۱۰. مدل آیزینگ[۳۷]

یکی از مدلهای بسیار پر کاربرد و مهم در مکانیک آماری مدل آیزینگ است. این مدل که اولین بار برای مدل سازی سیستم ها مغناطیسی پیشنهاد شد برای بسیاری از مسایل دیگر نیز کاربر یافته است. نکته ی مهم این است که این مدل به خوبی میتواند رفتار بحرانی و تغییر فاز پیوسته را نشان دهد. در این مدل فرض میشود که بروی رئوس یک شبکه دو قطبی های مغناطیسی نشسته اند. این دو قطبی ها هم با میدان خارجی و هم دو قطبی های دیگر برهمکنش دارند. فرض میشود که برهمکنش با دیگر دوقطبی ها کوتاه برد است و در ساده ترین تقریب فرض میشود که هر دو قطبی فقط با همسایه ها اولش برهمکنش دارد. این مدل از این هم ساده تراست و فرض میکند که هر دو قطبی فقط میتواند دو مقدار 1+ و 1- را داشته باشد. برای همین معمولا این دوقطبی ها را اسپین مینامند. در نتیجه یک نمونه از این سیستم آرایشی از این اسپین ها با مقادیر 1+ و 1- است.

+	-	-	+	+	-	+	+	+	-
+	+	-	-	-	+	+	-	+	-
-	-	+	+	-	+	-	+	+	+
-	+	-	+	-	-	-	+	-	+
-	-	-	+	+	-	+	+	-	+
+	+	-	+	-	-	-	-	+	+
-	+	-	-	-	+	+	-	+	-
+	+	-	+	-	+	+	+	-	+

شکل ۱۸ نمایی شماتیک از یک مدل دوبعدی آیزینگ با آرایشی از اسپین ها. هر اسپین فقط با همسایگان نزدیکش بر همکنش دارد.

در نتیجه اگر سیستم ما N اسپین داشته باشد، فضای فاز ما یک فضای گسسته ی N بعدی است که هر نقطه ی آن با یک بردار N مولفه ای، $\vec{s} = \{s_1,\ s_2, \dots, s_i, \dots, s_N\}$، داده میشود که مولفه های آن فقط میتواند مقادیر 1+ یا 1- را بگیرد. اگر این بردار را با یک بردار ۳ بعدی مقایسه کنیم، میتوانیم بگوییم که هر نقطه ی این فضا در یکی از رئوس یک مکعب N بعدی نشسته اند. در نتیجه ما با مسئله ای مواجه هستیم که فضای فاز آن گسسته است.

[37] Ising model

انرژی (یا هامیلتونی) این سیستم به شکل

$$E(\vec{s}) = -J \sum_{<ij>} s_i\, s_j - h \sum_i s_i$$

داده میشود. در این رابطه J مقیاس انرژی برهمکنش و مقداری مثبت است و $< ij >$ به معنی جمع بر روی تمام همسایه های اول است. عبارت دوم برهمکنش میان دوقطبی ها با میدان خارجی h را نشان میدهد. در ادامه این بحث بدون آنکه از کلیت بحث کاسته شود فرض میکنیم که $h = 0$، و فقط عبارت اول را در نظر میگیریم.

۱٫۱۰. شکست تقارن در مدل آیزینگ

در ابتدا قبل از شروع بحث شبیه سازی این مدل، اجازه بدهید کمی بیشتر با این مدل آشنا شویم. ضریب منفی پشت جمع درعبارت انرژی نشان میدهد که اسپین های هم جوار ترجیح میدهند که در حالت های هم سان باشند. به این معنی که هر دو مثبت یا منفی باشند. در نتیجه به راحتی میتوان حدس زد که آرایش کمینه ی انرژی برای این سیستم، آرایشی است که تمام اسپین ها مثبت یا منفی باشد. زیرا هر اختلاف علامتی در همسایه ها باعث افزایش انرژی سیستم میشود. ولی با وجود این که این آرایش کمینه ی انرژی است ولی کمینه ی انرژی آزاد[۳۸] (F) سیستم نیست. برای روشن شدن این نکته آرایشی را در نظر بگیرید که همه ی اسپین ها به غیر یکی مثبت هستند. هر چند این ساختار به اندازه $2J$ انرژی بیشتری نسبت به آرایش کمینه انرژی دارد، ولی به دلیل اینکه این تک اسپین مخالف میتواند هر کدام از N اسپین موجود در سیستم باشد، آنتروپی[۳۹] (S) این سیستم بیشتر است.

