

درس نهم: مدل آیزینگ، گذار خود به خود از بی نظمی به نظم

وحیدکریمی پور- دانشکده فیزیک - دانشگاه صنعتی شریف

۲ دی ۱۳۹۸

۱ مقدمه

تا کنون همه سیستم هایی که مطالعه کردیم (بجز سیستم های ذرات بوزونی و فرمیونی که اصل طرد پاولی در آنها برقرار است) سیستم های بدون برهم کنش بودند. این موضوع باعث می شد که اساسا محاسبه تابع پارش یک سیستم بس ذره ای به محاسبه تابع پارش یک ذره کاهش یابد. اما هر سیستم واقعی در طبیعت از تعداد فوق العاده زیادی ذره تشکیل شده که بین آنها برهم کنش وجود دارد. در بقیه درس مکانیک آماری به مطالعه سیستم هایی می پردازیم که برهم کنش دارند. در مطالعه هر سیستمی از این نوع خواهیم دید که وجود برهم کنش باعث ایجاد تصحیحاتی در تابع پارش و در نتیجه خواص ترمودینامیکی می شود. این تغییرات می توانند در معادله حالت و انرژی و به تبع آن در دیگر خواص ترمودینامیکی مثل ظرفیت گرمایی ویژه، ضریب تراکم پذیری، هدایت الکتریکی و گرمایی و بسیاری خواص دیگر ظاهر شوند. مثالهایی از این نوع را در درس های آینده بررسی می کنیم که طی آنها هم با روش های مهم محاسبه تابع پارش آشنا می شویم و هم به تصحیحاتی از معادله حالت گاز ایده آل به عنوان یکی از مهمترین سیستم های بس ذره ای آشنا می شویم.

اما مهمترین موضوعی که مطالعه سیستم های برهم کنش دار به ما می آموزد چگونگی وجود فازهای مختلف در ماده است. سوال اساسی که با آن روبرو هستیم این است که آیا ماده در این فازهای گوناگون با برهم کنش ها یا هامیلتونی های متفاوت تعریف می شود یا همواره می توانیم با یک هامیلتونی هر سیستمی را در فازهای گوناگونش توصیف کنیم. یادآوری می کنیم که تا حدود سالهای ۱۹۵۰ پاسخ این سوال بدیهی نبوده و

تنها امروزه است که به مدد پیشرفت های بسیار در مکانیک آماری می فهمیم که ماده در همه فازهایش تنها با یک هامیلتونی توصیف می شود و این تابع پارش سیستم است که با تغییر پارامترهای خارجی از خود رفتار غیر پیوسته نشان می دهد و منجر به ناپیوستگی در کمیت های ترمودینامیکی ناشی از آن می شود و ما آن را به صورت فازهای مختلف ماده می بینیم. این موضوع یعنی توصیف فازهای مختلف یک سیستم یکی از موفقیت های بزرگ مکانیک آماری بوده است.

چگونه می توانیم وجود فازهای مختلف در ماده را توصیف کنیم؟ چگونه مجموعه ای از اتم ها می توانند در شرایط معینی از دما و فشار به صورت بخار و سپس به صورت مایع و بعد به صورت جامد در آیند؟ چگونه می توان با یک هامیلتونی این فازهای گوناگون و به شدت متنوع را توضیح داد؟ نکته اساسی به صورت کیفی این است که اگرچه هر ذره تنها با تعداد کمی از ذرات همسایه اش برهم کنش می کند و نه با همه ذرات. این برهم کنش های کوتاه برد یک نوع همبستگی دوربرد بین ذرات را سبب می شود. این همبستگی های دور برد باعث می شود که گروه هایی از ذرات که در یک همسایگی بزرگ قرار دارند رفتاری همسان داشته باشند. با تغییر پارامترهای خارجی مثل دما یا فشار یا میدان مغناطیسی اندازه این ناحیه های همبسته می تواند زیاد شود و سرانجام به نقطه ای می رسیم که همه ذرات یک سیستم بس ذره ای رفتاری همانند داشته باشند. در این هنگام می گوئیم که سیستم بس ذره ای در یک فاز مشخص قرار گرفته است. با تغییر پارامترهای خارجی سیستم می تواند در فازهای مختلفی قرار بگیرد همان گونه که بخار آب می تواند از حالت گازی به حالت مایع و سپس به حالت جامد تغییر فاز دهد و حتی در دماهای پایین تر و فشارهای بالاتر یخ می تواند در فازهای گوناگونی قرار گیرد که هر کدام یک شکل کریستالی خاص خود را دارند. در این درس سعی می کنیم به صورت مقدماتی مطالبی در باره سیستم های برهم کنش دار و گذار فاز یاد بگیریم. برای آنکه این مفاهیم اساسی را بیاموزیم به ساده ترین پدیده یعنی گذار فاز مغناطیسی یک جامد می پردازیم که اتم های آن در جای خود ثابت اند و همبستگی بین دو قطبی های مغناطیسی این اتم ها می تواند باعث هم جهت شدن آنها در کل جامد و مغناطیسی شدن جامد شود. این پدیده یعنی پیدایش نظم در اثر عامل خارجی (میدان مغناطیسی) یا به صورت خود بخود (مغناطش خود بخود) موضوعی است که در فصل های آینده به آن خواهیم پرداخت. اما نخست لازم است که با بعضی از مفاهیم کلی در باره گذار فاز آشنا شویم. این مفاهیم اگرچه به زبان سیستم های مغناطیسی بیان می شوند ولی دامنه اعتبار آنها تقریباً همه انواع گذار فاز را شامل می شود.

۲ تعریف مدل آیزینگ و تابع پارش آن

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 دقیقاً 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.

