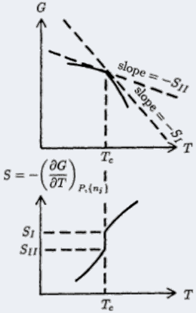
Teoría de Landau de las transiciones de fase

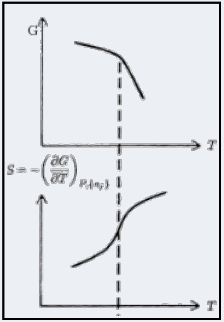
Lectura: K. Huang Cap. 17, R. K. Pathria & P. D. Beale, Cap. 12., L. E. Reichel, Cap. 3.

» Introducción

- Teoría fenomenológica.
- Para el entorno del punto crítico.
- Para transiciones de fase continuas.
- Hay un parámetro de orden y un cambio de simetría.



1er Orden



2do Orden

» La función de partición

Supongamos un sistema con un parámetro de orden m en un H externo, la función de partición,

$$Z_G(H,T) = e^{-\beta G(H,T)} = \int \mathcal{D}m\, e^{-F[m,H,T]}$$

donde $F[m,H]$ es un Hamiltoniano efectivo (divido $k_B T$) y está pensado como una funcional de $m(x)$.En general, si tiene una dependencia espacial

$$F[m(x),H(x)] = \int \boxed{f[m(x),H(x),T]}\, dx$$

El equilibrio del sistema está dado por $m = \bar{m}$ tal que

$$\left.\frac{\partial f}{\partial m}\right|_{m=\bar{m}} = 0 \qquad \text{y} \qquad \left.\frac{\partial^2 f}{\partial m^2}\right|_{m=\bar{m}} > 0$$

Y entonces $\beta G(H,T) = F[m,H,T]\Big|_{m=\bar{m}}$.

» Recordemos Bragg-Williams

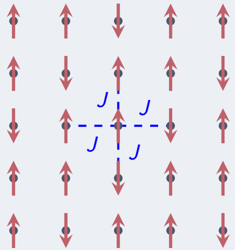
La aproximación de BW establecía

$$Z = e^{-\beta F} = \sum_{\mu_s} e^{-\beta E_s} \simeq \int dL\, g(L)\, e^{-\beta E^{\mathrm{BW}}(L)} = \int dL\, \exp\left[-\overbrace{\beta\left(E^{\mathrm{BW}} - k_B T \ln g(L)\right)}^{F[L,H,T]}\right]$$

Aproximación de campo medio

$$P_2(+,+) = [P(+)]^2 \to N_{++}/(\gamma N/2) = (N_+/N)^2$$

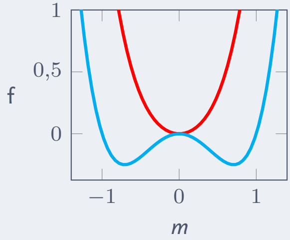
$$E^{\mathrm{BW}}(L) = N\left[-\mu_0 H L - \frac{\gamma J}{2} L^2\right]$$



» Landau

Landau postula un desarrollo en potencias del parámetro de orden m cerca de la transición de fase

$$f(m,T,Y) = f_0(T,Y) + \frac{1}{2}\phi_2(T,Y)\,m^2 + \frac{1}{4}\phi_4(T,Y)m^4 + \mathcal{O}(m^6)$$



que respeten las simetrías y el carácter del parámetro de orden. Donde Y representan otros parámetros termodinámicos (e.g., p, V).

En la aproximación de Landau $\phi_4 = \text{constante} = b > 0$. Así, el equilibrio corresponde a

$$\frac{\partial f}{\partial m} = 0 = m\phi_2(T,Y) + bm^3 = m\left(\phi_2(T,Y) + bm^2\right)$$

Entonces, tenemos dos tipos posibles de soluciones, $m = 0$ (no hay orden, magnetización en el caso de Ising), o si $\phi_2(T,Y) < 0$, entonces hay magnetización $m(T,Y) = \pm\sqrt{-\phi_2(T,Y)/b} \neq 0$.

La temperatura crítica T_c queda determinada por la condición $\phi_2(T_c, Y) = 0$, y es usual hacer un desarrollo de Taylor en ϕ_2 alrededor de T_c y escribir directamente $\phi_2(T, T) = a_0(Y)(T - T_c(Y))$. En ese caso,

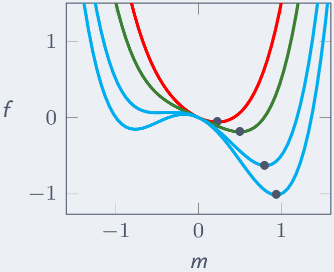
$$m(T) = \begin{cases} 0 & T > T_c \\ \sqrt{\frac{a_0}{b}|T - T_c|} & T < T_c \end{cases}$$

Lo que muestra que el exponente crítico del parámetro de orden (llamado β) es $\beta = 1/2$. Evaluando la energía libre para $T < T_c$ uno verifica que el estado con $m \neq 0$ es de hecho de menor energía libre que aquel con $m = 0$, y por lo tanto es el que se realiza termodinámicamente.
Finalmente, podemos calcular el calor específico correspondiente $C_Y \propto -T\frac{\partial^2 f}{\partial T^2}$ para encontrar que el C_Y es discontinuo, mientras que la entropía (que es una derivada primera de la energía libre) es continua.

