

سیستم های اسپینی - بخش دوم

تقریب میدان متوسط

وحیدکریمی پور - دانشکده فیزیک - دانشگاه صنعتی شریف

۳۰ آذر ۱۴۰۴

۱ مقدمه

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 چند اتمی 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. در واقع می توان گفت که هر مسئله واقعی فیزیک مسئله ای است که به صورت دقیق غیرقابل حل است. در درس مربوط به بسط خوشه ای دیدیم که چگونه می توان با استفاده از روش های اختلالی مسایل واقعی فیزیک را با تقریب خوب حل کرد. در روش اختلال سعی می کنیم پارامتر کوچکی را در مسئله پیدا کنیم و تابع پارش را نسبت به آن پارامتر کوچک بسط دهیم. به این ترتیب می توانیم بسته به دقتی که در نظر داریم، تابع پارش را تا رتبه مورد نیاز از آن پارامتر کوچک بسط دهیم و نتایج تقریبی خیلی خوبی از مقدار کمیت های فیزیکی بدست آوریم. اما روش بسط خوشه ای تنها روش مطالعه سیستم های بابرهم کنش نیست. در این درس با روشی آشنا می شویم که به آن روش میدان متوسط می

گویند. این روش معمولاً و به سادگی خیلی زیاد، ویژگی‌های اساسی یک دستگاه بس ذره ای را توصیف و پیش بینی می کند. دلیل اش هم این است که اِستِاری 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.

روش میدان متوسط 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. از یک نظر گاه اساس این روش 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. از نظرگاه دیگری هم این روش حاصل در نظر نگرفتن همبستگی های بین ذرات (و البته نه برهم کنش آنها) است. در این فصل به توصیف این روش باز هم در ساده ترین زمینه، یعنی مدل مغناطیسی می پردازیم. با توصیف این روش از زاویه های متفاوت قادر خواهیم بود که هم قدرت و هم کاستی های آن را بهتر بفهمیم.

می توان تقریب میدان متوسط را به شیوه های متفاوتی فهمید که البته همه شیوه ها نیز به یک نتیجه منجر می شوند، ولی دنبال کردن این شیوه به فهم عمیق تر ما از این تقریب کمک می کنند. این شیوه ها را می توان به شکل زیر بیان کرد:

- روش اول: جایگزین کردن برهم کنش همسایه های نزدیک یک ذره با اثر متوسط آنها یا به عبارت دیگر جایگزین کردن اثر آنها با یک میدان متوسط. نام این تقریب نیز از همین جا گرفته شده است. از نظر تاریخی این نوع تقریب را نخستین بار پیر وایس^۱ در ۱۹۰۷، البته نه برای مدل آیزینگ بلکه برای فرومغناطیس همسانگرد به عنوان مدلی واقعی تر از یک مغناطیس به کار برده است. به همین دلیل نام دیگر این روش نظریه میدان متوسط مولکولی وایس^۲ این روش در بخش (۲) توضیح داده شده است.

- روش دوم که حاصل کار براگ و ویلیامز^۳ است، که هسته اساسی آن همان در نظر نگرفتن همبستگی های بین مولکولی است. این روش در بخش (۳) توضیح داده می شود و بالاخره

- روش سوم: استفاده از اصل وردش. این استدلال مبتنی بر اصل آنتروپی ماکزیمم است که در آن سعی می کنیم تابع احتمال هر هیئت از اسپین ها را با ماکزیمم کردن آنتروپی به دست آوریم. هرگاه این ماکزیمم را روی همه فضای حالت ها انجام دهیم (البته با در نظر گرفتن قیدهای بهنجارش احتمالات و قید انرژی کل) به همان تابع توزیع کلی در انزامل کانونیک می رسیم. اما اگر ماکزیمم را فقط روی فضای

Piere Weiss^۱

Weiss Molecular Mean Field Theory^۲

Bragg and Williams^۳

توابع احتمال ضربی پیدا کنیم، مستقیماً به تقریب میدان متوسط می‌رسیم. این روش در بخش (۴) شرح داده شده و در بخش (۵) به مدد کار فیزیکدان اهل شوروی، نیکلای بوگولیوبوف^۴ بر مبنای محکم تری استوار شده است.



شکل ۱: نیکلای نیکولایوویچ بوگولیوبوف (۱۹۰۹-۱۹۹۲)

نیکلای نیکولایوویچ بوگولیوبوف (۲۱ اوت ۱۹۰۹ - ۱۳ فوریه ۱۹۹۲) یکی از تأثیرگذارترین فیزیکدانان نظری و ریاضی‌دانان قرن بیستم اتحاد جماهیر شوروی بود. او سهم عمده‌ای در زمینه‌های **مکانیک آماری، نظریه میدان کوانتومی، نظریه ابررسانایی، نظریه هسته‌ای و دینامیک غیرخطی داشته است. بوگولیوبوف در نیژنی نووگورود به دنیا آمد و پدرش که کشیش و نیز استاد الهیات بود، او را به صورت خصوصی آموزش داد. بوگولیوبوف در ۱۴ سالگی اولین کار علمی خود را ارائه داد و توجه نیکلای کریلوف ریاضیدان مشهور روسیه را جلب کرد. تحت سرپرستی کریلوف، وارد تحقیقات علمی شد و در ۱۹ سالگی نخستین مقاله علمی خود را منتشر کرد و در ۲۱ سالگی مدرک دکترای خود را گرفت.

بوگولیوبوف در چندین شاخه بنیادی فیزیک و ریاضیات انقلابی به پا کرد:

^۴Nikolay Nikolaevich Bogoliubov

یک - در مکانیک آماری و ترمودینامیک: روش‌های قدرتمندی برای مطالعه سیستم‌های تعادلی و دور از تعادل ارائه داد. معادله‌های حرکت بوگولیوبوف (زنجیره $BBGKY^T$ برای توصیف دینامیک ذرات در گازها، از کارهای ماندگار اوست.

دو- در نظریه ابررسانایی: به همراه لاندائو، پایه‌های نظری ابررسانایی را بنا نهاد. معیار لاندائو-بوگولیوبوف برای تشخیص گذار فاز مرتبه دوم، از نتایج این همکاری است.

سه - در نظریه میدان کوانتومی: روش تبدیل بوگولیوبوف-والاشینکو را ابداع کرد. همچنین، قضیه بوگولیوبوف-پاراسیوک-هیت در رابطه با نقاط تکین در نمودارهای فاینمن، از کارهای اساسی او و شاگردانش است.

چهار: در فیزیک هسته‌ای: مدل ابرشاره بوگولیوبوف را برای توصیف ساختار هسته اتم ارائه داد که تأثیر زیادی بر نظریه هسته داشت. و بالاخره

پنج: در دینامیک غیرخطی و نظریه آشوب: روش‌های تقریب وی برای سیستم‌های دینامیکی پرکاربرد هستند.

او استاد دانشگاه دولتی مسکو و یکی از بنیانگذاران موسسه ریاضیات استکلوف^۳ بود که بدون شک مهم‌ترین موسسه ریاضیات در شوروی بود. بوگولیوبوف نه تنها یک پژوهشگر برجسته و جامع‌الطراف بلکه مدیر علمی توانمندی بود که نقش کلیدی در توسعه علوم پایه در شوروی و جهان ایفا کرد. مکتب بوگولیوبوف در فیزیک نظری، نسل‌های زیادی از فیزیکدانان برجسته را پرورش داد. او در ۱۳ فوریه ۱۹۹۲ در مسکو درگذشت و در گورستان نووودویچی به خاک سپرده شد.

BBGKY Hierarchy^T
Steklov Mathematical Institute^۳

اگرچه در این درس این روش‌ها را برای یک سیستم اسپینی شرح می‌دهیم، اما تقریب میدان متوسط را می‌توان برای گروه وسیعی از مسایل در گازها و مایعات و حتی در حوزه‌های دیگری غیر از فیزیک نیز به کار برد. ایده اصلی این روش این است که برهم‌کنش‌های ذرات نزدیک به یک ذره را با یک میدان متوسط جایگزین می‌کنیم. وسعت کاربردهای این روش تقریب چنان است که نام نظریه میدان متوسط^۵ نیز برا آن به کار می‌رود.