مدل آیزینگ ساده ترین مدل برای مطالعه گذار فاز است، در واقع نمی توان مدلی ساده تر از آن برای مطالعه گذار از بی نظمی و نظم تعریف کرد. فرض می کنیم در یک شبکه دلخواه مثلاً 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 مدل آیزینگ مطالعه نظم مغناطیسی در یک ماده مغناطیسی بوده است. هامیلتونی این سیستم به صورت زیر تعریف می شود:

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j - B \sum_i S_i, \quad (1)$$

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. ^۱ 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:

$$Z(N, J, B) = \sum_{\{S_i\}} e^{-\beta H} = \sum_{\{S_i\}} e^{\beta J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j + \beta B \sum_i S_i} \quad (2)$$

پارامتر نظم برای مدل فرومغناطیسی چیزی نیست جز متوسط مغناطش یعنی

^۱ 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.

$$m := \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \langle S_i \rangle. \quad (3)$$

هدف اصلی ما این است که مقدار این پارامتر نظم را پیدا کنیم که طبیعتاً 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 و دو بعدی را تحت شرایط گوناگون و به روشهای متفاوت حل می کنیم. نخست فرض می کنیم که میدان مغناطیسی برابر با صفر است.

۳ مدل آیزینگ در یک بعد بدون میدان مغناطیسی

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

$$H = -J \sum_{i=1}^{N-1} S_i S_{i+1}, \quad (4)$$

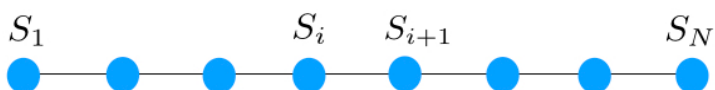
و تابع پارش برابر است با

$$Z = \sum_{\{S_i\}} e^{\beta J \sum_{i=1}^{N-1} S_i S_{i+1}}. \quad (5)$$

می توان این مدل را با شرایط مرزی گوناگون در نظر گرفت. مثلاً می توانیم فرض کنیم که اسپین های دو انتها کاملاً 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.

۱.۳ 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 حتماً 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:

$$q_1 = S_1 S_2, \quad q_2 = S_2 S_3, \quad \dots, \quad q_{N-1} = S_{N-1} S_N, \quad (۶)$$

این تغییر متغیر از $(S_1, S_2, \dots, S_N)$ به $(q_1, q_2, \dots, q_{N-1})$ 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:

$$Z = 2 \sum_{q_1, q_2, \dots, q_{N-1}} e^{\beta J (q_1 + q_2 + \dots + q_{N-1})} = 2 (2 \cosh \beta J)^{N-1}, \quad (۷)$$

■ 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:

$$Z_N = \sum_{\{S_1, S_2, \dots, S_N\}} e^{\beta J (S_1 S_2 + S_2 S_3 + \dots + S_{N-1} S_N)}, \quad (۸)$$

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

$$Z_N = \sum_{\{S_1, S_2, \dots, S_{N-1}\}} e^{\beta J (S_1 S_2 + S_2 S_3 + \dots + S_{N-2} S_{N-1})} \sum_{S_N} e^{\beta J S_{N-1} S_N}, \quad (۹)$$

اما جمع روی آخرین اسپین ساده است:

$$\sum_{S_N} e^{\beta J S_{N-1} S_N} = 2 \cosh(\beta J S_{N-1}), \quad (۱۰)$$

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

$$Z_N = Z_{N-1} (2 \cosh \beta J) \quad (۱۱)$$

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

۲.۳ شرایط مرزی پریودیک

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

$$H = -J \sum_{i=1}^N S_i S_{i+1}. \quad (۱۲)$$

■ راه حل اول: تغییر متغیر

می خواهیم همان راه حل تغییر متغیر را این بار نیز به کار ببریم. 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:

$$Z = 2 \sum_{q_1, q_2, \dots, q_{N-1}} e^{\beta J(q_1 + q_2 + \dots + q_{N-1})} e^{\beta J(q_1 q_2 \dots q_{N-1})}, \quad (۱۳)$$

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

$$Z = 2 \sum_{q_1, q_2, \dots, q_{N-1}} e^{\beta J(q_1 + q_2 + \dots + q_{N-1})} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\beta J)^n}{n!} (q_1 q_2 \dots q_{N-1})^n, \quad (۱۴)$$

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

$$\begin{aligned} Z &= 2 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\beta J)^n}{n!} \left[\sum_{q=1, -1} q^n e^{\beta J q} \right]^{N-1} \\ &= 2 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\beta J)^n}{n!} [e^{\beta J} + (-1)^n e^{-\beta J}]^{N-1}. \end{aligned} \quad (۱۵)$$

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

$$Z = 2 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\beta J)^{2n}}{(2n)!} (2 \cosh \beta J)^{N-1} + 2 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\beta J)^{2n+1}}{(2n+1)!} (2 \sinh \beta J)^{N-1} = (2 \cosh \beta J)^N + (2 \sinh \beta J)^N \quad (۱۶)$$

مقایسه تابع پارش نهایی در شرایط مرزی باز و بسته بخوبی نشان می دهد که در حد ترمودینامیک یعنی $N \rightarrow \infty$ 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 $kT \gg J$ باشد و سیستم تقریباً 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

$$Z = \sum_S e^{\beta J \sum_{i=1}^N s_i s_{i+1}} \equiv \sum_{s_1, s_2, \dots, s_N} \prod_{i=1}^N e^{\beta J s_i s_j}. \quad (۱۷)$$

براحتی می توان نشان داد که رابطه زیر همیشه برقرار است که در آن

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

$$e^{K s_i s_{i+1}} = \cosh K + s_i s_{i+1} \sinh K = \cosh K (1 + s_i s_{i+1} \tanh K) =: \cosh K (1 + s_i s_{i+1} \tau) \quad (۱۸)$$

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

$$Z_N(\beta J) = \sum_S \prod_{i=1}^N \cosh \beta J (1 + s_i s_{i+1} \tau) = (\cosh \beta J)^N \sum_S \prod_{i=1}^N (1 + s_i s_{i+1} \tau). \quad (۱۹)$$

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

$$\begin{aligned} Z &= (\cosh K)^N \sum_S \prod_{i=1}^N (1 + s_i s_{i+1} \tau) \\ &= (\cosh K)^N \sum_S \left(1 + \tau \left(\sum_i s_i s_{i+1} \right) + \tau^2 \left(\sum_{i,j} s_i s_{i+1} s_j s_{j+1} \right) + \tau^3 \left(\sum_{i,j,k} s_i s_{i+1} s_j s_{j+1} s_k s_{k+1} \right) + \dots \right) \end{aligned} \quad (۲۰)$$

