln y)}{d(\ln a)} = \frac{d(\ln(Ka^2))}{d(\ln a)} = (2 - \beta p^2) = -x \ . \tag{20.53}$$

Az egyenlet fixpontját tehát

$$\frac{d\ln(Ka^2)}{d\ln a} = 0 \ , \tag{20.54}$$

azaz

$$2 - \beta p^2 = x = 0 \tag{20.55}$$

határozza meg. Így az x változó fixpontbeli értéke

$$x^* = 0 \ . \tag{20.56}$$

A második egyenlet, eredeti βp^2-tel felírt formájában,

$$\frac{d(\beta p^2)}{(\beta p^2)^2} = -(2\pi)^2(Ka^2)^2 d\ln a \ , \tag{20.57}$$

azaz

$$\frac{d(\beta p^2)^{-1}}{d\ln a} = (2\pi)^2(Ka^2)^2 \tag{20.58}$$

alakban adható meg. Tehát a fixpontot meghatározó összefüggés:

$$\frac{d(\beta p^2)^{-1}}{d\ln a} = 0 \ , \tag{20.59}$$

amelyből a

$$Ka^2 = 0 \tag{20.60}$$

egyenlőség következik. Ez az y változóval felírva:

$$y^* = 0 \tag{20.61}$$

értéket jelent. A fixpontokat kifejezvén, a továbbiakban a rekurziós képletek (x^*, y^*) körüli formáját szeretnénk megkapni (ez a lépés felel meg a fixpont körüli linearizálásnak a tradicionális sémában). A mi esetünkben, mivel a fixpontban

$$x^* = 0 \ , \quad y^* = 0 \ , \tag{20.62}$$

a differenciális rekurziós képletekben csupán másodrendig megyünk el az x és y szorzatokban. Az első rekurziós képlet

$$dy = -yxd(\ln a) \tag{20.63}$$

jobboldala másodrendű tag, így változatlanul hagyjuk. A második egyenletben

$$dx = -\frac{1}{2^2}y^2(x+2)^2 d(\ln a) \tag{20.64}$$

szerepel. A jobboldalon csak másodrendű tagokat tartva meg $x + 2 \simeq x^* + 2 = 2$. Így:

$$\begin{cases} dy = -yxd(\ln a) \ , \\ dx = -y^2 d(\ln a) \ . \end{cases} \tag{20.65}$$

Most, mivel a második egyenletben y^2 szerepel, az első egyenletet is y^2–re szokás megadni

$$dy^2 = 2ydy \ \Rightarrow \ dy^2 = -2xy^2 d(\ln a) \ . \tag{20.66}$$

Így tehát a

$$\begin{aligned} dx &= -y^2 \frac{da}{a} \ ; \qquad x = \beta p^2 - 2 \ ; \qquad x^* = 0 \ ; \\ dy^2 &= -2xy^2 \frac{da}{a} \ ; \quad y = 4\pi e^{-\beta\mu} \ ; \qquad y^* = 0 \ , \end{aligned} \tag{20.67}$$

összefüggések alkotják a renormálási csoport rekurziós egyenleteinek differenciális formáit a fixpont körül kifejtve. Ezen egyenletek az x és y változókat a–tól függő parametrikus formában írják le. Az $s = \ln a$ jelölést bevezetve, megfigyelhető, hogy az egyenletrendszerünk megoldása:

$$x^2 - y^2 = \overline{k} \tag{20.68}$$

formajú, ahol $\overline{k}$ egy konstans. Ténylegesen

$$\frac{d}{ds}(x^2 - y^2) = 0 \ . \tag{20.69}$$

Így

$$2x\frac{dx}{ds} - \frac{dy^2}{ds} = 0 \ , \tag{20.70}$$

amiből, az egyenleteinket felhasználva,

$$2x(-y^2) - (-2xy^2) = 0 \tag{20.71}$$

adódik.

Továbbá, mindig $y > 0$ (mert pozitív definit mennyiség). Ezen túlmenőleg $x > 0$–ra, ha a nő, mind x, mind y csökken (az egyenletből például $ds > 0 \ \Rightarrow \ dx, dy < 0$). Ha pedig $x < 0$, akkor a növekedésével x csökken, y pedig nő.

A fixpont körüli viselkedést az ábra szemlélteti:

20.1 Ábra.
A fixpont körüli viselkedés a KTB fázisátalakulás esetében.

Megfigyelhető, hogy az $x > 0$ tartományból a fixpont stabil, és a kritikus felület (ami $a \to \infty$–re a fixpontba visz) az

$$x = y \tag{20.72}$$

első szögfelező. Ezen egyenes $\overline{k} = 0$–nak felel meg. Tudjuk, hogy a rendszernek megfelelő konfigurációs pontnak a kritikus felületen kell lennie, ha $T = T_c$. Ebből következik, hogy

$$\bar{k} \sim |t| = |T - T_c| \, . \tag{20.73}$$

Így a kritikus hőmérsékletet $\bar{k} = 0$, azaz $x = y$ adja meg. Ekkor $T = T_c$ behelyettesítéssel:

$$\frac{p^2}{k_B T_c} - 2 = 4\pi e^{(-\mu/(k_B T_c))} \tag{20.74}$$

A továbbiakban felhasználjuk azt a tényt, hogy $p_i = \sqrt{2\pi J} q_i$, ahol $(q_i)_i^2 = 1$, így $p^2 = 2\pi J$. Tehát a kritikus hőmérséklet egyenlete:

$$\frac{\pi J}{k_B T_c} - 1 = 2\pi \exp\left(-\frac{\mu}{k_B T_c}\right) \, . \tag{20.75}$$

Mivel általában $\mu/(k_B T_c) \gg 1$, ezen eredmény gyakorlatilag visszaadja az előzőkben kvalitatív meggondolásokból kapott kritikus hőmérséklet értéket, mely szerint

$$k_B T_c \approx \pi J \, . \tag{20.76}$$

Szintén a T_c kifejezésével kapcsolatban megemlítendő, hogy két rácsállandó távolságra lévő vortexből álló rendszer energiája $\pi^2 J$, és ez közelítőleg μ értékének tekinthető.

Az egzakt számítás során egy különálló, egységnyi vorticitású vortex kémiai potenciálja $\mu = 2\pi J[\gamma + (3/2)\ln 2]$, ahol γ az Euler konstans.

A μ-re vonatkozó közelítést felhasználva, a T_c egyenletét szokásos

$$\frac{\pi J}{k_B T_c} = 1 - 2\pi \exp\left(-\frac{\pi^2 J}{k_B T_c}\right) \tag{20.77}$$

formában megadni.

Ezen eredményeket összefoglalva, a renormálási csoport egyenletek kritikus fixpontja jelzi, hogy fázisátalakulás létezik, továbbá az átmenet kritikus hőmérsékletét az előbbiekben levezetett (??) kifejezés adja meg.

