



دانشگاه سقز

دانشکده علوم-گروه فیزیک
پایان نامه کارشناسی ارشد

عنوان:

مطالعه گذارهای فاز کوانتومی در مدل زنجیره فرومغناطیسی وامانده

نگارنده:

شیوا صفائی

استاد راهنما:

دکتر امیرحسین درونه

دکتر سعید مهدوی فر

بهمن ماه ۱۳۸۸

چکیده:

در این پایان نامه اثر میدان مغناطیسی خارجی بر زنجیره‌ی اسپینی را بررسی خواهیم کرد. زنجیره‌ی اسپینی از موادی ساخته می‌شود که در ترکیبشان عناصر Fe و Cu و فلزات گروه واسطه که اغلب تک ظرفیتی هستند وجود داشته باشد. این مواد عمدتاً به نحوی پایدار می‌شوند که در ترکیب آن‌ها تک اسپین‌ها در کنار هم قرار گرفته و تشکیل یک زنجیره می‌دهند. اسپین‌ها میل به هم جهت کردن یکدیگر دارند و از آنجا که در یک شبکه زنجیره‌های زیادی در کنار هم قرار دارند جهت گیری اسپین‌ها به قدرت برهمکنش هر کدام از آن‌ها با سایر اسپین‌های شبکه وابسته خواهد بود. از این رو به دلیل این که هر کدام از اسپین‌ها تمام جهات ممکنه را می‌توانند داشته باشند از هامیلتونی هایزنبرگ برای توصیف مدل استفاده می‌کنیم. با اعمال یک میدان مغناطیسی خارجی بر سیستم در دمای صفر یک گذار فاز خواهیم داشت. در واقع گذار فاز کوانتومی یک نوع خاص از گذار فاز است که در دمای صفر مطلق با اعمال یک پارامتر غیر گرمایی رخ می‌دهد. در دمای غیر صفر نوسانات گرمایی به حدیست که نوسانات کوانتومی قابل اغماض می‌شوند، اما اگر دما را تا حد صفر مطلق پایین بیاوریم دیگر نوسان گرمایی نداشته و می‌توانیم با اعمال میدان نوسانات کوانتومی که ریشه در اصل عدم قطعیت دارد و اندازه گیری پارامتر نظم گذار فاز کوانتومی را بررسی کنیم. روش انجام شده در اینجا به این ترتیب است که ابتدا ماتریس هامیلتونی کل سیستم را که شامل برهمکنش اولین و دومین همسایه اسپین‌ها و میدان مغناطیسی در جهت Z را نوشته سپس با روش عددی لنگشوز ماتریس را سه قطری کرده و در نهایت با روش QR گرام اشمیت قطری‌سازی نهایی می‌کنیم. عناصر روی قطر که همان ویژه مقادیر هستند را به ازای مقادیر مختلف قدرت میدان به دست آورده و از مقایسه بین حالت پایه و اولین حالت برانگیخته گاف انرژی را اندازه‌گیری می‌کنیم، این گاف انرژی نشان‌دهنده مرحله گذار است بدین معنی که انرژی قبل و بعد از گذار دستخوش تغییر ناگهانی شده و این به معنی وقوع گذار فاز برای این سیستم کوانتومی است.

فصل اول

گذار فاز

۱.۱ مقدمه:

گذار فاز یکی از پدیده‌های فیزیکی است که نقش مهمی در طبیعت ایفا می‌کند. همه روزه شاهد اتفاقاتی هستیم مانند ذوب شدن یخ، تبخیر آب، تبدیل شدن یک فلز به ابررسانا با اعمال میدان مغناطیسی در دمای پایین و حتی سرد شدن پلاسمای داغ تولید شده در بیگ بنگ و تغییر شکل آن به صورت دنیای امروزی همگی مثال‌هایی از گذار فاز می‌باشند. در مثال‌هایی که ذکر شد دما نقش پارامتر خارجی را بر عهده دارد. به عبارت دیگر، افزایش دما باعث به وجود آمدن افت و خیزهای گرمایی شده و این افت و خیزها نظم ماکروسکوپیک (مثل ساختار کریستالی در پدیده ذوب) را از بین می‌برد.

در این قسمت ابتدا قوانین ترمودینامیکی حاکم بر گذار فازها را مرور می‌کنیم سپس مرز بین گذار فاز کلاسیکی و کوانتومی را بررسی کرده و نهایتاً پارامترهای دخیل را برمی‌شمریم.

سیستم‌های ترمودینامیکی در فازهای مختلف می‌توانند وجود داشته باشند. هر کدام از این فازها رفتارهای ماکروسکوپی متفاوتی از خود بروز می‌دهند. معمولاً سیستم‌ها در دماهای خفیف منظم‌ترند، زیرا نیروهای اتصال دهنده بر حرکات گرمایی فائق می‌شوند و در نتیجه اتم‌ها در حالتی نظم یافته‌تر سامان پیدا می‌کنند.

منظور از سیستم فیزیکی یک محیط کاملاً مشخص است که برای آن مؤلفه‌های ترمودینامیکی قابل تعریف باشد و به طور کلی منظور از فاز یک قسمت همگن از سیستم است که از قسمت‌های دیگر به وسیله مرزی کاملاً مشخص جدا شده باشد و از لحاظ فیزیکی با آن قسمت‌ها فرق داشته باشد.

گذار فاز در دمای معین (یا فشار یا میدان مغناطیسی معین ...) به طور ناگهانی صورت می‌گیرد گرچه قرائن وقوع چنین تغییری با نزدیک شدن به دمای گذار، در مقیاس میکروسکوپی آشکار می‌شود. از نظر ترمودینامیکی، هر گذار فازی با یک رژیم خطی و رابطه بنیادی ترمودینامیکی متناظر است که آن را می‌توان محصول نقض معیارهای پایداری (کوژی یا کاوی) در رابطه بنیادی ترمودینامیکی به شمار آورد.

قدم اول برای فهم گذارهای فاز که در یک سیستم روی می‌دهد، رسم نمودار فاز سیستم است. در یک نقطه گذار، دو یا چند فاز در حال تعادل با یکدیگرند. در نتیجه شرایط تعادل باید برقرار باشد. چون فازها می‌توانند با یکدیگر ماده مبادله کنند، تعادل با برابری پتانسیل‌های شیمیایی فازها تحقق می‌یابد. از شرط تعادل می‌توان حد اکثر فازهایی که می‌توانند با یکدیگر همزیستی داشته باشند را بدست آورد و معادلاتی که نواحی مختلف را مشخص می‌کند استخراج کرد.

