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

ماستر أكاديمي

مجال: علوم المادة
تخصص: فيزياء تطبيقية إشعاعات وطاقة

من إعداد: ضيف الله رجاء

الموضوع

الدراسة العددية لنموذج ايزينغ

نوقشت يوم: 09 / 06 /2018

أمام لجنة المناقشة المكونة من الأساتذة

أ. لرقط حنان	أستاذ مساعد أ	رئيسة
أ. باقي محمد	أستاذ مساعد أ	مناقش
د. احميم رشيد	أستاذ محاضر ب	مؤطر

الموسم الجامعي 2017 / 2018

إهداء

أهدي هذا العمل إلى:

والدايا الكريمين أطال الله في عمرها

إلى كل إخوتي وأخواتي الأعزاء

إلى كل أفراد العائلة والأقارب

إلى كل الصديقات اللاتي فارقن العين ولم يفارقن الوجدان

إلى كل من علمني حرفا أساتذتي الكرماء.

رجاء

الشكر والعرفان

الحمد الله الذي خصني برعايته وحفظه وستره و أمدني بعوني ووفقني في إتمام هذا العمل على أحسن وجه فما كان لشيء أن يجري في ملكه إلا بمشيئته جل شأنه وعظم قدره، والصلاة والسلام على الحبيب طه الصادق الأمين.

أتقدم بأسمى عبارات الشكر والتقدير والامتنان إلى الدكتور الفاضل **احميم رشيد** على كل مجهوداته و نصائحةوتوجيهاته خلال إشرافه على إعداد هذه المذكرة فكان نعم الموجه والمرشد.

كما أشكر أعضاء اللجنة المناقشة على قبولها لمناقشة هذا العمل بداية برئيسة اللجنة الأستاذة **لرقط حنان**، وكذلك الأستاذ المناقش **باقي محمد** .

كما لايفوتني أن أتقدم بالشكر الجزيل إلى كل من قدم لي يد العون والمساعدة.

رجاء

فهرس المحتويات

إهداء II
الشكر والعرفان..... III
فهرس المحتويات..... IV
قائمة الأشكال..... VI
قائمة الجداول..... VII
قائمــة الرمــوز..... VIII
قائمة مصطلحات العلمية IX
المقدمة العامة..... - 1 -

الفصل الأول: عموميات حول الانتقالات الطورية

1.1 الإنتقال من سائل إلى غاز ..... - 4 -
2.1 الإنتقال فيرومغناطيسي - بارامغناطيسي ..... - 6 -
3.1 ترتيب الإنتقال الطوري..... - 8 -
4.1 وسيط الترتيب ..... - 10 -
5.1 الأسس الحرجة..... - 11 -
6.1 العالمية..... - 12 -

الفصل الثاني: المجموعة القانونية

1.2 المجموعة القانونية الصغرى..... - 15 -
2.2 المجموعة القانونية..... - 15 -
3.2 دالة التوزيع ..... - 17 -
4.2 العلاقة بين Z والدوال الترموديناميكية..... - 18 -
1.4.2 الطاقة الداخلية..... - 18 -
2.4.2 الضغط..... - 20 -
3.4.2 الطاقة الحرة ..... - 21 -
4.4.2 الأنتروبي..... - 22 -
5.4.2 السعة الحرارية..... - 23 -
6.4.2 المغنطة..... - 23 -
5.2 دالة التوزيع الكلاسيكية ..... - 23 -

6.2 تطبيقات المجموعة القانونية..... - 24 -
1.6.2البارامغناطيسية ..... - 24 -

الفصل الثالث: ظاهرة الفيرومغناطيس ونموذج ايزينغ

1.3 وصف النموذج..... - 28 -
2.3 نموذج ايزينغ..... - 30 -
3.3 تقريب متوسط الحقل ..... - 31 -
4.3 المخطط الطوري ودرجة الحرارة الحرجة..... - 31 -
5.3 نموذج ايزينغ والنتائج العددية..... - 34 -
6.3 النتائج العددية ومناقشتها..... - 36 -
1.6.3 المغنطة..... - 36 -
2.6.3 الطاقة ..... - 37 -
الخلاصة العامة..... - 39 -
قائمة المراجع ..... - 41 -

قائمة الأشكال

ترتيب الشكل	عنوان الشكل	الصفحة
الشكل (1.1)	المنحنى الطوري للماء.....	04
الشكل (2.1)	مخطط توضيحي لوسيط الترتيب.....	06
الشكل (3.1)	ظاهرة التلاكؤ.....	07
الشكل (4.1)	مخطط الانتقال.....	08
الشكل (1.3)	رسم تخطيطي يوضح الجوار الأقرب للسبين من أجل $d = 2$ و $d = 3$.....	29
الشكل (2.3)	المغنطة التلقائية كدالة في درجة الحرارة لنموذج ايزينغ من أجل $N=n^2$ ، $H=0$، $K_B = 1$.....	36
الشكل (3.3)	متوسط الطاقة لكل سبين كدالة في درجة الحرارة لنموذج آيزينغ من أجل $N=n^2$, $H=0$، $K_B = 1$	37

قائمة الجداول

ترتيب الشكل	عنوان الشكل	الصفحة
الجدول (1.1)	الأسس الحرجة الأساسية للانتقال الفيرومغناطيسي البارامغناطيسي.	11
الجدول (2.1)	الأسس الحرجة للانتقال السائل الغاز.	12

قائمــة الرمــوز

B	حقل مغناطيسي
C_V	السعة الحرارية
E_I	طاقة ايزينغ
E_{TOT}	طاقة كلية
E_{Res}	طاقة الخزان الحراري
E_n	طاقة نظام
F	طاقة حرة
g_n	معامل انحلال في المستوى
H_{eff}	تأثير الحقل المغناطيسي
H_{eff}^i	الحقل المغناطيسي الفعال
I_C	شدة التيار الحرج
J	ثابت الاقتران
K	ثابت بولتزمان
M	المغنطة
P_C	ضغط الحرج
S	الأنتروبي
T_C	درجة الحرارة الحرجة
X	الحساسية المغناطيسية
$\mathcal{Z}$	دالة التوزيع
$\Omega(E)$	العدد الكلي لحالات النظام ذات الطاقة E
$\Psi(r)$	دالة موجة

قائمة مصطلحات العلمية

English	العربية
Critical point	النقطة الحرجة
Phase transition	الانتقال الطوري
Order parameter	وسيط الترتيب
Ferromagnetic	الفيرومغناطيسية
Paramagnetic	البارامغناطيسية
Critical Exponents	الأسس الحرجة
Average	متوسط
Periodic boundary conditions	شروط الحدية الدورية
Torus	تورس
Metropolis Algorithm	خوارزمية ميتروبوليس
mean field approximation	تقريب متوسط الحقل
phenomenon of hysteresis	ظاهرة التلاكؤ
Domain	مجال
Reduced Critical Tempurature	درجة الحرارة الحرجة المختزلة
Universality	العالمية
Molecular filed approximation	تقريب الحقل الديناميكي
Isotherme	الإيزوترمي
Susceptability Isothermic	الحساسية الإيزوترمية
Flactuations	ترددات

المقدمة العامة

المقدمة العامة

تعتبر الانتقالات الطورية من أهم الظواهر الفيزيائية التي تدرس في إطار الفيزياء الإحصائية[2,1]. إن التركيز على ظاهرة الفيرومغناطيسية [5,4,3] هو نتيجة لاعتبارها نموذجا لكل الانتقالات الطورية من الدرجة الثانية [6].

في الحقيقة الوصف النظري للانتقالات الطورية صعب جدا، لذلك القليل من النماذج يمكن معالجتها في إطار الفيزياء الإحصائية بدون استعمال الحلول العددية [3,7]. أحد أهم هذه النماذج هو ذلك النموذج الذي قدم من قبل لنز(Lenz) سنة 1920 وعمل عليه تلميذه ايزينغ (Ising) لاحقا سنة 1925، إن هذا النموذج قدم في الأصل من أجل الانتقال الطوري الفيرومغناطيسي عند درجة حرارة كوري لكن ومع مرور الزمن وبتغييرات طفيفة أدرك أن هذا النموذج يمكن تطبيقه على إنتقالات طورية أخرى، وزيادة على ذلك هذا النموذج يمكن استعماله في المسائل الحديثة ذات عدة جسيمات ومن الأمثلة على ذلك إستعماله لوصف ما يسمى (spin glasses)، لذلك هذا النموذج يكتسب أهمية متزايدة لتطويره حتى نماذج الدماغ البشري [1,8] .

رغم أن هذا النموذج يصف الانتقال الطوري من الدرجة الثانية لاسيما الانتقال الفيرومغناطيسي-البارامغناطيسي [3]، لكن يبقى من الصعب الحصول على النتائج التجريبية التي تبديها مثل هذه الظاهرة من خلال نموذج ايزينغ بحساب أولا دالة التوزيع، حتى الآن لا يوجد حلول تحليلية لنموذج ايزينغ في ثلاثة أبعاد إلا عن طريق البرمجة العددية [8] أو بعض الإجراءات التقريبية التي تعتمد على نظرية مجموعة التنظيم التي طورت من قبل العالم ويلسن سنة 1971، في حين أنه يمكن الحصول على حلول في حالة بعد واحد الأمر الذي تم من طرف ايزينغ [2,7].

بمجرد أن أصبحت هناك دوافع قوية لدراسة نموذج ايزينغ بدأ الباحثون في محاولات مكثفة لحل هذا النموذج من أجل شبكات ذات أبعاد عليا[4]، ففي سنة 1936 بين بيرلس أن نموذج أيزينغ يبدي خصائص فيرومغناطيسية عند درجات حرارة منخفضة [3,8] في أبعاد عليا في حين أنه هذه الخصائص تختفي في حالة بعد واحد حتى عند درجات حرارة منخفضة بما فيه الكفاية، لاحقا وبمحاولة من كرامريس و وانير في سنة 1941 إكتشفا طريقة جيدة لحل نموذج أيزينغ، والتي مكنتهما من التحقق من النتائج الأولى للنموذج في حالة بعدين، ثم تلاهما أونسيغر ليتمكن من حساب العبارة الدقيقة لدالة التوزيع في حالة بعدين عند غياب الحقل المغناطيسي وذلك سنة 1944[1,4,2].

إن الحساب الدقيق الذي قدمه أونسيغر كان قفزة نوعية، لأنه يعتبر من الحالات القليلة التي يكون فيها الحساب الدقيق ممكن ويظهر الإنتقال الطوري [9,7] .

في هذه الأثناء، العديد من التقريبات أجريت من أجل الحصول على حلول بسيطة لحالة الثلاث أبعاد. لقد إقترح بياز وفايس وجود حقول ديناميكية في إجراءاته التحقيقية فيها، يخص الفيرومغناطيسية سنة 1907، التي كانت الصياغة لما يسمى بتقريب الحقل الديناميكي أو تقريب الحقل المتوسط [8,10].

من خلال هذا العمل سيتم تقديم دراسة نموذج ايزينغ واستعمال دراسة عددية حول الانتقال الفيرومغناطيس – البارامغناطيس.

تحتوي هذه المذكرة على ثلاثة فصول:

يتم في الفصل الأول دراسة الانتقالات الطورية و ذلك من خلال التطرق إلى بعض المفاهيم الأساسية المرافقة لمثل هذه الظواهر كوسيط الترتيب و الأسس الحرجة العالمية...إلخ.

يهتم الفصل الثاني بدراسة المجموعة القانونية واستخراج الدوال الترموديناميكية إنطلاقا من دالة التوزيع، آخذين بذلك مثالا توضيحيا يعتبر كتطبيق للمجموعة القانونية.

في الفصل الأخير و الأساسي سندرس نموذج ايزينغ من خلال تقريب الحقل المتوسط وكذلك من خلال الحسابات العددية المعتمدة على خوارزمية ميتروبوليس ومونتي كارلو.

الفصل الأول

عموميات حول الانتقالات الطورية

تمهيد:

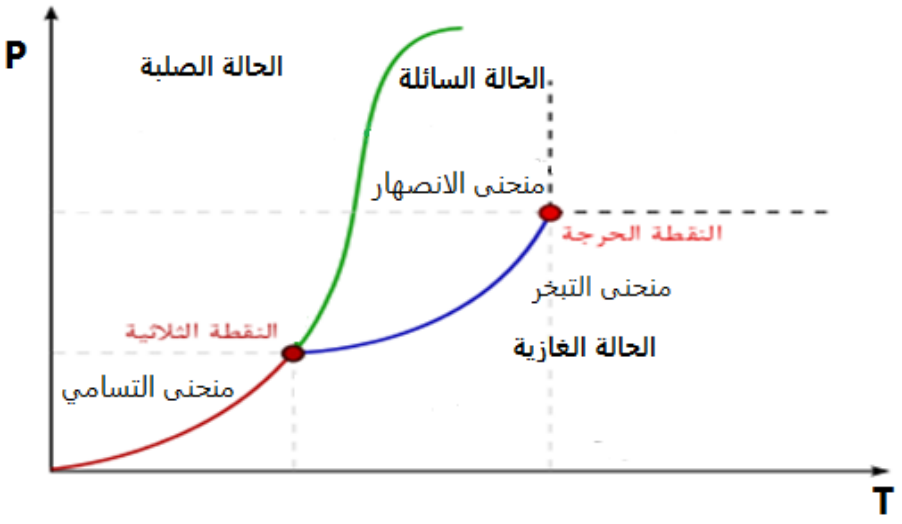
إن الانتقالات التي قد نشاهد بعضها في الحياة اليومية كالانتقال من سائل إلى غاز أو من صلب إلى سائل و كذلك الانتقال من فيرومغناطيس إلى بارامغناطيس، تعتبر من الظواهر الفيزيائية بالغةالأهمية[2,3].

لذلك خصصنا هذا الفصل لدراسة الانتقالات الطورية و ذلك من خلال التطرق إلى بعض المفاهيم الأساسية المرافقة لمثل هذه الظواهر كوسيط الترتيب و الأسس الحرجة العالمية...إلخ، مع تفادي الإثباتات أو التعقيدات الرياضية [6,1].

