تقریب میدان متوسط

وحیدکریمی پور- دانشکده فیزیک - دانشگاه صنعتی شریف

۷ آبان ۱۳۹۲

۱ مقدمه

در درس گذشته دیدیم که فرض مقیاس پذیری ویدام در توصیف جنبه هایی از پدیده های بحرانی موفق است به این معنا که می تواند روابطی را بین نماهای بحرانی پیش بینی کند که با تجربه توافق دارند. این روابط مستقل از نوع ماده و نوع گذار فاز برقرار هستند و بنابراین نشانه ای از عمومیت در آنها دیده می شود که به معنای موفقیت نسبی نظریه ویدام است. اما این نظریه ساده چند ضعف اساسی دارد. نخست این که هیچ چیز در باره افت و خیزها و واگرایی آنها و در نتیجه نماهای آنها به ما نمی گوید. دوم آنکه هیچ گونه سازو کاری برای محاسبه نماهای بحرانی بدست نمی دهد. بنابراین گام بعدی این است که از یک مدل میکروسکوپی شروع کنیم و از سازو کار قدرتمند مکانیک آماری ، همانطوری که همواره انتظار داشته ایم ، استفاده کنیم و خواص مدل را به دقت محاسبه کنیم. نتایج این محاسبه نه تنها می بایست اثباتی برای عمومیت بدست بدهد بلکه می بایست بتواند نماهای بحرانی را نیز محاسبه کند. نکته ای که وجود دارد این است که حل دقیق یک مدل میکروسکوپی که از ذرات برهم کنش دار تشکیل شده است بسیار دشوار و در بسیاری از موارد غیرممکن است. به همین دلیل در گام اول از یک روش تقریبی موسوم به تقریب میدان متوسط استفاده می کنیم.

۲ نظریه میدان متوسط

برای توصیف نظریه میدان متوسط [1] بازهم گذار فاز فرومغناطیسی را در نظر می گیریم. هامیلتونی ای که برهم کنش های دوقطبی ها را با یکدیگر و با میدان خارجی توصیف می کند به شکل زیر است:

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j - h \sum_i S_i, \tag{۱}$$

به این ترتیب یک اسپین (یا دوقطبی) هم تحت تاثیر میدان خارجیh است و هم تحت تاثیر اسپین های دیگر. برای محاسبه تمام خواص این سیستم بس ذره ای کافی است که تابع پارش را حساب کنیم که به صورت زیر است:

$$Z = \sum_{\{S_i\}} e^{\beta J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j + \beta h \sum_i S_i}, \tag{۲}$$

در این جا فرض خاصی در باره نوع شبکه ای که اسپین ها روی آن قرار گرفته اند نکرده ایم. این شبکه می تواند یک یا چند بعدی باشد. نوع شبکه می تواند منظم یا بی نظم باشد. محاسبه دقیق این تابع پارش، چنانکه می دانیم، غیرممکن است مگر در موارد بسیار استثنایی. بنابراین به یک تقریب متوسل می شویم که به آن تقریب میدان متوسط می گوییم. برای توصیف تقریب میدان متوسط چندین راه وجود دارد . ما ساده ترین و سرراست ترین راه را انتخاب می کنیم.

اگر مجموعه همسایه های اسپین i ام را با N_i نشان دهیم

می توانیم در درون تابع پارش بنویسیم:

$$\sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j = \sum_i S_i \sum_{j \in N_i} S_j \tag{۳}$$

اگر تعداد اسپین های همسایه را با z نشان دهیم می توانیم عبارت بالا را به شکل زیر بنویسیم

$$\sum_{j \in N_i} S_j = z \frac{\sum_{j \in N_i} S_j}{z} \approx z \langle S \rangle = zm \tag{۴}$$

[1] Mean Field Theory

که در آن

$$m := \frac{1}{z}\sum_{j\in N_i} S_j \tag{۵}$$

مغناطش متوسط دوقطبی های همسایه است. بنابراین تابع پارش به صورت زیر در می آید

$$Z \approx \sum_{\{S_i\}} e^{\beta \sum_i S_i(Jzm+h)}, \tag{۶}$$

حال پارامتر m را با متوسط گرمایی اسپین ها عوض می کنیم یعنی قرار می دهیم

$$\langle s\rangle = m. \tag{۷}$$

این پارامتر را می بایست بعدا یعنی بعد از محاسبه تابع پارش حساب کنیم ولی در حین محاسبه تابع پارش آن را یک پارامتر ثابت می گیریم. به این ترتیب مساله بس ذره ای اولیه تحت این تقریب به یک مساله تک ذره ای تبدیل شده است زیرا این تابع پارش مربوط به مجموعه ای از اسپین های بدون برهم کنش است که هرکدام در یک میدان خارجی برابر با $Jzm+h$ قرار گرفته اند. بخشی از این میدان، همان میدان خارجی و بخش دیگری از آن میدان متوسطی است که ناشی از تاثیر اسپین های مجاور است. به همین دلیل نام این تقریب نیز تقریب میدان متوسط است. مثل هر مساله دیگری که مربوط به سیستم های بدون برهم کنش است تابع پارش به سادگی حساب می شود و داریم:

$$Z \approx {Z_1}^N \tag{۸}$$

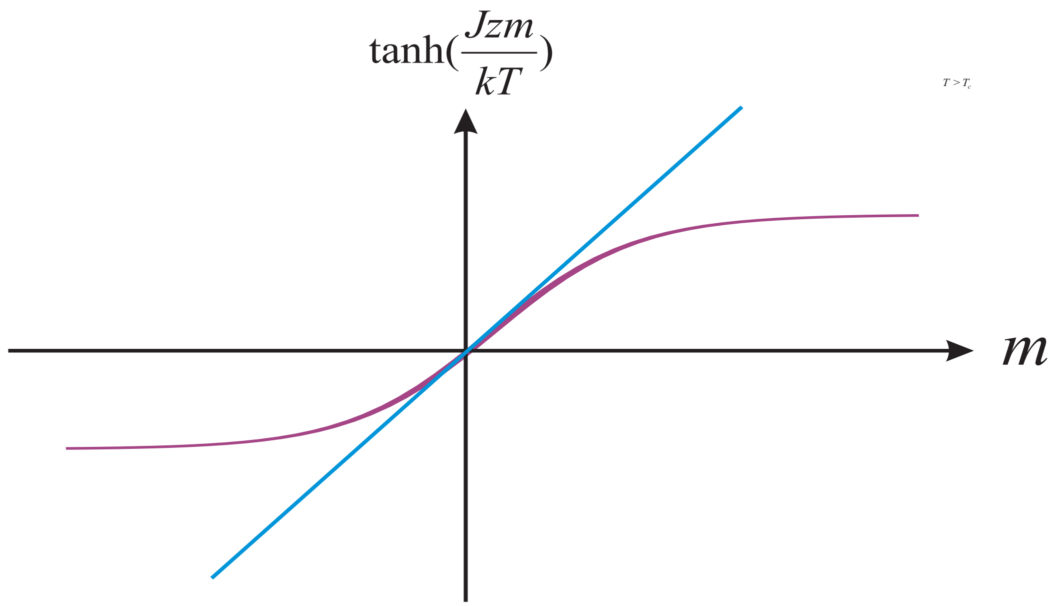
که Z_1 تابع پارش تک ذره ای است

$$Z_1 = \sum_{\{S_i=\pm1\}} e^{\beta S_i(Jzm+h)} = 2\cosh(Jzm+h), \tag{۹}$$

مقدار m می بایست از شرط سازگاری این تقریب بدست آید به این معنا که :

$$m = \frac{1}{N}\frac{\partial}{\partial \beta h}\ln Z = \tanh\beta(Jzm+h). \tag{۱۰}$$

