8.334 İstatistiksel Mekanik II: Alanların İstatistiksel Fiziği
2008 Bahar

II.D Saçılma ve Salınımlar

Hacimsel termodinamik deneylere ek olarak, saçılma deneyleri de yoklayıcının dalgaboyu λ mertebesindeki ölçeklerde mikroskopik salınımları incelemek için kullanılabilir. Tipik bir düzende, dalga vektörü $\mathbf{k}_i$ olan bir hüzme, örnek üzerine yollanır ve saçılan yoğunluk $\mathbf{k}_s = \mathbf{k}_i + \mathbf{q}$ dalga vektöründe ölçülür. Esnek saçılma için, $|\mathbf{k}_i| = |\mathbf{k}_s| \equiv k$, ve $q \equiv |\mathbf{q}| = 2k\sin\theta$, θ gelen ve yansıyan hüzmeler arasındaki açı olmak üzere. Saçılmanın olağan incelenmesi, Fermi Altın Kuralı ile başlar, ve genellikle saçılma genliğinin

$$A(\mathbf{q}) \propto \langle \mathbf{k}_s \otimes f|\mathcal{U}|\mathbf{k}_i \otimes i\rangle \propto \sigma(\mathbf{q}) \int d^d\mathbf{x} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}} \rho(\mathbf{x}) \tag{II.31}$$

ifadesine ulaşılır. Yukarıdaki ifadede, $|i\rangle$ ve $|f\rangle$, mikroskipik saçılma elemanının ilk ve son durumlarına (atom veya iyon), $\mathcal{U}$, örnekteki çeşitli saçılma elemanlarının toplamı olarak yazılabilen saçılma potansiyeline karşılık gelir. Genliğin, tek tek elemanlardan saçılmasını tasvir eden *yerel* bir yapı faktörü $\sigma(\mathbf{q})$ vardır. Bizim için daha ilginç olan *genel* bilgi ise $\rho(\mathbf{q})$, saçıcılarının genel yoğunluğunun $\rho(\mathbf{x})$ Fourier dönüşümü, içerisindedir. Uygun saçılma yoğunluğu, kullanılan inceleyicinin doğasına bağlıdır. Işık saçılması, gerçek atomik yoğunluğu, elektron saçılması yük yoğunluğunu hisseder, nötron saçılması ise çoğunlukla mıknatıslanma yoğunluğunu yoklamak için kullanılır. Bu tarz pek çok inceleyici aslında sistemin anlık durumuna bakmaz, konfigürasyonun zaman ortalamasına bakar. Bu yüzden, ölçülen saçılma yoğunluğu

$$S(\mathbf{q}) \propto \langle |A(\mathbf{q})|^2 \rangle \propto \langle |\rho(\mathbf{q})|^2 \rangle \tag{II.32}$$

olarak verilir. Burada $\langle \bullet \rangle$, $\bullet$'nın, ergodiklikten dolayı çoğu zaman zaman ortalaması yerine kullanılabilen, termal ortalamasıdır.

Denklem II.32, düzgün bir yoğunluğun sadece ileri saçılmaya ($\mathbf{q} = \mathbf{0}$) yol açtığını söylerken, uzun dalgaboylu salınımlar küçük açılar veya küçük k ile çalışarak incelenebilir. Eğer saçılma mıknatıslanma yoğunluğundan kaynaklı ise, Landau-Ginzburg yaklaşımını kullanarak şiddetini hesaplayabiliriz. Herhangi bir konfigürasyonun olasılığı

$$\mathcal{P}[\vec{m}(\mathbf{x})] \propto \exp\left\{-\int d^d\mathbf{x}\left[\frac{K}{2}(\nabla m)^2 + \frac{t}{2}m^2 + um^2\right]\right\} \tag{II.33}$$

