

الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية
وزارة التعليم العالي والبحث العلمي

رقم الترتيب:

رقم التسلسل:



جامعة الشهيد حمه لخضر بالوادي
كلية العلوم الدقيقة
قسم الفيزياء



مذكرة تخرج مقدمة لنيل شهادة

ماسٲر أكاديمي

مجال: علوم المادة

تخصص: فيزياء تطبيقية إشعاعات و طاقة

من إعداد:

رزاق محسن عائشة

الموضوع

دراسة عددية لدالة الربط الثنائية في نموذج ايزينغ

نوقشت يوم: 19-06-2019

أمام لجنة المناقشة المكونة من الأساتذة:

رئيسا	أستاذ محاضر - ب-	احميم رشيد
مناقشا	أستاذة محاضرة - ب-	بديدة نصيرة
مؤطرا	أستاذة مساعدة - أ -	سوداني شيرين

الموسم الجامعي: 2019/2018

الإهداء

بعد إتمام هذا العمل المتواضع لا يسعني إلا أن أحمد الله عز وجل
فاتح الأبواب وميسر الصعاب والهادي إلى الصواب أحمدته وأشكره

اهدي هذا العمل إلى جنود الخفاء و من له في القلب مكانا
الى من كانوا سببا في وجودي . أرواحهم لا تفارق روحي
ودعائهم سر نجاحي . الذي يعجز اللسان في وصف فضلهم

وجميلهم . إلى الذين اعتزوا بالإننتساب إليهم

والدين بارك الله فيهما وأطال في عمرهما

إلى أخواتي العزيزات وأخواي العزيزين

والى خالي و كل العائلة

إلى كل صديقتي

إلى كل أساتذة وطلبة الفيزياء

الي كل هؤلاء اهدي ثمرة هذا الجهد

تشكرات

حمدا وثناءنا أولا وأخيرا لله عز وجل على كرم فضله وجزيل نعمه

على أن وفقني في انجاز هذا العمل

وانه لواجب علي الاعتراف بالجميل و أبادر وأتقدم بخالص شكري

وامتناني لأستاذتي المشرفة : سوداني شيرين التي لم تبخل علي

بنصائحها وتوجيهاتها القيمة

كما أتوجه بالشكر والتقدير للأساتذة المناقشين :

أ.احميم رشيد-رئيسا و أ.بديدة نصيرة-مناقشا لقبولهم مناقشة مذكرتي

كما أتقدم بالشكر إلى جميع من ساهم معي في انجاز هذا العمل

ولو بكلمة طيبة

والى كل أساتذة قسم الفيزياء

فهرس المحتويات

- فهرس الأشكال.
- فهرس الجدول.
- فهرس المصطلحات.

1

مقدمة عامة

الفصل الأول: المجموعة القانونية والمجموعة القانونية الصغرى

- | | |
|----|---|
| 4 | 1-1 تمهيد |
| 4 | 2-1 نظام في اتصال مع خزان حراري |
| 5 | 3-1 المجموعة القانونية الصغرى للنظام المدمج |
| 7 | 4-1- المجموعة القانونية |
| 7 | 1-4-1 دالة التوزيع القانونية |
| 7 | 2-4-1 دالة التقسيم |
| 8 | 5-1 الخصائص الترموديناميكية |
| 8 | 1-5-1 الطاقة الداخلية |
| 9 | 2-5-1 الضغط |
| 10 | 3-5-1 الانتروبي |
| 11 | 4-5-1 الطاقة الحرة |
| 11 | 5-5-1 الكمون الكيميائي |
| 12 | 6-5-1 الحرارة النوعية |
| 12 | 6-1 تطبيقات المجموعة القانونية |
| 13 | 7-1 تحويل لابلاس |
| 13 | 8-1 علاقة السعة الحرارية النوعية C_V بتقلبات الطاقة |
| 14 | 9-1 تقلبات الطاقة النسبية |
| 14 | 10-1 بارامغناطيسية |
| 14 | 1-10-1 حالات الطاقة |
| 15 | 2-10-1 متوسط العزم المغناطيسي |
| 15 | 3-10-1 المغنطة |

الفصل الثاني: التحولات الطورية

- | | |
|----|---|
| 17 | 1-2 تمهيد |
| 17 | 2-2 مفهوم الطور |
| 18 | 1-2-2 النقطة الحرجة |
| 18 | 2-2-2 النقطة الثلاثية |
| 18 | 3-2 دالة الانتالي لجيبس |
| 19 | 4-2 الإنتقالات الطورية من الدرجة الأولى |
| 20 | 5-2 شرط التعايش الطوري |
| 20 | 6-2 الانتقال الفيرومغناطيسي |
| 22 | 7-2 تصنيف اهرنفاست من التحولات الطورية |

23	1-7-2 القابلية المغناطيسية
23	2-7-2 شرح المنحنيات
24	3-7-2 انتقال الكثافة
24	8-2 الترتيب المغناطيسي العفوي
25	9-2 تصنيف التحولات الطورية
26	10-2 وسيط الترتيب
26	11-2 مفهوم النقطة الحرجة
26	12-2 الأسس الحرجة
28	13-2 العالمية

الفصل الثالث: نموذج ايزينغ ودالة الربط الثنائية

30	1-3 تمهيد
30	2-3 نموذج ايزينغ والميكانيكا الاحصائية
32	1-2-3 نموذج ايزينغ في d بعد
33	2-2-3 نموذج ايزينغ في بعد واحد
35	3-2-3 نموذج ايزينغ في بعدين
35	3-3 نظرية الحقل المتوسط
38	4-3 طريقة مونت كارلو
40	5-3 الكميات الفيزيائية لنموذج ايزينغ
40	1-5-3 نموذج ايزينغ والانتقال من الدرجة الثانية
41	2-5-3 المحاكاة في نموذج ايزينغ
42	3-5-3 المغنطة في نموذج ايزينغ
43	4-5-3 الطاقة في نموذج ايزينغ
44	5-5-3 السعة الحرارية القابلية المغناطيسية في نموذج ايزينغ
45	6-3 دالة الربط الثنائية
47	7-3 برنامج الفورترون
48	8-3 شفرة الفورترون
49	9-3 مناقشة النتائج و التفسير
51	خاتمة عامة
53	المراجع
55	الملاحق

فهرس الأشكال

الصفحة	عنوان الشكل	ترتيب الشكل
الفصل الأول: المجموعة القانونية والمجموعة القانونية الصغرى		
6	دالة توزيع الطاقة	(1-1)
الفصل الثاني: التحولات الطورية		
17	المخطط الطوري للماء	(1-2)
18	منحنى طوري للماء يوضح مستوى الضغط والحجم	(2-2)
19	منحنى طوري للماء يوضح مستوى الضغط ودرجة الحرارة	(3-2)
20	منحنى الكثافة لانتقال المرحلة	(4-2)
21	ظاهرة التباطؤ	(5-2)
22	مخطط الانتقال	(6-2)
23	منحنى طوري للطاقة ودرجة الحرارة والسعة الحرارية	(7-2)
24	تطور الانتروبي بدلالة درجة الحرارة	(8-2)
24	تغيرات الكثافة بدلالة درجة الحرارة	(9-2)
25	تغيرات المغناطيسية بدلالة درجة الحرارة	(10-2)
الفصل الثالث: نموذج ايزينغ ودالة الربط الثنائية		
30	نموذج تخطيطي لسبين فيرومغناطيس الحديد في نموذج ايزينغ	(1-3)
33	نموذج ايزينغ في بعد واحد	(2-3)
37	طريقة الاسترخاء	(3-3)
38	حل معادلة الحقل المتوسط باستخدام عملية الاسترخاء	(4-3)
41	نموذج ايزينغ في الشروط الحدودية	(5-3)
41	المغنطة بدلالة الزمن لنموذج ايزينغ على شبكة مربعة 10×10 في درجات حرارة مختلفة	(6-3)
43	المغنطة العفوية كدالة لدرجة الحرارة لنموذج ايزينغ على شبكة مربعة 10×10	(7-3)
43	المتوسط الحراري للطاقة بدلالة درجة الحرارة لنموذج ايزينغ على شبكة مربعة 10×10	(8-3)
45	السعة الحرارية المحسوبة باستخدام علاقة تبدد التقلب لشبكة 10×10	(9-3)
46	رسم توضيحي للمحاذاة في شبكة ايزينغ	(10-3)
47	دالة الربط الثنائية المحسوبة من اجل 10×10 في شبكة مربعة	(11-3)
49	دالة الربط الثنائية من أجل شبكة مربعة $LL = 20$	(12-3)
50	دالة الربط الثنائية من أجل شبكة مربعة $LL = 50$	(13-3)

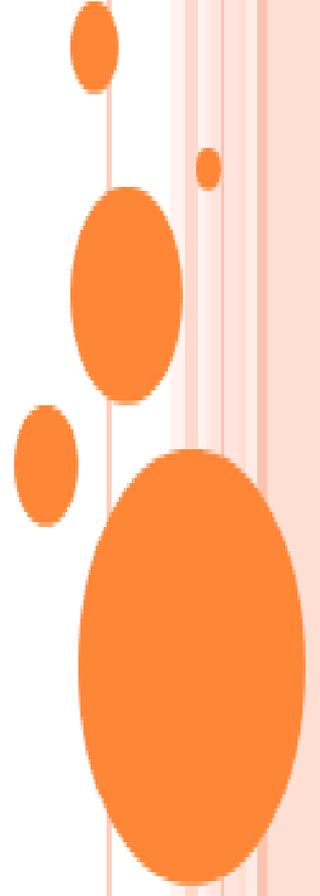
فهرس الجداول

الصفحة	عنوان الجدول	ترتيب الجدول
الفصل الأول: المجموعة القانونية والمجموعة القانونية الصغرى		
7	الفروقات بين المجموعة القانونية والمجموعة القانونية الصغرى	(1-1)
12	خصائص الغاز المثالي بالمجموعة القانونية	(2-1)
14	حالات المغناطيسية	(3-1)
الفصل الثاني: التحولات الطورية		
27	الأسس الحرجة الأساسية للانتقال الفيرومغناطيسي – البارامغناطيسي	(1-2)
27	الأسس الحرجة للانتقال سائل – غاز	(2-2)

فهرس المصطلحات

معناه بالعربية	المصطلح بالانجليزية
سبين	spin
تورس	Torus
التفرد	Singularité
معامل الترتيب	Order parameter
المحاذاة المتوازية	Parallel Alignment
قلب	flip
يلتقط	capture
تأرجحات - تبدد	Fluctuation-dissipation
نموذج ايزينغ	Ising model
الاسترخاء	The relaxation
التباطؤ	hystérésis

المقدمة العامة



المقدمة العامة

التحولات الطورية هي واحدة من تلك الظواهر الفيزيائية التي نجدتها في كل مجال من الفيزياء، تحتوي على كم هائل من الظواهر الفيزيائية، وتحتاج الى قدر لا يستهان به من الرياضيات . التحولات الطورية المعروفة أكثر لدى الكثيرين هي تحولات المادة بين اشكالها الاربعة التي هي الصلب والسائل والغازي والبلازما. لكن هناك ايضا تحولات طورية، مازالت مجهولة الى حد كبير واخرى هي المسؤولة عن الظواهر غير الاضطرابية التي تميز التفاعلات المعيارية التي تتحكم في كل القوى الطبيعية. هناك نوعان اساسيان من التحولات الطورية: التحول الطوري من الرتبة الاولى ويكون فيه الانتقال من طور الى اخر بشكل غير مستمر، ويحدث التحول تحت تأثير تغيير خارجي. والنوع الثاني والاهم هو التحول الطوري من الرتبة الثانية، وهو تحول مستمر ويحدث تحت تأثير القوى الداخلية للجلمة، واغلب التحولات الطورية التي تحدث في الطبيعة هي من هذا النوع [3] .

ظهر نموذج ايزينغ أولاً في الفيزياء الإحصائية كنموذج لوصف التحولات الطورية في المغناطيس [10]. نموذج ايزينغ هو نموذج كان قد اقترحه لنز على تلميذه ايزينغ من اجل دراسة التحول نحو او من الفيرومغناطيسية الذي نشاهده في كثير من المعادن عندما نغير درجة الحرارة. هذا النموذج يمكن أن يوجد في أى بعد. ففي بعد واحد الحل قدمه ايزينغ نفسه في رسالة الدكتوراة خاصته، اما في بعدين الحل قدمه اونساجر الذي حصل من خلاله على نوبل، بينما النموذج في اربعة أبعاد او اكثر يصبح اضطرابي يبقى ثلاثة ابعاد الذي هو أهم الابعاد على الاطلاق، والذي تتواجد فيه الاغلبية الساحقة من التحولات الطورية من الدرجة الثانية الموجودة في الطبيعة، يبقى نموذج ايزينغ في هذا البعد غير محلول [3] .

المغناطيسية هي ظاهرة كمومية بطبيعتها، ومن المثير للاهتمام أن نيلز بور أحد المبدعين في ميكانيكا الكم قد ساهم في مجال المغناطيسية. فقد أظهر أن النظام الكلاسيكي لا يمكنه أبداً إظهار الفيرومغناطيسية. فلم يكن لميكانيكا الكم تواجد بعد لأثبات هذه النظرية ، لذا فإن وجود الفيرومغناطيسيات مثل الحديد دليل واضح ومقنع على أنه لا يمكن وصف الفيزياء الكلاسيكية للعالم بأكمله. العنصر الرئيسي في نظرية المغناطيسية هو سبين الإلكترون والعزم المغناطيسي المرتبط به. تنشأ الفيرومغناطيسية عندما تتعاون مجموعة من هذه السبينات بحيث تتجه كل عزمها المغناطيسية في نفس الاتجاه مما ينتج عنه حالات ماكرو سكوبية. من القضايا المركزية في دراسة الفيرومغناطيسية وهي من أجل فهم كيف يؤدي التفاعل بين السبينات إلى هذا التوافق الشامل [5].

تعطي دالة الربط مقياساً لتشتت المتغير حول قيمته المتوسطة . سنقوم بتوضيح ذلك من خلال النظر في نظام مغناطيسي ثنائي الابعاد موصوف في نموذج ايزينغ , هذا النموذج رغم انه بدائي سيسمح لنا بفهم الفيزياء النوعية التي تقوم عليها ظواهر التحول الطوري و خاصة سلوك النقطة الحرجة [1] .

دراسة هذه التحولات الطورية تعتمد على قياس الكميات الفيزيائية مثل السعة الحرارية , المغنطة و القابلية المغناطيسية لتحديد النقطة الحرجة التي يتم فيها هذا التحول الطوري , يلقي سلوك دالة الربط الثنائية بين السبينات الضوء على الخصائص الفردية الموجودة في النقطة الحرجة , و هدفنا في هذه المذكرة هو دراسة دالة الربط الثنائية بالنسبة لنموذج ايزينغ باستخدام طرق عددية تعتمد على طريقة مونت كارلو و خوارزمية متروبوليس .

المسلمة الاولى للميكانيك الاحصائي التي تنص علي تساوي احتمال الحالات الميكروسكوبية تؤدي مباشرة الي ان اي جملة معزولة في حالة توازن ترموديناميكي يجب ان تنتمي الي مجموعة احصائية مميزة باحتمال ثابت. هذه المجموعة هي ما يعرف باسم المجموعة الميكرواقانونية. ان استعمال المجموعة الميكرواقانونية في التطبيق معقد عموما و بالتالي فاننا نستعمل مكانها تقريبات مثل المجموعة القانونية و هذا ما سنتطرق له في الفصل الأول [9].

في الفصل الثاني سنقوم بالتطرق الي مختلف التحولات الطورية انطلاقا من مفهوم الطور الي غاية مفهوم النقطة الحرجة .

في الفصل الثالث سنتطرق الي نموذج ايزينغ بالاضافة الي طريقة مونت كارلو و خوارزمية ميتروبوليس التي اعتمدنا عليها في دراستنا العددية لدالة الربط الثنائية و قدمنا النتائج التي تحصلنا عليها و مناقشتها .

الفصل الأول:

المجموعة القانونية و المجموعة
القانونية الصغرى

1-1- تمهيد:

تم تخصيص هذا الفصل لدراسة نظام معزول مع نظام أكبر في حالة توازن. وكذا معرفة اي المجموعات مناسبة لهذه الدراسة (المجموعة القانونية او المجموعة القانونية الصغرى)، حيث يربط هذا بين الميكانيكا الإحصائية وميكانيكا الكم وسنستخدم بعض الأمثلة الأولية لتوضيح الروابط بين المشاكل في الإحصاء وفي ميكانيكا الكم. في ميكانيكا الإحصاء الكمي ان حساب عدد الحالات الميكروسكوبية الموافقة لحالة ماكروسكوبية معرفة باعطاء (N, T, E) ، بينما في الحالة الميكروسكوبية فإن كل نقطة معرفة في كل لحظة بـ (p_i, r_i) ، في حالة دراسة عدة نقاط (جسيمات) فإن كل نقطة ترسم مسار طور حيث نعتبر هذه الجسيمات تمثل نظام . لذلك ندرس كثافتها بمعادلة ليوفيل التي تصف التطور الزمني لكثافة الاحتمال في فضاء الطور [1]، وتكتب:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \{H, \rho\} = \frac{d\rho}{dt} = 0 \quad (1.1)$$

فما هي المجموعة المناسبة لوصف نظام ليس بمعزول، ولكن في حالة التوازن الحراري مع نظام أكبر؟ للإجابة عليه يجب أن نجد احتمال أن النظام لديه طاقة E [1].

1-2- نظام في اتصال مع خزان حراري:

نعتبر نظامًا صغيرًا A_1 يتميز بـ E_1 و V_1 و N_1 في تفاعل حراري مع خزان حراري A_2 يتميز بـ E_2 و V_2 و N_2 في تفاعل حراري و A_1 يملك درجات حرية أقل من A_2 . اي $A_1 \ll A_2$ [2].

$$N_1 = \text{const} \quad , \quad E_2 \gg E_1$$

$$N_2 = \text{const} \quad , \quad N_2 \gg N_1$$

$$E_1 + E_2 = E = \text{const}$$

كلا النظامين في حالة توازن حراري عند درجة الحرارة T . يسمح الجدار بينهما بالتبادل الحراري ولكن ليس للجسيمات قد يكون النظام A_1 نظام مجهري صغير نسبيًا ، على سبيل المثال زجاجة ماء في بحيرة بينما تعمل البحيرة كمخزن للحرارة A_2 [2].

السؤال الذي نرغب في الإجابة عليه هو التالي: "تحت شروط التوازن، ما هو احتمال وجود النظام الأصغر A_1 في أي حالة ميكروسكوبية خاصة α ذات الطاقة E_α ؟ بطريقة اخرى ما هي دالة التوزيع $\rho = \rho(E_\alpha)$ للنظام A_1 ؟ [2].

نلاحظ أن الطاقة E_1 غير ثابتة فقط إجمالي الطاقة $E_1 + E_2 = E$ للنظام المدمج [2]. دالة الهاميلتون للنظام هي :

$$H(q, p) = H_1(q(1), p(1)) + H_2(q(2), p(2)) \quad (1.2)$$

نستخدم الترميز التالي: $q = (q(1), q(2))$ ، $p = (p(1), p(2))$.

3-1- المجموعة القانونية الصغرى للنظام المدمج:

بما أن النظام المجمع A معزول تعطى دالة التوزيع في فضاء الطور المشترك بواسطة دالة التوزيع $\rho(q, p)$ في المجموعة القانونية الصغرى [2].

$$\int dq dp \delta(E - H) = \Omega(E) \quad , \quad \rho(q, p) = \frac{\delta(E - H(q, p))}{\int dq dp \delta(E - H(q, p))} \quad (1.3)$$

حيث $\Omega(E)$ هي عدد الحالات الميكروسكوبية الممكنة .

للبحث عن A_2 حيث ان دالة للتوزيع عبارتها ليست $\rho(q, p) = \rho(q(1), p(1), q(2), p(2))$ للنظام ككل A التي نحن مهتمون به لكن دالة التوزيع $\rho_1(q(1), p(1))$ للنظام الصغير A_1 و بالتالي نحتاج لتتبع النظام A_2 , حيث :

$$\rho_1(q(1), p(1)) \equiv \int dq(2) dp(2) \rho(q(1), p(1), q(2), p(2)) \quad (1.4)$$

$$= \frac{\int dq(2) dp(2) \delta(E - H_1 - H_2)}{\Omega(E)} \quad (1.5)$$

$$\equiv \frac{\Omega_2(E - H_1)}{\Omega(E)} \quad (1.6)$$

حيث: $\Omega_2(E_2) = \Omega(E - H_1)$ هي كثافة فضاء الطور للنظام A_2 .

نستفيد من حقيقة أن A_1 هو نظام أصغر بكثير من A_2 وبالتالي فإن الطاقة E_1 التي تعطىها H_1 أصغر بكثير من طاقة النظام المدمج أي: $E_1 \ll E$
في هذه الحالة يمكننا تقريب (1.6) من خلال نشر اللوغاريتم لـ $\Omega_2(E_2) = \Omega_2(E - H_1)$ حول $E = E_2$:

$$\ln \Omega_2(E_2) = \ln \Omega_2(E - H_1) \cong \ln \Omega_2(E) - \left[\frac{\partial \ln \Omega_2}{\partial E_2} \right]_{E_2=E} H_1 + \dots \quad (1.7)$$

وبإهمال شروط الترتيب العليا أي $E_1 = H_1 \ll E$ [2].

وتعطى الانتروبي بالعبارة:

$$S = k_B \ln \left(\frac{\Gamma(E, V, N)}{\Gamma_0} \right) = k_B \ln \left(\frac{\Omega(E)\Delta}{\Gamma_0} \right) \quad , \quad \Gamma(E, V, N) \approx \Omega(E)\Delta \quad (1.8)$$

حيث Δ هي عرض قذيفة الطاقة و Γ هي حجم فضاء الطور [2] .

يمكن استخراج عامل بولتزمان باستخدام العلاقة (1.8) للنظام الأكبر A_2 ، وبالتالي يمكننا إعادة كتابة (1.7):

$$\Omega_2(E - H_1) = e^{\left[\ln \Omega_2(E) - \frac{\partial \ln \Omega_2(E_2)}{\partial E_2} \Big|_{E_2=E} H_1 + \dots \right]} \quad (1.9)$$

$$= \Omega_2(E) e^{\left[-\frac{H_1}{k_B T_2} \right]} \quad (1.10)$$

درجة الحرارة T_2 للخران الحراري A_2 بأي كمية صغيرة من الطاقة التي يعطيها النظام A_2 الكبير للنظام الصغير A_1 . حيث يقترن النظامين حرارياً أي $T_1 = T_2 = T$. نجدها من خلال العلاقة (1.6):

$$\rho_1(q(1), p(1)) = \frac{\Omega_2(E)}{\Omega(E)} e^{-\frac{H_1}{k_B T}} \propto e^{-\frac{H_1}{k_B T}} \quad (1.11)$$

حيث العامل $e^{-\frac{H_1}{k_B T}}$ هو عامل بولتزمان [2].