این رابطه در واقع معادله حالت سیستم مغناطیسی را نشان می دهد که m ، h و T را به هم مرتبط می کند. به ازای هر مقدار ثابت h می توان این معادله را به شکل گرافیک حل کرد و مقدار m را برحسب h و T پیدا کرد. اگر بخواهیم مغناطش



شکل ۱: وقتی که دما بیشتر از دمای بحرانی است. 11 حل گرافیکی معادله

خودبخود یعنی مغناطشی را که در میدان مغناطیسی صفر وجود دارد پیدا کنیم می بایست این معادله را در $h = 0$ حل کنیم یعنی می بایست معادله

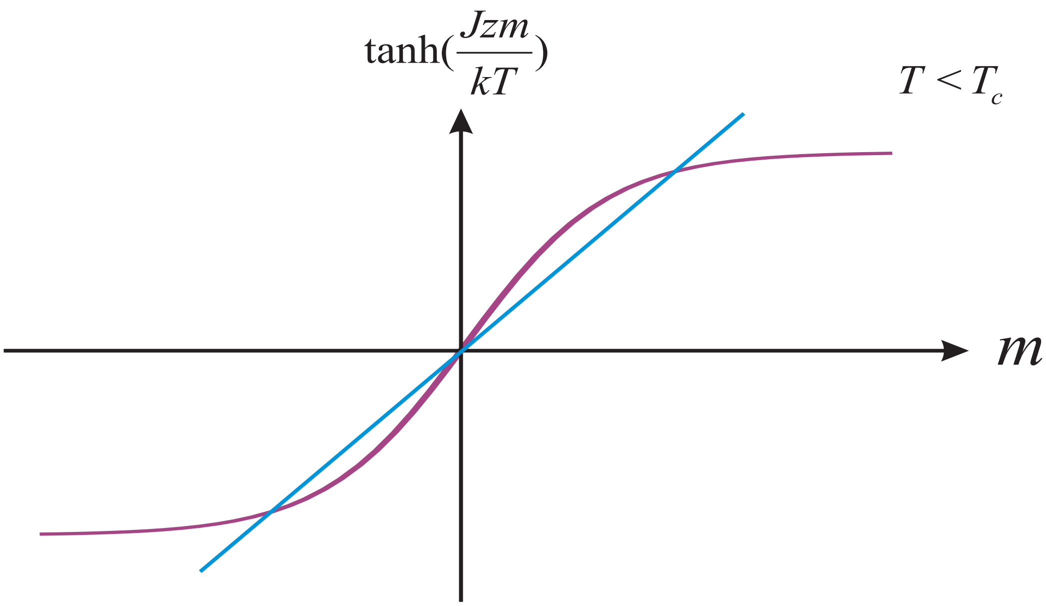
$$m = \tanh \beta Jzm \tag{۱۱}$$

را حل کنیم.

برای تعیین نقطه تقاطع می بایست مشتق تابع $\tanh \beta Jzm$ را در $m = 0$ تعیین کنیم. این مشتق برابر است با βJz . هرگاه این مشتق بیشتر از یک باشد، معادله بالا حل هایی غیر صفر نیز دارد، شکل ۲ ولی اگر این مشتق کمتر از یک باشد فقط حل صفر برای m وجود دارد، شکل ۲ . به این ترتیب می توان دمای بحرانی ای را که در کمتر از آن مغناطش خود بخود بوجود می آید پیدا کنیم. این دما برابر است با:

$$T_c := \frac{Jz}{k} \tag{۱۲}$$

شکل های ۲ و ۲ نشان می دهند که در دمای پایین تر از T_c مغناطش خود بخود رخ می دهد. دمای گذار به z یعنی تعداد همسایه ها و J بستگی دارد. بنابراین در تقریب میدان متوسط در هر بعدی همواره مغناطش خود بخود در پایین تر از یک دمای



شکل ۲: وقتی که دما کمتر از دمای بحرانی است. ۱۱ حل گرافیکی معادله

بحرانی رخ می دهد. هم چنین در این تقریب می توان دمای بحرانی را برحسب پارامترهای میکروسکوپی یعنی تعداد همسایه ها و شدت برهم کنش بدست آورد.

۳ تقریب میدان متوسط برای سیستم ناهمگن

در بخش قبلی تقریب میدان متوسط را برای یک سیستم همگن به کار بردیم. حال سیستمی را در نظر می گیریم با هامیلتونی زیر:

$$H = -\sum_{i,j} J_{ij} S_i S_j - \sum_i B_i S_i, \tag{۱۳}$$

که در آن J_{ij} ثابت جفتیدگی اسپین های S_i و S_j است و B_i نیز میدان مغناطیسی در نقطه i است. برای چنین سیستمی نیز می توان تقریب میدان میانگین بکار برد. می نویسیم:

$$\begin{aligned} Z &\approx \sum_{\{S\}} e^{\beta \sum_{i,j} J_{i,j} S_i m_j - \sum_i B_i S_i} = \sum_{\{S\}} e^{\sum_i \beta(\sum_j J_{ij} m_j + B_i) S_i} \\ &= \prod_i \sum_{S_i} e^{\beta(\sum_j J_{ij} m_j + B_i) S_i} = \prod_i \left[2\cosh\beta(\sum_j J_{ij} m_j + B_i) \right]. \end{aligned} \tag{۱۴}$$

پارامتر های m_i به شکلی که در تقریب میدان میانگین وارد شده اند می بایست همان متوسط مقدار اسپین ها باشند یعنی اینکه $m_i = \langle S_i \rangle$. از طرفی می دانیم که متوسط اسپین S_i را به طریق دیگری نیز می توانیم بدست بیاوریم به این معنا که قرار دهیم

$$m_i = \langle S_i \rangle = \frac{\partial \ln Z}{\partial \beta B_i}. \tag{۱۵}$$

از رابطه ۱۴ بدست می آوریم:

$$m_i = \tanh\beta(\sum_j J_{ij} m_j + B_i). \tag{۱۶}$$

به این ترتیب تعداد N معادله غیرخطی کوپل شده بدست می آوریم که حل آنها مقادیر m_i را نهایتا بدست می دهند.

۴ محاسبه نماهای بحرانی

می توان در تقریب میدان متوسط نماهای بحرانی را به ترتیب زیر محاسبه کرد. نخست توجه می کنیم که در نزدیکی نقطه بحرانی m و h مقادیر کوچکی دارند. بنابراین نخست معادله ۱۰ را به صورت زیر می نویسیم

$$\beta(Jzm + h) = \tanh^{-1} m \tag{۱۷}$$

می نویسیم و سپس از بسط تیلور زیر استفاده می کنیم

$$\tanh^{-1}(m) = m + \frac{1}{3}m^3 + \frac{1}{5}m^5 + \cdots \tag{۱۸}$$

تا رابطه ۱۰ را به صورت زیر بنویسیم:

$$m + \frac{1}{3}m^3 \approx \frac{T_c}{T}m + \frac{h}{kT}. \qquad (۱۹)$$

و یا

$$\frac{T_c - T}{T}m \approx frac13m^3. \qquad (۲۰)$$

از این رابطه می توانیم چند تا از نماهای بحرانی را به صورت زیر حساب کنیم.

۱.۴ نمای بحرانی β

در رابطه ۲۰ قرار می دهیم $h = 0$ که دراین صورت بدست می آوریم

$$m^2 = 3\left(\frac{T_c - T}{T}\right). \qquad (۲۱)$$

این رابطه نشان می دهد که نمای بحرانی β برابر است با $\beta = \frac{1}{2}$.

۲.۴ نمای بحرانی δ

در رابطه ۱۰ قرار می دهیم $T = T_c$ که در نتیجه آن بدست می آوریم

$$m \approx h^{\frac{1}{3}}. \qquad (۲۲)$$

و یا $\delta = 3$.

