sasvari.web.elte.hu/fazis/

$$\left.\begin{aligned} f(1) + f(-1) &= 1 \\ f(1) - f(-1) &= \langle S \rangle = m \end{aligned}\right\} \quad \begin{aligned} \oplus &\rightsquigarrow f(1) = \frac{1+m}{2} \\ \ominus &\rightsquigarrow f(-1) = \frac{1-m}{2} \end{aligned}$$

$$\Longrightarrow f(s) = \frac{1+ms}{2}$$

$$Q(\sigma) = \prod_i \left(\frac{1+m_i s_i}{2} \right)$$

spinek függetlensége miatt a várható értéket írjuk ide be.

$$\sum_{\sigma} Q(\sigma) \mathcal{H}(\sigma) = -\frac{1}{2} \sum_{ij} J_{ij} m_i m_j - \sum_i h_i m_i = \langle \mathcal{H} \rangle_Q$$

$$S_Q = -k \sum_i \left(\frac{1+m_i}{2} \ln \frac{1+m_i}{2} + \frac{1-m_i}{2} \ln \frac{1-m_i}{2} \right)$$

$$\left.\begin{aligned} &\frac{\partial}{\partial m_i} \left(\langle \mathcal{H} \rangle_Q - T S_Q \right) = 0 \\ &\frac{\partial^2}{\partial m_i \partial m_j} \left(\langle \mathcal{H} \rangle_Q - T S_Q \right) \text{ pozitív def.} \end{aligned}\right\}$$

$\boxed{2019.\ 10.\ 02.}$

$$\frac{\partial}{\partial m_i} \left(\langle \mathcal{H} \rangle_Q - T S_Q \right) = -\sum_j J_{ij} m_j - h_i + \underbrace{k_B T \left(\frac{1}{2} \ln \frac{1+m_i}{2} - \frac{1}{2} \ln \frac{1-m_i}{2} \right)}_{\frac{k_B T}{2} \ln \frac{1+m_i}{1-m_i} = k_B T \,\mathrm{Ath}(m_i)}$$

$$\Big/ \ \frac{1}{2} \ln \frac{1+x}{1-x} = \mathrm{Ath}(x) \ \Big/$$

$$\left.\begin{aligned} h_i &= k_B T \,\mathrm{Ath}(m_i) - \sum_j J_{ij} m_j \\ m_i &= \mathrm{th}\Big(\beta \big(h_i + \sum_j J_{ij} m_j \big) \Big) \qquad \beta = \frac{1}{k_B T} \end{aligned}\right\} \text{ állapotegyenlet}$$

- 1 Ising spin: $m = \dfrac{e^{\beta H} - e^{-\beta H}}{e^{\beta H} + e^{-\beta H}} = th(\beta H)$

$\mathcal{H} = -SH$

így az m_i-re kapott formulában a második tag (~~kiegészítő~~) a kölcsönhatásból származó mágnesezettség

$$\chi_{ij}^{-1} = \frac{\partial h_i}{\partial m_j} = \frac{k_B T}{1-m_i^2}\delta_{ij} - J_{ij}$$ reciprok - szuszceptibilitás

$$\frac{\partial^2}{\partial m_i \partial m_j}\left(E_Q - TS_Q\right) = -J_{ij} + \frac{k_B T}{1-m_i^2}\delta_{ij} = \chi_{ij}^{-1}$$

⇝ reciprok-szuszceptibilitásnak kell pozitív definitnek lenni, hogy valóban minimumot kapjunk.

- triviális megoldás: $h_i, m_i \stackrel{!}{=} 0$ (paramágnes)
  ⇝ csak a stabilitást kell vizsgálni

  $k_B T \delta_{ij} - J_{ij}$ pozitív definit

⇝ transzláció szimmetria. $J_{ij} = J(\underline{R}_i - \underline{R}_j)$

⇓

diagonalizálás Ft-trafóval.

$$J(q) = \sum_i e^{-iq(R_i - R_j)} J_{ij}$$

$$J_{ij} = \frac{1}{N}\sum_q e^{iq(R_i - R_j)} J(q)$$

q az első Brillouin-zónában lévő hullámszámok

$$\chi^{-1}(q) = k_B T - J(q) > 0$$

elegendően magas hőmérsékleten ez $>0 \ \forall q$.

⇝ magas hőmérs. a paramágnesek stabilak.

~> hol a határ?

$$\max_q J(q) = J(q_c)$$

~> stabilitás határa: $\boxed{k T_c = J(q_c)}$

↓

mi történik alatta?

