Statisztikus fizika 11. házi feladat

Kómár Péter (KOPNAAT.ELTE)

2008. 05. 13.

1. Feladat

Egyensúlyban $\frac{\partial F}{\partial m} = 0$:

$$a_0 \left(T - T^*\right) m + bm^3 + dm^5 = 0$$

Ez m-re egy ötödfokú egyenlet, amely azonban lebonható egy m^2-ben másodfokú és egy m-mel arányos tényezőre, így a gyökei:

$$\begin{aligned} m_1 =& 0 \\ \left(m_{2,3}^{+/-}\right)^2 =& \frac{-b \pm \sqrt{b^2 - 4d \cdot a_0 \left(T - T^*\right)}}{2d} \end{aligned}$$

Ha $T = T_0 = T^* + \frac{3b^2}{16a_0 d}$, akkor

$$\begin{aligned} m_2^{+/-} =& \pm\sqrt{\frac{-b}{4d}} \\ m_3^{+/-} =& \pm\sqrt{\frac{-3b}{4d}} \end{aligned}$$

Akkor stabil az egyenlsúly (ez valósul meg), ha $\frac{\partial^2 F}{\partial m^2} > 0$:

$$F''\left(m\right) = a_0 \left(T - T^*\right) + 3bm^2 + 5dm^4 > 0$$

Behelyettesítve az első derivált eltűnésének helyeit $T = T_0$ esetben: $F''\left(m_1\right) = \frac{3}{16}\frac{b^2}{d} > 0$, stabil; $F''\left(m_2\right) = -\frac{1}{4}\frac{b^2}{d} < 0$, instabil; $F''\left(m_3\right) = \frac{3}{4}\frac{b^2}{d} > 0$, stabil. Tehát m_3 az, ami új (nem nulla) egyensúlyi helyzetként szóba jöhet. Nézzük meg, hogy mennyi a szabad energia értéke ott:

$$F\left(m_3\right) = F_0 + \frac{a_0}{2} \cdot \frac{3b^2}{16a_0 d} \cdot \frac{-3b}{4d} + \frac{b}{4} \cdot \frac{9b^2}{16d^2} + \frac{d}{6} \cdot \frac{-27b^3}{64d^3} = F_0 + \frac{b^3}{d^2}\left[-\frac{9}{128} + \frac{9}{64} - \frac{9}{128}\right] = F_0 = F\left(m_1\right)$$

Tehát az új egyensúlyi érték szabad energiája T_0 hőmérsékleten megegyezik a régi állapotéval, ez azt jelenti, hogy további hőmérsékletcsökkenés után, amikor a szabadenergiája alacsonyabb lesz, már ez lesz a stabil állapot (míg az eredeti metastabillá válik), így végeredményben ugrásszerűen változott az egyensúlyi mágnesezettség (m), tehát elsőrendű fázisátmenetről van szó.

A latens hő a két különböző fázis állapotának energiakülönbségével azonosítható, hiszen ennyi energiát kell befektetni (vagy elvonni) az átalakuláshoz: $L = E\left(m_1\right) - E\left(m_3\right)$, ahol $E = F + ST = F - T \cdot \left(\frac{\partial F}{\partial T}\right)_m$.

$$E\left(m_1\right) = F_0, \quad E\left(m_3\right) = F_0 - T_0 \cdot \frac{a_0}{2}\left(-\frac{3b}{4d}\right) \qquad \Rightarrow L = -\frac{3}{8} T_0 \cdot \frac{a_0 b}{d}$$

2. Feladat

Az alábbi exponenseket definiáltuk:

$$\lim_{B\to 0}\xi \sim B^{-\nu}$$
$$\lim_{B\to 0}\chi \sim B^{1/\delta}$$
$$C \sim \exp\left(-\frac{r}{\xi}\right)\cdot r^{2-d-\eta}$$

A fluktuáció-válasz arányossága alaján:

$$\chi \sim \int d^d r\, C\left(r\right) \sim \int dr\, r^{d-1}\cdot \exp\left(-\frac{r}{\xi}\right)\cdot r^{2-d-\eta} = \xi^{2-\eta}\cdot \int dy\, \exp\left(-y\right)\cdot y^{1-\eta} \sim \xi^{2-\eta}$$

felhasználva az első definiáló egyenletet:

$$\chi \sim \left(B^{-\nu}\right)^{2-\eta} = B^{-\nu(2-\eta)}$$

amiből a harmadik egyenlet alapján:

$$B^{1/\delta} \sim B^{-\nu(2-\eta)} \quad \Rightarrow \quad \frac{1}{\delta} = \nu\left(\eta - 2\right)$$

3-4. Feladat

Egyensúly

(A megadott szabadenergia invariáns a kocka szimmetriacsoportjának csoportelemeinek hatására, ugyanis bármely csoportelem m_x, m_y, m_z-ket egymás között permutálja, illetve előjelüket cseréli, azonban F csak m-ek négyzetétől függ, azok permutációjára pedig szimmetrikus.)