20.4 A szabadenergia tanulmányozása

Az elkövetkezőkben az egységnyi felületre eső szabadenergia kifejezését vizsgáljuk meg. A levezetettek alapján:

$$df = \frac{dF}{A} = \frac{2\pi}{\beta}K^2 a da = \frac{1}{8\pi\beta}(16\pi^2 K^2 a^4)\frac{da}{a^3} = \frac{1}{8\pi\beta}y^2\frac{da}{a^3}\ , \tag{20.78}$$

azaz

$$f = \frac{1}{8\pi\beta}\int_{a_0}^{\infty}\frac{y^2}{a^3}\, da\ , \tag{20.79}$$

ahol $a_0 = a$–val jelöltük a kiinduló rácsállandót, azaz a rács valódi rácsállandóját. Most $\overline{k} = x_0^2$ jelölést bevezetve, a rekurziós képletek fixpont körül vett formájának megoldását

$$x^2 - y^2 = x_0^2 \tag{20.80}$$

alakban írhatjuk fel. Továbbá $dx = -y^2(da/a)$ egyenlőséget felhasználva:

$$\frac{dx}{y^2} = -\frac{da}{a} \ \Rightarrow\ \frac{dx}{x^2 - x_0^2} = -\frac{da}{a}\ . \tag{20.81}$$

Tehát

$$\frac{1}{2x_0}\left(\frac{1}{x - x_0} - \frac{1}{x + x_0}\right)dx = -\frac{da}{a}\ . \tag{20.82}$$

Most ezen egyenlet mindkét oldalát integrálva a_0–tól a–ig (és x_i–vel jelölve azon x értéket, mely $a = a_0$–nak felel meg):

$$\frac{1}{2x_0}\ln\left(\frac{|x - x_0|}{|x + x_0|}\right)\Bigg|_{x_i}^{x} = -\ln\frac{a}{a_0}\ ; \quad -\ln\frac{a}{a_0} = \frac{1}{2x_0}\left(\ln\left|\frac{x - x_0}{x + x_0}\right| - \ln\left|\frac{x_i - x_0}{x_i + x_0}\right|\right)\ . \tag{20.83}$$

Azonban

$$-\ln\frac{a}{a_0}=\frac{1}{2x_0}\ln\left|\frac{x-x_0}{x+x_0}\cdot\frac{x_i-x_0}{x_i+x_0}\right| \;\Rightarrow\; \ln\frac{a}{a_0}=\frac{1}{2x_0}\ln\left|\frac{x+x_0}{x-x_0}\cdot\frac{x_i-x_0}{x_i+x_0}\right| . \tag{20.84}$$

Innen látszik, hogy $a\to\infty \;\Rightarrow\; x\to x_0$. Továbbá:

$$a=a_0\cdot\left[\exp\left(\frac{1}{2x_0}\right)\right]\cdot\left|\frac{x_i-x_0}{x_i+x_0}\right|\left|\frac{x-x_0}{x+x_0}\right| . \tag{20.85}$$

Ezenkívül, szintén a $dx=-y^2(da/a)$ rekurziós képletből:

$$\frac{y^2da}{a^3}=-\frac{1}{a^2}\left(-y^2\frac{da}{a}\right)=-\frac{dx}{a^2} , \tag{20.86}$$

így f értéke:

$$f=\frac{1}{8\pi\beta a_0^2}\left(-\int_{x_i}^{x_0}\frac{dx}{a^2}\right)=\frac{1}{8\pi\beta a_0^2}\exp\left(-\frac{1}{2x_0}\right)\left|\frac{x_i+x_0}{x_i-x_0}\right|^2\int_{x_i}^{x_0}\left|\frac{x-x_0}{x+x_0}\right|^2 dx . \tag{20.87}$$

Ezen kifejezésből az egyedüli nem–analitikus rész $e^{-[1/(2x_0)]}$.

Láttuk azonban, hogy $\bar{k}=x_0^2\sim|t|$, és így:

$$f\sim\exp\left(-\frac{\text{konst}}{\sqrt{|t|}}\right)+\quad\text{analitikus rész} . \tag{20.88}$$

Ezen összefüggés T_c közvetlen közelében igaz, és nyilvánvalóan mutatja, hogy a szabadenergia a $T\to T_c$ határesetben végtelenszer deriválható anélkül, hogy valamely rendű deriváltja divergenciát mutatna. Mindebből az a következtetés vonható le, hogy ezen fázisátalakulás ,,végtelen" rendű fázisátalakulásként fogható fel (az Ehrenfest szerinti osztályozásnak megfelelően). Az tényként megállapítható, hogy f semmilyen véges rendű deriváltja $T=T_c$–ben divergenciát nem mutat:

$$\left.\frac{d^nf}{dT^n}\right|_{T=T_c}\neq\infty . \tag{20.89}$$

Így ténylegesen ezen átalakulás matematikai szempontból végtelen rendűnek tekinthető[337].

20.5 Szakirodalmi jegyzék 20.

[1] J. M. Kosterlitz, *The critical properties of two-dimensional xy model*, Jour. of Phys. C7, 1046, (1974).

[2] Zs. Gulácsi, M. Gulácsi: *Theory of phase transitions in two-dimensional systems*, Advances in Physics 47, 1-89, (1998).

[337] Részletesebb elemzés érdekében lásd [2].

21 A Kosterlitz-Thouless-Berezinski fázisátalakulás kritikus exponensei

A következőkben a KTB átmenet további jellemzőinek tanulmányozásával fogunk foglalkozni.

21.1 Bevezetés

A következőkben összefoglaljuk azokat a fontosabb ismereteket, amelyek ezen fejezet megértéséhez szükségesek.

A Kosterlitz–Thouless–Berezinski–féle fázisátalakulás renormálási csoporttal történő elemzéséből eredő rekurziós összefüggéseket ismerjük. A fixpont körül felírt alakban az összefüggések a fixpontokkal együtt, a következőek:

$$dx = -y^2 \frac{da}{a} \; ; \quad x^* = 0 \; . \tag{21.1}$$

$$dy^2 = -2xy^2 \frac{da}{a} \; ; \quad y^* = 0 \; . \tag{21.2}$$

Ismerjük az egyenletek megoldását is $x^2 - y^2 = \overline{k}$ formában, és amint láttuk, ezen összefüggés $x^2 - y^2 = x_0^2$ (vagy $y^2 - x^2 = y_0^2$) alakban felírható. Azt is láttuk, hogy a kritikus felület $x_0 = 0$–nak felel meg, amiből $x = y$ adódik a „kritikus felület" egyenletére. Továbbá a kritikus felületen az $s \to \infty$ határesetben a rendszert jellemző konfigurációs pont az (x^*, y^*) fixpontba megy át. Mindebből következik, hogy $x = y$ egyenesnek az (y, x) síkban $t = T - T_c = 0$ felel meg.

Az első felvetődő kérdés a továbbhaladás érdekében az, hogy az (y, x) síkban melyik térrész definiálja a $t < 0$, és melyik $t > 0$ tartományt.

21.2 A kritikus felület körüli tartomány hőmérséklet függésének elemzése

A $t = T - T_c$ különböző előjeleihez tartozó tartományok felismeréséhez figyelembe kell vennünk a következőket.

