به‌نام خداوند بخشنده و مهربان

دانشکده علوم

پایان نامه‌ی کارشناسی ارشد در رشته‌ی فیزیک

# بررسی خواص ترمودینامیکی سیستم‌های اسپینی فرومغناطیسی همگن با برهم‌کنش بلندبرد طبق آمار سلس

توسط

نجمه بلندهمت

استاد راهنما:

دکتر افشین منتخب

خردادماه ۱۳۸۸

به نام خدا

## ***اظهارنامه***

***اینجانب*** *نجمه بلندهمت* ***(۸۵۰۸۳۰) دانشجوی رشته ی*** *فیزیک*
***گرایش*** *حالت جامد* ***دانشکده ی*** *علوم* ***اظهارمی کنم که این پایان نامه حاصل پژوهش خودم بوده و در جاهایی که از منابع دیگران استفاده کرده ام، نشانی دقیق و مشخصات کامل آن را نوشته ام. همچنین اظهارمی کنم که تحقیق و موضوع پایان*** **نامه ام تکراری نیست و تعهد می نمایم که بدون مجوز دانشگاه دستاوردهای آن را منتشر ننموده و یا در اختیار غیر قرار ندهم. کلیه حقوق این اثر مطابق با آیین نامه مالکیت فکری و معنوی متعلق به دانشگاه شیراز است.**

**نام ونام خانوادگی :** نجمه بلندهمت

**تاریخ و امضا:** ۱۱ / ۳ / ۱۳۸۸

به نام خدا

# بررسی خواص ترمودینامیکی سیستم‌های اسپینی فرومغناطیسی همگن با برهم‌کنش بلندبرد طبق آمار سلس

به کوشش


نجمه بلندهمت


پایان نامه

ارائه شده به تحصیلات تکمیلی دانشگاه به عنوان بخشی

از فعالیت های تحصیلی لازم برای اخذ درجه کارشناسی ارشد

در رشته ی:

فیزیک

از دانشگاه شیراز

شیراز

جمهوری اسلامی ایران

**ارزیابی شده توسط کمیته پایان نامه با درجه: عالی**

دکتر افشین منتخب، استادیار بخش فیزیک (استاد راهنما) ........................................

دکتر محمود براتی خواجویی، استاد بخش فیزیک ........................................

دکتر محمود مرادی، استاد بخش فیزیک ........................................

دکتر سعید دعوت الحق، استادیار بخش فیزیک ........................................

خرداد ۱۳۸۸

**تقدیم به پدرم که بی‌نیازیم آموخت**

**به مادرم که به من درس محبت داد**

# سپاسگزاری

سپاس خداوندی که گنجینه‌ای از خرد بزرگ جهان خود را در اختیارم گذاشت. با تشکر فراوان از استاد دکتر افشین منتخب که با اندیشه‌ها و گفتارهای ارزشمند خود مرا در مسیر الهام بخشیدن به ذهن و جان بخشیدن به روح قرار دادند تا با تأمل بر آن‌ها و گام نهادن در راه عمل به آن‌ها بتوانم بخشی از زندگی خود را به ثمر رسانم. همچنین از استاد دکتر سعید دعوت الحق بابت راهنمایی‌های بی‌دریغ و القای حس پشتکار و اعتماد به نفس تشکر فراوان دارم.  بر خود لازم می‌دانم از اساتید بزرگوار آقایان دکتر محمود براتی، دکتر محمود مرادی و دکتر حمید نادگران در نهایت احترام، سپاسگزاری کنم.

در پایان خود را مدیون پدرم که وجود گرانقدرش سرچشمه‌ی تسلی و الهام در تمامی شرایط زندگی-ام است و مادرم که سرشار از محبتی عزیز و جان‌بخش است، می‌دانم.

