سیستم های اسپینی- بخش اول

مدل یک بعدی آیزینگ، تقریب میدان متوسط

وحیدکریمی پور- دانشکده فیزیک - دانشگاه صنعتی شریف

۲۳ فروردین ۱۴۰۳

۱ مقدمه

سیستم های اسپینی یکی از مهم ترین و در عین حال ساده ترین دستگاه های بس ذره ای با برهم کنش هستند. خواص مغناطیسی یک جامد بیشتر ناشی از برهم کنش گشتاور مغناطیسی اتم ها با یکدیگر است. اتم ها معمولا در جای خود ساکن هستند و حرکت نمی کنند. بنابراین درجات آزادی چنین دستگاهی دیگر مکان و سرعت اتم ها نیست بلکه جهت گشتاور مغناطیسی اتم هاست. میدان مغناطیسی خارجی و هم چنین برهم کنش اتم های جامد بیشتر سعی در منظم کردن این گشتاورها دارند. از طرف دیگر گرمای موجود در محیط سعی در بی نظم کردن این گشتاورها دارد. مقابله این دو عامل متضاد خواص مغناطیسی این جامد را معین خواهد کرد. به این ترتیب و با صرف نظر کردن از درجات آزادی مکان و سرعت مطالعه چنین دستگاهی تا حد زیادی ساده می شود. هامیلتونی چنین دستگاهی معمولا به شکل زیر است:

$$H = -\sum_{i,j} J_{ij}\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j - \sum_i \mathbf{B}_i \cdot \mathbf{S}_i. \qquad (۱)$$

در این رابطه $\mathbf{S}_i$ برداری سه بعدی است با اندازه S که می توان آن را بدون دیمانسیون در نظر گرفت، زیرا همه ضرایب دارای دیمانسیون را می توان در ضرایب جفت شدگی J_{ij} و میدان مغناطیسی موضعی $\mathbf{B}_i$ جذب کرد. از این به بعد بردارهای $\mathbf{S}_i$ را با تسامح اسپین می نامیم، اگر چه در این درس این دستگاه را به صورت کلاسیک در نظر می گیریم. میکروحالت های چنین سیستمی عبارتند از همه وضعیت هایی که اسپین ها می

توانند به خود بگیرند، یعنی همه وضعیت هایی مثل $(\mathbf{S}_1,\ \mathbf{S}_2, \cdots \mathbf{S}_N)$. تابع پارش چنین دستگاهی به صورت زیر خواهد بود:

$$Z_N = \int d\mathbf{S}_1 d\mathbf{S}_2 \cdots d\mathbf{S}_N e^{-\beta H}. \tag{۲}$$

اما می توان نخست یک مدل بسیار ساده را بررسی کرد. این مدل ساده مدل آیزینگ [۱] نام دارد. در این مدل چندین فرض ساده کننده به صورت زیر در نظر گرفته می شود، اما نکته مهم این است که این فرض ها ضمن آنکه مطالعه مکانیک آماری این مدل را ساده می کنند، از کیفیت های اصلی و اساسی این مدل برای توضیح فیزیکی پدیده های مغناطیسی نمی کاهند. طبیعتاً می توان بسته به پدیده مورد مطالعه هر کدام از این فرض های ساده کننده را نادیده گرفت مدلی پیچیده تری را بررسی کرد. این فرض ها این ها هستند:

یک ـ فرض می کنیم که فقط اسپین های همسایه با هم برهم کنش می کنند و ضریب جفتیدگی آنها نیز برابر با J است. میدان مغناطیسی یکنواخت است و اندازه آن برابر با

B است.

دو ـ فرض می کنیم که اسپین ها فقط یک مولفه مثلا در راستای z دارند و افت و خیز گرمایی تنها باعث می شود که جهت آن در راستای مثبت یا منفی قرار بگیرد. این فرض در بعضی از مواد مغناطیسی که به دلیل ساختار شبکه ای شان یک ناهمسانگردی شدید در یکی از راستاها وجود دارد، فرض واقع بینانه ای است.

با این فرض های ساده کننده به مدل آیزینگ که ساده ترین مدل بس ذره ای است که در آن برهم کنش وجود دارد. می توان گفت که مدلی ساده تر از آن نمی توان تعریف کرد. از این روست که مدل آیزینگ یکی از مهم ترین مدلهای مکانیک آماری است. اهمیت این مدل تنها به خاطر این نیست که مدل ساده ای برای مطالعه نظم خود بخود مغناطیسی در جامدات فرومغناطیسی یا پادفرومغناطیسی است بلکه در این است که تعداد بسیار زیادی از پدیده های دیگر را چه در فیزیک و چه در دیگر شاخه های علوم می توان به این مدل یا تغییراتی از این مدل نگاشت. هم چنین مدل آیزینگ خاستگاه بسیاری دیگر از مدل های دقیقا حل پذیر در مکانیک آماری شده است. بسیاری از روش های حل دقیق مدل های بس ذره ای که امروزه می شناسیم نخستین بار در مطالعه مدل آیزینگ معرفی شده اند. . نخست این مدل را تعریف می کنیم. رض می کنیم در یک شبکه دلخواه مثلا شبکه یک بعدی یا دو بعدی یا چند بعدی، در هر نقطه مثل i یک متغیر دوتایی S_i که تنها دو مقدار $+1$ و -1 اختیار می کند قرار گرفته است. برای راحتی می توانیم این متغیر دوتایی را اسپین بنامیم. این نام را هم برای سادگی به کار می بریم و هم برای اینکه خاستگاه اولیه

[۱] Ising Model

مدل آیزینگ مطالعه نظم مغناطیسی در یک ماده مغناطیسی بوده است. هامیلتونی این سیستم به صورت زیر تعریف می شود:

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j - B \sum_i S_i, \qquad (۳)$$

که در آن جمع روی اسپین های همسایه صورت می گیرد. در این هامیلتونی B را میدان مغناطیسی می نامیم. ضریب J نیز نشان دهنده برهم کنش بین اسپین هاست. [۲] مقدار میدان مغناطیسی را مثبت می گیریم. در این صورت میدان سعی می کند که اسپین ها را با خود هم جهت کند چرا که این کار باعث کاهش انرژی می شود. هرگاه J مثبت باشد اسپین های نزدیک نیز سعی می کنند هم جهت شوند. چنین مدلی را مدل فرومغناطیس می نامیم. اما اگر J منفی باشد اسپین های نزدیک سعی می کنند برای پایین آوردن انرژی جهت مخالف هم را اختیار کنند. چنین مدلی را مدل پادفرومغناطیس می نامیم. تابع پارش مدل آیزینگ به صورت زیر تعریف می شود:

$$Z(N,J,B) = \sum_{\{S_i\}} e^{-\beta H} = \sum_{\{S_i\}} e^{\beta J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j + \beta B \sum_i S_i} \qquad (۴)$$

پارامتر نظم [۳] یعنی آن چیزی که وجود نظم یا بی نظمی را در مدل فرومغناطیسی نشان می دهد چیزی نیست جز متوسط مغناطش یعنی

$$m := \lim_{N \longrightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \langle S_i \rangle. \qquad (۵)$$

هدف اصلی ما این است که مقدار این پارامتر نظم را پیدا کنیم که طبیعتا معادله بدست آمده معادله حالت این سیستم خواهد بود. بخصوص علاقمندیم ببینیم مغناطش خود بخود یعنی وقتی که میدان مغناطیسی به عنوان عامل نظم دهنده خارجی وجود ندارد، پدیدار می شود یا نه؟ در این درس مدل آیزینگ یک بعدی را تحت شرایط گوناگون و به روشهای متفاوت حل می کنیم. حل مدل آیزینگ در دو بعد را به درسهای آینده موکول می کنیم. اما قبل از ادامه به چند نمونه از پدیده هایی دیگری که همگی به مدل آیزینگ نگاشته می شوند را نام می بریم:

لایه نشانی روی سطح: گاز شبکه ای: [۴] می توان از چنین مدلی برای توصیف لایه نشانی اتم ها روی یک سطح استفاده کرد. هر جایگاه دو حالت دارد: یا خالی است و یا یک اتم روی آن نشسته است و در یک جایگاه نیز بیش از یک اتم نمی تواند قرار بگیرد. اگر J منفی باشد به این معناست که وقتی یک جایگاه پر شد اتم ها تمایل کمتری دارند که اطراف آن جایگاه بنشینند.

---

[۲] از آنجا که بسیاری از پدیده های دیگر حتی در مطالعات مربوط به فیزیک اجتماع به مدل آیزینگ نگاشته می شوند، B می تواند نشان دهنده هر نوع عامل خارجی باشد که سعی می کند مقادیر متغیرها را با خود هم جهت کند.

[۳] Order Parameter

[۴] **Lattice Gas**

آلیاژ دو گانه: [5] یا می توان آن را برای توصیف یک آلیاژ دوگانه به کار برد که هر جایگاه یا توسط یک اتم از نوع A یا B پر شده است. با توجه به علامت J می توان مدل هایی را توصیف کرد که در آنها اتم های یکسان یا اتم های نا یکسان در کنار هم قرار می گیرند.

گسترش اپیدمی: [6] هم چنین می توان آن را مدلی برای گسترش یک اپیدمی در نظر گرفت (که در آن هر شخص در دو حالت بیمار یا سالم قرار دارد) [7]

مدل های تشکیل آراء در اجتماع: [8] این مدل ها هم چنین برای مطالعه نحوه تشکیل آرا و عقاید در یک جامعه کاربرد دارند که در آنها نسبت به یک موضوع خاص می تواند دو رای متفاوت داشته باشد.

شمار این گونه پدیده ها که همگی با مدل آیزینگ مطالعه می شوند بسیار زیاد است و همین موضوع است که بر اهمیت این مدل می افزاید. در بخش های بعدی سعی می کنیم که مدل آیزینگ را تحت شرایط گوناگون و به روش های گوناگون حل کنیم. منظور از حل مدل آیزینگ هم این است که تابع پارش آن را به طور دقیق حساب کنیم. این کار ما را مجهز به رشته ای از تکنیک ها می کند که در مطالعه مکانیک آماری همواره با ما خواهند بود و به همین جهت می بایست آنها را خوب فرا بگیریم.

۲ مدل آیزینگ در یک بعد بدون میدان مغناطیسی

یک شبکه یک بعدی در نظر می گیریم، شکل (۱). هامیلتونی مدل آیزینگ برابر است با:

$$H = -J \sum_{i=1}^{N-1} S_i S_{i+1}, \tag{۶}$$

و تابع پارش برابر است با

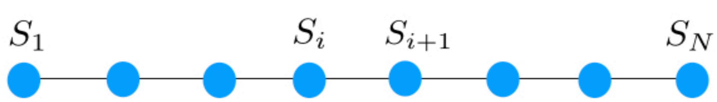
[5] Binary Alloy
[6] Epidemic Distribution
[7] البته مدل های اپیدمی کامل سه حالت دارند و شامل فرد بیمار شفا یافته که قابلیت سرایت دادن بیماری را دارد نیز می شوند.
[8] Voting Systems

$$Z = \sum_{\{S_i\}} e^{\beta J \sum_{i=1}^{N-1} S_i S_{i+1}}. \qquad (۷)$$

می توان این مدل را با شرایط مرزی گوناگون در نظر گرفت. مثلا می توانیم فرض کنیم که اسپین های دو انتها کاملا آزاد هستند یا اینکه در مقدارهای از پیش معینی قرار گرفته اند یا اینکه شرایط مرزی تناوبی است. خواهیم دید که در حد ترمودینامیک همه این مدل ها رفتار یکسان دارند. نخست شرایط مرزی باز را مطالعه می کنیم. اسپین های دو طرف آزاد هستند و می توانند هر مقداری را اختیار کنند.

۱.۲ شرایط مرزی باز

مدل آیزینگ را می توان به روش های متفاوت حل کرد. شما هم می توانید روش ابداعی خود را به کار بگیرید. توصیه می کنم که این کار را حتما انجام دهید چون خیلی آموزنده است. در این جا چند روش ساده را بررسی می کنیم.



شکل ۱: مدل آیزینگ یک بعدی: در شرایط مرزی پریودیک قرار می دهیم: $S_{N+1} = S_1$.

■ راه حل اول: تغییر متغیر

برای حل می توانیم تغییر متغیر زیر را اعمال کنیم:

$$q_1 = S_1 S_2, \quad q_2 = S_2 S_3, \quad \cdots, \quad q_{N-1} = S_{N-1} S_N, \tag{۸}$$

این تغییر متغیر از $(S_1, S_2, \cdots S_N)$ به $(q_1, q_2, \cdots q_{N-1})$ دو به یک است، زیرا اگر همه S_i ها را در یک علامت منفی ضرب کنیم هیچ تغییری در q_i ها حاصل نخواهد شد. بنابراین خواهیم داشت:

$$Z = 2 \sum_{q_1, q_2, \cdots q_{N-1}} e^{\beta J(q_1 + q_2 + \cdots q_{N-1})} = 2\left(2\cosh \beta J\right)^{N-1}, \tag{۹}$$

راه حل دوم: روش تکرار

حال از یک روش دیگر موسوم به روش تکرار استفاده می کنیم. تابع پارش را برای N تا اسپین در نظر می گیریم:

$$Z_N = \sum_{\{S_1, S_2, \cdots S_N\}} e^{\beta J(S_1 S_2 + S_2 S_3 + \cdots S_{N-1} S_N)}, \tag{۱۰}$$

اگر روی آخرین اسپین جمع را انجام دهیم بدست می آوریم:

$$Z_N = \sum_{\{S_1, S_2, \cdots S_{N-1}\}} e^{\beta J(S_1 S_2 + S_2 S_3 + \cdots S_{N-2} S_{N-1})} \sum_{S_N} e^{\beta J S_{N-1} S_N}, \tag{۱۱}$$

اما جمع روی آخرین اسپین ساده است:

$$\sum_{S_N} e^{\beta J S_{N-1} S_N} = 2\cosh(\beta J S_{N-1}), \tag{۱۲}$$

حال نکته مهم این است که این عبارت بستگی به مقدار S_{N-1} ندارد و همواره برابراست با $2\cosh \beta J$. بنابراین خواهیم داشت:

$$Z_N = Z_{N-1}(2\cosh \beta J) \tag{۱۳}$$

با تکرار این رابطه تابع پارش را بدست می آوریم که مقدارش برابر خواهد بود با $2(2\cosh \beta J)^{N-1}$.

