وزارت علوم، تحقیقات و فناوری
دانشگاه تحصیلات تکمیلی علوم پایه
گاوازنگ - زنجان

گذارهای فاز کوانتومی در سیستم $S=1$

پایان‌نامهٔ کارشناسی ارشد

سید روح‌اله اعتصامی

استاد راهنما: استاد محمدرضا خواجه‌پور

فروردین ۱۳۸۸

.

سپاس گذاری می‌کنم از

جناب آقای (ثبوتی، خواجه پور، میری، زارعیان، فضلی، کلاهچی، عبدالهی، فرنودی، ندایی، قدس، یارمحمدی، مبینی، واحدپور، بنی‌آدم، حسنی، ندرلو، حیاتی)

سرکار خانم (ملکی، غفرانی، موسوی)

چکیده

در این پایان نامه گذارهای فاز کوانتومی در مدل فرومغناطیسی بلوم—کاپل در یک میدان مغناطیسی عرضی بررسی می‌شود. مدل مورد نظر یک زنجیرهٔ آیزینگ کوانتومی $S = 1$ است در دمای صفر مطلق که تحت تاثیر یک میدان عرضی خارجی قرار دارد و یک جملهٔ شکافتگی تک ذره‌ایی بلورین (با پارامتر D) بر آن اضافه شده است. دیده می‌شود که سیستم در $T = 0$، در گستره‌ایی از مقادیر D، به ازای یک میدان عرضی مشخص $h_{xc}(D)$ دستخوش گذار فاز پیوسته‌ایی از فاز فرومغناطیسی به فاز پارامغناطیس می شود. در محاسبات، نقطهٔ گذار به دقت تقریب بستگی دارد. در اینجا مدل را نخست در « تقریب‌های میدان متوسط» حل می‌کنیم. برای محاسبهٔ نقاط بحرانی و همچنین نقطهٔ بحرانی سه‌گانه از دنباله‌ایی از تقریب‌های بته و تقریب‌های دو خوشه‌ایی استفاده می‌شود. در هر یک از این دنبالهٔ تقریب‌ها سعی می‌شود که نحوهٔ تغییر نقاط بحرانی با « درجهٔ تقریب» به طور عددی محاسبه شود و از برون‌یابی مناسب، نقطه بحرانی دقیق به دست آید. همچنین رفتار انرژی پایه، گاف انرژی و کمیت‌هایی نظیر مغناطش و پذیرفتاری در نزدیکی نقطه بحرانی مطالعه شده است. برای محاسبهٔ نماهای بحرانی، « روش نابهنجاری هماهنگ» به کار می‌رود که نسبت به مقدار دقیق نقطه بحرانی حساس است. نماهای بحرانی و بحرانی سه‌گانه حاصل از اِعمال این روش به ردهٔ تقریب‌های میدان متوسط، با دقت خوب برابر نماهای بحرانیِ نظیر در مدل آیزینگ دو بعدی کلاسیک در $T \neq 0$ هستند. چنین نتیجه‌ایی با قضیه نگاشت کوانتوم $(T = 0, d)$—کلاسیک $(T \neq 0, d+1)$ سازگار است.

فهرست

چکیده . . . . سه

مقدمه . . . . هفت

۱ نظری اجمالی بر مفاهیم اساسی گذارهای فاز مغناطیسی

۱.۱ فرومغناطیس ۱

۱.۱.۱ مدل آیزینگ ۳

۲.۱ فیزیک گذارفاز ۴

۳.۱ تابع همبستگی ۷

۴.۱ نماهای بحرانی ۹

۵.۱ عامیت ۱۱

۲ نظریه میدان متوسط و نظریه لاندائو

۱.۲ نظریه‌های میدان متوسط ۱۳

۱.۱.۲ تقریب وایس ۱۴
۲.۱.۲ تقریب اوگوشی ۱۶
۳.۱.۲ تقریب بته ۱۷
۴.۱.۲ نظریه میدان متوسط برای یک خوشه عمومی ۱۸
۲.۲ نظریه لاندائو ۱۹
۱.۲.۲ نقطه بحرانی سه‌گانه ۲۱
۲.۲.۲ دامنه اعتبار نظریه میدان متوسط و نظریه لاندائو ۲۳
۳.۲ تقریب دو خوشه‌ای ۲۵
نقطه بحرانی سه‌گانه در تقریب دو خوشه‌ای ۲۷

۳ گذارفاز کوانتومی در مدل بلوم—کاپل با میدان عرضی

۱.۳ گذارفازهای کوانتومی ۳۱
۱.۱.۳ حالت پایه ۳۴
۲.۱.۳ مسیر انتگرال گیری و نگاشت کوانتوم—کلاسیک ۳۵
زنجیر کوانتومی ۳۶
۲.۳ مدل بلوم—کاپل در میدان عرضی ۴۰
۱.۲.۳ تقریب بته ۴۱
نمودار فاز و نقطه بحرانی سه گانه ۴۴
۲.۲.۳ تقریب دوخوشه‌ای ۴۶