1.1 الإنتقال من سائل إلى غاز:

سنأخذ كمثال أول الإنتقال من سائل إلى غاز، حيث يوضح الشكل **(1.1)** المنحنى الطوري لمائع نموذجي، الماء على سبيل المثال. إن المنحنى الطوري يوضح، مستوي الضغط و درجة الحرارة ، المناطق المرفقة بمختلف الأطوار للمائع (الصلب و السائل والغاز)، حيث تمثل الخطوط على الشكل مناطق التعايش بين مختلف الأطوار الثلاثة و هي كالآتي[7,2]:

- الخط الأحمر الذي يفصل طور الحالة الصلبة عن طور الحالة الغازية يسمى منحنى التسامي، على طول هذا المنحنى الحالة الصلبة متعايشة مع الحالة الغازية .
- الخط الأخضر يسمى منحنى الإنصهار والذي هو منحنى يمثل نقاط التعايش بين الحالة الصلبة والحالة السائلة.
- الخط الأزرق يسمى بمنحنى التبخر والذي يمثل نقاط التعايش بين الحالة السائلة والحالة الغازية.



الشكل (1.1):المنحنى الطوري للماء

يتبين من الشكل (1.1) أن درجة حرارة التسامي أو الانصهار أو التبخر تتعلق بالضغط، وهذا ما نلاحظه في حياتنا اليومية من خلال درجة حرارة غليان الماء التي تتغير من المناطق المستوية الى المناطق المرتفعة.

منحنيات التعايش الثلاثة تلتقي في نقطة واحدة تسمى بالنقطة الثلاثية، إن هذه النقطة موافقة للحالة التي تلتقي فيها الأطوار الثلاثة (الحالة صلبة و الحالة السائلة والحالة الغازية) في نفس الوقت، حيث تتميز بضغط و درجة حرارة معينة من أجل كل مائع، فالماء على سبيل المثال درجة حرارة نقطته الحرجة مساوية إلى 273.16K. انطلاقا من النقطة الثلاثية يمكن التحول كليا إلى الحالة الصلبة أو الحالة السائلة أو الحالة الغازية بإجراء تغيير صغير في الضغط أو درجة الحرارة [4].

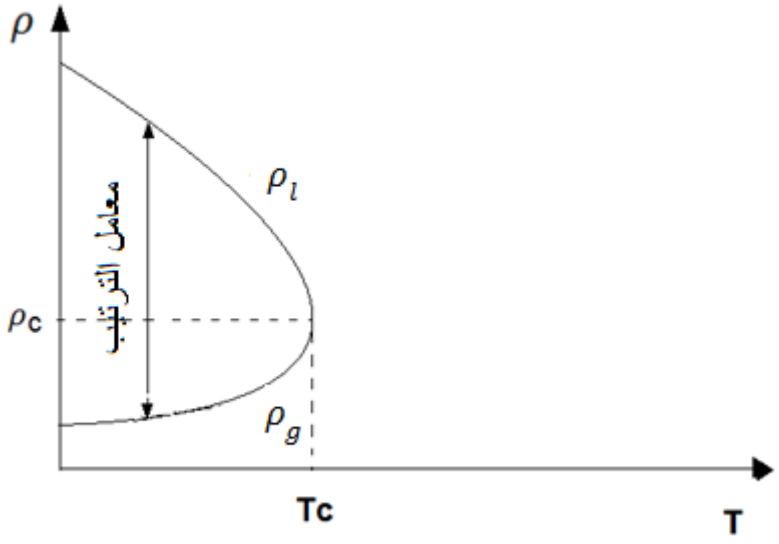
من الشكل (1.1) يمكن ملاحظة ان الخط الأزرق ينتهي عند نقطة تسمى النقطة الحرجة، حيث أنه عند إرتفاع الضغط ترتفع درجة حرارة الغليان والعكس عندما ينخفض الضغط تنخفض درجة حرارة الغليان بتعبير أدق عندما يزداد ضغط الغاز تكون الجزيئات المادة أقرب إلى بعضها البعض وهكذا تزداد كثافة الغاز مع الضغط، وعند تسخين السائل فإنها الكثافة تنخفض أي تدفع درجة الحرارة الجزيئات إلى التحريك بشكل أسرع وتستهلك مساحة أكبر. بعد هذه النقطة الحرجة يمكن المرور بصورة مستمرة من الحالة السائلة إلى الحالة الغازية و العكس بالعكس، بتعبير آخر في هذه الحالة لا يمكن التمييز بين السائل و الغاز [7,6].

عند كل نقطة من نقاط هذا الأخير ما عدا النقطة الحرجة تكون كثافة السائل مختلفة عن كثافة الغاز غير أنه عند النقطة الحرجة تكون لهما نفس الكثافة، الأمر الذي يجعل التمييز بين الحالتين غير ممكن، على خلاف الخط الأزرق فإن الخط الأخضر الموافق لمنحنى الإنصهار لا ينتهي بنقطة حرجة [9,2,6].

إذا تم رسم كثافة السائل والغاز على طول الخط الأزرق بدلالة درجة الحرارة، فإنه يتم الحصول عادة على الدورة المبينة في الشكل (2.1) من الملاحظ أن كثافة السائل ρ_l أكبر من كثافة الغاز g ، ولكن يقل هذا الاختلاف بازدياد درجة الحرارة ويختفي عند النقطة الحرجة. الفرق بين هاتين الكميتين، $\rho_l - \rho_g$، يسمى وسيط الترتيب للإنتقال سائل-غاز، كما سنرى لاحقا أن هذا الوسيط يلعب دورا مهما في وصف الانتقالات الطورية[1,2] .

النقطة الحرجة لديها خصائص مميزة. في الحقيقة، بالنسبة لمائع ما، هناك خصائص لها سلوكيات غير عادية في الفيزياء المألوفة، على سبيل المثال السعة الحرارية عند ثبوت الحجم ν $C_V=T(\frac{\partial S}{\partial T})$ ، تتباعد بالقرب من النقطة الحرجة. عند عبور، في مخطط الطور، الخط الأزرق بعيدا عن النقطة الحرجة نلاحظ أن كثافة المائع غير مستمرة (هذا راجع إلى الاختلاف بين كثافتي السائل و الغاز). إن الإنتقال من سائل إلى غاز يتطلب طاقة وهذا ما يسمى بالحرارة الكامنة، نحن نعلم أنه لغلي الماء لابد من تزويد المائع بطاقة

ليتحول كليا من سائل إلى غاز. الخاصيتان المذكورتان تفترضان أن الإنتقال من الحالة السائلة إلى الحالة الغازية هو إنتقال طوري من الدرجة الأولى.



الشكل(2.1): مخطط توضيحي لوسيط الترتيب

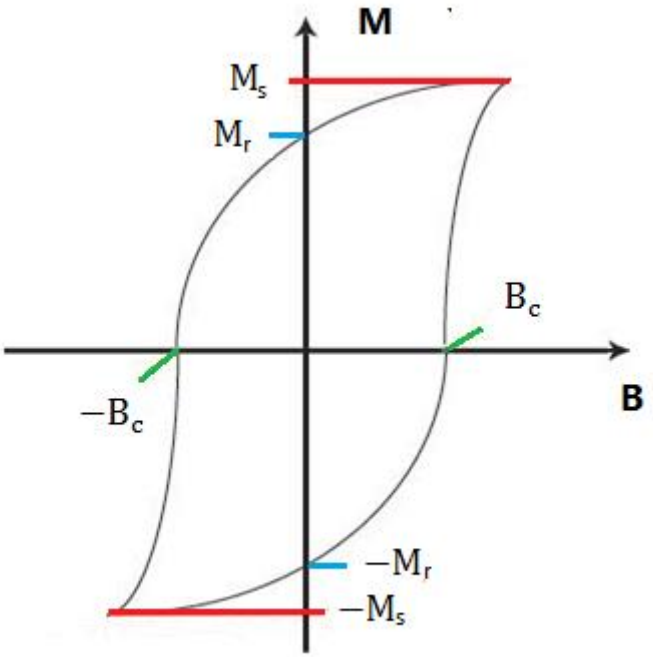
2.1 الإنتقال فيرومغناطيسي - بارامغناطيسي:

أحد أهم الأمثلة المعروفة للانتقالات الطورية و التي نلاحظها في المواد الفيرومغناطيسية هي تلك الانتقالات الطورية التي يتم فيها الإنتقال من الحالة الفيرومغناطيسية إلى الحالة البارامغناطيسية و العكس بالعكس، وهو مثال أكثر شيوعا للإنتقالات الطورية من الدرجة الثانية حيث أنه يمكن ملاحظة خصائصه العامة في العديد من الظواهر الأخرى. الفيرومغناطيسية هي ظاهرة جد معقدة لذا سنكتفي فقط بوصف سطحي لها. هناك بعض المواد تتمغنط حتى في درجة حرارة الغرفة مثل الحديد والكوبالت وغيرها، والتي نجدها في العديد من الأجهزة، مجهريا هذا يعني أن إلكترونات الطبقة غير المكتملة لها سبينات متوجهة فعليا في نفس الإتجاه. بما أن هناك عزم مغناطيسي مرتبط بكل سبين، فهذا يعني أن هذا التوجه للسبينات يتضمن جمع كل العزوم المغناطيسية مشكلة ما يسمى بالمغناطيس. من ناحية تجريبية عند تسخين مادة فيرومغناطيسية مثلا الحديد فوق درجة حرارة معينة تدعى بدرجة الحرارة الحرجة (T_C)، تختفي الفيرومغناطيسية لتصبح بارامغناطيسية، ينشأ هذا في الحقيقية نتيجة التفاعل بين السبينات الأمر الذي يجعلها تميل إلى التوجه في إتجاه واحد لكن عند درجات الحرارة العالية فإن التحريض الحراري يجعل السبينات تميل الى التوجه بطريقة عشوائية[3,1].

ظاهرة الفيرومغناطيسية هي عملية طبيعية جد معقدة، حيث تظهر المواد المغناطيسية ما يسمى بظاهرة التلاكؤ المبين في الشكل (3.1). إذا انطلقنا من مادة فيرومغناطيسية مغنطتها معدومة، هذه الأخيرة

تزداد بتطبيق حقل مغناطيسي خارجي ذو إتجاه ثابت، حتى يصل إلى قيمة حدية M_s تسمى بمغنطة التشبع، بهذه العملية نصف ما يسمى بخط المغنطة الأول الآن إذا خفضنا الحقل المغناطيسي B فإن المغنطة تقل ولكن لا تنعدم حتى عندما يكون الحقل الخارجي صفر حيث تأخذ القيمة M_r التي يشير إلى المغنطة المتبقية. لإلغاء المغنطة نحتاج إلى حقل مغناطيسي $-B_c$ موجه في الاتجاه المعاكس وهو ما يسمى بالحقل القسري [3,7].

إذا قمنا بتخفيض الحقل المغناطيسي B بدرجة كبيرة فإننا نصل إلى مغنطة التشبع $-M_s$ وإذا زادت قيمة الحقل B، فإن المغنطة تكون $-M_r$ عند $B = 0$ وتختفي عند $B = B_c$ وهذا قبل الوصول لقيمة التشبع M_s من أجل القيم الكبيرة لـ B. من خلال تأرجح الحقل المغناطيسي B فإن المغنطة تصف دورة تسمى بدورة التلاكؤ، هذا يعني أن المغنطة لا تعتمد فقط على قيمة الحقل المطبق ولكن أيضًا على تاريخ العينة[2] .



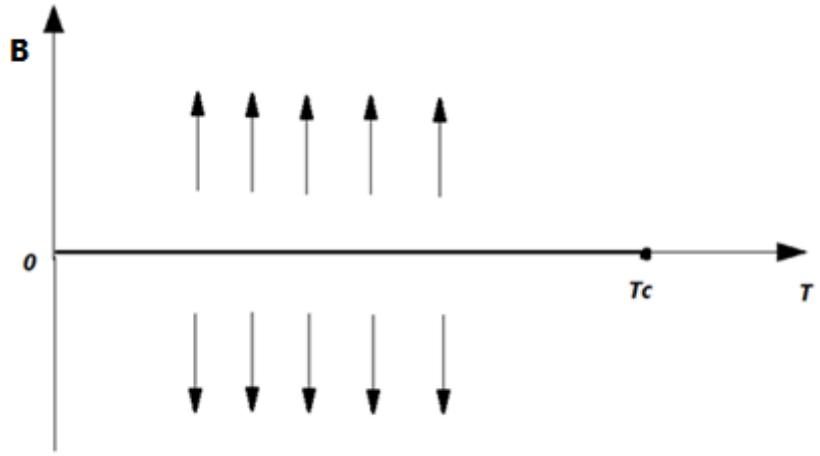
الشكل(3.1): ظاهرة التلاكؤ

لشرح ظاهرة التلاكؤ قام العالم فايس سنة 1910 بافتراض أن المادة الفيرومغناطيسية تتكون من (مجالات صغيرة) على المستوى العياني لكنها كبيرة على المستوى المجهري، تمتلك مغنطة تلقائية. وتأكدت هذه الفرضية تجريبيا عندما سمحت وسائل المراقبة بذلك. إذا تم تطبيق حقل مغناطيسي على عينة عند درجة حرارة أقل من كوري، فإن مجالات فايس تصل إلى مغنطة التشبع. إن جميع العزوم فيرومغناطيسية تحت درجة أقل من درجة حرارة كوري فإن المجالات تصل مغنطتها إلى حد التشبع، أي أن كل العزوم المغناطسية الجزئية للمجال تتوجه في إتجاه واحد، في حين أنه على المستوى العياني المغنطة بعيدة كل البعد عن الوصول إلى قيمة التشبع وهذا لأن العزوم المغناطيسية لمجالات فايس ليست موجهة في نفس الإتجاه

لكن بتطبيق حقل مغناطيسي ذو شدة عالية جدا يلاحظ زيادة تدريجية في المغنطة العيانية والتي لها أصلان مستقلان[5,3,4]:

- ❖ إذا كان الحقل المغناطيسي ضعيف فإن حجم مجالات فايس التي تتوجه في إتجاه الحقل المغناطيسي يزداد على حساب تلك التي تتوجه في الاتجاه الأقل تفضيلا.
- ❖ أما إذا كان الحقل مغناطيسي ذو شدة عالية جدا فإنه سيقوم بتدوير مجالات فايس آخذة الإتجاه الأكثر تفضيلا[3] .

مخطط الانتقال الطوري لمادة فيرومغناطيسية نموذجية هو أبسط منه لمائع، لذا سنعطي مخطط توضيحي كما يوضح في الشكل (4.1) حيث يمثل في المستوي المشكل من الحقل المغناطيسي B ودرجة حرارة T [2] .



