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 و طاقة

من إعداد الطالبة:
عطاالله حنان
الموضوع

الأسس الحرجة ونموذج ايزينغ

نوقشت يوم: 2019-06-20

أمام لجنة المناقشة المكونة من الأساتذة:

ليتيم فتحي	أستاذ مساعد أ	رئيسا
إحميم رشيد	أستاذ محاضر ب	مناقشا
بسر الزوبير	أستاذ مساعد أ	مؤطرا

الموسم الجامعي: 2019/2018

إهداء

أهدي هذا العمل المتواضع الى :

الوالدين الكريمين أطال الله في عمرهما.

الى إخوتي وأخواتي.

الى كل الصديقات وأخص بالذكر

دلال، مروة، مبروكة

الى من كان له الفضل في إتمامي لهذا العمل

*محمد تامة *

الى كل من كانت له يدي في إكمالي لهذا الجهد.قريب كان أو بعيد

قريب كان أو بعيد

الى كل أسرة كليتي *كلية العلوم الدقيقة * مع تمنياتي

لهم دوام التطور و النجاح.

حنان

شكر وعرفان

أشكر الله العلي العظيم وبه أستعين

فما التوفيق إلا من الله

فله الحمد حتى يرضى وله الحمد بعد الرضا

والصلاة والسلام على نبي الرحمة محمد وعلى آله وصحبه أجمعين.

أتقدم بالشكر الجزيل والعرفان الجميل إلى الأستاذ الفاضل **بسر الزوبير** على مساعدته العلمية ولما قدمه لنا من متابعة ونصح وتوجيه طيلة عملنا على هذه المذكرة ونسأل الله له دوام الصحة والعافية.وأن يحفظه في خدمة العلم.

كما أتقدم بالشكر الجزيل إلى لجنة المناقشة **ليتيم فتحي** و **احميم رشيد** لقبولهم مناقشة هذه المذكرة

كما أتقدم بشكري الخاص إلى الأستاذ المحترم **احميم رشيد** لتقديمه يد العون والمساعدة في متابعة مشواري في هذا العمل وإلى كل من دعمني ودعا لي

فهرس المحتويات

إهداء ..... *II*
شكر وعرفان ..... *III*
فهرس المحتويلت ..... *IV*
قائمة الأشكال ..... *VI*
قائمة الجداول ..... *VII*
قائمة الرموز ..... *VIII*
قائمة المصطلحات العلمية ..... *IX*

المقدمة العامة **01**

الفصل الأول :الإنتقالات الطورية

1-1-الانتقال من سائل إلى غاز **04**
1-2-الانتقال الفيرومغناطيسي –بار مغناطيسي- **05**
1-3-ترتيب الانتقال الطوري **07**
1-4-وسيط الترتيب **09**
1-4-1-انكسار التناضر **09**
1-4-2-طول الارتباط **09**
1 -5-الاسس الحرجة **10**
1-6-العالمية **11**

الفصل الثاني :المجموعة القانونية والمجموعة القانونية الصغرى

2-1-المجموعة القانونية الصغرى **13**
2-2-المجموعة القانونية **13**
2-3-دالة التوزيع **15**
2-4-العلاقة بين Z والدوال الترموديناميكية **16**
2-4-1-الطاقة الداخلية **16**
2-4-2- الضغط **18**
2-4-3-الانتروبي **19**
2 -4-4- الطاقة الحرة **20**
2-4-5-السعة الحرارية **20**
2-4-6-المغنطة **20**
2-5-دالة التوزيع الكلاسيكية **21**
2-6-تطبيقات المجموعة القانونية **22**

2-6-1-البارامغناطيسية **22**
الفصل الثالث : الأسس الحرجة في نموذج ايزينغ بطريقة محاكات مونتي كارلو

3-1 نموذج ايزينغ وميكانيكا الاحصاء..... 25
3-2- طريقة محاكات مونت كارلو و خوارزمية ميتروبولس..... 27
3-3- نموذج ايزينغ وتحولات الطور من الرتبة الثانية..... 28
3-4 - الاسس الحرجة وسلوك الابعاد المنتهية في نموذج..... 36
3-4-1- الاسس الحرجة والعالمية..... 37
3-4-2- سلوك الابعاد المنتهية..... **38**
الخلاصة العامة..... **44**
قائمة المراجع..... **45**