۴ روش نابهنجاری هماهنگ و نماهای بحرانی

۱.۴ ارتباط میان نمای بحرانی دقیق سیستم(ϑ_e) و نمای نابهنجار هماهنگ(ψ) ۵۳

۱.۱.۴ محاسبه نماهای نابهنجار هماهنگ برای مدل بلوم–کاپل در میدان عرضی . . . ۵۷

۲.۱.۴ محاسبه نماهای بحرانی دقیق برای مدل بلوم–کاپل در میدان عرضی ۶۵

۲.۴ محاسبه نماهای بحرانی دقیق در نقطه بحرانی سه‌گانه(ناحیهIII) ۶۹

۱.۲.۴ محاسبه مانده‌ها برای تقریب بته ۷۲

پیوست «الف» ۷۵

پیوست «ب» ۷۸

جمع‌بندی ۸۳

برنامه‌ها ۸۴

مراجع ۹۰

مقدمه

پس از دست یابی به مفهوم تقریبی «دما» در قرن هفده میلادی، بررسی علمی پدیده انبساط و انقباض و تغییر فاز ممکن شد و با توسعه فناوری ماشین‌های گرمایی در قرن هجده پژوهش‌ها پیرامون وقوع پدیده‌های گرمایی در جو و در آزمایشگاه آغاز شد. به تدریج دانشمندان دو مفهوم گرمای ویژه و گرمای نهان را مطرح کردند و از اواسط قرن نوزده میلادی علم ترمودینامیک استوار شد. در پایان قرن نوزده میلادی چارچوب منسجم ترمودینامیک قوام گرفت و تابع‌های ترمودینامیکی در مطالعه نظام‌مند این پدیده‌ها فرمول بندی شدند و مورد استفاده قرار گرفتند[۱]. از ارزشمندترین دستاوردهای فیزیک قرن نوزده، نظریه جنبشی گازها و مکانیک آماری به عنوان اساس میکروسکوپی ترمودینامیک بود. بخشی عمده از مفاهیم و روش‌های نظری مرتبط با این تحولات توسط ماکسول [۱] و بولتزمن [۲] صورت بندی شد و سرانجام مکانیک آماری تعادل به شکل کنونی آن تحت تاثیر کارهای گیبس [۳] شکل گرفت[۲].

پدیده‌های فیزیکی گوناگونی در مکانیک آماری مورد بررسی قرار می‌گیرد. در مواردی می‌توان از برهمکنش اجزای میکروسکوپی تشکیل دهنده یک سیستم چشم پوشی کرد. ولی پدیده‌های زیادی هم هستند که در آنها اجزای میکروسکوپی سیستم، دارای برهم‌کنش با یکدیگرند و از این برهمکنش‌ها نمی‌توان چشم پوشید. اکثر پدیده‌هایی که در گروه اول‌اند دارای توابع ترمودینامیکی هموار و تحلیلی هستند. اما وقتی برهمکنش در میان باشد توابع ترمودینامیکی ممکن است در شرایطی خاص تحلیلی نباشند و تکینگی‌هایی را شامل شوند. بررسی‌های گیبس و دیگران در شرایط پایداری سیستم‌ها، شالوده‌های مطالعه گذارفاز را فراهم آورد. در سیستم‌هایی که از اجزای برهمکنش کننده تشکیل شده باشد، اجزای میکروسکوپیک سازندهٔ سیستم در دماهای کم کنش‌هایی «جمعی» [۴] و تعادلی از خود بروز می‌دهند. وجود همین رفتارهای جمعی است که در شرایطی ویژه، بحرانی می‌شود و گذار به رفتارهایی دیگر را به نمایش می‌گذارد. این پدیده‌ها را که با تغییر رفتار جمعی

[۱] Maxwell

[۲] Boltzmann

[۳] Gibbs

[۴] Cooperative

ماکروسکوپی سیستم همراه است، گذارهای فاز و در اصطلاح «پدیده‌های بحرانی[5]» می‌نامند.

کارهای آزمایشگاهی برای تحقیق پدیده‌های گذارفاز با مطالعهٔ نقاط بحرانی مایع–بخار توسط آندروز[6] (۱۸۶۹) آغاز شد و وی برای نخستین بار «مه‌آلودگی بحرانی[7]» را مشاهده کرد. این مطالعات نظریهٔ واندروالس[8] (۱۸۷۳) را در پی داشت. تقریباً در همان زمان مطالعه نظام‌مند پدیده‌های مغناطیسی هم آغاز شد و در آغاز قرن بیستم به ارائه نظریه میدان مولکولی توسط وایس[9] (۱۹۰۷) منجر شد. در سال ۱۹۳۷ فیزیکدان روسی، لاندائو نظریه‌ای پدیده‌شناختی[10] و فراگیر در مورد پدیده گذارهای فاز ارائه کرد که چارچوبی را برای کارهای نظری بعدی فراهم ساخت [۳] [۶] [۷].

گذارفاز چنانکه اشاره شد در پدیده‌های طبیعی، امری متداول است و نقشی مهم ایفا می‌کند. عالم از زمان انفجار بزرگ[11] تاکنون گذارفازهای فراوانی را پشت سر نهاده است. در سیستم‌های که وقوع گذارفاز در آنها امکان‌پذیر است، معمولاً به یاری پارامترهایی خارجی می‌توان رفتار سیستم را کنترل کرد (پارامترهای کنترل) و گذارفاز را مشاهده کرد. در نمونه‌هایی از قبیل ذوب شدن برف این پارامتر دما (در فشار جو) T است. در حقیقت در این نمونه‌ها همبستگی افت و خیزها[12]ی گرمایی، رفتار سیستم در گذارفاز را مشخص می‌کند. در سال‌های اخیر نوعی متفاوت از گذارفاز توجه فیزیکدانان را به خود جلب کرده است و آن گذارفازهای است که در دمای صفر مطلق روی می‌دهند. در این گذارفازها پارامترهای کنترل دیگری، جز دما، کنترل رفتار سیستم را میسر می‌سازند. اگر سیستم‌های مورد نظر، سیستم‌هایی کوانتومی با مشاهده پذیرهایی غیر جابه‌جایی باشند، افت و خیزهای سیستم ریشه در اصل عدم قطعیت هایزنبرگ دارند.

