8.334 İstatistiksel Mekanik II: Alanların İstatistiksel Fiziği
2008 Bahar

VII.D İki Boyutlu Katılar

Sıvılardan katılara geçiş, öteleme simetrisinin kırılmasını gerektirir. Burada, iki boyutlu katılardaki düzen tiplerini inceleyeceğiz. Bu tarz düzenin erimeyle bozulması, hemen sonra tartışılacak.

(a) Problemin, düşük sıcaklık incelenmesi, $T = 0$'daki mükemmel katı ile başlar. Atomların denge konumları bir ağ oluşturur, $\mathbf{r}_0(m,n) = m\mathbf{e_1} + n\mathbf{e_2}$, burada $\mathbf{e_1}$ ve $\mathbf{e_2}$ baz vektörleridir, ve $\{m,n\}$ tam sayılardır. Sonlu sıcaklıklarda, atomlar denge konumları dışına salınırlar, ve

$$\mathbf{r}(m,n) = \mathbf{r}_0(m,n) + \mathbf{u}(m,n) \tag{VII.81}$$

noktasına giderler. Düşük sıcaklık bozulmaları, yakın atomlar arasında fazla değişmez, ki bu kabalaştırılmış bir *bozulma alanı* $\mathbf{u}(\mathbf{x})$ tanımlamamıza olanak tanır, burada $\mathbf{x} \equiv (x_1, x_2)$, ağ genişliği a'yi açıkça yazılmayan bir mesafe alt sınırı olarak alan sürekli bir değişken olarak düşünülmüştür. $\mathbf{u}$ bozulması, XY modelindeki θ açısının benzeridir.

(b) Öteleme simetrisinden dolayı, enerji sadece *gerilme matrisine* bağlıdır

$$u_{ij}(\mathbf{x}) = \frac{1}{2}\left(\partial_i u_j + \partial_j u_i\right), \qquad \Longrightarrow \qquad u_{ij}(\mathbf{q}) = \frac{i}{2}(q_i u_j + q_j u_i) \tag{VII.82}$$

Esneklik enerjisi, temeldeki ağın simetrisine uymak zorundadır. Basitleştirmek için, esneklik enerjisi tamamen eşyönlü, yani dönmeler altında değişmeyen (bkz. Landau ve Lifshits, *Theory of Elasticity*) olan üçgensel ağa bakacağız. *Lamé katsayıları* Λ ve μ cinsinden,

$$\begin{aligned} \beta\mathcal{H} &= \frac{1}{2}\int d^2\mathbf{x}\left[2\mu u_{ij}u_{ij} + \lambda u_{ii}u_{jj}\right] \\ &= \frac{1}{2}\int \frac{d^2\mathbf{q}}{(2\pi)^2}\left[\mu q^2 u^2 + (\mu+\lambda)(\mathbf{q}\cdot\mathbf{u})^2\right] \end{aligned} \tag{VII.83}$$

Yukarıdaki ifadede, enerjinin dönme simetrisi, açıkça yazılmayan, (i,j) indeksleri üzerinden toplam yaparak sağlanmıştır. Fourier gösteriminde, enerji q^2, $|\mathbf{u}|^2$ ve $(\mathbf{q}\cdot\mathbf{u})^2$ niceliklerine bağlıdır, ki bunlar açıkça dönmelerden bağımsızdır. Başka ağlar için, daha fazla esneklik katsayısı vardır, çünkü enerji sadece ağ dönmelerinden bağımsız olmalıdır. Örnek olarak, kare ağın simetrisi, $q_x^2 u_x^2 + q_y^2 u_y^2$ ile orantılı bir terime olanak verir.

(c) Kırılan öteleme simetrisine karşılık gelen Goldstone modları *fononlar*dır, titreşimlerin normal modları. Denklem VII.83, iki tür normal moda izin verir:

(i) $\mathbf{q} \perp \mathbf{u}$ olan *enlemesine modlar*ın enerjisi

$$\beta\mathcal{H}_T = \frac{\mu}{2}\int \frac{d^2\mathbf{q}}{(2\pi)^2} q^2 u_T^2, \qquad \Longrightarrow \qquad \langle|u_T(\mathbf{q})|^2\rangle = \frac{1}{\mu q^2} \tag{VII.84}$$