۱.۲.۱ توصیف ترمودینامیکی گذار فاز:

در گذار فازها پتانسیل شیمیایی فازها، در تبع آن انرژی آزاد گیبس^۱، تغییر می‌کند. اما تغییرات فاز را به اعتبار رفتار مشتق‌های تابع گیبس به دو دسته تقسیم می‌کنند [۱ و ۲].

۱- گذار فاز نوع اول (ناپیوسته)

۲- گذار فاز نوع دوم (پیوسته)

گذار فاز نوع اول: گذارهایی که با یک تغییر حالت ناپیوسته همراهند به عبارت دیگر مشتق اول تابع انرژی آزاد گیبس در نقطه گذار ناپیوسته است. تبدیل یخ به آب از این نوع است. دو حالتی که گذار فاز نوع اول بینشان روی می‌دهد متمایز از هم‌اند و در ناحیه‌های جداگانه‌ای از فضای آرایش ترمودینامیکی قرار دارند.

^۱ Gibbs free energy

گذار فاز نوع دوم: گذارهایی که با یک تغییر حالت پیوسته متناظرند به عبارت دیگر مشتق اول تابع انرژی آزاد گیبس در نقطه گذار پیوسته است. مشتقات بعدی می‌توانند پیوسته یا ناپیوسته باشند. حالت‌هایی که گذار فاز مرتبه دوم بینشان روی می‌دهد حالت‌های متصل به هم در فضای آرایش ترمودینامیکی هستند یعنی تغییر حالت سیستم پیوسته است.

مثال‌ها: گذارهای فاز نوع اول در شاره‌های کلاسیک: گذار بخار-مایع، گذار مایع-جامد، گذار بخار-جامد. منحنی‌های همزیستی در این گذارها را می‌توان از روی معادله کلازیوس-کلاپرون^۲ بدست آورد. گذار بخار-مایع به یک نقطه بحرانی ختم می‌شود که یک گذار فاز مرتبه دوم است. مخلوط‌های دوتایی ملکولی نیز مثال دیگری از گذارهای فاز را بدست می‌دهد. از دمای معینی به پایین جدایی فیزیکی مخلوط به دو مایع تحقق می‌پذیرد که هر کدام آکنده و غنی از یکی از دو نوع ملکول است. در بسیاری از گذارهای فاز یک نقطه بحرانی^۳ وجود دارد (که گذار فاز مرتبه دوم است) یعنی دمای کاملاً مشخصی وجود دارد که بالای آن فقط یک فاز وجود دارد و چون دما را کم کنیم یک فاز جدید پدیدار می‌شود. این فاز جدید خصوصیات تقارنی متفاوتی دارد و معمولاً با متغیر جدیدی مشخص می‌شود که پارامتر نظم^۴ نامیده می‌شود. در گذارهای فاز نوع اول لزومی ندارد که ارتباطی میان تقارن‌های دو فاز وجود داشته باشد ولی در گذارهای پیوسته روابط کاملاً مشخصی میان خواص تقارنی دو فاز وجود دارد. مثال‌های گذارهای فاز مرتبه دوم را در مواد مغناطیسی، ابر شاره‌ها، فرو الکتریک‌ها و تغییر حالت‌های ساختاری می‌توان دید.

نکته‌ای که در اینجا حائز اهمیت می‌باشد این است که تا این قسمت برای تقسیم بندی نوع گذار فازها از تابع پتانسیل گیبس استفاده کرده‌ایم و تفاوت دو نوع موجود را در تفاوت پیوستگی مشتق این تابع عنوان کردیم. اما در واقع می‌توان از پتانسیل دیگری هم برای این تقسیم بندی استفاده کرد و این انتخاب لزوماً برای همه سیستم‌ها یکی نیست. پارامتر نظم یک کمییت فیزیکی قابل اندازه‌گیری است که در فازهای

^۲ Clausius-Clapeyron
^۳ Critical point
^۴ Order parameter

مختلف مقادیر متفاوتی را خواهد داشت و یا به عبارت دیگر مشتق پتانسیل نسبت به عامل خارجی مولد تغییرات پارامتر نظم و ایجاد گذار فاز است. با این توصیفات بنابر نوع سیستم و پارامتر نظم، تابع پتانسیل در خور را انتخاب می‌کنیم.

مثلا اگر یک سیستم بخار داشته باشیم که با اعمال فشار به مایع تبدیل شود، تابع پتانسیل گیبس برای توصیف سیستم مناسب است [۳] چرا که:

$$G = U + PV - TS \quad (1.1)$$

$$dG = dU + PdV + VdP - TdS - SdT \quad (2.1)$$

و همانطور که میدانیم:

$$dU = dQ - PdV = TdS - PdV \quad (3.1)$$

$$dG = VdP - SdT \quad (4.1)$$

$$\left(\frac{\partial G}{\partial P}\right)_T = V, \quad \left(\frac{\partial G}{\partial T}\right)_P = -S \quad (5.1)$$

حال اگر سیستمی داشته باشیم که پارامتر نظم آن فشار باشد از تابع انرژی هلمهولتز^۵ استفاده می‌کنیم به این دلیل که:

$$F = U - TS \quad (6.1)$$

$$dF = dU - TdS - SdT \quad (7.1)$$

$$= -PdV - SdT$$

$$\left(\frac{\partial F}{\partial V}\right)_T = -P, \quad \left(\frac{\partial F}{\partial T}\right)_V = -S \quad (8.1)$$

با این تفصیل به این نتیجه پی می‌بریم که برای هر سیستم پارامتر نظم و تابع انرژی (پتانسیل) مناسب خود را می‌بایست انتخاب کنیم.