Mean Field Theory^۵

۲ تقریب میدان متوسط به روش پیر وایس

برای توصیف نظریه میدان متوسط ^۶ گذار فاز فرومغناطیسی را در نظر می گیریم. هامیلتونی ای که برهم کنش های دوقطبی ها را با یکدیگر و با میدان خارجی توصیف می کند به شکل زیر است:

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j - B \sum_i S_i, \quad (۱)$$

که در آن علامت $\langle i, j \rangle$ به معنای جمع روی اسپین های همسایه است. دقت کنید که در این عبارت هر دو اسپین همسایه دو بار شمرده می شوند. مثل این است که شدت برهم کنش دو اسپین کنار هم برابر با $2J$ است. 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:

$$Z = \sum_{\{S_i\}} e^{\beta J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j + \beta B \sum_i S_i}, \quad (۲)$$

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

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

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

$$\sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j = \sum_i S_i \sum_{j \in N_i} S_j = z \frac{\sum_{j \in N_i} S_j}{z} \approx z \langle S \rangle = zm \quad (۴)$$

که در آن

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

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

$$Z \approx \sum_{\{S_i\}} e^{\beta \sum_i S_i (Jzm+B)}, \quad (6)$$

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

$$\langle S \rangle = m. \quad (7)$$

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:

$$Z \approx Z_1^N \quad (8)$$

که Z_1 تابع پارش تک ذره ای است

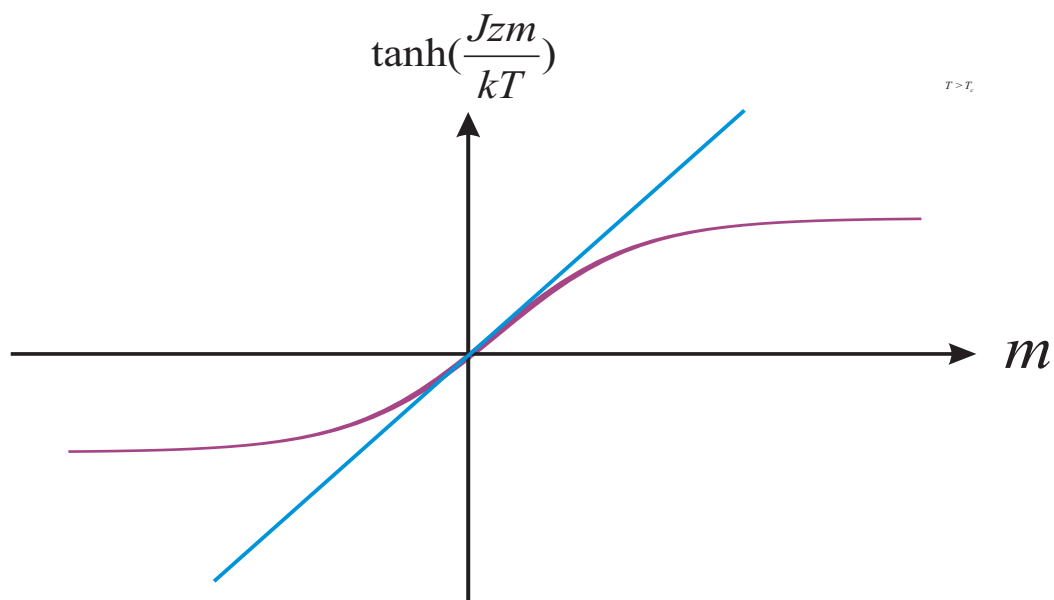
$$Z_1 = \sum_{\{S_i=\pm 1\}} e^{\beta S_i (Jzm+B)} = 2 \cosh \beta (Jzm + B), \quad (9)$$

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

$$m = \frac{1}{N} \frac{\partial}{\partial \beta B} \ln Z = \tanh \beta (Jzm + B). \quad (10)$$

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، باید این معادله را در $B = 0$ حل کنیم یعنی می بایست معادله

$$m = \tanh \beta Jzm \quad (11)$$

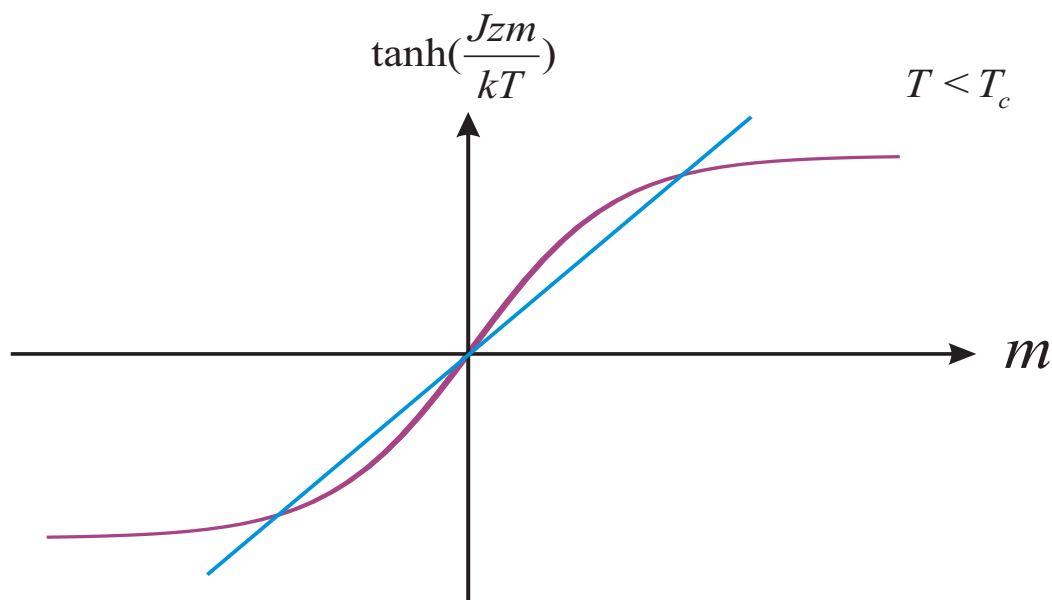


شکل ۲: وقتی که دما بیشتر از دمای بحرانی است، معادله (۱۱) تنها حل صفر دارد.

را حل کنیم.

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

$$T_c := \frac{Jz}{k} \quad (12)$$



شکل ۳: وقتی که دما کمتر از دمای بحرانی است، معادله (۱۱) حل های غیر صفر نیز دارد.

شکل (۲) نشان می دهد 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 (۱۱) 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 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 و تعادلی 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. این موضوع نیاز به

توضیح بیشتری دارد. در رابطه $F = E - TS$ می توانیم قرار دهیم

$$F = E - TS = \sum_{\alpha} E_{\alpha} P_{\alpha} - kT \sum_{\alpha} P_{\alpha} \ln P_{\alpha} \quad (۱۳)$$

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 (۱۳) قرار دهیم با یک محاسبه ساده به رابطه $F = -kT \ln Z$ می رسم. 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 (۱۳) 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:

$$E = -JN \frac{Z}{2} \tilde{m}^2. \quad (۱۴)$$

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

$$N_+ + N_- = N, \quad N_+ - N_- = \tilde{m}N, \quad (۱۵)$$

و یا

$$N_+ = \frac{N}{2}(1 + \tilde{m}) \quad N_- = \frac{N}{2}(1 - \tilde{m}). \quad (۱۶)$$

تعداد این نوع هیث ها برابر است با:

$$\Omega = \frac{N!}{N_+! N_-!} = \frac{N!}{\left(\frac{N(1+\tilde{m})}{2}\right)! \left(\frac{N(1-\tilde{m})}{2}\right)!} \quad (۱۷)$$

از تقریب استرلینگ استفاده می کنیم و نشان می دهیم

$$\ln \Omega = -N \left[\frac{1+\tilde{m}}{2} \ln \frac{1+\tilde{m}}{2} + \frac{1-\tilde{m}}{2} \ln \frac{1-\tilde{m}}{2} \right]. \quad (۱۸)$$

بنابراین خواهیم داشت:

$$F(\tilde{m}, T) = -JN \frac{\tilde{m}^2}{2} + NkT \left[\frac{1+\tilde{m}}{2} \ln \frac{1+\tilde{m}}{2} + \frac{1-\tilde{m}}{2} \ln \frac{1-\tilde{m}}{2} \right] \quad (۱۹)$$

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:

$$F(\tilde{m}, T) = -NkT \ln 2 + \frac{N}{2}(kT - Jz)\tilde{m}^2 + \frac{NkT}{3}\tilde{m}^4 + \dots \quad (۲۰)$$

حال اگر این تابع را برای دو حالت $T > T_c = \frac{Jz}{k}$ و $T < T_c = \frac{Jz}{k}$ رسم کنیم، متوجه می شویم که تابع هلمهولتز همان چیزی است که در شکل (۴) نشان داده شده است. این شکل نشان می دهد که نقطه ی کمینه تابع هلمهولتز اگر $T > T_c$ باشد، دارای یک نقطه ی کمینه در $m = 0$ است. اما وقتی که $T < T_c$ است، این تابع دارای دو نقطه ی کمینه 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. این نتایج را می توان به صورت واضح تر هم بیان کرد. با تعریف $T_c := \frac{Jz}{k}$ عبارت انرژی آزاد را می توان به صورت زیر بازنویسی کرد:

$$F(\tilde{m}, T) = NkT \left[-\ln 2 + \frac{1}{2} \left(1 - \frac{T_c}{T} \right) \tilde{m}^2 + \frac{1}{3} \tilde{m}^4 + \dots \right]. \quad (۲۱)$$

می نیمم این تابع با حل معادله $\frac{\partial F}{\partial \tilde{m}} = 0$ منجر به معادله زیر می شود:

$$\left(1 - \frac{T_c}{T} \right) \tilde{m} + \frac{4}{3} \tilde{m}^3 = 0. \quad (۲۲)$$

این معادله وقتی که $T > T_c$ باشد فقط یک جواب $\tilde{m} = 0$ دارد که نشان دهنده حالت بی نظم است. وقتی که $T < T_c$ باشد این معادله دارای سه جواب

$$\tilde{m} = 0, \quad \tilde{m} = \pm \sqrt{\frac{3(T_c - T)}{T}}, \quad (۲۳)$$

است. که اولی نشان دهنده یک ماکزیمم و دو جواب دیگر نشان دهنده نقاط می نیمم هستند.