(ii) $\mathbf{q} \parallel \mathbf{u}$ olan *boylamasına modlar*ın enerjisi

$$\beta\mathcal{H}_L = \frac{2\mu+\lambda}{2}\int \frac{d^2\mathbf{q}}{(2\pi)^2} q^2 u_L^2, \qquad \Longrightarrow \qquad \langle|u_L(\mathbf{q}|^2\rangle = \frac{1}{(2\mu+\lambda)q^2} \tag{VII.85}$$

Yukarıdaki sonuçları toplarsak, bağdaşıklık fonksiyonunun genel olarak

$$\langle u_i(\mathbf{q})u_j(\mathbf{q}')\rangle = \frac{(2\pi)^2\delta^2(\mathbf{q}+\mathbf{q}')}{\mu q^2}\left[\delta_{ij} - \frac{\mu+\Lambda}{2\mu+\lambda}\frac{q_iq_j}{q^2}\right] \tag{VII.86}$$

olduğunu görürüz.

Salınınların konum uzayındaki uzamları

$$\begin{aligned}\left\langle [\mathbf{u}(\mathbf{x}) - \mathbf{u}(\mathbf{0})]^2 \right\rangle &= \int \frac{d^2\mathbf{q}}{(2\pi)^2}\frac{2-2\cos(\mathbf{q}\cdot\mathbf{x})}{\mu q^2}\left[\delta_{ii} - \frac{\mu+\lambda}{2\mu+\lambda}\frac{q_iq_i}{q^2}\right] \\ &= \frac{2\mu+\lambda}{\mu(2\mu+\lambda)}\frac{\ln(|\mathbf{x}|/a)}{\pi}\end{aligned} \tag{VII.87}$$

olarak verilir. Salınımların $|\mathbf{x}|$ ile sınırsız büyümesi, iki boyutta uzun-erimli düzenin bozulmasına işaret eder. Yüksek boyutlarda benzer bir hesap, salınımların sıcaklıkla orantılı *sonlu* uzamlarını verir. *Lindeman kriteri*, erime noktasını, sezgisel olarak, bu termal salınımların, mükemmel ağ aralığının belirli bir oranına (aşağı yukarı 0.1) denk olduğu sıcaklık olarak tanımlar. Bu kritere göre, iki boyutlu katı her sıcaklıkta erir. Tabi ki, bu, iki boyutta gerçek uzun-erimli düzenin olmamasının başka bir sonucudur. Bu durumda, XY modelindekine benzer, bir çeşit sanki-uzun erimli düzen mümkün müdür?

(d) Kırık öteleme simetrisini tasvir eden *düzen parametresi*, $\rho_{\mathbf{G}} = e^{i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}(\mathbf{x})}$'dir, burada G herhangi bir *karşıt ağ* vektörüdür. $\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}_0$, tanımından dolayı 2π'nin tam katı olduğu için, sıfır sıcaklıkta, $\rho_{\mathbf{G}} = 1$'dir. Salınımlardan dolayı $\langle\rho_{\mathbf{G}}(\mathbf{x})\rangle = \langle e^{i\mathbf{G}\cdot\mathbf{u}(\mathbf{x})}\rangle$ sonlu sıcaklıklarda azalır, ve bağdaşıklıkları

$$\begin{aligned}\langle\rho_{\mathbf{G}}(\mathbf{x})\rho^*_{\mathbf{G}}(\mathbf{0})\rangle &= \left\langle e^{i\mathbf{G}\cdot(\mathbf{u}(\mathbf{x})-\mathbf{u}(\mathbf{0}))}\right\rangle \\ &= \exp\left(-\frac{G_\alpha G_\beta}{2}\langle(u_\alpha(\mathbf{x})-u_\alpha(\mathbf{0}))(u_\beta(\mathbf{x})-u_\beta(\mathbf{0}))\rangle\right) \\ &= \exp\left\{-\frac{G_\alpha G_\beta}{2}\int\frac{d^2\mathbf{q}d^2\mathbf{q}'}{(2\pi)^2}\left(e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}}-1\right)\left(e^{i\mathbf{q}'\cdot\mathbf{x}}-1\right)\langle u_\alpha(\mathbf{q})u_\beta(\mathbf{q}')\rangle\right\} \\ &= \exp\left\{-\frac{1}{2}\int\frac{d^2\mathbf{q}}{(2\pi)^2}\frac{2-2\cos\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}}{q^2}\left(\frac{G^2}{\mu} - \frac{\mu+\lambda}{\mu(2\mu+\lambda)}\frac{(\mathbf{G}\cdot\mathbf{q})^2}{q^2}\right)\right\} \\ &\approx \exp\left\{-\frac{G^2(3\mu+\lambda)}{2\mu(2\mu+\lambda)}\frac{\ln(|\mathbf{x}|/a)}{2\pi}\right\} = \left(\frac{a}{|\mathbf{x}|}\right)^{\eta_G}\end{aligned} \tag{VII.88}$$