از آنجا که در دمای های بالا τ کوچک است و می توانیم این عبارت را بر حسب قوای τ بسط دهیم این بسط به بسط دمای بالا مشهور است. حال توجه می کنیم که روابط زیر همیشه برقرارند که در آن ها $\sum_S$ به معنای جمع روی وضعیت همه اسپین های شبکه است.

$$\sum_s 1 = 2 \quad \sum_s s = 0 \quad (۲۱)$$

و

$$\sum_S 1 = 2^N \quad \sum_S s_i = 0 \quad (۲۲)$$

در نتیجه در جمع های بالا عبارت هایی مثل عبارت زیر که در آن ها حتی یکی از s ها به صورت منفرد ظاهر شده باشد برابر با صفر خواهند بود:

$$\sum_S s_i s_j \dots s_k = 0 \quad (۲۳)$$

تنها عبارت هایی مخالف صفر خواهند بود که در آن هر کدام از s ها به صورت جفت ظاهر شده باشد. این حرف به این معناست که در رابطه (۲۰) 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:

$$Z_N(\beta) = (2 \cosh \beta J)^N + (2 \sinh \beta J)^N. \quad (۲۴)$$

■ 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 $(s_i s_{i+1})(s_{i+1} s_{i+2}) = s_i s_{i+2}$ یا دوپارچه مثل $(s_i s_{i+1})(s_j s_{j+1})$ ، $j > i + 1$ 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 (۲۴) 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.

۴ 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^۲ 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 لزوماً 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:

$$H(S_1, S_2, \dots, S_N) = \sum_{i=1}^N h(S_i, S_{i+1}), \quad (25)$$

Transfer Matrix Method^۳

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

$$Z_N = \sum_{S_1, S_2, \dots, S_N} e^{-\beta h(S_1, S_2)} e^{-\beta h(S_2, S_3)} \dots e^{-\beta h(S_{N-1}, S_N)} \quad (26)$$

حال ماتریس T را به شکل زیر تعریف می کنیم:

$$\langle S | T | S' \rangle := e^{-\beta h(S, S')} \quad (27)$$

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:

$$Z_N = \sum_{S_1, S_2, \dots, S_N} \langle S_1 | T | S_2 \rangle \langle S_2 | T | S_3 \rangle \dots \langle S_N | T | S_1 \rangle = \text{tr}(\mathcal{T}^N) \quad (28)$$

در نتیجه محاسبه تابع پارش تبدیل می شود به محاسبه ویژه مقدارهای یک ماتریس $Q \times Q$ که از مسئله اولی بسیار ساده تر است. برای مدل

آیزینگ T دوبعدی است. در این حالت داریم

$$\langle S | T | S' \rangle := e^{\beta J S S' + \frac{\beta B}{2}(S+S')} \quad (29)$$

و یا

$$\mathcal{T} = \begin{pmatrix} e^{\beta J + \beta B} & e^{-\beta J} \\ e^{-\beta J} & e^{\beta J - \beta B} \end{pmatrix} \quad (30)$$

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

$$\lambda_{\pm} = e^{\beta J} \left(\cosh \beta B \pm \sqrt{\sinh^2 \beta B + e^{-4\beta J}} \right) \quad (31)$$

در نتیجه تابع پارش برابر خواهد بود با:

$$Z_N = \lambda_1^N + \lambda_2^N \quad (32)$$

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:

$$f = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{F}{N} = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{-kT \ln Z_N}{N} = -kT \ln \lambda_1. \quad (33)$$

بنابراین بدست می آوریم:

$$f = -J - kT \ln \left[\cosh \beta B + \sqrt{\sinh^2 \beta B + e^{-4\beta J}} \right]. \quad (34)$$

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 $T \rightarrow 0$ که در این صورت عبارت داخل رادیکال برابر می شود با $\sinh^2 \frac{B}{kT}$ و ما خواهیم داشت:

$$f_{T \rightarrow 0} = -J - \lim_{T \rightarrow 0} kT \ln \left[\cosh \frac{B}{kT} + \left| \sinh \frac{B}{kT} \right| \right] \quad (35)$$

در نتیجه f برابر می شود با:

$$f_{T \rightarrow 0} = \begin{cases} -J - kT \ln e^{\frac{B}{kT}} = -J - B & , \quad B > 0 \\ -J - kT \ln e^{-\frac{B}{kT}} = -J + B & , \quad B < 0 \end{cases} \quad (36)$$

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

$$m := \frac{\partial \ln \lambda_1}{\partial \beta B}, \quad \chi = \frac{\partial m}{\partial B}, \quad \epsilon = -\frac{\partial \ln \lambda_1}{\partial \beta}, \quad C_B = \frac{\partial \epsilon}{\partial T}. \quad (37)$$

به این ترتیب با محاسبه سرراست بدست می آوریم

$$m = \frac{\sinh \beta B}{\sqrt{\sinh^2 \beta B + e^{-4\beta J}}}. \quad (38)$$

■ تمرین: رابطه بالا را بدست آورید.

این رابطه نشان می دهد که:

الف: وقتی که $B = 0$ باشد، m نیز برابر با صفر خواهد بود و این یعنی اینکه در این سیستم یک بعدی مغناطش خود بخود و شکست تقارن بوجود نمی آید.

ب: وقتی که $T \rightarrow 0$ یا $\beta \rightarrow \infty$ ، این رابطه بیان می کند که $m = \frac{B}{|B|}$.

این رابطه نشان می دهد که در دمای صفر مقدار بی نهایت کوچکی میدان مغناطیسی می تواند باعث ایجاد مغناطش حداکثری در جهت میدان مغناطیسی شود. از آنجا که افت و خیزهای میدان مغناطیسی می تواند در جهت مثبت یا منفی رخ دهد، این نتیجه به این معناست که اگر چه وقتی میدان مغناطیسی دقیقاً صفر است مغناطی نیز صفر است اما در دمای صفر گذار فاز می تواند رخ دهد و مغناطش خود بخود در اثر یک افت و خیز بی نهایت کوچک میدان مغناطیسی پدیدار شود.

$$ج: m(B) = -m(-B)$$

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

$$\chi = \frac{\beta \cosh \beta B e^{-4\beta J}}{(\sinh^2 \beta B + e^{-4\beta J})^{\frac{3}{2}}}. \quad (39)$$

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

$$\chi(B=0) = \frac{e^{\frac{2J}{kT}}}{kT}, \quad (40)$$

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 باز 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.