قائمة الأشكال

ترتيب الشكل	عنوان الشكل	رقم الصفحة
الشكل (1 – 1)	المنحنى الطوري للماء	**04**
الشكل (1 – 2)	مخطط توضيحي لوسيط الترتيب	**05**
الشكل (1 – 3)	ضاهرة التلاكؤ	**06**
الشكل (1 – 4)	مخطط الإنتقال	**07**
الشكل (3 – 1)	مثال عن شبكة مربعة ابعادها 7x7 يمكن للسبين ان ياخد فيه الا اتجاهين	**26**
الشكل (3 – 2)	المتوسطة بدلالة الزمن لشبكة ابعادها 10x10 سبين عند درجات مختلفة للحرارة.	**30**
الشكل (3 – 3)	: تشكيلات سبينية تم الحصول عليها بخوارزمية ميتروبولس لشبكة ابعادها 10x10 سبين عند ثلاث درجات حرارة مختلفة	**31**
الشكل (3 – 4)	المغنطة بدلالة درجة الحرارة لشبكة مربعة ابعادها 10x10 سبين	**32**
الشكل (3 – 5)	المتوسط الحراري للطاقة بدلالة درجة الحرارة لشبكة مربعة ابعادها 10x10 سبين.	**33**
الشكل (3 – 6)	الحرارة النوعية بدلالة درجة الحرارة لشبكة مربعة ابعادها 10x10 سبين	**34**
الشكل (3 – 7)	السماحية المغناطيسية χ بدلالة درجة الحرارة لشبكة مربعة ابعادها 10x10 سبين	**34**
الشكل (3 – 8)	دالة الترابط لشبكة ابعادها 20x20 سبين عند درجات حرارة مختلفة.	**36**
الشكل (3 – 9)	المغنطة المتوسطة ومربعها بدلالة درجة الحرارة من اجل شبكات بمقاسات مختلفة	**38**
الشكل (3 – 10)	تغيرات المغنطة المتوسطة ومربعها بدلالة T_c-T بسلم لوغارتمي للمحورين	**39**
الشكل (3 – 11)	تقديرا لقيمة الاس β بطريقة $M^{\frac{1}{\beta^*}}$ من اجل $L = 128$	**40**
الشكل (3 – 12)	تقديرا لقيمة الاس β ودرجة الحرارة الحرجة بطريقة $\log M$ من اجل $L = 128$	**40**
الشكل (3 – 13)	المغناطيسية بدلالة درجة الحرارة ولشبكات قي بعدين	**41**

قائمة الجداول

ترتيب الجدول	عنوان الجدول	رقم الصفحة
الجدول(1 – 1)	الأسس الحرجة الأساسية للانتقال الفيرومغناطيسي – البارامغناطيسي	11
الجدول(1 – 2)	الأسس الحرجة للانتقال سائل-غاز	11

قائمة الرموز :

T_C	درجة الحرارة الحرجة
B	حقل مغناطيسي
C_V	السعة الحرارية
E_{TOT}	الطاقة الكلية للنظام
E_{Res}	طاقة الخزان الحراري
E_n	طاقة النظام
E_I	طاقة ايزينغ
F	الطاقة الحرة
N	عدد الجسيمات
K	ثابت بولتزمان
M	المغنطة
Z	دالة التوزيع
S	الأنتروبي
g_n	معامل الإنحلال في المستوي
$\Omega(E)$	العدد الكلي الموافق لحالات النظام ذات الطاقة E.
χ	الحساسية المغناطيسية
ξ	طول الترابط

قائمة المصطلحات العلمية :