الشكل (4.1):مخطط الانتقال

3.1 ترتيب الإنتقال الطوري:

هناك العديد من التصنيفات للإنتقالات الطورية، التي تؤدي إلى نفس الترتيب في معظم الحالات، لكن يمكن أن تكون هناك بعض الاختلافات أحيانا. بما أنه هناك تغير في الطور فهذا يعني ان النظام مكون من جزئيين متجانسين عند الإنتقال لهما خصائص فيزيائية متمايزة يفصل بينهما سطح محدد. يكفي لتوضيح ذلك، التفكير في ظاهرة تبخر الماء أين يتشكل البخار مع قطرات الماء داخل السائل عند الغليان، و بتغيير مستمر في بعض الوسائط الشدية للنظام (درجة الحرارة على سبيل المثال) نلاحظ أنه يتم الإنتقال من طور إلى آخر. الملفت للنظر أنه في المنطقة القريبة للإنتقال يكفي أن يحدث تغيير بسيط في الوسائط العيانية تغيرات مهمة في حالة النظام[4,9] .

يمكن تمييز نوعين من الانتقالات الطورية:

- ✓ النوع الأول هناك توازن بين الطورين عند نقطة الإنتقال، فعلى سبيل المثال يحدث هذا في حالة الإنتقال سائل - غاز أو في حالة ذوبان الجليد.
- ✓ النوع الثاني يتم فيه الإنتقال من طور إلى أخر ولكنهما لا يتوازنا مع بعضها البعض، ومن الأمثلة على ذلك الإنتقال الفيرومغناطيسي - البارامغناطيسي أو الانتقال من مادة فائقة الناقلية إلى ناقلة.

النوع الأول يحتاج إلى كمية من الحرارة للإنتقال من طور لآخر و يوجد عدم استمرارية في الأنتروبي أما النوع الثاني فلا يحتاج إلى كمية من الحرارة للإنتقال من طور لآخر ولكن غالباً ما يكون هناك شذوذ في السعة الحرارية للنظام عند نقطة الإنتقال[2,8,6] .

اقترح أيضا العالم ايرنفست في سنة 1933 التصنيفات التالية:

- ✓ الانتقالات الطورية من الدرجة الأولى هي التي تحتوي،على الأقل،على عدم إستمرارية واحدة للمشتقات الأولى للدالة الترموديناميكية التي تصف النظام (الطاقة الحرة أو الأنتالبي الحر). إذا كان المشتق الذي نعنيه الأنتروبي مثلا فإن $\left(S=\left(\frac{\partial F}{\partial T}\right)_{V,N}\right)$.
- ✓ أما الانتقالات الطورية من الدرجة الثانية تبدي عدم إستمرارية في الكميات الفيزيائية المتعلقة بالمشتقات الثانية للطاقة الحرة في حين أن المشتقات الأولى مستمرة.

هذا التصنيف لا يطرح أي مشكلة للإنتقالات الطورية من الدرجة الأولى، إلا أن بعض الانتقالات الطورية لا تحقق شرط ايرنفست خاصة تلك المتعلقة بالإنتقالات الطورية من الدرجة الثانية.

سوف نعتمد على تعريف ايرنفست للإنتقالات الطورية من الدرجة الأولى، أما الانتقالات الطورية الأخرى سنطلق عليها الانتقالات الطورية المستمرة[2] .

لقد إقترح لانداو في سنة 1937 تصنيفا آخر للإنتقالات الطورية تم تكييفه خصيصا لتلك التي أطلق عليها إسم الانتقالات الطورية المستمرة، يعتمد على حقيقة أن هذا النوع من الانتقالات يرافقه تغيير في تناظر النظام، هذه هي على سبيل المثال حالة الإنتقال الفيرومغناطيسي- الباراميغناطيسي لأن النظام الفيرومغناطيسي لديه إتجاه مفضل في الفضاء (يمثل مغنطته)، في حين أن الإنتقال البارامغناطيسي متماثل المناحي (لا وجود لإتجاه مفضل فيه) الأمر الذي أدى لانداو إلى اقتراح فكرة وسيط الترتيب الذي يكون معدوما في الطور الأكثر تناظراً عند درجة حرارة العالية ويختلف عن الصفر في الطور الآخر. بشكل عام الطور الأكثر تناظرا يكون عند درجات الحرارة العالية.

هناك إنتقالات تحدث دون تغير التناظر، و بالتالي لا يمكن تعريف وسيط ترتيب حسب مفهوم لانداو وكمثال على ذلك الإنتقال سائل-غاز لأن السائل والغاز لهما نفس نوع التناظر أي هما متماثلا المناحي، مع ذلك فحتى هذه الأنظمة يعرف لها وسيط ترتيب ينعدم عند درجات الحرارة العالية أي عند الطور الغازي.

إن وسيط الترتيب للإنتقال سائل-غاز هو الفرق $\rho_l - \rho_g$ وهو مختلف عن الصفر في جميع نقاط الخط الأزرق (أنظر الشكلين (1.1) و(2.1)، ماعدا النقطة الحرجة ($P_C = 217$ atm , $Tc = 647K$).

في التصنيف الذي إقترحه لانداو، الإنتقال الطوري من الرتبة الأولى يؤدي إلى قفزة في وسيط الترتيب (عدم الأستمرارية) في حين أن الأنتقالات ذات الرتب الأعلى (التي تسمى أيضا المستمرة) موافقة ألى حالات عدم استمرارية مشتق الدوال الترموديناميكية، في هذه الأخيرة يكون الإنتقال الطوري من الرتبة الثانية إذا كان المشتق كذلك وغير مستمر، و يكون الإنتقال من الرتبة الثالثة إذا المشتق كذلك وهكذا...، يشار إلى هذه الانتقالات الطورية على أنها إنتقالات مستمرة أو ظواهر حرجة [3,2].

النظام الذي يوجد فيه إنتقال طوري يكون فيه تنافس بين الدوال الترموديناميكية كالطاقة الداخلية التي تفضل الترتيب و الأنتروبي الذي على العكس يفضل الفوضى. إذا لم يكن اقتران دخيل بين درجات حرية النظام فإن الطور الفوضوي هو الذي يلاحظ عند درجة الحرارة العالية [1,6] .

4.1 وسيط الترتيب:

لقد رأينا أنه في الغالب يمكن إدخال وسيط ترتيب في دراسة الانتقالات الطورية، وهي خاصية مميزة للنظام المدروس والذي يسمح بتحديد و على وجه الخصوص ترتيب الانتقال الطوري. إذا كان وسيط الترتيب غير معدوم فإنه غالبا ما يكون دليلا على تكسر تناظر النظام[1,4].

عموما لا يكون تعريف وسيط الترتيب واضحا دوما، بحيث أنه لا يمكن تعريفه أصلا في بعض الأنظمة. إذا لم نتحدث عن انتقال طوري معين فسنرمز له بالرمز m [7,2].

في الحقيقة لا يوجد طريقة عامة لتحديد وسيط ترتيب النظام، لذلك يتم تحديده لكل حالة على حدا، فيأخذ إذن أشكالا مختلفة حيث يمكن أن يكون عددًا سلميا أو شعاعًا أو كائن رياضي معقد جدًا. بعد وسيط الترتيب مهم جدًا حيث نرمز له بالرمز n، فيأخذ القيمة 1 من أجل الأعداد السلمية و3 من أجل الأشعة وهكذا...، إن وسيط الترتيب يمثل سمة مميزة للانتقال الطوري[6,9].

سنوضح هذا في بعض الأمثلة التالية:

- بالنسبة لانتقال سائل- غاز فإن 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 لأخر، فوق نقطة الحرجة وسيط الترتيب معدوم ولا يمكن التميز بين الطورين، في حين أنه تحت النقطة الحرجة وسيط الترتيب يكون موجبا. الآن إذن إن وسيط الترتيب لهذا النظام يعرف بعدد سلمي لذلك يكون بعده $(n = 1)1$ [2,7].
- 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 إذن يساوي $(n = 3)$ [3].

5.1 الأسس الحرجة:

النقطة الحرجة مميزة بالتباعد لبعض الكميات الفيزيائية، وكمثال على هذا السعة الحرارية أو الحساسية المغناطيسية في الأنظمة الفيرومغناطيسية.

إن دراسة هذه التباعدات بالغة الأهمية لأنها تمثل الميزات الأساسية للنظام. وهذا ما يؤدي إلى مفهوم الأس الحرج، لذلك سندخل متغير جديد يمثل الانحراف النسبي للحرارة بالنسبة للحرارة الحرجة[2]:

$$t = \frac{T - T_C}{T_C} \qquad (1.1)$$

إن ميزة تعريف t بهذه طريقة هو جعل النقاط الحرجة للأنظمة المختلفة متكافئة، وبالتالي تكون لكل الأنظمة نفس درجة الحرارة الحرجة المختزلة $t=0$ على رغم من أن درجات الحرارة الحرجة مختلفة.

الأس الحرج λ المرافق لكل كمية فيزيائية $F(t)$ (سعة حرارية أو حساسية أو طول الارتباط ....إلخ) يعطى بـ [7] :

$$\lambda = \lim_{t\to 0} \frac{\log|F(t)|}{\log|t|} \qquad (2.1)$$

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

$$F(t) \sim |t|^{\lambda} \qquad (3.1)$$

هذه العلاقة تعني أن $F(t)$ يتغير كـ $|t|^{\lambda}$ لما $t \to 0$، لذلك نعطي الأسس الحرجة الأساسية للانتقال الفيرومغناطيسي- البارامغناطيسي المبينة في الجدول (1.1):

الجدول(1.1): الأسس الحرجة الأساسية للانتقال الفيرومغناطيسي - البارامغناطيسي [2].

السعة الحرارية (من أجل $B = 0$)	$C_B \sim \|t\|^{-\alpha}$
المغنطة (من أجل $B = 0$)	$M \sim (-t)^{\beta^*}$
الحساسية الإيزوترمية ($B = 0$)	$\chi_T \sim \|t\|^{-\gamma}$
الإيزوترمية الحرجة (t=0 ,B→0)	$B \sim \|M\|^{\delta} \mathrm{Sgn} M$
طول الارتباط	$\xi \sim \|t\|^{-\nu}$
دالة الارتباط لجسمين عند $(t = 0)$	$G(r) \sim {}^{1}/_{r^{d-2+\eta}}$

بنفس الطريقة نعطي الأسس الحرجة المرافقة للانتقال سائل –غاز المبينة في الجدول (2.1).

الجدول(2.1): الأسس الحرجة للانتقال السائل- الغاز[2].

سعة الحرارية عند حجم ثابت	$C_V \sim \|t\|^{-\alpha}$
الفرق بين كثافتي السائل والغاز	$(\rho_l - \rho_g) \sim (-\mathrm{t})^{\beta^*}$
الانضغاط الإيزوترمي	$\mathrm{KT} \sim \|t\|^{-\gamma}$
إيزوترمية الحرجة (t=0)	$P - P_c \sim \left\|\rho_l - \rho_g\right\|^{\delta} sgn(\rho_l - \rho_g)$
طول الارتباط	$\xi \sim \|\mathrm{t}\|^{-\mathrm{v}}$
دالة الارتباط الجسمين	$\mathrm{G(r)} \sim {}^{1}/_{r^{d-2+\eta}}$

ملاحظة:

تجدر الإشارة إلى أن الأس الحرج الموافق لمقدار ترموديناميكي عند أخذ النهاية $t \to 0^+$ من أجل $T > T_c$ هو نفسه عند أخذ النهاية $t \to 0^-$ من أجل $T < T_C$ [2,3].

6.1 العالمية:

الميزة المهمة للأسس الحرجة هي أنها لا تتعلق إلا بالخصائص العامة للأنظمة و لا تتعلق بتفاصيل التفاعلات الحادثة فيها و هذا أيضا حتى بالنسبة للأنظمة التي لديها تفاعلات قصيرة المدى مثل السوائل والمواد الفيرومغناطيسية إن هذه الأسس الحرجة لا تتعلق إلا ببعد الفضاء للنظام و بعد وسيط الترتيب هي إذن كميات ممتازة لوصف النظام في جوار النقطة الحرجة و كذلك لمعاينة صلاحية النماذج، فيقال أنها تخضع لقوانين عالمية لأنها تسمح بتعريف فئات تشمل إنتقالات طورية تبدو للوهلة الأولى مختلفة تماما.

كتلخيص، هناك كميتان تسمح بتحديد تصرف النظام في جوار النقطة الحرجة هما بعد الفضاء d وبعد وسيط الترتيب n، هذا الأخير قد يكون من الصعب جدا تحديده لأسباب تجريبية أحيانا ونظرية أحيانا أخرى، وبالتالي كل زوج $(,n)$ يحدد فئة عالمية. جميع الأنظمة التي تنتمي إلى نفس الفئة لها سلوكات و أسس حرجة متماثلة، فعلى سبيل المثال من أجل $d = 3$ و $n = 1$، لدينا الانتقال سائل-غاز و الانتقال الفيرومغناطيسي أحادي المحور(نموذج ايزينغ في ثلاثة أبعاد)[7,3] .

إذا عدنا الى الانتقال سائل-غاز فيتم ملاحظة أن درجة حرارة الحرجة تتعلق بالمائع المعتبر والتفاعلات بين ذرات، في حين أن رسم منحنى التعايش للموائع عند النقطة الحرجة (من أجل كل درجة حرارة T فقيمة الكثافة ρ لكل طورا في مخطط ${}^{T}/_{T_C}$ مقابل لـ ${}^{\rho}/_{\rho_C}$) نلاحظ ما يسمى بالمنحنى العالمي حيث يتم وضع كل النقاط التجريبية الموافقة للعديد من الموائع المختلفة. الأسس الحرجة المرفقة بالوسيط

$\rho_l - \rho_g$ تتغير كـ $(-t)^{\beta^*}$ عند نقطة الحرجة حيث $\beta^* = \frac{1}{3}$ يمكن تجريبيا ملاحظة أن قانون العالمية هذا غير محقق فقط في المنطقة المجاورة للنقطة الحرجة لكن أيضا في المنطقة البعيدة بما فيه الكفاية. لكل نظام معين هناك عائلة من الأسس الحرجة. لتوضيح هذا سنعتبر الانتقال سائل-غاز لمائع ما، الكميات الترموديناميكية التالية السعة الحرارية C_V والفرق بين الكثافتين $\left(\rho_l - \rho_g \right)$ والانضغاط الإيزوترمي K_T تتغير على الترتيب كـ $|t|^{-\propto}$ و $(-t)^{\beta^*}$ و $|t|^{-\gamma}$ في جوار النقطة الحرجة[2,4].