Belátjuk, hogy az egyensúly feltételét felírhatjuk $\frac{\partial F}{\partial\left(m_i^2\right)} = 0$ alakban is, ha $m_i \neq 0$:

$$\frac{\partial F}{\partial\left(m_i^2\right)} = \frac{\partial F}{\partial m_i}\cdot\frac{dm_i}{d\left(m_i^2\right)} = \frac{\partial F}{\partial m_i}\cdot\frac{1}{\frac{d\left(m_i^2\right)}{dm_i}} = \frac{\partial F}{\partial m_i}\cdot\frac{1}{2m_i}$$

Így:

$$\frac{\partial F}{\partial m_i} = 0 \quad \Rightarrow \begin{cases} m_i = 0 \\ \frac{\partial F}{\partial\left(m_i^2\right)} = 0 & , ha\ m_i \neq 0 \end{cases}$$

Ezért az egyensúly feltétele, ha $m_i \neq 0$:

$$\frac{\partial F}{\partial m_i^2} = a_0\left(T - T_C\right) + \frac{b_1}{2}m_i^2 + \frac{b_2}{2}\left(m_j^2 + m_k^2\right) = 0$$

ahol $i, j, k \in \{x, y, z\}$ és $i \neq j \neq k \neq i$.

Bonstuk esetekre:

1. Mindegyik nulla

$m_x = 0,\ m_y = 0,\ m_z = 0$, ez egyensúlyi állapot tetszőleges hőmérsékleten.

2. Egy nem nulla

$m_j = m_k = 0$ $(j, k \in \{x, y, z\}, j \neq k)$, ekkor csak m_i-re lehet egyenletet felírni: $a_0 (T - T_C) + \frac{b_1}{2} m_i^2 = 0, \quad \Rightarrow \quad m_i = \pm\sqrt{\frac{2a_0(T_C - T)}{b_1}}$, ez csak $T < T_C$-nél létezik. Ez mind a három koordinátára lehetséges állpot, így ezek az állapotok az (m_x, m_y, m_z) térben 6 pontot jelölnek ki, amelyek egy $R_1 = \sqrt{\frac{2a_0(T_C - T)}{b_1}}$ sugarú gömbön vannak, úgy elhelyezve, mint egy kocka lapközéppontjai.

3. Kettő nem nulla

$m_k = 0$ $(k \in \{x, y, z\})$, ekkor két egyenletet lehet felírni: (rögtön mátrix alakba írva)

$$\begin{pmatrix} b_1 & b_2 \\ b_2 & b_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} m_i^2 \\ m_j^2 \end{pmatrix} = 2a_0 (T_C - T) \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Itt kettéágazik a probléma, mert ha a b-kből álló mátrix determinánsa nulla, akkor csak egy algebrailag független egyenlet van: $det = b_1^2 - b_2^2 = 0 \;\Rightarrow\; b_1 = b_2 (= b)$, mert mindekttő pozitív, ekkor pedig csak egy egyenlet van: $m_i^2 + m_j^2 = \frac{2a_0(T_C - T)}{b}$, ezek az állapotok a koordinátasíkokban benne fekvő 3 körvonalat határozzák meg, amiknek a sugara $R_2^* = \sqrt{\frac{2a_0(T_C - T)}{b}}$.

Ha azonban $b_1 \neq b_2$, akkor invertálható a mátrix, és ekkor:

$$\begin{pmatrix} m_i^2 \\ m_j^2 \end{pmatrix} = \frac{2a_0 (T_C - T)}{b_1^2 - b_2^2} \begin{pmatrix} b_1 & -b_2 \\ -b_2 & b_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{2a_0 (T_C - T)}{b_1 + b_2} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

ezek a pontok a koordinátasíkokban egy-egy négyzet csúcspontjait határozzák meg (összesen 12 van belőlük), egy $R_2 = \sqrt{\frac{2a_0(T_C - T)}{(b_1 + b_2)/2}}$ sugarú gömbön helyezkednek el, úgy mint egy kocka élközéppontjai.