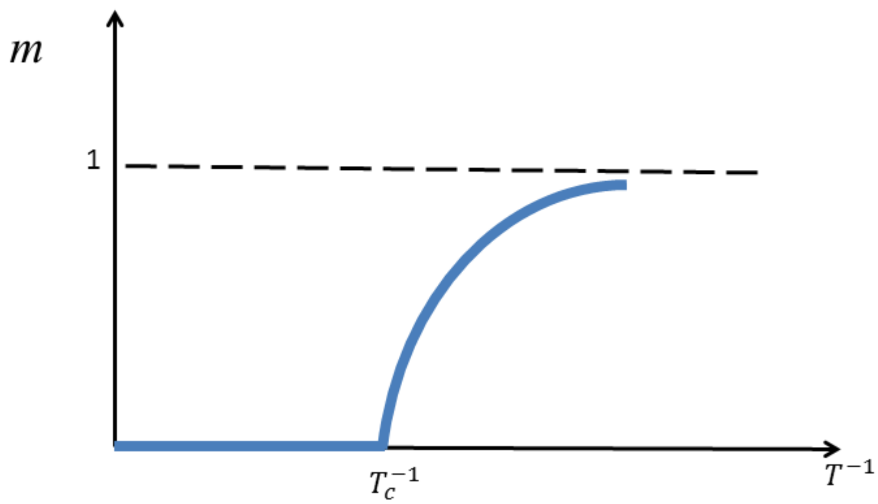
اگر مثال بالا را ادامه دهیم میتوان نشان داد که بیشترین انتروپی برای حالتی است که نیمی از اسپین ها مثبت و نیمی منفی است. به این شکل میتوان حدس زد که در دماهای بالا به دلیل اهمیت دما (T) در انرژی آزاد

$$F = E - TS$$

کمینه انرژی آزاد برای آرایش ها با آنتروپی بالا اتفاق میفتد و در نتیجه جمع مغناطش سیستم صفر میشود. به این ترتیب این سیستم در دماهای بالا فاقد مغناطش ذاتی است. اما با کاهش دما سهم عبارت دوم در انرژی آزاد کم میشود و کمینه ی انرژی آزاد و انرژی یکی میشوند و سیستم ترجیح میدهد در آرایشی قرار گیرد که اسپین ها هم جهت باشند و در نتیجه سیستم دارای مغناطش غیر صفر

[38] Free energy
[39] Entropy

است. نکته ی جالب این مدل این است که به خوبی رفتاری مشابه تغییر فاز سیستم های مغناطیسی از فاز پار مغناطیس به فاز فرومغناطیس نشان میدهد.



شکل ۱۹ تغییرات مغناطش بر حسب دما در مدل آیزینگ تغییر فازی از پارامغناطیس (مغناطش ذاتی صفر) به فرو مغناطیس نشان میدهد

کمیت مغناطش را که در این سیستم میتواند میعاری از نظم سیستم باشد به کمیت نظم[40] معروف است. تغییر فاز در کمیت نظم از مقدار غیر صفر به صفر در دمایی اتفاق می افتد که آنرا دمای بحرانی سیستم، T_c، مینامیم. برای دماهای بالاتر از این مقدار بحرانی تقارن مثبت – منفی بر سیستم حاکم است ولی در دماهای پایین سیستم باید یکی از دو حالت ممکن همه مثبت یا همه منفی را انتخاب کند. برای همین این مدل به خوبی یکی از مهم ترین پدیده های فیزیک آماری (و ماده ی چگال) یعنی شکست خود به خود تقارن[41] را از خود نشان میدهد و از این نظر شبیه سازی آن نه تنها برای ما از نظر محاسباتی ارزش آموزشی دارد، برای درک بهتر فرایند شکست خود به خود تقارن نیز بسیار مفید است.