۲.۱ همزیستی فازها:

همان طور که از قبل گفته شد از شرط تعادل است که می‌توان تعداد فازهایی که می‌توانند با یکدیگر همزیستی داشته باشند را بدست آورد و معادلاتی که نواحی مختلف را مشخص می‌کند استنتاج کرد. یک سیستم XYZ خالص، یعنی متشکل از یک مؤلفه را در نظر بگیرید (مثلاً یک فاز با متغیرهای PVT). در چنین سیستمی دو فاز ۱ و ۲ در صورتی می‌توانند در یک T و Y ثابت با یکدیگر همزیستی کنند که پتانسیل‌های شیمیاییشان برابر باشد [۴]:

$$\mu^1(Y, T) = \mu^2(Y, T) \quad (۹.۱)$$

در رابطه گیبس-دوهم^۶ پتانسیل شیمیایی به صورت زیر است:

$$Y = Y(T) \quad (۱۰.۱)$$

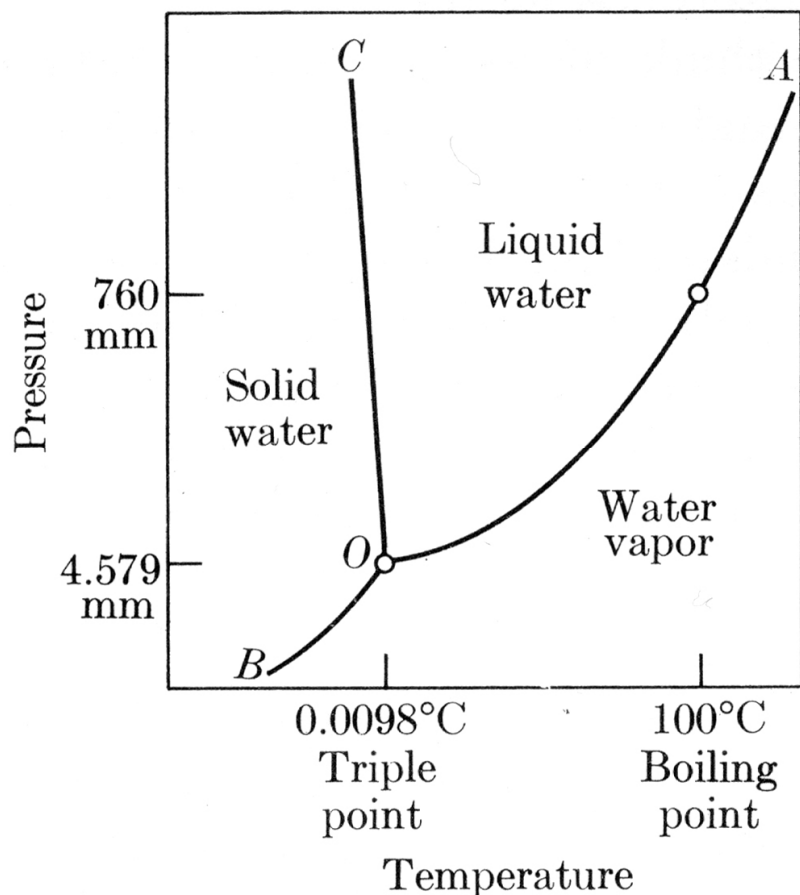
حال اگر سیستم تک مؤلفه‌ای سه فاز داشته باشد در این صورت:

$$\mu^1(Y, T) = \mu^2(Y, T) = \mu^3(Y, T) \quad (۱۱.۱)$$

که دو معادله با دو مجهول است و در نتیجه این سه فاز فقط در یک نقطه می‌توانند با یکدیگر مجاور باشند. مثال شاخص این مورد آب است.

آب در دماهای کمتر دارای چندین فاز یخ متفاوت است ولی در هیچ نقطه دیاگرام فاز بیش از سه فاز را در تعادل با یکدیگر نمی‌توان یافت.

^۶ Gibbs-Duhem



شکل ۱.۱

حالت مخلوطی از n مؤلفه (n نوع ملکول مختلف) را در نظر بگیرید. حداکثر $n + 2$ فاز مختلف می توانند با یکدیگر همزیستی کنند. اگر در هر فازی n نوع ملکول وجود داشته باشد $n + 2$ نوع متغییر مستقل برای هر فاز وجود دارد:

$$Y, T, x_1, \dots, x_i, \dots, x_{n-1}$$

که در آن x_i کسر مولی ملکول های نوع i ام است. حال اگر r فاز در یک مقدار معین T و Y همزیستی کنند، پتانسیل های شیمیایی یک نوع مشخص در فازهای مختلف باید یکی باشد:

$$\mu_1^1(Y, T, x_1^1, x_2^1, \dots, x_{n-1}^1) = \mu_1^2(Y, T, x_1^2, x_2^2, \dots, x_{n-1}^2) = \dots \quad (۱۲.۱)$$

$$\mu_1^r(Y, T, x_1^r, x_2^r, \dots, x_{n-1}^r)$$

⋮

$$\mu_n^1(Y, T, x_1^1, x_2^1, \dots, x_{n-1}^1) = \mu_n^2(Y, T, x_1^2, x_2^2, \dots, x_{n-1}^2) = \dots \quad (۱۳.۱)$$

$$\mu_n^r(Y, T, x_1^r, x_2^r, \dots, x_{n-1}^r)$$

تعداد معادلات بالا $n(r-1)$ است و تعداد مجهول‌ها $2 + r(n-1)$ برای داشتن جواب تعداد معادلات نباید بیشتر از تعداد مجهول‌ها باشد:

$$\begin{aligned} n(r-1) &\leq 2 + r(n-1) \\ r &\leq n+2 \end{aligned} \quad (14.1)$$

یعنی تعداد فازهای همزیست باید کمتر یا برابر با $n+2$ باشد.

مثال: در یک مخلوط دوتایی $n=2$ ، حداکثر ۴ فاز می‌توانند در همزیستی با یکدیگر (در T و Y ثابت) باشند.

رابطه فوق را به صورت:

$$N = 2 + n - r \quad (15.1)$$

هم می‌نویسند. N تعداد درجات آزادی ترمودینامیکی است. در یک سیستم دوتایی $n=2$

$$N = 4 - r$$

اگر $r=2$ یعنی دو فاز در حال تعادل داشته باشیم، $N=2$ یعنی دو تا از سه متغیر می‌توانند x, Y, T

مستقلاً تغییر کنند. یک سیستم دوتایی، مثل محلول نمک در آب. حالاتی که دو فاز می‌توانند در تعادل

باشند عبارتند از: (۱) بخار و محلول (۲) محلول و بلور یخ (۳) محلول و بلور نمک. در مورد (۱) مثلاً می-

توان x, T را مشخص کرد و $Y (= P)$ تابعی از x, T خواهد بود. در مورد (۲) می‌توان فشار (Y) ، x

(غلظت) را مستقلاً تغییر داد در حالی که دمای گذار تابعی از این دو خواهد بود.