۳.۴ نماهای بحرانی γ و γ'

از رابطه ۱۰ نسبت به h مشتق می گیریم و بدست می آوریم:

$$\frac{T_c}{T}\chi + \frac{1}{kT} \approx \chi + m^2\chi. \tag{۲۳}$$

حال دقت می کنیم که اگر $T > T_c$ باشد ، مقدار m برابر با 0 است و درنتیجه خواهیم داشت

$$\chi = \frac{1}{k(T - T_c)} \tag{۲۴}$$

و اگر $T < T_c$ باشد ، مقدار m برابر است با $m^2 = 3\frac{T_c - T}{T}$ که در نتیجه آن خواهیم داشت

$$\frac{T_c - T}{T} + \frac{1}{kT} = 3\frac{(T_c - T)}{T}\chi \tag{۲۵}$$

و یا پس از ساده کردن

$$\chi = \frac{1}{2k(T - T_c)}. \tag{۲۶}$$

بنابراین در هر دو حالت یعنی هم بالای نقطه بحرانی هم پایین نقطه بحرانی نمای مربوطه برابراست با یک:

$$\gamma = \gamma' = 1. \tag{۲۷}$$

اما باید دقت کنیم که ضرایب $T - T_c$ در بالا و پایین دمای بحرانی با هم متفاوت هستند.

۴.۴ نمای بحرانی α و α'

-—————————

$$H = -J\sum_{\langle i,j\rangle}\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j - \mathbf{h}\cdot\sum_i \mathbf{S}_i, \tag{۲۸}$$

$$Z = \int d\mathbf{S}_1 \cdots d\mathbf{S}_N e^{-\beta H} \approx Z = \int d\mathbf{S}_1 \cdots d\mathbf{S}_N e^{\beta \mathbf{S}_i \cdot (Jz\mathbf{m}+\mathbf{h})} = \ddagger^N \tag{۲۹}$$

$$\ddagger = \int d\mathbf{S} e^{\beta \mathbf{S}_i \cdot (Jz\mathbf{m}+\mathbf{h})} \tag{۳۰}$$

$$\ddagger = \int d\phi d\cos\theta e^{|\mathbf{n}|\cos\theta} = 4\pi \frac{\sinh|n|}{|n|} \tag{۳۱}$$

$$\ddagger = 4\pi \frac{\sinh|\beta(Jz\mathbf{m}+\mathbf{h})|}{|\beta(Jz\mathbf{m}+\mathbf{h})|} \tag{۳۲}$$

$$m = \coth\beta(Jzm+h) - \frac{1}{\beta(Jzm+h)} \tag{۳۳}$$

۵ مدل آیزینگ با برهم کنش های دوربرد

مطالعه مدل آیزینگ بابرهم کنش های دوربرد از این نقطه نظر جالب است که نشان می دهد چرا تقریب میدان متوسط وقتی که تعداد همسایه ها بی نهایت می شوند تبدیل به یک حل دقیق می شود. هامیلتونی این مدل به صورت زیراست:

$$H = -\frac{J}{N}\sum_{i,j} S_i S_j - B\sum_i S_i, \tag{۳۴}$$

که در آن برهم کنش بین همه اسپین هاست. دقت کنید که به دلیل این که هیچ نوع همسایگی برای اسپین ها در این جا تعریف نشده است نمی توان گفت که این مدل چندبعدی است. ولی اصطلاحا می توان گفت که بدلیل این که هر نقطه با همه نقاط دیگر همسایه است مثل این است که این شبکه یک شبکه بی نهایت بعدی است. البته این فقط یک اصطلاح است و نمی بایست از ان تعبیر هندسی خاصی بدست داد. هم چنین باید دقت کنید که ثابت جفتیدگی به صورت $\frac{J}{N}$ تعریف شده است، چرا

که فقط در این صورت است که انرژی یک کمیت فزونور و متناسب با N خواهد بود.

تمرین: با توجه به شکل هامیلتونی و تعداد همسایه های هر اسپین نشان دهید که ادعای فوق درست است.

تابع پارش این مدل برابراست با:

$$Z = \sum_{\{S_i\}} e^{\beta J \sum_{i,j} S_i S_j + \beta B \sum_i S_i} \tag{۳۵}$$

اگر تقریب میدان میانگین را به کار ببریم می توانیم با تعریف

$$m := \frac{1}{N} \sum_i S_i \tag{۳۶}$$

می توانیم بنویسیم

$$Z \approx \sum_{\{S_i\}} e^{\sum_{i=1}^{N} (Jm+B) S_i} = \left(2\cosh(\beta(Jm+B))\right)^N, \tag{۳۷}$$

که در آن بنابرتقریب میدان متوسط m را می بایست همان متوسط گرمایی اسپین در نظر گرفت یعنی اینکه

$$\langle S_i \rangle = m. \tag{۳۸}$$

تا اینجا تابع پارش را با استفاده از تقریب میدان میانگین بدست آورده ایم. حال تابع پارش را به صورت دقیق محاسبه می کنیم. تابع پارش را می توانیم به صورت زیر بنویسیم:

$$Z = \sum_{\{S_i\}} e^{\beta \frac{J}{N} (\sum_{i=1}^{N} S_i)^2 + \beta B \sum_{i=1}^{N} S_i} \tag{۳۹}$$

برای این که بتوانیم این جمع را انجام دهیم می بایست کاری کنیم که در همه جای تابع پارش عبارت $\sum_i S_i$ با توان یک ظاهر شود. برای این کار از اتحاد زیر در مورد انتگرال های گاووسی استفاده می کنیم:

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{1}{2}ax^2 + bx} = \sqrt{\frac{2\pi}{a}} e^{\frac{b^2}{2a}} \tag{۴۰}$$

و با استفاده از ان می نویسیم:

$$e^{\beta\frac{J}{N}(\sum_{i=1}^{N}S_i)^2}=\sqrt{\frac{4\pi\beta J}{N}}\int_{-\infty}^{\infty}dxe^{-\frac{1}{2}\frac{N}{2\beta J}x^2+x\sum_{i=1}^{N}S_i}. \qquad (۴۱)$$

در نتیجه تابع پارش به صورت زیر در می آید:

$$Z=\sqrt{\frac{4\pi\beta J}{N}}\sum_{\{S_i\}}\int_{-\infty}^{\infty}e^{-\frac{1}{2}\frac{N}{2\beta J}x^2+(x+\beta B)\sum_{i=1}^{N}S_i}. \qquad (۴۲)$$

حال می توانیم جمع روی اسپین ها را انجام داده و تابع پارش را به صورت زیر درآوریم:

$$Z=\sqrt{\frac{4\pi\beta J}{N}}\int_{-\infty}^{\infty}e^{-\frac{1}{2}\frac{N}{2\beta J}x^2}(2\cosh(x+\beta B))^N. \qquad (۴۳)$$

و یا

$$Z=\sqrt{\frac{4\pi\beta J}{N}}\int_{-\infty}^{\infty}e^{-\frac{1}{2}\frac{N}{2\beta J}x^2+N\ln(2\cosh(x+\beta B))}=\sqrt{\frac{4\pi\beta J}{N}}\int_{-\infty}^{\infty}e^{-Nf(x)} \qquad (۴۴)$$

که درآن

$$f(x)=\frac{1}{2\beta J}x^2-\ln(2\cosh(x+\beta B)). \qquad (۴۵)$$

برای N های به سمت بی نهایت می توان این انتگرال را به صورت دقیق و با استفاده از روش نقطه زینی حساب کرد. می دانیم که در این روش می توانیم بنویسیم

$$\int_{-\infty}^{\infty}e^{-Nf(x)}=\int_{-\infty}^{\infty}e^{-Nf(x_0)-\frac{N}{2}f"(x_0)(x-x_0)^2+\cdots}=e^{-Nf(x_0)}\int_{y=-\infty}^{y=\infty}dye^{\frac{N}{2}f"(x_0)y^2}=\sqrt{\frac{2\pi}{Nf"(x_0)}}e^{-Nf(x_0)}, \qquad (۴۶)$$