العربية	English
النقطة الحرجة	Critical transition
الأسس الحرجة	Critical Exponents
الإنتقال الطوري	Phase transition
وسيط الترتيب	
ظاهرة التلاكؤ	Phenomenon of hysteresis
العالمية	Universality
الفيرومغناطيسية	Ferromagnetic
البارامغناطيسية	Paramagnetic
خوارزمية ميتروبولس	Metropolis Algorithm
تقريب الحقل المتوسط	Mean field approximation
الإيزوترمي	Isotherme
مغنطة تلقائية	Spontaneous magnetization
معاينة موجهة	importance sampling
سلوك الابعاد المنتهية	finite-size scaling
طول الترابط	correlation length
نظرية المجموعة المعاد تنضيمها	renormalization group theory

قائمة المصطلحات العلمية :

English:	**العربية :**
Critical Point	النقطة الحرجة
Critical Exponents	الأسس الحرجة
Phase transition	الإنتقال الطوري
Order parameter	وسيط الترتيب
Phenomenon of hysteresis	ظاهرة التلاكؤ
Universality	العالمية
Ferromagnetic	الفيرومغناطيسية
Paramagnetic	البارامغناطيسية
Metropolis Algorithm	خوارزمية ميتروبولس
Mean field approximation	تقريب الحقل المتوسط
Isotherme	الإيزوترمي
Spontaneous magnetization	مغنطة تلقائية
importance sampling	معاينة موجهة
finite-size scaling	سلوك الابعاد المنتهية
correlation length	طول الترابط

المقدمة العامة

المقدمة العامة

إن الإنتقالات الطورية تعتبر من أهم الظواهر الفيزيائية التي تدرس في إطار الفيزياء الإحصائية [1] ،كما تعد ظاهرة الفيرومغناطيسية أحد أهم هذه الظواهر الفيزيائية كونها نموذجا مثاليا للإنتقالات الطورية من الرتبة الثانية [6].

في الواقع الوصف النظري للإنتقالات الطورية صعب جدا، لذالك القليل من النماذج يمكن معالجتها دون استعمال الحلول العددية [3].إن أحدى هذه النماذج هو ذالك النموذج الذي قدم من طرف العالم لنز سنة 1920 وعمل عليه تلميذه ايزينغ لاحقا سنة 1925، نموذج ايزينغ قدم في الأصل من أجل الإنتقال الطوري الفيرومغناطيسي عند درجة حرارة كوري لكن مع مرور الزمن أصبح بالإمكان تطبيقه على إنتقالات طورية أخرى، بالرغم من أن هذا النموذج يصف الإنتقالات الطورية من الدرجة الثانية لاسيما الإنتقال الفيرومغناطيسي-البارامغناطيسي[3]، لكن في الحقيقة 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 ثلاث أبعاد إلا عن طريق البرمجة العددية [8] أو بعض الإجراءات التقريبية، في حين أنه يمكن الحصول على حلول في حالة بعد واحد الأمر الذي تم من طرف العالم ايزينغ [1,7].

لقد حاول الباحثون في إيجاد حلول لنموذج ايزينغ من أجل شبكات ذات أبعاد عليا [4]، ففي سنة 1936 بين بيرلس أن نموذج ايزينغ يبدي خصائص فيرومغناطيسية عند درجات حرارة منخفضة في أبعاد عليا في حين أن هذه الخصائص تختفي في حالة بعد واحد حتى عند درجات حرارة منخفضة بما فيه الكفاية [3]، لاحقا وبمحاولة من كرامريس و وانير عام 1941 إكتشفا طريقة جيدة لحل نموذج ايزينغ، والتي مكنتهما من التحقق من النتائج الأولى للنموذج في حالة بعدين، ثم بعد ذالك ظهر أونسيغر ليتمكن من إيجاد العبارة الدقيقة لدالة التوزيع في حالة بعدين عند غياب الحقل المغناطيسي وذالك سنة 1944، تعتبر قفزة نوعية لأنه قدم من خلالها حساب دقيق [1,2,16].

ومن خلال هذا العمل سيتم دراسة نموذج ايزينغ بالإضافة إلي ذالك سيتم تقدير الأسس الحرجة وذالك بإستعمال دراسة عددية .