۱.۳ طبقه بندی گذارهای فاز:

با تغییر متغیرهای نا افزایشی مستقل یک سیستم، به مقداری از این متغیرها می‌رسیم که در آن‌ها تغییر

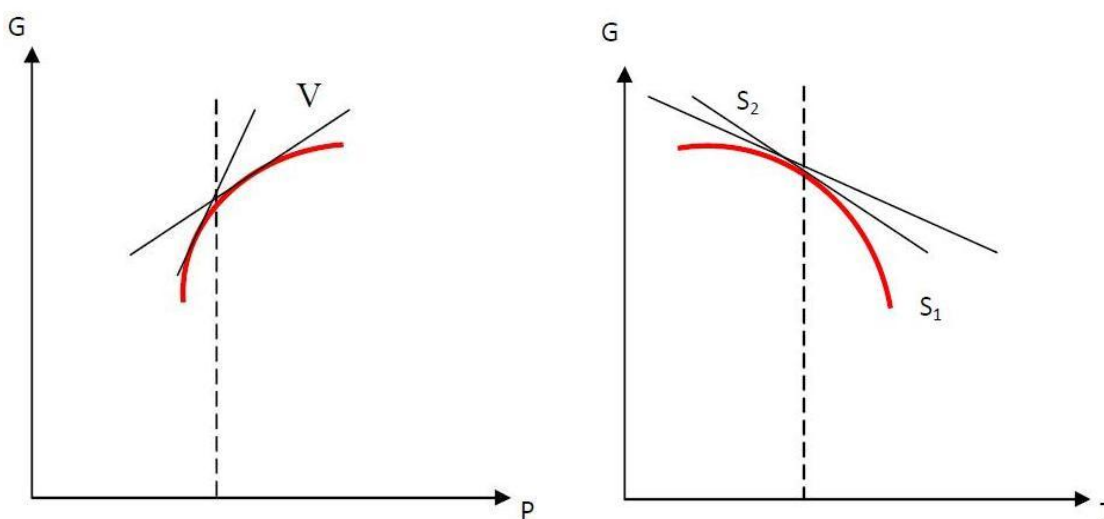
فاز روی می‌دهد. در چنین نقاطی پتانسیل شیمیایی فازها برابر خواهد بود. انرژی آزاد گیبس رابطه نزدیکی با پتانسیل شیمیایی دارد

$$G(T, Y, n_i) = \sum \tilde{\mu}_i n_i \quad (۱۶.۱)$$

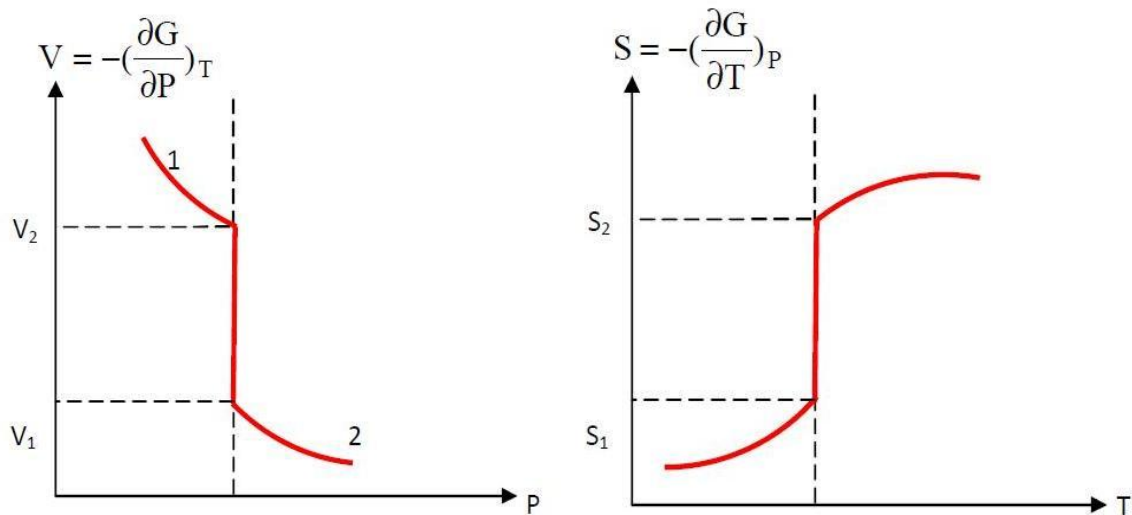
$\tilde{\mu}_i$ پتانسیل شیمیایی هر مول مؤلفه n_i است.

$$\tilde{\mu}_i = \left(\frac{\partial G}{\partial n_i} \right)_{T, Y, n_{j \neq i}} \quad (۱۷.۱)$$

در گذار فاز، انرژی آزاد گیبس باید پیوسته باشد و به علاوه مشتق‌های آن نسبت به n_i (یعنی $\tilde{\mu}_i$) باید یکی باشد. اما محدودیتی بر مشتقات $X = - \left(\frac{\partial G}{\partial Y} \right)_{T, n_j}$ و $S = \left(\frac{\partial G}{\partial T} \right)_{Y, n_i}$ وجود ندارد. از رفتار این مشتق‌ها برای طبقه‌بندی گذار فاز استفاده می‌شود اگر مشتق‌های $\left(\frac{\partial G}{\partial T} \right)$ و $\left(\frac{\partial G}{\partial Y} \right)$ در نقطه گذار ناپیوسته باشند، گذار نوع اول است. اگر این مشتق‌ها پیوسته باشند، مشتق‌های مرتبه بالاتر ناپیوسته باشند، گذار فاز پیوسته نامیده می‌شود. (ارنست بدوا طبقه‌بندی بر اساس ناپیوستگی مشتق درجه n ارائه کرد که با تجربه سازگار نبود. بعضی از مشتق‌های درجه بالا در بیشتر گذارهای فاز نظیر بی‌نهایت می‌شوند.) یک سیستم PVT در نظر می‌گیریم. تابع گیبس باید تابعی کاو نسبت به T و P باشد. برای یک گذار نوع اول شکل زیر را داریم:



شکل ۲.۱



شکل ۳.۱

$$V = V^1 - V^2 = \left(\frac{\partial G}{\partial P}\right)_{T, n_j}^1 - \left(\frac{\partial G}{\partial P}\right)_{T, n_j}^2 \quad (۱۸.۱)$$

$$\Delta S = S^1 - S^2 = \left(\frac{\partial G}{\partial T}\right)_{P, n_j}^1 - \left(\frac{\partial G}{\partial T}\right)_{P, n_j}^2 \quad (۱۹.۱)$$