4. Egyik sem nulla

Amikor egyik irányú mágnesezettség sem nulla, akkor mind a három egyenletre szükség van:

$$\begin{pmatrix} b_1 & b_2 & b_2 \\ b_2 & b_1 & b_2 \\ b_2 & b_2 & b_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} m_x^2 \\ m_y^2 \\ m_z^2 \end{pmatrix} = 2a_0 (T_C - T) \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Megint kettéágazik a probléma, először is ha a determináns nulla: $b_1^3 + 2b_2^3 - 3b_1 b_2^2 = 0$, ennek gyöke a $b_1 = b_2$; polinom osztással, megkapható a gyöktényezős alak: $\left(\frac{b_1}{b_2} - 1\right)^2 \cdot \left(\frac{b_1}{b_2} + 2\right) = 0$, ennek csak a $b_1 = b_2 (= b)$ az egyetlen pozitív megoldása, tehát itt is ez adja a különleges esetet, ekkor csak egy algebrailag független egyenlet marad:

$$m_x^2 + m_y^2 + m_z^2 = \frac{2a_0 (T_C - T)}{b}$$

ezek az állapotok egy $R_3^* = \sqrt{\frac{2a_0(T_C - T)}{b}}$ sugarú gömbön helyezkednek el az (m_x, m_y, m_z) térben.

Nem degenerált esetben a mátrix invertálható:

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} m_x^2 \\ m_y^2 \\ m_z^2 \end{pmatrix} &= \frac{2a_0 (T_C - T)}{b_1^3 + 2b_2^3 - 3b_1 b_2^2} \begin{pmatrix} b_1^2 - b_2^2 & b_2^2 - b_1 b_2 & b_2^2 - b_1 b_2 \\ b_2^2 - b_1 b_2 & b_1^2 - b_2^2 & b_2^2 - b_1 b_2 \\ b_2^2 - b_1 b_2 & b_2^2 - b_1 b_2 & b_1^2 - b_2^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \\ &= 2a_0 (T_C - T) \frac{b_1^2 - 2b_1 b_2 + b_2^2}{b_1^3 + 2b_2^3 - 3b_1 b_2^2} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{2a_0 (T_C - T)}{b_1 + 2b_2} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Ezek az állapotok egy kocka csúcsain (8db) helyezkednek el az (m_x, m_y, m_z) térben, és mindegyik $R_3 = \sqrt{\frac{2a_0(T_C - T)}{(b_1 + 2b_2)/3}}$ távolságra van az origótól.

Összegezve: Ha $b_1 = b_2\,(= b)$, akkor az összes állapot lehetséges egyensúlyi állapot, ami az origótól $R^* = R_2^* = R_3^*$ távolságra van, ennek az az oka, hogy ebben az esetben a szabad energia függvényét átalakíthatjuk az alábbi alakra:

$$F = f_0 + a_0\left(T - T_C\right)\left(m_x^2 + m_y^2 + m_z^2\right) + \frac{b}{4}\left(m_x^2 + m_y^2 + m_z^2\right)^2 = f_0 + a_0\left(T - T_C\right)|m|^2 + \frac{b}{4}|m|^4$$

ez az alak pedig látványosan invariáns tetszőleges forgatásra, amiből az következik, hogy a lehetséges állapotok halmaza is szimmetrikus kell legyen, azaz csakis egy gömb lehet, ha az origótól mért távolság adott.

Ha pedig $b_1 \neq b_2$, akkor a lehetséges egyensúlyi állapotok különböző oldalhosszúságú kockák lapközéppontjain, élközéppontjain és csúcsain helyezkednek el.

Így meghatároztuk tehát az egyensúlyi állapotokat, de nem tudjuk, hogy melyik stabil, melyik metastabil és melyik instabil, ehhez az egyensúlyi helyeken ki kell számítani a szabad energia második deriváltjának mátrixát, majd meg kell nézni, hogy pozitív definit-e:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial^2 F}{\left(\partial m_i\right)^2} &= 2a_0\left(T - T_C\right) + 3b_1 m_i^2 + b_2\left(m_j^2 + m_k^2\right) \\
\frac{\partial^2 F}{\partial m_i \partial m_j} &= 2b_2 m_i m_j
\end{aligned}$$

Vegyük végig az eseteket, és e mátrix mellé számítsuk ki a szabad energia értékét is, hogy eldönthessük, hogy stabil vagy metastabil állapotról van-e szó. Először tárgyaljuk a nem degenerált esetet $(b_1 \neq b_2)$

Stabilitás

1. Mindegyik nulla

$$F''\left(0,0,0\right) = 2a_0\left(T - T_C\right)\begin{pmatrix} 1 & & \\ & 1 & \\ & & 1 \end{pmatrix}$$