■ تمرین:

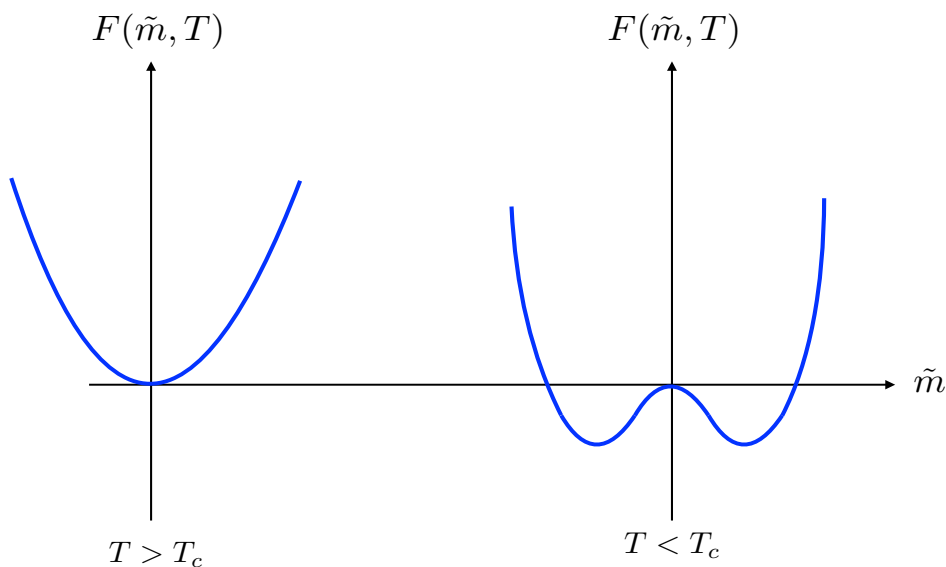
الف: می دانیم که مقدار تعادلی مغناطش که آن را با m نشان می دهیم، در نقطه ای بدست می آید که تابع هلمهولتز کمینه شود، یعنی

$$\left. \frac{\partial F}{\partial \tilde{m}} \right|_{\tilde{m}=m} = 0. \quad (24)$$

نشان دهید که معادله (۱۹) بالا منجر به رابطه زیر برای مغناطش متوسط در حالت تعادل می شود:

$$m = \tanh\left(\frac{zJ}{kT}m\right). \quad (25)$$

ب: حال معادله (۲۰) را در نظر بگیرید و نقطه ی کمینه 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 کمینه را بدست آورید. در حد $N \rightarrow \infty$ ارتفاع این سد چقدر می شود؟ چگونه این ارتفاع به ما کمک می کند که شکست تقارن را بفهمیم؟



شکل ۴: تابع انرژی آزاد مدل آیزینگ برای دمای بالاتر یا پایین تر از دمای بحرانی. این تابع از تقریب میدان متوسط بدست می آید و بنابراین برای یک بعد معتبر نیست.

۳ حل تقریبی مدل آیزینگ به روش براگ-ویلیامز

^۷ در تقریب میدان متوسط به یک معنا فرض کردیم که همبستگی بین اسپین ها وجود ندارد. در واقع تابع احتمال اسپین ها را به صورت حاصل ضربی از توابع احتمال تک تک اسپین ها در نظر گرفتیم. حال در روش ابداع شده توسط براگ و ویلیامز کمی از این تقریب فراتر می رویم و همبستگی ها را در نظر می گیریم. البته روشی که برای در نظر گرفتن این همبستگی ها به کار می بریم بازهم تقریبی است. ولی از نادیده گرفتن آنها مسلماً بهتر است. یک شبکه منظم که الزاماً دوبعدی هم نیست در نظر بگیرید. تعداد همسایه های هر اسپین را z می گیریم. (بنابراین برای شبکه دو بعدی مربعی این عدد برابر با ۴ و برای شبکه سه بعدی مکعبی برابر با ۶ است.) تعداد کل اسپین ها را برابر با N می گیریم. می دانیم که تابع پارش با جمع روی وضعیت های اسپین ها یعنی $(s_1, s_2, \dots, s_N)$ ها بدست می آید. اما کمی که فکر کنیم معلوم می شود که متغیرهای N_+ که باید روی آن ها جمع بزنیم کمتر هستند. در هر میکروحالتی فرض کنید که تعداد اسپین های مثبت برابر با N_+ و تعداد اسپین های منفی برابر با N_- است. بنابراین

$$N_+ + N_- = N.$$

حال در همین میکروحالت داریم:

$$\begin{aligned} N_{++} &= \text{تعداد اسپین های ++ در کنار هم} \\ N_{--} &= \text{تعداد اسپین های -- در کنار هم} \\ N_{+-} &= \text{تعداد اسپین های +- در کنار هم} \end{aligned} \quad (۲۶)$$

به این ترتیب می توان انرژی یک میکروحالت را به شکل زیر نوشت:

$$E = -J(N_{++} + N_{--} - N_{+-}) - B(N_+ - N_-) \quad (۲۷)$$

اما همه این متغیرها از یکدیگر مستقل نیستند. در واقع داریم:

$$N_+ + N_- = N. \quad (۲۸)$$

اما روابط بیشتری بین متغیرها نیز وجود دارد. برای فهم این روابط به استدلال زیر توجه می کنیم. یک میکروحالت مشخص را در نظر بگیرید. اسپین های مثبت را در این میکروحالت، حول هر اسپین مثبت z تا اتصال وجود دارد. بنابراین تعداد اتصالات حول همه اسپین های مثبت برابر

^۷Bragg-Williams

است با zN_+ . از این تعداد اتصال تعداد N_{++} تای آنها در حالت $++$ هستند و بقیه در حالت N_{+-} . البته وقتی این کار را برای همه اسپین های مثبت انجام دهیم متوجه می شویم که اتصالات $++$ دو بار شمرده می شوند. بنابراین داریم:

$$zN_+ = 2N_{++} + N_{+-} \quad (۲۹)$$

همین کار را می توانیم برای اسپین های منفی انجام دهیم و بدست آوریم:

$$zN_- = 2N_{--} + N_{+-}. \quad (۳۰)$$

بنابراین بین پنج متغیری که داشتیم سه رابطه بدست آوردیم که نشان می دهد تعداد متغیرهای مستقل دو تا بیشتر نیست. می توانیم هر دو متغیری را که می خواهیم به عنوان متغیرهای مستقل انتخاب کنیم. به عنوان مثال متغیرهای N_+ و N_{++} را انتخاب می کنیم. در این صورت خواهیم داشت:

$$N_- = N - N_+, \quad N_{+-} = zN_+ - 2N_{++}, \quad (۳۱)$$

و

$$N_{--} = \frac{1}{2}(z(N - N_+) - (zN_+ - 2N_{++})) = \frac{1}{2}(zN - 2zN_+ + 2N_{++}) \quad (۳۲)$$

در نتیجه انرژی هر میکروحالت به شکل زیر نوشته خواهد شد:

$$E(N_+, N_{++}) = -\frac{J}{2}zN - J(4N_{++} - 2zN_+) - B(2N_+ - N) \quad (۳۳)$$

و تابع پارش نیز به صورت زیر نوشته می شود:

$$Z = e^{\frac{\beta J z N}{2}} \sum_{microstates} e^{\beta J(4N_{++} + 2zN_+) + \beta B(2N_+ - N)}. \quad (۳۴)$$

در این تابع پارش می بایست روی تمام میکروحالت ها جمع بزنیم. اگر انرژی را توانسته بودیم تنها به N_+ ربط دهیم، این تابع پارش به راحتی و بدون هیچ تقریبی حساب می شد. در واقع می نوشتیم:

$$Z = \sum_{N_+=0}^N \binom{N}{N_+} e^{-\beta E(N_+)}. \quad (۳۵)$$

ولی انرژی تابع N_{++} هم هست. بنابراین می بایست در یک تقریب N_{++} را به N_+ مرتبط کنیم. ابتکار براگ و ویلیامز در همین نکته است. برای فهم آن دقت می کنیم که در این سیستم اسپینی می توان یک نوع نظم بلند برد را تعریف کرد که در واقع چیزی نیست جز همان مغناطش ایجاد شده که به صورت زیر تعریف می شود:

$$m := \frac{N_+ - N_-}{N} = \frac{2N_+ - N}{N}, \quad (۳۶)$$

یا

$$N_+ = N \frac{1+m}{2}. \quad (۳۷)$$

احتمال این که یک اسپین در حالت مثبت باشد برابر است با:

$$P(+) = \frac{N_+}{N} = \frac{1+m}{2}. \quad (۳۸)$$

علاوه بر این یک نوع نظم کوتاه برد هم در این سیستم اسپینی قابل تشخیص است. این نظم کوتاه برد را به این صورت تعریف می کنیم. از خود می پرسیم که یک اسپین مثبت چه درصدی از اسپین های همسایه اش را با خود همراستا می کند. هر چه که این درصد بالاتر باشد نظم کوتاه برد بیشتر است. در واقع احتمال این که دو اسپین همسایه در حالت ++ باشند را با $P(++)$ نشان می دهیم. این احتمال برابر است با نسبت تعداد اسپین های مثبت - مثبت به کل اتصالات، یعنی:

$$P(++) = \frac{N_{++}}{\frac{1}{2}zN}. \quad (۳۹)$$

تقریب براگ - ویلیامز، مبتنی بر این فرض است که آن نظم بلند برد و این نظم کوتاه برد به روش ساده ای به هم مربوط اند، یعنی احتمال حضور اسپین های مثبت در کنار هم ناشی از حضور تصادفی آنها در کنار یکدیگر است یا

$$P(++) = P(+)P(+), \quad (۴۰)$$

که به این معناست که

$$\frac{N_{++}}{\frac{1}{2}zN} = \left(\frac{N_+}{N}\right)^2. \quad (۴۱)$$

از این رابطه نتیجه می گیریم:

$$N_{++} = \frac{1}{2}zN \left(\frac{N_+}{N}\right)^2 = \frac{1}{2}zN \left(\frac{1+m}{2}\right)^2. \quad (۴۲)$$