یکی از خواص مهم سیستم هایی که رفتار بحرانی نشان میدهند این است که نه تنها کمیت نظم در نقطه ی بحرانی تغییراتی غیر عادی نشان میدهد، بلکه در رفتار دیگر مشاهده پذیر های ترمودینامیک و یا مشتقات آنها نیز میتوان ناپیوستگی یا تکینگی را مشاهده کرد. در مورد مدل آیزینگ نیز به این گونه است و در نقطه بحرانی دو کمیت ظرفیت گرمایی ویژه، C_v، و پذیرفتاری مغناطیسی، χ، سیستم در دمای بحرانی دارای تکنیگی هستند.

[40] Order parameter
[41] Spontaneous symmetry breaking

از مکانیک آماری میدانیم که دلیل اصلی این تکینگی ها به بینهایت شدن طول همبستگی، ξ، در این سیستم ها در نقطه بحرانی است. این خاصیت را در مورد مدل تراوش در بخش های قبلی مشاهد کردیم. طول همبستگی در مدل آیزینگ را کمی جلوتر به شکل ریاض تعریف خواهیم کرد. در اینجا همان بس که بدانیم این طول میعاری از همبستگی مکانی اسپین ها را میدهد. به دلیل نا محدود شدن طول همبستگی در دمای بحرانی سیستم بدون مقیاس میشود و تمام کمیت های فیزیک در این نقطه باید رفتاری آزاد-مقیاس[۴۲] یا توانی داشته باشند. به این ترتیب برای رفتار سیستم در نزدیکی نقطه ی بحرانی، توان های بحرانی زیرمعرفی میشوند.

$$m \sim (T_c - T)^{\beta}$$

$$\chi \sim |T_c - T|^{-\gamma}$$

$$C_v \sim |T_c - T|^{-\alpha}$$

$$\xi \sim |T_c - T|^{-\nu}$$

مدل آیزینگ در بُعد یک و دو دارای حل دقیق است. این مدل در یک بُعد رفتار بحرانی در دمای محدود نشان نمیدهد. ولی در بُعد ۲ به خوبی تغییر فاز را نشان میدهد. در بُعد ۳ حل دقیق ندارد و تمام اطلاعات ما از این مدل در این بعد از شبیه سازی های کامپیوتری بدست می آید و یا روشهای تقریبی که کیفیت تقریب نیز از مقایسه با نتایج شبیه سازی ها می آید. حل یک بعدی بسیار ساده و بدیهی است، حل دو بعدی بسیار تکنیکی و پیچیده ولی ممکن است، و حل سع بعدی وجود ندارد. اگر به این نکته توجه کنیم که در سوی دیگر شبیه سازی این مدل در ابعاد متفاوت خیلی شبیه به هم است و تنها زمان شبیه سازی برای بدست آورد پاسخی دقیق با بعد رشد میکند، به اهمیت شبیه سازی پی میبریم.

۱۰.۲. شبیه سازی مدل آیزینگ با استفاده از آلگوریتم متروپولیس

در اینجا میخواهیم الگوریتم متروپولیس را که در فصل قبل معرفی کردیم، برای مدل گسسته ی آیزینگ بکار ببریم. همانطور که قبلا اشاره شد هر آرایش سیستم در فضای فاز با برداری N بعدی که مولفه های آن میتوانند 1+ یا 1- باشند.

---

[42] Scale freeس

۱۰,۲,۱. شرایط اولیه

بهتر است که برای شروع کار با یک آرایشی شروع کنیم که خیلی خاص نباشد. برای همین پیشنهاد میکنیم که برای شروع شبیه سازی بعد از مشخص کردن اندازه های شبکه یک آرایش کاملا تصادفی برای شروع کار در نظر بگیریم. در یک شبیه سازی دو بُعدی کافی است آرایه ای دو بعدی متناظر با اندازه های شبکه در نظر بگیریم که با مقادیر کاتوره ای 1+ و 1- مقدار دهی اولیه میشوند.

نکته ۱:
بهتر است که برای ساختار دادن به کُد خود برنامه را به شکل بسته ای بنویسیم. برای این کار بهتر است که تابعی با نام ()init معرفی کنید و تمام امور مربوط به شرایط اولیه را در آن قرار دهیم. در آینده در صورت نیاز به کمیتی که باید در ابتدا معرفی شود یا مقدار اولیه داشته باشد، آن را در داخل این تابع قرار میدهیم. در حال حاضر کمیت هایی که باید معرفی شوند اضافه بر اندازه های شبکه، L، و مقادیر اولیه اسپین ها، دما و ضریب انرژی J است.