که در آن x_0 نقطه ای است که در آن $f(x)$ می نی مم است. بنابراین تابع پارش برابر است با:

$$Z=\sqrt{\frac{2\beta J}{f"(x_0)}}e^{-Nf(x_0)} \qquad (۴۷)$$

با توجه به شکل تابع $f(x)$ این نقطه از رابطه زیر بدست می آید:

$$\frac{x_0}{\beta J} = \tanh(x_0 + \beta B). \tag{۴۸}$$

بنابراین می توان با حل این معادله نخست مقدار x_0 را بدست آورد و سپس با قرار دادن آن در رابطه ۴۶ تابع پارش را حساب کرد. اما نشان خواهیم داد که نیازی به این کار نیست . نخست می بایست معنای فیزیکی پارامترx را روشن کنیم. برای این کار دقت می کنیم که با توجه به تعریف اولیه تابع پارش مغناطش متوسط برابراست با:

$$m := \frac{1}{N}\langle\sum_i S_i\rangle = \frac{1}{N}\frac{\partial}{\partial\beta B}\ln Z, \tag{۴۹}$$

که در آن مشتق نسبت به متغیر βB به عنوان یک متغیر مستقل گرفته می شود. (این کار برای سادگی است و می توان مشتق را نسبت به B گرفت به این معنا که قرار دهیم $m := \frac{1}{N}\langle\sum_i S_i\rangle = \frac{1}{N\beta}\frac{\partial}{\partial B}\ln Z.$ با توجه به رابطه ۴۷ بدست می آوریم:

$$m = \frac{\partial}{\partial\beta B}\left(-f(x_0)\right). \tag{۵۰}$$

در نوشتن این رابطه دقت کرده ایم که در حد $N \longrightarrow \infty$ جملاتی که متناسب با $\frac{1}{N}$ هستند به سمت صفر میل می کنند و بنابراین از نوشتن آنها صرف نظر کرده ایم. در نتیجه خواهیم داشت:

$$\begin{aligned} m &= \frac{\partial}{\partial\beta B}\left[\frac{-1}{2\beta J}x_0^2 + \ln(2\cosh(x_0+\beta B))\right] \\ &= \frac{-1}{\beta J}x_0\frac{\partial x_0}{\partial\beta B} + \tanh(x_0+\beta B)[\frac{\partial x_0}{\partial\beta B}+1]. \end{aligned} \tag{۵۱}$$

حال اگر بجای $\tanh(x_0+\beta B)$ از رابطه ۴۸ مقدار $\frac{x_0}{\beta J}$ را قرار دهیم به رابطه ساده زیر می رسیم:

$$m = \frac{x_0}{\beta J}. \tag{۵۲}$$

در نتیجه معادله ۴۸ به صورت زیر در می آید :

$$m = \tanh(\beta(Jm + B)). \tag{۵۳}$$

که همان معادله حالتی است که از تقریب میدان متوسط بدست آوردیم. به این ترتیب ثابت کرده ایم که در مدل آیزینگ با برهم کنش بلند برد و در حد ترمودینامیک یعنی حدی که $N \longrightarrow \infty$ تقریب میدان میانگین همان نتیجه ای را بدست می دهد که حل دقیق.

تمرین: برای مدل آیزینگ با برهم کنش های دوربرد دمای بحرانی و نماهای بحرانی α, β, γ وδ را بدست آورید.

۶ اصل آنتروپی ماکزیمم و تقریب میدان متوسط

اصل انتروپی ماکزیمم بیان می کند که در یک سیستم بسته هر فرآیندی که رخ می دهد (چه فرایندهای شبه تعادلی چه غیرتعادلی) همواره آنتروپی سیستم را افزایش می دهد یا ثابت نگاه می دارد و حالت تعادل حالتی است که انتروپی در آن به بیشترین مقدار خود رسیده باشد. یک بیان دیگر ازاین قضیه این است که در یک سیستم که در دمای معین قرار گرفته است هر فرایندی باعث می شود که انرژی آزاد سیستم ثابت باقی مانده یا کاهش یابد و در تعادل به حالتی می رسد که انرژی آزادش به کمترین مقدار خود رسیده باشد. هرگاه احتمال این که سیستم در حالت C باشد را با $P(C)$ نشان دهیم آنتروپی سیستم با تابع زیر نشان داده می شود:

$$S = -k \sum_C P(C) \ln P(C). \tag{۵۴}$$

سیستمی که در دمای T قرار گرفته است انرژی آزادش برابراست با

$$F = E - TS = \sum_C E(C) P(C) + kT \sum_C P(C) \ln P(C). \tag{۵۵}$$

هرگاه وردش این تابع را نسبت به $P(C)$ ها برابر با صفر قرار دهیم با یک محاسبه ساده بدست می آوریم که :

$$P(C) = \frac{1}{Z} e^{-\beta E(C)}, \tag{۵۶}$$

که همان تابع احتمال بولتزمن است. به این ترتیب از اصل انتروپی ماکزیمم می توانیم تابع احتمال بولتزمن را بدست بیاوریم. دقت کنید که وردش بالا را نسبت به تمامی توابع احتمال گرفته ایم و اگر وردش را در یک زیر مجموعه از توابع احتمال انجام

بدهیم چیزی که بدست می آوریم تقریبی از تابع انرژی آزاد است که مقدار آن بیشتر از مقدار واقعی است. حال این روش را برای مدل ایزینگ بکار می بریم.

عبارت ۵۵ را فقط در بین توابع احتمالی وردش می گیریم که از نوع ضربی باشند یعنی توابعی از جنس زیر:

$$P(S_1, S_2, \cdots S_N) = P(S_1)P(S_2)\cdots P(S_N). \qquad (۵۷)$$

به این ترتیب فرض کرده ایم که احتمال این که یک اسپین معین مقدار S را اختیار کند مستقل از دیگر اسپین ها برابر است با $P(S)$. اگر متوسط یک اسپین را با m نشان دهیم خواهیم داشت:

$$P(1) - P(-1) = m, \qquad P(1) + P(-1) = 1 \qquad (۵۸)$$

و در نتیجه

$$P(1) = \frac{1+m}{2}, \qquad P(-1) = \frac{1-m}{2} \qquad (۵۹)$$

و یا

$$P(S) = \frac{1+mS}{2}. \qquad (۶۰)$$

دراین صورت خواهیم داشت

$$E = \langle H \rangle = -J\sum_{\langle i,j \rangle}\langle S_i S_j \rangle - \sum_i B\langle S_i \rangle = -\frac{1}{2}JNzm^2 - NBm \qquad (۶۱)$$

و

$$S = -Nk\left(\frac{1+m}{2}\ln\frac{1+m}{2} + \frac{1-m}{2}\ln\frac{1-m}{2}\right). \qquad (۶۲)$$

و در نتیجه

$$F = -\frac{1}{2}JNzm^2 - NBm + NkT\left(\frac{1+m}{2}\ln\frac{1+m}{2} + \frac{1-m}{2}\ln\frac{1-m}{2}\right). \qquad (۶۳)$$

حال مقدار m را می خواهیم چنان انتخاب کنیم که F کمترین مقدار خود را اختیار کند. بنابراین مشتق F را نسبت به m مساوی صفر قرار می دهیم . بدست می اوریم:

$$Jzm + B = \frac{1}{2}\ln\frac{1+m}{1-m} \qquad (۶۴)$$

و یا با بازنویسی طرف راست

$$Jzm + B = \tanh^{-1} m. \qquad (۶۵)$$

که همان رابطه ای است که قبلا بدست آورده بودیم.

