

При нулевой температуре система находится в наинизшем энергетическом состоянии, и все спины ориентированы в одном и том же направлении и намагниченность, отлична от нуля. Материал является ферромагнитным. С ростом температуры тепловой шум вносит в расположение спинов элемент случайности. При не слишком высоких температурах в каждый момент времени еще будет существовать определенное число спинов, ориентированных в одном и том же направлении. По мере повышения температуры число их уменьшается. Когда T достигает критической температуры T_c и выше, их среднее число равно нулю. Материал становится парамагнитным.

Однако даже при T , чуть больших T_c , существуют большие области (много большие размера элементарной кристаллической ячейки), в которых значительная часть спинов ориентирована в определенном направлении.

Термодинамические свойства и критические показатели

а) Параметр порядка m как функция T , показатель β

При бесконечно малом внешнем поле H ниже T_c намагниченность есть убывающая функция T , которая становится равной нулю при $T = T_c$. При T , очень близких к T_c , наблюдается степенное поведение намагниченности $m \sim (T_c - T)^\beta$

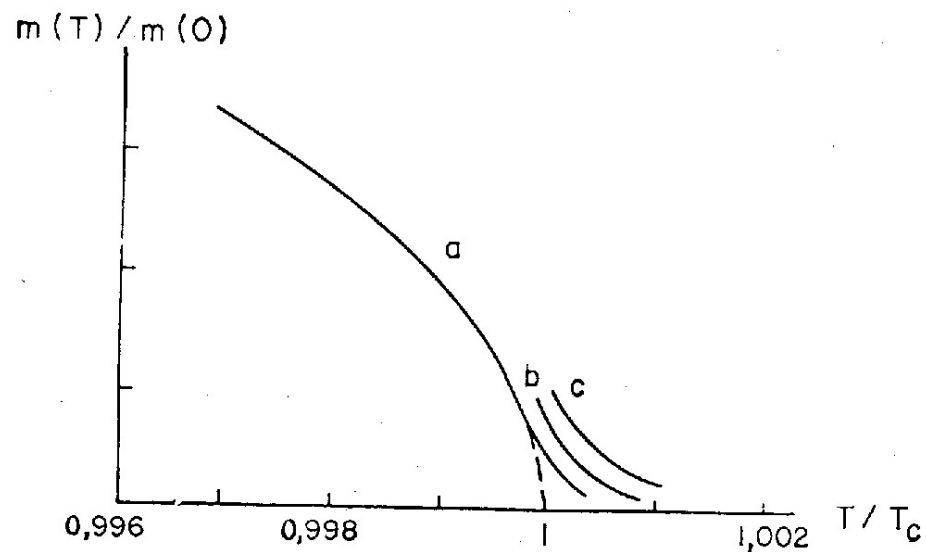
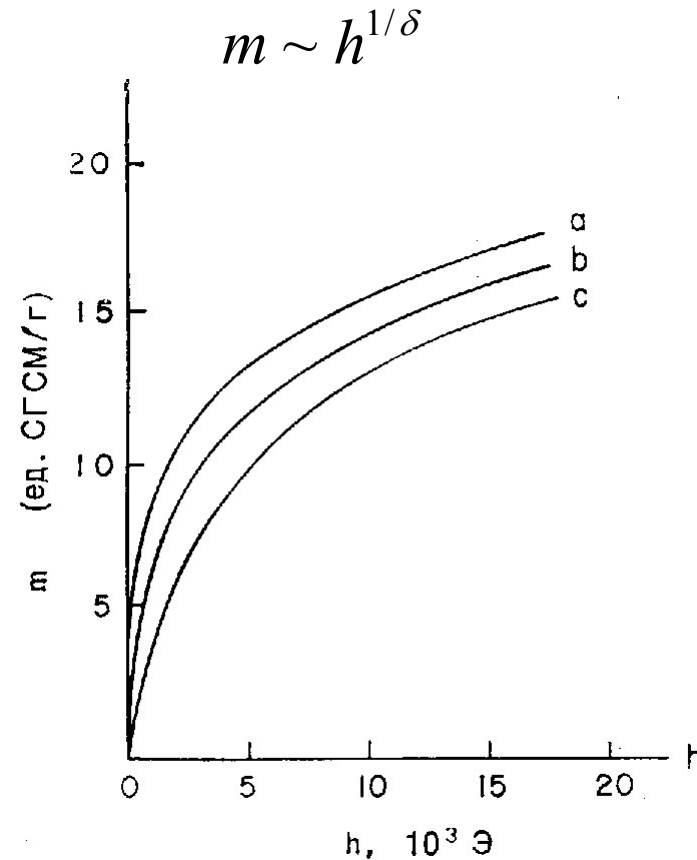