Ez pozitív definit, ha $T - T_C > 0$, azaz ha a kritikus hőmérséklet felett vagyunk, ez nem meglepő, mert ilyenkor csak ez az egyetlen egyensúlyi állapot; a kritikus hőmérséklet alatt pedig instabillá válik. Ennek az állapotnak a szabad energiája: $F\left(0,0,0\right) = f_0$

2. Egy nem nulla

Mind a 6 ide tartozó egyensúlyi állapot környezete a szimmetria miatt egyforma, ezért elég az egyiket megvizsgálni: $m_x = \sqrt{\frac{2a_0(T_C - T)}{b_1}}$

$$F''\left(m_x,0,0\right) = 2a_0\left(T_C - T\right)\begin{pmatrix} 2 & & \\ & \frac{1}{x} - 1 & \\ & & \frac{1}{x} - 1 \end{pmatrix}$$

ahol $x = \frac{b_1}{b_2}$. A kritikus hőmérséklet alatt e mátrixnak akkor vannak csupa pozitív sajátértékei (pozitív definit), ha $x < 1$, azaz, ha $b_1 < b_2$, ha ez teljesül, akkor az ilyen típusú állapotok (meta?)stabilak. Ehhez a típusú állapothoz tartozó szabad energia pedig: $F\left(m_x^{(1)},0,0\right) = f_0 - a_0^2\left(T - T_C\right)^2 \cdot \frac{1}{b_1}$.

3. Kettő nem nulla

Az ilyen típusú állapotok közül is kiválasztunk egyet: $m_x = m_y = \sqrt{\frac{2a_0(T_C - T)}{b_1 + b_2}}$

$$F''\left(m_x^{(2)}, m_y^{(2)}, 0\right) = 2a_0\left(T_C - T\right)\cdot\frac{b_2}{b_1+b_2}\begin{pmatrix} 2x & 2 & 0 \\ 2 & 2x & 0 \\ 0 & 0 & 1-x \end{pmatrix}$$

ez akkor pozitív definit ($T < T_C$ esetben), ha minden főminora pozitív, azaz az alábbi egyenlőtlenségeknek kell egyszerre teljesülniük:

$$\begin{aligned} 2x &> 0 \\ 4x^2 - 4 &> 0 \\ (1-x)\cdot\left(4x^2-4\right) &> 0 \end{aligned}$$

ezek közül az utolsó egyenlőtlenség nem teljesül semmilyen pozitív x-re, ugyanis a bal oldala $x \to \infty$, akkor tart a mínusz végtelenhez, és $x = 1$-ben kétszere gyöke van (alulról érinti a vízszintes tengelyt), a másik gyökhelye pedig $x = -1$-ben van. Tehát ez a mátrix minden pozitív x-re indefinit, ami azt jelenti, hogy az ilyne típusú állapotok nyeregpontjai a szabadenergiának.

Az ide tartozó szabad energia: $F\left(m_x^{(2)}, m_y^{(2)}, 0\right) = f_0 - a_0^2\left(T - T_C\right)^2\cdot\frac{2}{b_1+b_2}$.

4. Egyik sem nulla

Egy ilyen típusú állapot az $m_x = m_y = m_z = \sqrt{\frac{2a_0(T_C-T)}{b_1+2b_2}}$

$$F''\left(m_x^{(3)}, m_y^{(3)}, m_z^{(3)}\right) = 2a_0\left(T_C - T\right)\cdot\frac{b_2}{b_1+2b_2}\begin{pmatrix} 2x & 2 & 2 \\ 2 & 2x & 2 \\ 2 & 2 & 2x \end{pmatrix}$$

a kritikus hőmérséklet alatt ez akkor pozitív definit, ha az alábbi egyenlőtlenségek állnak fenn a főminorokra:

$$\begin{aligned} 2x &> 0 \\ 4x^2 - 4 &> 0 \\ 8x^3 + 2\cdot 8 - 3\cdot 8x &> 0 \end{aligned}$$

Ezek közül az első automatikusan teljesül pozitív x-ekre. A második akkor igaz, ha $x > 1$. A harmadik pedig, mivel a bal oldalon egy növekvő harmadfokú függvény áll, melynek egyszeres gyöke -2, kétszeres gyöke pedig az 1, az 1-et leszámítva minden pozitív x-re teljesül.