olarak verilir. Daha önce de tartışıldığı gibi, en olası konfigürasyon, $\vec{m}(\mathbf{x}) = \bar{m}\hat{e}_1$ olacak şekilde *düzgün*dür, burada $\hat{e}_1$ herhangi bir birim vektördür ($\bar{m}$, $t > 0$ için sıfırdır, ve $t < 0$ için $\sqrt{-t/4u}$'ya eşittir). Böyle bir konfigürasyonun etrafındaki küçük salınımları

$$\vec{m}(\mathbf{x}) = [\bar{m} + \phi_b(\mathbf{x})]\hat{e}_1 + \sum_{\alpha=2}^{n} \phi_{e,\alpha}(\mathbf{x})\hat{e}_\alpha, \tag{II.34}$$

yazarak inceleyebiliriz; burada ϕ_b ve ϕ_e sırasıyla *boylamasına* ve *enine* salınımlara karşılık gelir. İkincisi, ortalama mıknatıslanmaya dik $n-1$ yönden herhangi bir doğrultuda olabilir.

Denklem II.34'ü yerine yerleştirdikten sonra, Landau-Ginzburg Hamiltoniyen'indeki terimler, ikinci mertebeye kadar

$$\begin{aligned}(\nabla m)^2 &= (\nabla\phi_b)^2 + (\nabla\phi_e)^2,\\ m^2 &= \bar{m}^2 + 2\bar{m}\phi_b + \phi_b^2 + \phi_e^2\\ m^4 &= \bar{m}^4 + 4\bar{m}^3\phi_b + 6\bar{m}^2\phi_b^2 + 2\bar{m}^2\phi_e^2 + \mathcal{O}(\phi_b^3,\phi_e^3)\end{aligned}$$

şeklinde açılabilir ve sonuçta dördüncü mertebeden enerji maliyeti

$$\begin{aligned}\beta\mathcal{H} \equiv -\ln\mathcal{P} &= V\left(\frac{t}{2}\bar{m}^2 + u\bar{m}^4\right) + \int d^d\mathbf{x}\left[\frac{K}{2}(\nabla\phi_b)^2 + \frac{t+12u\bar{m}^2}{2}\phi_b^2\right]\\ &+ \int d^d\mathbf{x}\left[\frac{K}{2}(\nabla\phi_e)^2 + \frac{t+4u\bar{m}^2}{2}\phi_e^2\right] + \mathcal{O}(\phi_b^3,\phi_e^3).\end{aligned} \quad \text{(II.35)}$$

olarak elde edilir. Düzgün yapı değişiklikleri için, boylamsal ve enine *geri çekme* potansiyellerinin "yay sabitleri"

$$\frac{K}{\xi_b^2} \equiv t + 12u\bar{m}^2 = \left.\frac{\partial^2\Psi(m)}{\partial\phi_b^2}\right|_{\bar{m}} = \begin{cases} t & t>0 \text{ için} \\ -2t & t<0 \text{ için}\end{cases}, \quad \text{(II.36)}$$

ve

$$\frac{K}{\xi_e^2} \equiv t + 4u\bar{m}^2 = \left.\frac{\partial\Psi(m)}{\partial\phi_e^2}\right|_{\bar{m}} = \begin{cases} t & t>0 \text{ için} \\ 0 & t<0 \text{ için}\end{cases}, \quad \text{(II.37)}$$

olarak verilir. (Uzunluk ölçekleri ξ_b ve ξ_e'nin fiziksel anlamları birazdan anlaşılacaktır.) Paramanyetikte ($t > 0$) boylamsam ve enine bileşenler arasında bir fark olmadığına dikkat edin. $t < 0$'daki düzenli mıknatısta, bir önceki kısımda anlatılan Goldstone modlara karşılık gelen enine salınımlar için geri çekme kuvveti yoktur.