۵ 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^۳ بدست می

^۳Correlation Functions

آیند. این توابع همبستگی که به آنها توابع n نقطه ای^۴ 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.

۱.۵ معنای تابع همبستگی

یک تابع همبستگی مثل $\langle S_i S_j \rangle$ را می توان به روش های مختلف حساب کرد. اما قبل از محاسبه بهتر است معنای آن را دریابیم. معلوم است که هروقت S_i و S_j تمایل به هم جهت بودن داشته باشند، $\langle S_i S_j \rangle$ 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:

$$P(x = y) = P(1, 1) + P(-1, -1) = \langle \delta_{x,1} \delta_{y,1} \rangle + \langle \delta_{x,-1} \delta_{y,-1} \rangle \quad (۴۱)$$

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

$$P(x = y) = \frac{1}{4} \langle (1+x)(1+y) \rangle + \frac{1}{4} \langle (1-x)(1-y) \rangle = \frac{1}{2} (1 + \langle xy \rangle). \quad (۴۲)$$

بنابراین نشان دادیم که:

$$P(S_i = S_j) = \frac{1}{2} (1 + \langle S_i S_j \rangle), \quad P(S_i = -S_j) = \frac{1}{2} (1 - \langle S_i S_j \rangle). \quad (۴۳)$$

این رابطه نشان می دهد که تابع همبستگی $\langle S_i S_j \rangle$ 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

^۴n-point functions

به شکل زیر است:

$$H = H_0(S_1, S_2, \dots, S_N) - \sum_i B_i S_i. \quad (44)$$

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 کاملاً 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 زیر است:

$$Z = \sum_{\{S\}} e^{\beta \sum_i B_i S_i - \beta H_0}. \quad (45)$$

برای سادگی نمادگذاری موقتاً 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:

$$\langle S_i \rangle = \frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \tilde{B}_i}, \quad \langle S_i S_j \rangle = \frac{1}{Z} \frac{\partial^2 Z}{\partial \tilde{B}_i \partial \tilde{B}_j}. \quad (46)$$

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

$$\begin{aligned} \frac{\partial \langle S_i \rangle}{\partial \tilde{B}_j} &= \frac{\partial}{\partial \tilde{B}_j} \left(\frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \tilde{B}_i} \right) \\ &= \frac{-1}{Z^2} \frac{\partial Z}{\partial \tilde{B}_j} \frac{\partial Z}{\partial \tilde{B}_i} + \frac{1}{Z} \frac{\partial^2 Z}{\partial \tilde{B}_j \partial \tilde{B}_i} \\ &= -\langle S_i \rangle \langle S_j \rangle + \langle S_i S_j \rangle. \end{aligned} \quad (47)$$

بنابراین به طور کلی رابطه زیر را بین تابع همبستگی و تابع پاسخ^۵ یک سیستم مغناطیسی بدست آوردیم:

$$G(i, j) \equiv \langle \tilde{S}_i \rangle \langle \tilde{S}_j \rangle - \langle S_i \rangle \langle S_j \rangle = kT \frac{\partial \langle S_i \rangle}{\partial \tilde{B}_j}. \quad (48)$$

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.

Response Function^۵

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.

۲.۵ 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:

$$G(i, j) \equiv \langle S_i S_j \rangle - \langle S_i \rangle \langle S_j \rangle \sim e^{-\frac{|i-j|}{\xi}} \quad (۴۹)$$

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 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 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:

$$Z(K_1, K_2, \dots, K_N) = \sum_{S_1, S_2, \dots, S_N} e^{\sum_{i=1}^N K_i S_i S_{i+1}}, \quad (۵۰)$$

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

$$\langle S_i S_{i+1} \rangle = \frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial K_i}, \quad \langle S_i S_{i+2} \rangle = \frac{1}{Z} \frac{\partial^2 Z}{\partial K_i \partial K_{i+1}}, \quad \langle S_i S_{i+r} \rangle = \frac{1}{Z} \frac{\partial^r Z}{\partial K_i \partial K_{i+1} \dots \partial K_{i+r-1}}. \quad (۵۱)$$

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:

$$Z = 2 \prod_{i=1}^{N-1} (2 \cosh K_i), \quad (52)$$

که از آن نتیجه می گیریم:

$$\langle S_i S_{i+r} \rangle = (\tanh K)^r. \quad (53)$$

می توانیم این رابطه را به شکل بهتری بنویسیم:

$$\langle S_i S_{i+r} \rangle = e^{-\frac{r}{\xi}} \quad (54)$$

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

$$\xi = \frac{1}{\ln \coth K}. \quad (55)$$

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

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

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

$$\begin{aligned} \langle S_i \rangle &= \frac{1}{Z} \sum_{\{S_1, \dots, S_N\}} S_i e^{-\beta H} \\ &= \frac{1}{Z} \sum_{\{S_1, \dots, S_N\}} S_i \langle S_1 | T | S_2 \rangle \langle S_2 | T | S_3 \rangle \cdots \langle S_{i-1} | T | S_i \rangle \langle S_N | T | S_1 \rangle. \end{aligned} \quad (56)$$

حال ماتریس σ را چنان تعریف می کنیم که

$$\sigma |S\rangle = S |S\rangle \quad (57)$$

یعنی

$$\sigma |1\rangle = |1\rangle, \quad \sigma |-1\rangle = -|-1\rangle, \longrightarrow \sigma = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (58)$$

در این صورت رابطه (۵۶) را به شکل زیر می توانیم بنویسیم:

$$\begin{aligned}\langle S_i \rangle &= \frac{1}{Z} \sum_{\{S_1, \dots, S_N\}} \langle S_1 | T | S_2 \rangle \langle S_2 | T | S_3 \rangle \cdots \langle S_{i-1} | T \sigma | S_i \rangle \langle S_N | T | S_1 \rangle \\ &= \frac{1}{Z} \text{tr}(T^{i-1} \sigma T^{N-i+1}) = \frac{\text{tr}(\sigma T^N)}{\text{tr} T^N}\end{aligned}\quad (59)$$