با جایگذاری این مقادیر در عبارت (۳۳) انرژی را بر حسب متغیر m بدست می آوریم. پس از ساده کردن این عبارت خواهیم داشت:

$$E = -N \left[Jz \frac{m^2}{2} + Bm \right]. \quad (۴۳)$$

هم چنین می توانیم از تقریب استرلینگ استفاده کنیم و بنویسیم:

$$\begin{aligned} \binom{\ln(N)}{N_+} &= \ln N! - \ln N_+! - \ln(N - N_+)! = N \ln N - N_+ \ln N_+ - (N - N_+) \ln(N - N_+) \\ &- N \left[\left(\frac{1+m}{2} \right) \ln \left(\frac{1+m}{2} \right) + \left(\frac{1-m}{2} \right) \ln \left(\frac{1-m}{2} \right) \right] =: NH(m). \end{aligned} \quad (۴۴)$$

از آنجا که N_+ هر مقداری را از صفر تا N اختیار می کند، m هر مقدار پیوسته ای را بین -1 و 1 اختیار می کند. بنابراین تابع پارش به صورت زیر نوشته خواهد شد:

$$Z = \int dm e^{\beta N \left[H(m) + Jz \frac{m^2}{2} + Bm \right]} = \int dm e^{\beta F(m)}. \quad (۴۵)$$

از آنجا که N خیلی بزرگ است، این انتگرال را می توان با استفاده از تقریب نقطه زینی حل کرد. پاسخ اش برابر است با:

$$Z \approx e^{F(m_0)} \sqrt{2\pi |F''(m_0)|} \quad (۴۶)$$

که در آن m_0 نقطه ای است که در آن تابع $F(m)$ ماکزیمم است. این نقطه ماکزیمم با حل معادل زیر بدست می آید:

$$F'(m) \big|_{m=m_0} = 0 \quad (۴۷)$$

و یا

$$-\frac{1}{2} \ln \left(\frac{1+m_0}{2} \right) + \frac{1}{2} \ln \left(\frac{1-m_0}{2} \right) + \beta Jz m_0 + B = 0. \quad (۴۸)$$

■ **تمرین:** نشان دهید که این معادله را می توان به شکل زیر نوشت:

$$m_0 = \tanh(\beta(Jz m_0 + B)). \quad (۴۹)$$

این رابطه در واقع معادله حالت این سیستم مغناطیسی را نشان می دهد و در غیاب میدان مغناطیسی به رابطه آشنای $m_0 = \tanh \beta Jz m_0$ تبدیل می شود که در درس های گذشته با آن آشنا شده ایم و نشان می دهد که در دمای $T < T_0 := \frac{Jz}{k}$ این سیستم دارای مغناطش خود بخود است.

۴ اصل آنتروپی بیشینه و تقریب میدان متوسط

می دانیم اصل آنتروپی 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 آنتروپی در آن به بیشترین مقدار خود رسیده باشد. یک بیان دیگر از این قضیه این است که در یک سیستم که در دمای معین قرار گرفته است هر فرآیندی 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 $P(C)$ نشان دهیم آنتروپی سیستم با تابع زیر نشان داده می شود:

$$S = -k \sum_C P(C) \ln P(C). \quad (50)$$

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

$$F = E - TS = \sum_C E(C)P(C) + kT \sum_C P(C) \ln P(C). \quad (51)$$

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

$$P(C) = \frac{1}{Z} e^{-\beta E(C)}, \quad (52)$$

که همان تابع احتمال بولتزمن است. به این ترتیب از اصل آنتروپی 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 (51) را فقط در بین توابع احتمالی وردش می گیریم که از نوع ضربی باشند یعنی توابعی از جنس زیر:

$$P(S_1, S_2, \dots, S_N) = P(S_1)P(S_2) \dots P(S_N). \quad (53)$$

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:

$$P(1) - P(-1) = m, \quad P(1) + P(-1) = 1 \quad (54)$$

و در نتیجه

$$P(1) = \frac{1+m}{2}, \quad P(-1) = \frac{1-m}{2} \quad (55)$$

و یا

$$P(S) = \frac{1+mS}{2}. \quad (۵۶)$$

دراین صورت خواهیم داشت

$$E = \langle H \rangle = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \langle S_i S_j \rangle - \sum_i B \langle S_i \rangle = -\frac{1}{2} J N z m^2 - N B m \quad (۵۷)$$

و

$$S = -Nk \left(\frac{1+m}{2} \ln \frac{1+m}{2} + \frac{1-m}{2} \ln \frac{1-m}{2} \right). \quad (۵۸)$$

و در نتیجه

$$F = -\frac{1}{2} J N z m^2 - N B m + N k T \left(\frac{1+m}{2} \ln \frac{1+m}{2} + \frac{1-m}{2} \ln \frac{1-m}{2} \right). \quad (۵۹)$$

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 آوریم:

$$J z m + B = \frac{1}{2} k T \ln \frac{1+m}{1-m} \quad (۶۰)$$

و یا با بازنویسی طرف راست

$$m = \tanh \beta (J z m + B) \quad (۶۱)$$

که همان رابطه ای است که قبلا بدست آورده بودیم.

۵ 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^۸ است. می خواهیم از بین تمام توابع احتمالی که با قید های خارجی یک دستگاه سازگارند، آن تابع احتمالی را پیدا کنیم که تابع انرژی آزاد را می نیم می کند. چرا که می دانیم در دمای ثابت حالت تعادل، همان حالتی است که انرژی آزاد را کمینه می کند. اگر برای یافتن این حالت بین همه توابع احتمال جستجو کنیم، حتما حالت واقعی تعادل را پیدا می کنیم اما این کار نیازمند جستجو در یک فضای بی اندازه بزرگ است. اما با استفاده از یک اصل وردشی می توانیم تا حد امکان تابع انرژی آزاد را کمینه کنیم، اگرچه به مقدار کمینه واقعی آن نخواهیم رسید. فرض کنید که هامیلتونی یک سیستم به صورت زیر باشد:

$$H = H_0 + H_1, \quad (۶۲)$$

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:

$$Z = \sum_C e^{-\beta H_0 - \beta H_1} = Z_0 \frac{\sum_C e^{-\beta H_0 - \beta H_1}}{Z_0}, \quad (۶۳)$$

که در آن

$$Z_0 := \sum_C e^{-\beta H_0} \quad (۶۴)$$

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

$$Z = Z_0 \langle e^{-\beta H_1} \rangle_0, \quad (۶۵)$$

که در آن $\langle \cdot \rangle_0$ 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 مقعر است.

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

$$p_1 e^{x_1} + p_2 e^{x_2} \geq e^{p_1 x_1 + p_2 x_2}. \quad (۶۶)$$

Variational Principle^۸

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

$$\sum_i p_i e^{x_i} \geq e^{\sum_i p_i x_i}. \quad (67)$$

رابطه اخیر را می توان به صورت زیر نوشت :

$$\langle e^x \rangle \geq e^{\langle x \rangle}. \quad (68)$$

این رابطه، رابطه مهمی است که کاربردهای زیادی دارد. از جمله ترکیب آن با رابطه (۶۵) منجر به رابطه زیر می شود:

$$Z \geq Z_0 e^{-\beta \langle H_1 \rangle_0}, \quad (69)$$

و یا پس از محاسبه لگاریتم طرفین

$$F \leq F_0 + \langle H_1 \rangle_0. \quad (70)$$

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. هر چقدر که تعداد این پارامترها بیشتر باشد، و هر چقدر که انتخاب آنها هوشمندانه تر باشد، انتظار داریم که حد بالایی که برای انرژی آزاد بدست می آوریم، به 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. باز هم مدل آیزینگ را در نظر می گیریم و قرار می دهیم:

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j - B \sum_i S_i = -(B + \lambda) \sum_i S_i - J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j + \lambda \sum_i S_i = H_0 + H_1, \quad (71)$$

که در آن که در آن λ یک پارامتر دلخواهی است و هیچ معنای خاصی ندارد. به این ترتیب هامیلتونی را به صورت مجموع دو هامیلتونی نوشته ایم که تابع پارش مربوط به یکی از آنها را براحتی می توانیم حساب کنیم:

$$H_0 = -(B + \lambda) \sum_i S_i, \quad H_1 = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j + \lambda \sum_i S_i. \quad (72)$$

قبلا دیده ایم که

$$Z_0 = (2 \cosh \beta(B + \lambda))^N \quad (73)$$

و در نتیجه.

$$F_0 = -NkT \ln (2 \cosh \beta(B + \lambda)) \quad (74)$$

با استفاده از تابع پارش Z_0 که مربوط به اسپین های بدون برهم کنش است، بدست می آوریم

$$m \equiv \langle S_i \rangle_0 = \tanh \beta(B + \lambda). \quad (75)$$

با در دست داشتن این متوسط و با در نظر گرفتن این که H_0 یک هامیلتونی بدون برهم کنش است، معلوم می شود که

$$\langle H_1 \rangle_0 = -\frac{1}{2}NJzm^2 + N\lambda m \quad (76)$$

حال اصل وردشی بیان می کند که نامساوی زیر برای همه مقادیر λ برقرار است.