A kritikus fixpontba csak az $x = y$ görbén juthatunk be, ezen egyenes a „kritikus felület". Továbbá megjegyzendő, hogy $y = 4\pi e^{-\beta\mu} > 0$, tehát csak pozitív y értékek lehetségesek fizikai szempontból az (y, x) síkban. A T_c értékét az $x = y$ feltételből határozhatjuk meg, mely eljárás során figyelembe vesszük, hogy x és y hőmérsékletfüggő mennyiségek:

$$x(\beta) = \beta p^2 - 2 \; , \quad y(\beta) = 4\pi e^{-\beta\mu} \; . \tag{21.3}$$

Ezen összefüggésekből adódik

$$x(\beta) = y(\beta) \tag{21.4}$$

nyomán a kritikus hőmérséklet,

$$\beta = \beta_c \; . \tag{21.5}$$

A kapott egyenlőség definiálja a T_c kritikus hőmérsékletet értékét. Ezen túlmenőleg megfigyelhető, hogy $x(\beta)$ a β–nak monoton növekvő, míg $y(\beta)$ a β–nak monoton csökkenő függvénye. Így tehát $\beta > \beta_c$–re x nő, y meg csökken, azaz $\beta > \beta_c$–nek az $x > y$, míg $\beta < \beta_c$–nek az $x < y$ tartomány felel meg.

Így a $\beta > \beta_c$ tartomány ($T < T_c$, azaz $t = (T - T_c)/T_c < 0$) az $x = y$ alatti és $y = 0$ tengely felett elhelyezkedő síkrésznek, míg $\beta < \beta_c$ (azaz $T > T_c, t > 0$) tartomány az $x = y$ feletti síkrésznek felel meg az (y, x) paramétertérben.

Mindezek után az (y, x) síkban az $x^2 - y^2 = x_0^2$, illetve $y^2 - x^2 = y_0^2$ összefüggéseket elemezve megállapítható, hogy x_0, illetve y_0 a két négyzetes kifejezésből eredő görbe tengelymetszeteinek helyzetét adja. Ezeknek pozicióját vizsgálva a következőket figyelhetjük meg:

Mivel x_0 az $x = y$ alatt van és fennáll az

$$x_0^2 = \overline{k} \sim |t| \tag{21.6}$$

összefüggés, továbbá t ezen a tartományon negatív, következik

$$x_0^2 \sim -t \; . \tag{21.7}$$

Továbbmenőleg, mivel y_0 az $x = y$ egyenes felett van olyan tartományban ahol t pozitív, hasonló módon

$$y_0^2 = \overline{k} \sim |t| = t \; . \tag{21.8}$$

Ezen ismereteket összefoglalva, a szóbanforgó x_0, és y_0 konstansokra vonatkozólag a következő összefüggések állnak fenn:

$$x_0^2 = -ct \; ; \quad y_0^2 = c_1 t \; ; \quad t = \frac{T - T_c}{T_c} \; . \tag{21.9}$$

Ezen egyenlőségek közvetlenül T_c, tehát a kritikus felület körül érvényesek, és t–ben első rendig menőleg állnak fenn. A megjelenő c és c_1, két konstans szerepét tölti be.

Mindezen jellemzők felsorolása után a ξ korrelácios hossz értelmezésével és értékével fogunk a következőkben foglalkozni.

21.3 A ξ korrelácios hossz

A korrelációs hossz értelmezésében a következőket vesszük figyelembe: Az (y, x) sík egy adott pontjából kiindulva egy $a = a_0$ rácsállandó értékkel, és a–t növelve (tehát a ,,blokk" leírás rácsállandóját növelve), az (x, y) síkban mozgunk a rendszert jellemző konfigurációs ponttal. Ezen a növekedés irányába haladva $y = 4\pi e^{-\beta\mu}$ is változik. Az (x^*, y^*) fixpont közelében, egy adott t =konstans görbén,

T állandó (egy jólmeghatározott x_0 vagy y_0–hoz tartozik), így μ változtatásaként fogható fel y változása egy $x^2 - y^2 = x_0^2$ vagy $y^2 - x^2 = y_0^2$ görbe mentén.

Az értelmezés megértése céljából emlékeztetünk arra a tényre, hogy a rendezett fázisunk itt egymáshoz kapcsolt vortexpárokat jelent. Ha a vortexpárok kötöttek egymáshoz, akkor egy vortex párból való kiszakítása nehezen történhet, ami abban jut kifejezésre, hogy μ–nak nagynak kell lennie. A μ növekedése tehát úgy értelmezhető, hogy a vortexpárok mind jobban és jobban kapcsolódnak egymáshoz, azaz mind jobban és jobban korreláltak. Ezen kép alkalmazható a korrelácios hossz ξ értelmezésére. Mindez a következő modón történik: a–t növelve mind nagyobb és nagyobb távolságokat fogunk át. Most, ha mindezt egy t = konstans görbén tesszük, akkor y viselkedéséből következtetni lehet arra, hogy a rácsállandó növekedésével hogyan változik μ (ugyanis y növekedésével μ csökken és viszont). Most ξ–t úgy fogjuk fel, hogy azon a értékkel arányos, melynél az s (azaz a Kadanoff blokknagyság) növekedésével μ csökkenni kezd, tehát melynél y nőni kezd és távolodik a fixponttól. Ez azon távolságot jelzi, melynél a vortexpárok közötti ,,kötöttség" lazulni kezd.

Elemezzük először a $t < 0$ $(T < T_c)$,,rendezett" fázist. Amint az előbbiekben láttuk, itt $a \to \infty$ az $x \to x_0$–nak felel meg. Mindez az $y = x$ alatti részben történik, itt azonban, a $t = konstans$ görbe az $y = 0$ értékig csökken le. Az y értelmezése szerint azonban $y \to 0$ a $\mu \to \infty$ határátmenetet jelenti. Tehát tetszőleges nagy távolságokon a vortexpárok kötöttek, sőt $a \to \infty$–ben végtelen erősen $(\mu = \infty)$, ami azt jelenti, hogy

$$T < T_c - \text{re} \quad \xi = \infty \tag{21.10}$$

minden T_c alatti hőmérsékleten.

Most jellemezzük a $t > 0$, azaz $T > T_c$ esetet. Ezen szituáció, amint láttuk, az $x = y$ egyenes feletti félsíknak felel meg. Ez esetben az $x^2 - y^2 = x_0^2$ egyenlet[338] a felső félsíkba $x_0 = iy_0$ helyettesítéssel vihető át (ami természetesen az $y^2 - x^2 = y_0^2$ összefüggést vissza adja). Ekkor viszont, $dx = -y^2(da/a)$ egyenlőség alapján

$$\frac{dx}{y^2} = -\frac{da}{a} \;\Rightarrow\; \frac{dx}{x^2 + y_0^2} = -\frac{da}{a} \tag{21.11}$$

kapható. Azaz

$$\frac{1}{y_0^2}\,\frac{dx}{1 + \left(\frac{x}{y_0}\right)^2} = \frac{1}{y_0^2}\,\frac{d\left(\frac{x}{y_0}\right)}{1 + \left(\frac{x}{y_0}\right)^2} = -\frac{da}{a}\,. \tag{21.12}$$

Azonban tudvalevőleg,

$$\int \frac{dt}{1 + t^2} = \operatorname{arctg}(t) = -\operatorname{arcctg}(t)\,, \tag{21.13}$$