şeklinde azalır. $\mathbf{q}$ integrali, $(\mathbf{G}\cdot\mathbf{q})^2$'yi açısal ortalaması $G^2q^2/2$ ile değiştirdikten sonra yapılmıştır. Bu, $\cos\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}$ teriminin varlığından dolayı, ki dönme simetrisini kırar, tam olarak doğru değildir. Yine de, bu yaklaşıklık, integralin doğru asimptotik büyümesini yakalar. Dolayısıyla, bağdaşıklıklar,

$$\eta_G = \frac{G^2(3\mu+\lambda)}{4\pi\mu(2\mu+\lambda)} \tag{VII.89}$$

kuvveti ile cebirsel olarak azalır.

Ötelemesel bağdaşıklıklar, kırınım deneylerinde ölçülür. Saçılma genliği, $\rho_{\mathbf{q}}$'nun Fourier dönüşümüdür, ve $\mathbf{q}$ dalga-vektöründe saçılma yoğunluğu

$$\begin{aligned} S(\mathbf{q}) &= \left\langle |A(\mathbf{q}|^2 \right\rangle = \left\langle \left| \sum_{m,n} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}(m,n)} \right|^2 \right\rangle = N \sum_{m,n} \left\langle e^{i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{r}(m,n)-\mathbf{r}(0,0))} \right\rangle \\ &= N \sum_{m,n} e^{i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{r}_0(m,n)-\mathbf{r}_0(0,0))} \left\langle e^{i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{u}(\mathbf{x})-\mathbf{u}(\mathbf{0}))} \right\rangle \end{aligned} \quad \text{(VII.90)}$$

yapı çarpanı ile orantılıdır, burada N, toplam parçacıkların sayısıdır. Sıfır sıcaklıkta, yapı çarpanı, karşıt ağ vektörlerinde delta-fonksiyonları (Bragg zirveleri) kümesidir. Sonlu sıcaklıkta bile, eğer $\mathbf{q}$ bir $\mathbf{G}$ ağ vektörü civarında değilse, değişen fazlardan dolayı toplam sıfırdır. O zaman, toplamı bir integralle değiştirebiliriz ve

$$S(\mathbf{q}) \approx N \sum_{\mathbf{G}} \int d^2\mathbf{x} e^{i(\mathbf{q}-\mathbf{G})\cdot\mathbf{x}} \left(\frac{a}{|\mathbf{x}|} \right)^{\eta_G} \approx N \sum_{\mathbf{G}} \frac{1}{|\mathbf{q}-\mathbf{G}|^{2-\eta_G}} \quad \text{(VII.91)}$$

Şimdi, Bragg zirveleri, kuvvet yasası tekillikleri ile yer değiştirmiştir. Iraksamanın kuvveti, sıcaklıkla ve artan $|\mathbf{G}|$ ile azalır. Yeterince büyük $|\mathbf{G}|$'ye karşılık gelen zirveler artık görülemezler, ve sıcaklık arttıkça, daha fazlası yok olur. Üç boyutta, yapı çarpanı hala bir küme delta-fonksiyonudur, ancak genlikleri *Debye-Waller* çarpanı denen $\exp\left(-\frac{G^2}{12\pi a}\frac{5\mu+2\lambda}{\mu(2\mu+\lambda)}\right)$ çarpanı ile azalmıştır.

(e) Kristal fazı da kırılmış bir simetri ile karakterize edilir. *Yönelimsel düzen parametresi* tanımlayabiliriz $\Psi(\mathbf{x}) = e^{6i\theta(\mathbf{x})}$, burada $\theta(\mathbf{x})$ yerel ağ bağları ile, bir referans ekseni arasındaki açıdır. (6 çarpanı, üçgensel ağdaki 6 olası yönün birbirine denkliğinden kaynaklanır. Kare ağ için uygun tercih $e^{4i\theta(\mathbf{x})}$ olur.) Düzen parametresinin, $T = 0$'da birim genliği vardır, ve sonlu sıcaklıkta, salınımlardan dolayı azalması beklenir. $\mathbf{u}(\mathbf{x})$ bozulması, ağ açısında değişime yol açar

$$\theta(\mathbf{x}) = -\frac{1}{2}\left(\frac{\partial u_y}{\partial x} - \frac{\partial u_x}{\partial y} \right) = -\frac{1}{2}\hat{z}\cdot\nabla\times\mathbf{u} \quad \text{(VII.92)}$$