۲.۲ شرایط مرزی پریودیک

در این حالت شرط مرزی به این صورت است که $S_{N+1} = S_1$ و هامیلتونی برابر است با

$$H = -J \sum_{i=1}^{N} S_i S_{i+1}. \tag{۱۴}$$

راه حل اول: تغییر متغیر

می خواهیم همان راه حل تغییر متغیر را این بار نیز به کاربربریم. تفاوت اش در این است که این بار جمله $S_N S_1$ در هامیلتونی وجود دارد و با اعمال همان تغییر متغیر تابع پارش برابر می شود با:

$$Z = 2 \sum_{q_1, q_2, \cdots q_{N-1}} e^{\beta J (q_1 + q_2 + \cdots q_{N-1}} e^{\beta J (q_1 q_2 \cdots q_{N-1})}, \tag{۱۵}$$

حال می توانیم جمله آخر یعنی عبارت نمایی را بسط دهیم و بدست آوریم

$$Z = 2 \sum_{q_1, q_2, \cdots q_{N-1}} e^{\beta J (q_1 + q_2 + \cdots q_{N-1}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\beta J)^n}{n!} (q_1 q_2 \cdots q_{N-1})^n, \tag{۱۶}$$

به این ترتیب جمع $\sum_{q_1, q_2, \cdots q_{N-1}}$ تبدیل می شود به $N-1$ تا جمع مجزا از هم و در نتیجه خواهیم داشت:

$$\begin{aligned} Z &= 2 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\beta J)^n}{n!} \left[\sum_{q=1,-1} q^n e^{\beta J q} \right]^{N-1} \\ &= 2 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\beta J)^n}{n!} \left[e^{\beta J} + (-1)^n e^{-\beta J} \right]^{N-1}. \end{aligned} \tag{۱۷}$$

حال جمع روی n های زوج و فرد را جدا می کنیم و بدست می آوریم:

$$Z = 2 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\beta J)^{2n}}{(2n)!} (2 \cosh \beta J)^{N-1} + 2 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\beta J)^{2n+1}}{(2n+1)!} (2 \sinh \beta J)^{N-1} = (2 \cosh \beta J)^N + (2 \sinh \beta J)^N \tag{۱۸}$$

مقایسه تابع پارش نهایی در شرایط مرزی باز و بسته بخوبی نشان می دهد که در حد ترمودینامیک یعنی $N \longrightarrow \infty$ نتایج ترمودینامیکی یکسان خواهند بود.

راه حل دوم: بسط دمای بالا

بسط دمای بالا یک روش اختلالی است که در دماهای بالا یعنی وقتی که $kT >> J$ باشد و سیستم تقریبا بی نظم باشد، مفید است. در واقع پارامتر بسط بستگی مستقیم به مقدار $\frac{J}{kT}$ دارد و بنابراین هر چه که دما بالاتر باشد می توان با جملات کمتری در بسط اختلالی تابع پارش مدل آیزینگ را با دقت خوب بدست آورد. ابع پارش عبارت است از

$$Z = \sum_{S} e^{\beta J \sum_{i=1}^{N} s_i s_{i+1}} \equiv \sum_{s_1, s_2, \cdots s_N} \prod_{i=1}^{N} e^{\beta J s_i s_j}. \tag{۱۹}$$

براحتی می توان نشان داد که رابطه زیر همیشه برقراراست که در آن

$$\tau = \tanh \beta J.$$

$$e^{K s_i s_{i+1}} = \cosh K + s_i s_{i+1} \sinh K = \cosh K (1 + s_i s_{i+1} \tanh K) =: \cosh K (1 + s_i s_{i+1} \tau) \tag{۲۰}$$

صحت این رابطی متکی به این است که $s_i s_j$ همواره یا یک است و یا منهای یک . درنتیجه می توان تابع پارش را به شکل زیر بازنویسی کرد که درآن $\tau = \tanh \beta J$.

$$Z_N(\beta J) = \sum_{S} \prod_{i=1} \cosh \beta J (1 + s_i s_{i+1} \tau) = (\cosh \beta J)^N \sum_{S} \prod_{i=1}^{N} (1 + s_i s_{i+1} \tau). \tag{۲۱}$$

می توان این عبارت را برحسب قوای متوالی τ بسط داد. جملات اول بسط به ترتیب زیر خواهند بود :

$$\begin{aligned} Z &= (\cosh K)^N \sum_{S} \prod_{i=1}^{N} (1 + s_i s_{i+1} \tau) \\ &= (\cosh K)^N \sum_{S} \left(1 + \tau (\sum_{i} s_i s_{i+1}) + \tau^2 (\sum_{i,j} s_i s_{i+1} s_j s_{j+1}) + \tau^3 (\sum_{i,j,k} s_i s_{i+1} s_j s_{j+1} s_k s_{k+1}) + \cdots \right) \end{aligned} \tag{۲۲}$$

ازآنجا که دردمای های بالا τ کوچک است و می توانیم این عبارت را برحسب قوای τ بسط دهیم این بسط به بسط دمای بالا مشهوراست. حال توجه می کنیم که روابط زیر همیشه برقرارند که درآن ها $\sum_S$ به معنای جمع روی وضعیت همه اسپین های شبکه است.

$$\sum_{s} 1 = 2 \qquad \sum_{s} s = 0 \tag{۲۳}$$

و

$$\sum_S 1 = 2^N \qquad \sum_S s_i = 0 \tag{۲۴}$$

درنتیجه درجمع های بالا عبارت هایی مثل عبارت زیر که درآن ها حتی یکی از s ها به صورت منفرد ظاهر شده باشد برابر باصفر خواهندبود:

$$\sum_S s_i s_j \cdots s_k = 0 \tag{۲۵}$$

تنها عبارت هایی مخالف صفر خواهند بود که درآن هرکدام از s ها به صورت جفت ظاهر شده باشد. این حرف به این معناست که دررابطه (۲۲) تنها دو جمله باقی خواهند ماند. یکی متناسب با τ^0 و دیگری متناسب با τ^N. در نتیجه تابع پارش برابر می شود با:

$$Z_N(\beta) = (2\cosh\beta J)^N + (2\sinh\beta J)^N. \tag{۲۶}$$

- اگر به هر جمله ی $s_i s_{i+1}$ یک پاره خط نسبت دهیم، آنگاه جملات متوالی بسط دمای بالا را می توان به صورت هندسی تعبیر کرد. جمله متناسب با τ مجموع همه پاره خط های گوناگون به طول یک است. جمله متناسب با τ^2 مجموع همه پاره خطهای به طول ۲ است که البته ممکن است این پاره خط ها یک پارچه مثل $s_i s_{i+2} = (s_i s_{i+1})(s_{i+1} s_{i+2})$ یا دوپارچه مثل $j > i+1$, $(s_i s_{i+1})(s_j s_{j+1})$ باشند. در هر صورت جمع روی سر آزاد یک پاره خط به دلیل رابطه $\sum_i s_i = 0$ همواره صفر می شود. تنها وقتی جمع غیر صفر می شود که یک منحنی بسته تشکیل شود و همه s_i ها در اتصال پاره خط ها به هم حذف شوند. در مدل آیزینگ یک بعدی با شرایط مرزی پریودیک تنها دو منحنی بسته وجود دارد، یکی منحنی ای با طول صفر (یعنی همان جمله متناسب با یک) و دیگری منحنی با طول N. این دو جمله به تابع پارش نهایی در معادله (۲۶) منجر می شوند. نکته مهم این است که همین روش را می توان برای مدل آیزینگ دو بعدی یا سه بعدی هم بکار برد و حداقل در دماهای بالا تابع پارش را تا رتبه های پایین حساب کرد.

- **راه حل سوم: روش ماتریس انتقال**

این روش بر خلاف روش های قبلی برای وقتی که میدان مغناطیسی نیز حضور داشته باشد به کار می رود. به همین جهت آن را در بخش بعدی توضیح می دهیم.

۳ مدل آیزینگ یک بعدی در حضور میدان مغناطیسی

یکی از قدرتمندترین و عمومی ترین روش ها برای حل مدل آیزینگ و مدل های مشابه، روش ماتریس انتقال [۹] نام دارد. ایده این روش را برای مدل یک بعدی آیزینگ توضیح می دهیم ولی خواننده می تواند براحتی آن را برای مدل های دیگر و برای بعد ۲ نیز صورت بندی کند. فرض کنید که در هر نقطه از یک شبکه یک بعدی متغیری آماری داریم که آن را با S نشان می دهیم. S لزوما دو مقدار ± 1 ندارد و می تواند Q مقدار مختلف را اختیار کند. برای سادگی نیز از S به عنوان متغیر اسپین نام می بریم اگر چه ممکن است واقعا S یک متغیر اسپینی نباشد. انرژی هر هیئت دلخواه از اسپین ها را نیز به ترتیب زیر می نویسیم:

$$H(S_1, S_2, \cdots S_N) = \sum_{i=1}^{N} h(S_i, S_{i+1}), \tag{۲۷}$$

که در آن $h(S, S')$ یک تابع متقارن از S و S' است. شرط مرزی را نیز پریودیک می گیریم یعنی $S_{N+1} = S_1$. تابع پارش برابر است با:

$$Z_N = \sum_{S_1, S_2, \cdots S_N} e^{-\beta h(S_1, S_2)} e^{-\beta h(S_2, S_3)} \ldots e^{-\beta h(S_{N-1}, S_N)} \tag{۲۸}$$

حال ماتریس T را به شکل زیر تعریف می کنیم:

$$\langle S|\mathcal{T}|S'\rangle := e^{-\beta h(S,S')} \tag{۲۹}$$

ماتریس T یک ماتریس $Q \times Q$ است و به آن ماتریس انتقال گفته می شود. بنابراین تابع پارش به این صورت در می آید:

$$Z_N = \sum_{S_1, S_2, \cdots S_N} \langle S_1|\mathcal{T}|S_2\rangle\langle S_2|\mathcal{T}|S_3\rangle \cdots \langle S_N|\mathcal{T}|S_1\rangle = tr(\mathcal{T}^N) \tag{۳۰}$$

در نتیجه محاسبه تابع پارش تبدیل می شود به محاسبه ویژه مقدار های یک ماتریس $Q \times Q$ که از مسئله اولی بسیار ساده تر است. برای مدل آیزینگ T دوبعدی است. در این حالت داریم

$$\langle S|\mathcal{T}|S\rangle := e^{\beta JSS' + \frac{\beta B}{2}(S+S')} \tag{۳۱}$$

[۹] Transfer Matrix Method

و یا

$$\mathcal{T} = \begin{pmatrix} e^{\beta J+\beta B} & e^{-\beta J} \\ e^{-\beta J} & e^{\beta J-\beta B} \end{pmatrix} \tag{۳۲}$$

ویژه مقدارهای این ماتریس براحتی تعیین می شوند و برابرند با:

$$\lambda_{\pm} = e^{\beta J}\left(\cosh\beta B \pm \sqrt{\sinh^2\beta B + e^{-4\beta J}}\right) \tag{۳۳}$$

در نتیجه تابع پارش برابر خواهد بود با:

$$Z_N = \lambda_1^N + \lambda_2^N \tag{۳۴}$$

که در آن λ_1 ویژه مقدار بزرگ تر است. در حد ترمودینامیک یعنی وقتی که N به سمت بی نهایت میل می کند، خواهیم داشت:

$$f = \lim_{N\longrightarrow\infty}\frac{F}{N} = \lim_{N\longrightarrow\infty}\frac{-kT\ln Z_N}{N} = -kT\ln\lambda_1. \tag{۳۵}$$

بنابراین بدست می آوریم:

$$f = -J - kT\ln\left[\cosh\beta B + \sqrt{\sinh^2\beta B + e^{-4\beta J}}\right]. \tag{۳۶}$$

تمام جملات درون f تحلیلی هستند. تنها وقتی یک نقطه غیرتحلیلی بوجود می آید که درون رادیکال برابر با صفر شود و این امر هیچ گاه اتفاق نمی افتد مگر وقتی که $T \longrightarrow 0$ که در این صورت عبارت داخل رادیکال برابر می شود با $\sinh^2\frac{B}{kT}$ و ما خواهیم داشت:

$$f_{T\longrightarrow 0} = -J - \lim_{T\longrightarrow 0} kT\ln\left[\cosh\frac{B}{kT} + |\sinh\frac{B}{kT}|\right] \tag{۳۷}$$

در نتیجه f برابر می شود با:

$$f_{T\longrightarrow 0} = \begin{cases} -J - kT\ln e^{\frac{B}{kT}} = -J - B & , \quad B > 0 \\ -J - kT\ln e^{\frac{-B}{kT}} = -J + B & , \quad B < 0 \end{cases} \tag{۳۸}$$

به این ترتیب دیده می شود که در $T = 0$، تابع f یک ناپیوستگی از خود نشان می دهد. به طور کلی با داشتن تابع انرژی آزاد می توانیم تمام خصوصیات ترمودینامیکی این سیستم را بدست آوریم. می دانیم که

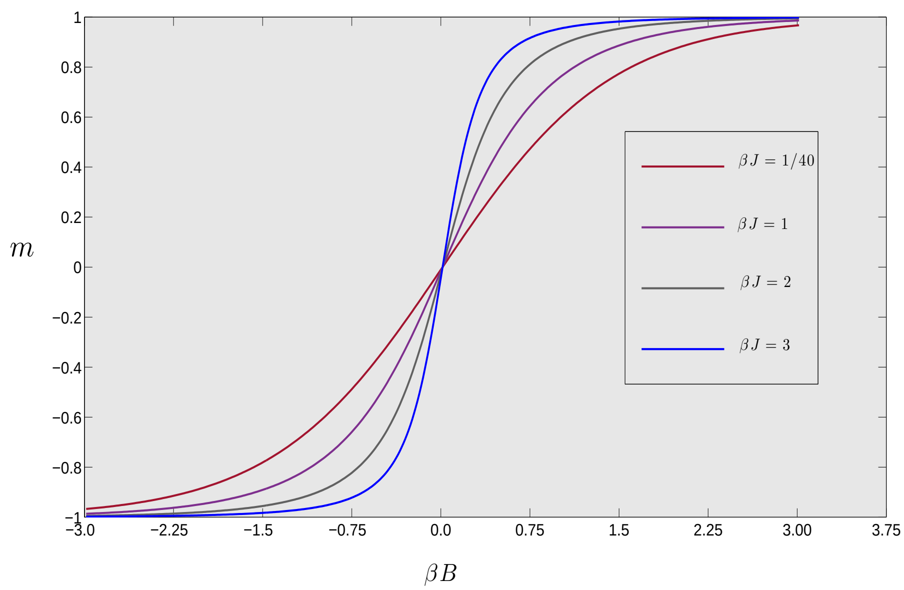
$$m := \frac{\partial\ln\lambda_1}{\partial\beta B}, \qquad \chi = \frac{\partial m}{\partial B}, \qquad \epsilon = -\frac{\partial\ln\lambda_1}{\partial\beta}, \qquad C_B = \frac{\partial\epsilon}{\partial T}. \tag{۳۹}$$

به این ترتیب با محاسبه سرراست بدست می آوریم

$$m = \frac{\sinh \beta B}{\sqrt{\sinh^2 \beta B + e^{-4\beta J}}}. \qquad (۴۰)$$

■ تمرین: رابطه بالا را بدست آورید.

شکل (۲) مقدار مغناطش را بر حسب βB در مقادیر مختلف βJ نشان می دهد.



شکل ۲: مغناطش متوسط به ازای هر اسپین در شرایط مختلف.

■ تمرین: نشان دهید که نفوذ پذیری مغناطیسی در مدل آیزینگ برابر است با:

$$\chi = \frac{\beta \cosh \beta B e^{-4\beta J}}{\left(\sinh^2 \beta B + e^{-4\beta J}\right)^{\frac{3}{2}}}. \qquad (۴۱)$$

از جمله می توان نفوذپذیری مغناطیسی را در میدان مغناطیس $B = 0$ حساب کنیم:

$$\chi(B = 0) = \frac{e^{\frac{2J}{kT}}}{kT}, \qquad (۴۲)$$

که نشان دهنده این است که نفوذ پذیری مغناطیسی در دمای صفر به سمت بی نهایت میل می کند.

- تمرین: تابع پارش مدل آیزینگ را بدون مغناطیسی برای شرایط مرزی بازِ زیر بدست آورید. در این شرایط مرزی اسپین اول همواره در حالت $s_1 = +1$ و اسپین آخر هم همواره در حالت $s_N = +1$ قرار دارند و در این مقادیر ثابت شده اند. راهنمایی: از روش ماتریس انتقال استفاده کنید.