$$F \leq -NkT \ln (2 \cosh \beta(B + \lambda)) - \frac{1}{2}NJzm^2 + N\lambda m =: N\mathcal{F} \quad (77)$$

می توانیم طرف راست را برای مقداری از λ که آن را می نیمم می کند بدست آوریم و بازهم نامساوی برقرار باقی خواهد ماند. به همین دلیل باید مشتق طرف راست را نسبت به λ حساب کنیم. اما از رابطه (75) می دانیم که این مشتق گیری را می توانیم با مشتق گیری نسبت به m جایگزین کنیم. بنابراین می نویسیم:

$$\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial m} = -kT \tanh \beta(B + \lambda) \left(\beta \frac{\partial \lambda}{\partial m} \right) - Jzm + \lambda m \frac{\partial \lambda}{\partial m} \quad (78)$$

این رابطه ساده می شود و خواهیم داشت:

$$\lambda = Jzm \quad (79)$$

با جایگذاری λ از این رابطه در (75) به رابطه نهایی یا همان معادله حالت میدان متوسط می رسمیم که مغناطش، دما و میدان مغناطیسی را به هم مرتبط می کند.

$$m = \tanh \beta(B + Jzm). \quad (80)$$

ای همان معادله ای است که از راه های دیگر هم بدست آورده ایم.

۶ مقایسه دمای گذار از روش میدان متوسط و روش پایرلز

در استدلال هایی که تا به حال بر اساس نظریه میدان متوسط انجام دادیم مقدار دمای بحرانی را به صورت

$$T_c(\text{MeanField}) = \frac{Jz}{k}$$

بدست آوردیم و حال آنکه دمای بحرانی از استدلال پایرلز به صورت

$$T_c(\text{Peierls}) = \frac{J}{k \ln(z-1)}$$

بدست می آید. اگر چه هر دو عبارتی که برای دمای بحرانی بدست می آوریم از استدلالهای کیفی پدید آمده اند، اما به نظر می رسد که نقش تعداد همسایه ها یعنی z در این دو استدلال کاملاً وارون یکدیگر است، زیرا در اولی تعداد همسایه ها یعنی z در صورت و در دومی در مخرج است. علی القاعده وارونی تعداد همسایه ها که عددی از مرتبه یک است، در این دو رابطه نباید زیاد موجب نگرانی باشد، چون هر دو مقدار دمای بحرانی را بر اساس استدلال کیفی بدست آورده ایم و ضرایب عددی از مرتبه یک را نباید چندان جدی گرفت. اما باز هم جالب خواهد بود اگر استدلالی برای این وارونی نقش پیدا کنیم. می توان به شکل زیر استدلال کرد. در تقریب میدان متوسط، تاکید ما بر وضعیت یک اسپین در محاصره اسپین های همسایه اش است. می خواهیم ببینیم وضعیت این اسپین در صورت پیدایش نظم خود به خود تا چه حد پایدار است. برای این کار اثر همسایه ها به صورت خطی و در قالب یک میدان متوسط

$$B_{eff} \sim zm$$

ظاهر می شود. در نتیجه انرژی یک اسپین m در این میدان به صورت Jzm^2 خواهد بود. تفاوت انرژی یک اسپین وقتی که مقدار آن صفر است از وقتی که جهت آن بالا یا پایین است از مرتبه Jz است. حال سوال این است که آیا افت و خیزهای گرمایی که با kT سنجیده می شوند قادر هستند که نظم مغناطیسی را از بین ببرند یا نه؟ پاسخ این است که اگر $kT > Jz$ باشد این نظم از بین می رود و از همین جا دمای گذار فاز به صورت تقریبی $T_c = \frac{Jz}{k}$ پدیدار می شود.

از طرف دیگر در استدلال پایرلز، تاکید ما بر محاسبه آنتروپی و اثرات تجمعی جزیره ها یا قطره هایی از اسپین های برگشته است. می خواهیم بدانیم چه موقع آنتروپی ایجاد شده توسط این قطرات به آن اندازه خواهد بود که بر انرژی غلبه کنند. به همین دلیل است که افزایش آنتروپی را حساب می کنیم که برابر است با

$$\Delta S \sim \ln\left(\frac{N(z-1)^L}{L}\right) \sim L \ln(z-1) \quad (81)$$

که منجر به رابطه

$$\Delta F \sim 2JL - kTL \ln(z-1) \quad (۸۲)$$

و دمای بحرانی $T_c = \frac{2J}{\ln(z-1)}$ می شود.

۷ 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:

$$\langle S_i S_j \rangle. \quad (۸۳)$$

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 مثلاً S_i مقدار 1 را اختیار کرده است اسپین دوم یعنی S_j همانقدر 1 است که -1 است و در نتیجه این مقدار متوسط برابر با صفر می شود. تابع همبستگی متصل^۹ به صورت زیر تعریف می شود:

$$\langle S_i S_j \rangle_c := \langle S_i S_j \rangle - \langle S_i \rangle \langle S_j \rangle. \quad (۸۴)$$

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 خیزهای اسپین را حول مقدار متوسط شان در دو نقطه i و j نشان می دهد. در واقع یک محاسبه ساده نشان می دهد که:

$$G(i, j) = \langle \delta S_i \delta S_j \rangle, \quad (۸۵)$$

^۹Connected Correlation Function

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:

$$H = \tilde{H}(S) - \sum_{i=1} B_i S_i \quad (۸۶)$$

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:

$$Z = \sum_{\{S\}} e^{-\beta \tilde{H}(S) + \beta \sum_i B_i S_i}. \quad (۸۷)$$

از این تابع پارش بدست می آوریم:

$$\langle S_i \rangle = \frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \beta B_i}, \quad (۸۸)$$

و

$$\langle S_i S_j \rangle = \frac{1}{Z} \frac{\partial^2 Z}{\partial \beta B_i \partial \beta B_j}, \quad (۸۹)$$

تابع همبستگی متصل برابر است با:

$$\langle S_i S_j \rangle - \langle S_i \rangle \langle S_j \rangle = \frac{1}{Z} \frac{\partial^2 Z}{\partial \beta B_i \partial \beta B_j} - \frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \beta B_i} \frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \beta B_j}, \quad (۹۰)$$

با کمی محاسبه بدست می آوریم

$$\langle S_i S_j \rangle - \langle S_i \rangle \langle S_j \rangle = \frac{\partial}{\partial \beta B_j} \left(\frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \beta B_i} \right), \quad (۹۱)$$

و یا

$$G(i, j) = kT \frac{\partial m_i}{\partial B_j} \quad (۹۲)$$

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 (۸۶) توجه می کنیم با این تفاوت که میدان مغناطیسی را یکنواخت می گیریم. داریم:

$$\frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \beta B} = \langle \sum_i S_i \rangle, \quad (93)$$

و

$$\frac{1}{Z} \frac{\partial^2 Z}{\partial (\beta B)^2} = \langle \sum_{i,j} S_i S_j \rangle, \quad (94)$$

بنابراین با کمی محاسبه خواهیم داشت:

$$\frac{1}{Z} \frac{\partial^2 Z}{\partial (\beta B)^2} - \frac{1}{Z^2} \left(\frac{\partial Z}{\partial \beta B} \right)^2 = \sum_{i,j} \langle S_i S_j \rangle - \langle S_i \rangle \langle S_j \rangle = \sum_{i,j} G(i,j), \quad (95)$$

اما طرف چپ برابر است با

$$\frac{\partial M}{\partial \beta B} = NkT \frac{\partial m}{\partial B} = NkT\chi \quad (96)$$

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

$$\sum_{i,j} G(i,j) = NkT\chi. \quad (97)$$

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

$$\sum_r G(r) = NkT\chi. \quad (98)$$

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.

۸ 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 $\langle S_i S_j \rangle - \langle S_i \rangle \langle S_j \rangle = 0$. با این وجود می توان در همین تقریب و با استفاده از رابطه $G(i, j) = kT \frac{\partial m_i}{\partial B_j}$ 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 x و y و نظایر آن نشان می دهیم. در این صورت رابطه بالا به صورت زیر نوشته می شود:

$$G(x, y) = kT \frac{\partial m_x}{\partial B_y}. \quad (99)$$

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 (۱۰) به صورت زیر در می آید:

$$m_x = \tanh \left[\beta \left(J \sum_{z \in N_x} m_z + B_x \right) \right]. \quad (100)$$

از طرفین این رابطه نسبت به βB_y مشتق می گیریم و در نتیجه با استفاده از رابطه (۹۹) خواهیم داشت:

$$G(x, y) = \cosh^{-2} \left[\beta \left(J \sum_{z \in N_x} m_z + B_x \right) \right] \times \left[J \beta \sum_{z \in N_x} G(z, y) + \delta_{x,y} \right] \quad (101)$$

حال تابع همبستگی را برای سیستمی محاسبه می کنیم که همگن است و در میدان مغناطیسی $B = 0$ قرار دارد. برای چنین سیستمی m_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:

$$G(x - y) = \cosh^{-2}(\beta J z m) \left[J \beta \sum_{z \in N_x} G(z - y) + \delta_{x,y} \right] \quad (102)$$