Yönelimsel salınımların azalması

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{\Psi}(\mathbf{x})\mathbf{\Psi}^*(\mathbf{0}) \rangle &= \left\langle e^{i6(\theta(\mathbf{x})-\theta(\mathbf{0}))} \right\rangle \\ &= \exp\left[-\frac{6^2}{2}\frac{1}{4} \left\langle [\nabla\times\mathbf{u}(\mathbf{x}) - \nabla\times\mathbf{u}(\mathbf{0})]^2 \right\rangle \right] \\ &= \exp\left\{ -\frac{9}{2} \int \frac{d^2\mathbf{q} d^2\mathbf{q}'}{(2\pi)^4} \left(e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}} - 1 \right) \left(e^{i\mathbf{q}'\cdot\mathbf{x}} - 1 \right) \epsilon_{ijk}\epsilon_{ij'k'} q_j q'_{j'} \langle u_k(\mathbf{q}) u_{k'}(\mathbf{q}') \rangle \right\} \\ &= \exp\left\{ -\frac{9}{2} \int \frac{d^2\mathbf{q}}{(2\pi)^2} (2 - 2\cos\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}) \left(q^2 \langle | \, u(\mathbf{q}) \, |^2 \rangle - \langle (\mathbf{q}\cdot\mathbf{u})^2 \rangle \right) \right\} \\ &= \exp\left\{ -\frac{9}{2\mu} \int \frac{d^2\mathbf{q}}{(2\pi)^2} (2 - 2\cos\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}) \right\} \approx \exp\left(-\frac{9}{a^2\mu} \right) \end{aligned} \quad \text{(VII.93)}$$

ifadesinden hesaplanır. ($\int d^2\mathbf{q}/(2\pi)^2$'nin $n = N/L^2 = 1/a^2$ yoğunluğu olduğuna dikkat ediniz.) Son sonuç, büyük mesafelerde $\mathbf{x}$'ten *bağımsızdır*, ve sıcaklıkla üstel olarak azalan ($\mu \propto 1/T$ olduğu için) bir sabite giderek yaklaşır. Dolayısıyla, iki boyutlu ağ, sanki uzun erimli öteleme düzeni ve gerçek uzun erimli yönelim düzeni ile karakterize edilir.

VII.E İki Boyutlu Erime

iki boyutlu bir katının erimesi ile, XY spin sisteminin düzensizleşmesi arasında niteliksel benzerlikler vardır. Kosterlitz ve Thouless'in işini genişleterek, Halperin ve Nelson, bağımsız olarak, Young, iki boyutlu erimenin bir kuramını geliştirdiler. Elde edilen, KTHNY denilen kuram, burada bahsedilmiştir.

(a) Bir katıdaki topolojik bozukluklar, yer değiştirmelerdir. Tek bir yer değiştirme, ek bir ağ yarı düzlemine karşılık gelir, ve *Burger'in devresi* uygulanarak karakterize edilir: Devre, konumdan konuma bir seri adımdır, öyle ki, mükemmel bir ağda, başlangıç noktasına döner (mesela, kare bir ağda, sağa 5 adım, aşağı 4 adım, takiben sola 5 adım, ve yukarı 4 adım.) Eğer devre, yer değiştirmeli bir bölgeyi çevreliyorsa, kapanamayacaktır. İlk ve son konumlar arasındaki fark, $\mathbf{b}$'yi, yer değiştirmenin *Burger vektörünü*, tanımlar. Bu kapanmanın başarısız olması mümkündür, çünkü, bozulma alanı $\mathbf{u}(\mathbf{x})$, bir ağ vektörüne kadar tanımlıdır. Süreklilik limitinde, bu yozlaşma

$$\oint \nabla u_\alpha d\mathbf{s} = b^\alpha \tag{VII.94}$$

ile tanımlanır. Dolayısıyla, bozulma alanının her bileşeni, XY modelindeki $\theta(\mathbf{x})$ açısı gibi davranır. Bu benzerliği kullanarak, $\{\mathbf{x}_i\}$ konumlarındaki bir gurup $\{\mathbf{b}_u\}$ yer değiştirmesine karşılık gelen bozulma alanının tekil kısmı

$$\nabla \tilde{u}_\alpha^* = -\nabla \times \left(\hat{z} \sum_i \frac{b_i^\alpha}{2\pi} \ln |\mathbf{x} - \mathbf{x}_i| \right) \tag{VII.95}$$

olarak verilir.