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

$$\langle S_i \rangle = \langle \lambda_{max} | \sigma | \lambda_{max} \rangle. \quad (60)$$

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 بازم 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 پرودیک در نظر می گیریم و می نویسیم

$$\langle S_i S_j \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\{S\}} S_i S_j \langle S_N | T | S_{N-1} \rangle \cdots \langle S_{i+1} | T | S_i \rangle \cdots \langle S_{j+1} | T | S_j \rangle \cdots \langle S_2 | T | S_1 \rangle. \quad (61)$$

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:

$$\begin{aligned}\langle S_i S_j \rangle &= \frac{1}{Z} \sum_{\{S\}} \langle S_N | T | S_{N-1} \rangle \cdots \langle S_{j+1} | T \sigma_z | S_j \rangle \cdots \langle S_{i+1} | T \sigma_z | S_i \rangle \cdots \langle S_2 | T | S_1 \rangle \\ &= \frac{1}{Z_N} \text{tr}(\mathcal{T}^{N-j} \sigma_z \mathcal{T}^{j-i} \sigma_z \mathcal{T}^i) \\ &= \frac{\text{tr}(\mathcal{T}^{N-j} \sigma_z \mathcal{T}^{j-i} \sigma_z \mathcal{T}^i)}{\text{tr}(\mathcal{T}^N)}.\end{aligned}\quad (62)$$

در حد ترمودینامیک، وقتی که $N \rightarrow \infty$ تنها بزرگترین ویژه مقدار و ویژه بردار مربوط به ماتریس انتقال باقی می ماند و صورت و مخرج

کسر بالا نیز ساده می شوند:

$$\langle S_i S_j \rangle = \frac{\langle \lambda_+ | \sigma_z \mathcal{T}^{j-i} \sigma_z | \lambda_- \rangle}{\lambda_+^{j-i}}. \quad (63)$$

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 $|j-i| \gg 1$ 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:

$$\langle S_i S_j \rangle - \langle S_i \rangle \langle S_j \rangle = \lambda_+^{i-j} \langle \lambda_+ | \sigma_z \mathcal{T}^{j-i} \sigma_z | \lambda_+ \rangle \quad (64)$$

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

$$\begin{aligned} \langle S_i S_j \rangle - \langle S_i \rangle \langle S_j \rangle &= \lambda_+^{i-j} \langle \lambda_+ | \sigma_z \mathcal{T}^{j-i} \sigma_z | \lambda_+ \rangle - \langle \lambda_+ | \sigma_z | \lambda_+ \rangle^2 \\ &= \lambda_+^{i-j} \left[\langle \lambda_+ | \sigma_z | \lambda_+ \rangle \lambda_+^{j-i} \langle \lambda_+ | \sigma_z | \lambda_+ \rangle + \langle \lambda_+ | \sigma_z | \lambda_- \rangle \lambda_-^{j-i} \langle \lambda_- | \sigma_z | \lambda_+ \rangle \right] - [\langle \lambda_+ | \sigma_z | \lambda_+ \rangle]^2 \\ &= \left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+} \right)^{j-i} \langle \lambda_+ | \sigma_z | \lambda_- \rangle \langle \lambda_- | \sigma_z | \lambda_+ \rangle. \end{aligned} \quad (65)$$

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

$$G_{ij} \sim e^{|j-i| \ln \frac{\lambda_-}{\lambda_+}} \sim e^{-\frac{|j-i|}{\xi}}, \quad (66)$$

که در آن ξ یعنی طول همبستگی برابر است با:

$$\xi = \frac{1}{\ln(\frac{\lambda_+}{\lambda_-})}. \quad (67)$$

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:

$$\frac{\lambda_+}{\lambda_-} = \frac{\cosh \beta B + \sqrt{\sinh^2 \beta B + e^{-4\beta J}}}{\cosh \beta B - \sqrt{\sinh^2 \beta B + e^{-4\beta J}}} \quad (68)$$

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

$$\xi(B=0) = \frac{1}{\ln(\coth \frac{2J}{kT})}. \quad (۶۹)$$

هم چنین براحتی می توان دریافت که:

$$\xi(T \rightarrow \infty) = 0, \quad \xi(T \rightarrow 0) \rightarrow \sim \frac{1}{2} e^{\frac{2J}{kT}} \rightarrow \infty. \quad (۷۰)$$

۴.۵ 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 همه 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 دیگری 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 کاملاً 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 کاملاً 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^۶ در بسیاری از گذار فاز ها وجود دارد و ما در درسهای آینده در باره آن به 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 اخیراً نیز دسته ای از گذار فاز ها موسوم به گذار فاز توپولوژیک کشف شده اند که همراه با شکست تقارن نیستند.

^۶Spontaneous Symmetry Breaking

۵.۵ 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:

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \quad (۷۱)$$

که در آن $\mathbf{S}_i$ 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 تغییر نمی کند. یعنی اینکه

$$H(\{\mathbf{S}_i\}) = H(\{\mathbf{S}'_i\}), \quad (۷۲)$$

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

$$P(\{\mathbf{S}_i\}) = \frac{1}{Z} e^{-\beta H(\{\mathbf{S}_i\})} \quad (۷۳)$$

تقارن ۷۲ نتیجه اش این است که

$$P(\{\mathbf{S}_i\}) = P(\{\mathbf{S}'_i\}) \quad (۷۴)$$

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

$$P(\{\mathbf{S}_i\}) = P(\{-\mathbf{S}_i\}) \quad (۷۵)$$

زیرا با یک دوران به اندازه 180° 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 غیر صفر 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 ۷۳ را خوب بفهمیم.