ضمنا توجه می کنیم که با استفاده از رابطه (۱۰۰) می توان نوشت

$$\cosh^{-2}(\beta J z m) = (1 - m^2) \quad (103)$$

و در نتیجه

$$G(\mathbf{x} - \mathbf{y}) = (1 - m^2) \left[J\beta \sum_{\mathbf{z} \in N_{\mathbf{x}}} G(\mathbf{z} - \mathbf{y}) + \delta_{\mathbf{x}, \mathbf{y}} \right] \quad (104)$$

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 $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_d)$ نوشته می شود. بردارهای یک شبکه به صورت زیر نوشته می شوند:

$$\mathbf{e}_1 = (1, 0, 0, \dots, 0), \quad \dots, \mathbf{e}_d = (0, 0, \dots, 1). \quad (105)$$

از درس ریاضی فیزیک و تبدیلات فوریه می دانیم که

$$G(\mathbf{x} - \mathbf{y}) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^d}} \int e^{-i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{y})} \tilde{G}(\mathbf{q}) d^d \mathbf{q}. \quad (106)$$

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

$$\tilde{G}(\mathbf{q}) = (1 - m^2) \left[J\beta \tilde{G}(q) (2 \cos q_1 + 2 \cos q_2 + \dots + 2 \cos q_d) + 1 \right] \quad (107)$$

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

$$\tilde{G}(\mathbf{q}) = \frac{1 - m^2}{1 - (1 - m^2) J\beta \sum_{i=1}^d \cos q_i}. \quad (108)$$

بنابراین با استفاده از این رابطه و رابطه (106) 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 (106) به ما می گوید که تنها $|\mathbf{q}|$ های کوچک اهمیت دارند و بنابراین کافی است که به رفتار تابع $\tilde{G}(\mathbf{q})$ در $|\mathbf{q}|$ های کوچک یعنی نکانه های کوچک نگاه کنیم. در این حد می توانیم بنویسیم:

$$\tilde{G}(\mathbf{q}) \approx \frac{1 - m^2}{1 - (1 - m^2) J\beta (2d - |\mathbf{q}|^2)}. \quad (109)$$

از این رابطه بدست می آوریم

$$\tilde{G}(0) \approx \frac{1 - m^2}{1 - (1 - m^2) J\beta 2d}. \quad (110)$$

و در نتیجه با تقسیم این دو رابطه بر هم

$$\tilde{G}(\mathbf{q}) = \frac{G(\mathbf{0})}{1 + \xi^2 |\mathbf{q}|^2}, \quad (111)$$

که در آن

$$\xi^2 := \frac{J(1 - m^2)}{kT - 2dJ(1 - m^2)}. \quad (112)$$

ξ کمیتی است که دارای بعد طول است.

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

$$G(|\mathbf{x} - \mathbf{y}|) = f\left(\frac{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|}{\xi}\right) \quad (113)$$

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

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

$$\xi = \frac{A_+}{T - T_c} \quad (114)$$

و در پایین نقطه بحرانی نیز می توان نوشت:

$$\xi = \frac{A_-}{T_c - T}. \quad (115)$$

مقادیر A_+ و A_- را بدست آورید.

بنا براین در تقریب میدان متوسط نمای ν برابر است با یک.

■ **تمرین:** با استفاده از رابطه (111) نشان دهید که در تقریب میدان میانگین نمای η برابر با یک است.

۹ مدل آیزینگ با برهم کنش های دوربرد

مطالعه مدل آیزینگ با برهم کنش های دور برد 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 زیر است:

$$H = -\frac{J}{N} \sum_{i,j} S_i S_j - B \sum_i S_i, \quad (116)$$

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 چند بعدی است. ولی اصطلاحاً 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 نباید از آن 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 برابر است با:

$$Z = \sum_{\{S_i\}} e^{\beta J \sum_{i,j} S_i S_j + \beta B \sum_i S_i} \quad (117)$$

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

$$m := \frac{1}{N} \sum_i S_i \quad (118)$$

می توانیم بنویسیم

$$Z \approx \sum_{\{S_i\}} e^{\sum_{i=1}^N (Jm+B)S_i} = (2 \cosh(\beta(Jm+B)))^N, \quad (119)$$

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

$$\langle S_i \rangle = m. \quad (120)$$

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:

$$Z = \sum_{\{S_i\}} e^{\beta \frac{J}{N} (\sum_{i=1}^N S_i)^2 + \beta B \sum_{i=1}^N S_i} \quad (121)$$

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 گاوسی استفاده می کنیم:

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{1}{2}ax^2+bx} = \sqrt{\frac{2\pi}{a}} e^{\frac{b^2}{2a}} \quad (122)$$

و با استفاده از آن می نویسیم:

$$e^{\beta \frac{J}{N} (\sum_{i=1}^N S_i)^2} = \sqrt{\frac{N}{4\pi\beta J}} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\frac{1}{2} \frac{N}{2\beta J} x^2 + x \sum_{i=1}^N S_i}. \quad (123)$$

در نتیجه تابع پارش به صورت زیر در می آید:

$$Z = \sqrt{\frac{N}{4\pi\beta J}} \sum_{\{S_i\}} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\frac{1}{2} \frac{N}{2\beta J} x^2 + (x+\beta B) \sum_{i=1}^N S_i}. \quad (124)$$

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

$$Z = \sqrt{\frac{N}{4\pi\beta J}} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\frac{1}{2} \frac{N}{2\beta J} x^2} (2 \cosh(x + \beta B))^N. \quad (125)$$

و یا

$$Z = \sqrt{\frac{N}{4\pi\beta J}} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\frac{1}{2} \frac{N}{2\beta J} x^2 + N \ln(2 \cosh(x + \beta B))} = \sqrt{\frac{N}{4\pi\beta J}} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-Nf(x)} \quad (126)$$

که در آن

$$f(x) = \frac{1}{2\beta J} x^2 - \ln(2 \cosh(x + \beta B)). \quad (127)$$

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

(۱۲۸)

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-Nf(x)} = \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-Nf(x_0) - \frac{N}{2} f''(x_0)(x-x_0)^2 + \dots} = e^{-Nf(x_0)} \int_{y=-\infty}^{y=\infty} dy e^{\frac{-N}{2} f''(x_0) y^2} = \sqrt{\frac{2\pi}{Nf''(x_0)}} e^{-Nf(x_0)},$$

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

$$Z = \sqrt{\frac{1}{2\beta J f''(x_0)}} e^{-Nf(x_0)} \quad (۱۲۹)$$

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

$$\frac{x_0}{\beta J} = \tanh(x_0 + \beta B). \quad (۱۳۰)$$

بنابراین می توان با حل این معادله نخست مقدار x_0 را بدست آورد و سپس با قرار دادن آن در رابطه (۱۲۸) تابع پارش را حساب کرد. اما نشان خواهیم داد که نیازی به این کار نیست. نخست می بایست معنای فیزیکی پارامتر x را روشن کنیم. برای این کار دقت می کنیم که با توجه به تعریف اولیه تابع پارش مغناطش متوسط برابر است با:

$$m := \frac{1}{N} \langle \sum_i S_i \rangle = \frac{1}{N} \frac{\partial}{\partial \beta B} \ln Z, \quad (۱۳۱)$$

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 $m := \frac{1}{N} \langle \sum_i S_i \rangle = \frac{1}{N\beta} \frac{\partial}{\partial B} \ln Z$ بدست می آوریم:

$$m = \frac{\partial}{\partial \beta B} (-f(x_0)). \quad (۱۳۲)$$

در نوشتن این رابطه دقت کرده ایم که در حد $N \rightarrow \infty$ 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:

$$m = \frac{\partial}{\partial \beta B} \left[\frac{-1}{2\beta J} x_0^2 + \ln(2 \cosh(x_0 + \beta B)) \right]$$

$$= \frac{-1}{\beta J} x_0 \frac{\partial x_0}{\partial \beta B} + \tanh(x_0 + \beta B) \left[\frac{\partial x_0}{\partial \beta B} + 1 \right]. \quad (133)$$

حال اگر بجای $\tanh(x_0 + \beta B)$ از رابطه (۱۳۰) مقدار $\frac{x_0}{\beta J}$ را قرار دهیم به رابطه ساده زیر می‌رسیم:

$$m = \frac{x_0}{\beta J}. \quad (134)$$

در نتیجه معادله (۱۳۰) به صورت زیر در می‌آید:

$$m = \tanh(\beta(Jm + B)). \quad (135)$$

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 $N \rightarrow \infty$ تقریب میدان میانگین همان نتیجه ای را بدست می‌دهد 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.