# چکیده

## بررسی خواص ترمودینامیکی سیستم‌های اسپینی فرومغناطیسی همگن با برهم کنش بلندبرد طبق آمار سلس

**به کوشش:**

**نجمه بلندهمت**

آمار بولتزمان-گیبس برای سیستم‌های کلاسیکی با برهم‌کنش‌های کوتاه‌برد و دینامیک ساده در حالت تعادل، پایه و اساس فیزیک آماری می‌باشد. اما اخیرا برای سیستم‌هایی که دینامیک پیچیده‌ای دارند و یا دارای برهم‌کنش‌های بلندبرد هستند، کنستانتینو سلس آمار جدیدی را پیشنهاد کرد که می‌تواند آمار بولتزمان-گیبس معمولی را تعمیم دهد. در این رساله ابتدا به مطالعه‌ی آمار سلس پرداخته، سپس ویژگی‌های ترمودینامیکی سیستم‌هایی که از این آمار تبعیت می‌کنند را بررسی می‌کنیم. در ادامه به ارائه‌ی یک الگوریتم مناسب در روش مونته‌کارلو برای شبیه سازی سیستم‌های اسپینی با بر هم کنش‌های بلند برد طبق هامیلتونی مدل آیزینگ در آمار سلس پرداخته و با به‌کارگیری شرط مرزی مناسب به بررسی خصوصیت‌های ترمودینامیکی مربوط به این سیستم می‌پردازیم. در نهایت به مقایسه‌ی نتایج به دست آمده از جمله مغناطش، انرژی درونی، ظرفیت گرمایی و پذیرفتاری مغناطیسی با نتایج شناخته شده در سیستم-های کوتاه برد در آمار بولتزمان-گیبس می‌پردازیم. همچنین شرایط بهنجارش مختلفی که در آمار سلس وجود دارد را نیز مقایسه می‌کنیم.

# فهرست مطالب

## فهرست شکل ها

| عنوان و شماره | صفحه |
|---|---|

# فصل اول

## مقدمه

# ۱- مقدمه

با توجه به‌اینکه تابع بولتزمان- گیبس به عنوان یک تابع جهانی برای توصیف حالت تعادل به کار می‌رود و همچنین می‌دانیم که آمار بولتزمان- گیبس برای سیستم‌های کلاسیکی با نیروهای کوتاه‌برد و دینامیک ساده به خوبی عمل می‌کند، اما با پیدایش یک نظریه مبنی بر اینکه برای سیستم‌هایی که دینامیک آنها به اندازه‌ی کافی پیچیده است آماری غیر از آمار بولتزمان- گیبس می‌تواند وجود داشته باشد. این امر منجر به این شد که یک تئوری آماری توسط کنستانتینو سلس[۱] مطرح شده و در سیستم‌های متعددی بررسی شود [۱و۲ ]. این فرمالیزم، به خصوص در مواردی که سیستم از شرط فزون‌وربودن[۲] پیروی نمی‌کند، یعنی زمانی که خصوصیات ترمودینامیکی سیستم متناسب با اندازه‌ی سیستم $V$ و تعداد ذرات $N$ نیست، استفاده می‌شود. رفتار نافزون‌ور بودن[۳] در دو دسته از سیستم‌ها دیده می‌شود، دسته‌ای شامل سیستم‌های کوچک که از تعداد محدودی ذره تشکیل شده‌اند و حد ترمودینامیکی در آنها گرفته نمی‌شود و دسته‌ی دیگر سیستم‌هایی که در آنها برهم‌کنش بین ذرات بلندبرد هستند. برخی از کاربردهای تئوری سلس در پدیده‌های بحرانی خودسازمان‌ده[۴] [۳] ، پخش همبسته‌ی ناهنجار و لوی[۵] [۴]، پخش کوارک‌ها در پلاسمای گلوانی [۵] و بسیاری پدیده‌های دیگر می‌باشد.

نیروهای بلند برد در طبیعت جهان پدیده‌ی رایجی به شمار می‌آیند. این نیروها از پتانسیل میان دو جسم که در فاصله‌ی زیادی از یکدیگر قرار دارند، ناشی می‌شوند ( پتانسیل میان آنها به صورت $1/r^{\alpha}$ با $\alpha \leq d$ ، که درآن $d$ معرف بعد فضاست ، می‌باشد). بنابراین بررسی نیروهای