۷ اصل وردشی و تقریب میدان متوسط

می توان مطالبی را که در قسمت قبلی گفتیم به روش دیگری بفهمیم. فرض کنید که هامیلتونی یک سیستم به صورت زیر باشد:

$$H = H_0 + H_1, \qquad (۶۶)$$

که در آن H_0 یک هامیلتونی است که ما می توانیم تابع پارش آن را براحتی حساب کنیم. در این صورت می توانیم بنویسیم:

$$Z = \sum_C e^{-\beta H_0 - \beta H_1} = Z_0 \frac{\sum_C e^{-\beta H_0 - \beta H_1}}{Z_0}, \qquad (۶۷)$$

که درآن

$$Z_0 := \sum_C e^{-\beta H_0} \qquad (۶۸)$$

تابع پارش سیستمی با هامیلتونی H_0 است. دراین صورت می توانیم بنویسیم

$$Z = Z_0 \langle e^{-\beta H_1} \rangle_0, \qquad (۶۹)$$

که در آن $\langle , \rangle_0$ به این معنی است که این متوسط برای هامیلتونی H_0 حساب شده است. معمولا H_0 را آن قسمتی از هامیلتونی می گیریم که تابع پارش آن را می توانیم به صورت دقیق حساب کنیم. البته این امر الزامی نیست و تاثیری در بحثی که اکنون می کنیم ندارد. نکته مهم در ادامه استدلال این است که دقت کنیم تابع e^x یک تابع معقراست .

تمرین: با رسم شکل تابع e^x خودتان را قانع کنید که خاصیت زیر به ازای هر دو عدد p_1, p_2 که یک توزیع احتمال را تشکیل می دهند برقرار است:

$$p_1 e^{x_1} + p_2 e^{x_2} \geq e^{p_1 x_1 + p_2 x_2}. \qquad (۷۰)$$

تمرین: رابطه قبلی که فقط برای دو نقطه بود را به N نقطه تعمیم دهید و نشان دهید که به ازای هر تابع توزیع احتمال p خاصیت زیر برقراراست:

$$\sum_i p_i e^{x_i} \geq e^{\sum_i p_i x_i}. \tag{۷۱}$$

رابطه اخیر را می توان به صورت زیر نوشت :

$$\langle e^x \rangle \geq e^{\langle x \rangle}. \tag{۷۲}$$

این رابطه ، رابطه مهمی است که کاربردهای زیادی دارد. از جمله ترکیب آن با رابطه ۶۹ منجر به رابطه زیر می شود:

$$Z \geq Z_0 e^{-\beta \langle H_1 \rangle_0}, \tag{۷۳}$$

و یا پس از محاسبه لگاریتم طرفین

$$F \leq F_0 + \langle H_1 \rangle_0. \tag{۷۴}$$

به این ترتیب با جداسازی H به $H_0 + H_1$ همواره می توانیم تابعی پیدا کنیم که اگر چه خود انرژی آزاد نیست ولی یک حد بالا برای انرژی آزاد است. هرگاه در تابع H_0 پارامترهای اختیاری قرار دهیم و سپس مقدار کمینه $F_0 + \langle H_1 \rangle_0$ را نسبت به این پارامترها حساب کنیم حد بالای خوبی برای انرژی آزاد بدست می آوریم. هرچقدر که تعداد این پارامترها بیشتر باشد، و هرچقدرکه انتخاب آنها هوشمندانه تر باشد انتظارداریم که حدبالایی که برای انرژی آزاد بدست می آوریم به خود انرژی آزاد نزدیک تر باشد. با استفاده از این مقدمه می توانیم تقریب میدان متوسط را به عنوان یک روش وردشی به صورت بالا بفهمیم. بازهم مدل آیزینگ را در نظر می گیریم و قرار می دهیم:

$$\begin{aligned} H &= -J\sum_{\langle i,j\rangle} S_i S_j - B\sum_i S_i = -\lambda \sum_i S_i - J\sum_{\langle i,j\rangle} S_i S_j - (B-\lambda)\sum_i S_i \\ &= H_0 + H_1, \end{aligned} \tag{۷۵}$$

که در آن

$$H_0 = -\lambda \sum_i S_i, \qquad H_1 = -J\sum_{\langle i,j\rangle} S_i S_j - (B-\lambda)\sum_i S_i. \tag{۷۶}$$

که درآن λ یک پارامتر دلبخواهی است. فعلا این پارامتر هیچ معنای خاصی ندارد.

تمرین: نخست Z_0 و سپس F_0 را حساب کنید. نشان دهید که $Z_0 = (2\cosh(\beta\lambda))^N$. سپس نشان دهید که

$$\langle H_1\rangle_0 = -NJz\frac{1}{2}\tanh(\beta\lambda)^2 - NB\tanh(\beta\lambda). \quad (۷۷)$$

سپس مقدار λ را چنان اختیار کنید که عبارت $F_0 + \langle H_1\rangle_0$ کمینه شود. نشان دهید که تحت این شرایط رابطه زیر برقرار است:

$$m = \tanh(\beta(Jzm + B)) \quad (۷۸)$$

که در آن $m = \langle S_i\rangle$ مغناطش متوسط است.

۸ رابطه همبستگی و تابع پاسخ

تابع همبستگی بین دو اسپین یکی در نقطهi و دیگری در نقطه j به صورت زیر تعریف می شود:

$$\langle S_iS_j\rangle. \quad (۷۹)$$

این تابع همبستگی بیان می کند که چه مقدار S_i و S_j مثل هم هستند. هرگاه S_i و S_j مثل هم باشند این تابع مقدار بیشینه خود یعنی 1 را اختیار می کند. اما وقتی که چنین شباهتی کم باشد، این مقدار کوچک شده و در غیاب همبستگی کامل برابر با صفر می شود چرا که وقتی که یکی از اسپین ها مثلا S_i مقدار 1 را اختیار کرده است اسپین دوم یعنی S_j همانقدر 1 است که -1 است و درنتیجه این مقدار متوسط برابر با صفر می شود. تابع همبستگی متصل [۲] به صورت زیر تعریف می شود:

$$\langle S_iS_j\rangle_c := \langle S_iS_j\rangle - \langle S_i\rangle\langle S_j\rangle. \quad (۸۰)$$

[۲] Connected Correlation Function

این تابع همبستگی را بیشتر اوقات با $G(i,j)$ نیز نشان می دهیم. این تابع همبستگی از نظر فیزیکی خاصیت مهمی را نشان می دهد. قبل از توضیح این خاصیت به این نکته توجه می کنیم که این تابع در واقع همبستگی افت و خیز های اسپین را حول مقدار متوسط شان در دو نقطه i و j نشان می دهد. در واقع یک محاسبه ساده نشان می دهد که :

$$G(i,j) = \langle \delta S_i \delta S_j \rangle, \tag{۸۱}$$

که در آن $\delta S_i := S_i - \langle S_i \rangle$. حال به تعبیر فیزیکی این کمیت می پردازیم. برای این که بحث و استدلال ما کلی باشد هامیلتونی را به شکل زیر در نظر می گیریم:

$$H = \tilde{H}(S) - \sum_{i=1} B_i S_i \tag{۸۲}$$

که در آن $\tilde{H}(S)$ نشان دهنده هر نوع برهم کنش بین اسپین هاست. این قسمت از هامیلتونی تاثیری در ادامه استدلال ما ندارد. تابع پارش برابر است با:

$$Z = \sum_{\{S\}} e^{-\beta \tilde{H}(S) + \beta \sum_i B_i S_i}. \tag{۸۳}$$

از این تابع پارش بدست می آوریم:

$$\langle S_i \rangle = \frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \beta B_i}, \tag{۸۴}$$