$\tilde{u}_\alpha^*$, girdapların varlığından kaynaklı tekillikleri düzgün olarak tasvir ederken, yerel bir denge dizilimi değildir, yani $2\mu\tilde{u}_{\alpha\beta} + \lambda\delta_{\alpha\beta}\tilde{u}_{\gamma\gamma} = 0$ denklemine bir çözüm değildir. Yer değiştirmelerin varlığında, parçacıkların dengeye gelmesine izin verince, $\tilde{u}_\alpha$ çözümü bulunur, ki $\tilde{u}_\alpha^*$'dan düzgün bir kısımla farklanır. Toplam gerilme alanı $u_{\alpha\beta} = \phi_{\alpha\beta} + \tilde{u}_{\alpha\beta}$ olarak ayrıştırılabilir, burada $\tilde{u}_{\alpha\beta}$ yer değiştirmelerden kaynaklanır, ve $\phi_{\alpha\beta}$ fononların katkısıdır. Bu şekli $\beta\mathcal{H} = \int d^2\mathbf{x} \left[2\mu u_{\alpha\beta}u_{\alpha\beta} + \lambda u_{\alpha\alpha}u_{\beta\beta}\right]/2$ esneklik enerjisinde yerleştirdikten sonra, XY modelindeki işlemlerin benzeri, $\beta\mathcal{H} = \beta\mathcal{H}_0 + \beta\mathcal{H}_1$ sonucunu verir, burada

$$\beta\mathcal{H}_0 = \frac{1}{2} \int d^2\mathbf{x} \left[2\mu\phi_{\alpha\beta}\phi_{\alpha\beta} + \lambda\phi_{\alpha\alpha}\phi_{\beta\beta}\right] \tag{VII.96}$$

ve

$$\beta\mathcal{H}_1 = -\bar{K}\sum_{i<j} b_i^\alpha b_j^\beta C_{\alpha\beta}(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) - \sum_i \ln\left[y_0(\mathbf{b}_i)\right] \quad \text{(VII.97)}$$

Yer değiştirmeler, $\{\mathbf{b}_i\}$ vektör yüklü bir büyük kanonik bir gaz gibi davranırlar. y_0 kaçarlığı, her yer değiştirmenin çekirdek enerjisinden gelir. Yükler, Coulomb etkileşmesinin vektörel bir genelleştirmesiyle etkileşirler:

$$C_{\alpha\beta}(\mathbf{x}) = \frac{1}{2\pi}\left[\delta_{\alpha\beta}\ln\left(\frac{|\mathbf{x}|}{a}\right) - \frac{x_\alpha x_\beta}{x^2}\right] \quad \text{(VII.98)}$$

Denklem VII.97'deki etkileşimin kuvveti $\bar{K}a^2 = 2\mu(\mu+\lambda)/(2\mu+\lambda)$'dır. Yukarıdaki çıkarımda açıkça yazılmayan yüksüzlük koşulu vardır, $\sum_i \mathbf{b}_i = \mathbf{0}$.

Yer değiştirmeler arasındaki çıplak etkileşme, ortamdaki diğer yer değiştirmeler tarafından perdelenir. Etkin kuvvet tedirgeme ile hesaplanabilir, ve $\pi\bar{K}a^2 < 2$ için ıraksar. Bu, eşleşmiş yüksüz yer değiştirmelerin ayrıldığını işaret eder. Kabalaştırma altında, kuramın parametreleri

$$\begin{cases} \frac{d\bar{K}^{-1}}{d\ell} &= Ay^2 + By^3 \\ \frac{dy_0}{d\ell} &= (2-\pi\bar{K})y + Dy^2 \end{cases} \quad \text{(VII.99)}$$

olarak evrilir, burada A, B, ve D sabitlerdir. XY modelinin aksine, y_0^3 mertebesinde ek terimler çıkar. Bunun sebebi, skalar Coulomb gazındaki tek yüksüz dizilimlerin çift sayıda parçacığa sahip olmasıdır. Üçgen bir ağdaki yer değiştirmeler için, $120°$'li üç yer değiştirmeden, yüksüz bir dizilim oluşturmak mümkündür.