Ha $T < T_c$ $\quad m_i \sim e^{i q_c R_i}$

- ferromágnes $h_i = 0$ $\quad m_i = m \neq 0$ homogén mágnesezettség

$$q_c = 0$$

~> feltétel $\max_q J(q) = J(0)$

~> áll. egyenlet: $m = th\Big(\beta \underbrace{\sum_j J_{ij}}_{J(0) = k_B T_c} m\Big)$

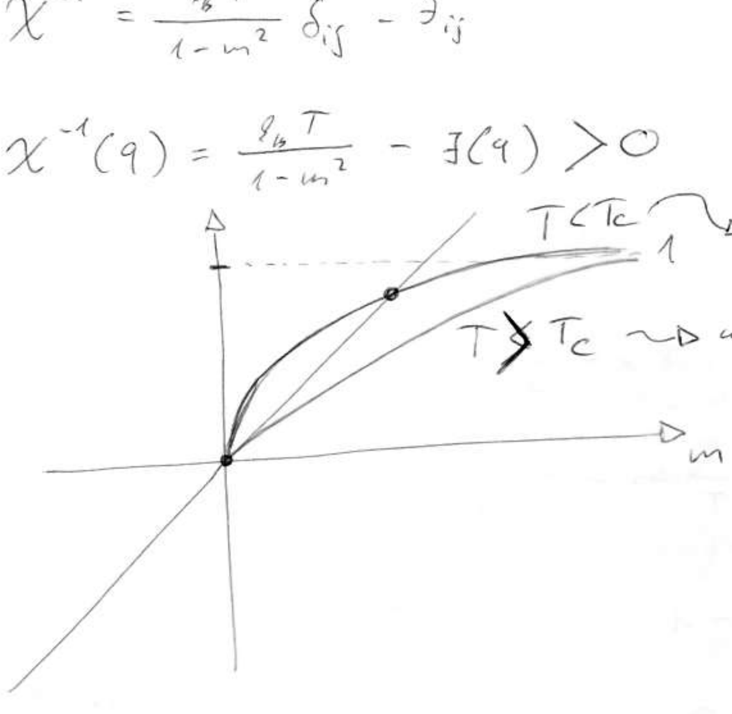
$$\boxed{m = th\left(\frac{T_c}{T} m\right)}$$

paramágneses krit. hőmérs!

~> stabilitás:

$$\chi^{-1} = \frac{k_B T}{1-m^2}\delta_{ij} - J_{ij}$$

$$\chi^{-1}(q) = \frac{k_B T}{1-m^2} - J(q) > 0$$



$T<T_c$ → van nem triviális m.o. T_c alatt.

$T>T_c$ → $m=0$ az egyetlen megoldás

↓

itt a paramágn. m.o. nem stabil.

$$\frac{k_B T}{1-m^2} - J(q) \geq \underbrace{\frac{k_B T}{1-m^2} - J(0)}_{\text{elég ezt vizsgálni, nem kell } \forall q\text{-ra}} > 0$$

$$\frac{k_B T}{1-m^2} > \overset{J(0)}{\overset{\parallel}{k_B T_c}}$$

$$\frac{m}{1-m^2} > \frac{T_c}{T}\cdot m$$

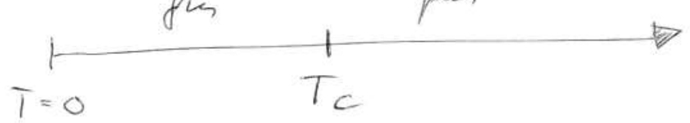
$$\frac{th\left(\frac{T_c}{T}m\right)}{1-th^2\left(\frac{T_c}{T}m\right)} > \frac{T_c}{T}\cdot m \qquad x := \frac{T_c}{T}m$$

$$\frac{sh(x)\,ch(x)}{ch(x)-sh(x)}$$

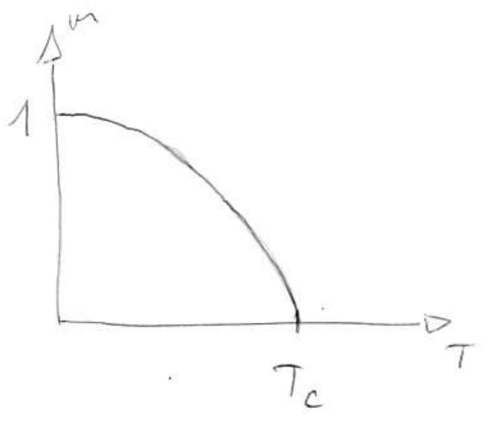
$$sh(x)\,ch(x) > sh(x) > x$$

$\square$

T_c alatt a ferromágneses állapot stabil.