و

$$\langle S_i S_j \rangle = \frac{1}{Z} \frac{\partial^2 Z}{\partial \beta B_i \partial \beta B_j}, \tag{۸۵}$$

تابع همبستگی متصل برابر است با:

$$\langle S_i S_j \rangle - \langle S_i \rangle \langle S_j \rangle = \frac{1}{Z} \frac{\partial^2 Z}{\partial \beta B_i \partial \beta B_j} - \frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \beta B_i} \frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \beta B_j}, \tag{۸۶}$$

با کمی محاسبه بدست می آوریم

$$\langle S_i S_j \rangle - \langle S_i \rangle \langle S_j \rangle = \frac{\partial}{\partial \beta B_i} \left(\frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \beta B_j} \right), \tag{۸۷}$$

و یا

$$G(i,j) = kT\frac{\partial m_i}{\partial B_j} \tag{۸۸}$$

که به روشنی نشان می دهد چرا این رابطه را رابطه همبستگی و تابع پاسخ می نامند چرا که طرف چپ آن تابع همبستگی بین دو نقطه i و j است و طرف راست آن پاسخ مغناطش در نقطه i به تغییرات میدان مغناطیسی در نقطه j است. این رابطه به ما می گوید که تابع همبستگی متصل بین دو نقطه i و j در واقع بیان می کند که اگر میدان مغناطیسی موضعی در نقطه j را تغییر دهیم مغناطش موضعی در نقطه i چه مقدار تغییر می کند. ممکن است که برهم کنش ها همه کوتاه برد باشند، یعنی هر اسپین تنها با اسپین کناری اش برهم کنش کند ولی این برهم کنش ها باعث انتشار یک نوع همبستگی در کل سیستم می شوند به نحوی که وقتی میدان مغناطیسی را در یک نقطه تغییر می دهیم اسپین های دوردست نیز اثر این تغییر را حس می کنند و متوسط اسپین ها یعنی همان مغناطش در نقاط دوردست تغییر می کنند. می توان رابطه تابع همبستگی و تابع پاسخ را به شکل دیگری نیز بدست آورد. بازهم به هامیلتونی کلی ۸۲ توجه می کنیم با این تفاوت که میدان مغناطیسی را یکنواخت می گیریم. داریم:

$$\frac{1}{Z}\frac{\partial Z}{\partial \beta B} = \langle \sum_i S_i \rangle, \tag{۸۹}$$

و

$$\frac{1}{Z}\frac{\partial^2 Z}{\partial (\beta B)^2} = \langle \sum_{i,j} S_i S_j \rangle, \tag{۹۰}$$

بنابراین با کمی محاسبه خواهیم داشت:

$$\frac{1}{Z}\frac{\partial^2 Z}{\partial (\beta B)^2} - \frac{1}{Z^2}(\frac{\partial Z}{\partial \beta B})^2 = \sum_{i,j}\langle S_i S_j\rangle - \langle S_i\rangle\langle S_j\rangle = \sum_{i,j} G(i,j), \tag{۹۱}$$

اما طرف چپ برابراست با

$$\frac{\partial M}{\partial \beta B} = NkT\frac{\partial m}{\partial B} = NkT\chi \tag{۹۲}$$

که در آن $M = \sum_i \langle S_i\rangle$ مغناطش کل و χ نفوذپذیری مغناطیسی است. بنابراین بدست آورده ایم که :

$$\sum_{i,j} G(i,j) = NkT\chi. \tag{۹۳}$$

هرگاه سیستم دارای تقارن انتقالی باشد می توانیم بنویسیم $G(i,j)=G(i-j)$ و درنتیجه رابطه بالا به صورت زیر در می آید:

$$\sum_r G(r) = kT\chi. \tag{۹۴}$$

این رابطه به خصوص منشاء واگرایی نفوذپذیری را نیز مشخص می کند. در واقع χ به این دلیل بی نهایت می شود که $G(r)$ نسبت به r به صورت نمایی افت نمی کند بلکه طوری افت می کند که تعداد خیلی زیادی از جملات$G(r)$ در جمع سمت چپ نقش ایفا می کنند. به این ترتیب واگرایی نفوذ پذیری مغناطیسی به افزایش طول همبستگی در نزدیکی نقطه بحرانی ربط پیدا می کند.

۹ محاسبه تابع همبستگی در تقریب میدان متوسط

در نگاه اول به نظر می رسد که در تقریب میدان متوسط می بایست تابع همبستگی $G(i,j)$ برابر با صفر باشد چرا که در این تقریب تابع احتمال را با یک تابع احتمال غیرهمبسته و ضربی به صورت $P_1(S_1)P_2(S_2)\cdots P_N(S_N)$ جایگزین می کنیم و این تابع هیچ نوع همبستگی ندارد به این معنا که برای چنین تابعی همواره داریم $\langle S_iS_j\rangle - \langle S_i\rangle\langle S_j\rangle = 0$. با این وجود می توان در همین تقریب و با استفاده از رابطه $G_(i,j) = kT\frac{\partial m_i}{B_j}$ تابع همبستگی را بدست آورد. این که چرا چنین چیزی ممکن است نیاز به توضیح دارد و ما سعی می کنیم بعد از پایان محاسبه چنین توضیحی را فراهم کنیم. فعلا توجه خود را به محاسبه معطوف می کنیم. نقاط شبکه را با بردارهای $\mathbf{x}$ و $\mathbf{y}$ و نظایرآن نشان می دهیم. در این صورت رابطه بالا به صورت زیر نوشته می شود:

$$G(\mathbf{x},\mathbf{y}) = kT\frac{\partial m_{\mathbf{x}}}{B_{\mathbf{y}}}. \tag{۹۵}$$

ضمنا برای سادگی ضرایب جفتیدگی مدل را یکسان در نظر می گیریم یعنی فرض می کنیم که هر نقطه با همسایه هایش با ضریب J برهم کنش دارد. هر نقطه نیز در یک میدان مغناطیسی ناهمگن است. در این صورت رابطه () به صورت زیر در می آید:

$$m_{\mathbf{x}} = \tanh\left[\beta\left(J\sum_{\mathbf{z}\in N_{\mathbf{x}}} m_z + B_{\mathbf{x}}\right)\right]. \tag{۹۶}$$

از طرفین این رابطه نسبت به $\beta B_{\mathbf{y}}$ مشتق می گیریم و در نتیجه با استفاده از رابطه (۹۵) خواهیم داشت:

$$G(\mathbf{x},\mathbf{y}) = \cosh^{-2}\left[\beta\left(J\sum_{\mathbf{z}\in N_{\mathbf{x}}} m_{\mathbf{z}} + B_{\mathbf{x}}\right)\right] \times \left[J\beta \sum_{\mathbf{z}\in N_{\mathbf{x}}} G(\mathbf{z},\mathbf{y}) + \delta_{\mathbf{x},\mathbf{y}}\right] \tag{۹۷}$$

حال تابع همبستگی را برای سیستمی محاسبه می کنیم که همگن است و در میدان مغناطیسی $B = 0$ قرار دارد. برای چنین سیستمی $m_{\mathbf{x}}$ یکنواخت و ثابت است. هم چنین با استفاده از تقارن انتقالی که فرض می کنیم برای چنین سیستمی وجود دارد می فهمیم که تابع همبستگی فقط به فاصله دو نقطه بستگی دارد و نه به دو نقطه به طور مستقل. بنابراین رابطه بالا به شکل زیر نوشته می شود:

$$G(\mathbf{x}-\mathbf{y}) = \cosh^{-2}(\beta J z m)\left[J\beta \sum_{\mathbf{z}\in N_{\mathbf{x}}} G(\mathbf{z}-\mathbf{y}) + \delta_{\mathbf{x},\mathbf{y}}\right] \tag{۹۸}$$