و بالتالي الاحتمال P_α لإيجاد النظام A_1 (الموجود في التوازن الحراري مع الخزان الحراري A_2) في حالة ميكروسكوبية α مع الطاقة E_α يتم إعطاؤه بواسطة توزيع بولتزمان :

$$P_\alpha = \frac{e^{-\beta E_\alpha}}{\sum_\alpha e^{-\beta E_\alpha}} \quad (1.12)$$

ويعبر الاعتماد الأسي لـ P_α على E_α في المعادلة (1.11) عن هذه الحقيقة من الناحية الرياضية.

المجموعة التي تصف خزان حراري عند درجة الحرارة T تسمى المجموعة القانونية، مع عامل بولتزمان $e^{-\beta E_\alpha}$ الذي يصف التوزيع القانوني (1.11) [2].

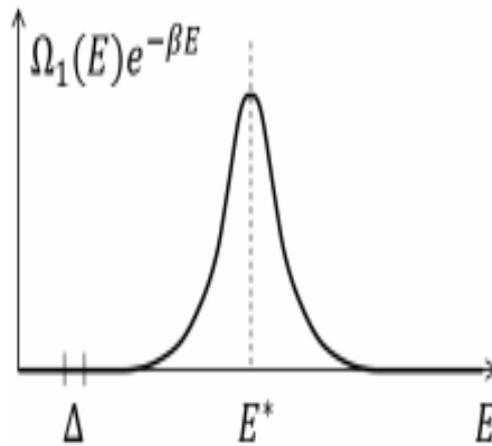
حيث توزيع بولتزمان (1.11) يعطي الاحتمال P_α لإيجاد حالة ميكروسكوبية فردية α . هناك بشكل عام العديد من الحالات الميكروسكوبية من أجل طاقة معطاة، أي:

$$P(E) = \sum_{E < E_\alpha < E + \Delta} P_\alpha \propto \Omega(E) e^{-\beta E} \quad (1.13)$$

$\Omega(E) = \Omega_2(E)$ هي دالة توزيع الطاقة وهي كثافة فضاء الطور و تتطور كالتالي :

- $P(E)$ يتناقص بسرعة مع زيادة الطاقة بسبب عامل بولتزمان $e^{-\beta E}$.
- يتناقص بتناقص الطاقة بسبب تناقص كثافة فضاء الطور $\Omega(E)$.

وبالتالي كثافة الطاقة تبلغ ذروتها بشكل حاد كما هو مبين في الشكل ادناه [2].



الشكل (1-1): دالة توزيع الطاقة

4-1- المجموعة القانونية :

1-4-1- دالة التوزيع في المجموعة القانونية:

تكون $\frac{\Omega_2(E)}{\Omega(E)}$ في (1.11) مستقلة عن H_1 وبالتالي نحصل على طبيعة دالة التوزيع ρ_1 بشكل آخر عن طريق الدمج على فضاء الطور لـ A_1 كالتالي :

$$\rho_1(q(1), p(1)) = \frac{e^{-\beta H_1(q(1), p(1))}}{\int dq(1) dp(1) e^{-\beta H_1(q(1), p(1))}} \quad , \quad \beta = \frac{1}{k_B T} \quad (1.14)$$

نعيد كتابة دالة التوزيع (1.14) من المجموعة القانونية كما يلي:

$$\rho(q, p) = \frac{e^{-\beta H(q, p)}}{\int d^{3N}q d^{3N}p e^{-\beta H(q, p)}} \quad (1.15)$$

حيث أسقطنا جميع المؤشرات "1" من أجل التبسيط على الرغم من أننا في الواقع لا نزال نصف خصائص نظام "صغير" (ومع ذلك كبير مجهريا) في حالة التوازن مع خزان حراري [2].

1-4-2- دالة التقسيم:

يتم تعريف دالة التقسيم القانونية Z_N :-

$$Z_N = \int \frac{d^{3N}q d^{3N}p}{h^{3N} N!} e^{-\beta H(q, p)} \quad (1.16)$$

وتتناسب مع دالة التوزيع القانونية $\rho(q, p)$ لكن مع اختلاف في الاستنظام ومشابه لحجم الفضاء في المجموعة القانونية الصغرى $\Gamma(E)$ في وحدات Γ_0 .

$$\frac{\Gamma(E)}{\Gamma_0} = \frac{1}{h^{3N} N!} \int_{E < H(q, p) < E + \Delta} d^{3N}q d^{3N}p \quad (1.17)$$

$$= \int \frac{d^{3N}q d^{3N}p}{h^{3N} N!} (\delta(E + \Delta - H) - \delta(E - H)) \quad (1.18)$$

حيث δ دالة ديراك [2].

لقد رأينا ان العمليات الحسابية في المجموعة القانونية الصغرى والمجموعة القانونية تقلل من تكامل فضاء الطور وحساب الجهد الديناميكي الحراري [2], و يعطي الجدول ادناه بعض الخصائص لكل من المجموعتين :

المجموعة القانونية	المجموعة القانونية الصغرى	تكامل فضاء الطور
دالة التوزيع $Z_N = \int \frac{d^{3N}q d^{3N}p}{h^{3N} N!} e^{-\beta H(q, p)}$	كثافة الحالات $\Omega_N(E) = \int d^{3N}q d^{3N}p \delta(E - H)$	
$F(T, V, N) = -K_B T \ln Z_N(T)$	$S(E, V, N) = K_B \ln \left(\frac{\Omega_N(E) \Delta}{h^{3N} N!} \right)$	الطاقة الترموديناميكية

الجدول (1-1): الفروقات بين المجموعة القانونية والمجموعة القانونية الصغرى

1-5- الخواص الترموديناميكية:

تعتمد دالة التقسيم على β (أي T) وعلى مستويات الطاقة للجسيمات E وعلى الحجم V وعلى عدد الجسيمات N أي $Z = Z(T, V, N)$

رأينا سابقا ان معرفة دالة التقسيم لنظام تمكننا من حساب الكميات الترموديناميكية وهذا ما سيتم تقديمه فيما يأتي .

1-5-1 الطاقة الداخلية:

تؤخذ في حجم وعدد الجسيمات ثابت بحيث تبقى مستويات الطاقة دون تغيير. الطاقة الداخلية هي متوسط قيمة الطاقة المأخوذة من المجموعة القانونية في الاحتمال $P(E_i)$ ، حيث يتم الحصول على الاحتمال في مستوى الطاقة E_i بالعلاقة :

$$P(E_i) = \frac{\sum_{\{j\}} e^{-\beta E_i}}{Z} = \frac{g_i e^{-\beta E_i}}{Z} \quad (1.19)$$

ومنه متوسط الطاقة $\langle E \rangle$ يكتب:

$$U = \langle E \rangle = \sum_i E_i P(E_i) = \frac{1}{Z} \sum_i \sum_{\{j\}} E_i e^{-\beta E_i} \quad (1.20)$$

حيث:

$$\sum_i \sum_{\{j\}} E_i e^{-\beta E_i} = - \sum_i \sum_{\{j\}} \frac{\partial}{\partial \beta} e^{-\beta E_i} = - \frac{\partial}{\partial \beta} \sum_i \sum_{\{j\}} e^{-\beta E_i} = \frac{\partial}{\partial \beta} Z \quad (1.21)$$

فنجد:

$$\langle E \rangle = - \frac{1}{Z} \left(\frac{\partial Z}{\partial \beta} \right)_{V, N} = - \left(\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta} \right)_{V, N} \quad (1.22)$$

$$\frac{\partial}{\partial \beta} = KT^2 \frac{\partial}{\partial T} \text{ اي } \beta = \frac{1}{KT}$$

ومنه متوسط الطاقة يكتب بالشكل:

$$\langle E \rangle = KT^2 \left(\frac{\partial \ln Z}{\partial T} \right)_{V, N} \quad (1.23)$$

لقد رأينا في بداية الفصل أن المجموعة القانونية تجعل من الممكن وصف نظام في حالة توازن مع خزان حراري، فإذا كانت تقلبات E حول $\langle E \rangle$ صغيرة يمكن عندئذ استبدال المجموعة القانونية التي تصف جملة ذات طاقة مثبتة بالمجموعة القانونية الصغرى لذلك من المهم حساب الانحراف المعياري ΔE المرتبط بالكمية E [1]، ويعرف بالانحراف (جذر التشتت) $(\Delta E)^2$ بواسطة:

$$(\Delta E)^2 = \langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2 \quad (1.24)$$

نعرف سابقا $\langle E \rangle$ وبالتالي نقوم بحساب $\langle E^2 \rangle$

$$\langle E^2 \rangle = \sum_i E_i^2 P(E_i) = \frac{1}{Z} \sum_i \sum_{\{j\}} E_i^2 e^{-\beta E_i} \quad (1.25)$$

بنفس الطريقة السابقة في العلاقة :

$$E_i^2 e^{-\beta E_i} = -E_i \frac{\partial}{\partial \beta} e^{-\beta E_i} = -\frac{\partial}{\partial \beta} E_i e^{-\beta E_i} = \left(\frac{\partial}{\partial \beta} \right)^2 e^{-\beta E_i} = \frac{\partial^2}{\partial \beta^2} e^{-\beta E_i} \quad (1.26)$$

ومنه :

$$\langle E^2 \rangle = \frac{1}{Z} \frac{\partial^2 Z}{\partial \beta^2} \quad (1.27)$$

$$\frac{1}{Z} \frac{\partial^2 Z}{\partial \beta^2} = \frac{\partial}{\partial \beta} \frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \beta} + \frac{1}{Z^2} \left(\frac{\partial Z}{\partial \beta} \right)^2 = \frac{\partial^2}{\partial \beta^2} \ln Z + \langle E \rangle^2 \text{ حيث}$$

وبالتالي :

$$(\Delta E)^2 = \frac{\partial^2}{\partial \beta^2} \ln Z = \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial \beta} \quad (1.28)$$

وباستعمال العلاقة (1.26) و (1.29) نجد:

$$(\Delta E)^2 = KT^2 \left(\frac{\partial \langle E \rangle}{\partial T} \right)_{V,N} = KT^2 C_V \quad (1.29)$$

حيث : C_V هي السعة الحرارية في حجم ثابت و $(\Delta E)^2 \geq 0$ و $\frac{\partial \langle E \rangle}{\partial T} \geq 0$

ونلاحظ هنا ان الطاقة الداخلية تزداد مع درجة الحرارة.

يتم إعطاء التقلبات النسبية للطاقة حول $\langle E \rangle$ بالعلاقة:

$$\frac{\Delta E}{\langle E \rangle} = \frac{KT}{\langle E \rangle} \sqrt{\frac{C_V}{K}} \quad (1.30)$$

1-5-2- الضغط:

يتم أخذ الان في T و N ثابتين ونفترض ان حجم النظام V متغير (حالته الستاتيكية من القيمة V الى القيمة (V + dV) ، هذا التغير يسبب تغير في مستويات الطاقة , فعندما يكون نظام المجموعة في حالة طاقة صغرى E_i ، يعطى الضغط بالعلاقة :

$$P_i = - \left(\frac{\partial E_i}{\partial V} \right)_{T,N} \quad (1.31)$$

إن الضغط المقاس بالمقياس الماكروسكوبي هو متوسط قيمة هذه الكمية المأخوذة على المجموعة القانونية:

$$\langle P \rangle = \sum_i P_i P_i(E_i) = \frac{1}{Z} \sum_i \sum_{\{j\}} \left(- \frac{\partial E_i}{\partial V} \right) e^{-\beta E_i} \quad (1.32)$$

حيث : $\frac{\partial}{\partial V} e^{-\beta E_i} = -\beta e^{-\beta E_i} \frac{\partial E_i}{\partial V}$

و $P_i(E_i)$ هو احتمال التواجد في مستوى الطاقة E_i

ومنه :

$$\langle P \rangle = \frac{1}{\beta Z} \frac{\partial}{\partial V} \sum_i \sum_{\{j\}} e^{-\beta E_i} = \frac{1}{\beta Z} \frac{\partial Z}{\partial V} \quad (1.33)$$

اي:

$$\langle P \rangle = \frac{1}{\beta} \left(\frac{\partial \ln Z}{\partial V} \right)_{T,N} = KT \left(\frac{\partial \ln Z}{\partial V} \right)_{T,N} \quad (1.34)$$

عندما تكون N كبيرة تكون تقلبات P حول $\langle P \rangle$ ضئيلة , أي قياس للضغط يؤدي إلى القيمة $\langle P \rangle$ (التي لا يمكن تمييزها من القيمة P الأكثر احتمالية). لذلك سنلاحظ أحياناً متوسط الكميات الحرارية الديناميكية مثل: $\langle E \rangle$ و $\langle P \rangle$ ببساطة عن طريق P, E [1].

1-5-3- الانتروبي:

لنفترض أن عدد الجسيمات ثابت. تعتمد دالة التقسيم على متغيرين T (أو β) و V :

$$Z = Z(\beta, V) = Z(T, V) \quad (1.35)$$

نكتب عبارة المشتق الكلي لـ $\ln Z$ بالعبارة :

$$d \ln Z = \frac{\partial \ln Z}{\partial \beta} d\beta + \frac{\partial \ln Z}{\partial V} dV \quad (1.36)$$

ومنه:

$$d \ln Z = -\langle E \rangle d\beta + \beta \langle p \rangle dV \quad (1.37)$$

أو

$$d(\beta \langle E \rangle) = \langle E \rangle d\beta + \beta d \langle E \rangle \quad (1.38)$$

بدمج المعادلتين السابقتين (1.39) و (1.40) نجد:

$$d(\ln Z + \beta \langle E \rangle) = \beta(d \langle E \rangle + \langle p \rangle dV) \quad (1.39)$$

أو: $d \langle E \rangle = TdS - \langle p \rangle dV$

اي

$$d(\ln Z + \beta \langle E \rangle) = \beta T dS = \frac{dS}{K} \quad (1.40)$$

وبالتكامل نجد:

$$S = K(\ln Z + \beta \langle E \rangle) \quad (1.41)$$

وذلك باختيار ثابت التكامل الصغرى عندما يكون $\beta \rightarrow \infty$ ، $S \rightarrow K \ln g_0$ ، حيث g_0 هو انحلال الحالة الدنيا (مستوى الطاقة الأدنى) [1].

1-5-4- الطاقة الحرة:

العبارة الاخيرة (1.43) يمكن كتابتها من الشكل:

$$\langle E \rangle - TS = -KT \ln Z \quad (1.42)$$

والجزء الاول يمثل تعريف الطاقة الحرة اي:

$$F = -KT \ln Z \quad (1.43)$$

حيث $F(N, T, V)$ هي الطاقة الحرة لـ " هيلمهولتز "

او من خلال دالة التقسيم:

$$Z = e^{-\frac{F}{KT}} \quad (1.44)$$

ان العلاقة التي تربط بين F و Z ، صالحة حتى إذا اختلف عدد الجسيمات [1].

1-5-5- الكمون الكيميائي:

لقد افترضنا سابقا أن عدد الجسيمات N من النظام كان ثابتاً. لنفترض الآن أنه يمكن أن يختلف ثم من خلال اشتقاق المعادلة (1.46) [1]، نحصل على:

$$dF = -d(KT \ln Z) \quad (1.45)$$

بتبسيط الطرف الثاني:

$$-d(KT \ln Z) = -K \left(\frac{\partial}{\partial T} T \ln Z \right)_{V,N} dT - KT \left(\frac{\partial}{\partial V} \ln Z \right)_{T,N} dV - KT \left(\frac{\partial}{\partial N} \ln Z \right)_{T,V} dN \quad (1.46)$$

نعلم ان :

$$dF = -SdT - pdV + \mu dN \quad (1.47)$$

وبالمطابقة بين المعادلتين الاخيرتين (1.48) و (1.49) نجد:

$$P = KT \left(\frac{\partial}{\partial V} \ln Z \right)_{T,N} \quad (1.48)$$

$$S = K \left(\frac{\partial}{\partial T} T \ln Z \right)_{V,N} = K \ln Z + KT \left(\frac{\partial}{\partial T} \ln Z \right)_{V,N} \quad (1.49)$$

$$= K(\ln Z + \beta \langle E \rangle) \quad (1.50)$$

$$\mu = KT \left(\frac{\partial}{\partial N} \ln Z \right)_{T,V} = -\frac{1}{\beta} \left(\frac{\partial}{\partial N} \ln Z \right)_{T,V} \quad (1.51)$$

يمكن حساب الكمون الكيميائي بنفس طريقة حساب متوسط الضغط، الكمون الكيميائي لحالة صغيرة يعطى بالعلاقة:

$$\mu_i = \left(\frac{\partial E_i}{\partial N} \right)_{T,V} \quad (1.52)$$

نجد القيمة المتوسطة $\langle \mu \rangle$ هو نفسه عبارة μ لأن التقلبات لا تكاد تذكر بالنسبة للنظام الماكروسكوبي [3]. وبطريقة اخرى يمكن التعبير عن الضغط P والانتروبي S والطاقة الكامنة μ بدلالة الطاقة الحرة كالتالي:

$$[1] . \mu = \left(\frac{\partial F}{\partial N} \right)_{T,V} , S = - \left(\frac{\partial F}{\partial T} \right)_{V,N} , P = - \left(\frac{\partial F}{\partial V} \right)_{T,N} \quad (1.53)$$

1-5-6- الحرارة النوعية:

تعطى عبارة السعة الحرارية بالعلاقة:

$$\frac{C_V}{T} = \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_V = - \frac{\partial^2 F}{\partial T^2} = \frac{\partial^2}{\partial T^2} (K_B T \ln Z_N) \quad (1.54)$$

حيث: $F(T, V, N) = -K_B T \ln Z_N$ [1] .

1-6- تطبيقات المجموعة القانونية [1]:

غاز مثالي	الخصائص الفيزيائية
$\langle E \rangle = \frac{3}{2} NKT$	متوسط الطاقة الداخلية
$Z_N(T,V) = \frac{1}{N!} \left(\frac{V}{\lambda_T^3} \right)^N$	دالة التقسيم
$F(T,V,N) = -NK_B T \left\{ \ln \left(\frac{V}{N\lambda_T^3} \right) + 1 \right\}$	الطاقة الحرة
$S = NK_B \left\{ \ln \left(\frac{V}{N\lambda_T^3} \right) + \frac{5}{2} \right\}$	الانتروبي
$\mu = -K_B T \ln \left(\frac{V}{N\lambda_T^3} \right)$	الكمون الكيميائي
$P = \frac{NK_B T}{V}$	الضغط
$C_V = \frac{3}{2} NK$	السعة الحرارية النوعية
$\frac{\Delta E}{\langle E \rangle} = \sqrt{\frac{2}{3}} \frac{1}{\sqrt{N}}$	التقلبات النسبية

الجدول (2-1): خصائص الغاز المثالي بالمجموعة القانونية

$$\lambda_T = \sqrt{\frac{3h^2}{4\pi mE}} \text{ حيث:}$$

7-1- تحويل لابلاس:

العلاقة بين عدد الحالات $\Omega_N(E)$ ودالة التقسيم $Z_N(T)$ يمكننا التعبير عنها بواسطة تحويل لابلاس بالطريقة التالية حيث نستعمل تعريف عدد الحالات $\Omega(E)$ (1.3) :

$$\int dq dp \delta(E - H) = \Omega(E) H = H(q,p) \quad (1.55)$$

وبالتالي:

$$\int_0^\infty \frac{dE e^{-\beta E}}{h^{3N} N!} \Omega_N(E) = \int d^{3N}q d^{3N}p \int_0^\infty \frac{dE e^{-\beta E}}{h^{3N} N!} \delta(E - H) \quad (1.56)$$

$$= \int \frac{d^{3N}q d^{3N}p}{h^{3N} N!} e^{-\beta H(q,p)} = Z_N(T) \quad (1.57)$$

وبالتالي اظهرنا ان $Z_N(T)$ هي تحويل لابلاس لـ $\Omega_N(E)$ [2].

8-1- علاقة السعة الحرارية النوعية C_V بتقلبات الطاقة:

بأخذ العبارة المعطاة سابقا (1.56):

$$\frac{C_V}{T} = \frac{\partial^2}{\partial T^2} (K_B T \ln Z_N) \quad (1.58)$$

$$= \frac{\partial}{\partial T} \left[K_B \ln Z_N + \frac{K_B T}{Z_N} \frac{\partial Z_N}{\partial \beta} \frac{\partial \beta}{\partial T} \right], \frac{\partial \beta}{\partial T} = \frac{-1}{K_B T^2} \quad (1.59)$$

$$= \frac{\partial}{\partial T} \left[K_B \ln Z_N - \frac{1}{T Z_N} \frac{\partial Z_N}{\partial \beta} \right] \quad (1.60)$$

بالاشتقاق بالنسبة لـ T كالآتي :

$$\frac{\partial}{\partial T} [K_B \ln Z_N] = -\frac{1}{T^2 Z_N} \frac{\partial Z_N}{\partial \beta} \quad (1.61)$$

$$\frac{\partial}{\partial T} \frac{-1}{T Z_N} \frac{\partial Z_N}{\partial \beta} = \frac{1}{T^2 Z_N} \frac{\partial Z_N}{\partial \beta} + \left[\frac{1}{T Z_N^2} \left(\frac{\partial Z_N}{\partial \beta} \right)^2 - \frac{1}{T Z_N} \frac{\partial^2 Z_N}{\partial \beta^2} \right] \frac{-1}{K_B T^2} \quad (1.62)$$

بجمع المعادلتين (1.63) و (1.64) حيث ان الطرفين الاولين يلغيان بعضهما فنجد:

$$C_V = \frac{1}{K_B T^2} \left[\frac{1}{Z_N} \frac{\partial^2 Z_N}{\partial \beta^2} - \left(\frac{1}{Z_N} \frac{\partial Z_N}{\partial \beta} \right)^2 \right] \quad (1.63)$$

من مشتقات دالة التقسيم نجد:

$$\frac{1}{Z_N} \frac{\partial Z_N}{\partial \beta} = \frac{\int \frac{d^{3N}q d^{3N}p}{h^{3N} N!} H e^{-\beta H(q,p)}}{\int \frac{d^{3N}q d^{3N}p}{h^{3N} N!} e^{-\beta H(q,p)}} = \langle H \rangle, Z_N(T) = \int \frac{d^{3N}q d^{3N}p}{h^{3N} N!} e^{-\beta H(q,p)} \quad (1.64)$$

ومنه

$$\frac{1}{Z_N} \frac{\partial Z_N}{\partial \beta} = -\langle E \rangle, \frac{1}{Z_N} \frac{\partial^2 Z_N}{\partial \beta^2} = \langle E^2 \rangle \quad (1.65)$$

وبالتالي عبارة السعة الحرارية النوعية بالشكل :

$$C_V = \frac{1}{k_B T^2} [\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2] \quad (1.66)$$

وهنا تظهر العلاقة بين السعة الحرارية النوعية C_V وتقلبات الطاقة $\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2$

تصف الحرارة النوعية تبادل الطاقة بين النظام وخزان حراري ومن ثم فإن هذا يعني أن السعة الحرارية متناسبة مع حجم تقلبات الطاقة [2].