۴ توابع همبستگی

در مطالعه هر مدل آماری یا بس ذره ای کار ما با محاسبه تابع پارش تمام نمی شود. این محاسبه اگر چه مهم ترین گام است اما هنوز تا درک رفتار سیستم بس ذره ای راه درازی در پیش داریم. بسیاری از خصوصیات فیزیکی یک مدل بس ذره ای از محاسبه توابع همبستگی [۱۰] بدست می آیند. این توابع همبستگی که به آنها توابع n نقطه ای [۱۱] نیز می گویند، همانطور که از اسم شان پیداست، نشان می دهند که گروه های ذرات در این سیستم بس ذره ای چه نوع همبستگی ای با هم دارند. تابع دو نقطه همبستگی جفت های ذرات و تابع سه نقطه ای هم بستگی گروه های سه تایی از ذرات را نشان می دهد. تابع یک ذره ای نیز رفتار متوسط تک تک ذرات را نشان می دهد. طبیعتا در این میان نقش توابع یک نقطه ای و دو نقطه ای از اهمیت بیشتری برخوردار است. مهم ترین خواص ترمودینامیکی به همین دو نوع تابع همبستگی مربوط اند. در ادامه نخست در باره معنای تابع دو نقطه ای و سپس روش محاسبه آن بیشتر توضیح می دهیم.

۱.۴ معنای تابع همبستگی

یک تابع همبستگی مثل $\langle S_iS_j\rangle$ را می توان به روش های مختلف حساب کرد. اما قبل از محاسبه بهتراست معنای آن را دریابیم. معلوم است که هروقت S_i و S_j تمایل به هم جهت بودن داشته باشند، $\langle S_iS_j\rangle$ مقدار بیشتری دارد. این موضوع را به ترتیب زیر می توان دریافت: فرض کنید که دو متغیر تصادفی x و y تابع توزیع احتمال $P(x,y)$ را داشته باشند. این دو متغیر مقادیر $+1$ و -1 را اختیار می کنند. در این صورت داریم:

[۱۰] Correlation Functions

[۱۱] n-point functions

$$P(x=y) = P(1,1) + P(-1,-1) = \langle \delta_{x,1}\delta_{y,1}\rangle + \langle \delta_{x,-1}\delta_{y,-1}\rangle \tag{۴۳}$$

اما می توانیم بنویسیم $\delta_{x,1} = \frac{1+x}{2}$ و $\delta_{x,-1} = \frac{1-x}{2}$. در نتیجه می توان نوشت:

$$P(x=y) = \frac{1}{4}\langle (1+x)(1+y)\rangle + \frac{1}{4}\langle (1-x)(1-y)\rangle = \frac{1}{2}(1+\langle xy\rangle). \tag{۴۴}$$

بنابراین نشان دادیم که:

$$P(S_i = S_j) = \frac{1}{2}(1+\langle S_iS_j\rangle), \qquad P(S_i = -S_j) = \frac{1}{2}(1-\langle S_iS_j\rangle). \tag{۴۵}$$

این رابطه نشان می دهد که تابع همبستگی $\langle S_iS_j\rangle$ مستقیما به احتمال هم جهت بودن S_i و S_j مربوط است.

تابع همبستگی معنای دیگری نیز دارد. این کمیت در واقع نشان می دهد که مقدار مغناطش در نقطه i یعنی $\langle S_i\rangle$ چقدر نسبت به تغییرات میدان مغناطیسی در نقطه j حساس است. برای درک این نکته سیستمی را در نظر بگیرید که میدان مغناطیسی ناهمگن دارد. هامیلتونی این سیستم به شکل زیر است:

$$H = H_0(S_1, S_2, \cdots S_N) - \sum_i B_iS_i. \tag{۴۶}$$

که در آن H_0 نشان دهنده برهم کنش های بین اسپین هاست که می تواند شکل خیلی کلی ای داشته باشد. همانطور که می بینید هامیلتونی این سیستم خیلی کلی است و مختص مدل آیزینگ نیست. در حقیقت نتیجه ای که بدست می آوریم کاملا کلی است و ربطی به مدل خاص آیزینگ ندارد و در همه ابعاد نیز برقرار است. می دانیم که تابع پارش این سیستم به صورت زیراست:

$$Z = \sum_{\{S\}} e^{\beta\sum_i B_iS_i - \beta H_0}. \tag{۴۷}$$

برای سادگی نمادگذاری موقتا نماد $\tilde{B}_i$ را به صورت زیر تعریف می کنیم: $\tilde{B}_i := \beta B_i$. با توجه به این رابطه و این نماد بدست می آوریم:

$$\langle S_i\rangle = \frac{1}{Z}\frac{\partial Z}{\partial \tilde{B}_i}, \qquad \langle S_iS_j\rangle = \frac{1}{Z}\frac{\partial^2 Z}{\partial \tilde{B}_i\partial \tilde{B}_j}. \tag{۴۸}$$

حال عبارت $\frac{\partial\langle S_i\rangle}{\partial\tilde{B}_j}$ را حساب می کنیم:

$$\begin{aligned}\frac{\partial\langle S_i\rangle}{\partial\tilde{B}_j} &= \frac{\partial}{\partial\tilde{B}_j}(\frac{1}{Z}\frac{\partial Z}{\partial\tilde{B}_i}) \\ &= \frac{-1}{Z^2}\frac{\partial Z}{\partial\tilde{B}_j}\frac{\partial Z}{\partial\tilde{B}_i}+\frac{1}{Z}\frac{\partial^2 Z}{\partial\tilde{B}_j\partial\tilde{B}_i} \\ &= -\langle S_i\rangle\langle S_j\rangle+\langle S_iS_j\rangle. \end{aligned} \tag{۴۹}$$

بنابراین به طور کلی رابطه زیر را بین تابع همبستگی و تابع پاسخ [۱۲] یک سیستم مغناطیسی بدست آوردیم:

$$G(i,j)\equiv\langle S_i\rangle\langle S_j\rangle-\langle S_i\rangle\langle S_j\rangle=kT\frac{\partial\langle S_i\rangle}{\partial B_j}. \tag{۵۰}$$

این رابطه بیان می کند که تابع G_{ij} در واقع مقدار حساسیت مغناطش در نقطه i را نسبت به تغییرات میدان مغناطیسی در نقطه j می سنجد.

حال می پردازیم به محاسبه دقیق تابع همبستگی در مدل آیزینگ یک بعدی. مثل تابع پارش، محاسبه تابع همبستگی نیز بسته به بود یا نبود میدان مغناطیسی و یا نوع شرایط مرزی به روش های متفاوتی قابل انجام است. در زیر بعضی از این روش ها را توضیح می دهیم. این روش ها منحصر به یک بعد هستند اگر چه به طور کلی می توان هسته این روش ها را به دو بعد نیز تعمیم داد.

۲.۴ محاسبه تابع همبستگی و طول همبستگی در غیاب میدان مغناطیسی

تابع همبستگی بین دو اسپین با افزایش فاصله بین آنها کم می شود. اغلب اوقات (یعنی وقتی به دمای بحرانی نزدیک نشده ایم) این همبستگی به صورت نمایی کم می شود. در واقع می توان نوشت:

$$G(i,j)\equiv\langle S_iS_j\rangle-\langle S_i\rangle\langle S_j\rangle\sim e^{-\frac{|i-j|}{\xi}} \tag{۵۱}$$

که در آن معنای $\sim$ این است که از مقادیر ثابت یا توابعی از فاصله بین دو اسپین که تغییرات زیاد ندارند صرف نظر کرده ایم و توجه خود را به کاهش نمایی همبستگی معطوف کرده ایم. این رابطه در واقع نشان می دهد که اسپین ها تا فاصله ی ξ نسبت به هم همبسته هستند و پس از این فاصله همبستگی آنها خیلی ضعیف می شود. در سیستم دو بعدی مثل این است که جزیره هایی از اسپین های همبسته بوجود می آید که اندازه شان از مرتبه ξ است. در واقع مثل این است که سیستم میکروسکوپی آیزینگ مثل یک سیستمی رفتار می کند که دیگر مقیاس طولی اش فاصله بین

[۱۲] Response Function

اسپین ها نیست بلکه همین طول همبستگی است. به همین دلیل است که محاسبه این طول همبستگی اهمیت خیلی زیادی دارد. این طول همبستگی را نیز به روش های متفاوت می توان محاسبه کرد. یک راه برای وقتی که شرایط مرزی باز باشد به ترتیب زیر است. نخست هامیلتونی را به طور موقت تغییر می دهیم به شکلی که همه ضرایب جفت شدگی با هم متفاوت باشند. به این ترتیب، تابع پارش برابر است با:

$$Z(K_1, K_2, \cdots K_N) = \sum_{S_1, S_2, \cdots S_N} e^{\sum_{i=1}^{N} K_i S_i S_{i+1}}, \qquad (۵۲)$$

و و $Z(K) = Z(K_1, K_2, \cdots K_N) |_{K_i=K}$. در این صورت داریم:

$$\langle S_i S_{i+1} \rangle = \frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial K_i}, \qquad \langle S_i S_{i+2} \rangle = \frac{1}{Z} \frac{\partial^2 Z}{\partial K_i \partial K_{i+1}}, \qquad \langle S_i S_{i+r} \rangle = \frac{1}{Z} \frac{\partial^r Z}{\partial K_i \partial K_{i+1} \cdots \partial K_{i+r-1}}. \qquad (۵۳)$$

پس از مشتق گیری ها می توان K_i ها را مساوی K قرار داد. در شرایط مرزی باز براحتی می توان تابع پارش را حساب کرد. این تابع پارش برابر است با:

$$Z = 2 \prod_{i=1}^{N-1} (2 \cosh K_i), \qquad (۵۴)$$

که از آن نتیجه می گیریم:

$$\langle S_i S_{i+r} \rangle = (\tanh K)^r. \qquad (۵۵)$$

می توانیم این رابطه را به شکل بهتری بنویسیم:

$$\langle S_i S_{i+r} \rangle = e^{-\frac{r}{\xi}} \qquad (۵۶)$$

که در مقایسه با رابطه قبلی مقدار زیر را برای ξ که به آن طول همبستگی می گوییم بدست می دهد:

$$\xi = \frac{1}{\ln \coth K}. \qquad (۵۷)$$

راه دیگر برای وقتی که شرایط مرزی باز باشد، در تمرین ها آمده است.

۳.۴ محاسبه تابع همبستگی در حضور میدان مغناطیسی- روش ماتریس انتقال

نخست روش بدست آوردن متوسط اسپین را در مرور می کنیم. می دانیم که

$$\langle S_i \rangle \quad = \quad \frac{1}{Z} \sum_{\{S_1, \cdots S_N\}} S_i e^{-\beta H}$$

$$= \frac{1}{Z}\sum_{\{S_1,\cdots S_N\}} S_i\langle S_1|T|S_2\rangle\langle S_2|T|S_3\rangle\cdots\langle S_{i-1}|T|S_i\rangle\langle S_N|T|S_1\rangle. \tag{۵۸}$$

حال ماتریس σ را چنان تعریف می کنیم که

$$\sigma|S\rangle = S|S\rangle \tag{۵۹}$$

یعنی

$$\sigma|1\rangle = |1\rangle, \qquad \sigma|-1\rangle = -|-1\rangle, \longrightarrow \sigma = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \tag{۶۰}$$

در این صورت رابطه (۵۸) را به شکل زیر می توانیم بنویسیم:

$$\begin{aligned} \langle S_i\rangle &= \frac{1}{Z}\sum_{\{S_1,\cdots S_N\}}\langle S_1|T|S_2\rangle\langle S_2|T|S_3\rangle\cdots\langle S_{i-1}|T\sigma|S_i\rangle\langle S_N|T|S_1\rangle \\ &= \frac{1}{Z}tr(T^{i-1}\sigma T^{N-i+1}) = \frac{tr(\sigma T^N)}{trT^N} \end{aligned} \tag{۶۱}$$

در حد ترمودینامیک تنها بزرگترین ویژه مقدار مهم است و در نتیجه خواهیم داشت:

$$\langle S_i\rangle = \langle\lambda_{max}|\sigma|\lambda_{max}\rangle. \tag{۶۲}$$

به این ترتیب متوسط اسپین در مسئله مکانیک آماری کلاسیک در یک بعد تبدیل شده است به یک متوسط شبه کوانتومی در صفر بعد. یعنی متوسط یک عملگر σ که متناظر با اسپین هست روی یک حالت در یک فضای هیلبرت که دیگر نه مختص یک زنجیره یک بعدی بلکه مختص تنها یک اسپین است. این تناظر به صورت کلی تر و با دامنه وسیع تری قابل اثبات است به این معنا که یک مدل مکانیک آماری که روی یک شبکه d بعدی معادل است با یک سیستم کوانتومی در یک شبکه $d-1$ بعدی. در ادامه این درس بازهم به این تناظر بازخواهیم گشت. حال به محاسبه تابع همبستگی می پردازیم. بر خلاف روش های قبلی که تنها وقتی کاربرد داشتند که میدان مغناطیسی صفر بود، در این روش میدان مغناطیسی می تواند غیر صفر باشد. شرایط مرزی را پریودیک در نظر می گیریم و می نویسیم

$$\langle S_iS_j\rangle = \frac{1}{Z}\sum_{\{S\}} S_iS_j\langle S_N|\mathcal{T}|S_{N-1}\rangle\cdots\langle S_{i+1}|\mathcal{T}|S_i\rangle\cdots\langle S_{j+1}|\mathcal{T}|S_j\rangle\cdots\langle S_2|\mathcal{T}|S_1\rangle. \tag{۶۳}$$

با تعریف ماتریس σ_z به صورت $\sigma_z = \sum_{1,-1} S|S\rangle\langle S|$ یا $\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$ خواهیم داشت:

$$\begin{aligned}
\langle S_i S_j\rangle &= \frac{1}{Z}\sum_{\{S\}}\langle S_N|\mathcal{T}|S_{N-1}\rangle\cdots\langle S_{j+1}|\mathcal{T}\sigma_z|S_j\rangle\cdots\langle S_{i+1}|\mathcal{T}\sigma_z|S_i\rangle\cdots\langle S_2|\mathcal{T}|S_1\rangle \\
&= \frac{1}{Z_N} tr(\mathcal{T}^{N-j}\sigma_z\mathcal{T}^{j-i}\sigma_z\mathcal{T}^i) \\
&= \frac{tr(\mathcal{T}^{N-j}\sigma_z\mathcal{T}^{j-i}\sigma_z\mathcal{T}^i)}{tr(\mathcal{T}^N)}.
\end{aligned} \tag{۶۴}$$

در حد ترمودینامیک، وقتی که $N \longrightarrow \infty$ تنها بزرگترین ویژه مقدار و ویژه بردار مربوط به ماتریس انتقال باقی می مانند و صورت و مخرج کسر بالا نیز ساده می شوند:

$$\langle S_i S_j\rangle = \frac{\langle\lambda_+|\sigma_z\mathcal{T}^{j-i}\sigma_z|\lambda_-\rangle}{\lambda_+^{j-i}}. \tag{۶۵}$$

حال می خواهیم تابع همبستگی متصل یعنی $G_{i,j} = \langle S_i S_j\rangle - \langle S_i\rangle\langle S_j\rangle$ را در حد فاصله های بزرگ یعنی $|j-i| >> 1$ بدست آوریم. دومین ویژه مقدار ماتریس انتقال را از نظر اندازه با λ_- نشان می دهیم. اگر یک عملگر واحد به صورت $I = \sum_\lambda |\lambda\rangle\langle\lambda|$ قبل از σ_z باز کنیم و از توان $|j-i|$ بقیه ویژه مقدار ها در مقابل ویژه مقدار اول و دوم صرف نظر کنیم بدست می آوریم:

$$\langle S_i S_j\rangle - \langle S_i\rangle\langle S_j\rangle = \lambda_+^{i-j}\langle\lambda_+|\sigma_z\mathcal{T}^{j-i}\sigma_z|\lambda_+\rangle \tag{۶۶}$$