۱۰ 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 می‌پردازیم که پیدایش مغناطش خود بخودی در یک هامیلتونی همسانگرد را نشان می‌دهد 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 می‌کنیم: 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 باز هم برای سادگی اسپین می نامیم با هامیلتونی زیر با هم برهم کنش می کنند:

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j - \mathbf{B} \cdot \sum_i \mathbf{S}_i. \quad (136)$$

در تقریب میدان متوسط، تابع پارش برابر است با:

$$Z = \int d\mathbf{S}_1 \cdots d\mathbf{S}_N e^{-\beta H} \approx Z = \int d\mathbf{S}_1 \cdots d\mathbf{S}_N e^{\beta \mathbf{S}_i \cdot (Jz\mathbf{m} + \mathbf{B})} = Z_1^N \quad (137)$$

که در آن

$$Z_1 = \int d\mathbf{S} e^{\beta \mathbf{S}_i \cdot (Jz\mathbf{m} + \mathbf{B})} \quad (138)$$

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

$$Z_1 = \int d\phi d\cos\theta e^{|\mathbf{n}| \cos\theta} = 4\pi \frac{\sinh|n|}{|n|} \quad (139)$$

در نتیجه بدست می آوریم:

$$Z_1 = 4\pi \frac{\sinh|\beta(Jz\mathbf{m} + \mathbf{B})|}{|\beta(Jz\mathbf{m} + \mathbf{B})|} \quad (140)$$

و با توجه به رابطه (137)

$$F = -NkT [\ln 4\pi + \ln(\sinh|\beta(Jz\mathbf{m} + \mathbf{B})|) - \ln|\beta(Jz\mathbf{m} + \mathbf{B})|]. \quad (141)$$

■ تمرین: از تابع پارش (140) یا تابع انرژی آزاد (141) 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 بخودی 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:

$$m = \coth\beta(Jzm + B) - \frac{1}{\beta(Jzm + B)} \quad (142)$$

۱.۱۰ 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. البته در این جا و بسیاری از جاهای دیگر که با پدیده گذار فاز سروکار داریم، محاسبه تابع پارش یا انرژی آزاد را مرحله به مرحله انجام نمی دهیم. بلکه با توجه به خصوصیات کلی پارامتر نظم (در اینجا همان مغناطش متوسط که یک بردار است) و تقارن های آن، عبارتی برای تابع انرژی آزاد می نویسیم که معقول و منطقی به نظر می رسد. این روش را نخستین بار دو فیزیکدان اتحاد جماهیر شوروی به نام های لاندائو و گینزبورگ^{۱۰} ابداع کردند، به همین جهت کار آنها سرآغاز نظریه لاندائو-گینزبورگ برای مطالعه گذار فاز در بسیاری از پدیده هاست. برای کاربرد این روش در مطالعه فرومغناطیس همسانگرد، نخست توجه می کنیم که در غیاب میدان مغناطیسی می توانیم بنویسیم:

$$F = E - TS = -NJ_2 \tilde{\mathbf{m}} \cdot \tilde{\mathbf{m}} - T N s(\tilde{\mathbf{m}}, T) \quad (۱۴۳)$$

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. باز هم 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. بر خلاف حالت گسسته محاسبه این عبارت انتروپی در اینجا کار ساده ای نیست. در واقع بجای معادله های (۱۵، ۱۶) معادله های زیر را داریم:

$$\int dS P(S) = 1, \quad \int dS P(S) S = \tilde{\mathbf{m}} \quad (۱۴۴)$$

و مسلم است که از این دو رابطه نمی توان تابع $P(S)$ 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:

$$s(\tilde{\mathbf{m}}, T) = a - \frac{b}{2} \tilde{\mathbf{m}} \cdot \tilde{\mathbf{m}} + c(\tilde{\mathbf{m}} \cdot \tilde{\mathbf{m}})^2 + \dots \quad (۱۴۵)$$

ضریب جمله مربعی می بایست حتما منفی باشند. دلیل اش این است که وقتی اسپین ها در بی نظمی کامل به سر می برند، یعنی وقتی که $\tilde{\mathbf{m}} \cdot \tilde{\mathbf{m}}$ برابر با صفر است، انتروپی برابر است با a . حال اگر اسپین ها کمی منظم شوند و $\tilde{\mathbf{m}} \cdot \tilde{\mathbf{m}} \ll 1$ مقدار کوچکی اختیار کند، که در این صورت می توانیم از مرتبه های بالاتر صرف نظر کنیم، آنگاه آنتروپی، تقریباً برابر است با $a - b\tilde{\mathbf{m}} \cdot \tilde{\mathbf{m}}$ که کمتر از انتروپی حالت کاملاً بی نظم است. در نتیجه تابع انرژی آزاد برابر خواهد شد با:

$$F = -NTa - NJ_2 \tilde{\mathbf{m}} \cdot \tilde{\mathbf{m}} + NT \frac{b}{2} \tilde{\mathbf{m}} \cdot \tilde{\mathbf{m}} - NTc(\tilde{\mathbf{m}} \cdot \tilde{\mathbf{m}})^2 + \dots$$

^{۱۰} Landau and Ginzburg

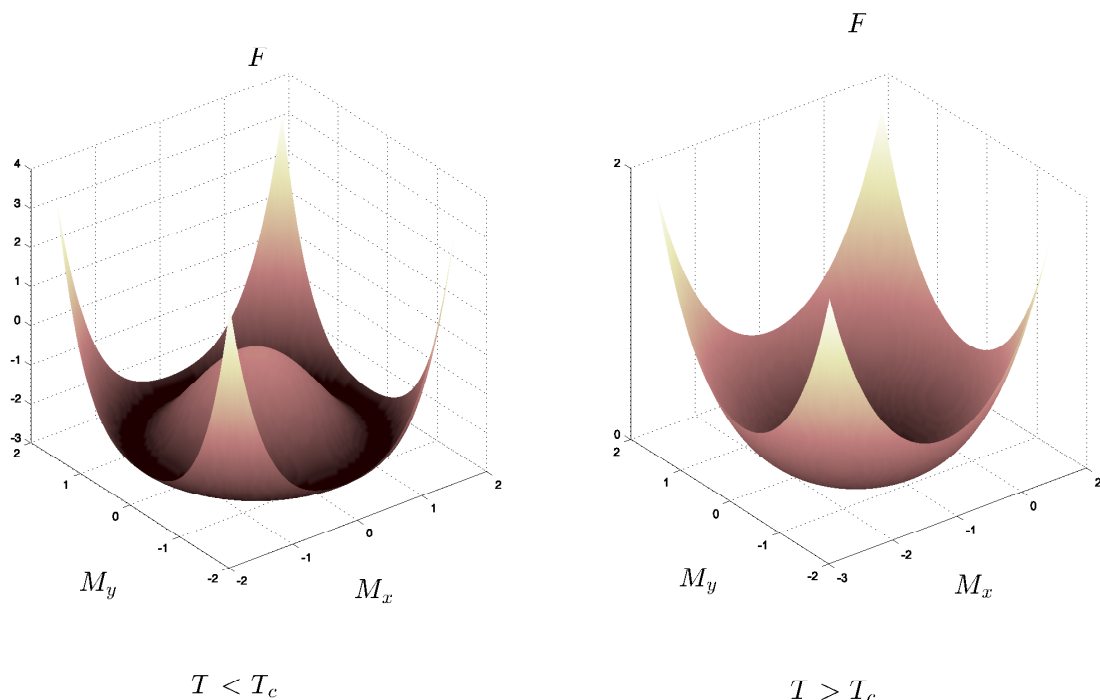
$$= -NTa + \frac{N}{2}(bT - Jz)\tilde{\mathbf{m}} \cdot \tilde{\mathbf{m}} + NTc(\tilde{\mathbf{m}} \cdot \tilde{\mathbf{m}})^2 + \dots \quad (۱۴۶)$$

باز هم از این عبارت می توانیم بفهمیم که یک دمای بحرانی داریم که با $T_c = \frac{Jz}{b}$ مشخص می شود و بسته به این که دما بیشتر یا کمتر از آن باشد، تابع انرژی آزاد به صورت نشان داده شده در شکل های (۵) 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 نقاط کمینه هر کدام به تنهایی پایدار هستند یا نه بستگی به بعد فضای سیستم دارد. در بعد ۲ قضیه ای به نام قضیه مرمین-وگنر^{۱۱} نشان می دهد که این نقاط می نیمم پایدار نیستند. در واقع قضیه مرمین-وگنر خیلی کلی است و نشان می دهد که در بعد 2 فازهایی که در اثر شکست تقارن پیوسته بوجود می آیند پایدار نیستند و در اثر افت و خیزهای گرمایی بلندبر (موسوم به مودهای گولدستون^{۱۲}) نظم بلند برد آنها به هم می خورد.

Mermin-Wagner^{۱۱}

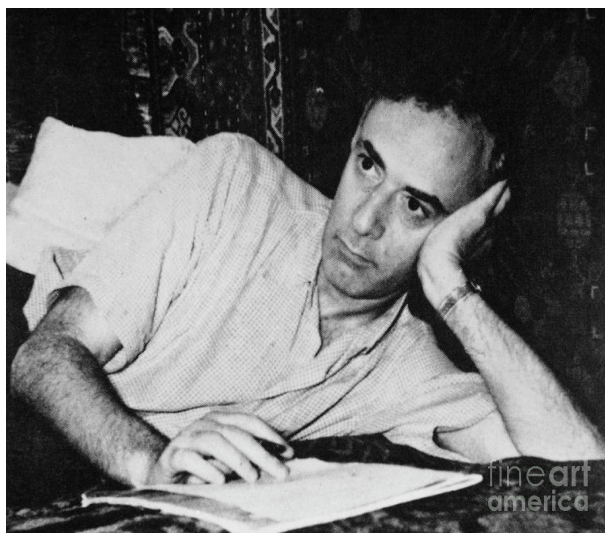
Goldstone Modes^{۱۲}



شکل ۵: شکل سمت راست، تابع انرژی آزاد است وقتی که $T > T_c$ است. در این دماها انرژی آزاد فقط یک نقطه کمینه دارد که در صفر قرار دارد. شکل سمت چپ، تابع انرژی آزاد است وقتی که دما زیر دمای بحرانی است. در این دماها نقطه $m = 0$ دیگر یک نقطه ی کمینه نیست. بلکه یک پیوستاری از نقاط کمینه وجود دارد که همه با هم یکسان هستند.