$$k_B T_c = J(0) = \sum_i J_{ij}$$



$$\underset{x\to 0}{th(x)} \approx x - \frac{x^3}{3} + \dots$$

$$m = \frac{T_c}{T}m - \frac{1}{3}\left(\frac{T_c}{T}m\right)^3 + \dots$$

$$\frac{T_c}{T} - 1 = \frac{1}{3}\left(\frac{T_c}{T}\right)^3 m^2$$

$m^2 \sim T_c - T \leadsto$ gyökös függés T_c körül.

$$\mathrm{th}(x) \approx 1 - e^{-2x} + \dots$$
$x \gg 1$

$$m = 1 - e^{-2\frac{T_c}{T}} + \dots$$

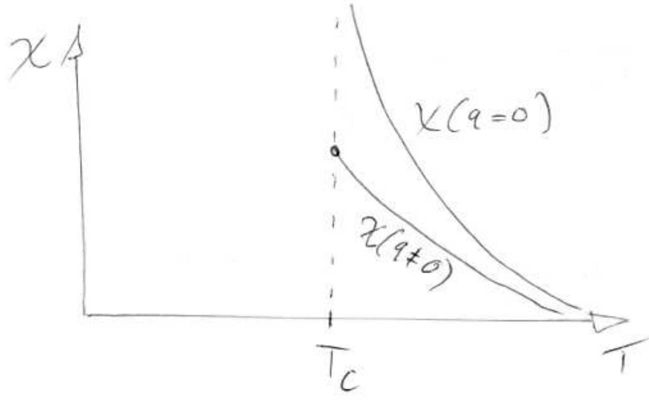
⇝ exponenciálisan tűnik el az egytől való eltérés.

$$\chi^{-1}(q) = k_B T - J(q)$$

$$\chi(0) = \sum_i \chi_{ij} \qquad \underline{q=0}$$

↓
makroszkópikus szuszceptibilitás
(homogén tér esetén)

$$\chi = \frac{1}{k_B T - J(0)} = \frac{1}{k(T - T_c)}$$ Curie - Weiss - törvény



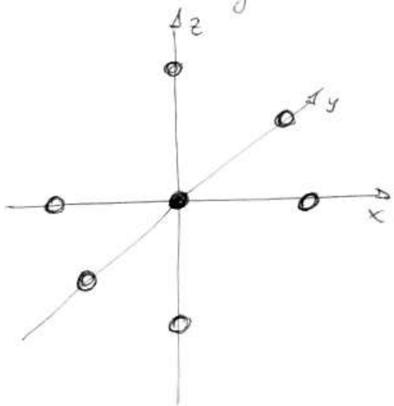
korrelációs fv.
$$C(q) = k_B T \chi(q)$$ fluktuáció - disszipáció tétel alapján...

$$C(q) = \frac{k_B T}{k_B T - J(q)}$$ ⇝ ez is divergál
⇝ n° szórással mérhető
⇝ anomális mágneses szórás

• SC rács, nn kölcsönhatás

↓

legközelebbi szomszéd



$$J(q) = J e^{-iq_x a} + J e^{iq_x a} + \ldots =$$

$$= 2J\left(\cos(q_x a) + \cos(q_y a) + \cos(q_z a)\right)$$

$J > 0$ ferromágneses csatolás

valóban $q_c = 0$ a maximum

$$J(q) \approx 6J - \frac{1}{2} 2J a^2 (q_x^2 + q_y^2 + q_z^2) = \underbrace{6J}_{k_B T_c} - Ja^2 \underbrace{(q_x^2 + q_y^2 + q_z^2)}_{q^2}$$