يمكن إثبات باستعمال تقنيات مجموعة إعادة التنظيم أن الأسس الحرجة الثلاثة مرتبطة ببعضها البعض بالعلاقة $\alpha + 2\beta^* + \gamma = 2$ ، وهذا ما يسمى بقانون السلمي. الترموديناميك الكلاسيكي لا يؤدي إلا الى متراجحة $\alpha + 2\beta^* + \gamma \leq 2$، لكن في الواقع هذه المتراجحة هي المساواة [3,5] .

الفصل الثاني

المجموعة القانونية

تمهيد:

من المعلوم أنه لدراسة نظام معزول (ذو طاقة ثابتة) في حالة توازن ترموديناميكي تستعمل المجموعة القانونية الصغرى من أجل وصف الخصائص الترموديناميكية له. لكن لدراسة نظام طاقته غير ثابتة، أي السماح لهذا النظام بتبادل الطاقة مع الوسط الخارجي (خزان حراري مثلا)، لابد من طريقة أخرى تمكننا من وصف خصائصه الترموديناميكية. إن مثل هذا النظام يدرس في إطار ما يسمى بالمجموعة القانونية.

الهدف من هذا الفصل هو دراسة المجموعة القانونية وكذلك دالة توزيع وعلاقتها بالدوال الترموديناميكية.

1.2 المجموعة القانونية الصغرى:

لدينا في المجموعة القانونية الصغرى

$$S[E] = K \ln \Omega(E) \qquad (1.2)$$

حيث:

K: هو ثابت بولتزمان .

$\Omega(E)$: هو العدد الكلي لحالات النظام ذات الطاقة E.

حيث أن الطاقة الداخلية تعطى بـ: $U =< E >$ ودرجة الحرارة المطلقة T تعطى أيضا بـ:

$$\frac{1}{T} = \frac{\partial S(E)}{\partial E} \qquad (2.2)$$

هذه الطريقة ملائمة عندما نتعامل مع درجات حرية متقطعة، حيث أن حساب $\Omega(E)$ هي مسألة تركيبات (مزج) كما يتبين في الكثير من الأمثلة، من أجل الغازات الحقيقية التي تميز عموما بهاملتوني.

المجموعة القانونية الصغرى لا يمكن استعمالها بسهولة لذلك سنحاول التطرق الى المجموعة القانونية والتي ستكون أكثر ملائمة[4].

2.2 المجموعة القانونية:

الفكرة الأساسية هو الارتياح من الضرورة إلى طاقة ثابتة، وذلك من خلال السماح للنظام بتبادل الطاقة مع خزان حراري، مع اعتبار أن النظام والخزان الحراري يشكلان جملة معزولة و الأمر الذي يؤدي بنا إلى دراسة هذه الجملة في إطار المجموعة القانونية الصغرى [1,2,3]وعليه فلسنا بحاجة إلى مبدأ جديد. الجديد هنا هو تركيز اهتمامنا على النظام المراد دراسته ومحاولة إيجاد احتمال التوزيع في فضاء طوره[4].

لنعتبر نظام معزول مقسم إلى نظامين جزئيين، النظام الأكبر ينظر إليه على أنه الخزان الحراري والنظام الصغير هو المرتبط بالخزان الحراري وهو الذي يهمنا، يمكن كتابة [5]:

$$E_{TOT} = E_{Res} + E_n \qquad (3.2)$$

حيث E_{TOT} هي طاقة الكلية و E_{Res} هي طاقة الخزان الحراري و E_n هي طاقة النظام.

في النهاية حتى النظام الصغير في طريقه إلى التقرب من النهاية الترموديناميكية، حيث $\mathcal{P}_n$ هو احتمال حصول على النظام في الحالة .

$$\mathcal{P}_{\mathrm{n}} = \frac{\Omega_{\mathrm{Res}}(\mathrm{E_{TOT}}-\mathrm{E_n})}{\Omega_{\mathrm{TOT}}} \tag{4.2}$$

حيث أن:

E_{Res} : هي عدد الحالات الميكروسكوبية للخزان والتي لها طاقة $E_{TOT} - E_n$.

E_{TOT}: هي عدد الحالات الميكروسكوبية الكلية (نظام + خزان حراري).

$\mathcal{P}_n$:احتمال تواجد النظام في حالة الطاقة E_n هو نفسه احتمال تواجد الخزان في حالة طاقة $E_{TOT} - E_n$.

لتكن E الطاقة المتوسطة للنظام، حيث:

$$< \mathrm{E} >= \sum \mathrm{E_n}\, \mathcal{P}_{\mathrm{n}} \tag{5.2}$$

بما أن الخزان أكبر بكثير من النظام فإن $E \ll \Omega_{Res}$

$$\mathcal{P}_{\mathrm{n}} = \frac{\Omega_{\mathrm{Res}}(\mathrm{E_{TOT}}-\mathrm{E_n})}{\Omega_{\mathrm{TOT}}} = \frac{\Omega_{\mathrm{Res}}(\mathrm{E_{TOT}}-\mathrm{E}+\mathrm{E}-\mathrm{E_n})}{\Omega_{\mathrm{TOT}}} \tag{6.2}$$

عبارة الاحتمال:

$$\mathcal{P}_{\mathrm{n}} = \frac{\mathrm{e}^{\ln\ \Omega_{\mathrm{Res}}}}{\mathrm{e}^{\ln \Omega_{\mathrm{TOT}}}} \tag{7.2}$$

في هذه الحالة سنقوم بنشر E_{Res} ونتحصل على المعادلة (8.2):

$$\ln \Omega_{\mathrm{Res}}(< E >_{\mathrm{Res}} + \mathrm{E} - \mathrm{E_n}) = \ln \Omega_{\mathrm{Res}}(< E >_{\mathrm{Res}}) + \frac{\partial \ln \Omega_{\mathrm{Res}}(<E>_{\mathrm{Res}})}{\partial \mathrm{E_{Res}}}\Big|_{<E>_{\mathrm{Res}}}^{(\mathrm{E}-\mathrm{E_n})} + ..$$

حيث لدينا: $\mathrm{S} = K\, ln\, \Omega_{Res}$ ومنه:

$$\ln \Omega_{\mathrm{Res}}(< E >_{\mathrm{Res}} + \mathrm{E} - \mathrm{E_n}) = \frac{\mathrm{S_{Res}}}{\mathrm{K}} + \frac{1}{\mathrm{K}} \frac{\partial \mathrm{S}}{\partial \mathrm{E_{Res}}}\Big|_{<E>_{\mathrm{Res}}} (\mathrm{E} - \mathrm{E_n}) \tag{9.2}$$

نعلم أن: $\frac{\partial S}{\partial E_{Res}} = \frac{1}{T}$

وتصبح المعادلة (9.2):

$$\ln \Omega_{\mathrm{Res}}(< E >_{\mathrm{Res}} + \mathrm{E} - \mathrm{E_n}) = \frac{\mathrm{S_{Res}}}{\mathrm{K}} + \frac{1}{\mathrm{KT}} (\mathrm{E} - \mathrm{E_n}) \tag{10.2}$$

$$\mathcal{P}_{\mathrm{n}} = \frac{\mathrm{e}^{(\mathrm{E}-\mathrm{E_n})\frac{\mathrm{S_{Res}}}{\mathrm{K}}+\frac{1}{\mathrm{KT}}}}{\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{S_{TOT}}}{\mathrm{K}}}} \tag{11.2}$$

إذن:

$$\mathcal{P}_{\mathrm{n}} = \mathrm{e}^{\left[\frac{1}{\mathrm{K}}(\mathrm{S_{Res}}-\mathrm{S_{TOT}})+\frac{\mathrm{E}}{\mathrm{KT}}\right]} \times \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{E_n}}{\mathrm{KT}}} = \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{T}(\mathrm{S_{Res}}-\mathrm{S_{TOT}})+\mathrm{E}}{\mathrm{KT}}} \tag{12.2}$$

لدين الطاقة الحرة F تساوي $F = E - ST$ و تساوي $\beta = \frac{1}{KT}$ ومنه[2]:

$$\mathcal{P}_{\mathrm{n}} = \mathrm{e}^{\frac{1}{\mathrm{KT}}[\mathrm{E}-\mathrm{ST}]} e^{-\beta \mathrm{E_n}} \tag{13.2}$$

ومنه :

$$\mathcal{P}_{\mathrm{n}} = \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{F}}{\mathrm{KT}}} e^{-\beta \mathrm{E_n}} \tag{14.2}$$

من المعلوم أن E_n تمثل احتمال الحصول على طاقة النظام E_n هي:

$$\sum_{\mathrm{n}} \mathcal{P}_{\mathrm{n}} = 1 \tag{15.2}$$

فتصبح المعادلة (16.2):

$$\sum_{\mathrm{n}} e^{-\beta \mathrm{E_n}} \, \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{F}}{\mathrm{KT}}} = 1$$

$$\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{F}}{\mathrm{KT}}} \sum_{\mathrm{n}} e^{-\beta \mathrm{E_n}} = 1 \tag{17.2}$$

حيث نستطيع كتابة المعادلة (17.2) كما يلي:

$$\sum_{\mathrm{n}} \mathrm{e}^{-\beta E_{\mathrm{n}}} = \mathrm{e}^{\frac{-\mathrm{F}}{\mathrm{KT}}} \tag{18.2}$$

في الفيزياء الإحصاء يسمى المقدار $\sum_n e^{-\beta E_r}$ بدالة التوزيع، و تكتب:

$$\mathcal{Z} = \sum_{\mathrm{n}} e^{-\beta \mathrm{E_n}} \tag{19.2}$$

3.2 دالة التوزيع:

دالة التوزيع التي تعرف بالمعادلة (19.2) تلعب دورًا جد مهمً في فيزياء الإحصاء:

$$\mathcal{Z} = \sum_{\mathrm{n}} e^{-\beta \mathrm{E_n}}$$

حيث الجمع يتم على مستويات الطاقة على كل الحالات التي تمتلك الطاقةE_n يمكن أن تؤدي كثير من الحالات الصغرى إلى نفس قيمة الطاقةE_n. إذا كان g_n هو الانحلال في المستوى n نستطيع كتابة $\mathcal{Z}$ أيضا مثل[8]:

$$\mathcal{Z} = \sum_{\mathrm{n}} \mathrm{g_n} \; \mathrm{e}^{-\beta \mathrm{E_n}} \tag{20.2}$$

إذا كان طيف مستويات الطاقة مستمرًا أو كانت قريبة جدًا من بعضها البعض فيتم كتابة $\mathcal{Z}$:

$$\mathcal{Z} = \int \omega(\mathrm{E})\mathrm{e}^{-\beta \mathrm{E}}\, \mathrm{dE} \qquad (21.2)$$

حيث: $\omega(E)$ هي كثافة حالات الطاقة E.

$\omega(E)dE$ تمثل عدد الحالات الصغرى التي تكون طاقتها بين E و $E+dE$.

مهما كان طيف مستويات الطاقة في النظام فنحن نعلم أن دالة التوزيع يتم الحصول عليها عن طريق مجموع $\mathrm{e}^{-\beta E_n}$ على كل الحالات الممكنة.

4.2 العلاقة بين $\mathcal{Z}$ والدوال الترموديناميكية:

تعتمد دالة التوزيع على β (وبالتالي T) وعدد الجسيمات N و على الحجم V.

$$\mathcal{Z} = \mathcal{Z}(\ \mathrm{T}، \mathrm{V}، \mathrm{N}\ ) \qquad (22.2)$$

سنرى أنه إذا عرفنا دالة التوزيع للنظام يمكن حساب جميع الدوال الترموديناميكية[7].

ملاحظة:

نقوم باستعمال المشتقات الجزئية دون الإشارة الى المتغيرات التي نعتبرها ثابتة [7,2] .

1.4.2 الطاقة الداخلية:

نعتبر الحجم وعدد الجسيمات ثابتة بحيث مستويات الطاقة تصبح غير متغيرة ونعتبر الطاقة الداخلية هي القيمة المتوسطة لطاقة المعتبرة في المجموعة القانونية .