9-1- تقلبات الطاقة النسبية:

وتعطى بـ:

$$\frac{\sqrt{\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2}}{\langle E \rangle} \sim \frac{1}{\sqrt{N}} \quad (1.67)$$

تخفي في الحد الديناميكي الحراري $N \rightarrow \infty$

- قياس العلاقة الاخيرة (1.69) هو نتيجة مباشرة لكون السعة الحرارية النوعية C_V (1.68) والطاقة الداخلية $U = \langle E \rangle$ كبير .

- العبارة الاخيرة (1.69) متوافقة مع كون المجموعة القانونية والمجموعة القانونية الصغرى متكافئتان في النهاية الترموديناميكية $N \rightarrow \infty$.

تقلبات الطاقة غائبة في المجموعة القانونية الصغرى [2] .

10-1- بارامغناطيسية:

نعتبر نظامًا يحتوي على N ذرات مغناطيسية في وحدة حجم موضوعة في حقل مغناطيسي خارجي B كل ذرة لها عزم مغناطيسي ذاتي $\mu = 2\mu_0 s$ مع سبين $s = 1/2$ [2].

1-10-1 حالات الطاقة:

في الوصف الكمي الميكانيكي العزوم المغناطيسية للذرات يمكن أن تكون في اتجاه الحقل او عكس اتجاه الحقل المغناطيسي [2] .

الحالة	الانتظام	العزم	الطاقة	الاحتمال
(+)	موازي لـ B	$+\mu$	$-\mu B$	$P_+ = ce^{-\beta\epsilon_+} = ce^{+\beta\mu B}$
(-)	معاكس لـ B	$-\mu$	$+\mu B$	$P_- = ce^{-\beta\epsilon_-} = ce^{-\beta\mu B}$

الجدول (3-1): حالات المغناطيسية

نفترض هنا أن الذرات تتفاعل بشكل ضعيف, يمكن إذن أن تكون ذرة واحدة كنظام صغير وباقي الذرات كخزان في إطار المجموعة القانونية [2] .

1-10-2- متوسط العزم المغناطيسي:

نريد أن نحلل متوسط العزم المغناطيسي $\langle \mu_B \rangle$ لكل ذرة كدالة لدرجة الحرارة T تعطى بالعلاقة:

$$\langle \mu_B \rangle = \frac{\mu e^{\beta\mu B} - \mu e^{-\beta\mu B}}{e^{\beta\mu B} + e^{-\beta\mu B}} \quad (1.68)$$

$$\langle \mu_B \rangle = \mu \tanh \frac{\mu B}{K_B T} \quad (1.69)$$

وذلك باستخدام العلاقة: $\tanh y = \frac{e^y - e^{-y}}{e^y + e^{-y}}$, $y = \beta\mu B = \frac{\mu B}{K_B T}$ [2].

1-10-3- المغنطة:

تعرف المغنطة بأنها العزم المغناطيسي المتوسط في وحدة حجم، أي:

$$\langle M \rangle = N \langle \mu_B \rangle \quad (1.70)$$

وسيتم تحليل سلوكها في درجات الحرارة العالية والمنخفضة [2].

أ- الدرجات العالية:

درجات الحرارة الكبيرة تتوافق مع $y \ll 1$ وبالتالي:

$$e^{-y} = 1 - y + \dots \quad e^y = 1 + y + \dots$$

$$\tanh y = \frac{(1+y+\dots) - (1-y+\dots)}{2} \approx y \quad \text{ومنه:}$$

وبالتالي:

$$\langle \mu_B \rangle = \frac{\mu^2 B}{K_B T} \quad (1.71)$$

قانون كوري: بالنسبة للقابلية المغناطيسية χ التي تعرف من خلال $\langle M \rangle = \chi B$ لدينا:

$$\chi = \frac{N\mu^2}{K_B T} \quad (1.72)$$

في درجات حرارة عالية مقارنة مع الطاقات المغناطيسية $\chi \propto T^{-1}$ والذي يعرف باسم قانون كوري [2].

ب- الدرجات المنخفضة:

درجات الحرارة المنخفضة تقابل $y \gg 1$, أي: $\tanh \approx 1, e^{-y} \gg e^y$

وبالتالي:

$$\langle \mu_B \rangle = \mu \quad , \quad \langle M \rangle = N\mu \quad (1.73)$$

المغنطة تصل الى القيمة القصوى عند درجات حرارة منخفضة مستقلة عن الحقل المغناطيسي B [2].

الفصل الثاني:

التحولات الطورية

1-2- تمهيد :

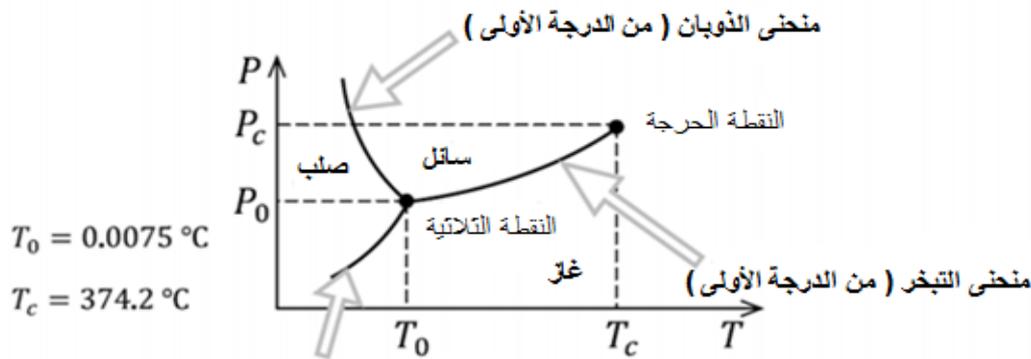
التحولات الطورية هي واحدة من تلك الظواهر الفيزيائية التي نجدها في كل مجال من الفيزياء فهي تحتوى على كم هائل من الظواهر الفيزيائية، وتحتاج الى قدر لا يستهان به من الرياضيات . التحولات الطورية المعروفة أكثر لدى الكثيرين، هي تحولات المادة بين اشكالها الاربعة التي هي الصلب والسائل والغازي والبلازما. لكن هناك ايضا تحولات طورية، مازالت مجهولة الى حد كبير و اخرى هي المسؤولة عن الظواهر غير الاضطرابية التي تميز التفاعلات المعيارية التي تتحكم في كل القوى الطبيعية. هناك نوعان اساسيان من التحولات الطورية. التحول الطوري من الرتبة الاولى ويكون فيه الانتقال من طور الى اخر بشكل غير مستمر ويحدث التحول تحت تأثير تغيير خارجي. والنوع الثاني والاهم هو التحول الطوري من الرتبة الثانية، وهو تحول مستمر ويحدث تحت تأثير القوى الداخلية للجلمة، واغلب التحولات الطورية التي تحدث في الطبيعة هي من هذا النوع[3] .

2-2- مفهوم الطور:

الأطوار هي حالات من المادة تتميز بخصائص مجهرية مميزة. المراحل النموذجية التي سنناقشها في هذا الفصل هي السائلة والصلبة والغازية. وكذا مراحل مهمة اخرى وهي المتمثلة في حالات التوصيل الفائق والمغناطيسية[4].

حالات المادة بمناطقها المستقرة نجدها في مخطط الطور وتتغير خصائص الحالة المجهرية بالتعريف عند حدود الطور, وهذا التغيير هو:

متقطع { من اجل }
 { الدرجة الأولى }
 { الدرجة الثانية }
 مستمر



منحنى التسامي (من الدرجة الأولى)

الشكل (1-2) : المخطط الطوري للماء

المتغيرات المناسبة لمخطط الطور للسائل هي الضغط P ودرجة الحرارة T.

2-2-1- النقطة الحرجة : تصبح حدود المرحلة الأولى بين الغاز والسائل من المرتبة الثانية مباشرة عند النقطة الحرجة. عندئذ تكون المرحلتان متساويتين في الكثافة مع وجود مفارقات محددة (الانتروبي لكل جسيم).

لا توجد نقطة حرجة للانتقال السائل الصلب [4].

2-2-2- النقطة الثلاثية : النقطة التي يتعايش فيها النظام في حالة الغازات والسوائل والصلبة في منحني انصهار المياه لديه ميل سلبي يذوب الثلج عند درجة حرارة ثابتة $T < T_0$ عند زيادة الضغط P يحدث هذا أثناء التزحلق على الجليد [4].

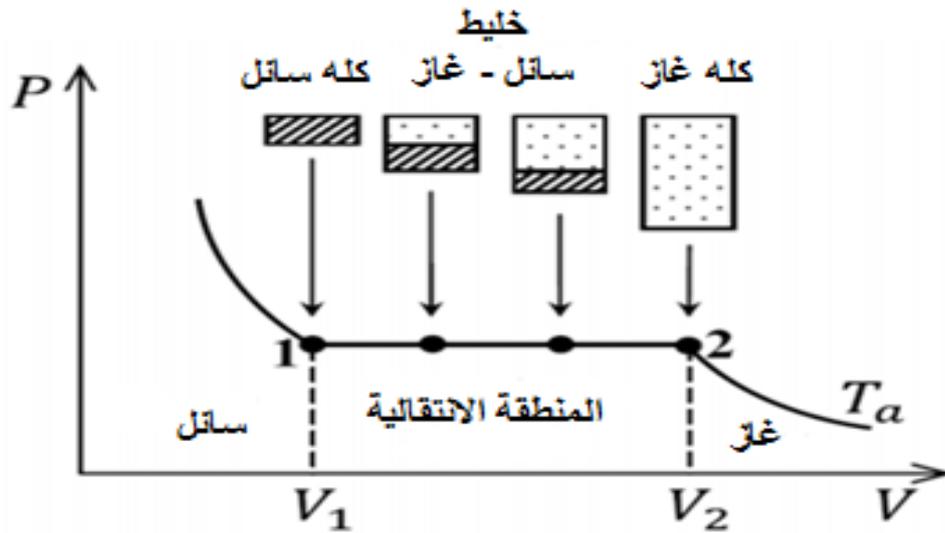
2-3- دالة الانتالبي لجيبس :

يتم وصف المرحلة الانتقالية في مخطط الطور $P - T$ من خلال المحتوى الحراري جيبس انتالبي $G(T, P, N)$ ، والذي هو في حد ذاته دالة للضغط P ودرجة الحرارة T يتغير $G(T, P, N)$ باستمرار عبر حدود الطور عندما يكون الانتقال من الدرجة الأولى ، الانتروبيا S والحجم V المعطاة بالمشتقات التالية :

$$dG = -SdT + VdP + \mu dN \quad (2.1)$$

$$V = \left(\frac{\partial G}{\partial P}\right)_T, S = -\left(\frac{\partial G}{\partial T}\right)_P \quad (2.2)$$

في حالة كمون جيبس تكون غير مستمرة [4].



الشكل (2-2) : منحني طوري للماء يوضح مستوى الضغط والحجم

الحرارة الكامنة:

دعونا ننظر بدلا من $P - T$ في $P - V$ الرسم البياني (الشكل (2-2)) ، وهو إسقاط لمعادلة الحالة للسائل هناك مرحلتان مختلفتان S_1 و S_2 في مرحلتين 1 و 2 تتعايشان عند درجة حرارة T_0 ولذلك يجب على النظام امتصاص الحرارة أو إطلاقها [4] ، تعطى الحرارة الكامنة ΔQ_L :

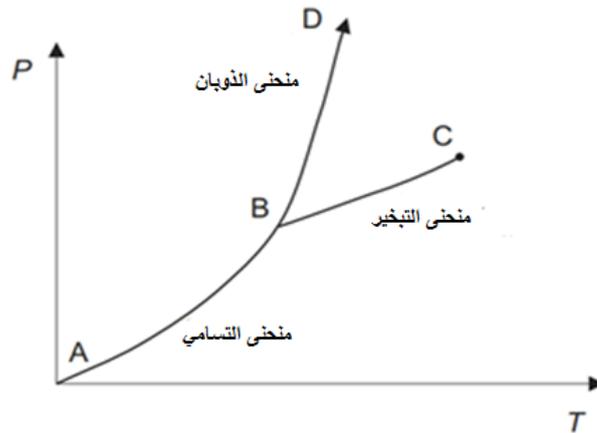
$$\Delta Q_L = T_0(S_2 - S_1) \quad (2.3)$$

4-2- الانتقالات الطورية من الدرجة الأولى:

عندما يبدأ الماء بالغليان فإنه يمر بمرحلة انتقال من السائل إلى الطور الغازي , بشكل مستقل في كلتا المرحلتين تكون معادلة الحالة دالة منتظمة ومستمرة مع المشتقات المستمرة ومع ذلك أثناء الانتقال من السائل إلى الغاز تتغير الدالة "فجأة" إلى دالة أخرى هذا الانتقال هو من الدرجة الأولى، عادة ما يتم إجراء دراسة انتقال غاز - سائل كدالة للحرارة والضغط , والدالة الديناميكية الحرارية الأكثر ملائمة هي المحتوى الحراري المجاني G [1].

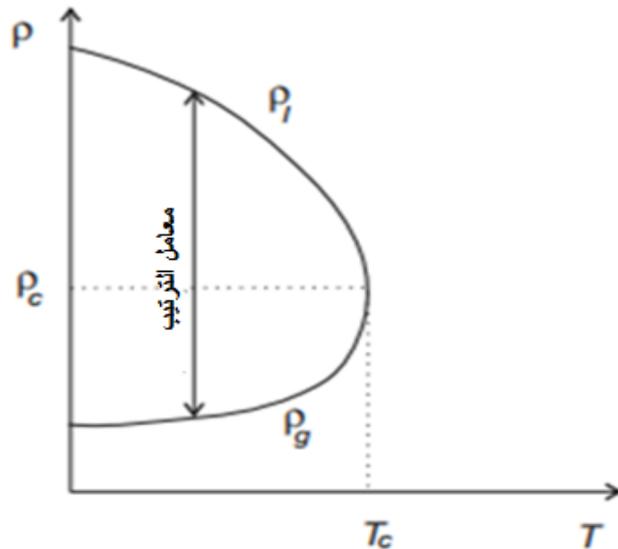
ان المناطق المرفقة بمختلف الاطوار للمائع (الصلب والسائل والغاز) في الشكل (3-2) هي مناطق التعايش , حيث يسمى الفرع AB الذي يفصل المرحلة الصلبة عن الطور الغازي بمنحنى التسامي، و كذلك الفرع BD الذي يسمى منحنى الصهر وهو خط التعايش بين المادة الصلبة والسائلة. اما الفرع BC هو منحنى التبخر إنه المكان الذي يتعايش فيه السائل مع البخار. سواء بالنسبة للتسامي أو الذوبان أو الغليان ، يوضح الشكل (3-2) أن درجات الحرارة في الذوبان والغليان تعتمد على الضغط [1].

منحنيات التعايش الثلاثة لها نقطة مشتركة B تسمى بالنقطة الثلاثية وهي تقابل الحالة التي توجد فيها المراحل الثلاث (الصلبة والسائلة والبخارية) في وقت واحد. حيث ان الضغط ودرجة الحرارة هما اللذان يصفان المائع على سبيل المثال النقطة الثلاثية $T = 273.16K$ [1].



الشكل (3-2): منحنى طوري للماء يوضح مستوى الضغط ودرجة الحرارة

يتبين من الشكل (3-2) أن الفرع BC ينتهي عند النقطة C ويسمى الأخير النقطة الحرجة. أبعد من هذه النقطة من الممكن استمراره وذلك بالاستمرار من الحالة السائلة إلى الحالة الغازية والعكس بالعكس. بتعبير أدق لم يعد هناك أي تمييز بين السائل والبخار في جميع النقاط في الفرع BC ما عدا النقطة C تختلف كثافة السائل وسعة الغاز. حيث تكون كثافة السائل ρ_1 أكبر من كثافة غاز ρ_g لكن هذا الفرق ينقص عندما تزداد درجة الحرارة ويختفي عند النقطة الحرجة حيث تكون متطابقة. ويسمى الفرق بين هاتين الكميتين $\rho_1 - \rho_g$ معامل الدرجة للانتقال غاز - سائل الخاصة بانتقال الغاز السائل كما يبينه الشكل (4-2) هذا المعامل دوراً مهماً جداً في وصف انتقالات الطورية [1].



الشكل (4-2) : منحني الكثافة لانتقال المرحلة

عندما يتم عبور خط BC في مخطط الطور (الشكل (3-2)) خارج النقطة الحرجة يتم ملاحظة انقطاع في كثافة السائل (تختلف كثافة الغاز عن السائل). يتطلب الانتقال من السائل إلى الغاز طاقة أيضاً هذا ما يسمى الحرارة الكامنة. فمن الضروري عند نقطة الغليان، توفير الطاقة للسائل من أجل تحويل السائل بالكامل إلى غاز. تشير الخاصيتان المشار إليهما أعلاه إلى أن انتقال غاز- سائل هو مرحلة انتقال من الدرجة الأولى [1].

5-2- شرط التعايش الطوري:

نعتبر نظام يتكون من نوع واحد من الجسيمات في ظروف معينة من T و P (ثابت) , نفترض التعايش بين مرحلتين في نظامنا. في هذه الحالة، إمكانات جيبس هي مجموع إمكانات جيبس في المرحلتين

$$G(T, P, N) = G_1(T, P, N_1) + G_2(T, P, N_2) \quad (2.4)$$

$$= N_1 \mu_1(T, P) + N_2 \mu_2(T, P) \quad (2.5)$$

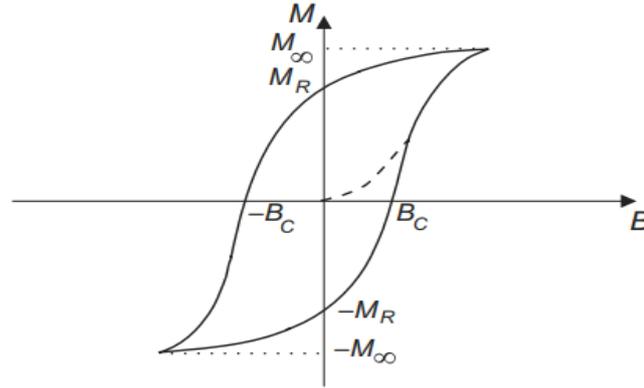
و بالتالي : $dG = \mu_1 dN_1 + \mu_2 dN_2 = 0$ اي : $\mu_1(T, P) = \mu_2(T, P)$ و هو يمثل شرط التعايش.

حيث : μ_i و N_i هما على التوالي عدد الجسيمات والكمون الكيميائي للطور [4].

6-2- الانتقال الفيرومغناطيسي:

و يكون هذا الانتقال في التحولات الطورية ويلاحظ في المعادن الفيرومغناطيسية لها مغنطة دائمة في غياب المجال المغناطيسي الخارجي وتتمثل هذه العملية في المغناطيسيات التي يمكن العثور عليها في العديد من الأجهزة بما في ذلك البوصلات تم ملاحظة المغنطيسية الحديدية لبعض المعادن الانتقالية، مثل الحديد والكوبالت أو النيكل. ترتبط بسلوك تساهمي لسبين الذرات وهذا يعني أن عددًا كبيرًا من الإلكترونات لطبقة غير مكتملة يكون سببها في نفس الاتجاه. تعد الفيرومغناطيسية عملية معقدة للغاية فالمواد المغناطيسية تظهر ظاهرة التباطؤ التي يمكن تلخيصها في (الشكل (5-2)). وإذا كان جزء من المادة الفيرومغناطيسية تحت درجة حرارة كوري فالمغنطة M تكون معدومة ، هذه الزيادة الاخيرة (الخط المنقط)

عند تطبيق حقل مغناطيسي خارجي B وفقا لاتجاه ثابت وموجه على طول المحور المرجعي . فتصل المغنطة إلى قيمة حدية M_{∞} تسمى مغنطة التشبع. من خلال هذه العملية وصفنا ما يسمى منحنى التمتع الأول. إذا قمنا بعد ذلك بتخفيض المجال المغناطيسي فإن المغنطة تقل ولكن لا تلغى بالحقل. عندما يكون الأخير هو صفر، فإنه يحتوي على قيمة M_R يشار إليها باسم مغنطة البقاء. لإلغاء المغنطة من الضروري وجود حقل مغناطيسي $-B_C$ ، موجه في الاتجاه المعاكس والذي يسمى الحقل القسري. إذا قمنا بتخفيض B بدرجة أكبر فإننا نصل إلى مغنطة التشبع $-M_{\infty}$ من أجل $B < 0$ ، والمغنطة معدومة من أجل $B = B_C$ قبل الوصول إلى قيمة التشبع M_{∞} للقيم الكبيرة لـ B . عن طريق تأرجح B ، نثبت أن المغنطة تصف دورة تسمى دورة التباطؤ. وهذا يعني أن المغنطة لا تعتمد فقط على قيمة الحقل المطبق وإنما أيضاً على تاريخ العينة [1].



الشكل (5-2): ظاهرة التباطؤ

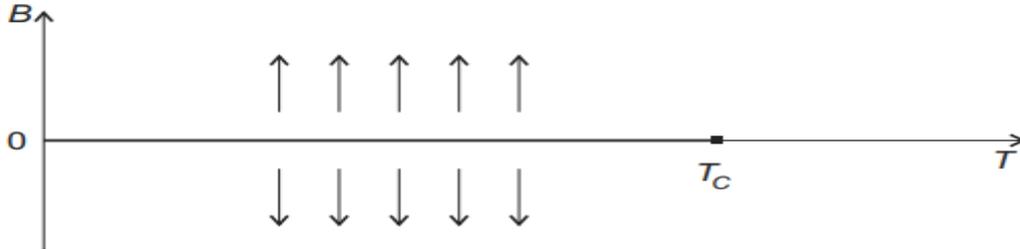
لتفسير هذه الظاهرة من التباطؤ قام P.Weiss في عام 1910 على افتراض أن المواد الفيرومغناطيسية تتكون من مجالات صغيرة على مقياس ماكروسكوبي ولكن كبيرة على نطاق مجهري، مع وجود مغنطة عفوية. وقد تم تأكيد هذه الفرضية تجريبياً عندما سمحت وسائل الملاحظة. يمكن ملاحظة مجالات Weiss تحت المجهر في تعليق مغناطيسي (تقنية Bitter)، حيث لديهم أحجام نموذجية تتراوح بين 10 إلى $100 \mu m$. بتطبيق مجال مغناطيسي على عينة فيرومغناطيسية تحت درجة حرارة كوري، مجالات Weiss تصل مغنطة التشبع بها، يتم محاذاة جميع العزوم المغناطيسية الأولية للمجال على الرغم من ذلك و على مقياس ماكروسكوبي فإن المغنطة بعيدة عن الوصول إلى قيمة التشبع. هذا لأن العزوم المغناطيسية لنطاقات Weiss ليست كلها موجهة في نفس الاتجاه. من خلال تطبيق مجال مغناطيسي ذو كثافة متزايدة [1]، نلاحظ زيادة تدريجية في المغناطيسية العيانية التي لها أصلان مستقلان:

- بالنسبة للحقول الضعيفة يزداد حجم مجالات Weiss في اتجاه المجال المغناطيسي على حساب أولئك الذين يتم توجيههم نحو أقل إيجابية.
- إذا أصبح الحقل المغناطيسي المطبق أكثر كثافة، فستكون هناك نطاقات في مجال Weiss التي تأخذ بعد ذلك تكوين أكثر ملاءمة في الطاقة.