تحتوي هذه المذكرة عل ثلاثة فصول :

- في الفصل الأول سنسلط الدراسة علي الإنتقالات الطورية والتي من خلالها سيتم التطرق إلي بعض المفاهيم الأساسية المرافقة لمثل هذه الظواهر كالأسس الحرجة ووسيط الترتيب وإنكسار التناظر والعالمية و...إلخ .
- أما فيما يخص الفصل الثاني فقد خصصت الدراسة فيه حول المجموعة القانونية والمجموعة القانونية الصغرى مع إعطاء مثال علي ذالك .
- في الفصل الأخير سنرصد احد اهم التصرفات للانظمة متعددة الاجسام التي يعرض فيها التفاعل بين جسيماتها ظاهرة مهمة جدا تعرف باسم التحول الطوري[1]، و سندرس نموذج ايزينغ الذي يستخدم التفاعل بين السبينات الكلاسيكية لوصف التحول الطوري في المواد الممغنطة. لذالك يعد هذا النموذج حجر الزاوية في الفيزياء الاحصائية لمحاكات التحولات الطورية. عموما تتميز مثل هذه التحولات بتحول مفاجئ من طور الى طور عند درجة حرارة معينة تعرف بدرجة الحرارة

الحرجة، عندها يسود الغموض وتتعقد المسألة ، إن تعقيد هذه المسائل وعدم توفر الحلول الرياضية الدقيقة يفرض نهجا احصائيا في المحاكات يعتمد على توليد الاعداد العشوائية لوصف تفاعل مثل هذه الانظمة مع الوسط. يعرف هذا النهج بطريقة مونتي كارلو وسنستخدمه لدراسة نموذج ايزينغ في المغنطة ولتقدير الاسس الحرجة في المغنطة والسماحية المغناطيسية والحرارة النوعية لذالك يعتبر هذا الفصل أساسي في هذه الدراسة و سنقوم بتقدير الأسس الحرج .

الفصل الأول :

الإنتقالات الطورية

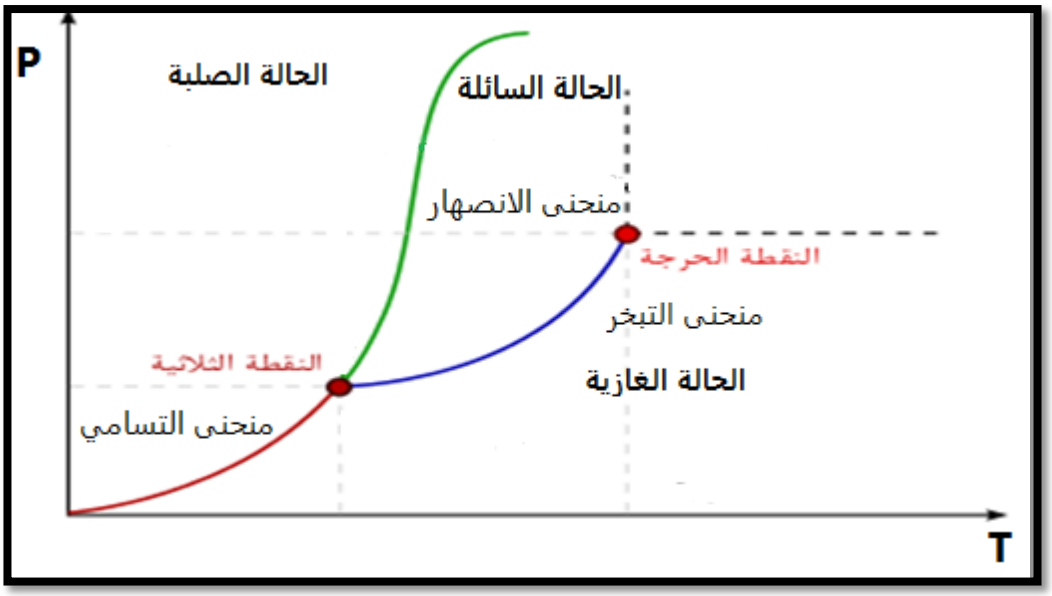
تمهيد :

إن الانتقال من سائل إلى غاز أومن مادة موصلة إلى مادة فائقة التوصيل أو الانتقال من الفيرومغناطيسية إلى البار مغناطيسية هي ظاهرة تعرف بظاهرة الانتقال الطوري وكثيرا ما يتم مواجهتها في دراسة الأنظمة الإحصائية والحياة اليومية ، فهي تؤدي إلى تغيير مفاجئ لبعض خصائص المادة وسنقدم في هذا الفصل بعض المفاهيم الأساسية المرافقة للانتقالات الطورية مثل وسيط الترتيب والأسس الحرجة و العالمية [1,6] .