$qa \ll 1$

$/\cos(x) = 1 - \frac{x^2}{2} + \ldots /$

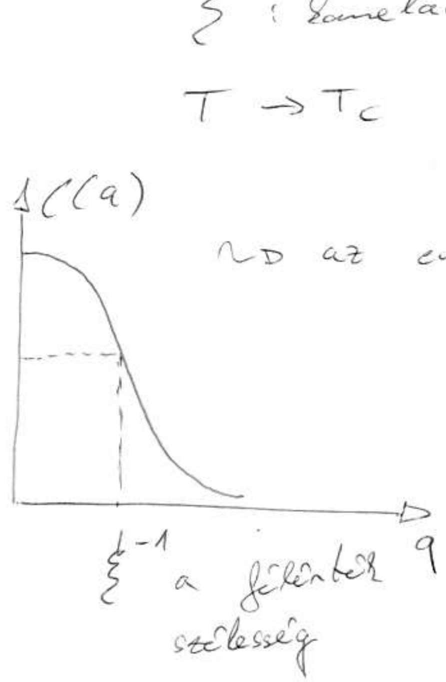
⤳ kvadratikus maximum

$$C(q) = \frac{k_B T}{k_B T - k_B T_c + Ja^2 q^2} = \frac{k_B T}{J a^2} \frac{1}{\xi^{-2} + q^2}$$

ahol $\xi^{-2} = \frac{k_B (T - T_c)}{J a^2}$ karakterisztikus hosszúság

ξ : korrelációs hossz.

$T \to T_c$ $\xi \sim (T - T_c)^{-1/2}$ (divergál)



⤳ az erős fluktuációk $q = 0$ körül vannak.

↓

valós térben erős korrelációk

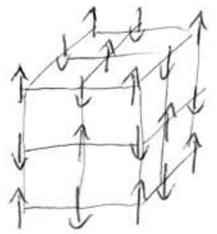
$r < \xi$

$d=3$ $\quad C(r) \simeq \frac{k_B T}{J a^2} \frac{1}{4\pi} \frac{e^{-r/\xi}}{r}$

→ a lecsengést az exp. szabályozza

→ $\xi \to \infty$ az exp. $= 1$ lesz → $\frac{1}{r}$-es lecsengés

• antiferromágnes, sc rács



$$e^{iQR_i} = e^{i(n_x+n_y+n_z)\pi}$$

$$R_i = a(n_x, n_y, n_z)$$

$$Q = \frac{\pi}{a}(1,1,1)$$

$$\left.\begin{array}{l} q_c = Q \\ m_i = n e^{iQR_i} \end{array}\right\} \text{ezt várjuk.} \longrightarrow \quad J(Q) = k_B T_c$$

$$J(Q) \geq J(q) \quad \forall q$$

$$n e^{iQR_i} = th\left[\beta \sum_j J_{ij} e^{iQR_j} n\right] \qquad / th(\pm x) = \pm th(x) /$$

$$n = \underbrace{e^{-iQR_i}}_{\pm 1} th(\dots)$$

$$n = th\left(\beta \underbrace{\sum_j J_{ij} e^{-iQ(R_i-R_j)}}_{J(Q) = k_B T_c} \cdot n\right) = th\left(\frac{T_c}{T} n\right)$$

→ ugyanaz mint a ferromágn. esetben.

n: alrács mágnesezettség

pl.: A alrács ∀ spin ↑ → ferromágn. vsz. viselkedik

$$\chi^{-1}_{ij} = \frac{k_B T}{1 - m_i^2}\delta_{ij} - J_{ij} = \frac{k_B T}{1 - m^2}\delta_{ij} - J_{ij}$$

$$\chi^{-1}(q) = \frac{k_B T}{1 - m^2} - J(q)$$

$$\chi^{-1}(Q) = \frac{k_B T}{1 - m^2} - J(Q)$$

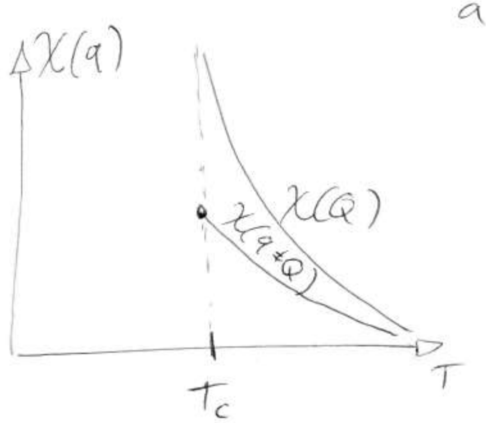
$\boxed{T > T_c}$

$$\chi^{-1}(q) = k_B T - J(q) = k_B T - \underbrace{J(Q)}_{k_B T_c} + J(Q) - J(q) =$$

$$= k(T - T_c) + J(Q) - J(q)$$

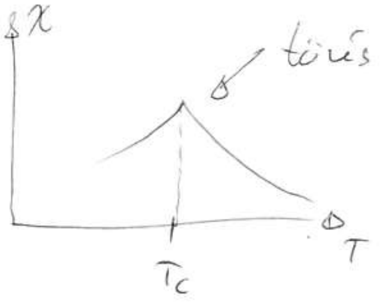
$$\chi(q) = \frac{C(q)}{k_B T} = \frac{1}{k_B(T - T_c) + J(Q) - J(q)}$$

$$\chi(Q) = \frac{1}{k_B(T - T_c)}$$ a BZ. sarkában kapjuk vissza a C-W-törvényt.



makroszkopikus szuszceptibilitás $\chi = \chi(q = 0)$

törés van benne (tengelyű antiferromágn.