ضمنا توجه می کنیم که با استفاده از رابطه)۹۶(می توان نوشت

$$\cosh^{-2}(\beta J z m) = (1-m^2) \tag{۹۹}$$

و در نتیجه

$$G(\mathbf{x}-\mathbf{y}) = (1-m^2)\left[J\beta \sum_{\mathbf{z}\in N_{\mathbf{x}}} G(\mathbf{z}-\mathbf{y}) + \delta_{\mathbf{x},\mathbf{y}}\right] \tag{۱۰۰}$$

این رابطه برای هر نوع شبکه ای درست است. از این به بعد توجه خود را به شبکه مکعبی محدود می کنیم. هر نقطه شبکه به صورت $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \cdots x_d)$ نوشته می شود. بردارهای یکه شبکه به صورت زیر نوشته می شوند:

$$\mathbf{e}_1 = (1,0,0\cdots 0), \qquad \cdots \mathbf{e}_d = (0,0,\cdots 1). \tag{۱۰۱}$$

در ضمیمه این درس با تبدیل فوریه آشنا می شوید. می دانیم که

$$G(\mathbf{x}-\mathbf{y}) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^d}} \int e^{-i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{y})} \tilde{G}(\mathbf{q}) d^d\mathbf{q}. \tag{۱۰۲}$$

در نتیجه با اعمال این تبدیل به رابطه قبلی بدست می آوریم:

$$\tilde{G}(\mathbf{q}) = (1-m^2)\left[J\beta\tilde{G}(q)(2\cos q_1 + 2\cos q_2 + \cdots 2\cos q_d) + 1\right] \tag{۱۰۳}$$

که درآن از این استفاده کرده ایم که برای شبکه d بعدی مکعبی $z=2d$ است. در نتیجه بدست می آوریم:

$$G(q)=\frac{1-m^2}{1-(1-m^2)J\beta\sum_{i=1}^{d}\cos q_i}. \qquad (۱۰۴)$$

بنابراین با استفاده از این رابطه و رابطه (۱۰۲) می توان علی الاصول تابع همبستگی را حساب کرد. ولی نکته این است که آنچه مورد نظر ماست رفتار تابع همبستگی برای فواصل بزرگ است و نه برای هر فاصله ای. برای فاصله های بزرگ رابطه (۱۰۲) به ما می گوید که تنها $|\mathbf{q}|$ های کوچک اهمیت دارند و بنابراین کافی است که به رفتار تابع $G(\mathbf{q})$ در $|\mathbf{q}|$ های کوچک یعنی تکانه های کوچک نگاه کنیم. در این حد می توانیم بنویسیم:

$$G(\mathbf{q})\approx\frac{1-m^2}{1-(1-m^2)J\beta(2d-|\mathbf{q}|^2)}. \qquad (۱۰۵)$$

از این رابطه بدست می آوریم

$$G(0)\approx\frac{1-m^2}{1-(1-m^2)J\beta 2d}. \qquad (۱۰۶)$$

و در نتیجه با تقسیم این دو رابطه برهم

$$G(\mathbf{q})=\frac{G(0)}{1+\xi^2|\mathbf{q}|^2}, \qquad (۱۰۷)$$

که در آن

$$\xi^2:=\frac{J(1-m^2)}{kT-2dJ(1-m^2)}. \qquad (۱۰۸)$$

ξ کمیتی است که دارای بعد طول است.

تمرین: نشان دهید که تابع همبستگی به صورت زیر قابل نوشتن است

$$G(|\mathbf{x}-\mathbf{y}|)=f(\frac{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|}{\xi}) \qquad (۱۰۹)$$

این رابطه نشان می دهد که تنها مقیاس طولی که در تابع هبستگی بوجود می آید همین طول ξ است . به این طول ، طول همبستگی می گوییم.

تمرین: نشان دهید که در بالای دمای بحرانی می توان طول همبستگی را به صورت زیر نوشت:

$$\xi = \frac{A_+}{T - T_c} \tag{۱۱۰}$$

و در پایین نقطه بحرانی نیز می توان نوشت:

$$\xi = \frac{A_-}{T_c - T}. \tag{۱۱۱}$$

مقادیرA_+ و A_- را بدست آورید. بنا براین در تقریب میدان متوسط نمای ν برابر است با یک.

تمرین: با استفاده از رابطه (۱۰۷) نشان دهید که در تقریب میدان میانگین نمای η برابر با یک است.

۱۰ مسئله ها و تمرین ها:

مسئله ۱: مدل پاتز 3 حالته [۳] را در نظر بگیرید. این مدل روی هر شبکه ای قابل تعریف است. در هر نقطه از شبکه یک متغیر تعریف می شود که 3 حالت مختلف $-1, 0, 1$ را اختیار می کند. حالت نقطه i ام را با S_i نشان می دهیم. اصطلاحا متغیر S_i را متغیر اسپین در مکان i ام می خوانیم اگر چه این متغیر اسپین به معنای کوانتومی و متداول آن نیست. هامیلتونی این سیستم به شکل زیر نوشته می شود:

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \delta(S_i, S_j) - B \sum_i \delta_{S_i,0} \tag{۱۱۲}$$

میدان خارجی B سعی می کند که همه اسپین ها را در راستای 0 منظم کند. در تقریب میدان متوسط، تابع پارش این مدل را به عنوان تابعی از βJ و βB حساب کنید. آیا در این مدل نظم خود بخود اتفاق می افتد؟ در صورت پاسخ مثبت دمای بحرانی را بدست آورید. (راهنمایی: سعی کنید که عبارت $\delta_{S,S'}$ را به صورت یک عبارت بر حسب S وS' و توان های آنها بنویسید.)

[۳] 3-State Potts Model

مسئله ۲: مدل آیزینگ را در حضور میدان مغناطیسی و در یک شبکه دو بعدی در نظر بگیرید. تابع پارش را در تقریب میدان میانگین خوشه ای [۴] حساب کنید. خوشه ها را طوری بگیرید که هر کدام شامل پنج تا از اتم های شبکه باشند.

الف: دمای گذار فاز را حساب کنید.

مسئله ۳: یک گاز شامل N اتم را که با هامیلتونی زیر توصیف می شود در محیطی به حجم کل V قرار دارد:

$$H = \sum_{i=1}^{N} \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} + \sum_{i,j} V(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|). \quad (۱۱۳)$$

در این عبارت $\mathbf{p}_i$ تکانه ذره i ام است و $V(r)$ نیز پتانسیل زیراست:

$$V(r) = \infty \quad if \quad r < a, \qquad V(r) = 0 \quad if \quad r \geq a. \quad (۱۱۴)$$

به عبارت دیگر این پتانسیل بیان می کند که اتم ها مثل گوی های سختی هستند با شعاع $a/2$. از تقریب میدان میانگین استفاده کنید و معادله حالت گاز را بدست آورید.