Az ide tartozó szabad enrgia: $F\left(m_x^{(3)}, m_y^{(3)}, m_z^{(3)}\right) = f_0 - a_0^2\left(T - T_C\right)^2\cdot\frac{3}{b_1+2b_2}$

Degenerált eset

$b_1 = b_2\,(= b)$, ekkor a fentebb tárgyalt gömbön helyezkednek el az állapotok, melyek szabad energiája mind megyezik, ami a stabilitás szempontjából azt jelenti, hogy az érintő irányú fluktuációkra nem reagál a rendszer, azaz a szömszédos állapotok irányában indifferens az egyensúly. Kérdés, hogy vajon radiális irányban stabil-e, ehhez a szabad energia az átalakított alakját érdemes $|m|$ szerint kétszer deriválni:

$$\frac{d^2}{d|m|^2}F\left(m\right) = -2a_0\left(T_C - T\right) + 3bm^2$$

Behelyettesítve az állapotok gömbjének sugarát: $m^* = \sqrt{\frac{2a_0(T_C-T)}{b}}$

$$\frac{d^2}{d|m|^2}F\left(m^*\right) = 4a_0\left(T_C - T\right)$$

ami pozitív, ha kritikus hőmérséklet alatt vagyunk.

Összegzés

Az alábbi táblázatban összefoglaljuk az eddigi számítások eredményeit $T < T_C$ esetre:

	$x = \frac{b_1}{b_2}$	< 1		$= 1$		> 1	
típus	multiplicitás	stabilitás	F	stabilitás	F	stabilitás	F
$(0,0,0)$	1	inst.	MAX	inst.	MAX	inst.	MAX
$(m,0,0)$	6	STABIL	MIN	STABIL (indiff.)	MIN	inst.	nyeregpont
$(m,m,0)$	12	inst.	nyeregpont	STABIL (indiff.)	MIN	inst.	nyeregpont
(m,m,m)	8	inst.	nyeregpont	STABIL (indiff.)	MIN	STABIL	MIN

Tehát b_1 és b_2 egymáshoz viszonyított értékétől úgy függ a kialakuló egyensúlyi állapot, hogy:

1. Ha $b_1 < b_2$, akkor a 6 multiplicitású kocka lapközéppontokon elhelyezkedő állapotok valamelyike alakul ki stabilan.

2. Ha $b_1 > b_2$, akkor a 8 multiplicitású kocka csúcsokon elhelyezkedő állapotok valamelyike alakul ki stabilan.

3. Ha $b_1 = b_2$, akkor pedig egy gömszimmetrikusan elhelyezkedő állapotseregből választódik ki az egyensúlyi állapot, amely azonban a legkisebb zavar hatására is képes egy szomszédos (de szintén a gömbön helyet foglaló) állapotba átmenni.

5. Feladat

A gömbök állandósult sebességét az egyensúlyi mozgásegyenletből határozhatjuk meg:

$$0 = \rho\frac{4\pi}{3}a^3 g - \rho_0\frac{4\pi}{3}a^3 g - 6\pi\eta a v \quad \Rightarrow \; v = \frac{2}{9}\cdot\frac{\rho-\rho_0}{\eta}\cdot a^2 g$$

ahol ρa gömb sűrűsége, ρ_0 a víz sűrűsége, a a gömb sugara, g a nehézségi gyorsulás, η pedig a víz dinamikai viszkozitása.

Így a süllyedési idő: $t = \frac{h}{v}$, amiből az oldalirnyú kitérés a diffúziós állandóval kifejezve:

$$R = \sqrt{2Dt} = \sqrt{2\cdot\frac{k_B T}{3\pi\eta a}\cdot t}$$

Innen kifejezve a hőmérsékletet:

$$T = \frac{3\pi}{2}\cdot\frac{\eta a}{k_B}\cdot\frac{R^2}{h}\cdot v = \frac{3\pi}{2}\cdot\frac{\eta a}{k_B}\cdot\frac{R^2}{h}\cdot\frac{2}{9}\cdot\frac{\rho-\rho_0}{\eta}\cdot a^2 g = \frac{\pi}{3}\cdot\frac{a^3}{k_B}\cdot\frac{R^2}{h}\cdot(\rho-\rho_0)\cdot g$$
$$= \frac{\pi}{3}\cdot\left(10^{-5}\right)^3\frac{1}{1.38\cdot 10^{-23}}\cdot\frac{\left(10^{-3}\right)^2}{10}\cdot(1002-1000)\cdot 9.81 = 149\,K$$

Ez a víz fagyáspontjánál alacsonyabb, ami elvben nem lenne probléma, mert a viszkozitás kiesik az egyenletből, de a jégben történő mozgásra lévén szilárd test nem érvényes a közegellenállási erő Stokes-féle alakja, ezért értelmetlen kiszámolni jégre ugyanezt, mert ott a süllyedési sebesség egzaktul nulla lenne.