می دانیم که رابطه (۷۳) 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. فضای 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 (۲). به عنوان مثال در مورد یک گاز ایده آل برخورد بین ذرات و بین ذرات و دیواره ها باعث می شود 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 است. 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 میکروسکوپی از سیستم را مشاهده می کنیم نقطه نماینده سیستم تقریبا تمام فضای فاز را طی می کند. بیابید 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:

$$\langle A \rangle = \frac{1}{T} \int A(x(t)) dt \quad (76)$$

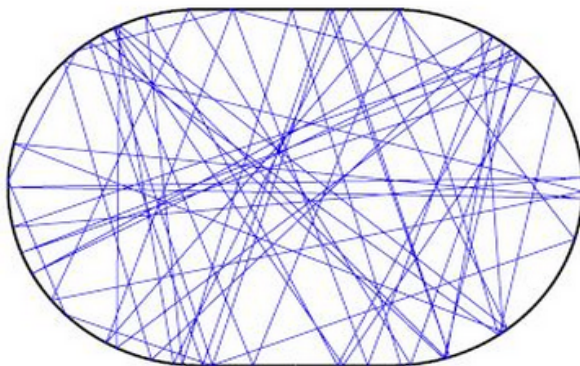
که در آن T زمانی است که طول کشیده است که کمیت A اندازه گیری شود. دقت کنید که ممکن است که این زمان در مقیاس میکروسکوپی خیلی کوتاه باشد ولی در مقیاس میکروسکوپی بی اندازه بزرگ باشد. در چنین شرایطی می نویسیم:

$$\langle A \rangle = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int A(x(t)) dt. \quad (77)$$

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:

$$\langle A \rangle = \int dx A(x) \rho(x), \quad (78)$$

که در آن $\rho(x)$ 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^۷ می گوئیم. 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 ۲: نمایشی از اصل ارگودیک. در زمان های به اندازه کافی طولانی مسیر یک سیستم بسته در فضای فاز تقریباً 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 تقریباً به ازای هر شرایط اولیه ای برقرار است. منظور از تقریباً 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

$$\rho(x) = \frac{1}{Z} e^{-\beta H(x)}. \quad (۷۹)$$

حال می توانیم بفهمیم 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^۸. معنای این حرف این است که نقطه نماینده سیستم در طول مسیر حرکت خود به ناحیه ای رفته که در آنجا مثلاً x مقادیرهای 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.

^۷Hypothesis Ergodic
^۸Ergodicity Breaking

۶ 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.

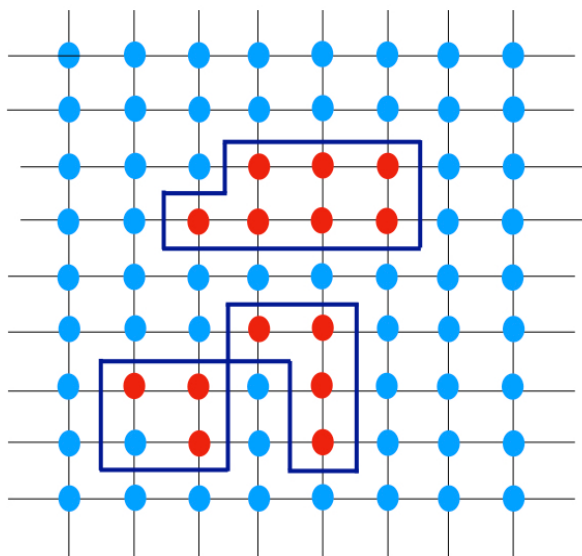
۱.۶ استدلال مبتنی بر انرژی و شکست تقارن

حالت هایی را که می توانند نشان دهنده فاز منظم باشند در نظر می گیریم. این حالت ها در شکل () نشان داده شده اند و انرژی آنها بنابر تقارن یکسان است. فرض کنید که تمام اسپین ها در یکی از کمینه های انرژی مثل $C = (+ + + + + + + + + +)$ قرار گرفته باشند. حال فرض کنید که یکی از اسپین ها از حالت $+$ به حالت $-$ تغییر می کند و حالت $C_1 = (+ + + + - + + + + + + + + +)$ بدست می آید. 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 $C_2 = (+ + + - - + + + + + + + + + +)$ 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 حالت های $C = (+ + + + + + + + + +)$ و $C' = (- - - - - - - - - -)$ 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.

۲.۶ 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 هر جایی 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 ماکرو حالت که تمام میکرو حالت هایش با احتمال یکسان اشغال می شوند برابر است با $k \ln \Omega$ که در آن Ω تعداد میکرو حالت 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 غیر صفر 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 کاملاً 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 پذیر است. 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 (۳) داریم:



شکل ۳: 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 در این صورت خواهیم داشت:

$$\Delta E = 2JL. \quad (۸۰)$$

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 نشان دهیم می توانیم بنویسیم

$$N_L \approx (z - 1)^L. \quad (۸۱)$$

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 ممکن که می تواند طی کند با تقریب قابل قبولی از مرتبه بالا است. به این ترتیب بدست می آوریم که میزان تغییر انرژی آزاد برای این ماکروحالت برابر است با:

$$\Delta F \approx \Delta E - T\Delta S = \Delta E - kT\Delta N_L = 2JL - kTL \ln(z - 1) = L(2J - kT \ln(z - 1)) \quad (۸۲)$$

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:

$$T_c = \frac{2J}{k \ln(z - 1)}, \quad (۸۳)$$

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

۷ 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 عملاً غیر ممکن است. البته جای ناامیدی نیست به دو دلیل مهم:

یک - 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 جزئیات میکروسکوپی ذرات و برهم کنش های آنها بستگی ندارد. اغلب اوقات می توانیم از جزئیات 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 عملاً 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^۹ 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:

^۹Mean Field Theory

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j - B \sum_i S_i, \quad (۸۴)$$

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:

$$Z = \sum_{\{S_i\}} e^{\beta J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j + \beta B \sum_i S_i}, \quad (۸۵)$$

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 سراسر 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:

$$\sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j = \sum_i S_i \sum_{j \in N_i} S_j \quad (۸۶)$$

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

$$\sum_{j \in N_i} S_j = z \frac{\sum_{j \in N_i} S_j}{z} \approx z \langle S \rangle = zm \quad (۸۷)$$

که در آن

$$m := \frac{1}{z} \sum_{j \in N_i} S_j \quad (۸۸)$$

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

$$Z \approx \sum_{\{S_i\}} e^{\beta \sum_i S_i (Jzm + B)}, \quad (۸۹)$$

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

$$\langle s \rangle = m. \quad (۹۰)$$

این پارامتر را می بایست بعداً 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:

$$Z \approx Z_1^N \quad (91)$$

که Z_1 تابع پارش تک ذره ای است

$$Z_1 = \sum_{\{S_i=\pm 1\}} e^{\beta S_i(Jzm+B)} = 2 \cosh(Jzm+B), \quad (92)$$

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

$$m = \frac{1}{N} \frac{\partial}{\partial \beta h} \ln Z = \tanh \beta(Jzm+B). \quad (93)$$

