مدل آیزینگ: تقریب میدان متوسط

مجموعه N اسپین برهمکنش دار در حضور میدان خارجی H، انرژی زیر مشخص می‌گردد:

$$E_\nu = -\frac{1}{2}\sum_{ij} J_{ij} s_i s_j - \mu H \sum s_i$$

که در آن J_{ij} فقط وقتی غیرصفر است که i و j همسایه نزدیک باشند و برای آنها J ثابت داریم.

← هدف این است که نشان دهیم یک دمای بحرانی T_c وجود دارد که برای $T>T_c$، مغناطش متوسط این سیستم یعنی $\bar{M} = \mu\sum_{i=1}^{N} \bar{s}_i$ صفر و برای $T<T_c$ و در غیاب میدان خارجی، مغناطش غیرصفر است. $(\bar{M} = N\mu\bar{s})$

← روش میدان متوسط ساده‌ترین روشی است که وجود گذار فاز در $T=T_c$ و رفتار بحرانی این سامانه را تا حدود خوبی توصیف می‌کند. ایده اصلی تقریب میدان متوسط این است که فرض کنیم هر اسپین به جای برهمکنش با همسایه‌های خودش با متوسط اسپین همسایه‌ها برهمکنش می‌کند. اگر متوسط s_i را با $\bar{s}$ نشان دهیم، چون تقارن انتقالی داریم، چه در فاز منظم چه فاز غیرمنظم، مقادیر $\bar{s}$ برای تمام اسپین‌ها باید یک مقدار داشته باشد. پس جمله برهمکنش بصورت زیر جایگزین می‌گردد:

$$s_i s_j \to s_i \bar{s}_j + \bar{s}_i s_j = \bar{s}(s_i+s_j)$$

$$\frac{1}{2}\sum_{ij} J_{ij} s_i s_j \to \frac{1}{2}\sum_{ij} J\bar{s}(s_i+s_j) = \gamma J\bar{s}\sum_i s_i$$

که در آن γ تعداد همسایه‌های نزدیک است.

پس
$$\boxed{E_\nu \simeq -(\gamma J\bar{s}+\mu H)\sum_{i=1}^{N} s_i}$$

اکنون مسئله به شکلی درآمده که مجموعه‌ای از N اسپین غیر برهمکنشی داریم، پس:

$$Q(T,N,H) = [Q(T,1,H)]^N$$

$$Q(T,1,H) = \sum_{s_1=\pm1} e^{(\beta\gamma J\bar{s}+\beta\mu H)s_1} = 2\cosh[\beta(\gamma J\bar{s}+\mu H)]$$

$$\bar{s} = \langle s_1\rangle = \sum s_1 e^{-\beta E}\Big/\sum e^{-\beta E} = \tanh[\beta(\gamma J\bar{s}+\mu H)] \quad (1)$$

$$\bar{M} = \mu\sum_{i=1}^{N}\bar{s}_i = N\mu\bar{s} = ?$$

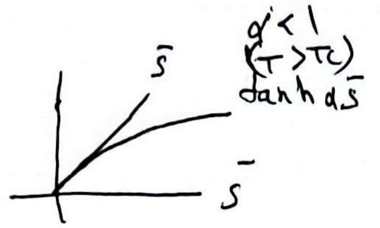
برای محاسبه‌ی مغناطش سیستم در دماهای مختلف ما عمدتاً معادله‌ی (1) باید برای $\bar{s}$ حل شود:
اجازه دهید در $H=0$ بررسی را ادامه دهیم:

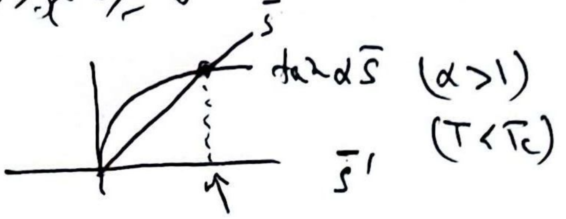
$$\bar{s} = \tanh(\beta\gamma J\bar{s})$$

یک جواب بدیهی $\bar{s}=0$ است ولی آیا جواب دیگری هم داریم. بسط تابع $\tanh\alpha\bar{s}$ را در نزدیکی $\bar{s}=0$ نگاه کنید:

$$\tanh(\beta\gamma J\bar{s}) \simeq \beta\gamma J\bar{s} + O(\bar{s})^2$$

اگر دو تابع $\bar{s}$ و $\tanh\alpha\bar{s}$ را کنار هم رسم کنیم واضح است که برای $\alpha<1$ این دو تابع تنها در $\bar{s}=0$ تلاقی دارند ولی برای $\alpha>1$ تلاقی دیگری هم پیدا می‌شود.