بالنسبة للبلورات تكون بعض الاتجاهات مغنطة بسهولة أكثر من غيرها. يأتي هذا التفضيل من زيادة استقرار الطاقة من التفاعلات التي تؤدي إلى وجود طاقة مغناطيسية أو طاقة متباينة الخواص [1].

بأخذ حالة البلورة الفيرومغناطيسية وباعتبار مجالين من Weiss حيث يكون التمتع المجهري في المقابل. في الواجهة هناك انتقال مستمر من تخصيص اتجاه واحد إلى الاتجاه المعاكس يحدث هذا على بضع مئات من المخططات الذرية وتسمى المنطقة المعنية "جدار بلوك" [1].

يكون مخطط الطور للمواد الفيرومغناطيسية النموذجية أبسط من المائع. نقدم توضيحاً تخطيطياً في الشكل (2-6) حيث أظهرنا في المستوي المرتبط بالمجال المغنطيسي B ودرجة الحرارة T . إنه ببساطة جزء خط يقع على المحور $B = 0$ والذي باستثناء النقطة C ، تقابل مرحلة الانتقال من الترتيب الأول. ينتهي عند النقطة C ، النقطة الحرجة للانتقال. يحدث انتقال الطور في حقل صفري لأسباب تناظر المادة الفيرومغناطيسية فيما يتعلق باتجاه المجال المغنطيسي المطبق [1].



الشكل (2-6): مخطط الانتقال

2-7- تصنيف اهرنفاست من التحولات الطورية :

لمناقشة هذا العنصر دعونا نشير إلى المرحلتين في التوازن في منحنى التعايش مثل α و β . من منطلق اهرنفاست نحدد ترتيب المرحلة الانتقالية. إن ترتيب أدنى مشتق لمحتوى جيبس الذي يظهر انقطاعاً عند عبور منطقة التعايش هو ترتيب المرحلة الانتقالية [4]، ويحدد هذا التعريف العلاقة:

$$dG = \mu_1 dN_1 + \mu_2 dN_2 = 0 \quad , \quad \mu_1(T,P) = \mu_2(T,P) \quad (2.6)$$

انتقالات الطورية من النظام n . بشكل صريح فإن الانتقال الطوري بين المرحلتين α و β يكون بترتيب n إذا

$$\left(\frac{\partial^m G_\alpha}{\partial T^m}\right)_P = \left(\frac{\partial^m G_\beta}{\partial T^m}\right)_P, \left(\frac{\partial^m G_\alpha}{\partial P^m}\right)_T = \left(\frac{\partial^m G_\beta}{\partial P^m}\right)_T \quad (2.7)$$

في الممارسة العملية التحولات الطورية من الدرجة الأولى والثانية ذات أهمية خصائصهم مدرجة أدناه :

الدرجة الأولى:

- 1- $G(T,P)$ مستمر
- 2- $S = -\left(\frac{\partial G}{\partial T}\right)_P$ و $V = \left(\frac{\partial G}{\partial P}\right)_T$ غير مستمرتين
- 3- الحرارة الكامنة E

الدرجة الثانية:

- 1- $G(T,P)$ مستمر
- 2- $S(T,P)$ و $V(T,P)$ مستمرتان
- 3- تؤدي حالات التوقف في مشتق عند الترتيب الثاني من $G(T,P,N)$ إلى توقف دوال الاستجابة :

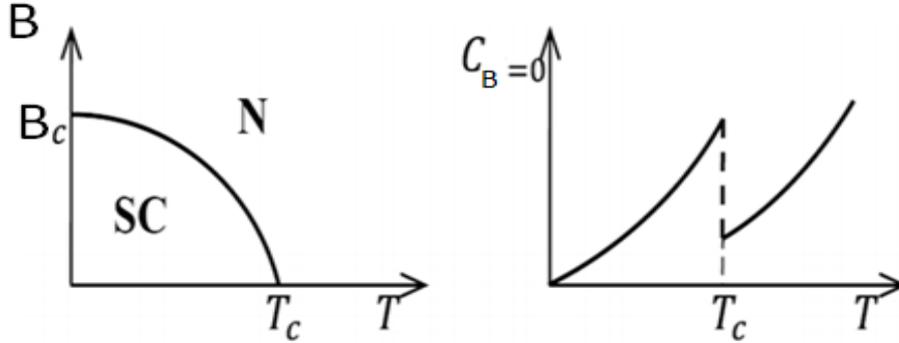
$$C_P = T \left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_P \quad (2.8)$$

$$K_T = -\frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial P}\right)_T \quad (2.9)$$

1-7-2- القابلية المغناطيسية:

عبر الانتقال هنا استخدمنا التعريف للحرارة C_p عند ضغط ثابت K_T هي الانضغاط متساوي الحرارة [4]، كما توضحه العلاقة :

$$dG = -SdT + VdP + \mu dN \quad (2.10)$$



الشكل (7-2): محنى طوري للطاقة ودرجة الحرارة والسعة الحرارية

2-7-2- شرح المنحنيات:

- قفزة حرارة محددة: تُظهر تحولات الطور من الرتبة الثانية انقطاعاً محدوداً في درجة حرارة C_p المحددة. مثال على ذلك هو الانتقال إلى حالة التوصيل الفائق في المجال المغناطيسي صفر [4].

- طول العلاقة المتباعدة الأسية: يصنف اهرنفاست فقط إذا كانت حركة الجسيمات البعيدة غير مرتبطة بمعنى أن طول الارتباط محدود ومع ذلك يتباعد طول الارتباط في درجة الأهمية بالنسبة لمرحلة الانتقال الثانية، أي عند $T \rightarrow T_c$ ، وهذا بدوره يؤدي أيضاً إلى اختلاف وظائف الاستجابة حيث تتأثر القابلية المغناطيسية للنظام المغناطيسي [4]، كما هو موضح:

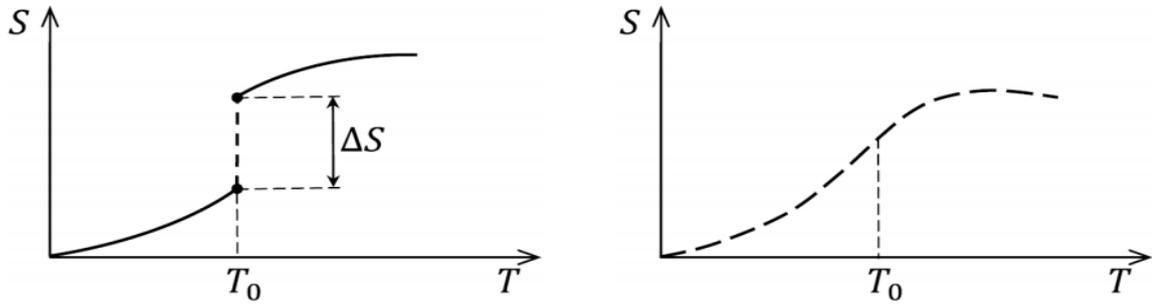
$$\chi = \left(\frac{\partial M}{\partial B}\right)_T, \quad \chi(T) \sim \frac{1}{(T-T_c)^\gamma} \quad (2.11)$$

حيث γ هو الأس الحرج. يتم تقييم الأس الحرج باستخدام أساليب الميكانيكا الإحصائية المتقدمة مع ذلك نلاحظ أن العلاقة السابقة في معظم الحالات قريبة جداً من الانتقال [4].

الانتروبيا لعملية انتقال متقطعة بخصم ترتيب الانتقال بدقة يمكننا تصنيف انتقال المرحلة في أي حال فيما يتعلق باستمرارية الانتروبي [4]. من أجل انتقال متقطع لدينا:

$$\Delta S \neq 0 \text{ و } E \text{ الطاقة الكامنة.}$$

$$C_p = -T \left(\frac{\partial^2 G}{\partial T^2}\right)_P \text{ وهو محدود بالنسبة } T \neq T_0 \text{ لا يوجد شرط } T = T_0.$$



الشكل (8-2): تطور الانتروبي بدلالة درجة الحرارة

الانتروبي للانتقال المستمر. في هذه الحالة نجد:

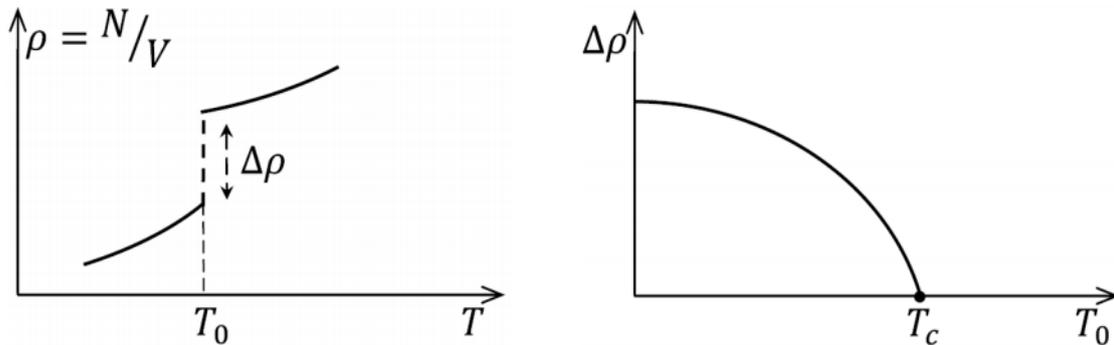
1- مستمرة \leftarrow لا يوجد حرارة كامنة

2- \exists نقطة حرجة T_C

3- التفرد في $\chi(T), K_T, C_V$ [4].

2-7-3- انتقال الكثافة:

باعتبار نظام سائل يظهر من أجله الحجم $V = \left(\frac{\partial G}{\partial P}\right)_T$ انقطاعاً محدوداً ΔV عند انتقال الطوري من الدرجة الأولى ، مثل خط الغاز السائل أسفل النقطة الحرجة كثافة الجسيمات المقابلة تعطى بـ : $\rho = N/V$ ثم متقطع [4] .

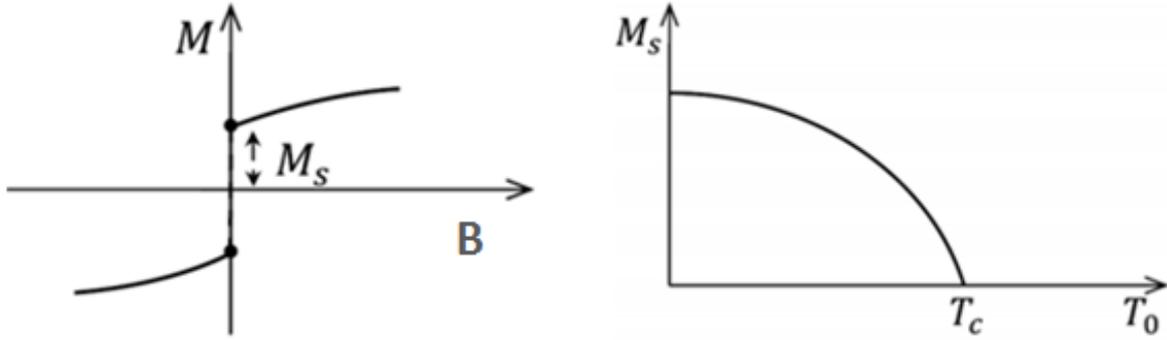


الشكل (9-2) : تغيرات الكثافة بدلالة درجة الحرارة

تتقلص قفزة الكثافة $\Delta\rho$ على طول خط نقل الغاز السائل عند زيادة درجة الحرارة حتى تختفي عند T_C . يصبح الانتقال مستمراً عند النقطة الحرجة $T = T_C$ [4].

2-8- الترتيب المغناطيسي العفوي:

يتم تحفيز المغنطة M للمركب المغناطيسي جزئياً بواسطة مجال مغناطيسي خارجي و يرجع ذلك جزئياً إلى الترتيب التلقائي، بمعنى محاذاة العزوم المجهرية [4].



الشكل (10-2) : تغيرات المغناطيسية بدلالة الحرارة

لعمل المغناطيسي الذي يدخل في الطاقة الداخلية $dU = \delta Q + \delta W$ هو $\delta W = BdM$ ، نظراً لأن جيبس انتالبي $G(T, H)$ هو تحويل Legendre (ذو شقين) للطاقة الداخلية $U(S, M)$ ، اي :

$$M = - \left(\frac{\partial G}{\partial B} \right)_T, \quad dG = -SdT - MdB \quad (2.12)$$

تكون المغناطيسية M متقطعة عند وجود نظام تلقائي أي عندما يكون الانتقال من الدرجة الأولى. بعد خط الانتقال من خلال زيادة درجة الحرارة $T \rightarrow T_c$ ، تنخفض القفزة بـ $2M_S$ حتى يختفي الترتيب تلقائياً ويصبح انتقال المرحلة من الدرجة الثانية عند $T_c = T_0$ [4].

9-2- تصنيف التحولات الطورية :

هناك عدة تصنيفات من مراحل التحولات تؤدي إلى نفس الترتيب في معظم الحالات ولكن قد تكون هناك بعض الاختلافات. سنقدم في ما يلي بعض الأفكار حول هذا الموضوع [1].

عندما يكون هناك تغير في الطور يتكون النظام في المرحلة الانتقالية من نظامين فرعيين متجانسين لهما خصائص فيزيائية مميزة ويفصل بينهما سطح محدد هذا الأخير لا يرتبط بالضرورة و هذا راجع الى التغيير المستمر لبعض المعاملات المكثفة للنظام (درجة الحرارة، على سبيل المثال) [1].

في عام 1937، اقترح لاندو تصنيفاً آخر للتحولات الطورية تم تكييفه خصيصاً لتلك التي توصلنا لها. ويستند إلى أن هذا النوع من الانتقال مصحوب بتغيير تناظر النظام كالتحول الفيرومغناطيسي- البارامغناطيسي لأن النظام الفيرومغناطيسي له اتجاه محدد في الفضاء بينما المرحلة البارامغناطيسية هي لها عدد متساو للسبينات في كلا الاتجاهين. وقد أدى ذلك إلى تقديم لاندو مفهوم معامل النظامية. وهو مقدار معدوم في الطور الأكثر تناظراً ويختلف عن الصفر في الآخر. تحدث بعض التحولات دون تناظر ومن حيث المبدأ لا يمكن تحديد معامل Landau [1].

في المرحلة الغازية بالنسبة إلى انتقال غاز-السائل، فإن معامل الترتيب هو الفرق $\rho_l - \rho_g$ و هو يختلف عن الصفر (الشكلين (3-2) و(4-2)) على طول منحنى BC باستثناء النقطة الحرجة C ($T_c = 647 \text{ K}, P_c = 217 \text{ atm}$) حيث يصبح معدوم [1].

10-2 - وسيط الترتيب:

لقد رأينا في الغالب يمكن ادخال وسيط الترتيب في دراسة الانتقالات الطورية، وهي خاصية مميزة للنظام المدروس والذي يسمح بالتحديد , وعلى وجه الخصوص ترتيب الانتقال الطوري، إذا كان وسيط الترتيب غير معدوم فإنه غالبا ما يكون دليلا على تكسر تناظر النظام [1].

عموما لا يكون تعريف وسيط الترتيب واضحا دوما، بحيث انه لا يمكن تعريفه اصلا في بعض الانظمة إذا لم نتحدث عن انتقال طوري معين فسنرمز له بالرمز m [1].

في الحقيقة لا يوجد طريقة عامة لتحديد وسيط الترتيب للنظام، لذلك يتم تحديده لكل حالة على حدة، فيأخذ إذا اشكالا مختلفة حيث يمكن ان يكون عددا سلميا او شعاعا او كائن رياضيا معقد جدا، يعد وسيط الترتيب مهم جدا حيث نرسم له بالرمز n ، فيأخذ القيمة 1 من اجل الاعداد السلمية و3 من اجل الاشعة وهكذا، ان وسيط الترتيب يمثل سمة مميزة للانتقال الطوري [1].

سنوضح هذا في بعض الامثلة التالية:

- بالنسبة لانتقال سائل-غاز فان وسيط الترتيب هو الفرق بين كثافتي السائل والغاز $\rho_l - \rho_g$ في هذا النظام بالتحديد وسيط الترتيب غير مرتبط بتغير التناظر عند الانتقال من طور لآخر، فوق نقطة حرجة وسيط الترتيب معدوم ولا يمكن التمييز بين الطورين في حين انه تحت النقطة الحرجة وسيط ترتيب يكون موجبا. اذا وسيط الترتيب لهذا النظام يعرف بعدد سلمي لذلك يكون بعده $(n=1)$
- بالنسبة للانتقال الفيرومغناطيسي البارامغناطيسي وسيط الترتيب هو المغنطة M وهو يختلف عن الصفر تحت درجة حرارة كوري ومعدوم فوقها، وسيط الترتيب لهذا النظام هو شعاع وبعده اذن يساوي $(n=3)$ [1].

11-2 - مفهوم النقطة الحرجة:

النقطة الحرجة لها خصائص خاصة تبرز اسمها في الواقع , فبالنسبة للسائل فإن بعض الخصائص لها سلوك غير عادي في الفيزياء التقليدية [4].

تصف الانتقالات الطورية و هي اهم وسيلة لقياس هذه الانتقالات بالإضافة الى ان النقطة الحرجة مميزة بالتباعد لبعض الكميات الفيزيائية، مثال السعة الحرارية او القابلية المغناطيسية او المغنطة في الانظمة الفيرومغناطيسية [4].

12-2 - الأسس الحرجة:

ان دراسة هذه التباعدات بالغة الاهمية لأنها تمثل الميزات الاساسية للنظام. وهذا ما يؤدي الى مفهوم الاس الحرج، لذلك سندخل متغير جديد يمثل الانحراف النسبي للحرارة بالنسبة للحرارة الحرجة [1].

$$t = \frac{T-T_C}{T_C} \quad (2.13)$$

ان ميزة تعريف t بهذه طريقة هو جعل النقاط الحرجة للانظمة المختلفة متكافئة، وبالتالي تكون لكل الانظمة نفس درجة الحرارة الحرجة المختزلة $t=0$ على الرغم من ان درجات الحرارة الحرجة المختلفة

الاس الحرج λ المرافق لكل كمية فيزيائية $F(t)$ (سعة حرارية او القابلية او طول الارتباط .. الخ) يعطى بـ [1]:

$$\lambda = \lim_{t \rightarrow 0} \frac{\log|F(t)|}{\log|t|} \quad (2.14)$$

استنادا الى هذا تعريف من الملائم كتابة تصرف $F(t)$ في جوار النقطة الحرجة على الشكل التالي :

$$F(t) \sim |t|^\lambda \quad (2.15)$$

هذه العلاقة تعني ان $F(t)$ يتغير كـ $|t|^\lambda$ لما $t \rightarrow 0$ ، لذلك نعطي الاس الحرجة الاساسية للانتقال الفيرومغناطيسي-البارامغناطيسي المبينة في الجدول التالي [1]:

$C_B \sim t ^{-\alpha}$	السعة الحرارية (من اجل $B=0$)
$M \sim (-t)^{\beta^*}$	المغنطة (من اجل $B=0$)
$\chi_T \sim t ^{-\gamma}$	القابلية الايزوترمية ($B=0$)
$B \sim M ^\delta \text{Sgn}M$	الايزوترمية الحرجة ($t=0, B \rightarrow 0$)
$\xi \sim t ^{-\nu}$	طول الارتباط
$G(r) \sim \frac{1}{r^{d-2+\eta}}$	دالة الارتباط لجسمين عند ($t=0$)

الجدول (1-2): الاس الحرجة الاساسية للانتقال الفيرومغناطيسي-البارامغناطيسي

بنفس الطريقة نعطي الاس الحرجة المرافقة للانتقال سائل-غاز المبينة في الجدول التالي :

$C_V \sim t ^{-\alpha}$	السعة الحرارية عند حجم ثابت
$(\rho_l - \rho_g) \sim (-t)^{\beta^*}$	الفرق بين كثافتي السائل والغاز
$k_T \sim t ^{-\gamma}$	الانضغاط الايزوترمي
$P - P_C \sim \rho_l - \rho_g ^\delta \text{sgn}(\rho_l - \rho_g)$	الايزوترمية الحرجة ($t=0$)
$\xi \sim t ^{-\nu}$	طول الارتباط
$G(r) \sim \frac{1}{r^{d-2+\eta}}$	دالة الارتباط لجسمين

الجدول (2-2): الاس الحرجة للانتقال سائل-غاز

2-13- العالمية:

الميزة المهمة للأسس الحرجة هي انها لا تتعلق الا بالخصائص العامة للازمنة ولا تتعلق بتفاصيل التفاعلات الحادثة فيها وهذا ايضا حتى بالنسبة للأنظمة التي لديها تفاعلات قصيرة المدى مثل السوائل والمواد الفيرومغناطيسية، ان هذه الاسس الحرجة لا تتعلق الا ببعد الفضاء للنظام وبعد وسيط الترتيب، هي اذن كميات ممتازة لوصف النظام في جوار النقطة الحرجة وكذلك لمعاينة صلاحية النماذج، فيقال انها تخضع لقوانين عالمية لأنها تسمح بتعريف فئات تشمل انتقالات طورية تبدو للوهلة الاولى مختلفة تماما [1].

كتلخيص، هناك كميّتان تسمح بتحديد تصرف النظام في جوار النقطة الحرجة هما بعد الفضاء d وبعد وسيط الترتيب n ، هذا الاخير قد يكون من الصعب جدا تحديده لأسباب تجريبية احيانا ونظريا احيانا اخرى، وبالتالي كل زوج n يحدد فئة عالمية. جميع الانظمة التي تنتمي الى نفس الفئة لها سلوكات واسس حرجة متماثلة، فعلى سبيل المثال من اجل $d=3$ و $n=1$ ، لدينا الانتقال سائل-غاز والانتقال الفيرومغناطيسي احادي المحور (نموذج ايزينغ في ثلاثة ابعاد) [1].