برای $|j-i| >> 1$ تابع همبستگی متصل به شکل زیر در می آید:

$$\begin{aligned}
\langle S_i S_j\rangle - \langle S_i\rangle\langle S_j\rangle &= \lambda_+^{i-j}\langle\lambda_+|\sigma_z\mathcal{T}^{j-i}\sigma_z|\lambda_+\rangle - \langle\lambda_+|\sigma_z|\lambda_+\rangle^2 \\
&= \lambda_+^{i-j}\left[\langle\lambda_+|\sigma_z|\lambda_+\rangle\lambda_+^{j-i}\langle\lambda_+|\sigma_z|\lambda_+\rangle + \langle\lambda_+|\sigma_z|\lambda_-\rangle\lambda_-^{j-i}\langle\lambda_-|\sigma_z|\lambda_+\rangle\right] - [\langle\lambda_+|\sigma_z|\lambda_+\rangle]^2 \\
&= (\frac{\lambda_-}{\lambda_+})^{j-i}\langle\lambda_+|\sigma_z|\lambda_-\rangle\langle\lambda_-|\sigma_z|\lambda_+\rangle.
\end{aligned} \tag{۶۷}$$

به این ترتیب می فهمیم که برای $|j-i|$ های خیلی بزرگ تر از 1:

$$G_{ij} \sim e^{|j-i|\ln\frac{\lambda_-}{\lambda_+}} \sim e^{-\frac{|j-i|}{\xi}}, \tag{۶۸}$$

که در آن ξ یعنی طول همبستگی برابر است با:

$$\xi = \frac{1}{\ln(\frac{\lambda_+}{\lambda_-})}. \tag{۶۹}$$

بنابراین طول همبستگی توسط نسبت بزرگترین ویژه مقدار T به ویژه مقدار بعدی داده می شود. این نتیجه وقتی که مدل های فراتر از مدل آیزینگ یک بعدی نیز مطالعه می شوند درست است. در واقع استدلال بالا هیچ ربطی به یک مدل خاص نداشت و به طور کلی معتبر بود. از مدل آیزینگ یک بعدی داریم:

$$\frac{\lambda_+}{\lambda_-} = \frac{\cosh\beta B + \sqrt{\sinh^2\beta B + e^{-4\beta J}}}{\cosh\beta B - \sqrt{\sinh^2\beta B + e^{-4\beta J}}} \tag{۷۰}$$

در حالت های حدی این عبارت و در نتیجه طول هبستگی شکل ساده ای پیدا می کند. مثلا در میدان مغناطیسی صفر، خواهیم داشت:

$$\xi(B=0) = \frac{1}{\ln(\coth\frac{2J}{kT})}. \tag{۷۱}$$

هم چنین براحتی می توان دریافت که:

$$\xi(T\longrightarrow\infty) = 0, \qquad \xi(T\longrightarrow 0) \longrightarrow\sim \frac{1}{2}e^{\frac{2J}{kT}} \longrightarrow \infty. \tag{۷۲}$$

۴.۴ شکست تقارن

بسیاری از گذارهای فاز همراه با شکست تقارن هستند. معنای این گزاره چیست؟ موجودی میکروسکوپی و خیالی را در نظر بگیرید که در آب زندگی می کند. وقتی که دمای آب بالاتر از دمای انجماد آب است دنیای این موجود میکروسکوپی تقارن کامل کروی و انتقالی دارد. همه جای محیط اطرافش مثل هم و هم جهت ها نیز مثل هم هستند. وقتی که دما به زیر نقطه انجماد می رسد و آب یخ می بندد به ناگهان دنیای این موجود کوچک تغییر می کند و جهت های گوناگون دیگر یکی نیستند. هم چنین چون یخ یک ساختمان بلوری دارد تقارن انتقالی نیز دیگر وجود ندارد. بنابراین در اثر گذار فاز این تقارن ها شکسته شده اند. یک نمونه دیگر از شکست تقارن وقتی است که یک ماده فرومغناطیس دچار گذار فاز می شود. در دمای بالاتر از دمای بحرانی ، دوقطبی های مغناطیسی در همه جهات پراکنده شده اند و هیچ جهت خاصی را بر جهت دیگر ترجیح نمی دهند. دنیای اطراف یک موجود میکروسکوپی کاملا تقارن کروی دارد. اما وقتی که دما به زیر دمای بحرانی می رسد دوقطبی ها در یک جهت خاص شروع به منظم شدن می کنند و مغناطش در یک راستا پدیدار می شود و این راستا بر راستاهای دیگر امتیاز پیدا می کند. این جهت کاملا به طور تصادفی اختیار می شود به نحوی که اگر یک بار دیگر آزمایش را تکرار کنیم مغناطش خودبخود در یک جهت دیگر بوجود می آید که هیچ ربطی به جهت قبلی ندارد. این پدیده یعنی شکست خود بخود تقارن [۱۳] در بسیاری از گذار فاز ها وجود دارد و ما در درسهای آینده در باره آن به

[۱۳] Sponteneous Symmetry Breaking

تفصیل صحبت خواهیم کرد. البته باید توجه داشت که بعضی از گذار فاز ها نیز چنین پدیده ای را از خود نشان نمی دهند مثل تبدیل بخار به آب که در هر دو مورد تقارن کروی وجود دارد. هم چنین اخیرا نیز دسته ای از گذار فاز ها موسوم به گذار فاز توپولوژیک کشف شده اند که همراه با شکست تقارن نیستند.

۵.۴ شکست تقارن و خاصیت ارگودیک

چرا شکست تقارن از لحاظ نظری عجیب است؟ چرا این موضوع احتیاج به توجیه و توصیف زیربنایی دارد؟ برای فهم این موضوع به یک مثال ساده یعنی پدیده فرومغناطیس توجه می کنیم. برهم کنش اتم های یک ماده جامد که باعث ایجاد پدیده فرومغناطیس می شود را می توان به خوبی با هامیلتونی زیر توصیف کرد:

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \tag{۷۳}$$

که درآن $\mathbf{S}_i$ دوقطبی دائمی اتمی است که در نقطه i از شبکه قرار دارد و J ثابت برهم کنش است. دوقطبی دائمی اتم ها با اسپین آنها متناسب است. همانطور که دیده می شود این هامیلتونی تحت دوران همه اسپین ها تغیر نمی کند. یعنی اینکه

$$H(\{\mathbf{S}_i\}) = H(\{\mathbf{S'}_i\}), \tag{۷۴}$$

که در آن $\mathbf{S}'_i = R\mathbf{S}_i$ و R یک عملگر دوران است. می دانیم که بنابر مکانیک آماری وقتی که سیستمی در دمای T قرار دارد همه هیئت های ممکن با احتمال بولتزمن اشغال می شوند یعنی اینکه

$$P(\{\mathbf{S}_i\}) = \frac{1}{Z} e^{-\beta H(\{\mathbf{S}_i\})} \tag{۷۵}$$

تقارن ۷۴ نتیجه اش این است که

$$P(\{\mathbf{S}_i\}) = P(\{\mathbf{S'}_i\}) \tag{۷۶}$$

یعنی همه حالت هایی که با دوران اسپین ها از یک دیگر بدست می آیند هم احتمال هستند. از جمله یک نتیجه این تقارن این است که

$$P(\{\mathbf{S}_i\}) = P(\{-\mathbf{S}_i\}) \tag{۷۷}$$

زیرا با یک دوران به اندازه ۱۸۰ درجه حول یک محور می توان همه اسپین ها را به منهای خود آنها تبدیل کرد. چنین تقارنی معنایش این است که متوسط اسپین ها در حالت تعادل می بایست صفر باشد. از طرفی می بینیم که در دمای پایین تر از گذار فاز متوسط اسپین ها یا متوسط مغناطش

غیرصفر می شود و به اصطلاح شکست تقارن رخ می دهد. سوالی که پیش روی ماست این است که چگونه می بایست این شکست تقارن را با توجه به اصول مسلم مکانیک آماری توضیح دهیم؟ برای توضیح این پدیده می بایست به اصل موضوع مکانیک آماری برگردیم و مبنای رابطه ۷۵ را خوب بفهمیم.

می دانیم که رابطه (۷۵) برای سیستم هایی است که در دمای ثابت قرار دارند. این رابطه از یک اصل کلی تر در مکانیک آماری استخراج می شود که بر مبنای آن یک سیستم بسته که در حال تعادل است همه میکروحالت هایش را با احتمال یکسان اشغال می کند. بنابراین اگر بخواهیم مبنای شکست تقارن را بفهمیم می بایست مبنای این اصل را بفهمیم. هامیلتونی یک سیستم چه در مکانیک کوانتومی و چه در مکانیک کلاسیک تابعی است که باعث تحول آن سیستم در فضای فاز می شود. فضا ی فاز با توجه به درجات آزادی یک سیستم تعیین می شود. به عنوان مثال برای یک گاز که شامل N اتم است هر نقطه از فضای فاز با $6N$ متغیر مشخص می شود . در هر لحظه وضعیت کل سیستم (در اینجا کل اتم های گاز) با یک نقطه در این فضای بزرگ تعیین می شود. هامیلتونی سیستم باعث حرکت این نقطه در فضای فاز می شود. به دلیل شرایط مرزی (دیواره ها) ، و هم چنین وجود نقص ها و ناخالصی ها و برهم کنش های کوچکی که الزاما در هامیلتونی ایده آل سیستم نوشته نشده اند نقطه نماینده این سیستم یک مسیر بسیار کاتوره ای را در فضای فاز طی می کند، شکل (۳). به عنوان مثال در مورد یک گاز ایده آل برخورد بین ذرات و بین ذرات و دیواره ها باعث می شو د که مسیر نقطه نماینده سیستم از یک خط راست به یک مسیر زیگزاکی و کاتوره ای همراه با شکستگی های خیلی زیاد تبدیل شود. فاصله زمانی بین این زیگزاک ها چیزی در حدود زمان پویش آزاد میانگین اتم ها و فاصله مکانی بین آنها در حدود فاصله پویش آزاد اتم ها ست. این مسیر به تدریج و با یک مقیاس زمانی که بستگی به سیستم مورد بحث دارد فضای فاز را پر می کند. در چنین حالتی می توان گفت که وقتی که سیستم به حالت تعادل می رسد این نقطه نماینده تمام فضای فاز را کم و بیش پر می کند و در فاصله زمانی ای که ما یک کمیت ماکروسکوپی از سیستم را مشاهده می کنیم نقطه نماینده سیستم تقریبا تمام فضای فاز را طی می کند. بیایید مختصات نقطه نماینده سیستم را به اختصار با x نشان دهیم با قبول این نکته که x نشان دهنده مجموعی از مختصات است. تحت این شرایط هرگاه بخواهیم متوسط یک کمیت مثل $A(x)$ را حساب کنیم باید بنویسیم:

$$\langle A\rangle = \frac{1}{T}\int A(x(t))dt \qquad (۷۸)$$

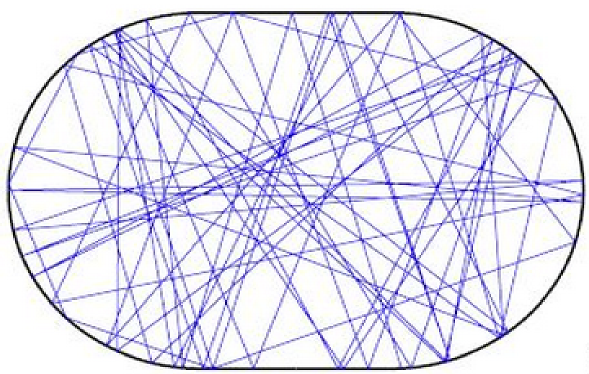
که در آن T زمانی است که طول کشیده است که کمیت A اندازه گیری شود. دقت کنید که ممکن است که این زمان در مقیاس ماکروسکوپی خیلی کوتاه باشد ولی در مقیاس میکروسکوپی بی اندازه بزرگ باشد. در چنین شرایطی می نویسیم:

$$\langle A\rangle = \lim_{T\longrightarrow\infty}\frac{1}{T}\int A(x(t))dt. \qquad (۷۹)$$

این محاسبه به این معناست که تحول کمیت A را همراه با حرکت نقطه نماینده سیستم در تمام طول مسیر دنبال کرده و سپس متوسط کمیت A را محاسبه می کنیم. حال اگر T واقعا نسبت به زمان مشخصه تحول سیستم بزرگ باشد می توانیم این متوسط را بجای اینکه روی مسیر حرکت دنبال کنیم با اتکا به این که مسیر حرکت تمام فضای فاز را پر کرده است به صورت زیر حساب کنیم:

$$\langle A \rangle = \int dx A(x)\rho(x), \tag{۸۰}$$

که درآن $\rho(x)$ چگالی احتمال این است که نقطه نماینده سیستم در نقطه x و در ناحیه ای به حجم dx باشد. این که این دو نوع متوسط باهم مساوی هستند در واقع یک فرض است که به آن فرض ارگودیک [۱۴] می گوییم. این فرض را برای سیستم های خیلی ساده مثلا سیستمی که دارای یک ذره است می توان به طور دقیق ثابت کرد ولی برای سیستم های بزرگ تر اثباتی برای آن وجود ندارد.



شکل ۳: نمایشی از اصل ارگودیک. در زمان های به اندازه کافی طولانی مسیر یک سیستم بسته در فضای فاز تقریبا تمام فضای فاز را می پوشاند و با احتمال یکسان می توان نقطه نماینده سیستم را در هر جایی از فضای فاز پیدا کرد. خاصیت ارگودیک برای یک توپ بیلیارد تقریبا به ازای هر شرایط اولیه ای برقرار است. منظور از تقریبا این است که مجموعه شرایط اولیه ای که این خاصیت برایشان برقرار نیست بی اندازه کوچک است.

در مکانیک آماری یاد می گیریم که برای سیستمی که در دمای ثابت قرار دارد، $\rho(x)$ برابر است با

$$\rho(x) = \frac{1}{Z} e^{-\beta H(x)}. \tag{۸۱}$$

[۱۴] Hypothesis Ergodic

حال می توانیم بفهیم که چرا شکست تقارن رخ می دهد. فرض کنید که $H(x) = H(-x)$ باشد. این یک تقارن هامیلتونی است . بنابراین از بحث بالا به دست می آوریم که $\langle x \rangle = 0$. اما اگر در عمل ببینیم که $\langle x \rangle \neq 0$ است به این معناست که خاصیت ارگودیک برقرار نیست یا به عبارت دیگر شکسته شده است [۱۵]. معنای این حرف این است که نقطه نماینده سیستم در طول مسیرحرکت خود به ناحیه ای رفته که در آنجا مثلا x مقدارهای مثبت دارد و در آنجا گیر افتاده است یعنی روند دینامیک در آن ناحیه آنقدر کند بوده است (در مقایسه با زمان مشاهده ما) که این نقطه نتوانسته است به ناحیه های منفی نیز برسد . به این دلیل است که متوسط مقدار غیر صفر اختیار کرده است و تقارن شکسته شده است.

---

۵ چرا در مدل آیزینگ یک بعدی گذار فاز رخ نمی دهد.