به این ترتیب نظریه لاندائو-گینزبورگ، به سادگی و با استفاده هوشمندانه از تقارن های یک پدیده و البته بدون محاسبات خیلی مفصل، مشخص می کند که آیا گذار فاز رخ می دهد یا نه و اگر پاسخ مثبت است، گذار در چه دمایی رخ می دهد. البته این نظریه ویژگی های متعدد دیگری را هم از گذار فاز تعیین می کند که موضوع درس کنونی نیست و می توان در درسهای اختصاصی تر آنها را مطالعه کرد.

لاندائو فیزیکدان متولد آذربایجان در روسیه، یکی از آخرین فیزیکدانان یونیورسال در قرن بیستم است، یعنی فیزیکدانانی که در همه عرصه های فیزیک کارهای بزرگ و درخشان انجام داده اند. وی مستقل از جان فون نویمان، صورت بندی ماتریس چگالی در مکانیک کوانتومی را کشف کرد. ابداع نظریه کوانتومی دیامغناطیس، نظریه ابرشارگی، نظریه گذار فازهای مرتبه دو، نظریه لاندائو-گینزبورگ، مایعات فرمی و توصیف میرایی لاندائو^۲ در فیزیک پلازما، قطب های لاندائو^۳ در الکترودینامیک کوانتومی، نظریه دو مولفه ای نوترینوها در ذرات بنیادی،

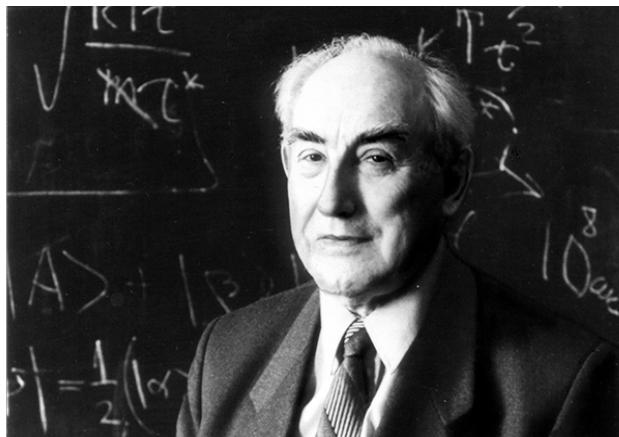


شکل ۶: لو داودیوچ لاندائو (۱۹۰۸-۱۹۶۸) (Lev Davidovich Landau)

و بالاخره معادله لاندائو برای ماتریس پراکندگی، بخشی از کارهای پیشتازانه او هستند. لاندائو به خاطر کار مهم اش در توصیف ابرشارگی به سال ۱۹۶۲، جایزه نوبل در فیزیک را دریافت کرد، اگرچه به خاطر جراحات متعددی که از تصادف اتومبیل در همان سال داشت، نتوانست شخصا برای دریافت جایزه حاضر شود. او شش سال بعد در اثر همان جراحات در گذشت.

علاوه بر پژوهش های بزرگ، لاندائو هم چنین به عنوان یک معلم بزرگ فیزیک در روسیه و تمام دنیا شناخته می شود. او به همراه یوگنی لیفشیتز ۷ کتابی ده جلدی به نام دوره فیزیک نظری ۸ را نوشت که دوره ای پیشرفته و شامل همه فیزیک نظری کلاسیک و مدرن است. علاوه بر این او آزمونی از یک دوره کامل فیزیک نظری طراحی به نام «می نیمم تئوریک» ۹ طراحی کرد که در فاصله سی و هفته ساله ۱۹۳۴ تا ۱۹۶۱، تنها ۴۳ نفر از آن فارغ التحصیل شدند، اما همه آنهايي که این آزمون را گذراندند، بعدها از فیزیکدانان بزرگ جهان شدند. لاندائو خود همواره از نیلز بوهر به عنوان معلم اش یاد می کرد اگرچه تنها دوره کوتاهی را در موسسه بوهر در دانمارک سپری کرده بود.

Landau Damping^۱
 Landau Poles^۲
 Yevgeny Lifshitz^۳
 Course of Theoretical Physics^۴
 Theoretical Minimum^۵



شکل ۷: ویتالی لازارویچ گینزبورگ

ویتالی لازارویچ گینزبورگ^۷ یکی از غول‌های فیزیک نظری قرن بیستم و یکی از چهره‌های چندوجهی و جذاب علم است که زندگی پرفرازونشیبی داشت. او در ۴ اکتبر ۱۹۱۶ در مسکو به دنیا آمد و در ۸ نوامبر ۲۰۰۹ در همان شهر درگذشت. برخلاف بسیاری از هم‌تایان غربی خود، زندگی و کار گینزبورگ به‌طور جدایی‌ناپذیری با تاریخ سیاسی شوروی گره خورده است. او در سال ۲۰۰۳ به خاطر پژوهش‌های اولیه‌اش در باره ابررسانی دمای بالا و ابرشارگی جایزه نوبل فیزیک را دریافت کرد. او مطابق با فرهنگ علمی رایج در آن زمان شوروی، یک فیزیکدان جامع بود که در زمینه‌های کاملاً متفاوتی کارهای بزرگ انجام داد. از یک سو، کارهایش بر روی پلازما و فرآیند همجوشی هسته‌ای کنترل‌شده تأثیرگذار بود و به توسعه برنامه انرژی همجوشی شوروی کمک کرد و از سوی دیگر در اختر فیزیک مکانیسم تابش ذرات نسبیتی در میدان‌های مغناطیسی کهکشان‌ها را توضیح داد. این تابش امروزه یک ابزار اصلی برای رصد کیهان است. هم‌چنین تئوری گینزبورگ در مورد اثر چرنکوف (تابش آبی رنگ در راکتورهای هسته‌ای) نیز مشهور است. او به‌خصوص به خاطر شجاعت فکری و اخلاقی‌اش تحسین شده، چرا که پس از فروپاشی شوروی، او به یک منتقد صریح ضد استالینیسم و مدافع سرسخت علم‌گرایی تبدیل شد. علیه نفوذ کلیسای ارتدکس در سیستم آموزشی روسیه و علیه شبه‌علم می‌نوشت و سخنرانی می‌کرد.

Vitaly Lazarevich Ginzburg^۷

۱۱ مسئله ها و تمرین ها:

■ مسئله یک: 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 ^{۱۳} 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 دو: یک گاز شامل N اتم را که با هامیلتونی زیر توصیف می شود در محیطی به حجم کل V قرار دارد:

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} + \sum_{i,j} V(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|). \quad (147)$$

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

$$V(r) = \infty \quad \text{if } r < a, \quad V(r) = 0 \quad \text{if } r \geq a. \quad (148)$$

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

$$F = E - TS = E_0 \quad (149)$$

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

$$\langle E \rangle = \langle \psi_0 | \hat{H} | \psi_0 \rangle, \quad (150)$$

^{۱۳}Cluster Mean Field

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 بولترمن است یعنی

$$\rho = \frac{1}{Z} e^{-\beta \hat{H}} \quad (151)$$

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

$$\begin{aligned} E &= \text{tr}(\rho \hat{H}) = \frac{1}{Z} \text{tr}(e^{-\beta \hat{H}} \hat{H}) \\ &= \frac{1}{Z} \sum_i \langle \psi_i | e^{-\beta \hat{H}} \hat{H} | \psi_i \rangle = \frac{1}{Z} \sum E_i e^{-\beta E_i} \end{aligned} \quad (152)$$

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:

$$\hat{H} = -J \sum_{i,j=1}^N \sigma_{z,i} \sigma_{z,j} - B \sum_{i=1}^N \sigma_{x,i}. \quad (153)$$

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

$$|\psi_0\rangle = |\psi_0(J, B)\rangle. \quad (154)$$

گذار فاز کوانتومی یک گذار فاز برحسب دما نیست بلکه برحسب یکی از پارامتر های 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:

$$m := \langle \psi_0 | \sigma_z | \psi_0 \rangle. \quad (155)$$

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

$$|\Phi\rangle := |\phi\rangle \otimes |\phi\rangle \otimes |\phi\rangle \cdots |\phi\rangle \quad (156)$$

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

$$\langle \Phi | \hat{H} | \Phi \rangle. \quad (157)$$

الف: در تقریب میدان میانگین حالت پایه هامیلتونی (۱۵۳) را پیدا کنید.

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

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

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

$$G_{xx}(i, j) \equiv \langle \sigma_{x,i} \sigma_{x,j} \rangle, \quad G_{zz}(i, j) \equiv \langle \sigma_{z,i} \sigma_{z,j} \rangle. \quad (158)$$

■ **قدردانی:** از بهروز بنیادی دانشجوی این درس در سال ۱۴۰۳ که اشکالاتی از متن اولیه این درسنامه را به من یادآوری کردند تشکر می کنم. نسخه اولیه این درسنامه شامل ده ها اشتباه ویرایشی و هم چنین چندین اشتباه مهم در بعضی از ضرایب و روابط ریاضی بود. آرمین یداللهی دانشجوی این درس در سال ۱۴۰۳، با شکیبایی فراوان تمامی این اشکالات را به من یادآوری کردند. نسخه نهایی این درسنامه که امیدوارم کم اشتباه باشد، مرهون این کمک و لطف بی سابقه اوست.