إذن الطاقة المتوسطة $< E >$ تكتب:

$$\mathrm{U} =< \mathrm{E} >= \sum_{\mathrm{n}} \mathrm{E_n}\, \mathcal{P}(\mathrm{E_r}) = \frac{1}{\mathcal{Z}} \sum_{\mathrm{n}} \mathrm{E_n} \mathrm{e}^{-\beta \mathrm{E_n}} \qquad (23.2)$$

ومنه:

$$< \mathrm{E} > = -\frac{1}{\mathcal{Z}} \sum_{\mathrm{n}} (-\mathrm{E_n})\ \mathrm{e}^{-\beta \mathrm{E_n}} \qquad (24.2)$$

$$< \mathrm{E} >= -\frac{1}{\mathcal{Z}} \sum_{n} \frac{\partial}{\partial \beta} \mathrm{e}^{-\beta \mathrm{E_n}} \qquad (25.2)$$

إذن:

$$< \mathrm{E} >= -\frac{1}{\mathcal{Z}} \frac{\partial}{\partial \beta} \sum_{n} \mathrm{e}^{-\beta \mathrm{E_n}} \qquad (26.2)$$

حيث: $\mathcal{Z} = \sum_{n} \mathrm{e}^{-\beta \mathrm{E_n}}$

$$< \mathrm{E} >= -\frac{1}{\mathcal{Z}} \left(\frac{\partial \mathcal{Z}}{\partial \beta}\right)_{\mathrm{V,N}} \mathcal{Z} \qquad (27.2)$$

نعلم أن:

$$\frac{\partial \ln \mathcal{Z}}{\partial \beta} = \frac{1}{\mathcal{Z}} \left(\frac{\partial \mathcal{Z}}{\partial \beta}\right)_{\mathrm{V,N}} \mathcal{Z} \qquad (28.2)$$

ومنه:

$$< \mathrm{E} >= -\left(\frac{\partial \ln \mathcal{Z}}{\partial \beta}\right)_{\mathrm{V,N}} \qquad (29.2)$$

وبالتعويض $\mathcal{Z} = \mathrm{e}^{\frac{-\mathrm{F}}{\mathrm{KT}}}$ تصبح:

$$< \mathrm{E} >= -\left(\frac{\partial \ln \mathrm{e}^{\frac{-\mathrm{F}}{\mathrm{KT}}}}{\partial \beta}\right)_{\mathrm{V,N}} \qquad (30.2)$$

ومنه:

$$< \mathrm{E} >= \left(\frac{\partial}{\partial \beta}\frac{\mathrm{F}}{\mathrm{KT}}\right)_{\mathrm{V,N}} \qquad (31.2)$$

وهذا يسمح لنا بكتابة المعادلة الشكل التالي:

$$< \mathrm{E} >= \frac{\partial}{\partial \beta}(\beta \mathrm{F}) \qquad (32.2)$$

المجموعة القانونية تسمح بوصف النظام الذي هو في حالة توازن مع الخزان الحراري بحيث الطاقة المتوسطة $< E >$ تكون ثابتة. إذا كانت ترددات E حول $< E >$ ضعيفة يمكن أن نقوم بتغيير مناسب للمجموعة القانونية الصغرى التي من أجلها الطاقة E ثابتة (و ليس $< E >$). إذن من المهم حساب الانحراف (ΔE) المرافق لـ E.التغير $(\Delta E)^2$ يعرف بـ [2]:

$$(\Delta E)^2 =< \mathrm{E}^2 > - < \mathrm{E} >^2 \qquad (33.2)$$

بما أننا نعلم $< \mathrm{E} >$ يكفي حساب $< E^2 >$:

$$< \mathrm{E}^2 >= \sum_{\mathrm{n}} \mathrm{E}_{\mathrm{n}}^2 \ \mathcal{P}(\mathrm{E}_{\mathrm{n}}) = \frac{1}{\mathcal{Z}} \sum_{\mathrm{n}} \mathrm{E}_{\mathrm{n}}^2 \ \mathrm{e}^{-\beta \mathrm{E}_{\mathrm{n}}} \qquad (34.2)$$

بنفس الطريقة السابقة:

$$\mathrm{E}_{\mathrm{n}}^2 \mathrm{e}^{-\beta \mathrm{E}_{\mathrm{n}}} = -\mathrm{E}_{\mathrm{n}} \frac{\partial}{\partial \beta} \mathrm{e}^{-\beta \mathrm{E}_{\mathrm{n}}} = -\frac{\partial}{\partial \beta} \mathrm{E}_{\mathrm{n}} \mathrm{e}^{-\beta \mathrm{E}_{\mathrm{n}}} = \left(\frac{\partial}{\partial \beta}\right)^2 \mathrm{e}^{-\beta \mathrm{E}_{\mathrm{n}}} \qquad (35.2)$$

بحيث :

$$< \mathrm{E}^2 >= \frac{1}{\mathcal{Z}} \frac{\partial^2 \mathcal{Z}}{\partial \beta^2} \qquad (36.2)$$

نلاحظ أن:

$$\frac{\partial^2 \mathcal{Z}}{\partial \beta^2} = \frac{\partial}{\partial \beta} \frac{1}{\mathcal{Z}} \frac{\partial \mathcal{Z}}{\partial \beta} + \frac{1}{\mathcal{Z}^2} \left(\frac{\partial \mathcal{Z}}{\partial \beta}\right)^2 = \frac{\partial^2}{\partial \beta^2} \log \mathcal{Z} + < \mathrm{E} >^2 \qquad (37.2)$$

إذن :

$$(\Delta \mathrm{E})^2 = \frac{\partial^2}{\partial \beta^2} \ln \mathcal{Z} = -\frac{\partial <\mathrm{E}>}{\partial \beta} \tag{38.2}$$

تصبح:

$$(\Delta \mathrm{E})^2 = KT^2 \left(\frac{\partial <\mathrm{E}>}{\partial \mathrm{T}}\right)_{\mathrm{V,N}} = \mathrm{K}T^2 \mathrm{C_V} \tag{39.2}$$

حيث C_V السعة الحرارية مع حجم ثابت، بما أن $(\Delta E)^2$ تكون موجبة أو معدومة، أي $\left(\frac{\partial <E>}{\partial T}\right) \geq 0$، فإن الطاقة الداخلية تزيد بزيادة درجة الحرارة. الترددات بالنسبة للطاقة حول $< E >$ تعطي بـ:

$$\frac{\Delta E}{<\mathrm{E}>} = \frac{KT}{<\mathrm{E}>} = \sqrt{\frac{\mathrm{C_V}}{K}} \tag{40.2}$$

من أجل تقييم رتبة هذه الكمية بمثال ، نستخدم النتائج المتحصل لغاز مثالي كلاسيكي مع مجموعة القانونية الصغرى : $< E > = \frac{3}{2} NKT$ و $C_V = \frac{3}{2} NK$ نجد:

$$\frac{\Delta \mathrm{E}}{<\mathrm{E}>} = \sqrt{\frac{2}{3}} \frac{1}{\sqrt{\mathrm{N}}} \tag{41.2}$$

وبالتالي فإن الترددات تكون متناسبة مع $\frac{1}{\sqrt{N}}$، فمثلا إذا كانت $\mathrm{N} \sim 10^{24}$ ستكون الترددات من رتبة 10^{-12} فهي صغيرة جدا فلا يكمن ملاحظتها. بالنسبة لنظام عياني كل هذا يحدث كما لو كانت الطاقة محددة بدقة وتساوي $< E >$ ، فهذا الإثبات يسمح باستخدام المجموعة القانونية عوضا من المجموعة القانونية الصغرى لوصف التوازن الإحصائي لنظام معزول يحتوي على عدد كبير من الجسيمات أو درجات الحرية.

يمكن أيضا استخدام المجموعة القانونية لوصف نظام عياني في توازن حراري مع خزان حراري و هذه هي الحالة التي تحدث عادة[7,6].

2.4.2 الضغط:

عندما تكونN وT ثابتة و نفترض أن حجم النظام V يتغير بطريقة شبه ثابتة من القيمة V الى قيمة $V+dV$، هذا تغيير ينتج عنه تغير الذي يحدث في مستويات الطاقة. عندما يكون نظام من المجموعة في حالة ممكنة بطاقة E_n فإن عبارة الضغط تعطى بـ:

$$\mathrm{P_n} = -\left(\frac{\partial \mathrm{E_n}}{\partial \mathrm{V}}\right)_{\beta,\mathrm{N}} \tag{42.2}$$

الضغط المقاس على المستوى العياني هو القيمة المتوسطة مأخوذة على أساس المجموعة القانونية:

$$\langle \mathrm{P} \rangle = \sum_{\mathrm{n}} \mathrm{U}_{\mathrm{n}} \quad {}_{\mathrm{n}}(\mathrm{E}_{\mathrm{n}}) = \frac{1}{\mathrm{z}} \sum_{\mathrm{n}} \left(-\frac{\partial \mathrm{E}_{\mathrm{n}}}{\partial \mathrm{V}} \right) \mathrm{e}^{-\beta \mathrm{E}_{\mathrm{n}}} \qquad (43.2)$$

نلاحظ أن:

$$\frac{\partial}{\partial V} e^{-\beta \mathrm{E}_{\mathrm{n}}} = -\beta e^{-\beta \mathrm{E}_{\mathrm{n}}} \frac{\partial \mathrm{E}_{\mathrm{n}}}{\partial \mathrm{V}} \qquad (44.2)$$

و التي تعطي:

$$< \mathrm{P} >= \frac{1}{\beta \mathcal{Z}} \frac{\partial}{\partial \mathrm{V}} \sum_{\mathrm{n}} \mathrm{e}^{-\beta \mathrm{E}_{\mathrm{n}}} = \frac{1}{\beta \mathcal{Z}} \frac{\partial \mathcal{Z}}{\partial \mathrm{V}} \qquad (45.2)$$

أو :

$$< \mathrm{P} >= \frac{1}{\beta} \left(\frac{\partial \ln \mathcal{Z}}{\partial \mathrm{V}} \right) = \mathrm{KT} \left(\frac{\partial \ln \mathcal{Z}}{\partial V} \right)_{\mathrm{T.N}} \qquad (46.2)$$

إذا كانت N كبيرة فإن ترددات P حول $< P >$ مهملة فأن كل قياس للضغط يؤدي إلى القيمة $< P >$ (لا نستطيع تمييزها عن القيمة الأكثر احتمالا $\tilde{P}$)، نتيجة لذلك، نرمز عادة للكميات الترموديناميكية مثل$< P >$ و $< E >$ بـ E وP....[2] .

3.4.2 الطاقة الحرة:

عبارة دالة التوزيع معرفة، (كما سبق و أن رأينا)، بالعبارة التالية:

$$\mathcal{Z} = \sum_{\mathrm{n}} e^{-\beta \mathrm{E}_{\mathrm{n}}} \qquad (19.2)$$

وأيضا:

$$\sum_{\mathrm{n}} \mathrm{e}^{-\beta E_{\mathrm{n}}} = \mathrm{e}^{\frac{-\mathrm{F}}{\mathrm{KT}}} \qquad (18.2)$$

يمكننا بعد ذلك كتابة:

$$\mathcal{Z} = \mathrm{e}^{\frac{-\mathrm{F}}{\mathrm{KT}}} \qquad (47.2)$$

التي نستنتج منها

$$\ln \mathcal{Z} = \frac{-\mathrm{F}}{\mathrm{KT}} \qquad (48.2)$$

و بالتالي يمكن كتابة الطاقة الحرة التي هي من الشكل:

$$\mathrm{F} = -\mathrm{KT} \ln \mathcal{Z} \qquad (49.2)$$

ومنه:

$$\mathrm{S} = -\left(\frac{\partial \mathrm{F}}{\partial \mathrm{T}} \right)_{\mathrm{N,V}} \qquad (50.2)$$

سنقبل وبدون إثبات بأن العلاقة (48.2) التي تربط $\mathcal{Z}$ بـ F صحيحة حتى ولو كان عدد الجسيمات متغيرا، فالعلاقة بين الطاقة الحرة ودالة التوزيع بسيطة جدا، هذا ليس صدفة، و لكن نعلم أنه في الترموديناميك، بما أن المتغيرات المستقلة هيT و V و N فإن الطاقة الحرة (و التي هي دالة الحالة) الأكثر ملائمة لمعالجة المسائل، أما في حالة المجموعة القانونية، حيث لدينا نفس المتغيرات المستقلة، فإن دالة التوزيع هي التي تلعب هذا الدور[6].

4.4.2 الأنتروبي:

نفترض أن عدد الجسيمات ثابت، تعتمد دالة توزيع على المتغيرينT (أو β) وبعدها نستطيع حساب الطاقة الحرة والتي تطرقنا إليها سابقا بالعبارة الأتية [4,2]:

$$\mathrm{F} = -\mathrm{KT}\ln\mathcal{Z} \tag{49.2}$$

$$\mathrm{S} = -\left(\frac{\partial \mathrm{F}}{\partial \mathrm{T}}\right)_{\mathrm{N,V}} \tag{50.2}$$

فتصبح :

$$\mathrm{S} = -\left(\frac{\partial \mathrm{F}}{\partial \mathrm{T}}\right)_{\mathrm{N,V}} = \frac{\partial(\mathrm{KT}\ln\mathcal{Z})}{\partial \mathrm{T}} \tag{51.2}$$

إذن :

$$\mathrm{S} = \mathrm{K}\ln\mathcal{Z} + \mathrm{KT}\frac{\partial(\ln\mathcal{Z})}{\partial \mathrm{T}}$$

$$\mathrm{S} = \mathrm{K}\ln\mathcal{Z} + \mathrm{KT}\frac{\partial\beta}{\partial \mathrm{T}}\frac{\partial \ln\mathcal{Z}}{\partial\beta} \tag{52.2}$$

وبعد الاشتقاق تصبح:

$$\mathrm{S} = \mathrm{K}\ln\mathcal{Z} - \frac{1}{\mathrm{T}}\frac{\partial \ln\mathcal{Z}}{\partial\beta} = \mathrm{K}\ln\mathcal{Z} + \frac{1}{\mathrm{T}}\sum \mathrm{E_n}\,\mathcal{P}_\mathrm{n} \tag{53.2}$$

ومنه:

$$\mathrm{S} = \mathrm{K}\ln\mathcal{Z} - \mathrm{K}\sum \mathcal{P}_\mathrm{n}\; e^{-\beta \mathrm{E}} \tag{54.2}$$

وهكذا:

$$\mathrm{S} = \mathrm{K}\sum \mathcal{P}_\mathrm{n}\left(\ln\mathcal{Z} - \ln e^{-\beta \mathrm{E}}\right) \tag{55.2}$$

فتصبح:

$$\mathrm{S} = -\mathrm{K}\sum \mathcal{P}_\mathrm{n}\;\ln\frac{e^{-\beta \mathrm{E}}}{\mathcal{Z}} \tag{56.2}$$

ومنه عبارة الأنتروبي:

$$\mathrm{S} = -\mathrm{K}\sum \mathcal{P}_\mathrm{n}\;\ln \mathcal{P}_\mathrm{n} \tag{57.2}$$

5.4.2 السعة الحرارية:

تعطى إذن بـ[6]:

$$C_V = \left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_V = \left(\frac{\partial < E >}{\partial T}\right)_V$$

$$C_V = \left(\frac{\partial}{\partial T}\left(-\frac{\partial \ln \mathcal{Z}}{\partial \beta}\right)\right)_V \qquad (58.2)$$

ومنه:

$$C_V = \left(\frac{\partial \beta}{\partial T} \times \frac{\partial}{\partial \beta}\left(-\frac{\partial}{\partial \beta} \ln \mathcal{Z}\right)\right)_V$$

$$C_V = \left(\frac{1}{KT^2} \times \frac{\partial^2}{\partial \beta^2} \ln \mathcal{Z}\right)_V \qquad (59.2)$$

وتصبح:

$$C_V = \frac{1}{KT^2} \left(\frac{\partial^2}{\partial \beta^2} \ln \mathcal{Z}\right)_V \qquad (60.2)$$

6.4.2 المغنطة:

تعرف المغنطة بـ[2,7]:

$$< M >= \frac{1}{\beta} \frac{\partial \ln \mathcal{Z}}{\partial H} \qquad (61.2)$$

وبالتعويض نجد:

$$< M >= \frac{1}{\beta} \frac{\partial \ln e^{\frac{-F}{KT}}}{\partial H} \qquad (62.2)$$

وتصبح:

$$< M >= \frac{1}{\beta} \frac{\partial\left(\frac{-F}{KT}\right)}{\partial H} \qquad (63.2)$$

ومنه:

$$< M >= \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial H} (-\beta F) \qquad (64.2)$$

إذن:

$$< M >= -\frac{\partial F}{\partial H} \qquad (65.2)$$

5.2 دالة التوزيع الكلاسيكية:

في تعريف دالة التوزيع، فرضنا ضمنيا بأننا نتعامل مع جمل فيزيائية بتشكيلات (*Micro states*) لديها طاقات متقطعة، في الحقيقة هذا صحيح في العديد من الجمل الكمية، و لكن غير صحيح للعديد من الجمل الأخرى وعلى الخصوص الكلاسيكية منها [7].