شاید در نگاه اول تصور شود که محدود بودن این گذارها به دمای صفر مطلق از اهمیت آنها بکاهد ولی بروز اثرات آنها در دماهای کم و این که وجود چنین گذارفازهایی کلید حل برخی از معماهای حل نشده فیزیک ماده چگال‌اند، اهمیت آنها را آشکار ساخته است.

---

[5] Critical Phonomana

[6] Andrews

[7] critical opalescence

[8] Van der Waals

[9] Weiss

[10] phenomenologicaly

[11] Big Bang

[12] fluctuations

اگر دو حالت از یک ماده(مثلاً جامد و مایع) را در نظر آوریم نیروی بین اتم‌ها و مولکول‌ها(و یا پتانسیلی که این نیرو از آنها مشتق می‌شود) تعیین کننده ساختار ماده و تحول آن با گذر زمان هستند. به عبارت دیگر نیروهای بین مولکولی عاملی برای ظهور مواد در فازهای متفاوت‌اند. بطور کلی منظور از فاز، قسمتی همگن از یک سیستم است که‌از قسمت‌های دیگر به وسیله مرزی کاملا مشخص جدا شده باشد و از لحاظ فیزیکی با آن قسمت‌ها فرق داشته باشد. بنابراین برای مطالعه پدیده گذار فاز می‌بایست از پتانسیل‌های بین مولکولی یا برهمکنش‌های میان ذرات آگاهی حاصل کرد و به کمک مکانیک آماری خواص فیزیکی سیستم را به دست آورد.

اگر از چشم انداز ریاضیات به این پدیده بنگریم، شاهدیم که گذارفاز زمانی روی می‌دهد که تکینگی در انرژی آزاد و یا یکی از مشتقاتش به وقوع بپیوندد که اغلب اوقات با تغییری بسیار شدید در یکی از ویژگی‌های ماده همراه است. به اعتبار رفتار همین مشتقات می‌توان به تقسیم بندی گذارهای‌فاز پرداخت. اولین تقسیم‌بندی توسط اهرنفست[۱۳] صورت پذیرفت[۱]. در گذارفازهای مرتبه اول مشتق مرتبه اول انرژی آزاد ناپیوسته است و امروزه همه گذارفازهایی را که مرتبه اول نیستند گذارفاز مرتبه‌دوم یا پیوسته و یا گذارفار نقطه بحرانی می‌نامند.

به عنوان نمونه، در یک شاره تکینگی‌ها را می بایست در انرژی آزاد گیبسG جستجو کرد :

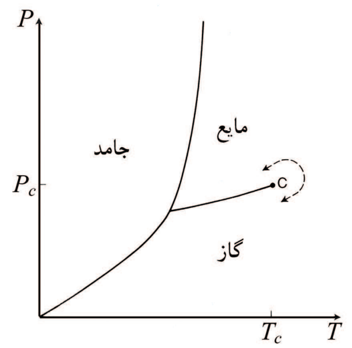
$$G = U - TS + PV.$$

که در آن U انرژی داخلی، S آنتروپی و P فشار است. نمودار فاز یک شاره در شکل(۱ـــ۰) آورده شده است. گذار از هریک از مرزها با جهشی در چگالی و همچنین آنتروپیS همراه است، که جهش در آنتروپی بیانگر وجود گرمایی نهان در حین گذار است. هم جهش در چگالی و هم وجود گرمای نهان از مشخصات بارز یک گذار فاز مرتبه اول هستند.

اگر در امتداد خط همزیستی گاز—مایع حرکت شود مشاهده می شود که هر چه بر میزان دما افزوده شود از اختلاف چگالی بین گاز و مایع کاسته می‌شود، به گونه‌ای که در نقطه‌ای ویژه این اختلاف صفر می‌شود. این نقطهT_c را نقطهٔ بحرانی می‌نامند و گذارفاز در این نقطه گذاری مرتبه دوم است. در عین حال اختلاف بین چگالی گاز و چگالی مایع در دمایی پایینتر از نقطه بحرانی غیرصفر است که این اختلاف چگالی تحت عنوان «پارامتر نظم[۱۴]» برای گذار مایع—گاز شناخته می‌شود.

[۱۳] Ehrenfest

[۱۴] order parameter

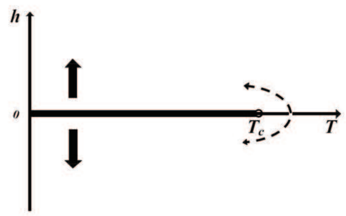


شکل ۰—۱: نمودار فاز یک شاره.