---

۱ Constantino Tsallis

۲ *Extensive*

۳ Nonextensive

۴ Self-organized criticality

۵ Lévy and correlated anomalous diffusion

بلند برد و یا برهم کنش‌های بلند برد تصویر واقعی‌تری را از جهان پیچیده به ما نشان می‌دهد. اگرچه این مهم چیزی از اهمیت آنچه از مطالعات برهم کنش‌های کوتاه برد به دست آمده است نمی‌کاهد، بلکه مکمل مناسبی برای آن خواهد بود. به عنوان مثال‌هایی از نیروهای بلند برد می‌توان به سیستم‌های خود گرانی[۱] (s=۱)[۶و۷]، فرومغناطیس‌ها و فرو الکتریک‌های دوقطبی (s=۱)[۸]، پلاسماهای غیر طبیعی (s=۱ )[۹]، برهم کنش میان ذرات باردار از طریق میدان‌های الکترومغناطیسی متقابل خود، مانند آنچه در لیزر الکترون آزاد رخ می‌دهد [۱۰] و بسیاری دیگر [۱۱] اشاره کرد. عدم وجود قانون جمع پذیری در این سیستم ها نشان می‌دهد که بسیاری از خصوصیات غیر معمول در آنها با نتایج مطالعات سیستم‌های با بر هم کنش‌های کوتاه برد هماهنگی ندارد از جمله این مطالعات آنچه توسط بولتزمان- گیبس ارائه شد و نیز آنچه به‌وسیله‌ی آنتونو[۲] [۱۲] بیان شد که بعدها توسط لیندن-بل[۳] [۱۳و۱۴] و ترینگ[۴] [۱۵و۱۶] ادامه یافت.

در پی مطالعه‌ی سیستم‌های با بر هم کنش‌های بلند برد [۱۱- ۱۸]به بررسی چگونگی اثر مغناطش در سیستم‌های اسپینی فرومغناطیسی که دارای بر هم کنش‌های بلند برد هستند، می‌پردازیم. برای شبیه سازی اینگونه سیستم‌ها روش‌های زیادی وجود دارد، از جمله روش عددی مونته کارلو و دینامیک مولکولی و روش HOW. ما نیز از روش عددی مونته کارلو استفاده کرده و به مطالعه‌ی این سیستم‌ها در مدل آیزینگ که یکی از ساده‌ترین و مهم‌ترین مدل‌های فیزیکی است، می‌پردازیم.

در سال ۱۹۸۸[۱۹] فیزیکدانی به‌نام کنستانتینو سلس توانست با استفاده از آنتروپی کلی زیر

$$S=-k_B \sum_i p_i \ln p_i \qquad (1.1)$$

که به آنتروپی شنن یا آنتروپی گیبس-بولتزمان معروف است و بر پایه‌ی تئوری اطلاعات طرح ریزی شده شکل جدیدی از آنتروپی را به‌نام آنتروپی سلس معرفی کرد و آن را به این طریق نشان

۱ Self gravitating

۲ Antonov

۳ Lynden – Bell

۴ Thirring

داد:

$$S_q(p)=(1/q-1)\ \{1-\sum_i p_i^{q}\} \qquad (۱.۲)$$

$p_i$ : احتمال وقوع حالت $i$

$q$ :[۲۰] یک پارامتر حقیقی بنام شاخص آنتروپی است که میزان نافزون‌ور بودن سیستم ترمودینامیکی راتعیین می‌کند. هرگاه این پارامتر به سمت یک میل کند آنتروپی سلس به آنتروپی شناخته شده‌ی بولتزمان- گیبس تبدیل می‌شود. آنتروپی سلس می‌تواند توجیه کننده‌ی وجود بر-هم‌کنش‌های بلندبرد میان ذرات باشد، این مهم یکی از موفقیت‌های آمار سلس است که محدودیت وجود برهم‌کنش‌های کوتاه‌برد میان ذرات در آمار بولتزمان- گیبس را بر طرف می‌کند.

ابزار انتخاب شده برای شبیه‌سازی سیستم اسپینی فرومغناطیسی دو بعدی در مدل آیزینگ برای آمار سلس روش مونته‌کارلو می‌باشد. این شبیه‌سازی می‌تواند سیستم مذکور را در حالت تعادل در دمای معین $T$ مورد بررسی قرار دهد و برای تعداد ذرات قابل دسترس خواص ترمودینامیکی سیستم را به روش مونته‌کارلو محاسبه کند. با توجه به اینکه سیستم در آمار سلس بررسی می-شود، وابستگی سیستم به پارامتر $\alpha$ که معرف میزان برهم‌کنش میان ذرات موجود در شبکه است، نیز در این شبیه سازی بررسی خواهد شد. با این بررسی می‌توان تفاوت میان رفتار فزونور و رفتار نافزونور سیستم را در خواص ترمودینامیکی آن به وضوح دید.