Рис 1.2. Намагниченность как функция температуры монокристалла YFeO_3 при T , близких к T_c . Приложено малое поле h . Кривые а, б, с соответствуют h , равным 38, 210 и 460 Э. Штриховая линия является экстраполяцией для $h = 0$ [71]

Параметр порядка m как функция h при $T=T_c$, показатель δ
При $T = T_c$ m не является гладкой функцией внешнего поля h . При
малых h



Намагниченность как функция приложенного поля при температуре
близкой к критической (630 К) а 627,56 К, в 629,43, с 631,30

Магнитная восприимчивость $\chi = (\partial m / \partial h)_T$ как функция T при $h=0$, показатель γ

$$\chi = \begin{cases} (T - T_c)^{-\gamma} & T > T_c \\ (T_c - T)^{-\gamma} & T_c > T \end{cases}$$

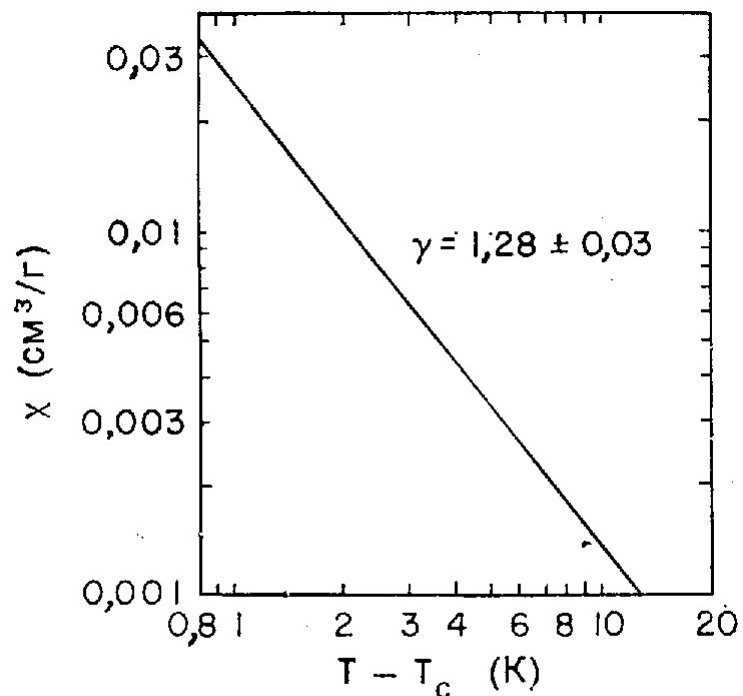


Рис. 1.4. Температурная зависимость магнитной восприимчивости никеля [26].

Теплоемкость и показатель α как функция T при $h=0$,

$$C = \begin{cases} (T - T_c)^{-\alpha} & T > T_c \\ (T_c - T)^{-\alpha} & T_c > T \end{cases}$$

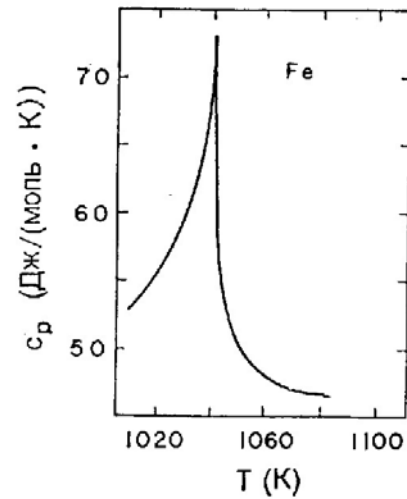


Рис. 1.5. Теплоемкость железа как функция температуры [115].