اذا عدنا الى الانتقال سائل-غاز فيتم ملاحظة ان درجة الحرارة الحرجة تتعلق بالمائع المعبر والتفاعلات بين الذرات، في حين ان رسم منحنى التعايش للموائع عند النقطة الحرجة (من اجل كل درجة حرارة T فقيمة الكثافة ρ لكل طور في مخطط $\frac{T}{T_C}$ مقابل $\frac{\rho}{\rho_C}$) نلاحظ بما يسمى المنحنى العالمي حيث يتم وضع كل النقاط التجريبية الموافقة للعديد من الموائع المختلفة. الاسس الحرجة المرفقة بالوسيط $\rho_1 - \rho_g$ تتغير ك $(-t)^{\beta^*}$ عند النقطة الحرجة حيث $\beta^* = \frac{1}{3}$ يمكن تجريبيا ملاحظة ان قانون العالمية هذا غير محقق فقط في المنطقة المجاورة للنقطة الحرجة لكن ايضا في المنطقة البعيدة بما فيه الكفاية. لكل نظام معين هناك عائلة من الاسس الحرجة. لتوضيح هذا سنعتبر الانتقال سائل-غاز لمائع ما، الكميات الترموديناميكية التالية السعة الحرارية C_V والفرق بين الكثافتين $(\rho_1 - \rho_g)$ والانضغاط الايزوترمي K_T تتغير على الترتيب ك $|t|^{-\alpha}$ و $(-t)^{\beta^*}$ و $|t|^{-\gamma}$ في جوار النقطة الحرجة [1].

يمكن اثبات باستعمال تقنيات مجموعة اعادة التنظيم ان الاسس الحرجة الثلاثة مرتبطة ببعضها البعض بالعلاقة $\alpha + 2\beta^* + \gamma = 2$ ، وهذا ما يسمى بقانون سلبي للترموديناميك الكلاسيكي لا يؤدي الا الى متراجعة $\alpha + 2\beta^* + \gamma \leq 2$ ، لكن في الواقع هذه المتراجعة هي المساواة [1].

الفصل الثالث:

نموذج ايزينغ و دالة الربط
الثنائية

3-1- تمهيد :

نموذج ايزينغ هو نموذج كان قد اقترحه لنز Lenz على تلميذه ايزينغ من اجل دراسة التحول نحو او من الفيرومغناطيسية الذي نشاهده في كثير من المعادن عندما نغير درجة الحرارة , هذا النموذج يمكن أن يوجد في أي بعد. ففي بعد واحد الحل قدمه ايزينغ نفسه في رسالة الدكتوراة خاصته، اما في بعدين الحل المعقد جدا قدمه اونساجر الذي حصل من خلاله على نوبل، اما بالنسبة النموذج في اربعة ابعاد او اكثر يصبح اضطرابي , يبقى ثلاثة ابعاد الذي هو أهم الابعاد على الاطلاق، والذي تتواجد فيه الاغلبية الساحقة من التحولات الطورية من الدرجة الثانية الموجودة في الطبيعة فيبقى نموذج ايزينغ في هذا البعد غير محلول [3].

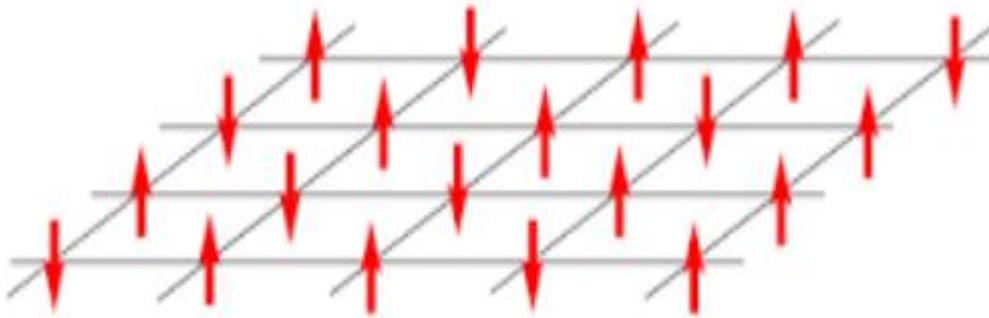
نموذج ايزينغ يتصور شبكة من النقاط في بعدين للتبسيط كما هو في الشكل (3-1) ، في كل نقطة من الشبكة يوجد جسيم يأخذ اما القيمة نصف للسبين او القيمة ناقص نصف، كما نعلم ان السبين هو العزم الحركي الذاتي، او للتبسيط، فان السبين هو مقدار فيزيائي لا يمكنه ان يأخذ الا قيمتين . نفرض ايضا ان كل جسيم لا يتفاعل الا مع جواره الاقرب اي في بعدين و مع الجسيمات الاربعة الاقرب اليه [3]، طاقة الجملة تعطى بالمعادلة التالية:

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j \quad (3.1)$$

3-2- نموذج ايزينغ والميكانيكا الإحصائية:

المغناطيسية هي ظاهرة كمومية بطبيعتها، ومن المثير للاهتمام أن نيلز بور، أحد المبدعين لميكانيكا الكم، قد ساهم في مجال المغناطيسية. فقد أظهر أن النظام الكلاسيكي لا يمكنه أبداً إظهار الفيرومغناطيسية. فلم يكن هناك ميكانيكا الكم لأثبات هذه النظرية ، لذا فإن وجود الفيرومغناطيسيات مثل الحديد دليل واضح ومقنع على أنه لا يمكن وصف الفيزياء الكلاسيكية للعالم بأكمله [5].

العنصر الرئيسي في نظرية المغناطيسية هو سبين الإلكترون والعزم المغناطيسي المرتبط به. تنشأ الفيرومغناطيسية عندما تتعاون مجموعة من هذه السبينات ، بحيث تشير كل عزومها المغناطيسية في نفس الاتجاه مما ينتج عنه حالات ماكروسكوبية بحجم معياري. من القضايا المركزية في دراسة الفيرومغناطيسية وهي من أجل فهم كيف يؤدي التفاعل بين السبينات إلى هذا التوافق الشامل. بما أننا نعلم أيضاً أن الأنظمة عموماً تفقد المغناطيسية في درجات الحرارة العالية ، نود أيضاً أن نفهم لماذا وكيف تعتمد الخصائص المغناطيسية على درجة الحرارة؟ [5].



الشكل (3-1) : نموذج تخطيطي لسبين فيرومغناطيس الحديد في نموذج ايزينغ

يتألف نموذج الفيرومغناطيس في الشكل (3-1) من مجموعة عزوم مغناطيسية، و المشار إليها بالأسهم والتي يمكن أن نعتبرها ذرات مع عزوم مغناطيسية ($\frac{1}{2} = \text{سبين}$) ، للتبسيط نفترض أن هذه السبينات تتموضع على شبكة منتظمة بما أن اللف المغزلي ينسب الى ظواهر ميكانيكية كمومية و بالتالي هذا النموذج من الناحية الكمومية سيتطلب معالجة ميكانيكية كمومية وذلك بأن ندرج جميع قواعد الكم للتعامل مع الزخم الزاوي للسبينات، ففي عمليات المحاكاة اتضح لدينا أن مثل هذا الحساب سيكون صعباً للغاية و بالتالي سنقوم ببعض التبسيط. فقد أظهر الكثير من العمل في هذا المجال أنه على الرغم من التبسيط الذي نحن بصدد القيام به إلا أن نموذجنا يلتقط الفيزياء الأساسية للمغناطيسية [5].

سنفترض أن كل سبين قادر على اخذ اشارة $+z$ أو $-z$ ، أي إما للأعلى أو للأسفل لا يوجد اتجاه آخر مسموح به و بالتالي يمكن أن يحتوي النظام على واحد من القيم الممكنة والتي من السهل اتخاذها $S_i = \pm 1$ و التي تسمى سبينات ايزينغ المتفاعلة مع السبينات الأخرى في الشبكة ؛ في الفيرومغناطيس هذا التفاعل يفضل ان تكون أزواج السبينات متوازية . في مادة مغناطيسية حقيقية سيكون التفاعل أكبر بين السبينات المجاورة ويسقط بسرعة مع زيادة الفصل بين سبينين. و من هذا المنطلق ابسط نموذج هو ايزينغ حيث يتم التفاعل بين أقرب الجيران فقط ، بحيث هاميلتون النظام تكون كالتالي :

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j \quad (3.2)$$

حيث يكون المجموع على جميع الأزواج القريبة للسبينات $\langle i,j \rangle$. و J يُعرف باسم "ثابت التبادل" والذي سنفترض أنه موجب [5].

قبل الشروع في معالجة كمية لنموذج ايزينغ ، من المفيد أولاً توقع السلوك النوعي الذي سنجده في هذه العملية ، سنقدم مراجعة سريعة للميكانيكا الاحصائية فوقاً لدالة الطاقة (3.2) ستحصل على سبينين مجاورين اللذان لهما طاقة تفاعل $-J$ إذا كانا في نفس الاتجاه و $+J$ إذا كانوا متعاكسان. بما أن J موجبة فإن التفاعلات تفضل ان تكون السبينات المجاورة متوازية لكل سبين اخر . إذا كان كل سبين موازي لجيرانه فإن اي سبين في الشبكة سيكون موازياً لأي سبين آخر. مثل هذا الانحياز لجميع العزوم المغناطيسية سيؤدي إلى عزم مغناطيسي غير معدوم للنظام و بالتالي ينتج مغنطيساً و يقال إن النظام الذي يملك عزم مغناطيسي في غياب مجال مغناطيسي لديه مغنطة عفوية [5].

في حين أن طاقة نظام السبين تكون منخفضة إذا كانت كل السبينات متوازية مع واحد آخر، يجب مراعاة تأثير درجة الحرارة المضطربة. سنفترض أن نظام السبين لدينا في حالة توازن مع حمام ساخن عند درجة حرارة T حيث يتم وصف السلوك عن طريق المجموعة القانونية تتمثل إحدى طرق عرض ذلك في أنه مع مرور الوقت مختلف السبينات تتقلب ذهاباً وإياباً و بالتالي "سينتقل" النظام إلى مختلف السبينات المكونة. يعتمد السلوك الذي تم ملاحظته في قياس تجريبي على مقدار الزمن الذي يقضيه النظام في توزيع السبينات المختلفة الممكنة. إنها نتيجة أساسية للميكانيكا الإحصائية أنه بالنسبة لنظام في حالة توازن مع حمام حراري يكون احتمال العثور على النظام في أي حالة جزئية له علاقة بعامل بولتزمان [5]. أي :

$$P_\alpha \sim e^{-E_\alpha/k_B T} \quad (3.3)$$

حيث E_α هي طاقة الحالة α (يجب عدم الخلط بينها و بين سبين i) كما تم حسابها من (3.2) k_B هو ثابت بولتزمان ، و P_α هو احتمال العثور على النظام في الحالة α . كل حالة من هذه الحالات هي توزيع معين من السبينات والتي سوف نشير إليها كحالة مجهرية دقيقة للنظام. إذا كان لدينا شبكة تحتوي على N سبين ايزينغ

يمكن أن يكون كل سبين في حالتين مختلفتين لذلك هناك 2^N حالة مجهرية ممكنة مختلفة للنظام ككل. سنهتم أكثر بالأنظمة التي يكون فيها N كبير وبالتالي سيكون عدد الحالات المجهرية كبيراً جداً هذا سيجعل من الصعب حل المشكلة ولكن سيؤدي أيضاً إلى بعض السلوكيات المثيرة للاهتمام [5].

على سبيل المثال فإن العزم المغناطيسي للحالة المجهرية M_α هو مجموع قيم s_i لكل السبينات في تلك الحالة الجزئية، ويتم قياس مغنطة النظام وتكون:

$$M = \sum_{\alpha} M_{\alpha} P_{\alpha} \quad (3.4)$$

حيث $M_{\alpha} = \sum s_i$ ، مع قيم متغيرات السبين في هذا المجموع مقابلة لاتجاهات السبين في حالة مجهرية α . وبالمثل يمكن التعبير عن الخصائص الأخرى من حيث الاحتمالات P_{α} وهذا شيء مألوف في الميكانيكا الإحصائية وتطرقنا لهذا في الفصل الأول [5].

و لاحقاً سننظر في كيفية حساب الكميات مثل المغنطة وغيرها من الخصائص لنظام السبين لدينا، هذا الحساب صعب بسبب العدد الكبير من الحالات المجهرية. لاحظنا بالفعل أنه بالنسبة لنظام ايزينغ مع N سبين ستكون هناك 2^N حالة وسنكون مهتمين بالأنظمة التي يكون فيها $\infty \rightarrow N$ لذلك سيكون عدد الحالات كبيراً بالفعل وقد أثبتت الأساليب التحليلية أنها هائلة للغاية وهناك عدد قليل نسبياً من النتائج الدقيقة المعروفة لهذه الأنظمة وهذا ما يجعل المحاكاة حل لهذه المشكلة [5].

من المثير للاهتمام أيضاً النظر في تأثير زيادة نطاق التفاعلات بين السبينات، بمعنى أنه يمكننا السماح للسبينات على ثاني أو ثالث أو أكثر بعد للجيران بالتفاعل. بالإضافة إلى ذلك هناك احتمال أن نظام السبين الحقيقي قد يتعين التعامل مع ميكانيكا الكم وهذا يجعل مهمتنا أكثر تحدياً فكل هذه النماذج من المغناطيسية تظهر خصائص مثيرة للاهتمام. أظهر هذا العمل أن نموذج ايزينغ البسيط له العديد من الميزات الأساسية للانتقال الطوري إلى الحالة الفيرومغناطيسية وهذا يجعلها مثالية لدراسة التحولات الطورية [5].

3-2-1- نموذج ايزينغ بأبعاد d:

نعتبر شبكة دورية بأبعاد d مع n نقاط في كل اتجاه بحيث تكون هناك $N = n^d$ نقاط في مجموع هذه الشبكة. في كل نقطة (موضع الشبكة)، نضع متغير السبين s_i ($i = 1, \dots, N$) والذي يمكن أن يأخذ القيمة $+1$ أو -1 . لذلك يتم تحديد تركيب هذا النظام من N سبين بواسطة مجموعة من الأرقام $\{s_i\}$ [6]، يتم إعطاء طاقة نظام N سبين في نموذج ايزينغ بالتركيب $\{s_i\}$ بواسطة:

$$E_I\{s_i\} = - \sum_{\langle ij \rangle} \epsilon_{ij} s_i s_j - B \sum_{i=1}^N s_i \quad (3.5)$$

حيث B هو المجال المغناطيسي الخارجي، و نرمز بالرمز $\langle ij \rangle$ إلى أقرب سبين مجاور. يمتد المجموع على $\langle i \rangle$ إلى أكثر من $\frac{\gamma N}{2}$ حيث $\gamma = 4, 6, 8$ هو عدد أقرب الجيران. في أبعاد (2, 3, 4) والمعامل ϵ_{ij} هي طاقة السبينات بين i و j . للتفاعلات الخواص $\epsilon = \epsilon_{ij}$. من أجل $\epsilon > 0$ نحصل على الفيرومغناطيسية بينما بالنسبة لـ $\epsilon < 0$ نحصل على ضد الفيرومغناطيسية [6]. نعتبر فقط $\epsilon > 0$ الطاقة هي:

$$E_I\{s_i\} = - \epsilon \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j - B \sum_{i=1}^N s_i \quad (3.6)$$

يتم إعطاء دالة التقسيم بواسطة:

$$Z = \sum_{s_1} \sum_{s_2} \dots \sum_{s_N} e^{-\beta E_I\{s_i\}} \quad (3.7)$$

هناك 2^N عبارة في المجموع و $\beta = \frac{1}{k_B T}$.

3-2-2- نموذج ايزينغ في بعد واحد:

كان ايزينغ قادراً على حل النموذج في 1D في أطروحته لكن وجد أنه في بعد واحد لم يحمل أي تحولات طورية (باستثناء المعنى الدقيق للكلمة في $T = 0$).

في بعد واحد يمكن حل نموذج ايزينغ بالضبط باستخدام طريقة مصفوفة النقل. من أجل التبسيط نضع في الاعتبار شبكة دورية تتكون من مواقع N (حلقة انظر الشكل (2-3)). هاميلتون في بعد واحد هو:

$$H_N = -J \sum_{i=0}^{N-1} s_i s_{i+1} - h \sum_{i=0}^{N-1} s_i \quad (3.8)$$

حيث شروط الحدود الدورية $s_N = s_0$

دالة التقسيم للمواقع N هي:

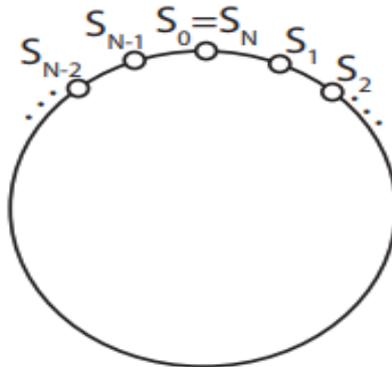
$$Z_N = \sum_{\{s\}} e^{(\beta J(s_0 s_1 + s_1 s_2 + \dots + s_{N-1} s_0) + \beta B(s_0 + s_1 + \dots + s_{N-1}))} \quad (3.9)$$

حيث $\{s\}$ يعني أن تتلخص كافة التوزيعات المشتركة في كل s_i من المعادلة (3.9)، نذكر أن J هو أقرب الجيران و B المجال المغناطيسي الخارجي. تكمن الفكرة الآن في تجزئة دالة التقسيم إلى أزواج سبينات [7]، مما يؤدي:

$$Z_N = \sum_{\{s\}} e^{(\beta J s_0 s_1 + \beta B \frac{s_0 + s_1}{2})} e^{(\beta J s_1 s_2 + \beta B \frac{s_1 + s_2}{2})} \dots e^{(\beta J s_{N-1} s_0 + \beta B \frac{s_{N-1} + s_0}{2})} \quad (3.10)$$

نلاحظ أن كل من العوامل في \exp في المعادلة (3.10) يمكن أن تأخذ واحدة من القيم الأربعة وهذا يتوقف على توزيع السبينين المعنيين. وأكثر ملاءمة لجمع هذه المصطلحات الأربعة كمعاملات في مصفوفة 2×2 .

$$T_{i,i+1} = e^{(\beta s_i s_{i+1} + \beta B \frac{s_i + s_{i+1}}{2})} \quad (3.11)$$



الشكل (2-3): نموذج ايزينغ في بعد واحد .

كل من المواقع N لديها اثنين من أقرب الجيران. كما ذكرنا سابقاً شروط الحدود الدورية، والتي يتم فرضها عن طريق الترتيب $s_0 = s_N$ أي أن نظام في 1D يصبح حلقة مغلقة من المواقع N [7].

أو أكثر صراحة :

$$\begin{bmatrix} e^{\beta(J+B)} & e^{-\beta(J)} \\ e^{-\beta(J)} & e^{\beta(J-B)} \end{bmatrix} \quad (3.12)$$

حيث تتوافق الصفوف مع قيمتي $s_i = \pm 1$ والأعمدة تتوافق مع قيمتي $s_{i+1} = \pm 1$. من البديهي هنا التفكير في جمع التصنيفات بدلاً من ترتيب القيود. بلغة رياضية , ما يمكن فعله هنا هو التبدل إلى الشبكة المزدوجة أي شبكة الروابط. حيث نلاحظ أنه في نموذج ايزينغ المجاور ذي البعد الواحد لا تزال الشبكة المزدوجة سلسلة أحادية البعد. بالنسبة للشبكة المربعة ثنائية الأبعاد فإن الشبكة المزدوجة هي أيضاً شبكة مربعة أما بالنسبة للشبكة المثلثة ثنائية الأبعاد تصبح شبكة المزدوجة شبكة سداسية حيث يوجد في كل موقع ستة جيران أقرب [7].

نعود إلى المشكلة أحادية البعد: تتحول دالة التقسيم إلى نتاج N مصفوفات 2×2 متطابقة حيث يضمن تكاثر المصفوفة بشكل جميل والقيود الذي يفيد بأن اختيار اتجاه السبينات في الموقع يجب أن يكون ثابتاً من مصفوفة واحدة (تكوين الأعمدة لمصفوفة واحدة يطابق تكوين الصفوف للمجاورة) [7]. وبالتالي تبسط دالة التقسيم لـ:

$$Z_N = \sum_{s_0=\pm 1} (T^N)_{0,0} = T_r(T^N) = \sum_i \lambda_i^N \quad (3.13)$$

حيث λ هي القيم الذاتية لـ T و T_r هو اثر مصفوفة (T^N)

المشكلة إذن تتلخص في إيجاد القيم الذاتية لـ T , أي الحل:

$$\det(T - \lambda I) = 0 \quad (3.14)$$

هذا يعطي:

$$(e^{\beta(J+B)} - \lambda)(e^{\beta(J-B)} - \lambda) - e^{-2\beta J} = 0 \quad (3.15)$$

وبالتالي:

$$\lambda_{1/2} = e^{\beta J} \cosh \beta B \pm \sqrt{e^{2\beta J} \sinh^2 \beta B + e^{-2\beta J}} \quad (3.16)$$

في الحد الديناميكي الحراري أي لما $N \rightarrow \infty$ من السهل حساب الطاقة الحرة لكل موقع. على افتراض أن القيم الذاتية مدرجة في تناقص الحجم أي $\lambda_1 > \lambda_2$ [7].

$$F = -k_B T \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln Z_N \quad (3.17)$$

$$= -k_B T \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln [\lambda_1^N + \lambda_2^N] \quad (3.18)$$

$$= -k_B T \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln \left[\lambda_1^N \left(1 + \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right)^N \right) \right] \quad (3.19)$$

في الحد الديناميكي الحراري الحد $\left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right)^N \rightarrow 0$ والطاقة الحرة لكل موقع هي فقط :

$$F = -k_B T \ln \lambda_1 \quad (3.20)$$

$$= -k_B T \ln \left[e^{\beta J} \cosh \beta h + \sqrt{e^{2\beta J} \sinh^2 \beta h + e^{-2\beta J}} \right] \quad (3.21)$$

3-2-3- نموذج ايزينغ في بعدين:

من خلال العبارة (3.7) لدينا 2^n حد في الجمع الظاهر في دالة التوزيع في حالة بعدين ($d = 2$) يكون لدينا عدد الحدود متساوي الى $N = n^2$ سبين في الشبكة المربعة . ان هذه التشكيلات $\{s_i\}$ يمكن ان نرى على انها مصفوفات $n \times n$ [9].

نفترض الشروط الدورية حيث تعتبر مصفوفة $(n + 1) \times (n + 1)$ كالآتي :

- هو ان الصف $(n + 1)$ هو بالضبط السطر الأول .
- و العمود $(n + 1)$ هو بالضبط العمود الأول .
- و بالتالي الشبكة المربعة هي تورس [8] .

3-3- نظرية الحقل المتوسط :

و هي طريقة تقريبية جيدة لحساب خصائص نظام السبين سنستخدمه لتقديم وتوضيح العديد من الميزات المثيرة للاهتمام في التحولات الطورية إلى جانب بعض الحسابات العددية في حين أن الطريقة الحسابية التي تم اكتشافها هنا هي أداة نوعية مفيدة لدراسة التحولات الطورية و نتائجها ليست دقيقة من الناحية الكمية [5] .