# فصل دوم

# آنتروپی سلس

# ۲- آنتروپی سلس

## ۲-۱ آنتروپی بولتزمان- گیبس

آنتروپی به‌عنوان یک مفهوم ترمودینامیکی کلاسیکی در قرن نوزدهم میلادی توسط کلاسیوس[۱] معرفی شد ، اما این تنها به کار بولتزمان و گیبس منسوب شده است که به عنوان یک اصل مهم در مکانیک آماری‌ست. آنتروپی S داده شده در یک سیستم به‌نام آنتروپی بولتزمان-گیبس[۲] به-صورت زیر بیان شده است:

$$S = -k_B \sum_{i=1}^{W} p_i \ln p_i \qquad (۱-۲)$$

با شرط بهنجارش

$$\sum_{i=1}^{W} p_i = 1 \qquad (۲-۲)$$

که در آن $p_i$ احتمالی‌ست که سیستم در میکروحالت i ام قرار دارد و k یک ثابت اختیاری‌ست که در ترمودینامیک به آن ثابت بولتزمان می‌گویند ، ( $k_B = 1.38\times10^{-23} J/k$ ). گاهی بدون در نظر گرفتن تقریب مقدار k را عدد یک در نظر می‌گیرند. اگر همه‌ی میکروحالت‌ها با احتمال مساوی $p_i = 1/W$ در سیستم قرار بگیرند (فرض احتمالات مساوی) ، آنگاه رابطه‌ی اساسی و مشهور بولتزمان-گیبس بدست می‌آید:

---

۱ Clausius

۲ Boltzmann-Gibbs

$$S_{BG} = k \ln W \qquad (۲-۳)$$

با توجه به معادله‌ی (۲-۱) می‌توان نشان داد که آنتروپی بولتزمان-گیبس مثبت ، واگرا ، فزونور و پایاست [۲۱] . فزونوربودن آنتروپی به این معنی‌ست که اگر A و B دو سیستم مستقل باشند به‌طوری‌که رابطه‌ی احتمال در آنها به‌صورت $p_{i,j}^{A+B} = p_i^A p_j^B$ باشد ، می‌توان آنتروپی را به این صورت نشان داد:

$$S_{BG}(A+B) = S_{BG}(A) + S_{BG}(B) \qquad (۲-۴)$$

در سال ۱۹۸۸ آنتروپی جدیدی توسط سلس به شکل $S_q$ پیشنهاد شد که از آن نیز می‌توان برای تعمیم به مکانیک آماری $BG$ استفاده کرد. آنتروپی $S_q$ (با $S_1 = S_{BG}$) به شاخص $q$ وابسته است ، که یک عدد حقیقی برای تعیین دینامیک میکروسکوپی‌ست[ ۲۲ ، ۲۳ ، ۲۴ ، ۲۵ ] .

در اینجا آنتروپی سلس را شرح داده و خواص و کاربردهای ان را تا حد امکان مطالعه می‌کنیم.

## ۲- ۲ آنتروپی سلس و خواص و کاربردهای آن

### ۲-۲-۱ معرفی آنتروپی سلس

یکی از مهم‌ترین موفقیت‌های سلس پیشنهاد عبارت متناوبی برای آنتروپی به فرم زیر بود[۲۶]:

$$S_q = \frac{(1 - \sum_i p_i^q)}{q-1} \qquad (۲-۵)$$

با توجه به مفهوم نافزون‌ور بودن آنتروپی سلس طبق رابطه‌ی زیر:

$$S_q(A+B) = S_q(A) + S_q(B) + (1-q) S_q(A) S_q(B)$$

می‌توان دید که برای q ≠۱ قانون جمع‌پذیری در آنتروپی وجود ندارد. همچنین مجموعه احتمال های $\{p_i\}$ به صورت $p_i^q > p_i$ برای q<۱ و $p_i^q < p_i$ برای q>۱ نشان داده می‌شود. سیستم را در آنسامبل کانونی در نظر می‌گیریم. احتمال‌های $\{p_i\}$ در این آنسامبل توسط حل مسئله‌ی ماکزیمم کردن آنتروپی $S_q$ داده شده در رابطه‌ی (۵.۲) با در نظر گرفتن شرط‌های (الف)مثبت

بودن: $p_i \geq ۰$ ، (ب)بهنجارش : $\sum_i p_i = ۱$ (ج)مقدار میانگین برای انرژی درونی: $U = \langle \mathcal{H} \rangle$ ، که در آن $\mathcal{H}$ هامیلتونی سیستم است ، بدست می‌آید. مقدار میانگین هر تابع نظیر $O$ در پیکربندی میکروسکوپی به‌وسیله‌ی رابطه‌ی کلی زیر بدست می‌آید:

$$\langle O \rangle = \sum_i O_i u(p_i) \qquad (۶-۲)$$

$O_i$ مقدار تابع $O$ که با احتمال $p_i$ در سیستم قرار دارد و تابع $u(p_i)$ باعث تولید مقدار میانگین می‌شود.