دیدیم که در مدل آیزینگ یک بعدی و در دمای غیر صفر گذار فاز رخ نمی دهد. در این بخش می خواهیم دلیل این پدیده را از نظر فیزیکی بفهمیم. این مسئله را می توان از راه های گوناگون توضیح داد.

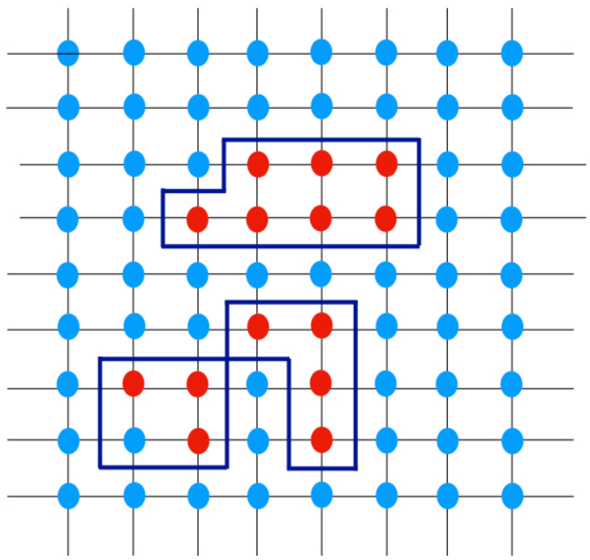
۱.۵ استدلال مبتنی بر انرژی و شکست تقارن

حالت هایی را که می توانند نشان دهنده فاز منظم باشند در نظر می گیریم. فرض کنید که تمام اسپین ها در یکی از کمینه های انرژی مثل $C = (+ + + + + + + + \cdots +)$ قرار گرفته باشند. حال فرض کنید که یک جزیره یک بعدی از اسپین ها از حالت $+$ به حالت $-$ تغییر کنند، مثل حالت زیر: $C_1 = (+ + + + - - - - - - - - - - + + + + + + \cdots +)$ تفاوت انرژی این حالت و حالت قبلی برابر است با $E(C_1) - E(C) = 4J$. حال فرض کنید که یکی دیگر از اسپین ها نیز برگردد و حالت $C_2 = (+ + + + - - - + + + + + + + \cdots +)$ تشکیل شود براحتی معلوم می شود که $E(C_2) - E(C_1) = 0$ و هرچند تا از اسپین ها را که برگردانیم دیگر احتیاجی به انرژی اضافی نداریم. معنای این حرف این است که این جزیره بدون صرف انرژی بیشتر می تواند در اثر اختلالات گرمایی بزرگ شده و به حالت $C' = (- - - - - - - - - - \cdots - - -)$ تبدیل شود، به عبارت دیگر دو حالت منظمِ $(+ + + + + + \cdots + + + + + +)$ و $(- - - - - - - \cdots - - - - - - - -)$ تنها با یک سد انرژی میکروسکوپی به اندازه $4J$ از هم جدا شده اند و ارتفاع این سد ربطی به اندازه سیستم ندارد. بنابراین افت و خیز های گرمایی اجازه نمی دهند که این سیستم یک بعدی در یکی از کمینه های انرژی گیر کند. به عبارت دیگر افت و خیز های گرمایی اجازه شکست تقارن و پیدایش فاز منظم را نمی دهند.

[۱۵] Ergodicity Breaking

۲.۵ استدلال مبتنی بر انرژی آزاد

سیستمی که در دمای ثابت T قرار دارد، سعی می کند به طرف حالت هایی برود که انرژی آزاد آنها کمتر باشد و وقتی به تعادل می رسد که این انرژی آزاد به کمترین مقدار خود رسیده باشد. انرژی آزاد با تابع $F = E - TS$ داده می شود. حال باید از خود سوال کنیم که آیا حالتی مثل $C_0 = (++++++++++++)$ می تواند حالتی باشد که در آن F کمترین مقدار خود را دارد؟ برای پاسخ به این سوال ، انرژی آزاد حالت های نزدیک به C_0 را نگاه می کنیم. برای آنکه F در نقطه C_0 کمترین مقدار را داشته باشد می بایست انرژی آزاد حالت های نزدیک به C_0 از انرژی آزاد حالت C_0 بیشتر باشد. حالتی را در نظر بگیرید که در آن یکی از اسپین ها برگشته باشد. برای این حالت که آن را C' می نامیم ، انرژی برابر است با $E_0 + 4J$ که در آن E_0 انرژی حالت C_0 است. ولی تعداد چنین حالت هایی N تا ست زیرا اسپین منفی می تواند در هرجایی از شبکه ی N تایی اتفاق افتاده باشد. بنابراین انرژی آزاد برای یک حالت ماکروسکوپی که انرژی اش برابر با $E_0 + 4J$ است برابر است با $F_1 = E_0 + 4J - kT\ln(N)$. در نوشتن این رابطه از این استفاده کرده ایم که آنتروپی یک ماکروحالت که تمام میکروحالت هایش با احتمال یکسان اشغال می شوند برابر است با $k\ln\Omega$ که در آن Ω تعداد میکروحالت های مربوطه است. اما رابطه فوق نشان می دهد که با افزایش N همواره F منفی می شود مگر وقتی که T برابر با صفر باشد. بنابراین هروقت دمای غیرصفر داشته باشیم، حالت C_0 یا متناظر آن که همه اسپین ها منفی هستند نقاط کمینه تابع F و در نتیجه نقاط تعادل ترمودینامیکی نیستند. دقت کنید که این مسئله کاملا مختص یک بعد است و در واقع برای همه مدل های یک بعدی که برهم کنش هایی با برد محدود دارند صادق است. این نوع استدلال در دو بعد و بالاتر نشان می دهد که گذار فاز در دمای محدود امکان پذیراست. در واقع اگر حالت C_0 و حالت های نزدیک به آن یعنی حالت هایی را که بعضی از اسپین ها برگشته اند، در دو بعد در نظر بگیریم آنگاه وضعیتی مثل شکل (۴) داریم:



شکل ۴: در دمای صفر همه اسپین ها در یک جهت قرار گرفته اند. در این شکل همه اسپین های زمینه $+1$ هستند ولی در اثر افت و خیز گرمایی اینجا و آنجا جزیره هایی از اسپین های منفی شکل گرفته اند. انرژی این حالت ها از حالت زمینه به اندازه $\Delta E = 2J \times l(C)$ بیشتر است که در آن $l(C)$ محیط کل جزیره های تشکیل شده است. جزیره ها می توانند یک پارچه یا چندپارچه باشند.

یک حالت کمی بی نظم که در آن گروهی از اسپین ها برگشته و تشکیل یک جزیره داده اند در نظر بگیرید. تفاوت انرژی این حالت را از انرژی حالت منظم با ΔE نشان می دهیم. اگر محیط جزیره را با L نشان دهیم دراین صورت خواهیم داشت:

$$\Delta E = 2JL. \tag{۸۲}$$

طبیعی است که تعداد زیادی میکروحالت مشابه وجود دارد که همه آنها تفاوت انرژی شان با مقدار بالا نشان داده می شود. همگی این حالت ها جزیره های یک یا چند پارچه ای را نشان می دهد که مجموع محیط های آنها برابر با L است. تعداد این جزیره ها را می توان تخمین زد. در واقع اگر تعداد چنین جزیره هایی را با N_L نشا ن دهیم می توانیم بنویسیم

$$N_L \approx (z-1)^L. \tag{۸۳}$$

که در آن z تعداد همسایه های یک نقطه از شبکه است. دلیل این رابطه این است که می توان تصور کرد که محیط یک جزیره رد مسیری است که یک ولگرد از خود به جا می گذارد و این ولگرد در هر قدم از ولگشت خود $z-1$ انتخاب دارد و چون تعداد قدم ها برابر با L است بنابراین تعداد کل مسیرهای ممکنی که می تواند طی کند با تقریب قابل قبولی از مرتبه بالا ست. به این ترتیب بدست می آوریم که میزان تغییر انرژی آزاد برای این ماکروحالت برابر است با:

$$\Delta F \approx \Delta E - T\Delta S = \Delta E - kT\Delta N_L = 2JL - kTL\ln(z-1) = L(2J - kT\ln(z-1)) \tag{۸۴}$$

این رابطه نشان می دهد که یک دما وجود دارد که بالاتر از آن به هم خوردن نظم آیزینگ باعث کاهش انرژی آزاد می شود. این دما همان دمای گذار است و توسط رابطه زیر داده می شود:

$$T_c = \frac{2J}{k\ln(z-1)}, \tag{۸۵}$$

در دماهای پایین تر از T_c نظم فرومغناطیسی پایدار است و در دماهای بالاتر، این نظم پایدار نیست.

۶ نظریه میدان متوسط

تا کنون به حل دقیق مدل آیزینگ پرداختیم. این مدل ساده ترین مدل از مجموعه ای از ذرات است که با یکدیگر برهم کنش دارند، ذرات سر جای خود ساکن اند و حرکت نمی کنند، بنابراین انرژی جنبشی در این دستگاه بس ذره ای وجود ندارد. درجه آزادی هر ذره نیز خیلی ساده است و دو مقدار $+1$ و -1 را اختیار می کند. هر ذره نیز تنها با ذره کناری اش برهم کنش دارد. با این وجود دیدیم که همین مدل ساده نیز خیلی به سختی تن به حل دقیق می دهد و تنها در موارد خیلی نادری آن هم با زحمت بسیار می توان تابع پارش این مدل را حساب کرد. اگر برای چنین مدل ساده ای محاسبه تابع پارش تا این اندازه سخت است می توان تصور کرد که محاسبه مدل های واقعی تر مثل یک گاز که از مولکول های چنداتمی تشکیل شده و هر مولکول آن درجات آزادی گوناگون دارد و مولکول های دور و نزدیک با هم برهم کنش دارند تا چه اندازه دشوار و عملا غیر ممکن است. البته جای ناامیدی نیست به دو دلیل مهم:

یک ـ همواره می توان به جای حل دقیق از روش های تقریبی استفاده کرد که با تقریب خوبی خصوصیات ترمودینامیکی یک دستگاه را بدست

می دهند.

دو- بسیاری از خصوصیات ترمودینامیکی یک دستگاه بس ذره ای آنقدرها که ما فکر می کنیم به جزییات میکروسکوپی ذرات و برهم کنش های آنها بستگی ندارد. اغلب اوقات می توانیم از جزییات صرف نظر کنیم و با در نظر گرفتن خصوصیات اصلی مدل ساده تری بسازیم که به همان خوبی رفتار آن دستگاه را توصیف کند.

در این فصل به یکی از مهم ترین روش های مطالعه دستگاه های بس ذره ای یعنی روش میدان متوسط می پردازیم. این روش اولین روش تقریبی ای است که در مطالعه دستگاه های بس ذره ای امتحان می کنیم و خوبی ها و بدی های خودش را دارد که به آن ها خواهیم پرداخت. اساس این روش هم این است که با جایگزین کردن درجات آزادی ذراتی که در نزدیکی یک ذره قرار دارند با متوسط آن درجات آزادی عملا محاسبه تابع پارش را به محاسبه تابع پارش یک ذره منفرد کاهش می دهیم. در این فصل به توصیف این روش بازهم در ساده ترین زمینه یعنی مدل مغناطیسی می پردازیم. در فصل های بعد این روش را برای مدل های دیگر نیز به کار خواهیم بست.

برای توصیف نظریه میدان متوسط [۱۶] 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:

$$H=-J\sum_{\langle i,j\rangle}S_iS_j-B\sum_i S_i, \qquad (۸۶)$$

به این ترتیب یک اسپین (یا دوقطبی) هم تحت تاثیر میدان خارجی B 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:

$$Z=\sum_{\{S_i\}}e^{\beta J\sum_{\langle i,j\rangle}S_iS_j+\beta B\sum_i S_i}, \qquad (۸۷)$$

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.

[۱۶] Mean Field Theory

اگر مجموعه همسایه های اسپین i ام را با N_i نشان دهیم می توانیم در درون تابع پارش بنویسیم:

$$\sum_{\langle i,j\rangle} S_i S_j = \sum_i S_i \sum_{j\in N_i} S_j \tag{۸۸}$$

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

$$\sum_{j\in N_i} S_j = z\frac{\sum_{j\in N_i} S_j}{z} \approx z\langle S\rangle = zm \tag{۸۹}$$

که در آن

$$m := \frac{1}{z}\sum_{j\in N_i} S_j \tag{۹۰}$$

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

$$Z \approx \sum_{\{S_i\}} e^{\beta\sum_i S_i(Jzm+B)}, \tag{۹۱}$$

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

$$\langle s\rangle = m. \tag{۹۲}$$

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 $Jzm + B$ 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:

$$Z \approx {Z_1}^N \tag{۹۳}$$

که Z_1 تابع پارش تک ذره ای است

$$Z_1 = \sum_{\{S_i=\pm1\}} e^{\beta S_i(Jzm+B)} = 2\cosh\beta(Jzm+B), \tag{۹۴}$$

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

$$m = \frac{1}{N}\frac{\partial}{\partial \beta h}\ln Z = \tanh\beta(Jzm + B). \tag{۹۵}$$

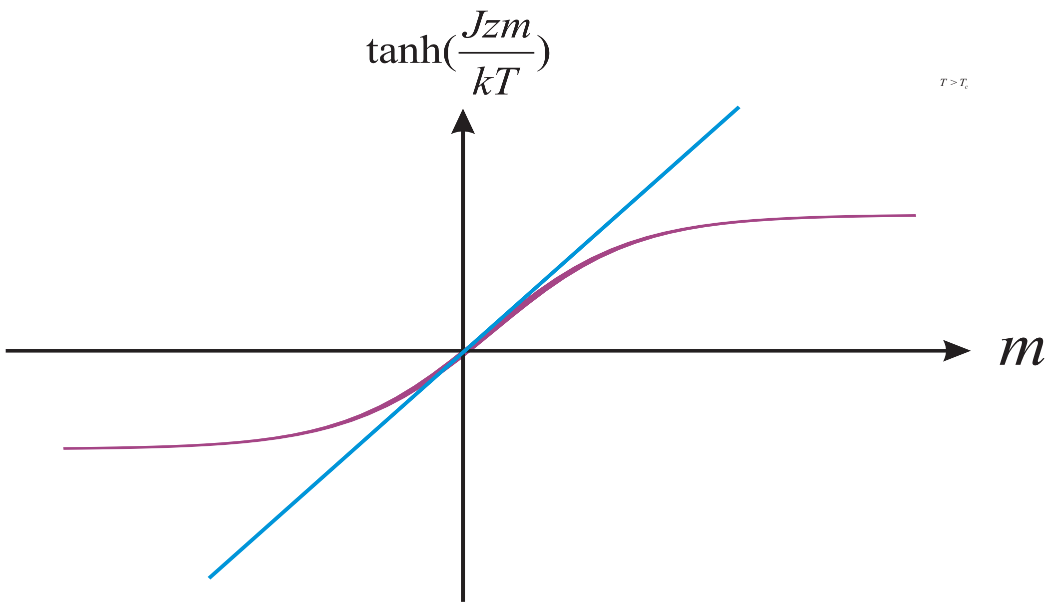
این رابطه در واقع معادله حالت سیستم مغناطیسی را نشان می دهد که m ، B و T را به هم مرتبط می کند. به ازای هر مقدار ثابت B می توان این معادله را به شکل گرافیک حل کرد و مقدار m را برحسب B و T پیدا کرد. اگر بخواهیم مغناطش خودبخود یعنی مغناطشی را که در میدان مغناطیسی صفر وجود دارد پیدا کنیم می بایست این معادله را در $B = 0$ حل کنیم یعنی می بایست معادله

$$m = \tanh\beta Jzm \tag{۹۶}$$

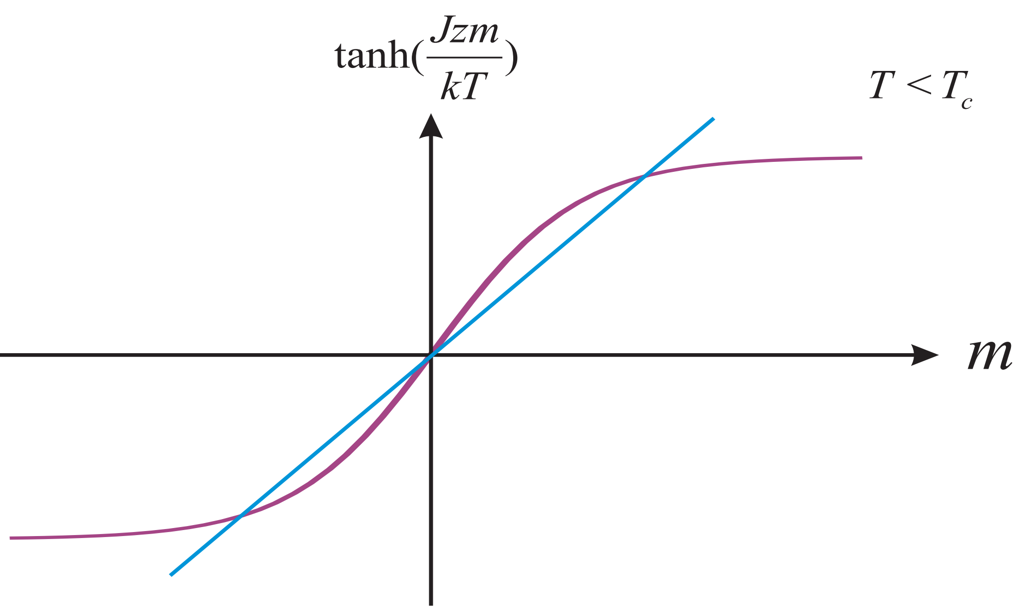
را حل کنیم.