Düşük sıcaklık fazı, renormalize edilmiş μ_R ve Λ_R Lamé katsayıları ve $y_0^* = 0$ ile karakterize olan sabit noktalardan oluşmuş bir doğruyla eşleşir. Yüksek sıcaklıklarda, y_0 ve $\bar{K}$'nin ikisi de ıraksar, ki bu μ_R kesme modülünün yok olmasını, ve sonlu bir ξ bağdaşıklık uzunluğuna işaret eder. Geçişe, düşük sıcaklık kısmından yaklaşırken, etkin kesme modülü, süreksiz bir sıçramaya uğrar, ki tekil davranışı $\mu_R \simeq \mu_c + c(T_c - T)^{\bar{\nu}}$ olur. Bağdaşıklık uzunluğu, yüksek sıcaklık tarafında $\xi \simeq a\exp(c'/(T-T_c)^{\bar{\nu}})$ şeklinde ıraksar. VII.99 denklemlerindeki üçüncü derece terimlerden dolayı $\bar{\nu} = 0.36963\cdots$ değeri, XY modelindeki $1/2$'den farklıdır, ki bu vektör ve skalar Coulomb evrensellik sınıflarındaki geçişlerin farklılıklarına işaret eder.

(b) Kesme modülünün yok olması, bağlı olmayan yer değiştirmeleri ile yüksek sıcaklık fazının bir sıvı olduğu anlamına gelir mi? Daha önce tartışıldığı gibi, kristal fazın hem öteleme hem yönelim düzeni vardır. Bir $\mathbf{u}(\mathbf{x})$ bozulması, denklem VII.92'ye göre, bağlarda dönmeye yol açar. Bir yer değiştirme topluluğundan kaynaklı net dönme

$$\tilde{\theta}(\mathbf{x}) = -\frac{1}{2}\hat{z}\cdot\nabla\times\tilde{u} = \frac{1}{2\pi}\sum_i \frac{\mathbf{b}_i\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{x}_i)}{|\mathbf{x}-\mathbf{x}_i|^2} \quad \text{(VII.100)}$$

olur. Sürekli yer değiştirme yoğunluğu $\mathbf{b}(\mathbf{x}) = \sum_i \mathbf{b}_i\delta^2(\mathbf{x}-\mathbf{x}_i)$ cinsinden

$$\tilde{\theta}(\mathbf{x}) = \frac{1}{2\pi}\int d^2\mathbf{x}'\,\frac{\mathbf{b}(\mathbf{x}')\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{x}')}{|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|^2} \quad \text{(VII.101)}$$

Alternatif olarak, Fourier uzayında

$$\tilde{\theta}(\mathbf{q}) = \int d^2\mathbf{x} d^2\mathbf{x}' e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}} \frac{b(\mathbf{x}')\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{x}')}{2\pi|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|^2} = i\frac{\mathbf{b}(\mathbf{q})\cdot\mathbf{q}}{q^2} \tag{VII.102}$$

Dolayısıyla, açısal salınımlar, yer değiştirme yoğunluğundaki bağdaşıklıklara

$$\left\langle|\tilde{\theta}(\mathbf{q})|^2\right\rangle = \frac{q_\alpha q_\beta}{q^4}\langle b^\alpha(\mathbf{q}) b^\beta(\mathbf{q})\rangle \tag{VII.103}$$

ile bağlıdır, burada

$$\langle b^\alpha(\mathbf{q}) b^\beta(\mathbf{q})\rangle = \int d^2\mathbf{x} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}} \langle b^\alpha(\mathbf{x}) b^\beta(\mathbf{0})\rangle \tag{VII.104}$$

$T > T_c$'de yer değiştirmeler bağlantısız hale geldikten sonra, perdelenmiş Coulomb etkileşmesiyle etkileşirler, ve

$$\lim_{|\mathbf{x}|\to\infty}\langle b^\alpha(\mathbf{x}) b^\beta(\mathbf{0})\rangle \propto \delta_{\alpha\beta} e^{-|\mathbf{x}|/\xi}, \quad \Longrightarrow \quad \lim_{\mathbf{q}\to\mathbf{0}}\langle b^\alpha(\mathbf{q}) b^\beta(\mathbf{q})\rangle \propto \delta_{\alpha\beta}\xi^2 \tag{VII.105}$$