از رابطه

$$H = G + TS \quad (۲۰.۱)$$

در (T ثابت) در یک گذار فاز مرتبه اول

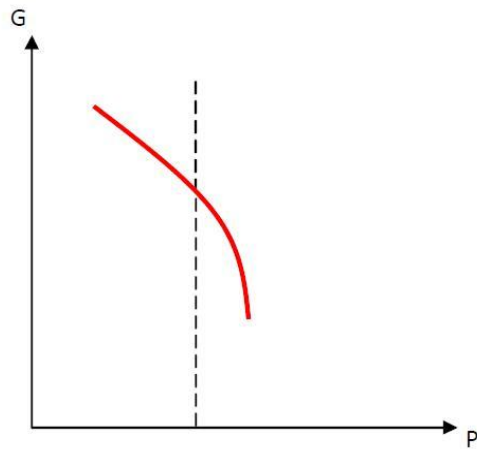
$$\Delta H = \Delta G + T\Delta S \quad (۲۱.۱)$$

$$H^1 - H^2 = \Delta H = T\Delta S \quad (۲۲.۱)$$

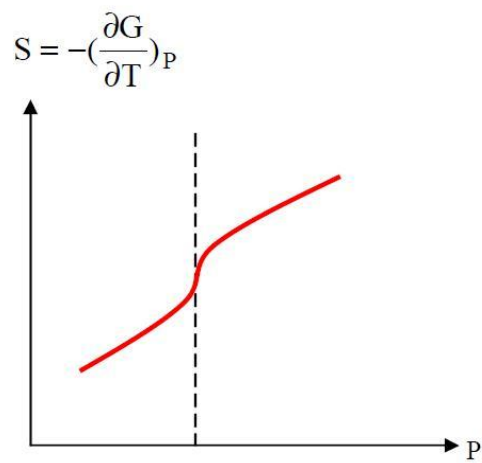
ΔH را گرمای نهان گذار می‌گویند.

برای یک گذار مرتبه دوم، انرژی آزاد گیبس و مشتق‌هایش پیوسته است. اما مشتق دستخوش تغییر شدیدی می‌شود. برای این نوع گذار مشتق دوم است که در نقطه گذار ناپیوسته است که کمیته قابل

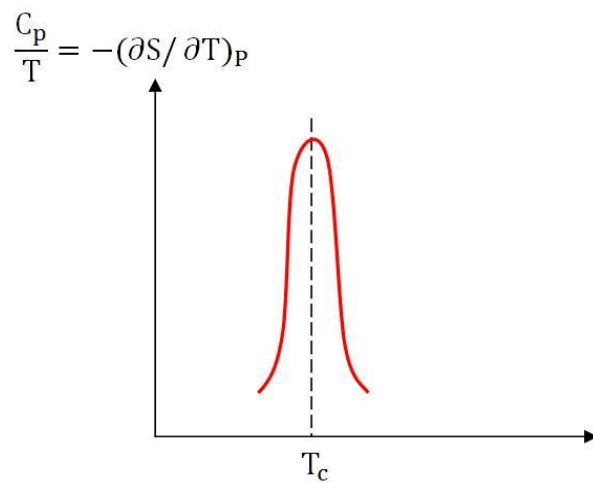
اندازه‌گیری است و معرف یک ظرفیت ویژه می‌باشد.



شکل ۴.۱



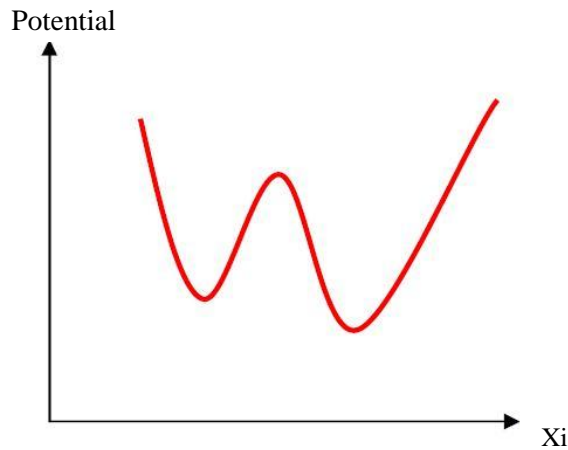
شکل ۵.۱



شکل ۶.۱

۱.۳۱ گذار فاز نوع اول:

یک ظرف بخار آب در فشار یک جو و دمای کمی بیشتر از ۱۰۰ درجه سانتی‌گراد در نظر می‌گیریم. یک زیر سیستم کوچک، یک ناحیه کوچک از این بخار، را در نظر می‌گیریم. این زیر سیستم عملاً در تماس با یک انباره گرما و یک انباره فشار است و شرط تعادل آنست که پتانسیل گیبس $G(T, P, N)$ زیر سیستم می‌نیموم باشد [۵]. (توجه کنید که شرط می‌نیموم بودن پتانسیل گیبس اینست که سیستم با انباره گرما و انباره فشار در تماس باشد یعنی $T = T'$ و $P = P'$ و ثابت باشند: یعنی تغییرات در نقاط می‌نیموم صفر است پس $\Delta P = \left(\frac{\partial G}{\partial V}\right) = 0$) از شرایط تعادل انرژی داخلی U و حجم زیر سیستم بدست می‌آید. در حالت کلی متغیر افزایشی X_i بدست می‌آید (که در اینجا حجم است). برای وقوع یک گذار فاز مرتبه اول، دو حالت باید متمایز از هم و در ناحیه‌های جداگانه‌ای از فضای آرایش ترمودینامیکی باشند. یعنی پتانسیل ترمودینامیکی باید بر حسب X_i دارای (دست کم) دو می‌نیموم موضعی باشد. اگر در مثال فوق هنوز به نقطه گذار نرسیده باشیم، پتانسیل گیبس بر حسب X_i باید به شکل زیر باشد:

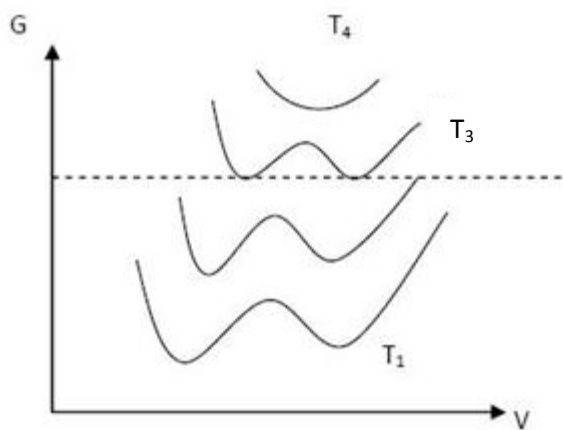


شکل ۷.۱

زیر سیستم مورد نظر ما در می‌نیموم پایین در تعادل پایدار است. توجه کنید که تعادل مربوط به می‌نیموم (یا می‌نیموم‌ها) است که متناظر با مقدار پارامتر داخلی غیر مقید X_i است. مقادیر دیگر X_i با مقادیر مقید پارامتر متناظر است.