» En presencia de un campo externo

Si uno mantiene el campo encendido, la teoria de Landau me sirve tambien para estudiar la susceptibilidad magnética. Incorporando el costo energético adicional $f \to f - \beta H m$

$$f = f_0 + \frac{1}{2}\phi_2 m^2 + \frac{1}{4}\phi_4 m^4 - m\beta H \quad \Rightarrow \frac{\partial f}{\partial m} = -\beta H + \phi_2 m - + \phi_4 m^3 = 0$$



Derivando implícitamente la ecuación respecto de H uno encuentra la susceptibilidad χ, que en el límite de $H \to 0$ vale

$$\chi = \frac{\beta}{a_0(T - T_c) + 3bm_0^2}, \quad \text{con } m_0 \text{ la magnetizacion para } H = 0.$$

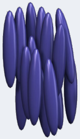
Y por lo tanto, el exponente crítico correspondiente queda determinado y es -1.

» Comentario: Las simetrías

Dependiendo de las simetrías del problema, cambia la funcional, por ejemplo:

- Ferromagneto de Heisenberg, el spin apunta a cualquier lado $\boldsymbol{m}$, si hay simetria esférica, solo potencias de $\boldsymbol{m} \cdot \boldsymbol{m}$,

$$f = f_0 + a\boldsymbol{m} \cdot \boldsymbol{m} + b(\boldsymbol{m} \cdot \boldsymbol{m})^4 + \cdots$$

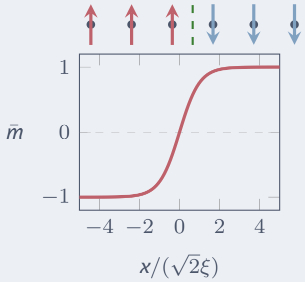


- Cristales líquidos nemáticos: formadas por moléculas alargadas, descritas por un tensor Q,

$$f = f_0 + a\,\mathrm{Tr}(Q^2) + b\,\mathrm{Tr}(Q^3) + c\,\left[\mathrm{Tr}(Q^2)\right]^2 + \cdots$$

» La energía libre de Ginzburg-Landau

El parámetro de orden puede tener una distribución no uniforme, y para tratarlo dentro de Landau, agregamos un término en la energía $\frac{1}{2}\kappa|\nabla m|^2$



El problema ahora se resuelve minimizando la funcional, ahora de Ginzburg-Landau, $F[m(x)]$ con las condiciones de contorno fijas. Esto es análogo a la minimización funcional de la acción en mecánica clásica, que da lugar a las ecuaciones de Euler-Lagrange. En nuestro caso y en 1D, eso se lee

$$\frac{\partial F}{\partial m} - \frac{d}{dx}\frac{\partial F}{\partial m'} \quad \Rightarrow \quad am + bm^3 - \kappa m'' = 0$$

Imponiendo las condiciones de contorno $m(\pm\infty) = \pm m_0$ con m_0 la solución del problema uniforme, uno encuentra

$$f(x) = \tanh(x/\sqrt{2}\xi) \quad \xi = \sqrt{\kappa/a_0|T - T_c|}$$

ξ nos proporciona una longitud típica del ancho de la pared del dominio magnético, donde los espines se correlacionan. Mostrando nuevamente que cuando $T \simeq T_c$ esa longitud diverge.

» Otro ejemplo: velocidad crítica en superfluidez

Supongamos la energía libre de un condensado/superfluido con parámetro de orden complejo ψ

$$F[\psi(x)] = \int dx \left[f_0 + \frac{a_0}{2}(T - T_c)|\psi|^2 + \frac{b}{4}|\psi|^4 + \kappa|\nabla\psi|^2 \right]$$

Si el parámetro de orden posee una velocidad uniforme v_s, $\psi = |\psi| e^{i\frac{mv_s}{\hbar}\cdot r}$, la solución en sencilla. El costo adicional de energía proveniente de $\kappa\nabla^2\psi$, tomando como $\kappa = \hbar^2/2m$ es directamente, $|\psi|^2 \frac{1}{2} m v_s^2$. Con lo cual el problema es análogo al problema uniforme con un a_0 cambiado en mv_s^2. Así, la temperatura crítica en presencia de este superflujo está determinada por

$$a_0(T_c - T_c^0) + mv_s^2 = 0, \quad \rightarrow \quad T_c = T_c^0 - \frac{mv_s^2}{a_0}$$

donde T_c^0 es la temperatura critica en ausencia de superflujo. Esto muestra que a mayor v_s la temperatura crítica disminuye (hay que enfriar más), y si es $mv_s^2 > a_0 T_c^0$ no habrá transición al superfluido.