السؤال الذي يطرح هنا هو: ما هو احتمال أن يكون النظام بحالة محددة بين $(\vec{r_N}\ ;\vec{P_1},\dots,\vec{P_N})$ و $(\vec{r_1},\dots,\vec{r_1}+d\vec{r_1},\dots,\vec{r_N}+d\vec{r_N}\ ;\ \vec{P_1}+d\vec{P_1},\dots,\vec{P_N}+d\vec{P_N})$

إن حالة هذا النظام تعرف بوجودها في حيز حجمه $dr^3 \dots dr_N{}^3\ dP^3 \dots dP_N{}^3$

$$\mathrm{dP} = \frac{\mathrm{e}^{-\beta \mathrm{H}\left(\vec{\mathrm{P}_\mathrm{i}},\vec{r_\mathrm{i}}\right)}}{\mathcal{Z}}\,\mathrm{dr}^3 \dots \mathrm{dr_N}{}^3\,\mathrm{dP}^3 \dots \mathrm{dP_N}{}^3 \qquad (66.2)$$

الملاحظ هو أنه لا يوجد تماثل في الوحدات بين طرفي المساواة الأخيرة فالطرف الأيسر ليست له وحدة لأنه يمثل احتمال والطرف الثاني له وحدة $J^{3N} \times S^{3N}$ بسبب الحجم العنصري dV، لذلك علينا قسمته على h^{3N} أي[7,4]:

$$\mathrm{dP} = \frac{\mathrm{e}^{-\beta \mathrm{H}\left(\vec{\mathrm{P}_\mathrm{i}},\vec{r_\mathrm{i}}\right)}}{\mathcal{Z}}\ \frac{\mathrm{dV}}{\mathrm{h}^{3\mathrm{N}}} \qquad (67.2)$$

حيث:

$$d\mathrm{V} = \mathrm{dr_N}{}^3 \mathrm{dP_N}{}^3 \qquad (68.2)$$

من المعلوم أن:

$$\int \mathrm{dP} = 1 \qquad (69.2)$$

حيث تصبح:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\mathrm{e}^{-\beta \mathrm{H}}}{\mathcal{Z}}\ \frac{\mathrm{dr}^{3\mathrm{N}}\mathrm{dP}^{3\mathrm{N}}}{\mathrm{h}^{3\mathrm{N}}} = 1 \qquad (70.2)$$

وبعدها نخرج $\mathcal{Z}$ من التكامل وتصبح:

$$\frac{1}{\mathcal{Z}}\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{e}^{-\beta \mathrm{H}}\ \frac{\mathrm{dr}^{3\mathrm{N}}\mathrm{dP}^{3\mathrm{N}}}{\mathrm{h}^{3\mathrm{N}}} = 1 \qquad (71.2)$$

ومن ثم عبارة $\mathcal{Z}$ هي:

$$\mathcal{Z} = \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{e}^{-\beta \mathrm{H}}\ \frac{\mathrm{dr}^{3\mathrm{N}}\mathrm{dP}^{3\mathrm{N}}}{\mathrm{h}^{3\mathrm{N}}} \qquad (72.2)$$

6.2 تطبيقات المجموعة القانونية:

نأخذ فقط البارامغناطيسية كتطبيق بسيط للمجموعة القانونية.

1.6.2البارامغناطيسية:

نلاحظ ظاهرة البارامغناطيسية عندما تكون الذرة أو جزيئات في مادة لها عزم مغناطيسي دائم، يمكن أن يأتي هذا من دوران الإلكترونات التي لها عزم مداري معدوم في المدارات الذرية أو الجزيئية غير المكتملة أو من تراكب التأثيرين السابقين عندما توضع مادة البارامغناطيسية في المجال المغناطيسي B فتميل العزوم المغناطيسية M الى التوجه في إتجاهه، هذا يعني أنه توجد علاقة بين العزم المغناطيسي وسبين الإلكترون.

تعطى معادلة العزم المغناطيسي M [3,2].

$$M = g\frac{e}{2m} S \qquad (73.2)$$

سنعتبر في هذا النموذج المكون من N جسيم متماثل لا تتفاعل فيما بينها، إذا تم تطبيق مجال مغناطيسي B فستميل الجسيمات إلى اتجاه الحقل المغناطيسي لكن التحريض الحراري سيحاول تغيير.

في ميكانيكا الكم يتوقع أن يكون هناك مستويين من الطاقة المحتملة لكل جسيم، حسبما إذا كان العزم المغناطيسي:

$$E_{\uparrow} = MB \quad \text{و} \quad E_{\downarrow} = -MB \qquad (74.2)$$

إذا كانت درجة حرارة الشبكة هي T فسنطبق المجموعة القانونية على كل جسيم من الشبكة لأنها يمكن تمييزها. ان الجسيمات الأخرى تلعب دور الخزان الحراري. الاحتمالات ل تكون الحالات ↑ و ↓ تساوي على التوالي لـ :

$$\mathcal{P}_{\uparrow} = \frac{1}{\mathcal{Z}} e^{\frac{MB}{KT}} \quad \text{و} \quad \mathcal{P}_{\downarrow} = \frac{1}{\mathcal{Z}} e^{-\frac{MB}{KT}} \qquad (75.2)$$

حيث :

$$\mathcal{Z} = e^{-\frac{MB}{KT}} + e^{\frac{MB}{KT}} \qquad (76.2)$$

نضع $x = \frac{MB}{KT}$، إذن:

$$\mathcal{Z} = e^{-x} + e^{x} \quad \text{و} \quad \mathcal{P}_{\downarrow} = \frac{1}{\mathcal{Z}} e^{-x} \quad \text{و} \mathcal{P}_{\uparrow} = \frac{1}{\mathcal{Z}} e^{x} \qquad (77.2)$$

لنحسب متوسط العزم المغناطيسي للجسيم :

$$\langle M \rangle = \frac{(M)\mathcal{P}_{\uparrow} + (-M)\mathcal{P}_{\downarrow}}{\mathcal{Z}} = M\frac{e^{x} - e^{-x}}{e^{x} + e^{-x}} \qquad (78.2)$$

$$\langle M \rangle = M \tanh x = M \tanh \frac{MB}{KT} \qquad (79.2)$$

✓ إذا T جد كبيرة $(KT \gg MB)$, $x \to 0$, $\tanh\frac{MB}{KT} \to \frac{MB}{KT}$ حيث:

$$\langle M\rangle = \frac{M^2B}{KT} \to 0 \qquad (80.2)$$

الحالة ↑ و ↓ لهما احتمالان متساويان: $\mathcal{P}_\uparrow = \mathcal{P}_\downarrow = \frac{1}{2}$

فهي تفوق طاقة التحريض الحرارية الطاقة المغناطيسية ويتم توزيع M بشكل متساوٍ في كلا الاتجاهين:

✓ إذا $T \leftarrow 0$ (KT≪MB)، $x \to \infty$, $\tanh\frac{MB}{KT} \to 1$ حيث :

$$\langle M\rangle \to M \qquad (81.2)$$

لدينا $\mathcal{P}_\uparrow = 1$ و $\mathcal{P}_\downarrow = 0$ ، النظام في حالة الطاقة الأقل ($E_\uparrow = -MB$) بما أن هناك جسيمات N لكل وحدة حجم ، فإن متوسط العزوم المغناطيسة لكل وحدة حجم هو:

$$\langle M\rangle = N\langle M\rangle \qquad (82.2)$$

الحساسية المغناطيسية χ ، و معامل التناسب بين $\langle\mathcal{M}\rangle$ و B عندما تكون $B \to 0$:

$$M = \chi B \qquad (83.2)$$

إذا $KT \gg MB$ لدينا :

$$\chi = \frac{NM^2}{KT} \qquad (84.2)$$

حيث:

χ : الحساسية المغناطيسية و هي تتناسب مع $\frac{1}{T}$ (قانون كوري)[2,5] .

الفصل الثالث

ظاهرة الفيرومغناطيس

ونموذج ايزينغ

تمهيد:

إن ظاهرة الفيرومغناطيسية من أهم و أعقد ظواهر الفيزيائية وهي وثيقة الاتصال بالظواهر الحرجة وكذلك بالانتقالات الطورية، لفهم هذه الظاهرة اجتهد الفيزيائيون لوضع نموذج يمكنهم من فهمها، لذلك أُقترح نموذج سمي بنموذج ايزينغ . والذي نحن بصدد دراسته في هذا الفصل من خلال تقريب الحقل المتوسط وكذلك من خلال الحسابات العددية المعتمدة على خوارزمية ميتروبوليس و مونتي كارلو.

1.3 وصف النموذج:

سنحاول بناء نموذج بسيط للفيرومغناطسية يضمن تلك الميزات التي تبدو أساسية، أي بناء نموذج يرقى إلى البحث عن أفضل حل وسط بين متطلبين متناقضين[7]:

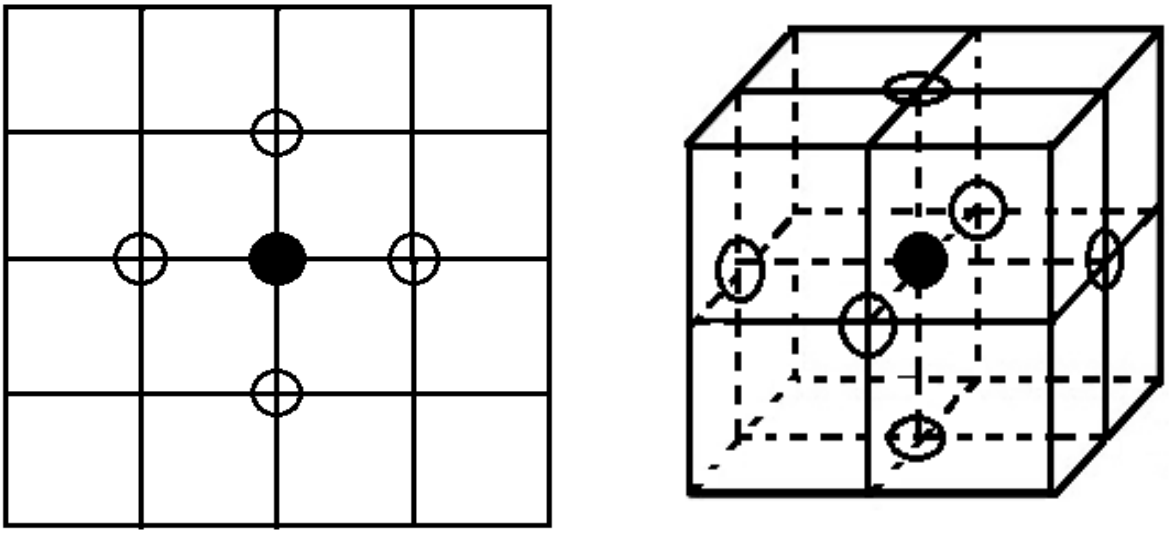
1. إيجاد معدلات بسيطة الحل تحليلا إن أمكن أو عدديا.
2. عدم فقدان أي ميزة من الميزات الفيزيائية الأساسية التي نود دراستها باستعمال هذا الإجراء التبسيطي.

الأمر الذي يبدو أساسيا في ظاهرة الفيرومغناطيسية هو التفاعل بين السبينات، الذي يجعلها تحاول أن تكون في اتجاه واحد، يبدو منطقيا افتراض أنه يمكن استبدال كل ذرة من الفيرومغناطيس بإلكترون يحمل سبينا يكون مسئولا عن الفيرومغناطيسية. وفقا لذلك، ما نقوم به كخطوة أولى لوصف الفيرومغناطيسية هو اعتبار أن الإلكترونات موضوع في مواقع على الشبكة البلورية[8].

سوف نقوم بتبسيط الدراسة من خلال اعتبار أن الشبكة مكعبة، رغم أن هذا غير ضروري.

التفاعل سبين – سبين ذو مدى قصير،لذلك التفاعل بين سبينين تفصلهما مسافة 10اضعاف من بعد الشبكة مثلا يكون مهملا[3,9].

الخطوة الثانية تتضمن كتابة التفاعل باعتبار التفاعل مع الجوار الأقرب فقط، فمثلا من أجل الشبكة ذات بعدين $(d = 2)$فإن كل سبين له أربعة جوارات أقرب، أما من أجل الشبكية ذات ثلاثة أبعاد $(d = 3)$ فإن السبين له ستة جوارات أقرب، يرمز هنا إلى بعد الفضاء [10,1,7] .



$\mathbf{d = 2}$ $\quad$ $d = 3$

● = الجوار الأقرب لسبين ○

الشكل(1.3): رسم تخطيطي يوضح الجوار الأقرب للسبين من أجل $d = 2$ و $d = 3$

الهاملتوني المسئوول على مثل هذه التفاعلات يكتب:

$$H = -J \sum_{<ij>} \sigma_i \ \sigma_j \qquad (1.3)$$

حيث:

J هو ثابت موجب يسمى ثابت الاقتران.

الترميز $\sum_{<ij>}$ يعني الجمع على الجوار الأقرب فقط .

الهاملتوني H يعرف بما يسمى بنموذج هايزنبرغ .

من المعلوم أن التأثيرات الكمومية غير مهمة في جوار درجة الحرارة الحرجة T_C.

وبالتالي يمكن تعويض مصفوفات باولي بأشعة كلاسيكية $\vec{S}$ ذات طول مساو للوحدة هذا يعرف بنموذج هايزنبرغ الكلاسيكي[11,8].