Теория среднего поля

$$H = -\frac{1}{2} \sum v_{ij} \mu_i \mu_j - \sum \mu_i h$$

$$h_i = \sum_j v_{ij} \mu_j + h$$

$$\langle h_i \rangle = \sum_j v_{ij} \langle \mu_j \rangle + h = R \sum_j v_{ij} + h = v(0) R + h$$

$$\left(v(q) = \sum_j v_{ij} \exp[iq(r_i - r_j)] \right)$$

$$R = \langle \mu \rangle = \frac{\text{Sp} \left[\mu_i e^{\beta \mu_i \langle h \rangle} \right]}{\text{Sp} \left[e^{\beta \mu_i \langle h \rangle} \right]} = \frac{e^{\beta \langle h \rangle} - e^{-\beta \langle h \rangle}}{e^{\beta \langle h \rangle} + e^{-\beta \langle h \rangle}} = \text{th} \left[\beta v(0) R + h \right]$$

$$\beta = 1/2, \quad \delta = 1/3, \quad \gamma = 1$$

$$R = \langle \mu \rangle = \frac{\text{Sp} \left[\mu_i e^{\beta \mu_i \langle h \rangle} \right]}{\text{Sp} \left[e^{\beta \mu_i \langle h \rangle} \right]} = \frac{e^{\beta \langle h \rangle} - e^{-\beta \langle h \rangle}}{e^{\beta \langle h \rangle} + e^{-\beta \langle h \rangle}} = \text{th} \left[\beta v(0) R + h \right]$$

$$1 - R = \text{th} \left[\beta v(0) R \right] = \beta v(0) R - \frac{(\beta v(0))^3}{3} R^3$$

$$R \sim \sqrt{\frac{3(\beta v(0) - 1)}{(\beta v(0))^3}} \sim \sqrt{v(0) - T}$$

$$m \sim (T_c - T)^\beta$$

$$\beta = 1/2$$

$$R = \text{th}[\beta v(0)R + h] = \beta v(0)R + h - \frac{(\beta v(0)R + h)^3}{3}$$

$$T = T_c = v(0) \quad (\beta v(0) - 1) = 0$$

$$\cancel{R(1 - \beta v(0))} = h - \frac{(\beta v(0)R + h)^3}{3}$$

$$h - \frac{(\beta v(0)R + h)^3}{3} = 0$$

$$R \sim h^{1/3} + h \sim h^{1/3} \quad m \sim h^{1/\delta}$$

$$\delta = 1/3$$

Гамильтониан Гинзбурга-Ландау и гауссово приближение

$$H[\sigma]/T = \int d^d x \left[a_0 + a_2 \sigma^2(x) + a_4 \sigma^4(x) + c (\nabla \sigma(x))^2 - h \sigma(x) \right]$$

$$P = Z^{-1} e^{-H[\sigma_{\min}]/T + (\sigma - \sigma_{\min})/\lambda^2}$$

Начнем с поиска σ_{\min} . Очевидно, что гамильтониан минимален при $\nabla \sigma = 0$

$$2\sigma_{\min} \left(a_2 + 2a_4 \sigma_{\min}^2 \right) - h = 0$$

$$\sigma_{\min} = \begin{cases} h/2a_2 & a_2 > 0 \\ \left(-a_2/2a_4 \right)^{1/2} + h/(-4a_2) & a_2 < 0 \end{cases}$$

$$a_2 = a(T - T_c)$$

$$\sigma_{\min} = (-a_2 / 2a_4)^{1/2} \quad T < T_c, \quad h = 0 \quad \beta = 1/2$$

$$\chi = \frac{\partial \sigma_{\min}}{\partial h} = \begin{cases} [2a(T - T_c)]^{-1} & T > T_c \\ [4a(T - T_c)]^{-1} & T < T_c \end{cases} \quad \gamma = 1$$

$$H[q]/T \approx H[\tilde{q}]/T + \frac{1}{2} \sum q_l^2 / \lambda_l^2$$

$$H[\sigma]/T = \int d^d x \left[a_0 + a_2 \sigma^2(x) + a_4 \sigma^4(x) + c (\nabla \sigma(x))^2 - h \sigma(x) \right]$$

$$H[\sigma]/T = \sum \sigma_k \sigma_{-k} (a_2 + ck^2) + \sum a_4 \sigma_k \sigma_{k''} \sigma_{k'} \sigma_{-k-k'-k''}$$

$$\langle \sigma_k \sigma_{-k} \rangle = \frac{1}{2(a_2 + ck^2)}$$

$$\lim_{T \rightarrow T_c} \langle \sigma_k \sigma_{-k} \rangle = \frac{1}{k^2} \quad \lim_{k \rightarrow 0} \langle \sigma_k \sigma_{-k} \rangle = \frac{1}{2(a_2)} \sim \frac{1}{T - T_c} \sim \chi$$