[338] Amely az $x = y$ egyenes alatti síkrészben helytálló

így, mindkét oldalt integrálva,

$$\ln a \,|_{a_0}^{a} = \frac{1}{y_0} \operatorname{arcctg} \left(\frac{x}{y_0} \right) \Bigg|_{x_i}^{x} , \tag{21.14}$$

tehát:

$$\frac{a}{a_0} = \exp \left\{ \left(\frac{1}{y_0} \right) \left[\operatorname{arcctg} \frac{x}{y_0} - \operatorname{arcctg} \frac{x_i}{y_0} \right] \right\} . \tag{21.15}$$

Itt x_i az a_0–nak megfelelő x érték. Ezen egyenlőség $x > 0$–ra

$$\operatorname{arcctg} x = \operatorname{arctg} \frac{1}{x} \tag{21.16}$$

felhasználásával

$$\frac{a}{a_0} = \exp \left\{ \frac{1}{y_0} \left(\operatorname{arctg} \frac{y_0}{x} - \operatorname{arctg} \frac{y_0}{x_i} \right) \right\} , \tag{21.17}$$

formába alakul át, ahol $x_i/y_0, x/y_0 > 0$ feltételezett. Most a $T > T_c$ esetre megfigyelhető, hogy az y eltávolodása a fixponttól, $x = 0$ környékén történik, miután y növekedni (és így μ csökkenni) kezd. Ez esetben a (**??**) összefüggésben $x \to 0$ határesetben $\operatorname{arctg}(y_0/x) \to \pi/2$, míg a második tagban, nagy kiinduló x_i-t választva $\operatorname{arctg}(y_0/x_i) \to 0$. Így a korrelációs hossz

$$\xi \sim a(x \approx 0) \sim \exp \left(\frac{\pi}{2y_0} \right) . \tag{21.18}$$

Azonban $y_0^2 \sim t$, így a korrelációs hosszra kapott végeredmény:

$$\xi(T > T_c) \sim \exp \left(\frac{b}{\sqrt{t}} \right) \; ; \quad t > 0 \; ; \tag{21.19}$$

$$\xi = \infty \; ; \quad T < T_c \; ; \quad t < 0 \; . \tag{21.20}$$

Pontos nyomonkövetés esetében, $b \approx 1.5$ adódik[339]. Látható, hogy ezen viselkedés messzemenően nem felel meg a $\xi \sim |t|^{-\nu}$,,hatványszerű" vislekedésnek. Az exponenciális típusú függést $\nu = \infty$–nek fogjuk fel, jelezvén, hogy a rendezett fázis nem egy konvencionális ,,hosszútávú térbeli rendezettségű", mint a tradicionális rendezett fázisok. Továbbá megfigyelhető, hogy $\xi = \infty$ minden $T < T_c$–re, tehát a teljes T_c alatti hőmérsékleten lévő rendezett fázisban.

Mindezen eredményeknek fontos következménye, hogy a skálatörvények és kritikus exponensek tradicionális definícioját a KTB fázisátalakulás esetében nem lehet fenntartani. Kritikus exponenseket csak ξ viszonylatában lehet definiálni, így a szigorú értelemben vett skálatörvények lesznek relevánsak.

[339]Lásd [1] és az ott adott bibliográfiai adatokat.

21.4 A korrelációs hossz és szabadenergia kapcsolata

A szabadenergiára vonatkozó tanulmányozásunk eddigi eredménye

$$f \sim \exp\left(-\frac{\text{konst}}{\sqrt{|t|}}\right) + \quad \text{analitikus rész} \tag{21.21}$$

formában foglalható össze. Mostani ismereteink alapján viszont belátható, hogy f levezetése során a rekurziós képletek megoldásának x_0–t tartalmazó formáját használtuk fel, és így, a termodinamikai potenciálra vonatkozó eredményünk csupán $t < 0$–ra érvényes. Ennek megfelelően először ezen hiányosságot pótoljuk, elvégezve az f jellemzést a $t > 0$ esetre is. Ezúttal is az

$$\frac{y^2 da}{a^3} = -\frac{dx}{a^2} \tag{21.22}$$

összefüggésből indulunk ki. Ebből egyrészt az

$$f = \frac{1}{8\pi\beta}\left(-\int_{x_i}^{x_\infty} \frac{dx}{a^2}\right) \tag{21.23}$$

szabadenergia kifejezése ered, ahol most x_∞ fog megfelelni $a \to \infty$–nak, (és nem x_0, mint a $t < 0$ esetben). Másrészt $y^2 = x^2 + y_0^2$ felhasználásával (**??**) egyenlet $da/a = -dx/(x^2 + y_0^2)$ formára írható amelyből a-ra a (**??**) kifejezés ered. Az f–ben szereplő integrál azon részét, mely kis pozitív x értéktartományba esik (általában $x_\infty < 0$) úgy tárgyaljuk, hogy az $\text{arctg}(y_0/x)$ kifejezését[340]

$$\text{arctg}\frac{y_0}{x}\,|_{x\approx 0, x>0} = \frac{\pi}{2} - \text{arctg}\frac{x}{y_0} \tag{21.24}$$

formában reprezentáljuk. Megjegyzendő hogy ezen összefüggés bármely $x/y_0 > 0$–ra fennáll, és ez esetben azért használatos, mert az így nyert $\text{arctg}(x/y_0)$, kis x–re, kis járulékot eredményez, így f analitikus részébe kerül. Mindezek után:

$$f = \frac{1}{8\pi\beta}\int_{-|x_\infty|}^{x_i} \frac{dx}{a^2}\ ; \quad \frac{a}{a_0} = \exp\left(\frac{1}{y_0}\frac{\pi}{2} - \frac{1}{y_0}\left(\text{arctg}\frac{x}{y_0} + \text{arctg}\frac{y_0}{x_i}\right)\right)\ ; \tag{21.25}$$

Most figyelembe véve, hogy $y_0^2 \sim t$, f formája[341]

$$f \sim \frac{1}{\left[\exp\left(\frac{\pi}{2y_0}\right)\right]^2} = e^{-\frac{\pi}{y_0}} \sim \exp\left(-\frac{\text{konst}}{\sqrt{t}}\right) \tag{21.26}$$

[340] Lásd $\text{arctg}\alpha + \text{arctg}(1/\alpha) = \pi/2$ ha $\alpha > 0$.

[341] Mivel a kiinduló x_i érték nagy szám, $x_i \to \infty$ választható mind az f-ben szereplő integrál felső határában mind a/a_0 kifejezésében.

függést mutat. Látható tehát, az általános f forma marad ugyanaz, mint $t < 0$ esetében, csupán az exponensbeli konstans értéke változik meg. Figyelembevéve[342], hogy $t > 0$–ra

$$\xi \sim e^{\frac{\pi}{2y_0}} , \quad f \sim e^{-\frac{\pi}{y_0}} , \tag{21.27}$$

egy fontos eredmény adódik, éspedig

$$t > 0 \;\Rightarrow\; f \sim \xi^{-2} ; \tag{21.28}$$

továbbá:

$$\left.\begin{array}{l} t > 0 \;\Rightarrow\; f \sim e^{-\frac{k_1}{\sqrt{t}}} \\ t < 0 \;\Rightarrow\; f \sim e^{-\frac{k_2}{\sqrt{|t|}}} \end{array}\right\} \tag{21.29}$$

Így, függetlenül t előjelétől, ténylegesen

$$\left.\frac{\partial^n}{\partial T^n}\right|_{T=T_c} f \neq \infty , \tag{21.30}$$

tehát a fázisátalakulás végtelen rendűnek tekinthető matematikai szempontból.