مسئله ۴ـ هدف این مسئله یادگرفتن بعضی مفاهیم مقدماتی در باره گذار فاز کوانتومی است. وقتی که یک سیستم در دمای صفر است ، حتما در حالت پایه است و انرژی آزاد آن با انرژی حالت پایه آن برابر است زیرا وقتی که $T = 0$ باشد،

$$F = E - TS = E_0 \quad (۱۱۵)$$

که در آن E_0 انرژی حالت پایه است. برای چنین سیستمی متوسط هر کمیتی مثل E دیگر یک متوسط گرمایی نیست بلکه یک متوسط کوانتومی است که به صورت زیر حساب می شود:

$$\langle E \rangle = \langle \psi_0 | \hat{H} | \psi_0 \rangle, \quad (۱۱۶)$$

که در آن $|\psi_0\rangle$ حالت پایه سیستم است. وقتی که دما غیر صفر است حالت سیستم دیگر یک حالت خالص نیست و مطابق با اصل موضوع مکانیک آماری مخلوطی از حالت های مختلف با وزن بولتزمن است یعنی

$$\rho = \frac{1}{Z} e^{-\beta \hat{H}} \quad (۱۱۷)$$

[۴] Cluster Mean Field

که در آن $Z=tr(e^{-\beta\hat{H}})$ تابع پارش است. در دمای غیرصفر متوسط ها به شکل زیر حساب می شوند: به عنوان مثال

$$\begin{aligned} E &= tr(\rho\hat{H})=\frac{1}{Z}tr(e^{-\beta\hat{H}}\hat{H}) \\ &= \frac{1}{Z}\sum_i\langle\psi_i|e^{-\beta\hat{H}}\hat{H}|\psi_i\rangle=\frac{1}{Z}\sum E_ie^{-\beta E_i} \end{aligned} \tag{۱۱۸}$$

که در آن $|\psi_i\rangle$ ها ویژه حالت های هامیلتونی هستند. برای آنکه مثالی از یک نوع گذار فاز کوانتومی را معرفی کنیم هامیلتونی زیر را در نظر بگیرید:

$$\hat{H}=-J\sum_{i,j=1}^{N}\sigma_{z,i}\sigma_{z,j}-B\sum_{i-=1}^{N}\sigma_{x,i}. \tag{۱۱۹}$$

در این عبارت $\sigma_{a,i}$ نشان دهنده عملگر اسپین پاوولی σ_a در مکان i ام شبکه است.

این هامیلتونی برهم کنش اسپین ها در یک میدان مغناطیسی را توصیف می کند. این مدل اصطلاحاً مدل آیزینگ در میدان مغناطیس عرضی خوانده می شود زیرا برهم اسپین ها با هم در راستای z است و حال آنکه میدان در راستای x است. پیدا کردن حالت پایه این سیستم به طور دقیق دشوار است. فرض کنید که حالت پایه این سیستم را پیدا کنیم. این حالت پایه به پارامتر های هامیلتونی بستگی دارد. بنابراین می نویسیم

$$|\psi_0\rangle=|\psi_0(J,B)\rangle. \tag{۱۲۰}$$

گذار فاز کوانتومی یک گذار فاز برحسب دما نیست بلکه برحسب یکی از پارامترهای هامیلتونی است که قابل کنترل باشد مثل میدان مغناطیسی در مثال حاضر. به این معنا که با تغییرات پیوسته B ممکن است که یک پارامتر نظم مثل انرژی یا هر چیز دیگر به طور غیر تحلیلی تغییر کند. به عنوان مثال در مدل آیزینگ در میدان مغناطیسی عرضی پارامتر نظم مغناطش است که به صورت زیر سنجیده می شود:

$$m:=\langle\psi_0|\sigma_z|\psi_0\rangle. \tag{۱۲۱}$$

برای پیدا کردن یک حد بالا از انرژی حالت پایه و مطالعه گذار فاز از تقریب میدان میانگین استفاده می کنیم به این معنا که سعی می کنیم با شروع از یک حالت ضربی به صورت

$$|\Phi\rangle:=|\phi\rangle\otimes|\phi\rangle\otimes|\phi\rangle\cdots|\phi\rangle \tag{۱۲۲}$$

که در آن $\langle\phi|$ یک حالت یک ذره ای بهنجار برای یک اسپین است عبارت وردشی زیر را کمینه کنیم:

$$\langle\Phi|\hat{H}|\Phi\rangle. \tag{۱۲۳}$$

الف: در تقریب میدان میانگین حالت پایه هامیلتونی (۱۱۹) را پیدا کنید.

ب: پارامتر نظم را برحسب B و J پیدا کنید و نشان دهید که در این سیستم یک گذار فاز در یک نقطه بحرانی از B بدست می آید.

پ: انرژی حالت پایه را در دو طرف نقطه گذار فاز پیدا کنید.

د: در یک شبکه مکعبی d بعدی ، تابع های همبستگی های زیر را پیدا کنید:

$$G_{xx}(i,j) \equiv \langle\sigma_{x,i}\sigma_{x,j}\rangle, \qquad G_{zz}(i,j) \equiv \langle\sigma_{z,i}\sigma_{z,j}\rangle. \tag{۱۲۴}$$

۱۱ ضمیمه: تبدیل فوریه

دراین بخش تبدیل فوریه روی شبکه های مربعی را مرور می کنیم. از شبکه یک بعدی شروع می کنیم. شبکه ای یک بعدی در نظر بگیرید که نقاط آن عبارتند از $\{\cdots,-3,-2,-1,0,1,2,3,\cdots\}$. این شبکه از هر دوسو تا بی نهایت گسترده است. توابع

$$\epsilon_q(n) := \frac{1}{2\pi}e^{iqn}, \qquad q\in[0,2\pi]. \tag{۱۲۵}$$

را روی این شبکه در نظر می گیریم. این توابع دارای خاصیت تعامد و کامل بودن هستند به این معنا که

$$\langle\epsilon_q,\epsilon_{q'}\rangle \equiv \frac{1}{2\pi}\sum_{-\infty}^{\infty} e^{-in(q-q')} = \delta(q-q') \tag{۱۲۶}$$

و

$$\int |\epsilon_q\rangle\langle\epsilon_q|dq = I \qquad \longrightarrow \qquad \frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi} e^{iq(n-n')}dq = \delta_{n,n'}. \tag{۱۲۷}$$

از این رابطه ها نتیجه می شود که برای هر تابع F که روی این شبکه تعریف شده باشد می توانیم بنویسیم:

$$F(n)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_0^{2\pi}e^{-iqn}\tilde{F}(q)dq \tag{۱۲۸}$$

که در آن

$$\tilde{F}(q)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\sum_{-\infty}^{\infty}e^{iqn}F(n). \tag{۱۲۹}$$

روابط بالا را می توان براحتی به شبکه d بعدی تعمیم داد. در شبکه d بعدی هر نقطه با مختصات $\mathbf{n}=(n_1,n_2,\cdots n_d)$ مشخص می شود. روابط قبلی به صورت سرراست زیر تعمیم پیدا می کنند:

$$\epsilon_{\mathbf{q}}(\mathbf{n}):=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{n}},\qquad \mathbf{q}\in[0,2\pi]\times[0,2\pi]\times\cdots[0,2\pi]. \tag{۱۳۰}$$

$$\langle\epsilon_{\mathbf{q}},\epsilon_{\mathbf{q}'}\rangle\equiv\frac{1}{(2\pi)^d}\sum_{-\infty}^{\infty}e^{-i\mathbf{n}\cdot(\mathbf{q}-\mathbf{q}')}=\delta^d(\mathbf{q}-\mathbf{q}') \tag{۱۳۱}$$

و

$$\int|\epsilon_{\mathbf{q}}\rangle\langle\epsilon_{\mathbf{q}}|d^dq=I\qquad\longrightarrow\qquad\frac{1}{(2\pi)^d}\int e^{i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{n}-\mathbf{n}')}d^d\mathbf{q}=\delta_{\mathbf{n},\mathbf{n}'}. \tag{۱۳۲}$$

از این رابطه ها نتیجه می شود که برای هر تابع F که روی این شبکه تعریف شده باشد می توانیم بنویسیم:

$$F(\mathbf{n})=\frac{1}{\sqrt{(2\pi)^d}}\int e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{n}}\tilde{F}(\mathbf{q})d^d\mathbf{q} \tag{۱۳۳}$$

که در آن

$$\tilde{F}(\mathbf{q})=\frac{1}{\sqrt{(2\pi)^d}}\sum_{-\infty}^{\infty}e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{n}}F(\mathbf{n}). \tag{۱۳۴}$$