۱۰,۲,۲. قدم مونت کارلو برای مدل آیزینگ

برای ادامه کار باید قسمت اصلی شبیه سازی که حلقه ی مرکزی متروپولیس است را ایجاد کنیم. این حلقه با انتخاب یک آرایش در همسایگی نقطه ی فعلی برای تلاش درجابجایی در فضای فاز شروع میشود. در اینجا به دلیل گسسته بودن فضای فاز دست ما برای انتخاب طول قدم برای جابجایی باز نیست. بهتر است که کوتاه ترین قدم را در نظر بگیریم. کوتاه ترین قدم معادل است با تغییر یکی از اسپین ها. یعنی کافی است که یکی از اسپین ها به طور کتره ای انتخاب شود و در یک منفی ضرب شود. البته این کار نباید تا امتحان شرط متروپولیس و قبول تلاش نهایی شود.

۱۰,۲,۳. محاسبه ی انرژی

برای انجام شبیه سازی متروپولیس محاسبه ی انرژی یکی از کارهایی که حتما باید انجام داد. برای همین توصیه میشود که این محاسبه نیز در تابعی به نام ()energy انجام گیرد. برای تحقیق شرط متروپولیس در هر تلاش باید انرژی حالت فعلی با انرژی

حالت مورد بررسی مقایسه شود. همانطور که در قبل اشاره شد به دلیل محدود بودن قدمهای تلاش، محاسبه ی تغییر در انرژی به ازای قدمی که قرار است برداشته شود هزینه ی کمتری دارد. در مورد مدل آیزینگ محاسبه ی انرژی نیاز به $2N$ محاسبه، به ازای تمام رابط های بین اسپینی، دارد. در صورتی که تغییر در علامت یک اسپین فقط در چها رجمله از این $2N$ جمله تاثیر میگذارد. از آنجا که حلقه ی متروپولیس قلب اصلی این شبیه سازی است، کاهش مرتبه ی محاسبه در اینجا بسیار اهمیت دارد. برای همین به غیر از تابعی که انرژی را محاسبه میکند به تابعی احتیاج داریم که تغییر در انرژی را به ازای جهش علامت یکی از اسپین ها گزارش کند.

از آنجا که برای محاسبه احتمال قبول قدم نیاز به محاسبه عامل بولتزمن $e^{-\beta\Delta E}$ است، در تمام محاسبات ضریت $\beta J = J/k_B T$ با هم ظاهر میشود. برای کاهش تعداد عملیات ضرب و تقسیم میتوان به جای استفاده از واحد های فیزیکی از واحدی استفاده کنیم که در آن این عامل به یک پارامتر کاهش یابد. به طور مثال اگر واحد انرژی را $k_B T$ بگیریم، J تنها پارامتر موثر مسئله خواهد بود (البته در این واحد). امکان دیگر تثبیت J/k_B به عنوان واحد انرژی و ورود دما به مسئله در این واحد است. این گونه واحد های انتخابی که در شبیه سازی به به منظور کاهش عملیات ریاضی انتخاب میشوند را واحد های کاهیده[٤٣] مینامیم.

نکته ۲:
در مورد مسئله آیزینگ میتوان محاسبه ی عامل احتمال متروپولیس را به شکل بسیار بهینه ای نوشت. فرض کنید که در قدمی از شبیه سازی، تلاش برای تغییر علامت s_{ij} مورد بررسی باشد. در این حالت تغییر در انرژی به شکل $\Delta E = -2\, s_{ij}\,(s_{i+1j} + s_{i-1j} + s_{ij+1} + s_{ij-1})$ داده میشود. عبارت داخل پرانتز عددی مضرب دو خواهد بود. پس $\Delta E \in \{-8, -4, 0, 4, 8\}$ است. به دلیل محدودیت در مقادیر ممکن ΔE میتوان ضریت بولتزمن را برای این پنج مقدار در یک آرایه ی پنج عضوی ذخیره کرد و بر حسب مورد صدا زد. این کار به مراتب از محاسبه ی تابع نمایی کم هزینه تراست.