Fourier modlarına değişken değiştirilirse, $\phi(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{q}}\phi_{\mathbf{q}}e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}}/\sqrt{V}$, belli bir salınım konfigürasyonu için olasılık

$$\mathcal{P}[\{\phi_{b,\mathbf{q}};\phi_{e,\mathbf{q}}\} \propto \prod_{\mathbf{q}}\exp\left\{-\frac{K}{2}(q^2+\xi_b^{-2})|\phi_{b,\mathbf{q}}|^2\right\}\cdot\exp\left\{-\frac{K}{2}(q^2+\xi_e^{-2})|\phi_{e,\mathbf{q}}|^2\right\}. \quad \text{(II.38)}$$

olarak verilir. Açıkça, her bir mod, ortalaması sıfır olan, Gaussiyan bir rastgele değişken gibi davranır, ve iki nokta bağdaşıklık fonksiyonları

$$\langle\phi_{\alpha,\mathbf{q}}\phi_{\beta,\mathbf{q}'}\rangle = \frac{\delta_{\alpha,\beta}\delta_{\mathbf{q},-\mathbf{q}'}}{K(q^2+\xi_\alpha^{-2})}, \quad \text{(II.39)}$$

olarak verilir; burada indeksler boylamsal veya herhangi bir enine bileşeni gösterir. Spin polarize bir nötron kaynağı kullanarak, göreli yönelim, boylamsal ya da enine bağdaşıklıkları inceleyecek şekilde ayarlanabilir. $S(\mathbf{q}) \propto 1/(q^2+\xi^{-2})$ *Lorentz form*u, genelde, kritik noktadan uzaktaki saçılma çizgi şekillerine mükemmel bir uyum gösterir. Denklem II.39, düzenli fazda, boylamsal saçılmanın hala Lorentz formunda olduğunu (kendiliğinden mıknatıslanmadan kaynaklı $\mathbf{q} = \mathbf{0}$'daki Dirac deltanın üstüne), bununla beraber, enine saçılmanın her zaman $1/q^2$

şeklinde büyüdüğünü söyler. Aynı üstel azalma yasasının kritik noktada da, $t = 0$, olacağı öngörülür. Gerçek deneysel yakıştırmalar, η için küçük bir pozitif değer olacak şekilde

$$S(\mathbf{q}, T = T_c) \propto \frac{1}{q^{2-\eta}} \tag{II.40}$$

şeklinde bir kuvvet yasası açığa çıkarırlar.

II.E Bağdaşıklık Fonksiyonları ve Alınganlıklar

Dalgalanmaların boyutunu gerçek uzayda da inceleyebiliriz. $\langle\phi_\alpha(\mathbf{x})\rangle = \langle m_\alpha(\mathbf{x}) - \bar{m}_\alpha\rangle$ ortalamaları açıkça sıfırdır, ve *bağlantılı bağdaşıklık fonksiyonları*

$$\begin{aligned} G^c_{\alpha,\beta}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') &\equiv \langle(m_\alpha(\mathbf{x}) - \bar{m}_\alpha)(m_\beta(\mathbf{x}') - \bar{m}_\beta)\rangle \\ &= \langle\phi_\alpha(\mathbf{x})\phi_\beta(\mathbf{x}') = \frac{1}{V}\sum_{\mathbf{q},\mathbf{q}'} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}+i\mathbf{q}'\cdot\mathbf{x}'}\langle\phi_{\alpha,\mathbf{q}}\phi_{\beta,\mathbf{q}'}\rangle. \end{aligned} \tag{II.41}$$

olarak verilir. Denklem II.39'u kullanarak

$$G^c_{\alpha,\beta}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \frac{\delta_{\alpha,\beta}}{V}\sum_{\mathbf{q}} \frac{e^{i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{x}')}}{K(q^2 + \xi_\alpha^{-2})} \equiv -\frac{\delta_{\alpha,\beta}}{K} I_d(\mathbf{x} - \mathbf{x}', \xi_\alpha), \tag{II.42}$$