رفتار مشابهی را می‌توان در گذار فازهای مغناطیسی دید. در این حالت انرژی آزاد به شکل زیر اختیار می‌شود:

$$A(m) = U(m) - TS.$$

که در آن U علاوه بر دما تابعی از مغناطش m سیستم است. در شکل (۰—۲) نمودار فاز یک فرومغناطیس ساده، با دو فاز $m(\uparrow)$ و $-m(\downarrow)$، نشان داده شده‌است. شبیه حالت همزیستی گاز—مایع در اینجا شاهد خطی هستیم که بیانگر گذاری مرتبه اول است و در میدان مغناطیسی خارجی $h = 0$ روی می‌دهد و به نقطه‌ای بحرانی T_c ختم می‌شود. هنگام عبور از مرز بین دو فاز در دمایی کمتر از دمای بحرانی با یک جهش در میزان مغناطش m سیستم مواجهیم، در حالی‌که در دماهای بالاتر از دمای بحرانی دو فاز $\uparrow$ و $\downarrow$ از هم غیر قابل تمیزاند. در این مورد پارامتر نظم را بر میزان مغناطش سیستم اطلاق می کنند. تغییرات پارامتر نظم براساس تغییرات دما در شکل (۱—۱) آورده شده‌است.



شکل ۰—۲: نمودار فاز یک فرومغناطیس.

می‌بایست توجه داشت که اگرچه در حین گذار از نقطه بحرانی مغناطش بطور پیوسته تغییر می‌کند اما، مشتقات آن ناپیوسته‌اند و بنابراین تابع پاسخی مثل پذیرفتاری در این نقطه واگراست.

در ادامه به مفاهیم اساسی مرتبط با پدیده گذارفاز می‌پردازیم. سپس در فصل دو به روش‌های حل تقریبی این پدیده اشاره می‌کنیم. در فصل سه مبحث گذارفاز کوانتومی را باز کرده، ارتباط آن با گذارفازهای کلاسیک را مطرح می‌کنیم و سپس مدل مورد مطالعه را معرفی می‌کنیم. در انتهای فصل سه با اعمال روش‌های میدان متوسط توصیفی کیفی از رفتار سیستم مورد مطالعه ارائه می‌دهیم. همچنین به محاسبه نقاط بحرانی و نقطه بحرانی سه‌گانه توسط تقریب‌های بته و تقریب دو خوشه‌ایی همت می‌گماریم. و سرانجام در فصل چهار روش نابهنجاری هماهنگ را معرفی کرده و سعی می‌کنیم با اعمال آن، نماهای بحرانی و نماهای بحرانی سه‌گانه حاصل از روش‌های میدان متوسط را بهبود بخشیم.

فصل اول

نظری اجمالی بر مفاهیم اساسی گذارهای فاز مغناطیسی

۱.۱ فرومغناطیس

مطالعه پدیده‌های بحرانی و گذارهای‌فاز، در حالت کلی، به دلایل مفهومی و ریاضی بسیار دشوارند، مخصوصاً اگر به دنبال جواب‌های تحقیقی و دقیق آنها باشیم. از این رو باید به مدلی برای توصیف برهم‌کنش میان ذرات روی آورد که حل آن به‌طور قابل توجهی ساده باشد و در عین حال ویژگی‌های اساسی این پدیده‌های جمعی را به وضوح بنمایاند. با این حال ساده‌ترین مدل‌ها نیز ساختار ریاضی غنی دارند و حل تحلیلی آنها علی‌رغم ظاهر ساده آنها، بسیار مشکل است و چه بسا که جز از طریق محاسبات عددی و کامپیوتری میسر نباشد.

یک دسته بزرگ از سیستم‌های دربردارنده گذار فاز را می‌توان این گونه توصیف کرد[۴] : «آرایه‌هایی بر شبکه‌ایی d بعدی که در آن فقط نزدیکترین همسایه‌ها با یکدیگر برهم‌کنش دارند و اندازهٔ این برهم‌کنش‌ها هم فقط به نحوهٔ اشغال نزدیکترین همسایه‌ها بستگی دارد.»

در اینجا ما فقط به مسئلهٔ یک فرومغناطیس می‌پردازیم. شبکه‌ای را در نظر می آوریم که هریک از N جایگاه شبکه آن توسط اتمی اشغال شده که دارای یک گشتاور مغناطیسی $\vec{\mu}$ بااندازهٔ $g\mu_B\sqrt{J(J+1)}$ است. J تکانه زاویه‌ای هر اتم است. در این صورت $(2J+1)^N$ پیکربندی متفاوت در شبکه میسر است.

برای محاسبه انرژی برهم‌کنش میان دو ذره همسایه، خود را به حالتی محدود می‌کنیم که $J=S=\frac{1}{2}$. از مکانیک کوانتومی می‌دانیم که انرژی میان دو ذره همسایه هم با اسپین $\vec{S_i}$ و $\vec{S_j}$ به شکل $\epsilon_{ij}=K_{ij}\pm J_{ij}$ است که علامت + مربوط به حالتی است که اسپین‌ها ناموازیند و علامت − مربوط به حالتی است که اسپین‌ها موازی یکدیگرند. K_{ij} بیانگر انرژی کولنی بین دو ذره و J_{ij} بیانگر انرژی تبادلی[1] آنها می‌باشد که در یک فرومغناطیس مقداری مثبت است.

تفاوت انرژی میان حالتی با اسپین‌های موازی و حالتی با اسپین‌های ناموازی به صورت زیر است:

$$\epsilon_{\uparrow\uparrow}-\epsilon_{\uparrow\downarrow}=-2J_{ij}.$$

اگر $J_{ij}>0$، اسپین‌ها تمایل به موازی شدن با یکدیگر را دارند که در یک سیستم ماکروسکوپی، به مغناطشی متناظر با حالت فرومغناطیسی منجر می‌شود.