• af, sc, un

$$J(q) = 2J\left(\cos(q_x a) + \cos(q_y a) + \cos(q_z a)\right)$$

Ha $J < 0$ <u>max</u> : $q_x a = \pi \rightarrow q_c = \frac{\pi}{a}(1,1,1)$

$$\left| \cos(x) \approx -1 + \frac{(x-\pi)^2}{2} \right/$$

$$J(q) = -2|J|\left(-3 + \frac{(q_x a - \pi)^2}{2} + \frac{(q_y a - \pi)^2}{2} + \frac{(q_z a - \pi)^2}{2}\right) =$$

$$J(q) = 6|J| - a^2|J|\left(\sum_{i=1}^{3}\left(q_i - \frac{\pi}{a}\right)^2\right)$$

$$\rightsquigarrow \hat{q} = q - Q$$

$$J(q) = 6|J| - a^2|J|\,\hat{q}^2$$

$$C(q) = k_B T\,\chi(q) = \frac{k_B T}{k_B T - 6|J| + a^2|J|\,\hat{q}^2}$$

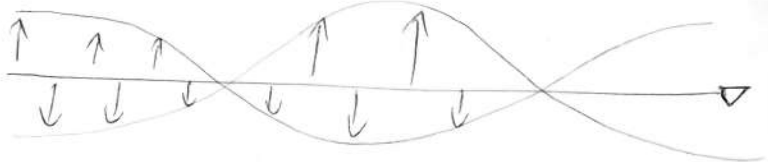
$\rightsquigarrow$ ugyanaz mint fm.-nél

$\rightsquigarrow$ 0 körüli kis q helyett a BZ. sarka (Q) körüli kis $\hat{q}$ van.

$$C(q) = \frac{k_B T}{|J| a^2}\,\frac{1}{\xi^{-2} + \hat{q}^2}\,, \quad \xi^{-2} = \frac{k_B (T - T_c)}{|J|\,a^2}$$

$$m_i = e^{i(Q+\hat{q})R_i}A = \underbrace{A e^{iQR_i}}_{\text{Antifm. rend váltakozó előjellel.}} \cdot \underbrace{e^{i\hat{q}R_i}}_{\cos(\hat{q}R_i) \,\rightsquigarrow\, \text{lassan változó cos fv.}}$$

$\Downarrow$ alrács mágnesezettség lassú modulációja.



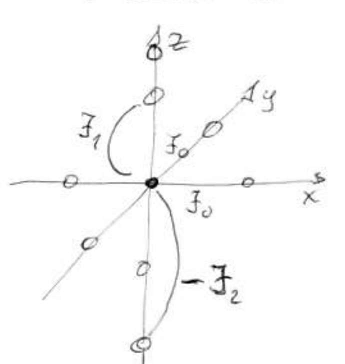
⇝ az alrács mágn. hosszú hullámú fluktuációi hasonlóan viselkednek mint a fm. esetében.

⇝ af. rend is stabil lesz fm.-hez hasonlóan.

• ANNNI - model

(axial - next - nearest - neighbour - Ising - model)

⇝ másodszomszéd kh. is van.



xy -síkban $J_0 > 0$ fm. csatolás

z - tengelyen $J_1 > 0$ — " —

— " — $-J_2 < 0$ af csatolás

↓

J_1, J_2-től függ a mágneses rend

ferro, antiferro

versengnek egymással

kölcsönhatás:

$$J(q) = 2J_0\left(\cos(q_x a) + \cos(q_y a)\right) + \underbrace{2J_1\cos(q_z a) - 2J_2\cos(q_z 2a)}_{q_z = q_c}$$

max $J(q)$: $q_x = 0$ $q_y = 0$

$$2J_1\left(1 - \frac{(q_z a)^2}{2}\right) - 2J_2\left(1 - \frac{(2q_z a)^2}{2}\right) + \dots$$

⇝ versengés elrontja a ferromágn. áll. és új rendet hozhat létre.