در شکل فوق می‌نیموم پایدار متناظر با حجم بزرگ‌تر (یا X_i بزرگ‌تر) یا چگالی کم‌تر است در حالیکه می‌نیموم موضعی ثانوی با حجم کوچک‌تر یا چگالی بیشتر متناظر است. (حالت های گاز و مایع!)
 حال افت و خیزی در حجم را در نظر بگیرید. این افت و خیز سیستم را از حالت همگن اولیه خارج می‌کند. اما ضریب زاویه منحنی پتانسیل که پارامتری غیر افزایشی است، نوعی نیروی باز گرداننده است (در اینجا اختلاف فشار است) و سیستم را به حالت همگن اولیه باز می‌گرداند. گهگاه افت و خیز بزرگی رخ می‌دهد که سیستم را به می‌نیموم ثانوی می‌برد. اما با توجه به سد پتانسیل نسبتاً کم عمق در می‌نیموم ثانوی، دیری نمی‌گذرد که افت و خیز نسبتاً کوچکی بار دیگر سیستم را به حالت اولیه (می‌نیموم اصلی) باز می‌گرداند. اگر عمق سد پتانسیل بزرگ باشد سیستم می‌تواند به مدت درازی در می‌نیموم ثانوی گیر بیفتد (حالت شبه تعادل).

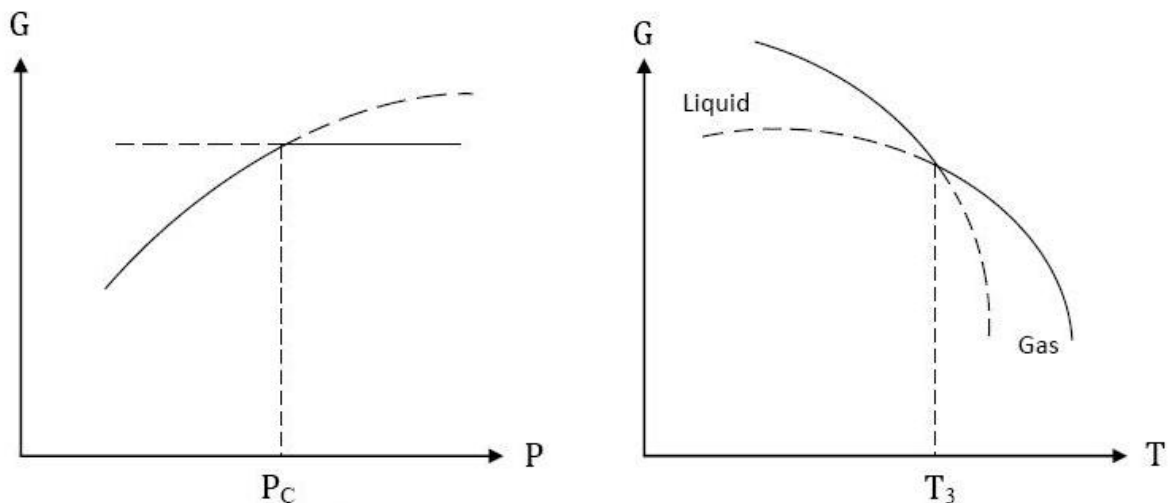
حال به نقطه جوش نزدیک می‌شویم. شکل زیر را داریم



شکل ۸.۱

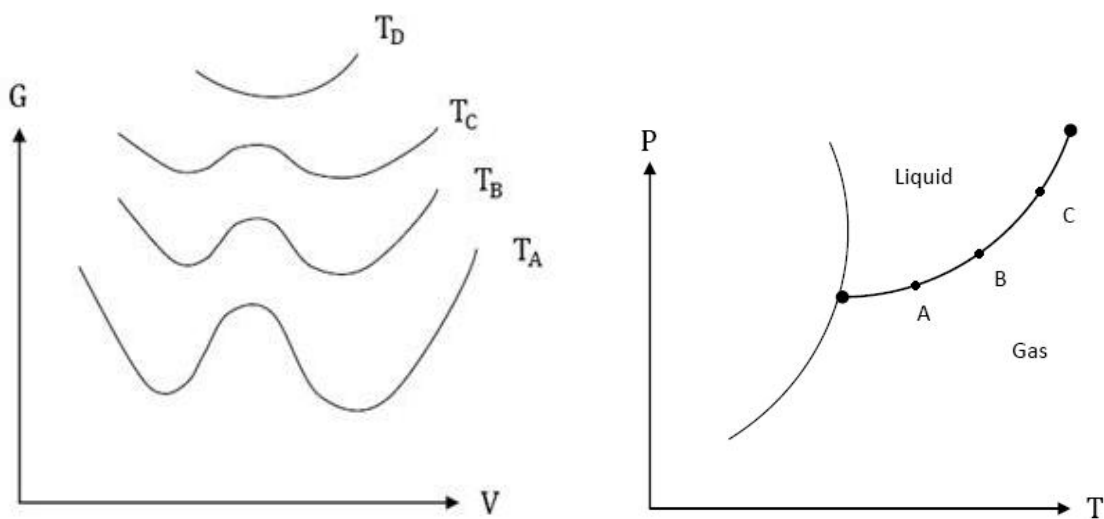
در دمای T_3 دو می‌نیموم برابر می‌شوند. این دمای گذار است. اگر پتانسیل گیبس را در هر یک از

منحنی هایش رسم کنیم، شکلی به صورت زیر خواهیم داشت



شکل ۹.۱

بنابراین تابع گیبس واقعی آنست که با خط چین نشان داده شده است و نا پیوستگی های مشتقات اول مربوط به این تابع است. نقطه T_3 دمای همزیستی دو فاز است، فاز گاز و فاز مایع. حال اگر فشار را تغییر دهیم یک نقطه همزیستی دیگر به دست می آید و نمودار فاز زیر را داریم:



شکل ۱۰.۱

در شکل بالا هر چه در امتداد خم همزیستی (خم فشار بخار) پیش برویم دو می نیموم به یکدیگر نزدیک تر می شوند و دیواره آنها کوتاهتر می شود، یعنی افت و خیزهای کوچکتر می توانند یک فاز را به فاز دیگر مبدل

کنند. معنی این حرف اینست که تمایز دو فاز مایع و بخار کمتر می شود. سر انجام در نقطه D تمایز دو فاز از بین می رود. نقطه D که انتهای خم همزیستی است، نقطه بحرانی نامیده می شود.