می‌توان رابطه بالا را به صورت خلاصه‌تر نوشت:

$$\epsilon_{ij}=Const.-2J_{ij}(\vec{S_i}.\vec{S_j}).$$

به‌دلیل افت سریع انرژی تبادلی J_{ij} با فاصله جدایی میان دو اسپین، به‌عنوان تقریب اول می‌توان J_{ij} را برای همه جفت‌ها به‌جز جفت‌های همسایه صفر گرفت. بنابراین انرژی ناشی از برهمکنش‌های جفت ذره‌ای را برای کل اسپین‌ها این گونه می‌توان نوشت:

$$E=Const.-2J\sum_{<ij>}(\vec{S_i}.\vec{S_j})$$

که $<ij>$ به معنی جمع روی نزدیکترین همسایه‌ها است. مدلی که انرژی آن با رابطه بالا داده می‌شود را مدل هایزنبرگ[2] (۱۹۲۸) می‌نامند.

[1] exchange energy

[2] Heisenberg

۱.۱.۱ مدل آیزینگ

اگر در مدل هایزنبرگ حاصل‌ضرب $\vec{S_i}.\vec{S_j}$ با حاصل‌ضرب $s_i^z s_j^z$ جایگزین شود مدل آیزینگ [۳] حاصل می‌شود. معمولا هامیلتونی مدل آیزینگ به‌صورت کلی‌تر زیر نوشته می شود:

$$H = -J \sum_{<ij>} s_i^z s_j^z - h \sum_i s_i^z,$$

که در آن h میدان مغناطیسی خارجی است. جمله اول در سمت راست عامل رفتار جمعی است و احتمال وجود یک گذارفاز را تعیین می‌کند. وقتی $J = ۰$ معادله بالا بیانگر هامیلونی مجموعه‌ای از N اسپین آزاد است که در آن تنها عامل مؤثر در نظم دادن به اسپین‌ها، میدان خارجی h است. در این حالت هیچ اثر جمعی و درنتیجه هیچ گونه گذارفازی نداریم. این مدل نخستین بار به صورت یک مدل دو حالته $s^z = \pm ۱$ توسط لنز [۴] (۱۹۲۰) مطرح شد و در بعد $d = ۱$ توسط شاگردش یعنی آیزینگ (۱۹۲۵) بررسی شد[۴].

حل مدل آیزینگ در یک بعد آسان است، اما صورت‌های اندکی پیچیده‌تر آن که بعداً به آنها اشاره خواهد شد به دلیل وجود گذارفاز در دمای صفر از موقعیت ویژه‌ای برخوردار است. حل مدل آیزینگ در حالت دو بعدی و در میدان صفر مسئله‌ای دشوار است و تابع پارش و برخی از توابع ترمودینامیکی آن نخستین بار توسط لارس انزاگر [۵] (۱۹۴۴) بطور دقیق محاسبه شده اند. (یکی از ابزار حل مسائل مرتبط با گذارفاز، ماتریس انتقال [۶] است که در پیوست «الف» به آن اشاره شده است.)

در مدل آیزینگ اسپین‌ها با یکدیگر جابه‌جا می‌شوند، بنابراین می‌توان آنها را به صورت پارامترهایی کلاسیکی در نظر آورد و از دید مکانیک آماری کلاسیک به مطالعهٔ آن پرداخت. علی رغم سادگی مدل آیزینگ این مدل به طور گسترده برای شرح هر سیستم دارای برهمکنشی که اجزای آن دو حالت اختیار کنند قابل استفاده است.

---

[۳] Ising model

[۴] Lenz

[۵] Lars Onsager

[۶] transfer matrix

به‌عنوان‌مثال برای گذارهای نظم‌بی‌نظمی [۷] در آلیاژهای‌دوتایی [۸] و یا برای مدل‌های گاز روی شبکه [۹].

البته برای برخی از سیستم‌هایی که اجزای آن بیش از دو حالت را اختیار می‌کنند، می‌توان مدل‌های آیزینگی با اسپین‌های بالاتر با جملات خاص تعبیه کرد. به‌عنوان مثال، کلی‌ترین هامیلتونی که برای مدل آیزینگ با اسپین یک می‌توان نوشت به‌صورت زیر است:

$$H = -J\sum_{<ij>} s_i s_j - K\sum_{<ij>} s_i^2 s_j^2 + D\sum_i s_i^2 - L\sum_{<ij>}(s_i^2 s_j + s_i s_j^2) - h\sum_i s_i \qquad ; s_i = \pm 1, 0$$

در حقیقت در رابطه بالا همه جملات ممکنی که به شکل $(s_i)^\alpha (s_j)^\beta$ هستند واردشده‌اند. در عین حال انتظار می‌رود به دلیل بزرگترشدن فضای پارامترها، شاهد رفتارهای بحرانی غنی‌تری نسبت به حالت $s = \pm\frac{1}{2}$ باشیم. در این پایان نامه مدل آیزینگ $s = \pm 1, 0$ که مورد نظر ما است، مدل ساده‌تری است که در آن $K = L = 0$ و $J > 0$ و $D > 0$ اختیار شده‌اند. منشا جملهٔ D در سیستم‌های مغناطیسی، میدان کریستالی است.