ترتبط المغناطيسية ارتباطاً وثيقاً بانحياز متوسط السبين $\langle s_i \rangle$ ، حيث تشير الأقواس الزاوية إلى المتوسط الحراري. من الجيد التفكير في هذا كمعدل زمني للنظام في حالة توازن حراري مع حمام حراري. كما هو موضح في العنوان 2-3 ، يتسبب التفاعل مع حمام حراري في قلب السبين من +1 إلى -1 والعكس بالعكس. بالنسبة لنظام كبير لا نهائي ، فإن جميع السبينات لها نفس معدل الانحياز. يمكن ملاحظة ذلك من خلال أن السبينات جميعها متكافئة ، بمعنى أن كل واحد يتفاعل مع أربعة من أقرب الجيران ويكون كل منهم بعيداً تماماً عن أي حدود. وبالتالي يجب أن يكون كل سبين له نفس الخصائص المتوسطة [5]. فإن المغناطيسية الكلية في درجة حرارة T لنظام فيه N سبين تعطى بـ:

$$M = \sum_i \langle s_i \rangle = N \langle s_i \rangle \quad (3.27)$$

العبارة P_α المذكورة في (8.2). هذه مهمة جداً، لذلك نعتبر هذا بديلاً تقريبياً يعرف بنظرية الحقل المتوسط [5]. إذا أضفنا مجالاً مغناطيسياً إلى المشكلة ، تصبح دالة الطاقة بـ :

$$E = -J \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j - \mu B \sum_i s_i \quad (3.28)$$

حيث B هو المجال المغناطيسي و μ هو العزم المغناطيسي المرتبط بكل سبين (مقارنة بـ (3.2)). هذا الحقل يميل الى جعل السبينات في اتجاه موازي لـ B ، هذا يقلل الطاقة. للحصول على تقريب الحقل المتوسط ، نفترض أولاً أن نظامنا يحتوي على لف واحد فقط s_i ، بحيث تكون الطاقة الوحيدة المستخدمة هي طاقة الحقل. سبين المفرد له حالتان ممكنتان $s_i = \pm 1$ ، طاقتاهما هي $E_\pm = \mp \mu B$ [5] . يتم إعطاء احتمالات العثور على "النظام" في هاتين الحالتين P_\pm بواسطة (3.3) كالآتي:

$$P_- = Ce^{-\mu B/k_B T} , \quad P_+ = Ce^{+\mu B/k_B T} \quad (3.29)$$

حيث C هو معامل يمكن تحديده من خلال اشتراط أن الاحتمالين يضيفان إلى الوحدة. هذه الحقول :

$$C = \frac{1}{e^{+\mu B/k_B T} + e^{-\mu B/k_B T}} \quad (3.30)$$

يمكن بعد ذلك حساب المتوسط الحراري لـ s_i :

$$\langle s_i \rangle = \sum_{s_i = \pm 1} s_i P_{\pm} = P_+ - P_- = \tanh(\mu B / k_B T) \quad (3.31)$$

هذه هي النتيجة الدقيقة لسلوك السبين المفرد في الحقل المغناطيسي. نستخدمها الآن للحصول على حل تقريبي لنظام له N سبين متفاعل. يستند تقريب المجال المتوسط على افتراض أن تفاعل السبين s_i مع السبينات المجاورة له وهو ما ينتج عنه عبارة الجانب الأيمن من (3.28) يعادل مجال مغناطيسي فعال يعمل على s_i . يمكن بعد ذلك حساب نتيجة $\langle s_i \rangle$ باستخدام (3.31) مع استبدال B بالمجال الفعال B_{eff} . يبقى لنا أن نقدر B_{eff} [5].

يمكن إعادة كتابة دالة الطاقة (3.28) من خلال :

$$E = -\left(J \sum_{\langle ij \rangle} s_j\right) s_i - \mu B s_i \quad (3.32)$$

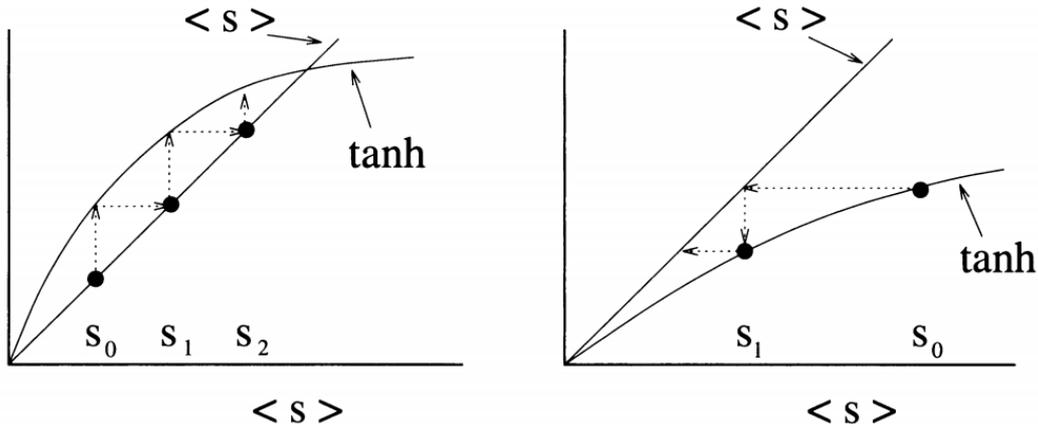
مما يدل على أن العبارة التي تتضمن J (الذي يصف تفاعل s_i مع جيرانه) له شكل حقل مغناطيسي مع $\mu B_{eff} = J \sum s_j$. بالتقريب نفترض أن متغيرات السبين s_j في هذا التعبير لـ B يمكن استبدالها بمعدلاتها الحرارية. للدلالة على ذلك بواسطة $\langle s \rangle$ وافترض أن الحقل "الحقيقي" المطبق خارجياً هو $B = 0$ ، لدينا :

$$H_{eff} = \frac{J}{\mu} \sum \langle s \rangle = \frac{zJ}{\mu} \langle s \rangle \quad (3.33)$$

حيث z هو عدد أقرب الجيران الذين يجمعون هذا مع (3.31) يؤدي إلى النتيجة :

$$\langle s \rangle = \tanh\left(\frac{zJ \langle s \rangle}{k_B T}\right) \quad (3.34)$$

هذه علاقة ضمنية لـ $\langle s \rangle$ والتي لا يمكن حلها تحليلياً إلا في حدود معينة مثلاً عندما تكون $\langle s \rangle$ صغيرة لذلك نعتبر النهج العددي [5].



الشكل (3-3) : طريقة الاسترخاء

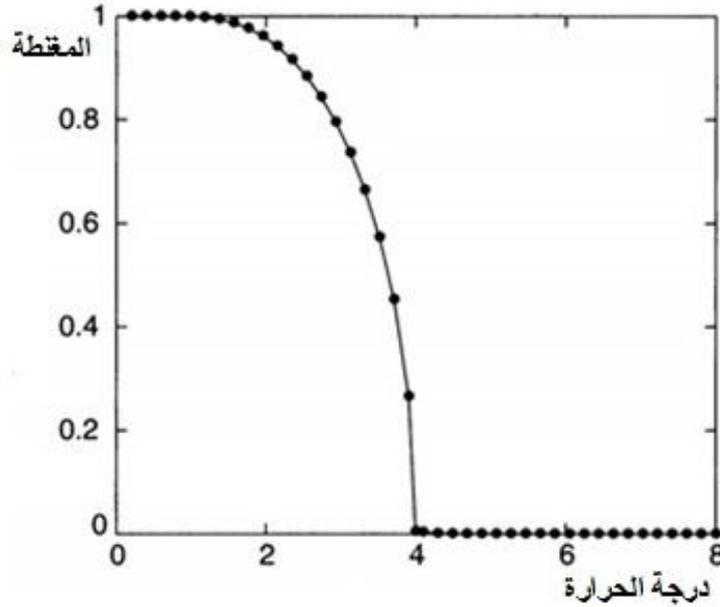
يوضح الشكل (3-3) حل المجال المتوسط لـ $\langle s \rangle$ كدالة لدرجة الحرارة التي يتم الحصول عليها باستخدام طريقة الاسترخاء نظراً لأن المغناطيسية تتناسب مع $\langle s \rangle$ و هناك مغنطة عفوية $M > 0$ في درجات حرارة منخفضة أي أن النظام الفيرومغناطيسي في درجات الحرارة العالية يسيطر التأثير المضطرب ويكون النظام بارامغناطيسياً مع $M = 0$. الانتقال بين هاتين المرحلتين مفاجئ ، فيحدث في ما يعرف باسم درجة الحرارة الحرجة T_c . تتوقع نظرية الحقل المتوسط أن $T_c = 4$ في هذه الحالة (أي ، أخذ $J/k_B = 1$) [5].

هذا مثال على الانتقال الطوري من الدرجة الثانية وله بعض السمات المهمة المشتركة . المغنطة العفوية هي ما يُعرف باسم معامل الترتيب لهذا الانتقال وبصورة تقريبية فإنه يحدد المرحلة التي يدخل فيها النظام هنا يتم العثور على قيمة غير معدومة لمعامل الترتيب M عندما يكون النظام في الطور الفيرومغناطيسي، بينما $M = 0$ تعني أنه بارامغناطيسية. تشير النتائج في الشكل (4-3) إلى أن M تختفي بطريقة مفردة في T_c ، حيث يصبح الميل dM/dT كبير جداً لما $T \rightarrow T_c$. يمكن الحصول على شكل هذا التفرّد بشكل تحليلي باستخدام $\tanh(x) \approx \frac{x-x^3}{3}$ الصغيرة. وبالتالي عندما تكون $\langle s \rangle$ صغيرة، المعادلة (3.34) تصبح :

$$\langle s \rangle \approx \frac{zJ\langle s \rangle}{k_B T} - \frac{1}{3} \left(\frac{zJ\langle s \rangle}{k_B T} \right)^3 \quad (3.35)$$

التي لديها حلول $\langle s \rangle = 0$ و :

$$\langle s \rangle = \sqrt{\frac{3}{T} \left(\frac{k_B T}{zJ} \right)^3} \left(\frac{zJ}{k_B} - T \right)^{1/2} \sim (T_c - T)^\beta \quad (3.36)$$



الشكل (3-4) : حل معادلة الحقل المتوسط باستخدام عملية الاسترخاء

حيث قمنا في الخطوة الأخيرة بتحديد الهوية $T_c = zJ/k_B$ ($= 4$ لاختيارنا لـ J بالاتفاق مع النتائج العددية في الشكل (3-3)) و $\beta = 1/2$. المعامل β هي الأس الحرجة [5].

4-3- طريقة مونت كارلو:

لقد لاحظنا أن نظرية الحقل المتوسط تتوقع حدوث انتقال مفاجئ بين المرحلتين الفيرومغناطيسية و البارامغناطيسية لنموذج ايزينغ . لاحظنا أيضاً أنه على الرغم من أن تقريب الحقل المتوسط صحيح في التنبؤ بالسلوك المفرد بالقرب من T_c إلا أنه لا ينتج عموماً القيم الصحيحة للأسس الحرجة ويلزم اتباع نهج أكثر قوة للحصول على صورة كمية دقيقة للسلوك - لا سيما بالقرب من المرحلة الانتقالية - في ما يلي نعتبر مقاربة و التي تعرف باسم "طريقة مونت كارلو" ، وبدلاً من البدء بتعريف تجريدي للطريقة ، وسنقوم بوصف كيف تعمل الطريقة بعد أن اكتسبنا بعض الميزات في تشغيلها ، سنناقش لماذا تعمل ؟ [5] .

هدفنا هو محاكاة كيفية تفاعل نظام سبين مع البيئة المحيطة به في الفيزياء الإحصائية غالباً ما تسمى البيئة حمام ساخن. سننظر في الحالة الخاصة لمجموعة سبينات ايزينغ ، وفقاً للميكانيكا الإحصائية يتمثل دور الحمام الحراري في تبادل الطاقة مع نظام السبين وبالتالي يتم إدخاله في حالة توازن عند درجة حرارة معينة T . حيث يكتسب النظام الطاقة من و يفقد الطاقة إلى الحمام ، تنقلب السبينات مما يسبب للنظام المزيد من الحالات المجهرية الجديدة. كل من هذه الحالات المجهرية تتوافق مع ترتيب معين للسبين. تعتمد قيم الكميات المقاسة مثل المغطة على احتمالات العثور على النظام في حالاته المختلفة [5] .

تستخدم طريقة مونت كارلو أسلوباً عشوائياً لمحاكاة تبادل الطاقة بين نظام السبينات والحمام الحراري. نبدأ مع النظام في حالة مجهرية معينة كما هو موضح في الشكل (3-1) على غرار التفاعل مع الحمام على النحو التالي حيث يتم اختيار سبين ويتم حساب الطاقة اللازمة لجعله ينقلب E_{flip} ، من أجل نموذج ايزينغ يتم حساب هذه الطاقة باستخدام (3.2) . إذا كانت E_{flip} سالبة (يتم خفض الطاقة عن طريق عكس السبين) ينقلب السبين ويتحرك النظام إلى حالة مجهرية مختلفة. فإذا كانت E_{flip} موجبة (بحيث يتم زيادة طاقة النظام) يتم إنشاء عدد عشوائي و يتم توزيعه بشكل موحد في النطاق بين 0 و 1 ومقارنته بعامل

بولتزمان $e^{-E_{flip}/k_B T}$. إذا كان عامل بولتزمان أكبر من الرقم العشوائي يتم قلب السبين وإلا فإن السبين يترك دون قلبه وبالتالي في هذه الحالة قد ينتقل النظام أو لا ينتقل إلى حالة مجهرية مختلفة اعتماداً على قيمة الرقم العشوائي و يتم حساب E_{flip} و ينقلب سبين آخر أو لا ينقلب وفقاً للخوارزمية الموصوفة للتو [5].

يتكرر هذا الإجراء كثيراً من المرات بحيث يعطى لكل سبين العديد من فرص الانقلاب يختلف تأثير هذا التفاعل وفقاً لدرجة الحرارة ، حيث إن T يدخل في احتمال عامل بولتزمان لقلب السبين. دعونا الآن نفكر لماذا تحاكي خوارزمية مونت كارلو هذا التفاعل بشكل صحيح. مما سبق يقلب السبين الذي يتم اختياره عندما تكون $E_{flip} < 0$ أي عندما تقلل من طاقة النظام. إذا كانت هذه هي معايير الانقلاب الوحيدة فإن النظام سينتقل سريعاً إلى الحالة ذات الطاقة الأقل والتي تعد نموذجاً دقيقاً لكل الذرات المتوازية مع بعضها وهي الحالة الفيرومغناطيسية. ويجب أن نسمح أيضاً بالانتقال إلى حالات الطاقة الأعلى التي يجب أن تخضع احتمالاتها لعامل بولتزمان $e^{-E_{flip}/k_B T}$ مع $E_{flip} > 0$. في درجات الحرارة المنخفضة يكون هذا العامل صغيراً لذا فإن احتمال قلب السبين إلى حالة طاقة أعلى منخفض جداً. وبالتالي في درجات الحرارة المنخفضة عادةً ما يكون النظام موجوداً في حالة مجهرية قريبة جداً من الحالة المتوافقة تماماً (الحالة ذات الطاقة الأقل). وبالتالي فإن النظام سيكون فيرومغناطيسي. على الرغم من أن M لن يكون لها القيمة المطابقة للتكملة كاملة. في درجات الحرارة المرتفعة لن يكون معامل بولتزمان قريباً من الصفر وبالتالي فإن احتمال الانقلاب إلى حالة طاقة أعلى سيكون مهماً جداً. في الواقع عندما تصبح T كبيرة للغاية فإن العامل الأسّي في بولتزمان سوف يقترب من 1 وهذا سيجعل ترتيب السبين يميل نحو العشوائية الكاملة ، هذه هي الحالة البارامغناطيسية [5].

يتضح مما سبق أن إجراء انقلاب مونت كارلو يعطي الصورة النوعية الصحيحة في كل من الحدود المرتفعة والمنخفضة لدرجة الحرارة و بالنسبة للأمور الكمية فتقلب سبين مونت كارلو يربط اثنين من الحالات المجهرية دعونا ندعو طاقاتهم E_1 و E_2 ونفترض أن $E_1 > E_2$ إذا كان النظام في الحالة 1 ، قواعد الانقلاب تحدد احتمال انقلاب السبين المحدد خلال خطوة زمنية معينة وبالتالي معدل الانتقالات من الحالة 1 إلى الحالة 2 هو $W(1 \rightarrow 2)$ ومنذ افتراض $E_1 > E_2$ تخبرنا القواعد أن $W(1 \rightarrow 2) = 1$ و بالمثل إذا كان النظام في الحالة 2 ، فإن احتمال انتقال مونت كارلو إلى الحالة 1 خلال الخطوة التالية هي $W(2 \rightarrow 1) = e^{-(E_1-E_2)/k_B T}$ ، لأن $E_{flip} = E_1 - E_2 > 0$. عندما يصل نظامنا إلى التوازن الحراري يكون احتمال العثور عليه في أي حالة معينة مستقلاً عن الزمن ، لذلك نتوقع أن يكون عدد المراحل الانتقالية من الحالة 1 إلى الحالة 2 مساوياً لعدد التحولات في الاتجاه المعاكس يتناسب عدد التحولات من نوع معين مع ناتج معدل الانتقال W واحتمال وجود النظام في الحالة الأولية المناسبة. يعطي عدد التحولات من 2-1 و 1-2 بـ :

$$P_1 W(1 \rightarrow 2) = P_2 W(2 \rightarrow 1) \quad (3.37)$$

حيث P_1 و P_2 هي احتمالات النظام الموجود في هاتين الحالتين الصغيرتين. ندرج نتائج عوامل W التي نجدها في :

$$\frac{P_1}{P_2} = e^{\left[\frac{-(E_1-E_2)}{k_B T} \right]} \quad (3.38)$$

بمقارنة هذا السلوك بـ (3.3) نرى أن هذا هو بالضبط ما هو متوقع لنظام في التوازن الحراري. تؤدي خوارزمية مونت كارلو وبالتالي إلى وضع يتم فيه إعطاء الاحتمالات النسبية التي تكون موجوده في مختلف

الحالات المجهرية بواسطة عامل بولتزمان. فإن هذا الإجراء سيحاكي بالفعل نظامًا على اتصال مع حمام حراري [5].

و نلخص ما سبق في النقاط التالية :

- 1- يتم اختيار سبين و حساب الطاقة اللازمة لجعله ينقلب E_{flip} .
- 2- اذا كانت $E_{flip} < 0$ ينقلب السبين و يتحرك النظام الى حالة مجهرية مختلفة .
- 3- اذا كانت $E_{flip} > 0$ يتم انشاء عدد عشوائي $0 < r < 1$ و يتم مقارنته بعامل بولتزمان .
- 4- اذا كان عامل بولتزمان اكبر من العدد العشوائي يتم قلب السبين و غير ذلك فانه يتترك دون قلبه .
- 5- يتم حساب E_{flip} .
- 6- يتكرر الاجراء .
- 7- قسمة مختلف القيم المتوسطة على العدد الاجمالي للسبينات .

3-5- الكميات الفيزيائية في نموذج ايزينغ :

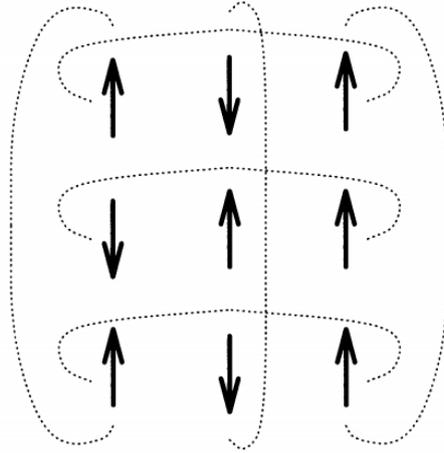
3-5-1- نموذج ايزينغ و التحولات الطورية من الدرجة الثانية :

الآن على استعداد لتطبيق طريقة مونت كارلو على دراسة التحولات الطورية في نموذج ايزينغ . سنواجه نوعين من التحولات والتي تصنف على أنها من الدرجة الأولى والثانية و بدلاً من محاولة تقديم تعريف عام تمامًا لهذه التصنيفات وكل ما تستلزمه الذي سبق و قمنا بتوضيحه في الفصل الثاني ، سنقوم بتوضيحها بطريقة اخرى في ما يلي [5] .

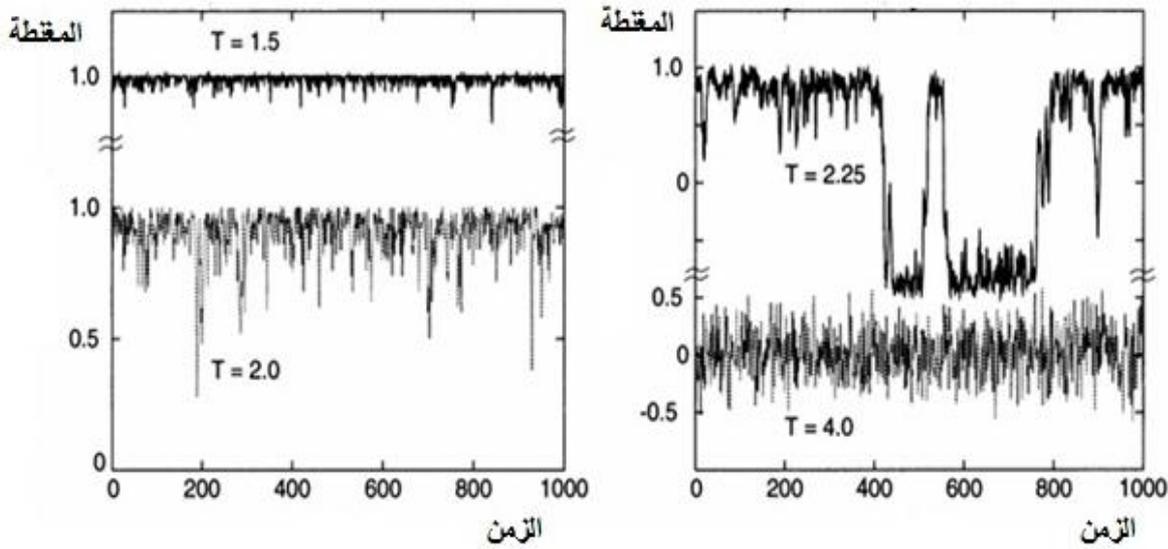
نموذجنا هو مرة أخرى مجموعة من سبينات ايزينغ مرتبة على شبكة مربعة كما هو موضح في الشكل (3-1). تتفاعل السبينات مع بعضها البعض في مجال مغناطيسي وفقاً لدالة الطاقة (3.28). نبدأ النظر في حالة $B = 0$ على العموم نقيس الطاقة بوحدة k_B ونأخذ $J = 1$ بحيث تكون T بلا وحدة .

من الناحية المثالية نود حساب سلوك الأنظمة الكبيرة جدًا عادة ما يحتوي المغناطيس الحقيقي مثل قطعة من الحديد على عدد كبير من السبينات (من أجل 10^{23}) وأحد أهدافنا هو فهم سلوك النظام الحقيقي سيتضح أن التحولات الطورية الموصوفة أعلاه تحدث فقط في حدود الأنظمة الكبيرة جدًا ومع ذلك فإن الكمبيوتر يتطلب إجراء محاكاة دقيقة تقتصرها على المشابك التي لا تحتوي على أكثر من $10^3 \sim$ سبين. لهذا النظام محدود يمكن أن يكون لسلوكيات السبينات عند الحواف تأثير واضح [5].