elde ederiz, burada, süreklilik limitinde

$$I_d(\mathbf{x}, \xi) = -\int \frac{d^d\mathbf{q}}{(2\pi)^d} \frac{e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}}}{q^2 + \xi^{-2}} \tag{II.43}$$

olarak verilir. Alternatif olarak, I_d, aşağıdaki differansiyel denklemin çözümüdür:

$$\nabla^2 I_d(x) = \int \frac{d^d\mathbf{q}}{(2\pi)^d} \frac{q^2 e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}}}{q^2 + \xi^{-2}} = \int \frac{d^d\mathbf{q}}{(2\pi)^d}\left[1 - \frac{\xi^{-2}}{q^2 + \xi^{-2}}\right] e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}} = \delta^d(\mathbf{x}) + \frac{I_d(\mathbf{x})}{\xi^2}. \tag{II.44}$$

Çözüm küresel simetriktir, ve

$$\frac{d^2 I_d}{dx^2} + \frac{d-1}{x}\frac{dI_d}{dx} = \frac{I_d}{\xi^2} + \delta^d(\mathbf{x}) \tag{II.45}$$

denklemini sağlar. Uzan mesafelerde, üstel olarak azalan

$$I_d(x) \propto \frac{\exp(-x/\xi)}{x^p} \tag{II.46}$$

gibi bir çözüm deneyebiliriz. (Alt öncül bir üstel yasanın varlığını öngördük.) I_d'nin türevleri

$$\begin{aligned} \frac{dI_d}{dx} &= -\left(\frac{p}{x} + \frac{1}{\xi}\right) I_d \\ \frac{d^2 I_d}{dx^2} &= \left(\frac{p(p+1)}{x^2} + \frac{2p}{x\xi} + \frac{1}{\xi^2}\right) I_d \end{aligned} \tag{II.47}$$

olarak verilir. $x \neq 0$ için, denklem II.46 nin, denklem II.45'i sağlamasını istemek

$$\frac{p(p+1)}{x^2} + \frac{2p}{x\xi} + \frac{1}{\xi^2} - \frac{p(d-1)}{x^2} - \frac{(d-1)}{x\xi} = \frac{1}{\xi^2} \quad \text{(II.48)}$$

koşulunu getirir. ξ'i azalma uzunluğu olarak seçmiş olmak, yukarıdaki denklemde sabit terimlerin birbirini götürmesini sağlar. p üsteli, bir sonraki en büyük terimlerin birbirlerini götürmesini talep ederek bulunabilir. $x \ll \xi$ için, $1/x^2$ terimleri, bir sonraki en önemli terimlerdir; $p(p+1) = p(d-1)$ ve $p = d-2$ olması gerekmektedir. Bu Coulomb etkileşmesi için tanıdık üsteldir, ve gerçektende bu mesafelerde, bağdaşıklıklar ξ'in varlığını hissetmezler ve

$$I_d(x) \simeq C_d(x) = \frac{x^{2-d}}{(2-d)S_d} \qquad (x \ll \xi) \quad \text{(II.49)}$$

olarak azalırlar. (Bağdaşıklık fonksiyonuna, incelenen bağdaşıklık fonksiyonunun sınır koşullarını sağlaması için, her zaman bir sabit terim eklenebilir.) Uzak mesafelerde $x \gg \xi$, $1/(x\xi)$ terimi, denklem II.48'de baskın olur, ve yok olması, $p = (d-1)/2$ olmasını gerektirir. Denklem II.49'a $x \approx \xi$'da eşleştirirsek,

$$I_d(x) \simeq \frac{\xi^{(3-d)/2}}{(2-d)S_d x^{(d-1)/2}} \exp(-x/\xi) \quad (x \gg \xi) \quad \text{(II.50)}$$

elde ederiz.