۲.۱ فیزیک گذارفاز

مدل آیزینگ را در میدان صفر و برای یک شبکهٔ مربعی درنظر آورید. همانطور که ذکر شد این مدل بطور دقیق حل‌شده و می‌دانیم گذارفازی پیوسته شبیه آنچه در شکل (۰−۲) نشان‌داده شده، دارد.

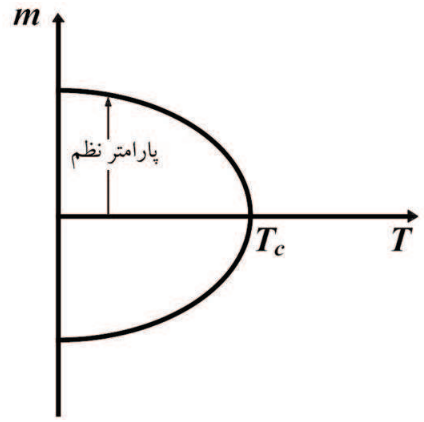
مغناطش در زیر دمای بحرانی غیرصفر است و باکاهش دما به‌سوی مقدار اشباعش می رود(شکل (۱−۱) در دمای $T = 0$). به‌کمک شبیه‌سازی منت کارلو [۱۰] می‌توان نتایج نشان داده شده در شکل‌های (۱−۲)،(۱−۳) و(۱−۴) را به‌دست‌آورد[۵]. مربع‌های سیاه مربوط به $s_i = +1$ و مربع‌های سفید مربوط به $s_i = -1$ می‌شوند. در هر شکل نتایج حاصل از مقیاس‌های گوناگون ارائه شده‌است. مقیاس طول شبکه در (ب) ۳ برابر، در (ج) 3^2 برابر، در (د) 3^3 برابر و در (ه) 3^4 برابر شده است.

[۷] order-disorder transition

[۸] binary alloys

[۹] lattice gas models

[۱۰] Monte Carlo



شکل ۱—۱: مغناطش در غیاب میدان.

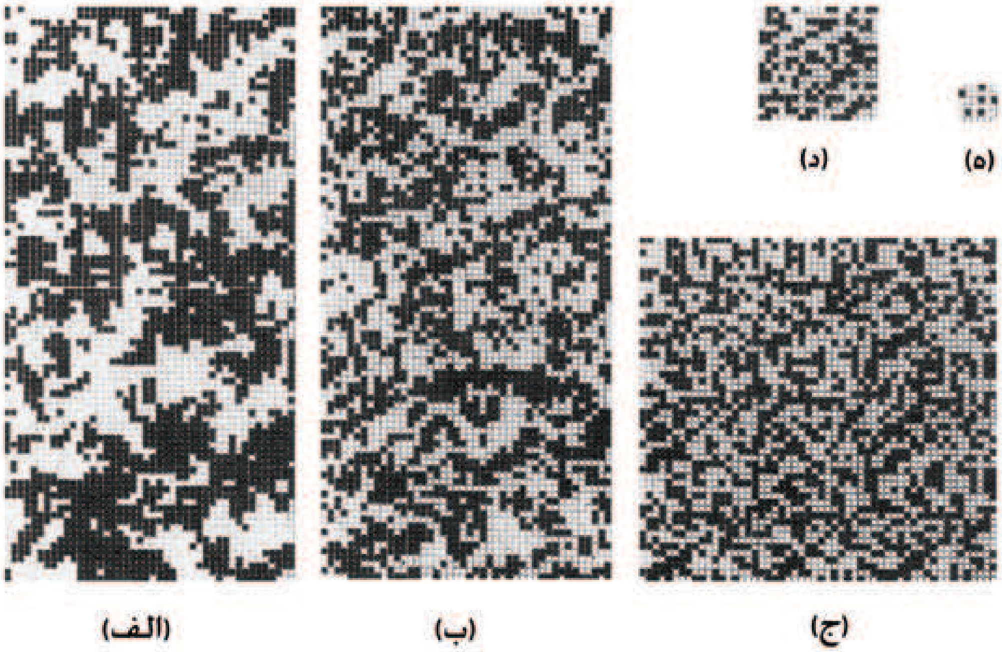
اگرچه در دماهای خیلی بالاتر از دمای بحرانی نیز همسایه‌های نزدیک تمایل به همجهت شدن با یکدیگر را دارند ولی این تنها به صورت اختلالی کوچک در انرژی آزاد وارد شده و همچنان سهم آنتروپی بر سهم انرژی تبادلی غالب است. باکاهش دما اثر برهم‌کنش تبادلی بیشتر آشکار شده و همسایه‌های نزدیک تمایل بیشتری برای همجهت شدن با یکدیگر را پیدا می‌کنند و خوشه‌های از اسپین‌های همجهت یا اسپین‌های همبسته [۱۱] ظاهر می‌شوند. اندازه بزرگترین خوشه‌ها توسط طولی که طول همبستگی نامیده می‌شود، سنجیده می‌شود. در شکل (۱—۲) طول همبستگی از مرتبه چند برابر فاصلهٔ شبکه است. دراین حالت گفته می‌شود که سیستم «نظمی کوتاه برد[۱۲]» را به نمایش گذاشته است. با کاهش دما طول همبستگی افزایش می‌یابد، با وجود این می‌باید توجه داشت که افت و خیزها در مقیاس‌های کوچکتر همچنان بااهمیت هستند.