على الرغم من ان هذا النموذج الأخير الكلاسيكي غير أنه مازال معقدا لأنه لا تعرف له أي حلول تحليلية إلا في حالة خاصة ذات بعد واحد أو بعدين، لذلك يجب إضافة تقريبات أخرى كتعويض الأشعة $\vec{S}$ بأعداد سلمية S_i التي يمكن أن تأخذ فقط القيمتين التاليتين:

$$S_i = +1 \ ، \ S_i = -1 \qquad (2.3)$$

إن التقريب الأخير يعني أن سبين يكون دائما موازيا لمحور ثابت وعلى طول هذا المحور هناك امكانياتان لتوجهه (سبين إلى أعلى $S_i = +1$، سبين إلى أسفل $S_i = -1$)[6,12,9].

لقد اقترح لنز هذا النموذج على ايزينغ كموضوع دكتورا في سنة 1920، لم تكن هناك أي طريقة لتقييم تقريباته ، لكن الآن نعلم أن نموذج ايزينغ نموذج جيد للفيرومغناطسية.

في نموذج هايزنبرغ المغنطة هي شعاع وبالتالي نحتاج الى ثلاثة أعداد لتعيينه، حيث يمكن القول بأن البعد n وسيط الترتيب مساوي الى 3، لكن في نموذج ايزينغ إتجاه المغنطة ثابت ولذلك عدد واحد كاف لتعيينه، وبذلك يكون بعد وسيط الترتيب هو $n = 1$[7,10].

ما ذكرناه سابقا يجعلنا نكتب الهاملتوني لنموذج ايزينغ على الشكل التالي:

$$H = -J\sum_{<ij>} S_i\, S_j \text{ ، } S_i = \pm 1 \qquad (3.3)$$

2.3 نموذج ايزينغ:

نعتبر شبكة دورية ذات d بعد بها n نقطة في كل بعد، وبالتالي يكون لدينا $N = n^d$ نقطة في كامل الشبكة، بحيث أن في كل نقطة (موقع الشبكة) نضع سبين S_i $(i = 1, \ldots, N)$.

السبينات يمكنها أن تأخذ فقط القيمتين $+1$ أو -1 ، تشكيلة هذه الجملة (النظام) ذات N سبين هي إذن معينة مجموعة الأعداد $\{S_i\}$[13,11].

في نموذج ايزينغ طاقة هذا النظام ذات N سبين في تشكيلة $\{S_i\}$ تعطى بـ:

$$E_I\{S_i\} = -J\sum_{<ij>} S_i\, S_j - H\sum_{i=1}^{N} S_i \qquad (4.3)$$

الوسيط H يمثل الحقل المغناطيسي الخارجي.

الرمز $< ij >$ يرمز الى الجمع على الجوار الأقرب.

من أجل $J > 0$ وبالتالي نحصل على الفيرومغناطيسية في حين أنه من أجل$(J < 0$)نحصل على ضد الفيرومغناطيسية، لكن ما يهمنا هو فقط الحالة الأولى $(J > 0)$.

إذن الدالة التوزيع تعطى بـ:

$$\mathcal{Z} = \sum_{S_1}\sum_{S_2} \ldots \sum_{S_N} e^{-\beta E_I\{S_i\}} \qquad (5.3)$$

إذن يوجد 2^N حد في الجمع الظاهر في دالة التوزيع. في حالة بعدين $(d = 2)$ يكون لدينا عدد الحدود مساوي الى $N = n^2$ سبين في الشبكة المربعة. إن هذه التشكيلات $\{S_i\}$ يمكن أن ترى على أنها مصفوفات $n \times n$ [11,12].

نفترض الشروط الدورية حيث نعتبر مصفوفة $(n + 1)(n + 1)$ كالأتي:

- ✓ هو أن الصف $(n + 1)$ هو بالضبط السطر الأول.
- ✓ والعمود $(n + 1)$ هو بالضبط العمود الأول .
- ✓ وبالتالي الشبكة المربعة هو تورس [7].

3.3 تقريب متوسط الحقل:

بما أن الحلول التي نبحث عليها في نموذج ايزينغ معقدة أو لا يمكن الوصول إليها، لذلك نحتاج إلى طرق التقريب.

أحد أهم هذه الطرق والتي اقترحت من قبل العالم فايس سنة 1907 م وهي طريقة الحقل المتوسط. إن هذه الطريقة سنعتمد عليها في دراستنا لنموذج ايزينغ و التي ستمكننا من الحصول على الانتقالات الطورية[12,6].

طريقة التقريب هذه تعتمد على الفكرة التالية:

- نأخذ أحد السبينات S_i ونفترض أن طاقته هي E_I التي يمكن الحصول عليها من خلال تعويض باقي السبينات بقيمها المتوسطة $\langle S_i \rangle$ وهذا يؤدي بنا الى المسألة الكلاسيكية للبارامغناطيسية التي هي شكل من أشكال المغناطيسية تظهر فقط في وجود مجال مغناطيسي خارجي و تزول بزوالها ...

أن هذه الطريقة تمكننا من كتابة حد الطاقة الناتج عن التفاعل بين السبينات بطريقة يرى كأنه حد ناتج عن وجود سبينات تحت تأثير حقل مغناطيس خارجي[8,13].

إذن طاقة الجملة (4.3) تكتب:

$$E_I\{S\} = -J\sum_{<ij>} S_i\langle S_j\rangle - H\sum_{i=1}^{N} S_i \qquad (6.3)$$

4.3 المخطط الطوري ودرجة الحرارة الحرجة:

بافتراض أن الجملة في حالة توازن مع الخزان الحراري بدرجة الحرارة T. التوازن الحراري لنموذج ايزينغ يوصف بالمجموعة القانونية.

إن احتمال أن نجد نموذج ايزينغ في تشكيلة $\{S_1, \dots, S_N\}$ يعطى بتوزيعة بولتزمان التالية[10,14]:

$$P\{S\} = \frac{e^{-\beta E_I\{S\}}}{\mathcal{Z}} \qquad (7.3)$$

حيث أن دالة التوزيع تعطى بالعبارة الآتية:

$$\mathcal{Z} = \sum_{\{S\}} e^{\beta(J\sum_{<ij>} S_i\langle S_j\rangle + H\sum_{i=1}^{N} S_i)}$$

$$\mathcal{Z} = \sum_{S_1} \dots \sum_{S_N} e^{\beta(J\sum_{<ij>} S_i\langle S_j\rangle + H\sum_{i=1}^{N} S_i)} \qquad (8.3)$$

المغنطة، والتي تمثل وسيط الترتيب للجملة، في التشكيلة $\{S_1, \dots, S_N\}$ تكتب:

$$M = \sum_i S_i \tag{9.3}$$

متوسط المغنطة M يعطى بالعلاقة:

$$< M >= -\frac{\partial F}{\partial H} = -\frac{\partial}{\partial H}\left(-KT \ln \mathcal{Z}\right) \tag{10.3}$$

$$< M >= \frac{1}{\beta}\frac{\partial}{\partial H}\ln \mathcal{Z} = \frac{1}{\beta}\frac{1}{\mathcal{Z}}\frac{\partial \mathcal{Z}}{\partial H} \tag{11.3}$$

$$= \frac{1}{\beta}\frac{1}{\mathcal{Z}}\frac{\partial}{\partial H}\sum_{\{S\}} e^{\beta(J\sum_{<ij>} S_i(S_j)+H\sum_{i=1}^{N} S_i)} \tag{12.3}$$

$$= \frac{1}{\beta}\frac{1}{\mathcal{Z}}\sum_{\{S\}} \beta \sum_i S_i \, e^{-\beta E_I\{S\}} \tag{13.3}$$

$$= \sum_i \frac{1}{\mathcal{Z}}\sum_{\{S\}} \sum_i S_i \, e^{-\beta E_I\{S\}} \tag{14.3}$$

$$< M >= \sum_i < S_i >= N < S > \tag{15.3}$$

نلاحظ هنا أن $< S >=< S_i >$ لأن كل السبينات متكافئة.

لحساب المغنطة علينا أولا حساب دالة التوزيع $\mathcal{Z}$ وذلك بإعتماد تقريب الحقل المتوسط من أجل ذلك سنكتب الطاقة على الشكل التالي[12,10]:

$$E_I\{S\} = (-J\sum_{<ij>}(S_j))\, S_i - H\sum_{i=1}^{N} S_i \tag{16.3}$$

$$E_I\{S\} = \sum_i H_{eff}^{i} S_i - H\sum_i S_i \tag{17.3}$$

حيث أن الحقل المغناطيسي الفعال يكتب:

$$H_{eff}^{i} = -J\sum_{<ij>} S_{j(i)} \tag{18.3}$$

إن الترميز $S_{j(i)}$ يعني أن الجمع يكون فقط على الجوار الأقرب لسبين i في تقريب الحقل المتوسط نقوم بتعويض السبينات $S_{j(i)}$ بقيمتها المتوسطة أي[13,8]:

$$H_{eff}^{i} = -J\sum_{<ij>} S_{j(i)} = -Jq < S > \tag{19.3}$$

إذن يمكن إعادة كتابة الطاقة (17.3) على الشكل:

$$E_I\{S\} = -Jq < S > \sum_i S_i - H\sum_i S_i$$

$$E_I\{S\} = -(H + Jq < S >)\sum_i S_i \tag{20.3}$$

استنادا الى العبارة (20.3) للطاقة فإن دالة التوزيع تصبح:

$$\mathcal{Z} = \sum_{S_1} \dots \sum_{S_N} e^{\beta(H+Jq<S>)\sum_i S_i} \tag{21.3}$$

$$= \sum_{S_1} \dots \sum_{S_N} e^{\beta(H+Jq<S>)S_1} \dots e^{\beta(H+Jq<S>)S_N} \tag{22.3}$$

$$= \sum_S e^{\beta(H+Jq<S>)S_1} \dots e^{\beta(H+Jq<S>)S_N} \tag{23.3}$$

$$=\left(\sum_S e^{\beta(H+Jq<S>)S}\right)^N \quad (24.3)$$

$$=(e^{-H_{eff}}+e^{H_{eff}})^N \quad (25.3)$$

$$\mathcal{Z}=(2\cosh(\beta H_{eff}))^N \quad (26.3)$$

الطاقة الحرة والمغنطة تعطيا إذن بالعلاقتين التاليتين:

$$F=-KT\ln\mathcal{Z}=-KT\ln(2\cosh(\beta H_{eff}))^N \quad (27.3)$$

$$=-NKT\ln(2\cosh(\beta H_{eff})) \quad (28.3)$$

$$<M>=N<S>=-\frac{\partial F}{\partial H}=\frac{N}{\beta}\beta\frac{\sinh(\beta H_{eff})}{\cosh(\beta H_{eff})} \quad (29.3)$$

$$<M>=N\tanh(\beta H_{eff}) \quad (30.3)$$

في غياب الحقل المغناطيسي الخارجي فإن متوسط السبينات يكتب:

$$<S>=\tanh(\beta Jq<S>) \quad (31.3)$$

هذه هي المعادلة الأساسية في تقريب الحقل المتوسط. يبدو جليا من المعادلة (29.3) بأن $<S>=0$ هو حل لها، والذي يصف الطور البارامغناطيسي وذلك من أجل درجات الحرارة العالية (أكبر من درجة حرارة حرجة T_C)، أما من أجل درجات الحرارة المنخفضة (أقل من درجة حرارة حرجة T_C) لدينا أيضا حل يختلف عن الصفر $(<S>\neq 0)$[15,10,9] .

المقصود بدرجة حرارة الحرجة هو درجة الحرارة التي تفصل الطورين، لذلك يمكن أن نقول بأن $<S>$ تقترب من الصفر كلما اقتربت درجة الحرارة من درجة الحرارة الحرجة، وبالتالي في جوار درجة الحرارة الحرجة T_C يمكن استعمال نشر العلاقة (29.3).

نعلم أن:

$$\tanh_{X\to 0}X=X-\frac{1}{3}X^3+\cdots \quad (32.3)$$

وبالتالي:

$$<S>=\beta Jq<S>-\frac{1}{3}(\beta Jq<S>)^3 \quad (33.3)$$

$$\left(\frac{1}{3}(\beta Jq)^3<S>^2-\beta Jq+1\right)<S>=0 \quad (34.3)$$

وهذا يعني أن:

$$<S>=0 \quad (35.3)$$

أو

$$\frac{1}{3}(\beta Jq)^3 < S >^2 - \beta Jq + 1 = 0 \quad (36.3)$$

$$< S >^2 - \frac{3}{(\beta Jq)^3}(\beta Jq - 1) = 0 \quad (37.3)$$

$$< S >^2 - \frac{3}{T(\beta Jq)^3}(\frac{JqT}{KT} - T) = 0 \quad (38.3)$$

في المعادلة (38.3) نضرب ونقسم في T .

$$< S >^2 - \frac{3}{T(\beta Jq)^3}(\frac{JqT}{KT} - T) = 0 \quad (39.3)$$

$$< S >^2 - \frac{3}{T(\beta Jq)^3}(\frac{Jq}{K} - T) = 0 \quad (40.3)$$

نقوم بتعويض $T_C = \frac{JqT}{KT}$ وتصبح:

$$< S >^2 - \frac{3}{T(\beta Jq)^3}(T_C - T) = 0 \quad (41.3)$$

$$< S >= \sqrt{-\frac{3}{T(\beta Jq)^3}}(T_C - T)^{1/2} \quad (42.3)$$

و منها عبارة $< S >$ هي:

$$< S >= \sqrt{-\frac{3}{T(\beta Jq)^3}}(T_C - T)^{\beta} \quad (43.3)$$

حيث $\beta = \frac{1}{2}$:

إذن في النهاية سنحصل على الحلول الآتية[8,7]::

- ✓ الطور البارامغناطيسي $< S >= 0$
- ✓ الطور الفيرومغناطيسي $< S >= \pm \sqrt{-\frac{3}{T(\beta Jq)^3}}(T_C - T)^{\beta}$

5.3 نموذج ايزينغ والنتائج العددية:

سنقوم بكتابة الشفرة باستعمال لغة الفورترون كما أننا سنستعمل برنامج الغنوبلوط لرسم المنحنيات العددية والتي سنحصل عليها من خلال رسم الطاقة المتوسطة والمغنطة المتوسطة كدوال في درجة الحرارة، والتي يظهر من خلالها المنحنيات الطور الذي يبدي بوضوح الانتقال الطوري بين الطورين عند درجة الحرارة الحرجة T_C باستعمال وسيط الترتيب الذي هو المغنطة المتوسطة[12,14].