Блочный гамильтониан и преобразование Каданова

Вероятность конкретной конфигурации спинов

$$P = Z^{-1} e^{-H[\sigma]/T}$$

$$Z = \int e^{-H[\sigma]/T} \prod_i \sigma_i$$

$$H = -\frac{1}{2} \sum J_{ij} (\sigma_i - \sigma_j)^2 - \sum \sigma_i h$$

Пусть $P(q_1, q_2)$ есть плотность распределения случайных величин q_1, q_2 ; q – случайная величина, равная их среднему значению

$$q = \frac{1}{2}(q_1 + q_2)$$

Плотность распределения q

$$P'(q) = \int dq_1 dq_2 \delta\left(q - \frac{1}{2}(q_1 + q_2)\right) P(q_1, q_2) = \left\langle \delta\left(q - \frac{1}{2}(q_1 + q_2)\right) \right\rangle_{P'}$$

До тех пор пока мы рассматриваем средние величин, зависящих только от q , функция распределения $P'(q)$ полностью совпадает с $P(q_1, q_2)$; так как интегрирование по q снимается дельта функцией

$$\langle q^2 \rangle = \int P'(q) dq = \left\langle (q_1 + q_2)^2 / 4 \right\rangle$$

Разобьем множество узлов на блоки и введем блочные спины

$$\sigma_x = \frac{1}{b^d} \sum \sigma_i$$

$$P'(\sigma) = \left\langle e^{-H[\sigma_i]/T} \prod_{i,x} \delta \left(\sigma_x - b^{-d} \sum_i \sigma_{ix} \right) \right\rangle_P \equiv e^{-H_b[\sigma]/T}$$

$$H_{bloc} = b^d \sum \left[a_2 \sigma_x^2 + a_4 \sigma_x^4 + \frac{1}{2} \sum_y c (\sigma_x - \sigma_{x+y})^2 \right]$$

$$\vec{\mu} = (a_2, a_4, c)$$

$$H_{bloc} = K \cdot H \quad \vec{\mu}' = R \vec{\mu}$$

Неподвижная точка

$$\vec{\mu}^* = R\vec{\mu}^*$$

$$\vec{\mu} = \vec{\mu}^* + \delta\vec{\mu}$$

$$\delta\vec{\mu}' = R^{lin} \delta\vec{\mu}$$

$$R^{lin} = \left. \frac{\partial \vec{\mu}'}{\partial \vec{\mu}} \right|_{\vec{\mu}=\vec{\mu}^*}$$

Основная гипотеза

$$\lim_{s \rightarrow \infty} R_s \vec{\mu}(T_c, h = 0) = \vec{\mu}^*$$

$$R_s \vec{\mu}(T, h=0) = \vec{\mu}^* + R_s^{lin} \delta\vec{\mu} = \vec{\mu}^* + t_1(T) s^y \vec{e}_1$$

$$\delta\vec{\mu} = \vec{\mu}(T) - \vec{\mu}^* = \sum t_i(T) \vec{e}_i \leftarrow$$

Собственные вектора R

$$t_1(T) = A(T - T_c) + B(T - T_c)^2 + \dots$$

$$R_s \vec{\mu}(T, h=0) \approx \vec{\mu}^* + A(T - T_c) s^y \vec{e}_1 \approx \vec{\mu}^* \pm (s / \xi)^{1/\nu} \vec{e}_1$$

$$1/\nu = y, \quad \xi = |A(T - T_c)|$$

Костелайн Фортуин 1969 г. Показали, что теория задача протекания по связям совпадает с термодинамикой модели Поттса при s стремящейся к 1.