21.5 Az η kritikus exponens

A következőkben a KTB fázisátalakulás kritikus exponenseit szeretnénk elemezni. Amint látni fogjuk, a tanulmányozott esetben központi helyet foglal el az η kritikus exponens értéke, ezért elsősorban ennek a levezetésével fogunk foglalkozni.

A spin–korrelációs függvény formája

$$\begin{aligned} \Gamma(r-r') &= <\vec{S}(r)\cdot\vec{S}(r')>=<\cos(\phi(r)-\phi(r'))> \\ &= <\cos\Big[(\overline{\phi}(r)-\overline{\phi}(r'))+(\psi(r)-\psi(r'))\Big]> \qquad (21.31) \\ &= <\cos(\overline{\phi}(r)-\overline{\phi}(r'))\cdot\cos(\psi(r)-\psi(r'))> \\ &= <\cos(\overline{\phi}(r)-\overline{\phi}(r'))><\cos(\psi(r)-\psi(r'))> \ . \qquad (21.32) \end{aligned}$$

A kifejezésekben, a fejezet elején bevezetett konvenciókat megtartottuk, azaz $\overline{\phi}$ a tökéletes vortexes elrendeződés szögeit, míg ψ az ehhez képest vett lokális és rendezetlen eltérést jelöli. A várhatóérték két $\cos(x)$ tagra bomlik abból kifolyólag, hogy $\sin(\psi(r)-\psi(r'))$ páratlan, és rendezetlen változású függvény (illetve páros függvényekkel vett szorzata) átlagban zérót eredményez. Továbbá, $\overline{\phi}$ és ψ független

[342]Lásd a (**??**) egyenlőséget kis x esetében

mennyiségek, így a Γ–ban szereplő átlagérték, két átlagérték szorzatára bomlik fel. Tehát:

$$\Gamma(r-r') = \Gamma_s(r-r')\cdot\Gamma_v(r-r') \ , \tag{21.33}$$

ahol

$$\Gamma_s(r-r') =< \cos(\psi(r)-\psi(r')) > \ , \tag{21.34}$$

és

$$\Gamma_v(r-r') =< \cos(\overline{\phi}(r)-\overline{\phi}(r')) > \ . \tag{21.35}$$

A két korrelációs függvény jelentése különböző: Γ_s a tökéletes vortexes elrendeződéshez mért fluktuációk spin-hullám jellegű korrelációja, míg Γ_v a tökéletes vortexes elrendeződés következtében fellépő korreláció. A két komponens elemzését külön–külön kell elvégeznünk.

21.5.1 A spin-hullámok által meghatározott korrelációs függvény

A Γ_s elemzése a hagyományos úton történik. Mivel, amint a hosszútávú térbeli korrelációk tanulmányozásánál láttuk:

$$< e^{\alpha_i x_i} >= e^{\frac{1}{2}\alpha_i\alpha_j <x_i x_j>}, \tag{21.36}$$

a mi esetünkben, a $\sin(x)$–es tag átlagértékének zéró mivolta miatt:

$$\Gamma_s(r-r') =< \cos(\psi(r)-\psi(r')) >=< e^{i(\psi(r)-\psi(r'))} >= e^{-\frac{1}{2}<(\psi(r)-\psi(r'))^2>}. \tag{21.37}$$

Most, a korrelációknál tárgyalt $\chi(r)$ függvényhez hasonlóan,

$$\begin{aligned}\chi(r-r') &= < (\psi(r)-\psi(r'))^2 >= \frac{k_BT}{J}\int_0^\Lambda \frac{d^2k}{(2\pi)^2}\frac{(1-\cos(\vec{k}\cdot(\vec{r}-\vec{r}')))}{k^2} \\ &= \frac{k_BT}{J}\int_0^\Lambda \frac{d^2k}{(2\pi)^2}\frac{1-e^{i\vec{k}\cdot(\vec{r}-\vec{r}')}}{k^2}.\end{aligned} \tag{21.38}$$

Ezen kifejezésben újból felhasználtuk a páratlan és rendezetlen függvények zéró átlagára vonatkozó információt. A következőkben felhasználjuk a $J_0(z)$ Bessel függvény integrál reprezentációját:

$$J_0(z) = \frac{1}{\pi}\int_0^\pi e^{iz\cos(\theta)}d\theta \ . \tag{21.39}$$

Mindezek után a 2π intervalumra vett θ integrál elvégzése következtében:

$$\chi(r) = \frac{k_BT}{2J}\int_0^\Lambda \frac{dk}{\pi k}(1-J_0(rk)) \tag{21.40}$$

Feltételezve hogy $r >> \Lambda^{-1}$, ahol, mint szokásosan, Λ a levágási hullámszám, igazolható, hogy

$$\chi(r) = \frac{k_BT}{2\pi J}\ln(r\Lambda) \ . \tag{21.41}$$

Erről meggyözödhetünk, ha a

$$\chi(r) = \frac{k_B T}{2J\pi}\mathcal{I} \tag{21.42}$$

kifejezést használjuk, ahol

$$\mathcal{I} = \int_0^{\Lambda r} \frac{dx}{x}(1 - J_0(x)) \ . \tag{21.43}$$

Most $\exp(-x/(2\Lambda r))$ integrandusban való hozzáadásával és kivonásával, a következő kifejezés adódik

$$\mathcal{I} = \int_0^{\Lambda r} \frac{dx}{x}(e^{-\frac{x}{2\Lambda r}} - J_0(x)) + \int_0^{\Lambda r} \frac{dx}{x}(1 - e^{-\frac{x}{2\Lambda r}}) \tag{21.44}$$

Mindezek után a $\Lambda r \to \infty$ határesetben a kifejezés formája a következőképpen alakul:

$$\mathcal{I} = \int_0^{\infty} \frac{dx}{x} \left(e^{-\frac{x}{2\Lambda r}} - J_0(x) \right) \Bigg|_{\Lambda r \to \infty} \tag{21.45}$$

Azonban tudvalevő, hogy $a > 0$ esetében,

$$\int_0^{\infty} \left(J_0(x) - e^{-ax} \right) \frac{dx}{x} = \ln(2a) \ , \tag{21.46}$$

mely összefüggés alkalmazásával

$$\mathcal{I} = \ln(\Lambda r) \ . \tag{21.47}$$

A χ értékét Γ_s kifejezésébe helyettesítve, a Berezinski nevéhez fűződő[343] korrelációs-függvény formáját kapjuk vissza:

$$\Gamma_s(r) \sim r^{-(4\pi\beta J)^{-1}} \tag{21.48}$$

Ezen kifejezésnek fontos fizikai vetületei vannak, melyek lényegét érdemes lesz elemezni. Mindenekelőtt megemlítendő, hogy a (**??**)–ban szereplő eredményt a szakirodalom két formában tartja nyílván. Egyrészt

$$< (\psi(r) - \psi(0))^2 > \sim \ln r \ , \tag{21.49}$$

másrészt

$$\Gamma_s(r) \sim r^{-\eta_s} \ , \tag{21.50}$$

ahol

$$\eta_s = \frac{1}{4\pi\beta J} \ . \tag{21.51}$$

[343] Lásd [2]