۱۰٫۲٫٤. شرایط مرزی دوره ای

در تمام مسایلی که برهمکنش های چند ذره ای (تقریبا تمام مسایل فیزیک) در هامیلتونی سیستم وجود دارد، سوال مهمی مطرح است و آن اینکه با ذراتی که بر روی مرزی سیستم مینشینند چه کنیم. توجه کنید که در سیستم های ترمودینامیک تعداد این ذرات در مقایسه با ذراتی که در حجم قرار دارند انقدر کوچک است که از اثر آنها میتوان چشم پوشی کرد و هر گونه که بر همکنش

[43] Reduced units

آنها را فرض کنیم تاثیری بر فیزیک نخواهد داشت. ولی در مسایلی که ما شبیه سازی میکنیم، به دلیل محدودیت های محاسباتی اندازه های سیستم بسیار کوچک است و این ذرات نقش موثر و قابل مشاهده ای را خواهند داشت. پس نتایج شبیه سازی به نحوه برخورد با آنها وابسته است.

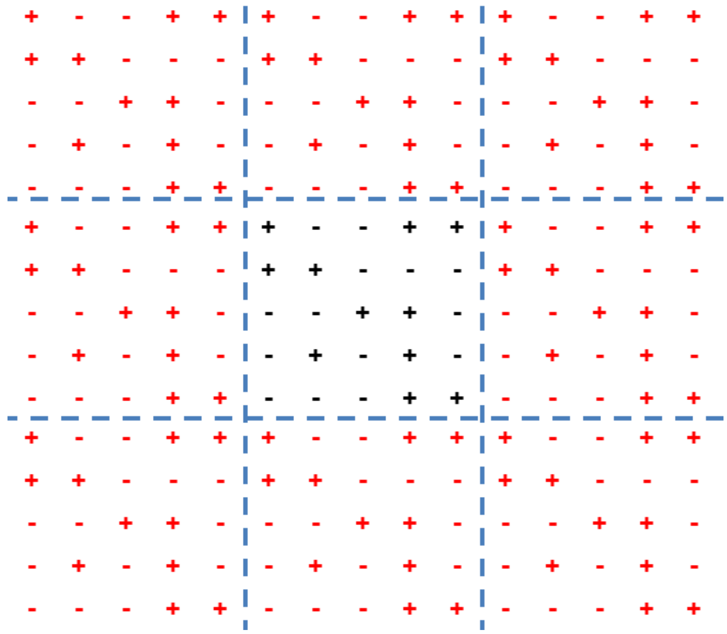
روشهای متفاوتی برای در نظر گرفتن ذرات سطحی وجود دارد، ولی یکی از پر کاربرد ترین آنها که قصد دارد اثر سطح را تا حد امکان کاهش دهد استفاده از شرایط مرزی دوره ای است. مثال زیر میتواند برای درک این شرایط مرزی کمک کند.

فرض کنید که سیستم محدودی با اندازه ای 5×5 داریم؛

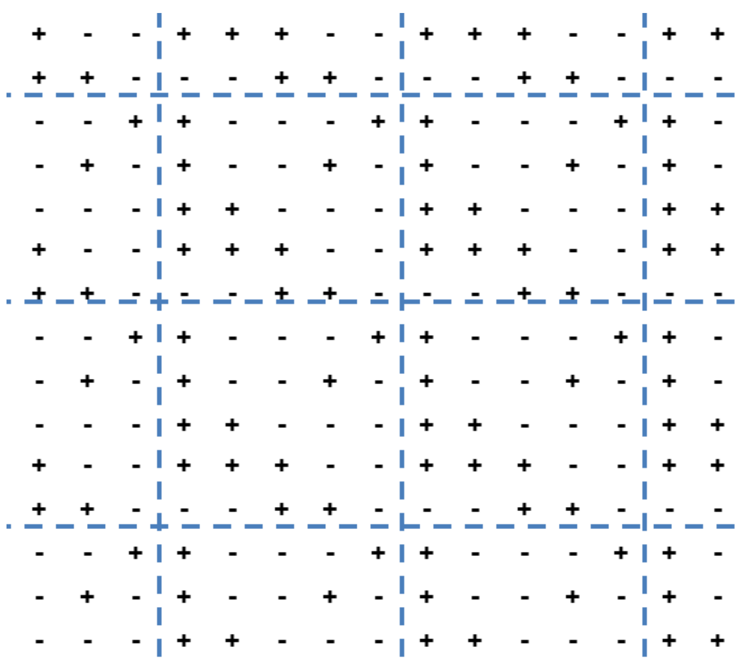
+	-	-	+	+
+	+	-	-	-
-	-	+	+	-
-	+	-	+	-
-	-	-	+	+