1-1-الانتقال من سائل إلى غاز :

سنأخذ كمثال أولي الانتقال من سائل الى غاز حيث يظهر الرسم البياني (1 – 1) المنحنى الطوري لمائع نموذجي على سبيل المثال الماء بشكل تخطيطي، حيث يوضح هذا المنحنى في مستوي الضغط ودرجة الحرارة المناطق المرتبطة بالأطوار المختلفة من الصلبة والسائلة والغاز حيث تمثل الخطوط التي تفصل بين الأطوار المختلفة مناطق التعايش وهي كالتالي:

- الخط الأحمر :الذي يفصل الطور الصلب عن الطور الغازي ويسمى بمنحنى التسامي.
- الخط الأخضر :الذي يمثل نقاط التعايش بين الحالة الصلبة والحالة الغازية ويسمى بمنحنى الإنصهار .
- الخط الأزرق :يمثل نقاط التعايش بين الحالة السائلة والحالة الغازية ويسمى بمنحنى التبخر[2] .



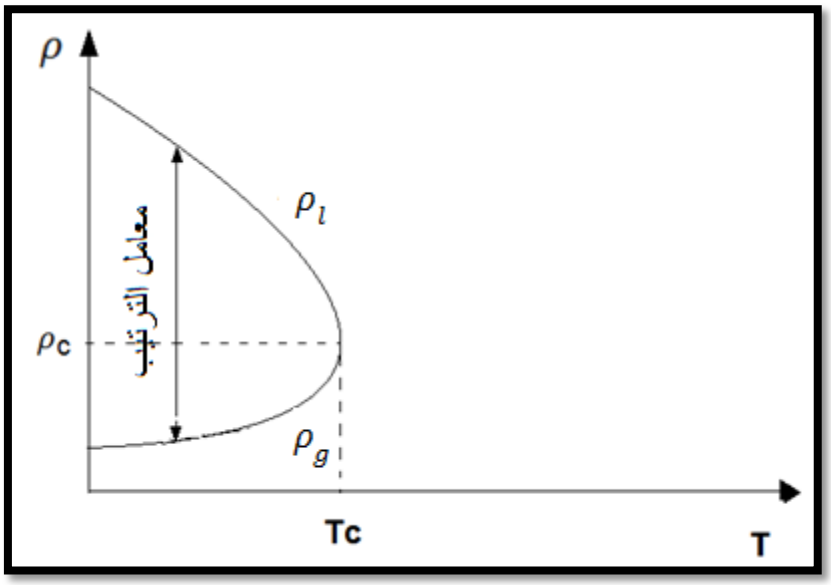
شكل (1 – 1) :المنحنى الطوري للماء

منحنيات التعايش الثلاثة لها نقطة مشتركة، تسمى بالنقطة الثلاثية وهي موافقة للحالة التي تلتقي فيها الأطوار الثلاثة –الصلبة والسائلة والغازية-في نفس الوقت حيث أنها تتميز بضغط ودرجة حرارة معينة من أجل كل مائع فالماء على سبيل المثال النقطة الثلاثية مساوية لـ K273.16 .

من خلال دراسة الشكل(1 – 1)، نلاحظ أنه ينتهي الخط الأزرق عند نقطة تسمى بالنقطة الحرجة، حيث انه عند ارتفاع الضغط ترتفع درجة حرارة الغليان والعكس عندما ينخفض الضغط تنخفض درجة حرارة الغليان أو بتعبير أدق عندما يزداد ضغط الغاز تكون جزيئات المادة اقرب إلى بعضها البعض، وهكذا تزداد كثافة الغاز مع الضغط،وعند تسخين السائل فان الكثافة تنخفض حيث تؤدي إلي حركة سريعة للجزيئات بحيث تستهلك مساحة اكبر ، بعد هذه النقطة يمكن المرور بشكل مستمر من الحالة السائلة إلي الحالة الغازية والعكس بالعكس ،بتعبير آخر لم يعد هناك أي تمييز بين السائل والغاز حيث تختلف كثافة السائل وسعة الغاز[2,6,7].