نفترض أن السبينات على الحافة تتفاعل أيضًا مع السبينات على الحافة المقابلة للشبكة ، كما هو موضح في الخطوط المنقطعة التي تلتف حول الشبكة يمكننا أن نتخيل أن الشبكة تقع على محرك مستدير لذا فإن هذه الحلقات "الحافة" هي بالفعل جيران لبعضهم البعض. في كلتا الحالتين قمنا بطريقة ما بالقضاء على كل الحواف للسبينات. كل سبين الآن لديه أربعة جيران بحيث تكون جميع السبينات في مواقع مكافئة [5].



الشكل (3-5): نموذج ايزينغ في شروط الحدود الدورية



الشكل (3-6): المغطة بدلالة الزمن لنموذج ايزينغ على شبكة مربعة 10×10 في درجات حرارة مختلفة

يتيح لنا استخدام شروط الحدودية الدورية التحايل إلى حد كبير على تأثيرات الحدود , وهذا لا يعني أن شبكة 5×5 مع شروط الحدود الدورية سوف تتصرف بنفس الطريقة مثل شبكة أكبر. بالنسبة لشبكة $L \times L$ ذات شروط حدود دورية , لا يمكن أن تكون المسافة بين اثنين من السبينات أكبر من $L/\sqrt{2}$ وهي أقصى فصل على طول قطري [5].

3-5-2- المحاكاة في نموذج ايزينغ :

بالنسبة لعمليات المحاكاة نبدأ في درجات حرارة منخفضة أين يكون النظام في حالة فيرومغناطيسية. سنختار توزيعاً أولياً للسبينات مع كل السبينات على طول الاتجاه الموجب ونستخدم مونت كارلو لحساب المغطة كدالة في الزمن مع استمرار المحاكاة. بعض النتائج لشبكة 10×10 في عدة درجات حرارة مبينة في الشكل (3-6). هنا بوحدة الزمن يتوافق مع مرور كامل من خلال الشبكة بحيث كان لكل سبين الفرصة لقلب مرة واحدة خلال كل خطوة زمنية. عند أدنى درجة حرارة تظل المغطة قريبة جداً من قيمة التشبع المقابلة لجميع السبينات التي تكون متوازية. في حين تؤدي قواعد مونت كارلو إلى التقلب العرضي في الاتجاه

المعكس، التقلبات في M صغيرة عندما يتم رفع درجة الحرارة إلى $T = 2.0$ ومتوسط قيمة M ينخفض إلى حوالي 90 في المائة من القيمة الكاملة للمحاذاة حيث أن عامل بولتزمان في درجة الحرارة هذه يفضل قلب السبين في حالة الطاقة العليا للنظام التي تبلغ 10 في المائة من الزمن. لا يزال نظامنا فيرومغناطيسي ولكن يتم تقليل درجة الترتيب في درجات حرارة منخفضة بالإضافة فإن حجم التقلبات يزيد بشكل كبير. هذه التقلبات مهمة لعدة أسباب. أولاً سنرى كيف يمكن استخدامها بين تأرجحات الميكانيكا الإحصائية لحساب العديد من الكميات الديناميكية الحرارية الأخرى. وثانياً تشير هذه التقلبات المحسنة إلى أننا نقترّب من مرحلة الانتقال من الدرجة الثانية والمعروفة أيضاً باسم النقطة الحرجة. وهو نظام في النقطة الحرجة حساس للغاية للاضطرابات الصغيرة حيث تتغير خصائصه بسرعة كبيرة استجابة للتغيرات في درجة الحرارة و المجال المغناطيسي. سنرى أن هذه التقلبات ترتبط ارتباطاً وثيقاً بالخصائص في T_c [5].

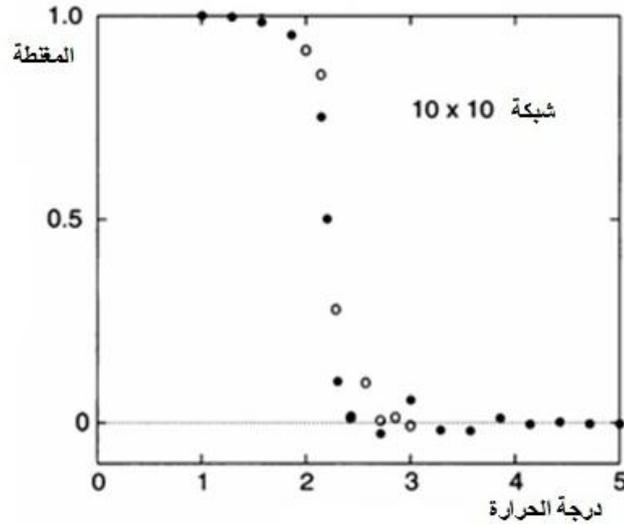
3-5-3- المغنطة في نموذج ايزينغ :

عندما نسخن أكثر إلى $T = 2.25$ تصبح التقلبات أكبر حيث يتقلب النظام بين قيم أكبر من $\pm M$ 0.8. وبالتالي هناك تقلبات تغير اتجاه العزم المغناطيسي للنظام بأكمله بالنسبة لنموذج ايزينغ على الشبكة المربعة تسفر الحسابات التحليلية عن النتيجة $T_c = 2/\ln(1 + \sqrt{2}) \approx 2.27$ ، لذلك نحن قريبون جداً من النقطة الحرجة. بعد ارتفاع درجات الحرارة نجد أنه في $T = 4$ تقل التقلبات في الحجم وتتركز حول $M \sim 0$. و هنا أعلى بكثير من T_c في المرحلة البارامغناطيسية. بمقارنة السلوك في درجات حرارة مختلفة نرى أن التقلبات أكبر بالقرب من T_c . سنقوم بتحليلها بمزيد من التفاصيل فيما يلي [5].

من المحاكاة في درجات حرارة مختلفة يمكننا حساب متوسط قيم M بمرور الزمن للحصول على مغنطة كدالة لـ T وتظهر بعض النتائج في الشكل (3-8). في حين أن هناك بعض التشتت في النتائج بسبب الأخطاء الإحصائية ، فإن M تنخفض إلى الصفر عند قيمة T وهو ما يتماشى مع القيمة المعروفة بالضبط لدرجة الحرارة الحرجة كما ذكرنا للتو ($T_c \approx 2.27$). يمكن تحسين الجودة الشاملة لهذه النتائج بعدة طرق. أولاً يمكننا محاكاة عمليات التشغيل لفترة أطول باستخدام المزيد من خطوات مونت كارلو في المتوسط عند كل درجة حرارة هذا من شأنه أن يقلل من الأخطاء الإحصائية بمعدل يتناسب تقريباً مع $N_{steps}^{-1/2}$ حيث $N_{steps}^{-1/2}$ هو عدد الخطوات الزمنية لمونت كارلو المستخدمة في الحساب. ثانياً يمكننا دراسة سلوك الشبكات الكبيرة والاستقرار إلى حد الشبكة اللانهائية [5].

من المثير للاهتمام مقارنة نتائج مونت كارلو لـ M مع التنبؤ بنظرية الحقل المتوسط الشكل (3-4). في حين أن للنتيجتين نفس الشكل النوعي ، فإن نظرية المجال المتوسط تبالغ في تقدير T_c بحوالي معامل 2. بالإضافة فإن التنبؤ بمتوسط الحقل لـ M يذهب إلى الصفر عند T_c بشكل تدريجي أكثر مما نجده في نتائج مونت كارلو. و يتم تحديد تباين M قرب T_c بواسطة الأس الحرج β لـ :

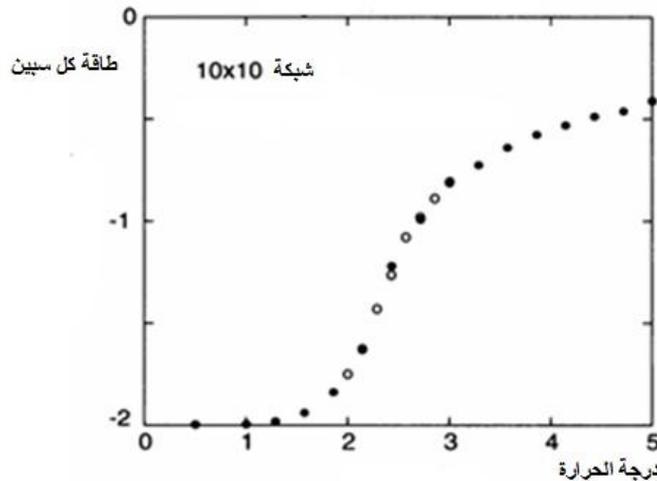
$$M \sim (T_c - T)^\beta \quad (3.49)$$



الشكل (7-3) : مغطاة عفوية كدالة لدرجة الحرارة لنموذج ايزينغ على شبكة مربعة 10×10 .

3-5-4- الطاقة في نموذج ايزينغ :

في الشكل (7-3) يظهر تغيرات الطاقة مع درجة الحرارة. تم الحصول على ذلك من نفس عمليات المحاكاة المستخدمة لحساب M بعد مرور مونت كارلو عبر الشبكة سجل برنامجنا E (تم حسابه باستخدام (3.32)) في درجات حرارة منخفضة السبينات تكون بمحاذاة و كل سبين لديه طاقة تفاعل $-J$ مع كل أقرب جيرانها الأربعة وبالتالي يجب أن تكون الطاقة الكلية عند $T = 0$ هي $-4NJ/2$ حيث N هو عدد السبينات ذات المعامل 2 لأنه زوج من السبينات. نتائج مونت كارلو جيدة مع هذه النتيجة في الحد $T \rightarrow 0$ من ناحية أخرى و في درجات الحرارة المرتفعة للغاية سوف تكون السبينات بشكل عشوائي اي سيكون لكل سبين سبينان متجاوران متوازيان و اثنان متعاكسان وبذلك يكون المتوسط الحراري لإجمالي الطاقة في هذا الحد صفرا بينما تميل النتائج في الشكل (7-3) نحو $\langle E \rangle = 0$ في درجات الحرارة المرتفعة إلا أنها أقل بكثير من هذه القيمة حتى عند $T = 5$ أي أكثر من ضعف درجة الحرارة الحرجة. هذا يعني أن الحالات المجاورة لأي سبين معين ليست موجهة بشكل عشوائي فوق T_c ، على الرغم من أننا نعلم من خلال نتائج M أن متوسط الانحياز للشبكة بأكملها هو صفر. هذا يشير إلى أن اتجاهات السبينات مهمة جدا [5].



الشكل (8-3) : المتوسط الحراري للطاقة بدلالة درجة الحرارة لنموذج ايزينغ على شبكة مربعة 10×10

و بالتالي نفهم سلوك $\langle E \rangle$ في كل من درجات الحرارة العالية والمنخفضة ولكن السلوك بالقرب من T_c ليس بهذه البساطة. نرى من الشكل (7-3) أن $\langle E \rangle$ لها نقطة انعطاف ذات ميل كبير جداً بالقرب من T_c بالنسبة إلى النظام الكبير غير المحدود يكون المشتق $d\langle E \rangle/dT$ بلا حدود في T_c من الديناميكا الحرارية [5].

3-5-5- السعة الحرارية و القابلية المغناطيسية في نموذج ايزينغ :

نعلم أن الحرارة المحددة مرتبطة بالطاقة بواسطة $C_V = d\langle E \rangle/dT$ وهذا يعني أن الحرارة المحددة تتباعد في T_c هذا الاختلاف هو أحد الخصائص الفردية المرتبطة بالنقطة الحرجة كما هو الحال مع المغناطيسية يتم وصف هذا التفرد بشكل عام عن طريق القانون :

$$C_V \sim \frac{1}{|T-T_c|^\alpha} \quad (3.40)$$

حيث α هو الأس الحرج. هناك طريقتان لدراسة سلوك الحرارة المحددة باستخدام طريقة مونت كارلو. واحد منها هو للتمييز عددياً نتائج E والآخر هو دراسة تقلبات E كدالة للزمن فعندما درسنا حساب M للمرة الأولى لاحظنا أن قيمته تتقلب مع الزمن وأن حجم هذه التقلبات يصبح كبيراً بالقرب من T_c . المقياس المناسب لحجم هذه التقلبات هو الفرق , إذا نظرنا إلى الطاقة مثلاً كدالة للزمن يمكن أن تنتج مخططات مؤثرة على الزمن تشبه نوعياً تلك الموضحة للمغطة في الشكل (7-3) [5]. هذه النتائج يمكننا من حساب متوسط الطاقة كما هو مبين في الشكل (9-3) بالعبارة:

$$\langle E \rangle = \frac{1}{N_m} \sum_{\alpha} E_{\alpha} \quad (3.41)$$

حيث ان المجموع N_m للحالات المجهرية α المتولدة من محاكاة مونت كارلو. وبالمثل يمكننا النظر في الفرق :

$$(\Delta E)^2 \equiv \langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2 \quad (3.42)$$

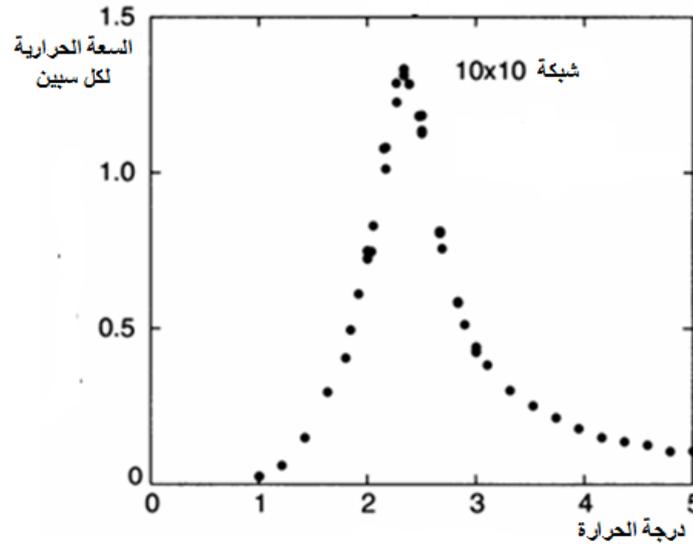
$$\langle E^2 \rangle = \frac{1}{N_m} \sum_{\alpha} E_{\alpha}^2 \quad \text{حيث :}$$

وفقاً لنظرية التذبذب للميكانيكا الإحصائية ، يرتبط تباين الطاقة بالحرارة المحددة بواسطة :

$$C_V = \frac{(\Delta E)^2}{k_B T^2} \quad (3.43)$$

هذا يدل على أن التفرد في الحرارة المحددة عند الانتقال يرتبط مباشرة مع التقلبات الكبيرة الموجودة بالقرب من T_c . يمكن أيضاً استخدام المعادلة (3.44) لحساب C باستخدام نتائج مونت كارلو لـ E كدالة للزمن [5].

يوضح الشكل (8-3) سلوك C_V باستخدام (3.44). فكما توقعنا ان يتعرض C_V لقمة كبيرة بالقرب من T_c . لا تتباعد القيمة الملاحظة هنا نظراً لأن حجم الشبكة محدود (أذكر أن الخصائص الفردية المرتبطة بمرحلة انتقال الطور موجودة فقط في نظام لا نهائي). من خلال دراسة السلوك كدالة بحجم الشبكة يمكننا أن نظهر أن الذروة في الحرارة المحددة لكل سبين يزداد في الحجم نظراً لأن النظام كبير [5].



الشكل (9-3) : السعة الحرارية المحسوبة باستخدام علاقة تبديد التقلب لشبكة 10×10

تنطبق علاقة تبديد التقلب على عدد من الكميات الأخرى إحداها هي $\chi \equiv dM/dB$ وهذا مقياس لمقدار المغنطة الناجم عن تطبيق الحقل المغناطيسي. في هذه الحالة تسفر نظرية التقلب على :

$$\chi = \frac{(\Delta M)^2}{k_B T} \quad (3.44)$$

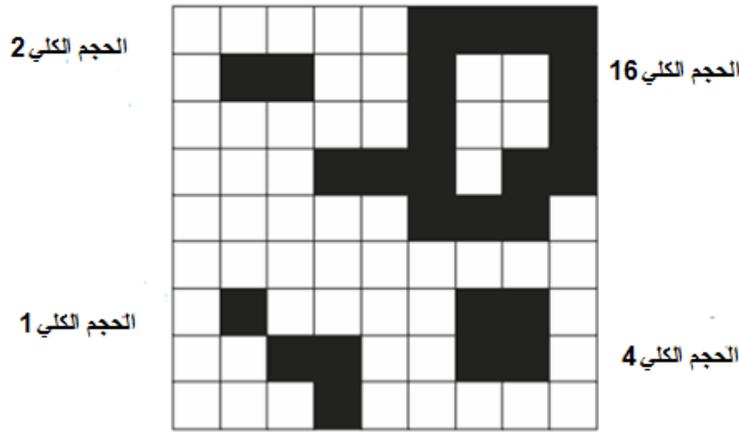
حيث $(\Delta M)^2$ هو تباين M والذي يمكن حسابه من النتائج الواردة في الشكل (7-3). اتضح أن χ تتباعد أيضًا عند النقطة الحرجة ويوصفها قانون يشبه (3.40) ، ولكن مع اس حرج مختلف يعرف باسم γ . من المثير للاهتمام أنه يمكن استخدام التقلبات لتقدير كيفية استجابة النظام لحقل مغناطيسي على الرغم من أن المحاكاة تتم في حقل معدوم. هذا هو الجانب المثير للفضول في نظرية التقلب والتبديد [5] .

حيث درسنا تباين الطاقة مع درجة الحرارة في الشكل (7-3) ، لاحظنا سلوك $\langle E \rangle$ عند T_c حيث يجب أن يكون هناك ارتباطات كبيرة في محاذاة السبينات المجاورة هذا يمكن أن يكون على النحو التالي. فوق T_c يكون المغنطة صفر بحيث يشير نصف السبينات في المتوسط إلى الأعلى بينما يشير النصف الآخر إلى الأسفل و طاقة التفاعل بين سبين المجاور ليست قوية بما يكفي لإنتاج محاذاة بين جميع السبينات [5].

3-6- دالة الربط الثنائية :

تعطي دالة الربط مقياساً لتشتت المتغير حول قيمته المتوسطة . و سنقوم بتوضيح ذلك من خلال النظر في نظام مغناطيسي ثنائي الأبعاد موصوف في نموذج ايزينغ , هذا النموذج رغم انه بدائي سيسمح لنا بفهم الفيزياء النوعية التي تقوم عليها ظواهر التحول الطوري و خاصة سلوك النقطة الحرجة [1] .

في نظام مثل نموذج ايزينغ ثنائي الأبعاد لدينا نوعان من التفاعلات التي تكون آثارها معاكسة , فالأول ذو طبيعة حرارية في حالة توازن بحيث تكون انتروبي النظام بحد اقصى مما يعني ان هذا الاضطراب هو الحد الأقصى . لذلك فإن توزيع السبينات يميل الى ان يكون الأكثر تنظيماً [1].

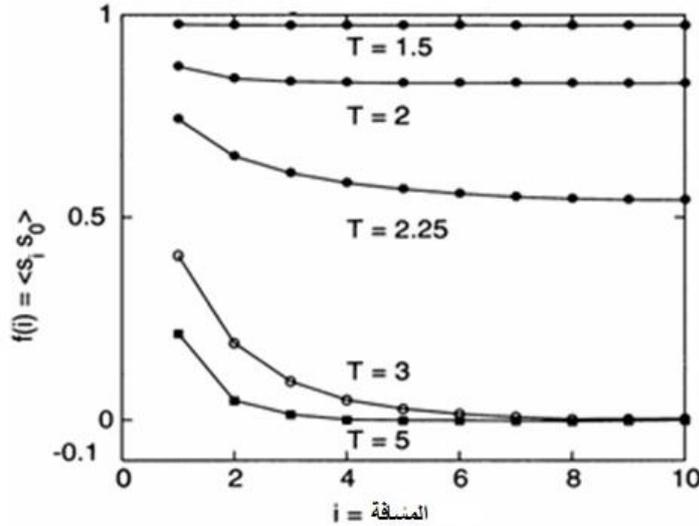


الشكل (10-3) : رسم توضيحي للمحاذاة في شبكة ايزينغ

نعتبر سبين معين ، واسمه s_0 مع افتراض أنه يشير إلى الأعلى. سندرس محاذاة الجيران الأربعة لـ s_0 عند $s_0 = +1$ ، سيكون لدى الجيران طاقة أقل إذا اتجهوا نحو الأعلى على الرغم من أن درجة الحرارة قد تكون أعلى من T_c بحيث يكون متوسط المحاذاة للنظام صفر، إلا أن هؤلاء الجيران الأربعة سيظلون لديهم احتمالية كبيرة للمحاذاة بشكل متوازٍ مع s_0 بدلاً من كونها متعاكسة. تعتمد درجة موازيتهم على درجة الحرارة ، لكنها لن تكون صفر عند T_c . يمكن أيضاً تطبيق هذا على أي من جيران s_0 ، نسميها s_1 . يميل الجيران القريبون من s_1 إلى المحاذاة معها. وبما أن s_1 يرتبط مع s_0 فإن هذا الميل في المحاذاة سينتشر من سبين إلى سبين من خلال جيرانهم المشتركين . يمكن قياس هذا الميل إلى الارتباط باستخدام دالة الربط :

$$f(i) = \langle s_0 s_i \rangle \quad (3.45)$$

حيث s_i هو سبين في موضع i بالشبكة بعيداً عن s_0 وتدل الأقواس الزاوية مرة أخرى على متوسط حراري يمكن حسابه عن طريق حساب متوسط الجزينات الدقيقة الناتجة عن خوارزمية مونت كارلو. دالة الربط $f(i)$ هي أول لقاء لنا مع خاصية الطول. يمكن حسابه عن طريق اختيار أول سبين ليكون سبين "المركزي" s_0 ثم حساب الناتج $s_0 s_i$ لجميع السبينات ذات المسافة i ويتم بعدها تقييم متوسط هذا الناتج من خلال السماح لكل سبين بأن يكون مركزي ومراعاة العديد من خطوات مونت كارلو الزمنية بالنسبة للشبكة المربعة ، حيث ان i عدد صحيح من أجل قياس المسافة في عبارة تباعد الشبكة وحساب الارتباطات الخاصة بالسبينات مفصولة على طول الصفوف والأعمدة. حيث بالنسبة لشبكة $L \times L$ ذات شروط دورية فإن الحد الأقصى للمسافة بين سبينين في نفس الصف أو العمود هو $L/2$ حيث يجب قياس هذه المسافة من حيث أصغر عدد لأقرب الجيران المتفاعلة مع السبينين [5].