$\alpha=1$ دمای بحرانی را تعریف می‌کند.

$$T_c = \frac{\gamma J}{k_B} \Leftarrow \alpha = \frac{\gamma J}{kT_c} = 1$$

برای $\begin{bmatrix}\alpha<1\\ T>T_c\end{bmatrix}$ فقط یک جواب داریم $\bar{s}=0$

برای $\begin{bmatrix}T<T_c\\ \alpha>1\end{bmatrix}$ یک جواب غیر صفر هم برای $\bar{s}$ داریم. چگونه این جواب را بصورت تقریبی بیابیم:

$$\bar{s} = \tanh\overbrace{\beta\gamma J}^{\alpha}\bar{s} = \alpha\bar{s} - \frac{1}{3}\alpha^3\bar{s}^3 + \cdots \rightarrow \bar{s} \simeq \begin{cases}0 & \alpha \not> 1\\ \sqrt{\dfrac{3(\alpha-1)}{\alpha^3}} & \alpha>1\end{cases}$$

یا بصورت دیگر:

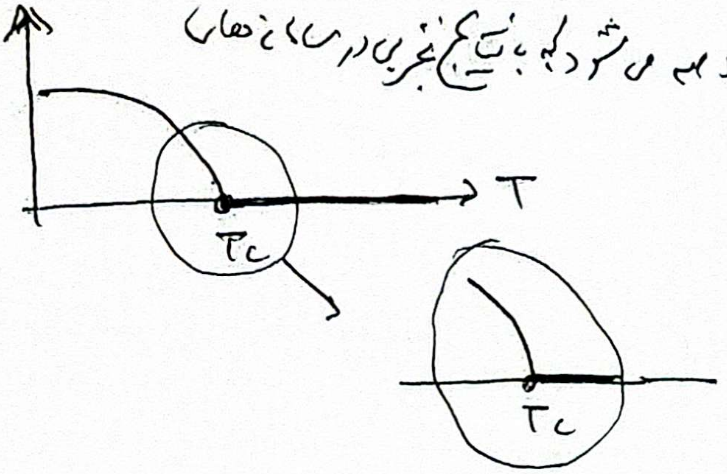
$$\bar{s} \simeq \begin{cases}0 & T>T_c\\ \sqrt{\dfrac{3\left(\frac{T_c}{T}-1\right)}{(T_c/T)^3}} & T<T_c\end{cases}$$

← این رابطه اولین موفقیت تقریب میدان متوسط است که وجود نقطه‌ی بحرانی را نشان می‌دهد

← در نزدیکی نقطه‌ی بحرانی با تقریب می‌توانیم قرار دهیم: $T=T_c+t$ و عبارات بالا را برای t خیلی کوچک بسط دهیم تا روابط ساده‌تر شوند:

$$\bar{s} \simeq \begin{cases}0 & ;\ t>0\\ \sqrt{\dfrac{3}{T_c}}\,|t|^{1/2} & ;\ t<0\end{cases}$$

$\frac{m}{\mu} = \bar{s}$



نتیجه بدست آمده در منحنی زیر خلاصه می‌شود که با نتایج تجربی در سیستم‌های مغناطیسی تطابق خوبی دارد.

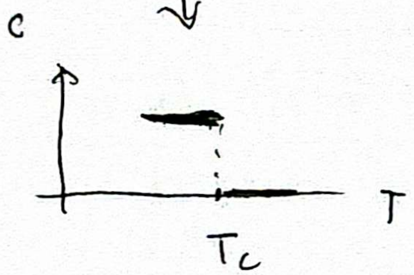
البته در نگاه از نظر دقیق‌تر، m با t بصورت $m\sim|t|^{\beta}$ است که β اندکی با $\frac{1}{2}$ تفاوت دارد.