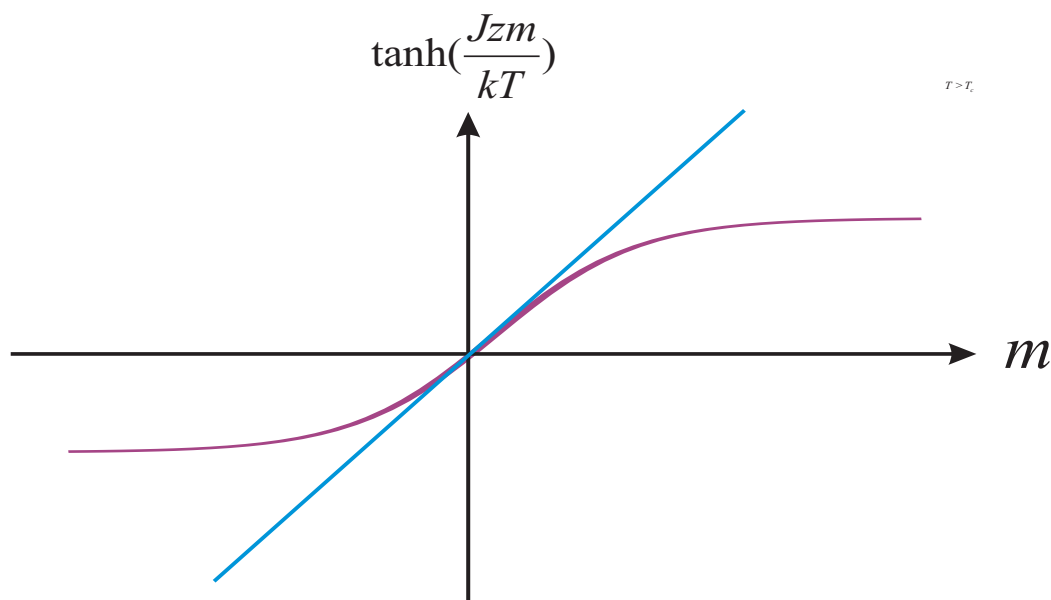
این رابطه در واقع معادله حالت سیستم مغناطیسی را نشان می دهد که m ، B و T را به هم مرتبط می کند. به ازای هر مقدار ثابت B می توان این معادله را به شکل گرافیک حل کرد و مقدار m را برحسب B و T پیدا کرد. اگر بخواهیم مغناطش خودبخود یعنی مغناطشی را که در میدان مغناطیسی صفر وجود دارد پیدا کنیم می بایست این معادله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

$$m = \tanh \beta Jzm \quad (94)$$

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 ۷ ولی اگر این مشتق کمتر از یک باشد فقط حل صفر برای m وجود دارد، شکل ۷. 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:

$$T_c := \frac{Jz}{k} \quad (95)$$

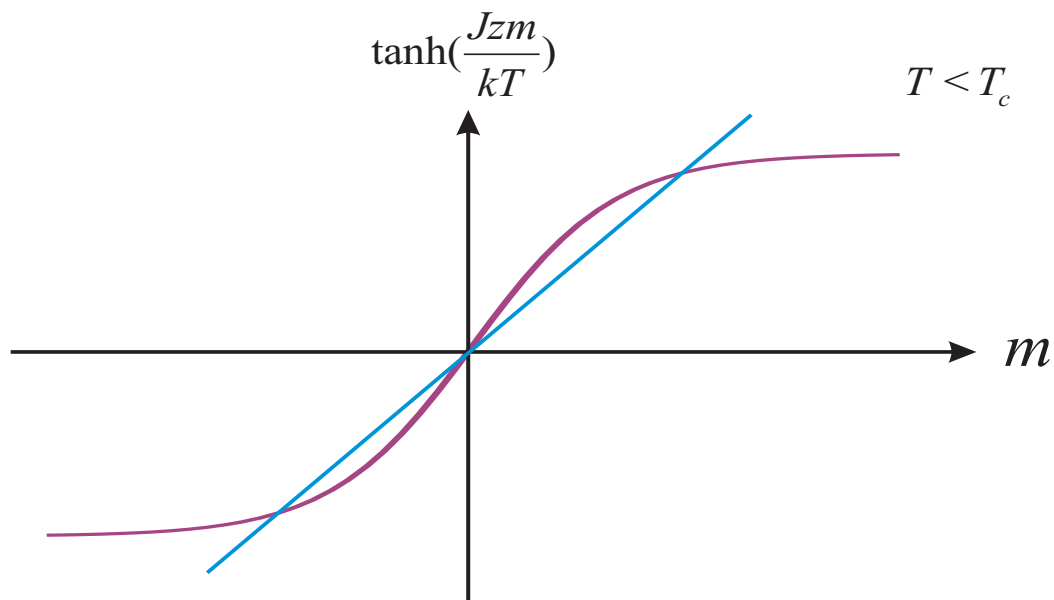


شکل ۴: وقتی که دما بیشتر از دمای بحرانی است. 94 حل گرافیکی معادله

شکل های ۷ و ۷ 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 (۹۴) 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 نهایتاً در حالت تعادل این تابع انرژی به مقدار کمینه خود می رسد. این مقدار کمینه همان است که ما می توانیم از رابطه $F = -kT \ln Z$ حساب کنیم. اما در این استدلال ما با این مقدار تعادلی کاری نداریم بلکه می خواهیم برای یک حالت کلی که الزاماً حالت تعادل نیست از رابطه $F = E - TS$ تابع انرژی هلمهولتز را حساب کنیم. البته می توانیم از بعضی