Uzunluk ölçeği ξ, *bağdaşıklık uzunluğu* olarak bilinir. Denklem II.42'den, boylamsal ve enine bağdaşıklıkların farklı davrandığını görürüz. Kritik nokta yakınında, boylamsal bağdaşıklık uzunluğu (denklem II.36)

$$\xi_b = \begin{cases} t^{-1/2}/\sqrt{K} & t > 0 \text{ için} \\ (-2t)^{-1/2}/\sqrt{K} & t > 0 \text{ için} \end{cases} \quad \text{(II.51)}$$

olarak davranır. Tekillikler, $\xi_\pm \simeq \xi_0 B_\pm |t|^{-\nu_\pm}$, $\nu_\pm = 1/2$ ve $B_+/B_- = \sqrt{2}$ evrensel iken $\xi_0 \propto 1/\sqrt{K}$ evrensel olmayan sabitler olmak üzere, şeklinde tanımlanabilir. Enine bağdaşıklık uzunluğu (denklem II.37) $t > 0$ iken, ξ_b'e eşittir, ve $t > 0$ iken sonsuzdur.

Denklem II.49, T_c'nin tam üzerinde, bağdaşıklıkların $1/x^{d-2}$ şeklinde azalacağını söyler. Gerçekte, azalma üsteli çoğu zaman $1/x^{d-2+\eta}$, η denklem II.40'da tanımlanan üstel olmak üzere, şeklinde gösterilir. Bağlantılı bağdaşıklık fonksiyonunun integralini almak, hacim alınganlıklarını verir. Mesela, boylamsal alınganlığın ıraksaması

$$\chi_b \propto \int d^d\mathbf{x} G_b^c(\mathbf{x}) \propto \int_0^{\chi_b} \frac{d^d x}{x^{d-2}} \propto \xi_b^2 \simeq A_\pm t^{-1} \quad \text{(II.52)}$$

olarak elde edilir. Evrensel üsteller ve genlik oranları, yine yukarıdaki denklemden elde edilir. $T < T_c$ için, enine bağdaşıklıklar için bir üst sınır uzunluğu yoktur, ve enine alınganlıktaki ıraksama, sistem boyutu L ile

$$\xi_e \propto \int d^d\mathbf{x} G_e^c(\mathbf{x}) \propto \int_0^{L} \frac{d^d x}{x^{d-2}} \propto L^2 \quad \text{(II.53)}$$

şeklinde ilişkilendirilebilinir.

II.F Deneylerle Kıyaslama

Önceki kısımlarda ana hatları anlatılan yaklaşımın gerçek testi, deneylerle kıyaslanmasındadır. Üstellerin ve uygun deneysel malzemelerin bir tablosu aşağıda verilmiştir. Üsteller aslında

Geçiş Türü	Malzeme	α	β	γ	ν
Ferromıknatıs $(n = 3)$	Fe, Ni	-0.1	0.4	1.3	
Süperakışkan $(n = 2)$	He^4	0	0.3	1.3	0.7
Sıvı-Gaz $(n = 1)$	CO_2, Xe	0.1	0.3	1.2	0.7
Ferroelektrikler ve Süperiletkenler	TGS	0	$1/2$	1	$1/2$
Ortalama-Alan Kuramı		0	$1/2$	1	$1/2$

tabloda gösterilenden çok daha hassas olarak bilinmektedir. Son sıra (ortalama-alan kuramı), semer noktası yaklaşımı ile elde edilen sonuçları gösterir. Sadece ferroelektrik ve süperiletken malzemelerde deney ile uyumludurlar. Farklı n değerleri için üstellerdeki uyuşmazlık, ortalama-alan sonuçlarının çok evrensel olduğu, ve n'e (ve d'ye) önemli bir bağlılığı ihmal ettiğini akla getirir. Bu çelişkiye nasıl açıklık getirebiliriz? Landau-Ginzburg Hamiltoniyen'inin başlangıç noktası güvenilir olacak kadar geneldir. Problem, sonraki bölümlerde de daha belirgenleşeceği gibi, bölüşüm fonksiyonunun hesabında kullandığımız ayar noktası yaklaşımındadır.