۲.۳.۱ گذار فاز نوع دوم:

ویژگی های ترمودینامیکی سیستم در نزدیکی نقطه گذار مرتبه دوم بسیار جالب توجه است به این دلیل که سیستم در حال گذار از لحاظ ماکروسکوپیکی تغییری ندارد و به صورت شهودی نمی توان آن را مشاهده کرد یعنی آرایش ترمودینامیکی ثابتی دارد. سیستم فرومغناطیسی یک مثال از این نوع گذار فاز است که در ادامه مورد بحث قرار می گیرد. در دماهای بسیار پایین در فلزات (برای مثال در آهن) به دلیل اینکه نوسانات گرمایی قابل اغماض می شوند کسر زیادی از اسپین ها (یا دوقطبی های مغناطیسی) به طور خود به خود با هم جهت می شوند در نتیجه یک میدان مغناطیسی قابل اندازه گیری خالص را تولید می کنند. اگر چه با افزایش دما آشفستگی های گرمایی این مغناطیدگی را از بین می برد. دمای بحرانی که که در آن این تغییر رخ می دهد دمای کوری^۷ نامیده می شود (که برای آهن این دما $1044 K$ می باشد).

در دماهای بالا اصطلاحاً فاز سیستم نامنظم است (پارامتر نظم مقدارش صفر است)، مغناطیدگی خالصی وجود ندارد اما تقارن چرخشی آن کامل است، در واقع سیستم همسانگرد است. در دماهای پایین سیستم منظم است (یا پارامتر نظم مقدار غیر صفر دارد)، مغناطش یک جهت مشخص در فضا خواهد داشت اما برعکس حالت قبلی تقارن چرخشی از بین رفته و محیط ناهمسانگرد می شود. با توجه به اینکه مقدار مغناطش کل در یک فاز صفر و در فاز دیگر غیر صفر است می توانیم آن را به عنوان پارامتر نظم انتخاب کنیم. در این مثال خاص دما پارامتر خارجی تاثیر گذار بر سیستم مغناطیسی است، اما نوع دیگری از گذار فاز داریم که در دمای صفر مطلق روی می دهد لذا پارامتر خارجی کمیتی غیر گرمایی مانند فشار میدان مغناطیسی و... است. این نوع گذار فاز را گذار فاز کوانتومی می گوئیم که در بخش ۵.۱ به تفصیل در مورد آن بحث خواهیم کرد.

^۷ Courie temperature

وقتی که در مورد سیستم‌های مغناطیسی بحث می‌کنیم می‌بایست پارامترهای ترمودینامیکی دخیل در روابط ریاضی آن را نیز بدانیم. همانند قسمت قبل که PVT را به عنوان توصیف کننده‌های سیستم نام بردیم در اینجا از \mathcal{HMT} به عنوان کمیات مناسب سیستم استفاده می‌کنیم که در آن میدان مغناطیسی، مانند P یک کمیت نافزونور و $-M$ مغناطش کل سیستم، مانند V کمیت فزونور است. (کمیت نافزونور^۸ کمیتی است که به ابعاد و مقدار ماده سیستم بستگی ندارد اما کمیت فزونور^۹ به مقدار ماده بستگی دارد. به عنوان مثال اگر مقدار دو حجم گاز هم‌نوع را با هم مخلوط کنیم، حجم نهایی سیستم دو برابر می‌شود اما فشار آن ثابت است. چگالی، سرعت، و مقدار ماده، حجم به ترتیب مثال‌هایی از کمیات نافزونور و فزونور هستند)

کار انجام شده توسط سیستم مغناطیسی که بر محیط انجام می‌دهد:

$$dw = -\mathcal{H}dM \quad (23.1)$$

اگر متناظر با قبل گذار فاز با تغییر میدان مغناطیسی خارجی روی داد از تابع پتانسیل گیبس استفاده می‌کنیم، به این دلیل که:

$$G = H - TS \quad (24.1)$$

میدانیم که آنتالپی، کل انرژی درونی سیستم منهای کل انرژی مکانیکی سیستم است:

$$H = \int dU - \int \mathcal{H}dM = U - \mathcal{H}M \quad (25.1)$$

$$dG = dU - \mathcal{H}dM - Md\mathcal{H} - TdS - SdT$$

$$dG = -Md\mathcal{H} - SdT \quad (26.1)$$

$$M = -\left(\frac{\partial G}{\partial \mathcal{H}}\right)_T, \quad S = \left(\frac{\partial G}{\partial T}\right)_{\mathcal{H}} \quad (27.1)$$

همچنین تراوایی مغناطیسی (متناظر با تراکم‌پذیری) معادل رابطه زیر است

$$\chi \equiv \frac{1}{V} \left(\frac{\partial M}{\partial \mathcal{H}}\right) \quad (28.1)$$

^۸ intensive
^۹ extensive

و ظرفیت گرمایی ویژه از مشتق دوم تابع گیبس به دست می‌آید

$$C_{\mathcal{H}} = \left(\frac{\partial Q}{\partial T} \right)_{\mathcal{H}} = -T \left(\frac{\partial^2 G}{\partial T^2} \right)_{\mathcal{H}} \quad (29.1)$$

حال اگر با تغییر مغناطش گذار فاز را ایجاد کنیم باید از تابع هلمهولتز استفاده کنیم. با توجه به (۶.۱) برای سیستم فرومغناطیسی خواهیم داشت:

$$\begin{aligned} dF &= dQ + \mathcal{H}dM - TdS - SdT \\ dF &= \mathcal{H}dM - SdT \end{aligned} \quad (30.1)$$

یعنی با توجه به رابطه بالا گذار را توصیف می‌کنیم.