شکل ۵: وقتی که دما کمتر از دمای بحرانی است. ۹۴ حل گرافیکی معادله

تقریب ها نیز استفاده کنیم. اولین تقریب این است که با توجه به اینکه تابع F یک تابع فزونور است آن را به شکل زیر می نویسیم:

$$F = Nf = N(\epsilon - Ts) \quad (96)$$

که در آن ϵ انرژی یک اسپین و s انتروپی یک اسپین است. فرض کنید در یک حالت غیرتعادل ولی همگن هستیم که در آن $\tilde{m}$ متوسط مغناطش هر اسپین است. بازهم تاکید می کنیم که این مقدار با مقدار مغناطش در حالت تعادل متفاوت است. در حالت تعادل است که این دو مقدار یکی می شوند. بنابراین خواهیم داشت:

$$\epsilon = -J \frac{z}{2} \tilde{m}^2.$$

آنتروپی نیز برابر است با:

$$s = -k(P_+ \log P_+ + P_- \log P_-) \quad (97)$$

که در آن P_+ و P_- به ترتیب احتمال مثبت بودن و احتمال منفی بودن یک اسپین است. از آنجا که می دانیم:

$$P_+ + P_- = 1 \quad P_+ - P_- = \tilde{m}, \quad (98)$$

بدست می آوریم:

$$P_+ = \frac{1}{2}(1 + \tilde{m}) \quad P_- = \frac{1}{2}(1 - \tilde{m}) \quad (99)$$

بنابراین خواهیم داشت:

$$f(\tilde{m}, T) = -J \frac{z}{2} \tilde{m}^2 + kT \left[\frac{1 + \tilde{m}}{2} \ln \frac{1 + \tilde{m}}{2} + \frac{1 - \tilde{m}}{2} \ln \frac{1 - \tilde{m}}{2} \right] \quad (100)$$

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

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

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

$$F(\tilde{m}, T) = -kT \ln 2 + \frac{1}{2}(kT - Jz)\tilde{m}^2 + \frac{kT}{3}\tilde{m}^4 + \dots \quad (101)$$

برابر با صفر شود و اگر نظمی وجود داشته باشد می بایست مقدار

■ 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

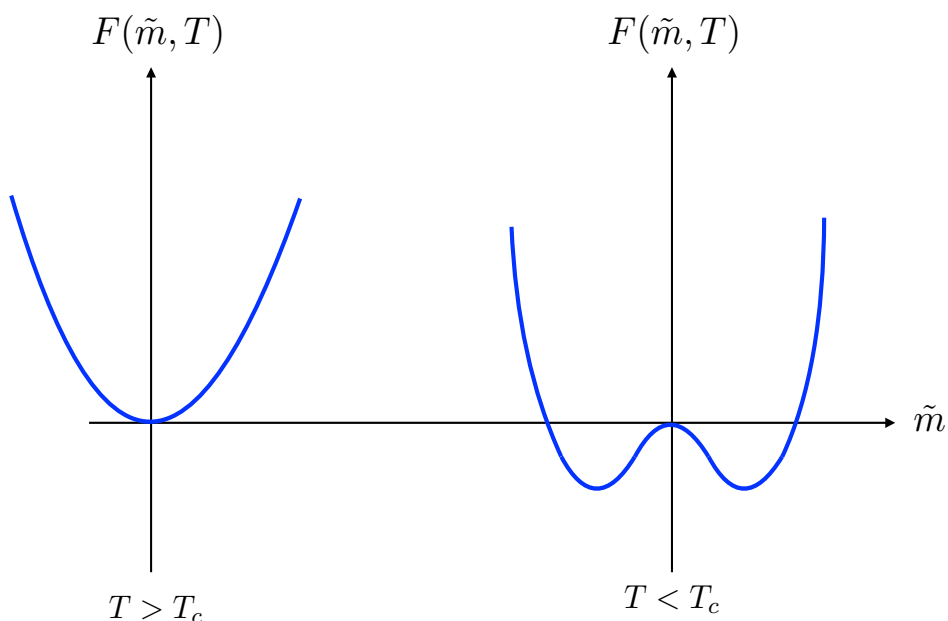
$$\frac{\partial F}{\partial \tilde{m}} \Big|_{\tilde{m}=m} = 0. \quad (102)$$

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

$$m = \tanh\left(\frac{zJ}{kT}m\right). \quad (103)$$

۸ شکست تقارن پیوسته: 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



شکل ۶: 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.

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:

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j - \mathbf{B} \cdot \sum_i \mathbf{S}_i. \quad (104)$$

در تقریب میدان متوسط، تابع پارش برابر است با:

$$Z = \int d\mathbf{S}_1 \cdots d\mathbf{S}_N e^{-\beta H} \approx Z = \int d\mathbf{S}_1 \cdots d\mathbf{S}_N e^{\beta \mathbf{S}_i \cdot (Jz\mathbf{m} + \mathbf{B})} = Z_1^N \quad (105)$$

که در آن

$$Z_1 = \int d\mathbf{S} e^{\beta \mathbf{S}_i \cdot (Jz\mathbf{m} + \mathbf{B})} \quad (106)$$

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:

$$Z_1 = \int d\phi d\cos\theta e^{|\mathbf{n}| \cos\theta} = 4\pi \frac{\sinh|n|}{|n|} \quad (107)$$

در نتیجه بدست می آوریم:

$$Z_1 = 4\pi \frac{\sinh|\beta(Jz\mathbf{m} + \mathbf{B})|}{|\beta(Jz\mathbf{m} + \mathbf{B})|} \quad (108)$$

و با توجه به رابطه (105)

$$F = -NkT [\ln 4\pi + \ln(\sinh|\beta(Jz\mathbf{m} + \mathbf{B})|) - \ln|\beta(Jz\mathbf{m} + \mathbf{B})|] . \quad (109)$$

■ تمرین: از تابع پارش (108) یا تابع انرژی آزاد (109) 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 مغناطش 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 را که 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:

$$m = \coth \beta(Jzm + B) - \frac{1}{\beta(Jzm + B)} \quad (110)$$

۹ مسئله ها و تمرین ها:

■ مسئله یک: 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 دو: 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 سوم: هامیلتونی مدل آیزینگ را به صورت زیر در نظر بگیرید:

$$H = J \sum_{i=1}^N S_i S_{i+1} \quad (111)$$

شرایط مرزی را پریودیک و تعداد اسپین ها را نیز زوج بگیرید. شدت برهم کنش یعنی J را مثبت بگیرید. 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 آنکه 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:

$$M_{st} := \sum_{i=1}^N (-1)^i \langle m_i \rangle. \quad (112)$$

مقدار پارامتر نظم را بر حسب دما محاسبه کنید.