از ویژگی‌های بارز دمای بحرانی بی‌نهایت شدن طول همبستگی است. در این دما هیچ حد بالایی برای طول همبستگی وجود ندارد به این معنا که ساختار منظم را در هر مقیاسی از طول می توان مشاهده‌کرد (شکل (۱—۳)). این نکته بیانگر فیزیک گذارفاز در نقطهٔ بحرانی و از نمایی میکروسکوپی است: «افت خیزها در همه مقیاس‌های طول مهم هستند.»

در دماهای پایینتر از دمای بحرانی مغناطش صفر نیست و اکثر اسپین‌ها در یکی از دو حالت اسپینی قرار

[۱۱] correlated spins

[۱۲] short range order

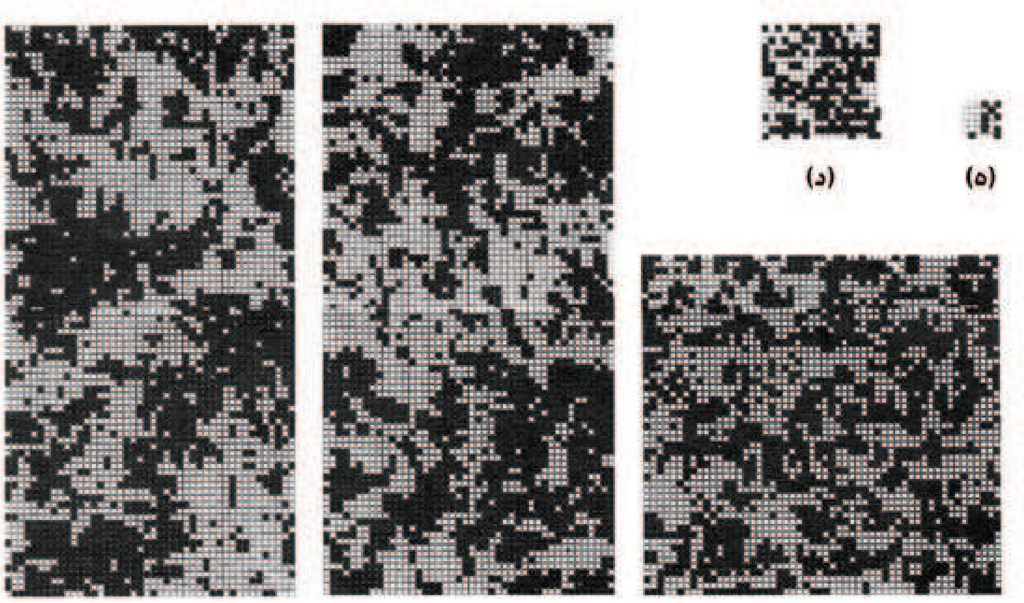


شکل ۱—۲: $T = ۱.۲۲T_c$، [۵].

دارند؛ در این حالت گفته می‌شود که سیستم دارای «نظم بلند برد[۱۳]» است (شکل (۱—۴)). در دمای صفر مطلق به‌دلیل غلبه برهمکنش تبادلی همه اسپین‌ها در یک جهت قرارمی‌گیرند. با افزایش دما ترم آنتروپی در انرژی آزاد منجر به ایجاد افت و خیز در حالت سیستم شده و بنابراین مغناطش از مقدار اشباعش افت پیدا می‌کند. در این حالت طول همبستگی معیاری برای سنجش اندازه بزرگترین افت وخیز نسبت به پس‌زمینه منظم است. هنگامی که دما به سوی مقدار بحرانیش پیش می‌رود طول همبستگی ازدیاد یافته و افت و خیزها از میزان مغناطش سیستم می‌کاهند؛ بگونه‌ایی که در دمای بحرانی مغناطش صفر می‌شود. این درحالی است که طول همبستگی بی‌نهایت است و نظم سابق کاملاً برهم خورده است.

افت وخیزهای بلندبرد در مغناطش برای یک سیستم مغناطیسی تصویری آینه‌وار از افت و خیزهای بلندبرد در چگالی برای یک شاره هستند. اثر این افت و خیزهای بلندبرد را می‌توان با تاباندن نور به شاره‌ای که در دمای بحرانی قرار دارد مشاهده کرد؛ در این دما شاره شیری رنگ به‌نظر می‌رسد. این پدیده را اصطلاحاً «مه آلودگی

[۱۳] long range order



شکل ۱—۳: $T = T_c$، [۵].

بحرانی[۱۴]» می‌نامند[٦].