۴.۱ نقطه بحرانی:

برخی شرایط دمایی (یا متغیر دیگری مثل فشار یا میدان...) وجود دارند که در آن‌ها مرز بین فازها از بین رفته و نمی‌توان تفاوتی بین آن‌ها قائل شد. که در شکل ۸.۱ با T_4 نمایش دادیم این نقطه را نقطه بحرانی می‌گویند. برای توصیف ویژگی‌های فیزیکی سیستم در این نقاط اصولاً از تابع همبستگی^۱ استفاده می‌کنند. در واقع تابع همبستگی ارتباط (همبستگی) یک متغیر در دو نقطه از فضا یا زمان را مشخص می‌کند، و اغلب به صورت تابع مکان یا زمان است. در نقطه بحرانی از آنجایی که مرزی بین فازها وجود ندارد تمام اعضای سیستم بر یکدیگر اثر گذارند یا به عبارت دیگر هر ذره کل اعضا یکدیگر را می‌بینند، در نتیجه طول همبستگی بی‌نهایت می‌شود.

در نقطه بحرانی تابع همبستگی G ، همبستگی فضایی افت و خیزهای پارامتر نظم از مقدار متوسط را بیان می‌کند و به صورت زیر نوشته می‌شود:

$$\begin{aligned} G(\vec{r}, \vec{r}') &= \langle \delta m(\vec{r}) \delta m(\vec{r}') \rangle \\ &= \langle \{m(\vec{r}) - m\} \{m(\vec{r}') - m\} \rangle \\ &= \langle m(\vec{r}) m(\vec{r}') \rangle - m^2 \end{aligned} \quad (31.1)$$

^۱ Correlation function

$m(\vec{r})$ پارامتر نظم موضعی و m متوسط آن است. در حالی که متوسط ترمودینامیکی پارامتر نظم صفر است سیستم در فاز نامنظم قرار دارد و افت و خیزها غیر صفراند. با نزدیک شدن به نقطه بحرانی، همبستگی‌ها فضایی افت و خیزهای کوانتومی، بلند-بردتر می‌شوند. فرض می‌کنیم که همبستگی فضایی پارامتر نظم m به صورت:

$$G(\vec{r}, \vec{r}') = f\left(\frac{|\vec{r}-\vec{r}'|}{\xi}\right) \quad (32.1)$$

باشد که تابع f با یک مقیاس طول ξ افت می‌کند. ξ ، طول همبستگی نامیده می‌شود و فاصله‌ای است که در آن افت و خیزهای سیستم با هم همبسته‌اند. نزدیک نقطه بحرانی، طول همبستگی به شکل زیر واگرا می‌شود:

$$\xi \propto |t|^{-\nu} \quad (33.1)$$

که ν نمای بحرانی طول همبستگی و t یک پارامتر بی بعد است که فاصله تا نقطه بحرانی را نشان می‌دهد و برای گذار فازی که در دمای غیر صفر T_c اتفاق می‌افتد، به صورت $t = \frac{|T-T_c|}{T_c}$ تعریف می‌شود. علاوه بر همبستگی‌های بلند برد در فضا، همبستگی‌های بلند برد پارامتر نظم در زمان نیز وجود دارند. مقیاس زمانی نوعی برای واپاشی افت و خیزها، زمان همبستگی τ_c است. با نزدیک شدن به نقطه بحرانی، زمان همبستگی به صورت زیر واگرا می‌شود:

$$\tau_c \propto \xi^z \propto |t|^{-\nu z} \quad (34.1)$$

که Z نمای بحرانی دینامیکی نامیده می‌شود. نزدیک نقطه بحرانی هیچ طول مشخصه و زمان مشخصه‌ای غیر از ξ و τ_c وجود ندارد.

واگرایی‌های (۳۳.۱) و (۳۴.۱) مسئول پدیده‌های بحرانی هستند. در نقطه بحرانی، طول همبستگی و زمان همبستگی بی‌نهایت می‌شوند. افت و خیزها در همه مقیاس‌های طولی و زمانی اتفاق می‌افتند و سیستم اصطلاحاً ناوردای مقیاسی^{۱۱} می‌شود.

۵.۱ گذار فاز کوانتومی^{۱۲}:

مکانیک کوانتومی برای فهم گذارهای فاز از اهمیت بالایی برخوردار است به این دلیل که مکانیک کوانتومی برای فهم وجود فاز منظم ضروری است (مثل ابررسانایی) که البته به گذار خاص در نظر گرفته شده نیز بستگی دارد [۶].

به این منظور باید دو مقیاس انرژی را مقایسه کنیم. یکی $\hbar\omega_c$ انرژی نوعی افت و خیزهای پارامتر نظم و دیگری، انرژی گرمایی $K_B T$ است. در بخش قبل دیدیم مقیاس زمانی τ_c وقتی به نقطه گذار پیوسته نزدیک می‌شویم، واگرا می‌شود. به طور متناظر، فرکانس نوعی ω_c به سمت صفر میل می‌کند و مقیاس انرژی نوعی، وقتی به نقطه گذار نزدیک می‌شویم:

با توجه به (۳۴.۱) و اینکه می‌دانیم $\omega = \frac{2\pi}{\tau}$ و $\omega \propto \tau^{-1}$ خواهیم داشت:

$$\hbar\omega_c \propto |t|^{\nu z} \quad (۳۵.۱)$$

وقتی که این مقیاس انرژی نوعی $\hbar\omega_c$ بزرگ‌تر از انرژی گرمایی $K_B T$ است، برای توصیف سیستم باید از مکانیک کوانتومی استفاده کرد. به عبارت دیگر، برای محدوده $K_B T \gg \hbar\omega_c$ ، می‌توان از توصیف کلاسیکی برای افت و خیزهای کلاسیکی استفاده کرد. مشخصه پارامتر نظم وقتی $\hbar\omega_c$ کمتر از $K_B T$ می‌شود از کلاسیک به کوانتوم می‌رود.

با این اوصاف، برای هر گذاری که در دمای T_c روی می‌دهد، در ناحیه $|t| < T_c^{-\nu z}$ مکانیک کوانتومی اهمیت خود را از دست می‌دهد. به عبارت دیگر، رفتار بحرانی مجانبی در نزدیکی نقطه گذار، کاملاً کلاسیکی است و افت و خیزهای گرمایی کلاسیکی حاکم بر مقیاس‌های ماکروسکوپی، رفتار بحرانی سیستم

^{۱۱} Scale-invariant
^{۱۲} Quantum phase transition (QPT)