Билеты по курсу «Введение в физику конденсированного состояния»

Автор заметок: Хоружий Кирилл

От: *6 декабря 2022 г.*

Содержание

1 Основные понятия и приближения

Модель желе

Рассмотрим модель желе: узлы решетки + электроны в целом электронейтральны. Характерные величины системы:

$$[e^2] = \frac{\text{г}\,\text{см}^3}{\text{с}^2}, \qquad [m] = \text{г}, \qquad [n] = \text{см}^{-3}, \qquad [\hbar] = \frac{\text{г}\,\text{см}^2}{\text{с}}.$$

Из них можем составить две характерные энергии

$$E_\text{C} = e^2 n^{1/3}, \qquad E_\text{F} = \frac{\hbar^2}{m} n^{2/3}.$$

Вспомним, что боровский радиус $a_0 = \hbar^2/me^2$. При $n \gg a_0^{-3}$: $E_\text{F} \gg E_\text{C}$ – получается Ферми-газ. При $n \ll a_0^{-3}$: $E_\text{F} \ll E_\text{C}$ – вигнеровский кристалл.

Метод функционала плотности

Рассмотрим гамильтониан

$$\hat{H} = \sum_j \frac{p_j^2}{2m} + \sum_j U(r_j) + e^2 \sum_{i\neq j} \frac{1}{|r_i - r_j|}.$$

Собственно потенциал $U(r)$ задаёт волновую функцию и концентарцию $n(r)$.

Thr 1.1 (Hohenberg-Kohn I)**.** *По концентрации $n(r)$ однозначно восстанавливается $U(r)$.*

Thr 1.2 (Hohenberg-Kohn II)**.** *Для заданной $n(r)$ существует такой $\tilde{U}(r)$, что система невзаимодейтсвующих частиц с гамильтонианом $\tilde{H} = \sum_j \frac{p_j^2}{2m} + \sum_j \tilde{U}(r_j)$ приходит к плотности $n(r)$.*

Остаётся вопрос как найти $\tilde{U}(r)$. Понятно, что

$$\tilde{U}(r) = U(r) + e^2 \int \frac{n(r')}{|r-r'|}\, d^3r' + V(r),$$

где в рамках local density approximation (LDA) утверждаем, что $V(r) = V(r)[n(r)]$ – зависит только от концентрации а той же точке.

2 Фазовые переходы

Теория Ландау

Рассмотрим теорию Ландау фазовых переходов II рода. Переход II рода характеризуется разрывом μ'' и изменением симметрии: более симметричная фаза обычно соответсвует более высоким температурам $T > T_\text{c}$, менее симметричная фаза соответственно при $T < T_\text{c}$, гле T_c – температура перехода.

Введем *параметр порядка* η так, чтобы в несимметричной фазе $\eta(T > T_\text{c}) \equiv 0$ и $\eta(T < T_\text{c}) \neq 0$. Вблизи от точки перехода η принимает малые значения, тогда можем разложить, например, свободную энергию. Считая $F(\eta) = F(-\eta)$[1] :

$$F = F_0 + \frac{a}{2}\eta^2 + \frac{b}{4}\eta^4 + \ldots$$

где $b > 0$.

В излагаемой теории предполагается, что $A(T)$ не имеет особенности в точке перехода, так что вблизи нее она разложима по целым степеням «расстояния» до этой точки

$$a(T) = \alpha(T - T_\text{c}).$$

Из условия минимальности $F(\eta)$, находим

$$\eta^2 = -\frac{a}{b} = \frac{\alpha}{b}(T_\text{c} - T), \qquad \Rightarrow \qquad \boxed{\eta = \pm\sqrt{\tfrac{\alpha}{b}(T_\text{c} - T)}}$$

при $T < T_\text{c}$ и $\eta \equiv 0$ при $T > T_\text{c}$.

Сразу можем найти, например, скачок теплоёмкости

$$S = -\frac{\partial F}{\partial T}, \qquad C = T\frac{\partial S}{\partial T}, \qquad \Rightarrow \qquad C = C_0 + \frac{\alpha^2}{b} T_\text{c}.$$

[1] Это почти всегда так, нам интересна намагниченность в качестве η, так что точно можем нечетные степени опустить.

Теория Ландау применима в области немного отстоящей от T_c, так как в T_c доминирует вклад от флуктуаций, но при этом $|T_c - T| \ll T_c$ для малости η.

Теория Гинзбурга-Ландау

Вообще η можем флуктуировать по объёму, тогда корректнее рассматривать $\eta(r)$, и $F[\eta(r)]$ – функционал[2] от параметра порядка:

$$F[\eta(r)] = \int d^D r \, \left(\frac{\alpha(T - T_c)}{2} \eta^2 + \frac{b}{4} \eta^4 + C(\nabla \eta_r)^2 \right),$$

где C отвечает за ограничение роста числа флуктуаций. Соответсвенно при $C \to \infty$ получалась бы теория Ландау: $\eta(r) = \text{const}$.

Соберем из доступных констант две длины:

$$r_c = \sqrt{\frac{C}{\alpha(\mathrm{T} - T_c)}}, \qquad r_0 = \left(\frac{bT_c}{\alpha^2 (T - T_c)^2} \right)^{1/D},$$

где r_c – корреляционный радиус. Таким образом можем игнорировать вклад от флуктуаций при $r_c \gg r_0$.

В размерности $D = 3$:

$$\frac{T - T_c}{T_c} \gg \mathrm{Gi} = \frac{b^2 T_c}{\alpha C^3},$$

где Gi – *число Гинзбурга*, собственно это и образует критерий Гинзбурга-Леванюка. При $D = 5$:

$$\frac{T - T_c}{T_c} \ll \frac{T_c C^5}{\alpha b^2},$$

таким образом $D = 5$ – верхняя критическая размерность, теория Ландау применима в T_c для $D > 4$.

Внешнее поле

Внешнее поле h даст добавку в F:

$$F = F_0 + \frac{\alpha}{2}(T - T_c) + \frac{b}{4}\eta^4 - \eta h V,$$

получается поле понижает симметрию более симметричной фазы, так что разница между обеими фазами исчезает – переход «размывается».

Конкретизируем рассмотрение к модели Изинга, тогда параметром порядка η будет удельная намагниченность M, внешнее поле B:

$$\frac{\partial F}{\partial M} = \alpha(T - T_c)M + bM^3 - B = 0.$$

Появляется дополнительная намагниченность к спонтанной $M = M_0 + \delta M$, в небольших полях $\delta M = \chi B$ и получаем закон Кюри-Вейса для восприимчивости

$$\frac{1}{\chi(T)} = \begin{cases} 2\alpha(T_c - T), & T < T_c, \\ \alpha(T - T_c), & T > T_c, \end{cases}$$

где учли, что при $T > T_c$ спонтанная намагниченность $M_0 = 0$.

[2] Подробнее про отсутствие других производных от η можно прочитать в ЛЛ5 §146.