Az η_s jelölésben az s indexel hangsúlyoztuk, hogy nem a teljes korrelációfüggvény exponenséről, hanem csupán a spin-hullám jellegű járulékról van szó. A (**??**) egyelőségből látszik hogy a vortexes felépítéstől eltekíntve, hosszutávú térbeli rendezetségünk nem lesz, hiszen a lokális spin szögeltérések logaritmikusan nőnek a távolság függvényében. Továbbá a (**??**) összefüggésből látszik, hogy korrelációs– függvényünk hatványfüggvényszerűen csökken zéróra, egy olyan exponensel, ami nem univerzális, és T, illetve J függő.

Van itt viszont egy lényeges megjegyeznivaló, mely kiemelésre érdemes. Tudvalevő, hogy a spin–hullám approximáció csak alacsony hőmérsékleten érvényes. Magas hőmérsékleten a rendszernek paramágnesként kell viselkednie, mely fázisban a korrelációs függvények exponenciális formában csökkennek. Tehát rendszerünkben alacsony hőmérsékleten nincs hosszútávú térbeli rendezettség, és a korrelációs függvények hatványszerüen csökkennek. Ezzel ellentétben magas hőmérsékleten, habár továbbra sincs hosszútávú térbeli rendezettség, a korrelációs függvények exponenciálisan csengenek le. Mindez hangsúlyozza, hogy a két határeset között valamilyen kvalitatív változásnak kell történnie, azaz egy fázisátalakulásnak kell fellépnie, ami pontosan a KTB-átmenet.

21.5.2 A vorticitás által meghatározott korrelációs függvény

Az előbbiekhez hasonlóan Γ_v kifejezése a következő formára hozható:

$$\Gamma_v =< \cos(\overline{\phi}(r) - \overline{\phi}(r')) >=< e^{i(\overline{\phi}(r)-\overline{\phi}(r')} > \ . \tag{21.52}$$

A $\overline{\phi}(r)$ meghatározásához felhasználjuk a következő, korábban[344] levezetett kifejezéseket:

$$\overline{\phi}_(r) = \int G(r-r')(-2\pi\rho(r'))d^2r' \ , \tag{21.53}$$

ahol

$$G(r-r') = \frac{1}{2\pi}\ln\frac{|r-r'|}{a} \ , \quad \rho(r') = \sum_k q_k\delta(r'-r_k) \ . \tag{21.54}$$

Mindennek alapján

$$\overline{\phi}(r) = -\sum_k q_k \ln\frac{|r-r_k|}{a} \ , \tag{21.55}$$

tehát

$$\overline{\phi}(r) - \overline{\phi}(r') = -\left[\sum_{k1} q_{k1}\ln\frac{|r-r_{k1}|}{a} - \sum_{k2} q_{k2}\ln\frac{|r'-r_{k2}|}{a}\right] \ . \tag{21.56}$$

Mindezek után a (**??**) egyenlet alapján a vortexes elrendeződésnek megfelelő korreláció kifejezhető. Az eljárás viszont nem ugyanaz, mint a rendezetlenül változó

[344] Lásd 1 18.4 paragrafust

ψ tagok esetében, itt ugyanis egy ideális vortexes elrendeződés hatását elemezzük. Az ez esetben alkalmazható módszer azon alapszik, hogy a Γ_v függvény implicit rácsállandó függését használjuk fel, és Γ_v–t ugyanazon $a \to a + da$ Kadanoff–transzformációnak vetjük alá, mint amit az állapotösszegen alkalmaztunk. Az eljárás tőkéletesen hasonlit a Z–re alkalmazott eljáráshoz, a

$$\Gamma_v(r - r', a) = \mathrm{Tr} e^{i(\overline{\phi}(r) - \overline{\phi}(r'))} \cdot e^{-\beta H} \tag{21.57}$$

kiinduló–forma, és az (**??**) egyenlet felhasználásával. A számítás végeredményét adjuk meg ezúttal csupán[345]:

$$\Gamma_v(r - r', a) = \Gamma_v(r - r', a + da) e^{(dx/8)} \ln \left| \frac{r - r'}{a} \right| , \tag{21.58}$$

ahol a levezetett rekurziós képleteink szerint

$$dx = -y^2 \frac{da}{a} . \tag{21.59}$$

Ha most bevezetjük az

$$\alpha = -\frac{1}{8} y^2 \ln \frac{r}{a} \tag{21.60}$$

jelölést, és figyelembe vesszük, hogy a növekedésével x csökken, a következő összefüggést kapjuk:

$$\Gamma_v(x + dx) = \Gamma_v(x) e^{(\alpha da/a)} = \Gamma_v(x) \left[1 + \alpha \frac{da}{a} \right] . \tag{21.61}$$

Ebből

$$d\Gamma_v = \Gamma_v \alpha \frac{da}{a} . \tag{21.62}$$

Mivel a jobboldal da–val arányos, az ott szereplő Γ_v a függésétől eltekinthetünk (ugyanis ez $\mathcal{O}((da)^2)$ tagot adna). Mindkét oldalt integrálva, és x_i-val jelölve a kiinduló a_0 értéknek megfelelő x tagot:

$$\Gamma_v(x) - \Gamma_v(x_i) = \Gamma_v(x_i) \int \alpha \frac{da}{a} . \tag{21.63}$$

Ezen összefüggésből

$$\Gamma_v(x) = \Gamma_v(x_i)(1 + \int \alpha \frac{da}{a}) \sim \exp \int \alpha \frac{da}{a} . \tag{21.64}$$

Igy tehát a vortexes elrendeződés által létrehozott korrelációkra vonatkozólag kapott kifejezés:

$$\Gamma_v(r) \sim \exp \left[\frac{1}{8} \int_{x_i}^{x_0} dx \ln r \right] \approx \exp \left(\frac{1}{8} (x_0 - x_i) \ln r \right) \tag{21.65}$$

[345] A részleteket lásd például [1]-ben.

Itt felhasználtuk, hogy

$$\int \alpha \frac{da}{a} = \int (-\frac{1}{8} y^2 \ln \frac{r}{a})(-\frac{dx}{y^2}) \sim \frac{1}{8} \ln r \int dx \; . \tag{21.66}$$

Azonban $T = T_c$–re, mikor $x_0 = 0$,

$$\Gamma_v(r) \sim r^{-(x_i/8)} \; . \tag{21.67}$$

Mindezek után Γ_s és Γ_v ismeretében a teljes korrelációs függvény meghatározható. Először viszont x_i–re vonatkozólag kell információt gyűjteni.