همانطور که در این تصویر میبیند ۱۶ عدد از ۲۵ اسپین این مدل، یعنی بیش از نیمی از آنها، بر روی مرز نشسته اند. در این ارایش عناصر مرزی کمتر از ۴ همسایه دارند و در صورت عدم تمهیدی برای از بین بردن اثرات مرزی این اسپین ها بر فیزیک مسئله تاثیر قابل توجی میگذارند.

در واقع در این تصویر ۱۶ اسپین از ۹ اسپین دیگر متمایز هستند. برای از بین بردن این تمایز میتوان این آرایش را در فضا تکرار کرد. یعنی تصاویر این سیستم را از راست وچپ، بالا و پایین در فضا تکثیر کرد به گونه ای که بنظر برسد که سیستم ما تا بینهایت از هر سو ادامه دارد. البته به خوبی میدانیم که این تصویر نا متناهی از تناوب سیستم محدود ما تولید شده است.

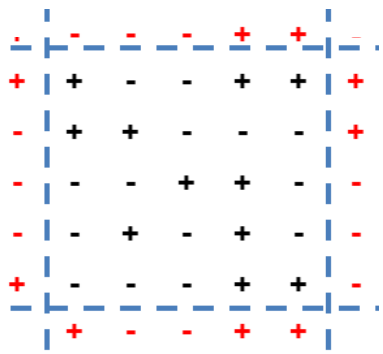


در اینجا برای تمایز سیستم اولیه از تصاوی هم از رنگ استفاده شده است و هم مرزها با خطوط خط چین نمایش داده شده است. ولی اگر این علایم نا پدید بشود (با توجه به نا محدود بودن این مجموعه) کسی نمیتواند محل مرز اولیه و سیستمی که تکثیر شده است را تشخیص دهد. تنها چیزی که قابل مشاهده است وجود دوره تناوب است. ولی سیستم اصلی میتواند هر مربع 5×5 دلخواهی باشد.



به این ترتیب هیچ تمایزی بین نقاط این شبکه تناوبی نیست و میتوان برای انرژی این آرایش، برهمکنش هر ذره با همسیگانش را در نظر گرفت. به این ترتیب اثر مرز حذف شده است، هر چند به دلیل تناوب مسئله اثر طول محدود همچنان پا برجاست و نباید فراموش کنیم که در هر صورت ما در حال شبیه سازی سیستمی به طول ۵ هستیم و ما باید انرژی در واحد سیستم محدود را محاسبه کنیم. یعنی فقط برای ۲۵ ذره ای که در سیستم وجود دارند.

بدلیل کوتاه برد بودن برهمکنش در مدل آیزینگ نیازی به نگه داشتن تمام تصاویر نداریم. چون هر ذره فقط با همسایه اول خود برهمکنش دارد. در نتیجه سیستم محدود زیر که در آن فقط یک ردیف از مجموعه تصاویر در دو سوی سیستم اصلی نگه داشته شده است معادل سیستم بینهایت گسترده و تناوبی ماست.



۱۰,۳. تصحیح اندازه ی محدود

باید اضافه شود.

۹,۱.	
تمرین	۱. کدی برای شبیه سازی مدل آیزینگ دو بعدی با روش متروپولیس آماده کنید. ۲. رفتار کمیتهای $\lvert\langle m\rangle\rvert,\ \chi,\ C_v$ و ξ را برحسب دما (بخصوص در اطراف دمای بحرانی) بررسی کنید. ۳. با فرض اینکه رفتار بحرانی برای ظرفیت گرمایی، تکینگی لگاریتمی دارد، $c_v = c_0 \ln(\lvert T - T_c\rvert)$ با اجرای برنامه برای سیستم هایی با اندازه های متفاوت نماهای بحرانی $\beta,\ \gamma, \nu$ و ضریب c_0 را برای آیزینگ دو بعدی بدست آورید.

بیشتر بدانیم