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 ۶ ولی اگر این مشتق کمتر از یک باشد فقط حل صفر برای m وجود دارد، شکل ۶ . 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:

$$T_c := \frac{Jz}{k} \tag{۹۷}$$



شکل ۵: وقتی که دما بیشتر از دمای بحرانی است. 96 حل گرافیکی معادله



شکل ۶: وقتی که دما کمتر از دمای بحرانی است. ۹۶ حل گرافیکی معادله

شکل های ۶ و ۶ 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 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.

■ تمرین: وقتی که معادله (۹۶) را به صورت گرافیکی حل می کنیم در دمای زیر دمای بحرانی نقطه $m = 0$ نیز هم چنان یک جواب این معادله است. چرا این جواب را در نظر نمی گیریم؟ برای پاسخ به این سوال، مقدار انرژی آزاد را به ازای $m = 0$ و به ازای دو مقدار غیرصفری که بدست آورده ایم حساب کنید و آن را با هم مقایسه کنید. نشان دهید که نقطه $m = 0$ نمی تواند نقطه تعادل باشد.

با محاسبه تابع انرژی آزاد هلمهولتز می توانیم این موضوع را به شکل دقیق تری نشان دهیم. می دانیم که وقتی هر سیستم بسته ای در دمای ثابت در جهتی حرکت می کند که تابع انرژی هلمهولتز آن کم شود و نهایتا در حالت تعادل این تابع انرژی به مقدار کمینه خود می رسد. این مقدار کمینه و تعادلی همان است که ما می توانیم از رابطه $F = -kT \ln Z$ حساب کنیم. اما در این استدلال ما با این مقدارِ تعادلی کاری نداریم بلکه می خواهیم برای یک حالت کلی که الزاما حالت تعادل نیست از رابطه $F = E - TS$ تابع انرژی هلمهولتز را حساب کنیم. این موضوع نیاز به توضیح بیشتری دارد. در رابطه $F = E - TS$ می توانیم قرار دهیم

$$F = E - TS = \sum_\alpha E_\alpha P_\alpha - kT \sum_\alpha P_\alpha \ln P_\alpha \qquad (۹۸)$$

که در آن P_α احتمال این است که دستگاه ترمودینامیکی در میکروحالت α باشد. در حال تعادل می دانیم که این احتمال برابر است با:

$$P_\alpha = \frac{e^{-\beta E_\alpha}}{Z}$$

و در نتیجه $\ln P_\alpha = -\beta E_\alpha - \ln Z$ و یا

$$E_\alpha = -kT \ln Z - \ln P_\alpha$$

. اگر بجای E_α این مقدار آخری را در عبارت (۹۸) قرار دهیم با یک محاسبه ساده به رابطه $F = -kT \ln Z$ می رسیم. بنابراین عبارت $F = -kT \ln Z$ عبارت صحیح برای تابع انرژی آزاد است وقتی که دستگاه به حالت تعادل رسیده باشد. برای این که تابع انرژی آزاد را برای یک حالت غیرتعادلی بدست آوریم می بایست از رابطه مستقیم (۹۸) استفاده کنیم. به این منظور و در چارچوب تقریب میدان متوسط، مقدار متوسط هر اسپین را $\tilde{m}$ می گیریم و نمادی را برای آن به کار می بریم که با مقدار تعادلی یعنی m متفاوت باشد. در این صورت با توجه به شکل

هامیلتونی در غیاب میدان مغناطیسی، انرژی برابر است با:

$$E = -JN\frac{z}{2}\tilde{m}^2. \qquad (۹۹)$$

برای محاسبه انتروپی، می بایست تعداد میکروحالت هایی را محاسبه کنیم که با متوسط اسپین $\tilde{m}$ سازگار است. چنین هیئتی دارای N_+ تا اسپین رو به بالا و N_- تا اسپین رو به پایین است که در شرایط زیر صدق می کنند:

$$N_+ + N_- = N \ \ , \ \ N_+ - N_- = \tilde{m}N, \qquad (۱۰۰)$$

و یا

$$N_+ = \frac{N}{2}(1+\tilde{m}) \qquad N_- = \frac{N}{2}(1-\tilde{m}). \qquad (۱۰۱)$$

تعداد این نوع هیئت ها برابر است با:

$$\Omega = \frac{N!}{N_+!N_-!} = \frac{N!}{(\frac{N(1+\tilde{m})}{2})!(\frac{N(1-\tilde{m})}{2})!} \qquad (۱۰۲)$$

از تقریب استرلینگ استفاده می کنیم و نشان می دهیم

$$\ln\Omega = -N\left[\frac{1+\tilde{m}}{2}\ln\frac{1+\tilde{m}}{2} + \frac{1-\tilde{m}}{2}\ln\frac{1-\tilde{m}}{2}\right]. \qquad (۱۰۳)$$

بنابراین خواهیم داشت:

$$F(\tilde{m},T) = -JN\frac{z}{2}\tilde{m}^2 + NkT\big[\frac{1+\tilde{m}}{2}\ln\frac{1+\tilde{m}}{2} + \frac{1-\tilde{m}}{2}\ln\frac{1-\tilde{m}}{2}\big] \qquad (۱۰۴)$$

اگر در حالت تعادل سیستم بی نظم باشد می بایست مقدار کمینه این تابع در $\tilde{m}=0$ حاصل شود و در غیر این صورت می بایست مقدار کمینه در نقطه ای متفاوت حاصل شود. بنابراین تابع هلمهولتز را در نزدیکی نقطه $\tilde{m}=0$ بسط می دهیم. از رابطه

$$\ln(1+x) = x - \frac{x^2}{2} + \frac{x^3}{3} - \cdots$$

استفاده می کنیم و تابع F را بسط می دهیم. بعد از کمی محاسبه کردن بدست می آوریم:

$$F(\tilde{m},T) = -NkT\ln 2 + \frac{N}{2}(kT - Jz)\tilde{m}^2 + \frac{NkT}{3}\tilde{m}^4 + \cdots \qquad (۱۰۵)$$

حال اگر این تابع را برای دو حالتِ $T > T_c = \frac{Jz}{k}$ و $T < T_c = \frac{Jz}{k}$ رسم کنیم، متوجه می شویم که تابع هلمهولتز همان چیزی است که در شکل (۷) نشان داده شده است. این شکل نشان می دهد که می نیمم تابع هلمهولتز اگر $T > T_c$ باشد، دارای یک می نیمم در $m = 0$ است. اما وقتی که $T < T_c$ است، این تابع دارای دو می نیمم غیر صفر است که قرینه یکدیگرند. این شکل نشان می دهد که در دمایی که زیر دمای بحرانی است امکان پیدایش مغناطش خود بخود وجود دارد.

■ **تمرین:**

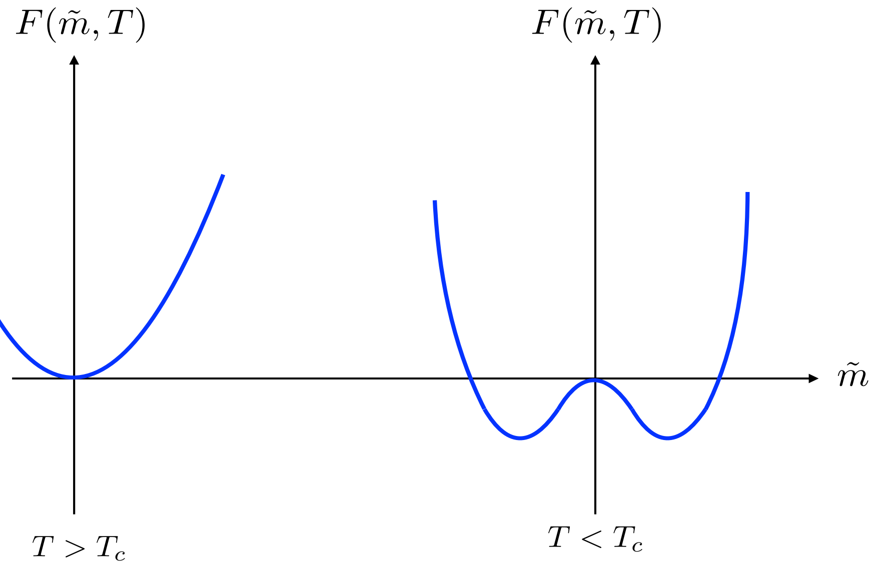
الف: می دانیم که مقدار تعادلی مغناطش که آن را با m نشان می دهیم، در نقطه ای بدست می آید که تابع هلمهولتز کمینه شود، یعنی

$$\frac{\partial F}{\partial \tilde{m}} |_{\tilde{m}=m} = 0. \qquad (۱۰۶)$$

نشان دهید که معادله (۱۰۴) بالا منجر به رابطه زیر برای مغناطش متوسط در حالت تعادل می شود:

$$m = \tanh(\frac{zJ}{kT} m). \qquad (۱۰۷)$$

ب: حال معادله (۱۰۵) را در نظر بگیرید و نقطه می نیمم آن را برای دمای $T > \frac{Jz}{k} = T_c$ و $T < \frac{Jz}{k} = T_c$ بدست بیاورید. سپس در $T < T_c$ ارتفاع سد پتانسیل بین دو نقطه می نیمم را بدست آورید. در حد $N \longrightarrow \infty$ ارتفاع این سد چقدر می شود؟ چگونه این ارتفاع به ما کمک می کند که شکست تقارن را بفهمیم؟



شکل ۷: تابع انرژی آزاد مدل آیزینگ برای دمای بالای بالاتر یا پایین تر از دمای بحرانی. این تابع از تقریب میدان متوسط بدست می آید و بنابراین برای یک بعد معتبر نیست.

۷ فرومغناطیس همسانگرد

پیدایش مغناطش خودبخود در مدل آیزینگ همراه است با شکست تقارن یک گروه گسسته که گروه Z_2 نام دارد. در این بخش به توصیف مدلی می پردازیم که پیدایش مغناطش خود بخود در یک هامیلتونی همسانگرد را نشان می دهد و به همین دلیل پیدایش نظم در اینجا همراه است با شکست یک تقارن پیوسته. توضیح خواهیم داد که شکست تقارن در اینجا به چه معناست و چه ویژگی هایی دارد. کار خود را با توصیف هامیلتونی همسانگرد فرومغناطیس که این بار به جای مدل آیزینگ مدل هایزنبرگ نام دارد آغاز می کنیم: در هر نقطه به جای یک متغیر دو مقداری یک بردار سه بعدی که نشان دهنده قطبش یک اتم است قرار گرفته و این بردارها که آنها را بازهم برای سادگی اسپین می نامیم با هامیلتونی زیر با هم

برهم کنش می کنند:

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j - \mathbf{B} \cdot \sum_i \mathbf{S}_i. \tag{۱۰۸}$$

در تقریب میدان متوسط، تابع پارش برابر است با:

$$Z = \int d\mathbf{S}_1 \cdots d\mathbf{S}_N e^{-\beta H} \approx Z = \int d\mathbf{S}_1 \cdots d\mathbf{S}_N e^{\beta \mathbf{S}_i \cdot (Jz\mathbf{m} + \mathbf{B})} = {Z_1}^N \tag{۱۰۹}$$

که در آن

$$Z_1 = \int d\mathbf{S} e^{\beta \mathbf{S}_i \cdot (Jz\mathbf{m} + \mathbf{B})} \tag{۱۱۰}$$

و انتگرال روی همه جهت های بردار اسپین گرفته می شود. محاسبه این تابع پارش آسان است. براحتی می توان انتگرال زیر را محاسبه کرد:

$$Z_1 = \int d\phi d\cos\theta e^{|\mathbf{n}|\cos\theta} = 4\pi \frac{\sinh|n|}{|n|} \tag{۱۱۱}$$

در نتیجه بدست می آوریم:

$$Z_1 = 4\pi \frac{\sinh|\beta(Jz\mathbf{m} + \mathbf{B})|}{|\beta(Jz\mathbf{m} + \mathbf{B})|} \tag{۱۱۲}$$

و با توجه به رابطه (۱۰۹)

$$F = -NkT \left[\ln 4\pi + \ln(\sinh|\beta(Jz\mathbf{m} + \mathbf{B})|) - \ln|\beta(Jz\mathbf{m} + \mathbf{B})| \right]. \tag{۱۱۳}$$

■ تمرین: از تابع پارش (۱۱۲) یا تابع انرژی آزاد (۱۱۳) نسبت به میدان مغناطیسی مشتق گرفته و مغناطش متوسط را بدست آورید. این معادله همان معادله حالت است. از این معادله حالت نشان دهید که مغناطیش پدید آمده حتما در امتداد میدان مغناطیسی خارجی است. سپس نشان دهید که وقتی میدان مغناطیسی خارجی صفر است امکان پیدایش مغناطش خود بخود در هر جهتی وجود دارد. دمای بحرانی ای راکه در پایین تر از آن مغناطش خود بخود پدید می آید حساب کنید. راهنمایی: نشان دهید که معادله حالت این سیستم به صورت زیر است:

$$m = \coth\beta(Jzm + B) - \frac{1}{\beta(Jzm + B)} \tag{۱۱۴}$$

۱.۷ انرژی آزاد در فرومغناطیس همسانگرد

به همان شکلی که در بخش پیشین برای مدل آیزینگ تابع انرژی آزاد را در تقریب میدان متوسط حساب کردیم ، در این جا هم می توانیم تابع انرژی آزاد را در تقریب میدان میانگین حساب کنیم تا اطلاعاتی در باره گذار فاز این سیستم بدست آوریم. در این جا هم می توانیم در غیاب میدان مغناطیسی بنویسیم:

$$F = E - TS = -NJ\frac{z}{2}\tilde{\mathbf{m}}\cdot\tilde{\mathbf{m}} - TNs(\tilde{\mathbf{m}},T) \tag{۱۱۵}$$