$$H_{Potts} = -s \sum J(\delta_{n_i n_j} - 1) - sh \sum (\delta_{n_i} - 1) \quad n_i = 1, \dots, s$$

Взаимодействие между соседними узлами равно нулю, если они находятся в одинаковом состоянии.

$$Z = \sum e^{-H_{Potts}/T} = \sum e^{sh \sum (\delta_{n_i} - 1)/T} \prod e^{sJ(\delta_{n_i n_j} - 1)/T}$$

$$e^{sJ(\delta_{n_i n_j} - 1)/T} = \begin{cases} e^{-sJ/T} & n_i \neq n_j \\ 1 & n_i = n_j \end{cases} = e^{-sJ/T} + (1 - e^{-sJ/T}) \delta_{n_i n_j}$$

Введем обозначения $q = e^{-Js/T} \quad p = 1 - q \quad 0 < p < 1$

$$Z = \sum \exp(-H/T) = \sum_{n_i} \prod_{\langle i, j \rangle} (q + p \delta_{n_i n_j}) e^{sh \sum (\delta_{n_i} - 1)/T}$$

Каждое слагаемое можно представить в виде диаграммы, где наличие связи между узлами соответствует множитель $p\delta_{n_i n_j}$, а отсутствию множитель q .

Каждый отдельный не связанный с остальными узлами узел войдет со множителем $q^z \left(1 + (s-1)e^{-sh/T}\right)$, где z — координационное число.

В связанных между собой узлах принимает одно и тоже значение из-за дельта функции и кластер дает множитель

$$\left(1 + (s-1)e^{-sh_n/T}\right)$$

$$Z = \sum \exp(-H/T) = \sum_{n_i} \prod_{\langle i,j \rangle} \left(q + p\delta_{n_i n_j}\right) e^{sh \sum (\delta_{1n_i} - 1)/T} =$$

$$= \sum_{\text{конфигурациям}} p^R q^{L-R} \prod (\kappa(nh))^{N_n}$$

R — число связей $(L - R)$ — число разорванных связей

$$\kappa = \left(1 + (s-1)e^{-sh/T}\right)$$

Вычислим функцию, связанную со свободной энергией

$$K(x) = \lim_{L \rightarrow \infty} \lim_{s \rightarrow 1} \frac{\ln Z}{L(s-1)} = \sum \gamma_n e^{-N_n h/T}$$

Действительно, разлагая по $(s-1)$, получим

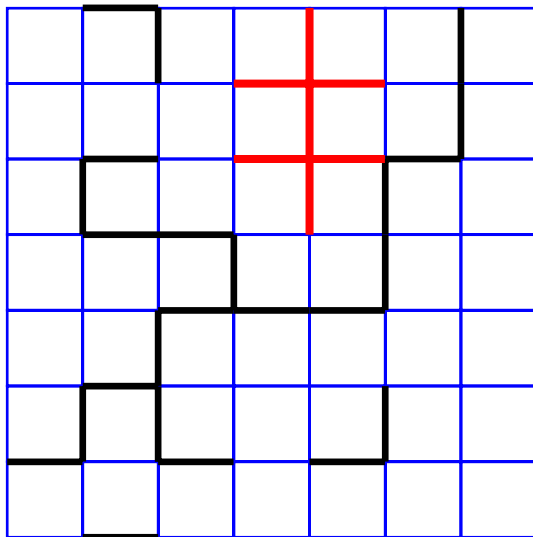
$$\frac{\ln(\kappa(nh))^{N_n}}{L(s-1)} \sim \frac{\ln(1 + (s-1)e^{-nh}e^{\bar{T}nh/T})^{N_n}}{L(s-1)} \sim \frac{N_n(s-1)e^{-nh/T}}{L(s-1)} \sim \frac{N_n}{L} e^{-nh/T}$$

$$\gamma_n \sim \frac{N_n}{L} \quad \text{Число кластеров на один узел}$$

$e^{-nh/T}$ Вероятность связи с дополнительным узлом

$$P(p) = p - \sum n\gamma_n = p + K' \Big|_{h=0}$$

Задача связей.
Координационное число
 $z=6$



$$z\rho_c \sim 1$$

Задача узлов.
Координационное число
 $z=4$