E célból figyeljük meg, hogy pontosan a $T = T_c$ görbén mozogva (az η kritikus exponens a $t = |T - T_c| = 0$ esetében van értelmezve), a kritikus hőmérséklet $x = y$ összefüggésből adódik. Ebbe $y = 4\pi e^{-\beta\mu}$ értéket helyettesítve

$$x = 4\pi e^{-\beta\mu} = 2 - 2 + 4\pi e^{-\beta\mu} = 2 - 2(1 - 2\pi e^{-\beta\mu}) \tag{21.68}$$

egyenlőség kapható, melyben $\beta = \beta_c$. Most emlékeznünk kell arra a tényre hogy a blokk-transzformáció során, mivel mind nagyobb és nagyobb blokkok oldalhosszát tekintjük egységnyi rácsállandónak, a távolság skálázása $R' = R/s$ formában történik a Kadanoff–konstrukció nyomán. Ez viszont a korrelációs hossz blokk szinten vett értékének átskálázásához is vezet. Így, a blokkok nagyságát növelve, a korrelációs hossz értéke a $\xi' = \xi/s$ arányban csökken, azaz a Kadanoff–konstrukció során mind jobban és jobban távolítjuk a rendszerünket a kritikus ponttól. Az itteni gondolatmenet szempontjából mindez azt jelenti, hogy a kezdeti a–ra nézve a korrelációs hosszunk a legnagyobb (T_c közvetlen közelében), azaz ekkor a legjobban kötöttek a vortexek parosan egymáshoz. Mindez abban nyilvánul meg, hogy a kezdeti a értékre lesz μ a legnagyobb, azaz $x = x_i$–re $2\pi e^{-\beta\mu} << 1$ tekinthető. Ekkor $1 - 2\pi exp(-\beta\mu) = 1/(1 + 2\pi exp(-\beta\mu))$ a $\mu \to \infty$ határérték miatt. Ez esetben viszont a (**??**) összefüggés alapján, továbbá felhasználva azt a tényt, hogy a kritikus hőmérséklet egyenletéből $\pi J \beta_c = 1 + 2\pi \exp(-\beta_c\mu)$, a következő egyenlőség adódik:

$$x_i = 2 - 2\frac{1}{1 + 2\pi e^{-\beta_c\mu}} = -2\frac{1 - \pi J \beta_c}{\pi J \beta_c} \tag{21.69}$$

Most elegendő információval rendelkezünk ahhoz, hogy a teljes korrelációs függvényt elemezzük:

$$\Gamma(r)|_{t=0} = \Gamma_s \cdot \Gamma_v \sim r^{-\frac{1}{4}(\frac{1}{\pi\beta_c J} + \frac{x_i}{2})} = r^{-\frac{1}{4}} \tag{21.70}$$

továbbá, definíció szerint

$$\Gamma(r)|_{t=0} \sim r^{-\eta} \; . \tag{21.71}$$

Végeredményként, a keresett kritikus exponens értéke

$$\eta = \frac{1}{4} \tag{21.72}$$

Fizikai szempontból megállapítható, hogy az $\eta = \frac{1}{4}$ érték, a spin-hullám és vortex járulékok érzékeny egymásratevődése során alakul ki. Ha csupán a spin–hullám járulékot vesszük figyelembe, $\eta = \eta_s = \frac{1}{4}\frac{k_B T_c}{\pi J}$ adódik. Ha most az egyszerü, kvalitatív szabadenergia elemzést használjuk fel, akkor, amint láttuk $\frac{k_B T_c}{\pi J} \approx 1$, és az $\eta = \frac{1}{4}$ visszanyerhető. Ezen kvalitatív elemzés azonban teljesen eltekint a vortexek közötti kölcsönhatástól, mely esetben a vortexes felépítés nem ad direkt járulékot η–ban, hanem csak $k_B T_c = \pi J$ beállításához segít hozzá.

Ha viszont a renormálási csoport tárgyaláson keresztül a vortexek közötti kölcsönhatást is figyelembe vesszük, a kritikus hőmérséklet csökken, de ez esetben a vortexek plusz járuléka az η–ban pont akkora, hogy az $\eta = \frac{1}{4}$ értéket visszaállítja. Így alakul ki a pontos eredmény.

21.6 További kritikus exponensek értékei

A korrelációs függvény kritikus viselkedése, illetve az η kritikus exponens ismeretében a többi kritikus exponens is kiszámítható. Nem szabad azonban elfelednünk azt a tényt, hogy a KTB átmenet esetében nincs hosszútávú térbeli rendezettségünk, így a szigorúbb értelemben vett skálatörvények és kritikus exponensek érvényesek, melyeket, amint láttuk a skálatörvények bemutatásakor, nem $t = |T - T_c|$, hanem ξ viszonylatában definiálunk. Mindennek az az oka, hogy $t > 0$ esetben a korrelációs hossz nem hatványfüggvényszerüen, hanem exponenciálisan divergál. Továbbá mivel a rendezett fázisban, ξ minden $t < 0$ hőmérsékleten végtelen, kritikus exponensekről csak a $T > T_c$ tartományban beszélhetünk. Mint már említettük, ez szokásos a nem-HTR típusú rendezettségek esetében.

Emlékeztetőül, a szigorúbb értelemben vett skálatörvények esetében, adott dimenzióban csak egyetlen kritikus exponens független (ezért van nagyon fontos szerepe η ismeretének a KTB átmenetnél), és a skálatörvények formái:

$$\delta = \frac{d+2-\eta}{d-2+\eta}\ ; \quad \tilde{\gamma} = 2 - \eta\ ; \quad \tilde{\alpha} = -d\ . \tag{21.73}$$

Itt a felső hullámmal jelölt exponensek ν–re normált értékekkel rendelkeznek a hagyományos definícióhoz képest: $\chi \sim \xi^{\tilde{\gamma}}$, és $\tilde{\gamma} = \gamma/\nu$; továbbá $C \sim \xi^{\tilde{\alpha}}$, és $\tilde{\alpha} = \alpha/\nu$.

Most, η ismeretében a többi releváns kritikus exponens meghatározható. Esetünkben $d = 2$, tehát[346]:

$$\delta = \frac{(4 - \frac{1}{4})}{\frac{1}{4}} = 15\ ; \quad \tilde{\gamma} = 2 - \frac{1}{4} = \frac{7}{4}\ ; \quad \tilde{\alpha} = -2. \tag{21.74}$$

A szigorúbb értelemben vett skálatörvények fennállását a KTB fázisátalakulás keretei között direkt módon is igazolni lehet. Mindezt a szuszceptibilitás esetével

[346] A felsorolt kritikus exponensek külön-külön közvetlenül is meghatározhatóak, lásd például [1]

példázzuk. Amint már a Landau–elméletnél is láttuk,

$$\chi \sim \int d^2 r \Gamma(r), \tag{21.75}$$

ahol az integrálást $(0, \xi \to \infty)$ határok között végezzük. Figyelembe véve, hogy $\Gamma(r) \sim r^{-\eta}$, és $d^2 r \sim r dr$, látható, hogy:

$$\chi \sim \int_0^\xi d^2 r \Gamma(r) \sim \int_0^\xi r^{1-\eta} dr = \frac{1}{2-\eta} r^{2-\eta}|_0^\xi = \xi^{2-\eta} = \xi^{\tilde{\gamma}} , \tag{21.76}$$

azaz ténylegesen:

$$\chi \sim \xi^{2-\eta} ; \quad \tilde{\gamma} = 2 - \eta . \tag{21.77}$$

Megfigyelhető az is, hogy $t < 0$–ra, mivel $\xi = \infty$, következik:

$$\chi|_{t<0} = \infty . \tag{21.78}$$

Tehát nemcsak a korrelációs hossz, hanem a mágneses szuszceptibilitás is végig divergens a $T < T_c$ hőmérsékleti tartományban.