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

$$E_I = -\sum_{j=1}^{n}\left[\frac{J}{2}S(i,j)\big(S(i+1,j)+S(i-1,j)+S(i,j+1)+S(i,j-1)\big)\right] \quad (44.3)$$

يبدو أن هناك مشكلة الحواف في الشبكة المعتبرة، لذلك سنفرض شروط حدية دورية، من أجل اختزال الحواف والتأثيرات الحدودية، هذا يمكن فعله كالأتي:

نعتبر مصفوفة $(n+1)\times(n+1)$ حيث أن سطر $(n+1)$ متطابق مع سطر الأول والعمود $(n+1)$ متطابق مع العمود الأول، وبالتالي الشبكة المربعة هي تورس. الشروط الحدية الحلقية هي إذن تكتب كما يلي:

$$S(0,j) = S(n,j), S\big((n+1),j\big) = S(1,j) \quad (45.3)$$

$$S(i,0) = S(i,n), S(i,n+1) = S(i,1) \quad (46.3)$$

التغير في الطاقة جراء قلب السبين $S(i,j)$، هو مكون أساسي في خوارزمية ميتروبوليس، لذلك يعطى هذا التغير بالعلاقة:

$$\Delta E = 2J\,S(i,j)\big(S(i+1,j)+S(i-1,j)+S(i,j+1)+S(i,j-1)\big)+2HS(i,j) \quad (47.3)$$

شفرة الفورترون تحتوي على الأجزاء التالية[11,7]:

1. برنامج جزئي يولد الأعداد الشبه العشوائية، نشير الى برنامجين مستقرين هما Run 2أو Run Lux.
2. برنامج جزئي ينفذ خوارزمية ميتروبوليس لنموذج ايزينغ الجزء الأساسي لهذا البرنامج مدرج في الملحق.
3. يتم حساب الطاقة والمغنطة لنموذج ايزينغ.
4. ومن ثم تحديد وسائط النموذج مثل n و J و $\beta = \frac{1}{KT}$ و H.
5. نختار تشكيلة ابتدائية ويتم اختيارها عن طريق قيم لسبين تكون إما:

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

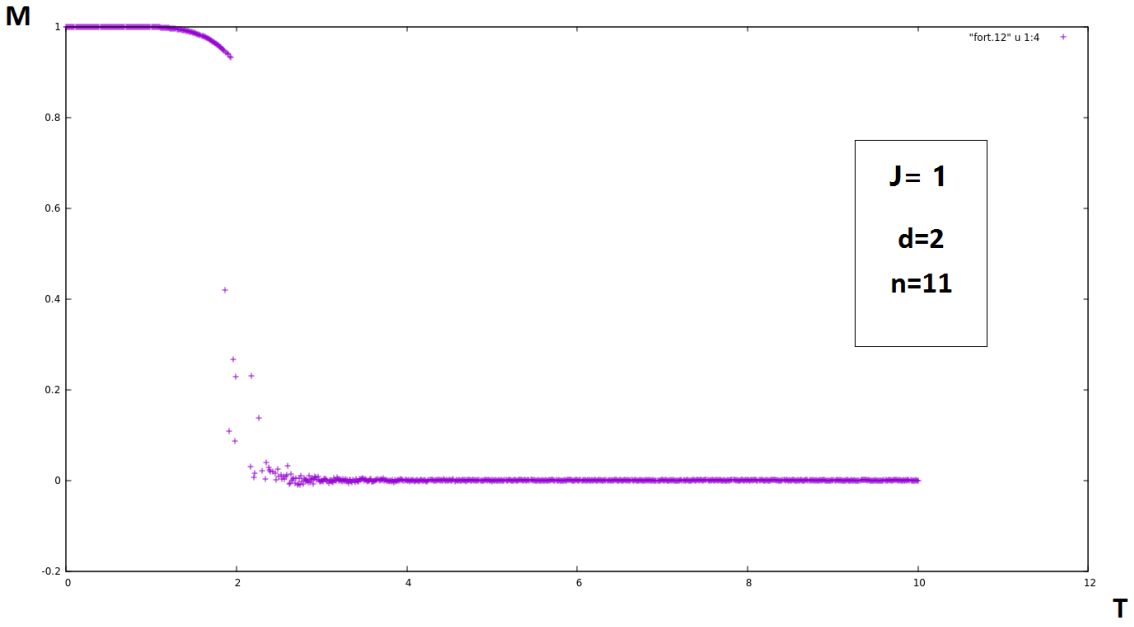
أو

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

6. نجري خوارزمية ميتروبوليس من أجل زمن الوصول إلى التوازن الحراري وتدرس تطور الطاقة والمغنطة من أجل درجات حرارة مختلفة.
7. نضيف تطور مونتي كارلو بعدد كبير من الخطوات ثم نقوم بحساب القيمة المتوسطة لكل من الطاقة والمغنطة.

6.3 النتائج العددية ومناقشتها:

1.6.3 المغنطة:

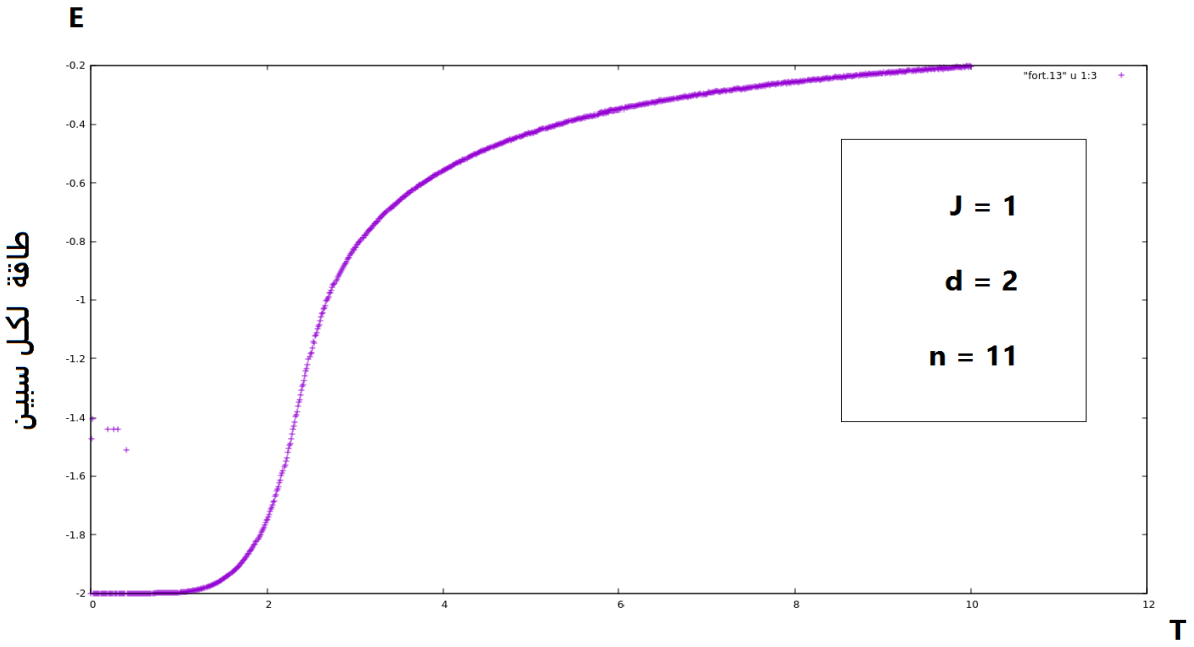


الشكل(2.3): المغنطة التلقائية كدالة في درجة الحرارة لنموذج ايزينغ من أجل $N=n^2$ ، $H=0$ ،$K_B = 1$

تفسير:

1. نلاحظ من خلال منحنى المغنطة أنه فعلا هناك انتقال طوري من الدرجة الثانية .
2. يتم الانتقال الطوري عند درجة الحرارة الحرجة $T_C \approx 2.27$.
3. المغنطة بجوار درجة الحرارة الحرجة تتصرف كـ $(T_C - T)^{\beta}$ حيث $\beta=\frac{1}{2}$

2.6.3 الطاقة:



الشكل(3.3): متوسط الطاقة لكل سبين كدالة في درجة الحرارة لنموذج آيزينغ من أجل $N=n^2$ ،

تفسير:

1. نلاحظ أنه من أجل درجات الحرارة المنخفضة أن الطاقة $<E>/N$ تقرب من 2J- التي تساوي 2-

   وهذا من أجل كل السبينات التي تتوجه من أجل درجة الحرارة هذه في اتجاه واحد.

2. هناك انعطاف عند نقطة تقريبا مساوية لـ T_C موافق للميل الكبير $\left(\frac{d<E>}{dT}\right)$.

3. من أجل الأنظمة الكبيرة جدا فإن $\frac{d<E>}{dT}$ مالا نهاية عند T_C ونعلم أن الطاقة مرتبطة بالسعة الحرارية عن طريق العلاقة $C_V = \frac{d<E>}{dT}$ مما يعني أن السعة الحرارية لا نهائية وهذا دليل على وجود النقطة الحرجة التي يحدث عنها الانتقال الطوري.

الخلاصة العامة

الخلاصة العامة

في هذا العمل يمكننا القول أننا توصلنا في الفصل الأول إلى توضيح وتعميق فهم الانتقالات الطورية من خلال الوقوف على خصائص عامة التي تميزها وذلك من خلال تعريف الأدوات الرياضية والمفاهيم الفيزيائية التي تمكننا من ذلك' كتعريف وسائط الترتيب والأسس الحرجة وعلاقتها بالدوال الترموديناميكية، إضافة إلى معايير التصنيف المختلفة وأخيرا العالمية.

أما الفصل الثاني تطرقنا إلى دراسة مفصلة للمجموعة القانونية حيث توصلنا إلى تعريف دالة التوزيع ثم القيام بإشتقاق الكميات الترموديناميكية من خلال دالة التوزيع.

وفي الفصل الأخير تطرقنا إلى حل نموذج ايزينغ في بعدين باستعمال تقريب الحقل المتوسط وتمكنا من الحصول على طورين في جوار النقطة الحرجة نظريا، كما قمنا بكتابة شفرة الفورترون بالاعتماد على خوارزمية ميتروبوليس و مونتي كارلو، وحصلنا من خلال هذا الحساب العددي على منحنى المغنطة المتوسطة ومنحنى الطاقة المتوسطة التي توصلنا من خلالها إلى إثبات وجود الإنتقال الطوري من الفيرومغناطيسية إلى البارامغناطيسة.

قائمة المراجع

قائمة المراجع

[1] W. Greiner, L. Neise, H. Stöcker, "Thermodynamics and Statistical Mechanics", springer, New York,457,1997.

[2] C. Ngô, H. Ngô, " Physique statistique introduction(3^{e}édition)", Dunod, Paris, 350, 2008.

[3] M. Le Bellac, " Quantum and Statistical Field Theory", Oxford Science Publications, New Yor,606,1991,

[4] K.Huang, " Introduction to Statistical Physics", Taylor & Francis, London and New York , 305,2002.

[5] Kittel. C, Introduction to solid state physics, (6th edn). Wiley, New York. (1986)

[6] D. Tong, " Statistical Physics", Cambridge. U. K, 2012.

[7] K.Huang, " Statistical mechanics", JOHN WIELEY & SONS, 487, 1987.

[8] B. Ydri," Computational Physics ", World Scientific, singapora, 313, 2017.

[9] M. Kardar, " Statistical Physics of Fields", Cambridge, London, 2007.

[10] N.J.Giordano, H. Nakanishi, "Computational Physics", 2nd Edition,Pearson/Prentice Hall, 2006.

[11] R.H.Landau, M.J.Paez, C.C. Bordeianu, "Computational Physics: Problem Solving with Computers", 2nd edition, John Wiley and Sons, 2007.

[12] Paul L.DeVries, "A First Course in Computational Physics", 2nd edition, Jones and Bartlett Publishers , 2010.

[13] Ma. S. K, Statistical mechanics, World Scientific, Singapore, 1985.

[14] Kogut, J. and Wilson, K. (1973). The renormalization group and the ε-expansion. Physics Reports, 12C, 76.

[15] Wilson. K, "The renormalization group and critical phenomena", Rev. Mod. Phys. 55, 583, 1983. doi:10.1103/RevModPhys.55.583.

الملخص

تهدف هذه المذكرة لدراسة الانتقالات الطورية من الدرجة الثانية، والتي تسمى أيضا الظواهر الحرجة. تقتصر الدراسة على الانتقال الفيرومغناطيسي-البارمغناطيسي، لأن هذا هو المثال الأكثر شيوعًا للانتقالات الطورية من الدرجة الثانية، ويمكن بسهولة سحب خصائصه العامة إلى كل الانتقالات الأخرى. نموذج أيزينغ بالغ الأهمية لأنه النموذج الأساسي للفيرومغناطيسية كما يبدي مغنطة تلقائية في بعدين. هناك ثلاثة فصول في هذه المذكرة، الأول مخصص للمفاهيم العامة للإنتقالات الطورية، والفصل الثاني مخصص للمجموعة القانونية. أخيرًا، خُصص الفصل الأخير والأساسي لدراسة نموذج أيزينغ في بعدين بإستعمال تقريب الحقل المتوسط ومحاكاة مونتي كارلو العددية.

الكلمات المفتاحية: نموذج ايزينغ – الإنتقالات الطورية – الإنتقال الفيرومغناطيسي-بارامغناطيس

Résumé

This memoir aims to study second-order phase transitions, also called critical phenomena. The study is restricted to the ferromagnetic-paramagnetic transition; because this is the most familiar example of a second-order phase transition, and its general characteristics can easily be transposed to all the others. The Ising model is so important because it is the basic model of ferromagnetism and exhibits spontaneous magnetization in two dimensions. There are three chapters in this memoir the first one is devoted to the general concepts of phase transitions and the second chapter is devoted to canonical ensemble. Finally, the last and the basic one is devoted to study of Ising model in two dimensions by using mean field approximation and numerical Monte Carlo simulation.

Key words: Ising model - phase transitions - the ferromagnetic-paramagnetic transition