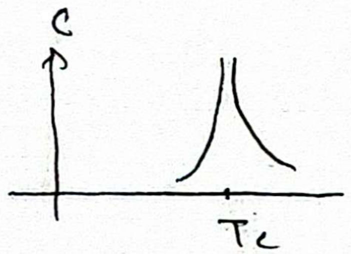
گرمای ویژه چطور رفتار می‌کند:

$$\bar{E} = -\partial_\beta \ln Q = -N\partial_\beta \ln\left(e^{\beta J z\bar{s}} - e^{-\beta zJ\bar{s}}\right)$$

$$= -NzJ\bar{s}\tanh(\beta zJ\bar{s}) = -NzJ\bar{s}^2 \simeq \begin{cases} 0 & T>T_c \\ 3Nz\frac{J}{T_c} & T<T_c \end{cases}$$

(رفتار واقعی)





البته در آزمایشگاه، واقعاً یک واگرایی در T_c برای C_V دیده می‌شود.

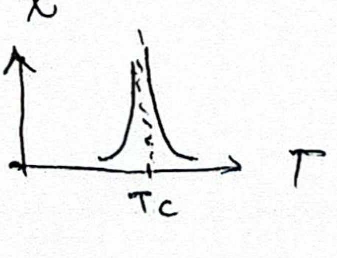
تابع پاسخ مغناطیسی یا پذیرفتاری مغناطیسی کمیت مهم دیگری است که می‌توانیم حساب کنیم:

$$\chi = \left[\frac{\partial}{\partial H}\langle M\rangle\right]_{H=0} = N\mu\frac{\partial}{\partial H}\langle s\rangle = N\mu\left(\frac{\partial\bar{s}(H)}{\partial H}\right)_{H=0}$$

$$\langle M\rangle = N\mu\bar{s} = N\mu\tanh(\beta zJ\bar{s}+\beta\mu H) \simeq N\mu(\beta zJ\bar{s}+\beta\mu H)+\cdots$$

$$\to \bar{s} \simeq \frac{\beta\mu H}{1-\beta zJ} \quad \to \chi \simeq N\beta\mu^2\times\frac{1}{1-\frac{zJ}{kT}} \simeq \frac{N\mu^2}{k_B}\frac{1}{(T-T_c)}$$

$$\boxed{\chi\sim|t|^{-1}}$$



* واگرایی پذیرفتاری هم یک واقعیت آزمایشگاهی است که البته نه واقعی واگرایی دقیقاً 1 نیست.

ولی چرا در نقطه بحرانی واگرایی داریم؟ یک کمیت مهم و مشهور، تابع همبستگی و طول همبستگی است. که با تعریف طول همبستگی نشان می‌دهیم واگرایی‌ها در نقطه بحرانی به این نکته که می‌رسد طول همبستگی در نقطه بحرانی واگراست مربوط می‌شوند.

□ تابع همبستگی افت‌وخیزهای اسپین در دو نقطه دلخواه i و j را به صورت زیر تعریف می‌کنیم:

$$C_{ij} = \langle (S_i - \bar{S})(S_j - \bar{S}) \rangle$$

اسپین در دو نقطه i و j دلخواه را نسبت به میانگین افت‌وخیز می‌کنند. این افت‌وخیزها در هم ضرب و متوسط گیری‌ها می‌شود. اگر افت‌وخیزها در دو نقطه دلخواه به هم ربطی نداشته باشند انتظار داریم:

$$C_{ij} = \langle (S_i - \bar{S}) \rangle \langle (S_j - \bar{S}) \rangle = 0 \times 0 = 0$$

ولی اگر $C_{ij} \neq 0$ باشد می‌گوییم افت‌وخیزهای ۲ نقطه با هم همبسته‌اند.