الشكل (11-3) : دالة الربط الثنائية المحسوبة من اجل 10×10 في شبكة مربعة

يلقي سلوك دالة الربط الضوء على الخصائص الفردية الموجودة في النقطة الحرجة. اتضح أنه بعيداً عن T_c تسقط الارتباطات بشكل كبير مع المسافة , أي :

$$f(i) \sim C_1 + C_2 e^{\left(\frac{-r_i}{\xi}\right)} \quad (3.46)$$

حيث C_1 هو ثابت يفوق الصفر و T_c و r_i هي المسافة بين السبينات وتعرف ξ بطول الارتباط. ξ يعطي قياساً لمدى الارتباطات. كما لاحظنا من الشكل (9-3) يزيد هذا النطاق حيث يتم تقييم T_c من خلال حساب دقيق على شبكة أكبر فنجد أن t ينحرف في T_c ، وفقاً للقانون :

$$\xi \sim \frac{1}{|T-T_c|^v} \quad (3.47)$$

حيث v هو الأس الحرج الآخر عند النقطة الحرجة , حيث انه عندما $\xi = \infty$ تسقط الارتباطات كدالة لقانون أسّي r نظراً لأن ξ تتباعد في T_c يصبح هذا النطاق بلا حدود على نحو فعال بحيث تكون كل لفة حساسة لمحاذاة كل لفة أخرى. هذه الحساسية الشديدة للنظام في T_c هي التي تؤدي إلى التقلبات الكبيرة والسلوك المفرد للكميات مثل المغنطة والحرارة النوعية عند النقطة الحرجة. يتم تجاهل هذه الارتباطات المحسنة من خلال تقريب الحقل المتوسط الذي يفترض أن المحاذاة النسبية للجيران القريبين هي نفس محاذاة متوسط النظام بأكمله [5].

7-3- برنامج الفورترون :

سنقوم بكتابة الشفرة باستعمال لغة الفورترون كما اننا سنستعمل برنامج الغنوبلوط لرسم المنحنيات العددية و التي سنحصل عليها من خلال رسم $f(i)$ كدالة في المسافة في درجات حرارة مختلفة و التي يظهر من خلالها الانتقالات الطورية و كذا النقطة الحرجة T_c [8].

سنقتصر في هذه الدراسة العددية نموذج ايزينغ في بعدين فقط . ان السبينات التي يتم الحصول عليها عند نقطة التقاطع بين سطر رقم i و العمود رقم j للشبكة , سوف يعبر عنها بعنصر المصفوفة $S(i,j)$ و بالتالي دالة الطاقة تكتب $(N = n^d = n^2)$:

$$E_i = - \sum_{j=1}^n \left[\frac{1}{2} S(i,j) (S(i+1,j) + S(i-1,j) + S(i,j+1) + S(i,j-1)) \right] \quad (3.50)$$

يبدو ان هناك مشكلة الحواف في الشبكة المعتبرة , لذلك سنفرض شروط حدية دورية من اجل اختزال الحواف و التأثيرات الحدودية , هذا يمكن فعله كالاتي :

نعتبر مصفوفة $(n+1) \times (n+1)$ حيث ان سطر $(n+1)$ يتطابق مع السطر الاول و العمود $(n+1)$ متطابق مع العمود الاول , و بالتالي الشبكة المربعة هي تورس . الشروط الحدية الحلقية هي اذن تكتب كما يلي :

$$S(0,j) = S(n,j), S((n+1),j) = S(1,j) \quad (3.51)$$

$$S(i,0) = S(i,n), S(i,(n+1)) = S(i,1) \quad (3.52)$$

التغير في الطاقة جراء قلب السبين $S(i,j)$, هو مكون اساسي في خوارزمية ميتروبوليس [8], لذلك يعطى هذا التغير بالعلاقة :

$$\Delta E = 2JS(i,j)(S(i+1,j) + S(i-1,j) + S(i,j+1) + S(i,j-1)) \quad (3.53)$$

و تعطى عبارة دالة الربط الثنائية بالعلاقة التالية :

$$f_n = \left\langle \frac{1}{4L^2} \sum_{i,j} S(i,j) [S(i-n,j) + S(i+n,j) + S(i,j-n) + S(i,j+n)] \right\rangle \quad (3.54)$$

3-8- شفرة الفورترون:

شفرة الفورترون تحتوي على التعليمات التالية:

- برنامج جزئي يولد الاعداد الشبه العشوائية، نشير الى برنامجين مستقرين هما Run 2 او Run Lux
- برنامج جزئي ينفذ خوارزمية متروبوليس لنموذج ايزينغ .
- يتم حساب المغنطة لنموذج ايزينغ.
- ومن ثم تحديد وسائط النموذج مثل n و J و $\beta = \frac{1}{k_B T}$ و B .
- نختار قيم ابتدائية ويتم اختيارها عن طريق قيم لسبين تكون اما:

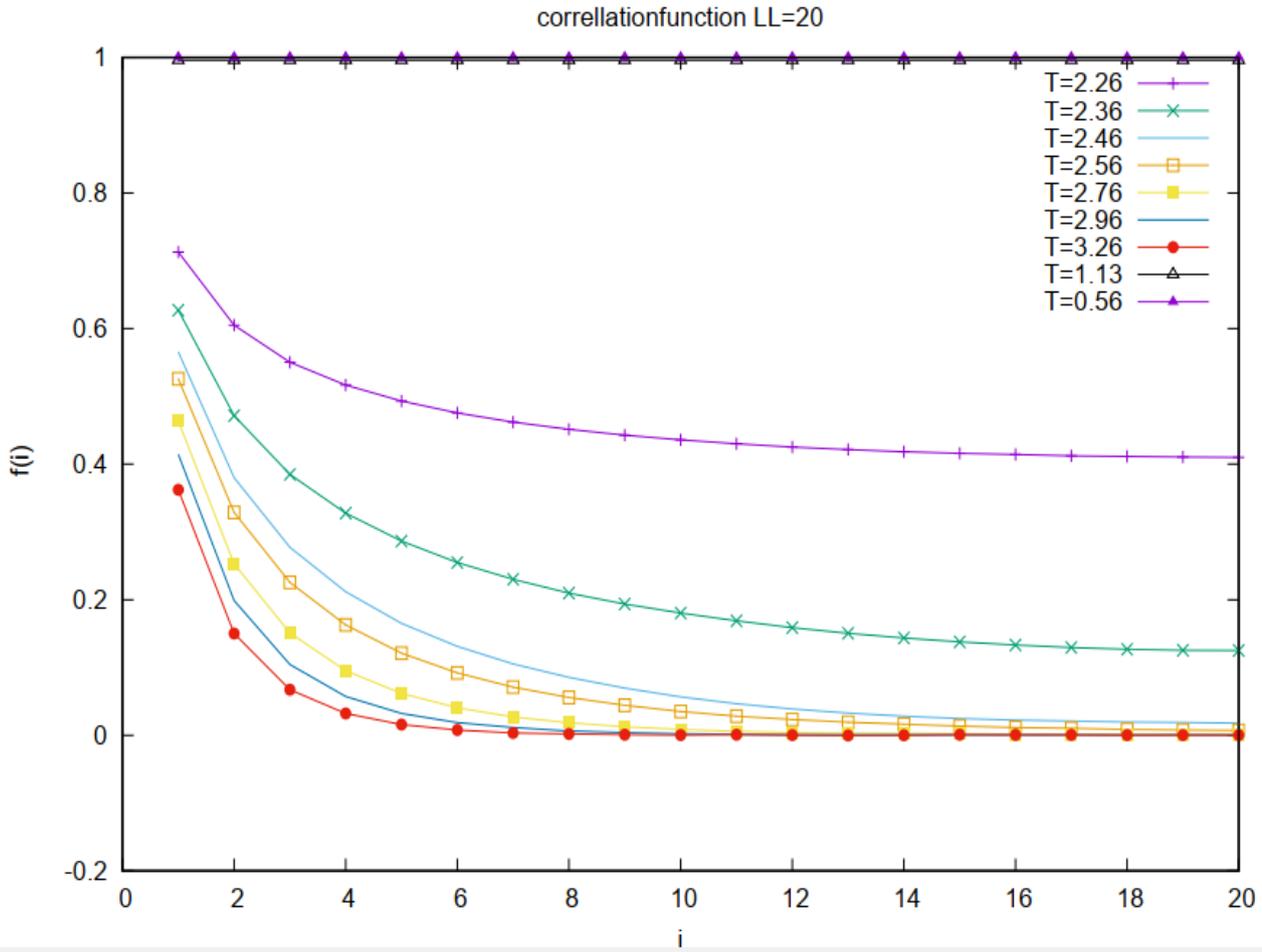
$$S(i,j) = 1$$

او

$$S(i,j) = -1$$

- نجري خوارزمية ميتروبوليس (و هي مكافئة لطريقة مونت كارلو) من اجل زمن الوصول الى التوازن الحراري و ندرس تغير دالة الربط بدلالة المسافة من اجل درجات حرارة مختلفة [8].

9-3- مناقشة النتائج و التفسير:



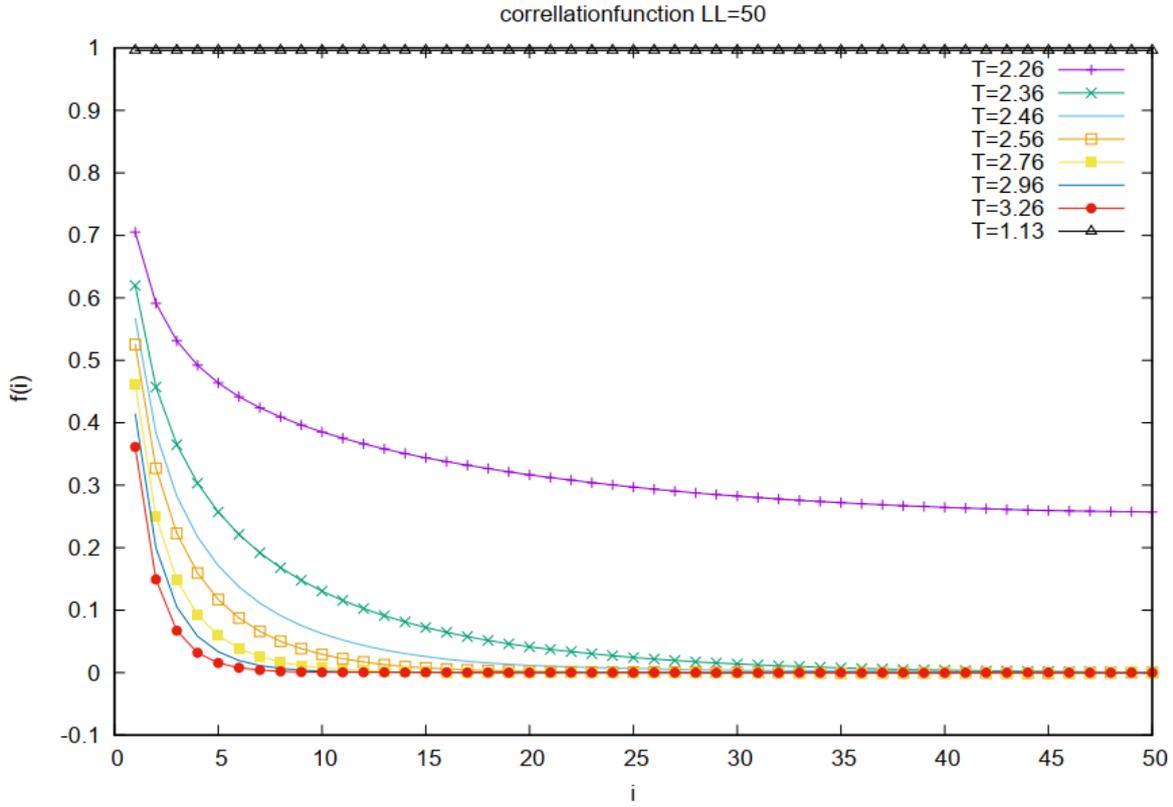
الشكل (12-3) : دالة الربط الثنائية من أجل شبكة مربعة LL = 20

التفسير و المناقشة :

يظهر من خلال النتائج العددية التي تحصلنا عليها و الموضحة في الشكل (11-3) من أجل شبكة LL = 20 و الذي يوضح دالة الربط $f(i)$ في درجات حرارة مختلفة اي من أجل :

- $T = 0.56$, $f(i)$ غير معدومة على مسافات كبيرة .
- برفع درجات الحرارة بالتدرج و قد اخذنا كل خطوة هي $\Delta T = 0.1$ فإن الارتباط و هو سلوك دالة الربط لا يتغير كثيرا عندما تكون $T < T_c$. حيث $T_c = 2.26$ في هذه الحالة .
- انطلاقا من النقطة الحرجة T_c يتغير سلوك دالة الربط و يقل الارتباط بين السبينات بشكل واضح من أجل $T > T_c$. في المسافات البعيدة يبقى فقط ارتباط الجوار الاقرب .

من اجل شبكة مربعة $LL = 50$ في درجات حرارة مختلفة تحصلنا على الشكل الموالي و كان تصرف دالة الربط بنفس السلوك



الشكل (3-13) : دالة الربط الثنائية من اجل شبكة مربعة $LL = 50$

و هذا التصرف ناتج الى كون أن طول الارتباط يذهب الى مالا نهاية عند و الى ما بعد النقطة الحرجة .

الخاتمة العامة

الخاتمة العامة

في الميكانيك الاحصائي من اجل تفسير التحولات الطورية من الدرجة الثانية و كمثل نأخذ ما يعرف بنموذج ايزينغ . نتصور اذن شبكة من النقاط في بعدين حيث يوجد في كل نقطة ذرة او الكترون بعزم لف (سبين) يمكن ان يأخذ احد قيمتين اما +1 او -1 و هذا اذن هو تصورنا للمادة وسائط هذه الجملة هي ثابت الاقتران بين عزوم اللف و نرسم له بالرمز J و درجة الحرارة T [3] .

نفترض ان قوى الاقتران بين عزوم اللف او السبينات هي قوى الجوار الاقرب بمعنى ان كل ذرة في الشبكة لا تتفاعل الا مع الذرات المجاورة لها مباشرة و هي اربعة ذرات في حالة شبكة ذات بعدين. اذن اذا كانت عزوم اللف كلها متوجهة في اتجاه واحد- وهذا تحت تأثير قوى الاقتران J- فان الشبكة تتصرف مثل المادة المغناطيسية فمجموع السبينات او عزوم اللف هو بالضبط العزم المغناطيسي و هو غير معدوم في هذه الحالة كما هو تطرقنا لهذا بالتفصيل في الفصل الثاني , اما اذا كانت اتجاهات عزوم اللف او السبينات موزعة بشكل عشوائي- وهذا تحت تأثير درجة الحرارة- فاننا نحصل على عزم مغناطيسي معدوم و في هذه الحالة فان المادة حديدية [3] .

اذن نموذج ايزينغ يصف التحول الطوري من الدرجة الثانية من المادة المغناطيسية العادية وتسمى الطور الفيرومغناطيسي الى المادة الحديدية العادية وتسمى الطور البارامغناطيسي وهو يقع عند درجة حرارة معينة T_c - درجة حرارة كوري- وعند ثابت اقتران حرج معين J_c - ثابت اقتران كوري - . و هو ما تطرقنا له في الفصل الثالث [3].

الاعظم من هذا ان نموذج ايزينغ يصف ايضا اي تحول طوري من الدرجة الثانية آخر في الطبيعة مثلا التحول من البخار الى السائل في الماء [3].

في الوقت الحالي أصبحت دراسة مختلف الظواهر الفيزيائية باستعمال الفيزياء الحديثة لا يكتمل الا باستعمال الفيزياء الحاسوبية بمختلف طرقها و هذا من أجل اثبات مختلف النظريات و الحصول على نتائج دقيقة لتفسير تلك الظواهر و ذلك لصعوبة الحصول عليها تحليليا .

هدفنا المسطر في أول هذه المذكرة كان دراسة دالة الربط الثنائية في نموذج ايزينغ الذي يمثل احسن نموذج لوصف التحولات الطورية من الدرجة الثانية أي من الحالة الفيرومغناطيسية الى الحالة البارامغناطيسية في المعادن كما ذكرنا من قبل , و قد توصلنا من خلال دراسة عددية تعتمد على طريقة مونت كارلو و خوارزمية ميتروبوليس الى فهم سلوك هذه الدالة التي تصف الارتباط بين السبينات في نموذج ايزينغ في حالة بعدين . و توصلنا الى اثبات اهم نتيجة هي ان الارتباط يسقط بشكل كبير مع المسافة عند الوصول الى النقطة الحرجة التي تقاس من خلال الكميات الفيزيائية (M , χ , C_v) , مما يعطي تفسير لتصرف باقي الكميات الفيزيائية خلال انتقال ايزينغ .

المراجع

- [1] C. Ngo, H. Ngo, "Introduction Physique Statistique", 3 édition , Paris (2008)
- [2] M. H. Jensen, "Computational Physics" , University of Oslo (2011).
- [3] باديس يدري, "الواقع و الزمن و الفيزياء الاساسية", جامعة عنابة (2018) .
- [4] C.Gros, "Thermodynamic Statistical Mechanic", university frankfurt (2017).
- [5] N. J. Giordano, "Computational Physics", Upper saddle river, New Jersey (1997).
- [6] B. Yadri , Cours "The Ising Model and the Onsager solution" , University Anaba (2017).
- [7] J. O. Haerter, "Statistical Mechanics , The Ising Model and Critical Phenomena", (September 26, 2017) .
- [8] رجاء ضيف الله , رسالة ماستر أكاديمي , جامعة الوادي (2018) .
- [9] باديس يدري , "الترموديناميك و الميكانيك الاحصائي" , جامعة عنابة (2015) .
- [10] O. Lisovyy, "Correlation Function of 2D Ising Model and Integrable Differential Equation" , Department Mathématiques, Université d'Angers, France .

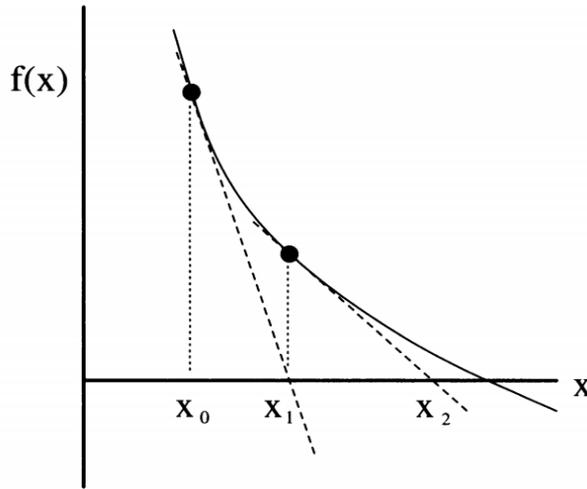
الملاحق

1.A. حل معادلة الحقل المتوسط باستخدام عملية نيوتن:

ان الطريقة (الاسترخاء) ستتلاقى دائماً مع حل (3.34) بالقرب من T_c سيكون لمنحني $\langle s \rangle$ و $\tanh(z\langle s \rangle/k_B T)$ ، حيث نقاط التقاطع التي نريد العثور عليها لها نفس الميل تقريباً. سيؤدي ذلك إلى أن يكون التقارب بطيئاً للغاية حيث أن كل تكرار سيحرك مسافة صغيرة جداً فقط على طول محور $\langle s \rangle$. لذلك من المفيد التفكير في طرق لتسريع التقارب [5].

إحدى الطرق لتحقيق ذلك هي البدء بإعادة كتابة (3.34) فنجد :

$$f(\langle s \rangle) \equiv \langle s \rangle - \tanh\left(\frac{z\langle s \rangle}{k_B T}\right) = 0 \quad (1.A)$$



الشكل (1.A) : حل معادلة الحقل المتوسط باستخدام عملية نيوتن

نحتاج بالتالي إلى إيجاد جذور الدالة $f(\langle s \rangle)$. هذه مشكلة تنشأ في العديد من السياقات ، لذلك نحن الآن ننظر بطريقة عامة في الشكل (3.4) (الفصل 3) حيث نظهر دالة افتراضية ، و لإيجاد جذر x لـ $f(x)$ أي عندما تكون $f(x) = 0$ ، نبدأ بتخمين أولي للحل s_0 . من أجل الحصول على تخمين محسن نقيم مشتق $f(x)$ عند s_0 ونستخدمه للاستقراء خطياً على المحور x ، كما هو موضح بواسطة الخط المنقطع الذي يتقاطع مع المحور عند x_1 . إذا كانت $f(x)$ عبارة عن خط مستقيم فسوف ينتج عن هذا الإجراء الحل الدقيق. ومع ذلك في معظم الحالات لن يكون الميل معدوم لذلك قد لا تكون x_1 تقريباً دقيقة بدرجة كافية. ومع ذلك يمكننا تكرار العملية بدءاً من x_1 للحصول على تقريب أفضل x_2 [5].

يُعرف هذا النهج بأسلوب نيوتن وهو متفوق بشكل جيد على خوارزمية الاسترخاء التي نستخدمها عند ميل $f(x)$. يمكننا استخدامه لحل معادلة المجال المتوسط (3.37) ، وتكون نتائج M مطابقة لتلك الموضحة في الشكل (3-3) (الفصل 3) لذلك لم نكن مضطرين للتخطيط لها هنا. و المثير للاهتمام هو عدد التكرارات المطلوبة للحصول على التقارب، نقارن عدد التكرارات التي تتطلبها طريقة الاسترخاء مع العدد الذي تحتاجه طريقة نيوتن لمشكلة مجال المتوسط لدينا. فنلاحظ ان طريقة الاسترخاء تتقارب ببطء شديد بالقرب من T_c حيث يصبح عدد التكرارات المطلوبة كبيراً جداً. تتطلب طريقة نيوتن عدداً أقل من التكرارات في جميع درجات الحرارة ، خاصة بالقرب من T_c [5].

الملخص :

أهم ما تطرقنا اليه في هذا العمل هو دراسة دالة الربط و تصرفها في نموذج ايزينغ الذي يمثل احسن وصف للانتقالات الطورية من الدرجة الثانية اي من الحالة الفيرومغناطيسية الى الحالة البارامغناطيسية , و قمنا بإثبات ان الارتباط بين السبينات يسقط بشكل كبير مع المسافة عند الوصول الى النقطة الحرجة , مما يعطي تفسير لتصرف باقي الكميات الفيزيائية خلال هذا الانتقال الطوري . و اعتمدنا في هذه الدراسة العددية على طريقة مونت كارلو و خوارزمية ميتروبوليس

الكلمات المفتاحية : نموذج ايزينغ – دالة الربط – طريقة مونت كارلو – المجموعة القانونية – التحولات الطورية – النقطة الحرجة .

Abstract :

The most important thing we discussed in this work is the study of the correlation function and its behavior in the ising model, which is the best description of the second phase transitions from the ferromagnetic state to the paramagnetic state, we proved that the correlation between the spins falls large with the distance when reaching the critical point, Gives an explanation for the behavior of the remaining physical quantities during this phase transition . We have used in this numerical the monte carlo method and metropolis algorithm

key words : Ising Model – Correlation Function - Monte Carlo Method – Canonical Ensemble - Phase Transitions - Critical Point