Denklem VII.103'e yerleştirerek

$$\lim_{\mathbf{q}\to\mathbf{0}}\left\langle|\tilde{\theta}(\mathbf{q})|^2\right\rangle \propto \frac{\xi^2}{q^2} \tag{VII.106}$$

elde edilir. (Düşük sıcaklık fazında, büyük $|\mathbf{q}|^{-1}$ ölçeğinde yüklerin nötrlüğü, $\mathbf{b}(\mathbf{q})$'nun $\mathbf{q}\to\mathbf{0}$ iken yok olmasını ve $\lim_{\mathbf{q}\to\mathbf{0}}\langle b^\alpha(\mathbf{q}) b^\beta(\mathbf{q})\rangle \propto q_\alpha q_\beta$ olmasını gerektirir, ki bu da sonlu bir $\langle|\tilde{(}\mathbf{q})|^2\rangle$ değerine yol açar.

Denklem VII.106, yer değiştirmeler bağımsız hale geldikten sonra, yönelimsel salınımların hala bağdaşık oldukları anlamına gelir. Gerçekten, böyle bağdaşıklıklar

$$\beta\mathcal{H} = \frac{K_A}{2}\int d^2\mathbf{x}(\nabla\theta)^2, \quad K_A \propto \xi^2 \text{ olmak üzere} \tag{VII.107}$$

Hamiltoniyeninden gelir. Açısal sertlik K_A, Frank sabiti olarak bilinir. Bağ açısı düzen bağdaşıklıkları, şimdi

$$\langle\mathbf{\Psi}(\mathbf{x})\mathbf{\Psi}^*(\mathbf{x})\rangle = e^{-\frac{36}{2}\left\langle\left[\tilde{\theta}(\mathbf{x})-\tilde{\theta}(\mathbf{0})\right]^2\right\rangle} = \left(\frac{a}{|\mathbf{x}|}\right)^{-\eta_\Psi} \tag{VII.108}$$

şeklinde azalır, burada $\eta_\Psi = 18/(\pi K_A)$. Yönelimsel salınımların, sanki uzun erimli azalaması, kırınım şeklinde altı kat yoğunluk değişimine yol açar. Dolayısıyla, yer değiştirmeler, düzeni tam olarak yok etmede etkin değillerdir, ve bağıl halden kurtulmaları, *hexatik* olarak bilinen yönelimsel düzenli fazın ortaya çıkmasına yol açar. Hexatik fazın sertliği, katıya geçişte, denklem VII.107'ye uygun bir şekilde ıraksar.

(c) Yönelimsel düzen, yüksek sıcaklıklarda, *disklinasyon* olarak bilinen yeni bir toplojik bozukluk gurubunun bağıl olmayan hale geçmesiyle yok olur. Bunlar, girdaplara çok benzerler, ancak, bağ açısı $2\pi/6$'ya kadar tanımlı olduğu için

$$\oint \nabla\theta \cdot d\vec{s} = \frac{2\pi}{6} \tag{VII.109}$$

denklemini sağlarlar. Disklinasyonun enerji maliyeti, sistem boyutu ile $\mathcal{E}_1 = \pi K_A \ln(L/a)/36$ şeklinde büyür. $2\ln(L/a)$ entropisini göz önüne alınca, $K_A < 72/\pi$'de disklinasyon ayrışma geçişi buluruz. Bu geçiş, skalar Coulomb gazının evrensellik sınıfındadır. Elde edilen yüksek sıcaklık fazının ya yönelimsel, ya da ötelemesel düzeni vardır ve olağan sıvıdır.

Bu senaryo, iki boyutlu katının erimesinin, bir ara hexatik fazla gerçekleştiğini öngörür. Gerçekte, bilgisayar simülasyonları, basit iki boyutlu katıların, mesela Lennard-Jones potansiyeli ile etkileşen parçacıklar, üç boyutta olduğu gibi, doğrudan birinci derece bir geçiş geçirdiğini önermektedirler. Üç boyuttaki daha karmaşık moleküler sistemlerin, mesela uzun polimerlerin, ara sıvı kristal fazları olduğu bilinmektedir. Sıvı kristallerin katı ve sıvı arası bir düzeni vardır, ve hexatik fazın üç boyutlu benzerleridir. Birkaç tek-kat sıvı kristalden yapılan filmler, KTHNY erime senaryosunu incelemek için en iyi adaylardır.