ξ: طول همبستگی: اگر سیستم همسانگرد و همگن باشد انتظار داریم C_{ij} فقط به فاصله دو نقطه i و j از یکدیگر وابسته باشد. طول همبستگی، طول مشخصه‌ای است که در آن طول اسپین‌ها به هم همبسته‌اند. مثلاً اگر طول همبستگی $\xi = 1\,mm$ باشد، به این معنی است که افت‌وخیزهای تصادفی هر اسپین با اسپین دیگری که با آن به اندازه $1\,mm$ فاصله دارد همبستگی دارد و افت‌وخیز هرکدام باعث تغییر آن دیگری می‌شود و از هم مستقل نیستند.

طول همبستگی ارتباط مستقیمی با χ دارد.

تابع همبستگی اسپین شماره 1 با بقیه اسپین‌ها را در نظر بگیرید: C_{1j}. کمیت زیر را ببینید:

$$\sum_{j=1}^{N} C_{1j} \approx \chi$$

اگر طول همبستگی بی‌نهایت کوچک باشد، هیچ اسپینی با اسپین 1 همبسته نیست و جمع بالا صفر است ولی اگر طول همبستگی زیاد شود، ξ زیاد می‌شود تا جایی که $\sum_j C_{1j}$ متناسب با تعداد اسپین‌های همبسته با اسپین شماره 1 است و آن هم متناسب با χ است.

از طرف دیگر، اگر انرژی مدل ایزینگ را بصورت زیر بنویسیم:

$$E_\nu = E_{int.} - \mu H \sum S_i = E_{int} - HM$$

داریم:

$$\bar{M} = \frac{\sum_\nu M e^{-\beta E_{in} + \beta HM}}{\sum_\nu e^{-\beta E_{in} + \beta HM}} \to \chi = \frac{\partial \bar{M}}{\partial H}\Big|_{H=0} = \beta\left[\frac{\sum M^2 e^{-}}{\sum e^{-}} - \left(\frac{\sum M e^{()}}{\sum e^{-}}\right)^2\right]$$

$$\chi = \beta\left(\langle M^2\rangle - \langle M\rangle\langle M\rangle\right) = \beta\mu^2\left(\langle \sum_i S_i \sum_j S_j\rangle - \langle S\rangle\langle S\rangle\right) = \beta\mu^2 \sum_{ij}(S_i - \bar{S})(S_j - \bar{S})$$

$$\chi = \beta\mu^2 \sum_{ij} C_{ij} = \beta\mu^2 N \sum_{j=1}^{N} C_{1j} \sim \xi \to \boxed{\chi \sim \xi}$$

در مرحله آخر از این حقیقت که C_{1j} فقط به فاصله بین ذرات بستگی دارد استفاده کرده‌ایم.
(رابطه دقیق‌تر این بصورت $\chi \sim \xi^d$ است که d بعد سیستم است).

□ نتیجه نهایی این است که تمام واگرایی‌هایی که در نقطه بحرانی دیده می‌شود بصورتی به این موضوع ارتباط دارد که طول همبستگی است و چیزها در نقطه بحرانی واگراست یعنی همه با هم همبسته است.

* فرض کنید طول همبستگی یک عدد مشخص و با ξ نشان داده شود. در این صورت تمام اسپین‌هایی که در ناحیه‌ای به اندازه ξ هستند با هم همبسته اند و احتمالاً و چیز نشان کم و بیش مثل هم است. پس می‌توانیم همه این اسپین‌ها را با یک اسپین معادل (یک درجه آزادی) جایگزین کنیم. در نتیجه اگر سایز سیستم L باشد، به نظر می‌رسد تعداد $(L/\xi)^d$ تا درجه آزادی موثر داریم و مثلاً انرژی آزاد سیستم برابر با تعداد درجات آزادی موثر ضرب در انرژی هر درجه آزادی $(k_B T)$ می‌شود. $f \sim k_B T (L/\xi)^d$.

** طول همبستگی یک کمیت است و در دمای بحرانی $\infty \leftarrow \xi$ ولی در نقاط دور از نقطه بحرانی $0 \leftarrow \xi$. توجه کنید که در سیستم فیزیکی ∞ و 0 با مقادیر فیزیکی سایز سامانه L و کوچکترین طول میکروسکوپیک سیستم a جایگزین می‌شود.

*** همبستگی همه به هم از عجیب‌ترین اتفاقات طبیعت است که فقط در نقطه بحرانی دیده می‌شود.