۳.۱ تابع همبستگی

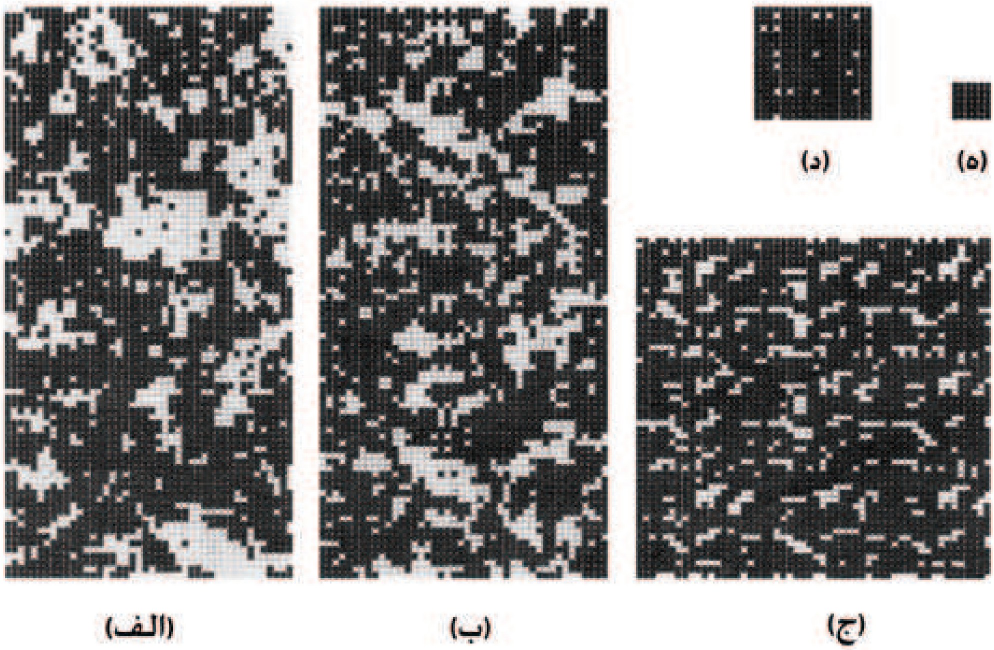
همانگونه که اشاره شد برای درک پدیده گذارفاز می‌بایست از آنچه در نمای میکروسکوپی سیستم می‌گذرد اطلاع حاصل کرد. تابع همبستگی ابزاری است برای حصول به این امر که در مدل آیزینگ فرومغناطیسی به صورت زیر تعریف می‌شود :

$$\Gamma(\vec{r_i}, \vec{r_j}) =< (s_i^z - < s_i^z >)(s_j^z - < s_j^z >) >$$

که در حقیقت بیانگر همبستگی میان دو اسپین در جایگاه‌های i و j است. $< ... >$ بیانگر متوسط گرمایی است.

دور از نقطه بحرانی و هنگامی که فاصله $|\vec{r_j} - \vec{r_i}|$ به بی‌نهایت میل کند، اسپین‌ها ناهمبسته می‌شوند و

[۱۴] critical opalescence



شکل ۱—۴: $T = ۰.۹۹T_c$، [۵].

بنابراین تابع همبستگی به صفر می‌گراید. این نتیجه نه تنها برای دماهای بالاتر از نقطه بحرانی صادق است بلکه برای دماهای پایین‌تر از نقطه بحرانی که در آن مقدار متوسط هر اسپین صفر نیست هم برقرار است؛ توجه می‌شود که تابع همبستگی همواره معیاری برای سنجش تغییرات اسپین هر ذره از مقدار میانگین آن است. می‌توان نشان داد که دور از نقطه بحرانی همبستگی به صورت نمایی کاهش می‌یابد[۷].

$$\Gamma(\vec{r_i},\vec{r_j}) \sim \frac{exp(-|\vec{r_j}-\vec{r_i}|/\xi)}{|\vec{r_j}-\vec{r_i}|}$$

این معادله تعریفی برای طول همبستگی (ξ) فراهم می آورد.

در نقطه بحرانی نظم بلندبرد در سیستم توسعه یافته، طول همبستگی بی‌نهایت می‌شود و رابطه بالا از اعتبار ساقط می شود. تجربه و حل دقیق مدل‌ها نشان می‌دهد که در این حالت تابع همبستگی به صورت توانی کاهش می‌یابد[۷] :

$$\Gamma(r)\Big|_{T=T_c} \sim r^{-(d-۲+\eta)}$$

البته با فرض اینکه Γ به فاصله $|\vec{r_j} - \vec{r_i}|$ بستگی داشته باشد. η ثابتی است که مقدارش به نوع سیستم وابسته است و یک نمای بحرانی محسوب می‌شود. این نما توسط فیشر[۱۵] و برای توجیه نتایج حاصل از آزمایش پراکندگی[۱۶] معرفی شد[۷].

۴.۱ نماهای بحرانی

از جمله مشخصه‌های نقطه بحرانی واگرایی گرمای ویژه و پذیرفتاری است و آنچه که همواره در بررسی پدیده‌های بحرانی از اهمیت بسزایی برخوردار بوده، پی‌بردن به نحوه و شکل این واگرایی‌ها و رفتار تکینگی پاسخ‌های ترمودینامیکی دیگر در نزدیکی نقطه بحرانی بوده است؛ به همین خاطر به تعریف مجموعه‌ای از نماهای بحرانی می‌پردازند.

اگر $t = \frac{T-T_c}{T_c}$ میزانی برای انحراف دما از مقدار بحرانی‌اش باشد، نمای بحرانی مرتبط با با یک تابع $F(t)$ به صورت زیر تعریف می‌شود :

$$\lambda = lim_{t\to \circ} \frac{\ln|F(t)|}{\ln t}$$

و یا به گونه‌ایی معمول‌تر :

$$F(t) \sim |t|^{\lambda}.$$

علامت $\sim$ در رابطه بالا یادآور این نکته است که در تعریف بالا رفتار تابع در حد $t \to \circ$ مد نظر است. تعریف نماهای بحرانی مرتبط با یک سیستم مغناطیسی در جدول (۱ — ۱) آورده شده‌است. برای تفصیل بیشتر می‌توان به مرجع [٦] مراجعه کرد.

---

۱۵ Fisher

۱٦ scattering