مقدارهای میانگین استاندارد بااستفاده از $u(p_i)$ بدست می‌آیند. اگرچه برای تابع $u(p_i)$ سه تا انتخاب در نظر گرفته شده است:

(انتخاب اول) $$u(p_i) = p_i$$

(انتخاب دوم) $$u(p_i) = p_i^q$$

(انتخاب سوم) $$u(p_i) = p_i^q \Big/ \sum_j p_j^q$$

در حال حاضر نشان داده شده که تنها انتخاب سوم می‌تواند در ساختار لژاندر برای حل فرمالیزم ترمودینامیک به طور صحیح به‌کار رود[۲۷]. بنابراین به پیروی از این نکته برای محاسبه‌ی مقدار میانگین از انتخاب سوم استفاده می‌کنیم:

$$\langle O \rangle_q = \sum_i O_i P_i; \qquad P_i = p_i^q \Big/ \sum_j p_j^q \qquad (۷-۲)$$

$\{P_i\}$ را به‌عنوان احتمالات اسکورتز[۱] می‌شناسند [۲۸]. این امکان وجود دارد که احتمالات $p_i$ را به‌عنوان تابعی از احتمالات اسکورتز به‌فرم زیر نشان داد:

$$p_i = P_i^{1/q} \Big/ \sum_j P_j^{1/q} \qquad (۸-۲)$$

آنتروپی به عنوان تابعی از $\{P_i\}$ به‌صورت زیر در می آید:

---
۱ escorts

$$S_q = \frac{1-(\sum_i P_i^{1/q})^{-q}}{q-1} \qquad (۹-۲)$$

البته در بیان تعریف دیگری برای میانگین‌گیری باید گفته شود که اخیرا نشان داده‌اند که [۲۹، ۳۰، ۳۱] مقدار میانگین استاندارد در انتخاب اول $u(p_i) = p_i$ ، نیز می‌تواند موافق با ساختار لژاندر برای حل فرمالیزم ترمودینامیک به‌کار رود و نتایج درستی را برای توصیف ترمودینامیکی بدست دهد. در اینجا برای ادامه از مقدارهای میانگین تعریف شده در معادله‌ی (۲-۷) پیروی می‌کنیم، اگرچه در فصل آینده نشان خواهیم داد که نتایج بدست آمده با استفاده از مقدارهای میانگین استاندارد می‌توانند با آنچه که از معادله‌ی (۲.۷) بدست آمد، منطبق باشند.

در مسئله‌ی ماکزیمم کردن احتمالات شناخته شده‌ی اسکورتز $P_i$ در آنسامبل کانونی با یک انرژی درونی داده شده ی $U_q$ داریم :

$$\frac{\delta}{\delta P_i}[S_q - \beta\sum_i \varepsilon_i P_i - \alpha\sum_i P_i] = 0 \qquad (۱۰-۲)$$

$$P_i \geq 0 \qquad (۱۱-۲)$$

$$\sum_i P_i = 1 \qquad (۱۲-۲)$$

$$\sum_i \varepsilon_i P_i = U_q \qquad (۱۳-۲)$$

که در آن $\alpha$ و $\beta$ ضرائب لاگرانژ هستند. $\{\varepsilon_i\}$ ترازهای انرژی موجود در سیستم است که انرژی حالت پایه‌ی آن برابر با $E_0$ می‌باشد. با حل معادلات (۲-۱۱)، (۲-۱۲ ) و (۲-۱۳ ) می‌توان احتمالات را برای آنسامبل کانونی بدست آورد. با تعریف تابع $z$ به شکل زیر [۲۷]:

$$z = \sum_k [1-(1-q)\beta(\varepsilon_k - U_q)/(\sum_j P_j^{1/q})^q]^{\frac{q}{1-q}} \qquad (۱۴-۲)$$

$P_i$ به صورت زیر بدست می‌آید:

(۱۵-۲)

$$P_i = \begin{cases} 0 & 1-\dfrac{(1-q)\beta(\varepsilon_i - U_q)}{(\sum_j P_j^{1/q})^q} < 0 \\ \dfrac{[1-(1-q)\beta(\varepsilon_i - U_q)/(\sum_j P_j^{1/q})^q]^{\frac{q}{1-q}}}{z} & otherwise \end{cases}$$