که در آن $s(\tilde{\mathbf{m}},T)$ انتروپی یک اسپین در تقریب میدان متوسط است وقتی که مغناطش متوسط اسپین ها برابر با $\tilde{\mathbf{m}}$ است. بازهم تاکید می کنیم که این مقدار با مقدارِ مغناطش در حالت تعادل متفاوت است. در حالت تعادل است که این دو مقدار یکی می شوند. بر خلاف حالت گسسته محاسبه این عبارت انتروپی در اینجا کار ساده ای نیست. در واقع بجای معادله های (۱۰۰، ۱۰۱) معادله های زیر را داریم:

$$\int d\mathbf{S}P(\mathbf{S}) = 1 \quad , \quad \int d\mathbf{S}P(\mathbf{S})\mathbf{S} = \tilde{\mathbf{m}} \tag{۱۱۶}$$

و مسلم است که از این دو رابطه نمی توان تابع $P(\mathbf{S})$ و سپس آنتروپی را محاسبه کرد. اما می توانیم بگوییم که نهایتا تابع انتروپی هرچه که هست تابعی اسکالر است یعنی تابعی از $\tilde{\mathbf{m}}\cdot\tilde{\mathbf{m}}$ است. بنابراین در نزدیکی های $\tilde{\mathbf{m}} = 0$ می توان آن را به صورت زیر بسط داد:

$$s(\tilde{\mathbf{m}},T) = a + \frac{b}{2}\tilde{\mathbf{m}}\cdot\tilde{\mathbf{m}} + c(\tilde{\mathbf{m}}\cdot\tilde{\mathbf{m}})^2 + \cdots \tag{۱۱۷}$$

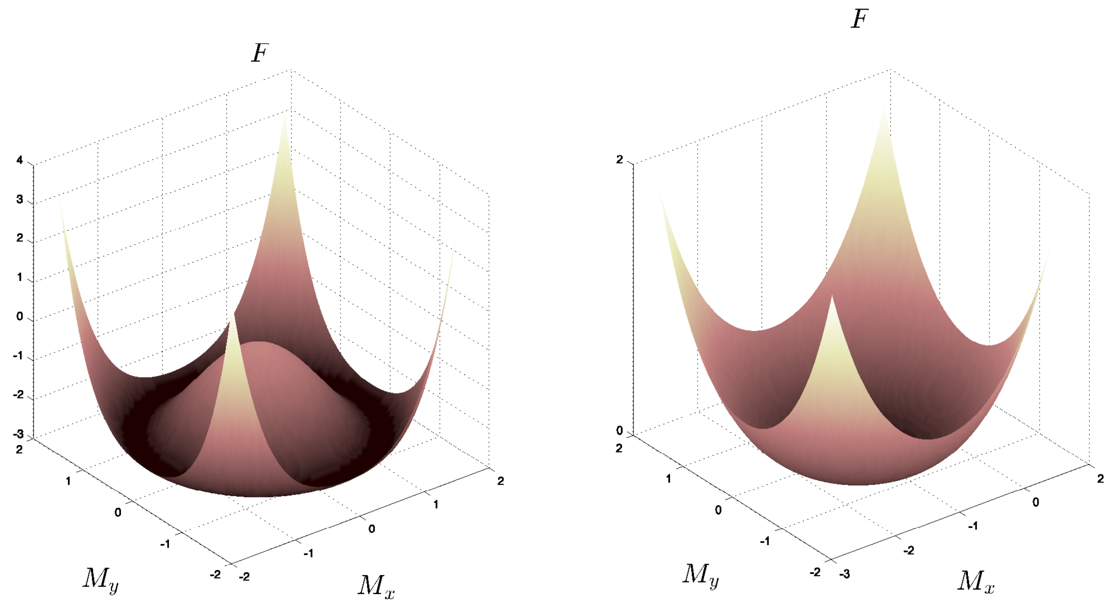
ضریب c می بایست حتما منفی باشند چرا که وقتی اسپین ها همه همراستا می شوند و $\tilde{\mathbf{m}}\cdot\tilde{\mathbf{m}}$ بیشترین مقدار خود را می گیرد، مقدار نظم به حداکثر خود و مقدار انتروپی به کمترین مقدار خود می رسد. در نتیجه تابع انرژی آزاد برابر خواهد شد با:

$$\begin{aligned} F &= -NTa - NJ\frac{z}{2}\tilde{\mathbf{m}}\cdot\tilde{\mathbf{m}} + NT\frac{b}{2}\tilde{\mathbf{m}}\cdot\tilde{\mathbf{m}} + NT|c|(\tilde{\mathbf{m}}\cdot\tilde{\mathbf{m}})^2 + \cdots \\ &= -NTa + \frac{N}{2}(bT - Jz)\tilde{\mathbf{m}}\cdot\tilde{\mathbf{m}} + NT|c|(\tilde{\mathbf{m}}\cdot\tilde{\mathbf{m}})^2 + \cdots \end{aligned} \tag{۱۱۸}$$

بازهم از این عبارت می توانیم بفهمیم که یک دمای بحرانی داریم که با $T_c = \frac{Jz}{b}$ مشخص می شود داریم که بسته به این که دما بیشتر یا کمتر از آن باشد، تابع انرژی آزاد به صورت نشان داده شده در شکل (۸) خواهد بود. این شکل ها نشان می دهند که چگونه وقتی دما کمتر از دمای بحرانی است، تقارنی که در هامیلتونی وجود دارد یعنی تقارن دورانی شکسته می شود. این که این می نیمم هر کدام به تنهایی پایدار هستند یا نه بستگی به بعد فضای سیستم دارد. در بعد ۲ قضیه ای به نام قضیه مرمین-واگنر [۱۷] نشان می دهد که این نقاط می نیمم پایدار نیستند. در واقع

[۱۷] Mermin-Wagner

قضیه مرمین_واگنر خیلی کلی است و نشان می دهد که در بعد فازهایی که در اثر شکست تقارن پیوسته بوجود می آیند پایدار نیستند و در اثر افت و خیزهای گرمایی بلندبر (موسوم به مودهای گولدستون [۱۸]) نظم بلند برد آنها به هم می خورد.



$T < T_c$ $\qquad\qquad$ $T > T_c$

شکل ۸: شکل سمت راست، تابع انرژی آزاد است وقتی که $T > T_c$ است. در این دماها انرژی آزاد فقط یک مینیمم دارد که در صفر قرار دارد. شکل سمت چپ، تابع انرژی آزاد است وقتی که دما زیر دمای بحرانی است. در این دماها نقطه $\mathbf{m} = 0$ دیگر یک نقطه می نیمم نیست. بلکه یک پیوستاری از نقاط می نیمم وجود دارد که همه با هم یکسان هستند.

[۱۸] Goldstone Modes

۸ اصل آنتروپی ماکزیمم و تقریب میدان متوسط

تقریب اساسی ای که در محاسبه تابع پارش به کار بردیم اساسا این بود که از هم بستگی بین اسپین ها صرف نظر کردیم به این معنا که در عبارت انرژی قرار دادیم

$$S_iS_j \approx S_im \tag{۱۱۹}$$

که در آن $\langle S_j \rangle =$. بنابراین، در این تقریب داریم:

$$\langle S_iS_j\rangle = \langle S_im\rangle = \langle S_i\rangle m = \langle S_i\rangle\langle S_j\rangle.$$

تقریب میدان میانگین را می توان به شیوه های متفاوت صورت بندی کرد که مبنای همه آنها همین نادیده گرفتن هم بستگی بین اسپین هاست. در این بخش این تقریب را به شیوه دیگری توضیح می دهیم.

می دانیم 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:

$$S = -k\sum_C P(C)\ln P(C). \tag{۱۲۰}$$

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

$$F = E - TS = \sum_C E(C)P(C) + kT\sum_C P(C)\ln P(C). \tag{۱۲۱}$$

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

$$P(C) = \frac{1}{Z}e^{-\beta E(C)}, \tag{۱۲۲}$$

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 تابع پارش دقیق نیست بلکه تقریبی از آن است. حال این روش را برای مدل ایزینگ بکار می بریم.

عبارت ۱۲۱ را فقط در بین توابع احتمالی وردش می گیریم که از نوع ضربی باشند یعنی توابعی از جنس زیر:

$$P(S_1, S_2, \cdots S_N) = P(S_1)P(S_2)\cdots P(S_N). \quad (۱۲۳)$$

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:

$$P(1) - P(-1) = m, \qquad P(1) + P(-1) = 1 \quad (۱۲۴)$$

و در نتیجه

$$P(1) = \frac{1+m}{2}, \qquad P(-1) = \frac{1-m}{2} \quad (۱۲۵)$$

و یا

$$P(S) = \frac{1+mS}{2}. \quad (۱۲۶)$$

دراین صورت خواهیم داشت

$$E = \langle H \rangle = -J\sum_{\langle i,j \rangle}\langle S_iS_j\rangle - \sum_i B\langle S_i\rangle = -\frac{1}{2}JNzm^2 - NBm \quad (۱۲۷)$$

و

$$S = -Nk\left(\frac{1+m}{2}\ln\frac{1+m}{2} + \frac{1-m}{2}\ln\frac{1-m}{2}\right). \quad (۱۲۸)$$

و در نتیجه

$$F = -\frac{1}{2}JNzm^2 - NBm + NkT\left(\frac{1+m}{2}\ln\frac{1+m}{2} + \frac{1-m}{2}\ln\frac{1-m}{2}\right). \quad (۱۲۹)$$

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:

$$Jzm + B = \frac{1}{2}\ln\frac{1+m}{1-m} \tag{۱۳۰}$$

و یا با بازنویسی طرف راست

$$Jzm + B = \tanh^{-1} m. \tag{۱۳۱}$$

که همان رابطه ای است که قبلا بدست آورده بودیم.

---

۹ اصل وردشی و تقریب میدان متوسط

می توانیم از یک شیوه دیگر نیز برای فهم تقریب میدان متوسط استفاده کنیم. این روش مبتنی بر اصل وردشی [۱۹] است. فرض کنید که هامیلتونی یک سیستم به صورت زیر باشد:

$$H = H_0 + H_1, \tag{۱۳۲}$$

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:

$$Z = \sum_C e^{-\beta H_0 - \beta H_1} = Z_0 \frac{\sum_C e^{-\beta H_0 - \beta H_1}}{Z_0}, \tag{۱۳۳}$$

که درآن

$$Z_0 := \sum_C e^{-\beta H_0} \tag{۱۳۴}$$

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

$$Z = Z_0 \langle e^{-\beta H_1}\rangle_0, \tag{۱۳۵}$$

[۱۹] Variational Principle

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:

$$p_1 e^{x_1} + p_2 e^{x_2} \geq e^{p_1 x_1 + p_2 x_2}. \qquad (۱۳۶)$$

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

$$\sum_i p_i e^{x_i} \geq e^{\sum_i p_i x_i}. \qquad (۱۳۷)$$

رابطه اخیر را می توان به صورت زیر نوشت :

$$\langle e^x \rangle \geq e^{\langle x \rangle}. \qquad (۱۳۸)$$

این رابطه ، رابطه مهمی است که کاربردهای زیادی دارد. از جمله ترکیب آن با رابطه ۱۳۵ منجر به رابطه زیر می شود:

$$Z \geq Z_0 e^{-\beta \langle H_1 \rangle_0}, \qquad (۱۳۹)$$

و یا پس از محاسبه لگاریتم طرفین

$$F \leq F_0 + \langle H_1 \rangle_0. \qquad (۱۴۰)$$

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:

$$\begin{aligned} H &= -J\sum_{\langle i,j\rangle} S_iS_j - B\sum_i S_i = -\lambda\sum_i S_i - J\sum_{\langle i,j\rangle} S_iS_j - (B-\lambda)\sum_i S_i \\ &= H_0 + H_1, \end{aligned} \quad (۱۴۱)$$

که در آن

$$H_0 = -\lambda\sum_i S_i, \qquad H_1 = -J\sum_{\langle i,j\rangle} S_iS_j - (B-\lambda)\sum_i S_i. \quad (۱۴۲)$$

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

$$\langle H_1\rangle_0 = -NJz\frac{1}{2}\tanh(\beta\lambda)^2 - NB\tanh(\beta\lambda). \quad (۱۴۳)$$

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:

$$m = \tanh(\beta(Jzm + B)) \quad (۱۴۴)$$

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

۱۰ رابطه همبستگی و تابع پاسخ

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

$$\langle S_i S_j \rangle. \tag{۱۴۵}$$

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 [20] به صورت زیر تعریف می شود:

$$\langle S_i S_j \rangle_c := \langle S_i S_j \rangle - \langle S_i \rangle \langle S_j \rangle. \tag{۱۴۶}$$

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 :

$$G(i,j) = \langle \delta S_i \delta S_j \rangle, \tag{۱۴۷}$$

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:

$$H = \tilde{H}(S) - \sum_{i=1} B_i S_i \tag{۱۴۸}$$

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:

$$Z = \sum_{\{S\}} e^{-\beta \tilde{H}(S) + \beta \sum_i B_i S_i}. \tag{۱۴۹}$$

از این تابع پارش بدست می آوریم:

$$\langle S_i \rangle = \frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \beta B_i}, \tag{۱۵۰}$$

[20] Connected Correlation Function

و

$$\langle S_i S_j\rangle = \frac{1}{Z}\frac{\partial^2 Z}{\partial\beta B_i \partial\beta B_j}, \tag{۱۵۱}$$

تابع همبستگی متصل برابر است با:

$$\langle S_i S_j\rangle - \langle S_i\rangle\langle S_j\rangle = \frac{1}{Z}\frac{\partial^2 Z}{\partial\beta B_i \partial\beta B_j} - \frac{1}{Z}\frac{\partial Z}{\partial\beta B_i}\frac{1}{Z}\frac{\partial Z}{\partial\beta B_j}, \tag{۱۵۲}$$

با کمی محاسبه بدست می آوریم

$$\langle S_i S_j\rangle - \langle S_i\rangle\langle S_j\rangle = \frac{\partial}{\partial\beta B_i}\left(\frac{1}{Z}\frac{\partial Z}{\partial\beta B_j}\right), \tag{۱۵۳}$$

و یا

$$G(i,j) = kT\frac{\partial m_i}{\partial B_j} \tag{۱۵۴}$$

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 ۱۴۸ توجه می کنیم با این تفاوت که میدان مغناطیسی را یکنواخت می گیریم. داریم:

$$\frac{1}{Z}\frac{\partial Z}{\partial\beta B} = \langle\sum_i S_i\rangle, \tag{۱۵۵}$$

و

$$\frac{1}{Z}\frac{\partial^2 Z}{\partial(\beta B)^2} = \langle\sum_{i,j} S_i S_j\rangle, \tag{۱۵۶}$$

بنابراین با کمی محاسبه خواهیم داشت:

$$\frac{1}{Z}\frac{\partial^2 Z}{\partial(\beta B)^2} - \frac{1}{Z^2}(\frac{\partial Z}{\partial\beta B})^2 = \sum_{i,j}\langle S_i S_j\rangle - \langle S_i\rangle\langle S_j\rangle = \sum_{i,j} G(i,j), \qquad (۱۵۷)$$

اما طرف چپ برابراست با

$$\frac{\partial M}{\partial\beta B} = NkT\frac{\partial m}{\partial B} = NkT\chi \qquad (۱۵۸)$$

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

$$\sum_{i,j} G(i,j) = NkT\chi. \qquad (۱۵۹)$$

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:

$$\sum_r G(r) = kT\chi. \qquad (۱۶۰)$$

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.