Fontos megemlíteni még azt a tényt is, hogy $d = 2$ spin–rendszerre az Ising esetben szintén van fázisátalakulás, mely viszont konvencionális hosszútávú térbeli rendezettséget eredményez. Mindennek ellenére, az η és δ kritikus exponensek (melyek szigorúbb értelemben is jelentéssel bírnak), mindkét esetben ugyanakkora értékűek:

$$\eta = \frac{1}{4} ; \quad \delta = 15 . \tag{21.79}$$

Továbbá $\tilde{\gamma} = \frac{7}{4}$ értéke is ugyanaz mindkét esetben, mely azonban a $d = 2$ Ising rendszerre $\nu = 1$, $\gamma = \frac{7}{4}$ formában épül fel, mig a KTB átmenetre ν és γ külön-külön divergál, csupán arányuk marad azonos: $\tilde{\gamma} = \frac{7}{4}$. Ami α esetét illeti, $d = 2$ Ising esetben értéke zéró, azaz $\tilde{\alpha} = 0$, míg a KTB átmenetre $\tilde{\alpha} = -2$. Ezen a szinten az azonosság csupán abban nyilvánul meg, hogy a fajhőben egyik esetben sincs divergencia.

A felsorolt eredmények azonban világosan mutatják, hogy a $d = 2$ dimenzióban vett két univerzalitási osztály, azaz az $n = 1$ Ising, és $n = 2$ KTB közötti különbségek sok szempontból kicsinek tekínthetők (a szigorú értelemben vett skálatörvények szintjén), habár a fizikai háttér teljesen különböző.

Néhány további megjegyzést teszünk a KTB átmenettel kapcsolatban. A rendezett fázis rigiditása (habár nincs hosszútávú térbeli rendezettség) ez esetben is megmarad, értéke a kritikus hőmérsékleten[347]:

$$R|_{limT \to T_c^-} = \frac{2}{\pi} k_B T_c \sim \frac{2}{\pi} J , \tag{21.80}$$

[347]Lásd például [3]

továbbá, R ugrásszerűen csökken zéróra a T_c kritikus hőmérsékleten. A levezetett R kvalitatíve egyezik a Landau–elmélet xy spin–rendszerre adott értékével, mely J nagyságú spinek közötti kölcsönhatás esetében az $R = J$ eredményt adja.

Megemlítendő továbbá, hogy a KTB fázisátalakulás a Wilson–képlet levezetésénél felhasznált Ginzburg-Landau alakú Hamilton–operátorból kiindulva is tárgyalható fenomenológikus alapon, ha annak formáját a

$$\beta H[\sigma] = \int d^2r \left[\frac{1}{2}|\nabla\sigma|^2 + \frac{a_4}{4}\left(|\sigma|^2 - \frac{|a_2|}{a_4}\right)^2\right] \tag{21.81}$$

módon választjuk meg. E képletben továbbá, a vorticitás favorizálása érdekében

$$\sigma(r) = \sqrt{\frac{|a_2|}{a_4}}\exp(i\theta(r)) \tag{21.82}$$

összefüggést feltételezzük.

21.7 Szakirodalmi jegyzék 21.

[1] Zs. Gulácsi, M. Gulácsi, Theory of phase transitions in two-dimensional systems, Advances in Physics, 47, 1-89, (1998).

[2] V. L. Berezinski, Zh. Eksp. Teor. Fiz. 61, 1144 (1972).

[3] N. Goldenfeld, Lectures on Phase Transitions and the Renormalization Group, Addison-Wesley, 1992, 350 oldal.

22 Javasolt szakirodalom.

1. L.D.Landau, E.M.Lifsic: Elméleti Fizika, sorozat, Tankönyvkiadó, Budapest, 1981
2. C. Domb, M. S. Green, és C. Domb, J. L. Lebovitz: Phase Transitions and Critical Phenomena, sorozat, Academic Press, New York, 1972
3. H. E. Stanley, Phase Transitions and Critical Phenomena, Clarendon Press, Oxford, 1971
4. N. Goldenfeld, Lectures on Phase Transitions and the Renormalization Group, Addison-Wesley, 1992.
5. Shang-keng Ma, Modern Theory of Critical Phenomena, Benjamin Inc., London, 1976.
6. Y. G. Sinai, Theory of Phase Transitions: Rigorous Results, Akadémiai Kiadó, Budapest, 1982.
7. D. J. Amit, Field Theory, Renormalisation Group and Critical Phenomena, World Scientific, Singapore, 1984.
8. F. Ravndal, Scaling and Renormalisation Group, Nordita, 1977.
9. P. W. Anderson, Basic Notions of Condensed Matter Physics, Benjamin, 1984.
10. N. W. Ashcroft, N. D. Mermin, Solid State Physics, Harcourt Brace College Publishers, USA, 1977.
11. J. S. Smart, Effective Field Theories of Magnetism, Benjamin, 1966.
12. D. C. Mattis, An Encyclopedia of Exactly Solved Models in One Dimension, World Scientific, 1993.
13. Shang-keng Ma, Introduction to the Renormalisation Group, Rev. Mod. Phys. 45, 589 (1973).
14. J. Cardy, Scaling and Renormalization in Statistical Physics, Cambridge Lecture Notes in Physics Vol. 5., Eds. P. Goddard, J. Yeomans, Cambridge University Press, 1996.

15. J. J. Binney, N. J. Dowrick, A. J. Fisher, M. E. J. Newman, The Theory of Critical Phenomena, an Introduction to the Renormalization Group, Oxford Science Publications, Clarendon Press, Oxford, 1995.

16. K. G. Wilson, J. Kogut, The Renormalization Group and the ϵ expansion, Physics Reports C12, 78 (1974).

17. K. G. Wilson, The renormalization group and critical phenomena, Rev. Mod. Phys. 55, 583 (1983).

18. J. M. Kosterlitz, D. J. Thouless: Ordering, metastability and phase transitions in two-dimensional systems, Jour. of Phys. C6, 1182 (1973).

19. J. M. Kosterlitz, The critical properties of two-dimensional xy model, Jour. of Phys. C7, 1046 (1974).

20. V. L. Berezinski, Zh. Eksp. Teor. Fiz. 61, 1144 (1972).

21. Zs. Gulácsi, M. Gulácsi, Theory of phase transitions in two-dimensional systems, Advances in Physics, 47, 1-89, (1998).

22. A. P. Prudnikov, Y. A. Brychkov, O. I. Marichev, Integrals and Series, Gordon and Breach Science Publishers, 1986.

23. I. M. Rijic, I. S. Gradstein, Table of Integrals, Series, and Products, Academic Press, New York, 1980.