۱۱ 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:

$$G(\mathbf{x},\mathbf{y}) = kT\frac{\partial m_{\mathbf{x}}}{B_{\mathbf{y}}}. \tag{۱۶۱}$$

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:

$$m_{\mathbf{x}} = \tanh\left[\beta\left(J\sum_{\mathbf{z}\in N_{\mathbf{x}}} m_z + B_{\mathbf{x}}\right)\right]. \tag{۱۶۲}$$

از طرفین این رابطه نسبت به $\beta B_{\mathbf{y}}$ مشتق می گیریم و در نتیجه با استفاده از رابطه (۱۶۱) خواهیم داشت:

$$G(\mathbf{x},\mathbf{y}) = \cosh^{-2}\left[\beta\left(J\sum_{\mathbf{z}\in N_{\mathbf{x}}} m_{\mathbf{z}} + B_{\mathbf{x}}\right)\right] \times \left[J\beta\sum_{\mathbf{z}\in N_{\mathbf{x}}} G(\mathbf{z},\mathbf{y}) + \delta_{\mathbf{x},\mathbf{y}}\right] \tag{۱۶۳}$$

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:

$$G(\mathbf{x}-\mathbf{y}) = \cosh^{-2}(\beta Jzm)\left[J\beta\sum_{\mathbf{z}\in N_{\mathbf{x}}} G(\mathbf{z}-\mathbf{y}) + \delta_{\mathbf{x},\mathbf{y}}\right] \tag{۱۶۴}$$

ضمنا توجه می کنیم که با استفاده از رابطه)۱۶۲(می توان نوشت

$$\cosh^{-2}(\beta Jzm) = (1-m^2) \tag{۱۶۵}$$

و در نتیجه

$$G(\mathbf{x}-\mathbf{y}) = (1-m^2)\left[J\beta\sum_{\mathbf{z}\in N_{\mathbf{x}}} G(\mathbf{z}-\mathbf{y}) + \delta_{\mathbf{x},\mathbf{y}}\right] \tag{۱۶۶}$$

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:

$$\mathbf{e}_1 = (1,0,0\cdots 0), \qquad \cdots \mathbf{e}_d = (0,0,\cdots 1). \tag{۱۶۷}$$

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

$$G(\mathbf{x}-\mathbf{y}) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^d}} \int e^{-i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{y})} \tilde{G}(\mathbf{q}) d^d\mathbf{q}. \tag{۱۶۸}$$

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

$$\tilde{G}(\mathbf{q}) = (1-m^2)\left[J\beta\tilde{G}(q)(2\cos q_1 + 2\cos q_2 + \cdots 2\cos q_d) + 1\right] \tag{۱۶۹}$$

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

$$G(q) = \frac{1-m^2}{1-(1-m^2)J\beta\sum_{i=1}^{d}\cos q_i}. \tag{۱۷۰}$$

بنابراین با استفاده از این رابطه و رابطه (۱۶۸) 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 (۱۶۸) 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:

$$G(\mathbf{q}) \approx \frac{1-m^2}{1-(1-m^2)J\beta(2d-|\mathbf{q}|^2)}. \tag{۱۷۱}$$

از این رابطه بدست می آوریم

$$G(0) \approx \frac{1-m^2}{1-(1-m^2)J\beta 2d}. \tag{۱۷۲}$$

و در نتیجه با تقسیم این دو رابطه برهم

$$G(\mathbf{q}) = \frac{G(0)}{1+\xi^2|\mathbf{q}|^2}, \tag{۱۷۳}$$

که در آن

$$\xi^2 := \frac{J(1-m^2)}{kT-2dJ(1-m^2)}. \tag{۱۷۴}$$

ξ کمیتی است که دارای بعد طول است.

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

$$G(|\mathbf{x}-\mathbf{y}|) = f(\frac{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|}{\xi}) \quad (۱۷۵)$$

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:

$$\xi = \frac{A_+}{T-T_c} \quad (۱۷۶)$$

و در پایین نقطه بحرانی نیز می توان نوشت:

$$\xi = \frac{A_-}{T_c-T}. \quad (۱۷۷)$$

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

تمرین: با استفاده از رابطه (۱۷۳) نشان دهید که در تقریب میدان میانگین نمای η برابر با یک است.

۱۲ 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:

$$H = -\frac{J}{N}\sum_{i,j} S_iS_j - B\sum_i S_i, \quad (۱۷۸)$$

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:

$$Z = \sum_{\{S_i\}} e^{\beta J \sum_{i,j} S_i S_j + \beta B \sum_i S_i} \tag{۱۷۹}$$

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

$$m := \frac{1}{N} \sum_i S_i \tag{۱۸۰}$$

می توانیم بنویسیم

$$Z \approx \sum_{\{S_i\}} e^{\sum_{i=1}^{N} (Jm+B) S_i} = \left(2\cosh(\beta(Jm+B))\right)^N , \tag{۱۸۱}$$

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

$$\langle S_i \rangle = m. \tag{۱۸۲}$$

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:

$$Z = \sum_{\{S_i\}} e^{\beta \frac{J}{N} (\sum_{i=1}^{N} S_i)^2 + \beta B \sum_{i=1}^{N} S_i} \tag{۱۸۳}$$

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:

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{1}{2}ax^2 + bx} = \sqrt{\frac{2\pi}{a}} e^{\frac{b^2}{2a}} \tag{۱۸۴}$$

و با استفاده از ان می نویسیم:

$$e^{\beta\frac{J}{N}(\sum_{i=1}^{N}S_i)^2}=\sqrt{\frac{4\pi\beta J}{N}}\int_{-\infty}^{\infty}dxe^{-\frac{1}{2}\frac{N}{2\beta J}x^2+x\sum_{i=1}^{N}S_i}. \tag{۱۸۵}$$

در نتیجه تابع پارش به صورت زیر در می آید:

$$Z=\sqrt{\frac{4\pi\beta J}{N}}\sum_{\{S_i\}}\int_{-\infty}^{\infty}e^{-\frac{1}{2}\frac{N}{2\beta J}x^2+(x+\beta B)\sum_{i=1}^{N}S_i}. \tag{۱۸۶}$$

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

$$Z=\sqrt{\frac{4\pi\beta J}{N}}\int_{-\infty}^{\infty}e^{-\frac{1}{2}\frac{N}{2\beta J}x^2}(2\cosh(x+\beta B))^N. \tag{۱۸۷}$$

و یا

$$Z=\sqrt{\frac{4\pi\beta J}{N}}\int_{-\infty}^{\infty}e^{-\frac{1}{2}\frac{N}{2\beta J}x^2+N\ln(2\cosh(x+\beta B))}=\sqrt{\frac{4\pi\beta J}{N}}\int_{-\infty}^{\infty}e^{-Nf(x)} \tag{۱۸۸}$$

که درآن

$$f(x)=\frac{1}{2\beta J}x^2-\ln(2\cosh(x+\beta B)). \tag{۱۸۹}$$

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

$$\int_{-\infty}^{\infty}e^{-Nf(x)}=\int_{-\infty}^{\infty}e^{-Nf(x_0)-\frac{N}{2}f''(x_0)(x-x_0)^2+\cdots}=e^{-Nf(x_0)}\int_{y=-\infty}^{y=\infty}dye^{\frac{N}{2}f''(x_0)y^2}=\sqrt{\frac{2\pi}{Nf''(x_0)}}e^{-Nf(x_0)}, \tag{۱۹۰}$$

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

$$Z=\sqrt{\frac{2\beta J}{f''(x_0)}}e^{-Nf(x_0)} \tag{۱۹۱}$$

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

$$\frac{x_0}{\beta J}=\tanh(x_0+\beta B). \tag{۱۹۲}$$

بنابراین می توان با حل این معادله نخست مقدار x_0 را بدست آورد و سپس با قرار دادن آن در رابطه ۱۹۰ 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:

$$m := \frac{1}{N}\langle\sum_i S_i\rangle = \frac{1}{N}\frac{\partial}{\partial\beta B}\ln Z, \tag{۱۹۳}$$

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 ۱۹۱ بدست می آوریم:

$$m = \frac{\partial}{\partial\beta B}\left(-f(x_0)\right). \tag{۱۹۴}$$

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:

$$\begin{aligned} m &= \frac{\partial}{\partial\beta B}\left[\frac{-1}{2\beta J}x_0^2 + \ln(2\cosh(x_0+\beta B))\right] \\ &= \frac{-1}{\beta J}x_0\frac{\partial x_0}{\partial\beta B} + \tanh(x_0+\beta B)[\frac{\partial x_0}{\partial\beta B}+1]. \end{aligned} \tag{۱۹۵}$$

حال اگر بجای $\tanh(x_0+\beta B)$ از رابطه ۱۹۲ مقدار $\frac{x_0}{\beta J}$ را قرار دهیم به رابطه ساده زیر می رسیم:

$$m = \frac{x_0}{\beta J}. \tag{۱۹۶}$$

در نتیجه معادله ۱۹۲ به صورت زیر در می آید :

$$m = \tanh(\beta(Jm+B)). \tag{۱۹۷}$$

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 و δ را بدست آورید.

۱۳ مسئله ها و تمرین ها:

■ مسئله ۱: مدل پاتز 3 حالته [۲۱] 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:

$$H = -J\sum_{\langle i,j\rangle}\delta(S_i, S_j) - B\sum_i \delta_{S_i,0} \quad (۱۹۸)$$

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 و S' و توان های آنها بنویسید.)

■ 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 [۲۲] 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:

$$H = \sum_{i=1}^{N}\frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} + \sum_{i,j} V(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|). \quad (۱۹۹)$$

[۲۱] 3-State Potts Model

[۲۲] Cluster Mean Field

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

$$V(r) = \infty \quad if \quad r < a, \qquad V(r) = 0 \quad if \quad r \geq a. \tag{۲۰۰}$$

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،

$$F = E - TS = E_0 \tag{۲۰۱}$$

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:

$$\langle E\rangle = \langle\psi_0|\hat{H}|\psi_0\rangle, \tag{۲۰۲}$$

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

$$\rho = \frac{1}{Z}e^{-\beta\hat{H}} \tag{۲۰۳}$$

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

$$\begin{aligned} E &= tr(\rho\hat{H}) = \frac{1}{Z}tr(e^{-\beta\hat{H}}\hat{H}) \\ &= \frac{1}{Z}\sum_i\langle\psi_i|e^{-\beta\hat{H}}\hat{H}|\psi_i\rangle = \frac{1}{Z}\sum E_i e^{-\beta E_i} \end{aligned} \tag{۲۰۴}$$

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:

$$\hat{H} = -J\sum_{i,j=1}^{N}\sigma_{z,i}\sigma_{z,j} - B\sum_{i-=1}^{N}\sigma_{x,i}. \tag{۲۰۵}$$

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

$$|\psi_0\rangle = |\psi_0(J,B)\rangle. \qquad (۲۰۶)$$

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:

$$m := \langle\psi_0|\sigma_z|\psi_0\rangle. \qquad (۲۰۷)$$

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

$$|\Phi\rangle := |\phi\rangle\otimes|\phi\rangle\otimes|\phi\rangle\cdots|\phi\rangle \qquad (۲۰۸)$$

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

$$\langle\Phi|\hat{H}|\Phi\rangle. \qquad (۲۰۹)$$

الف: در تقریب میدان میانگین حالت پایه هامیلتونی (۲۰۵) را پیدا کنید.

ب: پارامتر نظم را برحسبB و J پیدا کنید و نشان دهید که در این سیستم یک گذار فاز در یک نقطه بحرانی ازB 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:

$$G_{xx}(i,j) \equiv \langle \sigma_{x,i}\sigma_{x,j}\rangle, \qquad G_{zz}(i,j) \equiv \langle \sigma_{z,i}\sigma_{z,j}\rangle. \tag{۲۱۰}$$

■ مسئله پنج: مدل آیزینگ یک بعدی را در شرایط مرزی پریودیک و میدان مغناطیسی صفر در نظر بگیرید. تابع همبستگی بین دو نقطه با فاصله l محاسبه کنید.

■ مسئله شش: مدل آیزینگ یک بعدی را در شرایط مرزی پریودیک و میدان مغناطیس صفر در نظر بگیرید. فرض کنید که شدت برهم کنش اسپین ها یک در میان J و J' است. تعداد اسپین ها را زوج بگیرید. تابع پارش و مغناطش متوسط را حساب کنید. انرژی متوسط را نیز در دمای T حساب کنید.

■ مسئله هفت: هامیلتونی مدل آیزینگ را به صورت زیر در نظر بگیرید:

$$H = J\sum_{i=1}^{N} S_i S_{i+1} \tag{۲۱۱}$$

شرایط مرزی را پریودیک و تعداد اسپین ها را نیز زوج بگیرید. شدت برهم کنش یعنی J را مثبت بگیرد. در دمای صفر اسپین ها در چه حالتی قرار می گیرند؟ آیا این حالت واگنی دارد؟ برای چنین سیستمی نمی توان پارامتر نظم را به صورت مغناطش متوسط تعریف کرد، چرا که این پارامتر نظم در دمای صفر برابر با صفر است و حال انکه در دمای صفر می بایست سیستم یک نوع نظم داشته باشد. به جای مغناطش متوسط، می بایست پارامتر زیر را به عنوان پارامتر نظم که Staggered Magnetization نامیده می شود، در نظر بگیریم:

$$M_{st} := \sum_{i=1}^{N} (-1)^i \langle m_i\rangle. \tag{۲۱۲}$$

مقدار پارامتر نظم را بر حسب دما محاسبه کنید.

■ مسئله هشت: در مدل آیزینگ یک بعدی، ضریب نفوذ مغناطیسی را که به صورت $\chi := \frac{\partial m}{\partial B}$ تعریف می شود حساب کنید. مقدار این پارامتر را در $B = 0$ حساب کنید.

■ مسئله نه: یک شبکه یک بعدی در نظر بگیرید که در هر جایگاه آن یک متغیر سه حالته $s_i = -1,\ 0,\ 1$ وجود دارد. انرژی هر هیئت به صورت زیر است:

$$H(s_1, s_2, \cdots s_N) = -J\sum_{i=1}^{N} \delta_{s_i, s_{i+1}}. \qquad (۲۱۳)$$

شرایط مرزی نیز پریودیک است. متوسط انرژی این سیستم را در دمای دلخواه حساب کنید.

■ مسئله ده: یک شبکه یک بعدی با شرایط مرزی تناوبی با $2N$ جایگاه در نظر بگیرید. (s) انرژی هر هیئت از اسپین ها به شکل زیر است:

$$H(s_1, s_2, \cdots s_{2N}) = -J\sum_{i=1}^{2N} s_i s_{i+1} - B\sum_{i=1}^{2N} s_i. \qquad (۲۱۴)$$

اما همه اسپین های مربوط به جایگاه های زوج روی مقدار $s = 1$ ثابت شده است، یعنی

$$s_2 = s_4 = \cdots s_{2N} = 1$$

و فقط اسپین های مربوط به جایگاه های فرد افت و خیز حرارتی دارند. انرژی متوسط این سیستم را در دمای دلخواه حساب کنید.