عند كل نقطة من نقاط هذا الخط تكون كثافة السائل مختلفة عن كثافة الغاز ماعدا النقطة الحرجة ،حيث في هذه النقطة تكون لهما نفس الكثافة[1,6] .

إذا تم رسم كثافة السائل والغاز على طول الخط الأزرق بدلالة درجة الحرارة فانه يتم الحصول على الدورة المبينة في الشكل(1 – 2)،حيث يلاحظ أن كثافة السائل ρ_Lتختلف عن كثافة الغاز ρ_g.حيث يقل هذا الاختلاف بزيادة درجة الحرارة ويختفي عند النقطة الحرجة [1,16].



شكل(1 – 2) :مخطط توضيحي لوسيط الترتيب

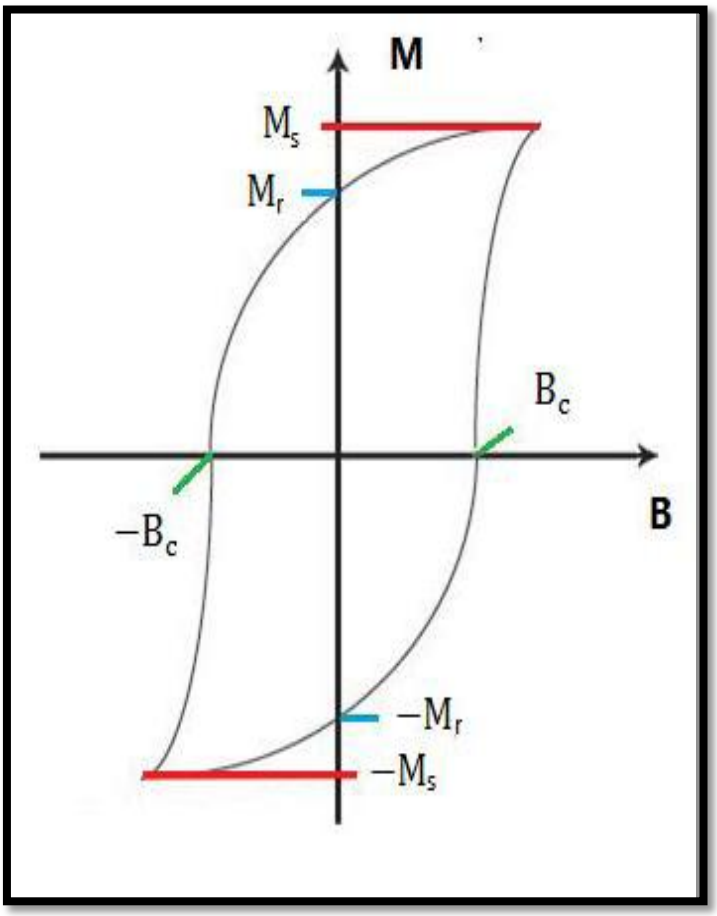
1-2-الانتقال الفيرومغناطيسي –بار مغناطيسي :

هناك مثال معروف جيدا للانتقال الطوري يلاحظ في المواد المغناطيسية. إن مثل هذه المواد لها مغنطة دائمة حتى في غياب الحقل المغناطيسي الخارجي .وهي تشكل على سبيل المثال المغانط التي يمكن العثور عليها في العديد من الأجهزة بما في ذلك البوصلات ، تم ملاحظة الفيرومغناطيسية لبعض المعادن الإنتقالية، مثل الحديد و الكوبالت أو النيكل ترتبط بسلوك تعاوني لسبين الذرات وهذا يعني أن عددا كبيرا من الإلكترونات في الطبقة غير الكاملة يتحاذى دورانها في نفس الاتجاه وقد وجد بشكل تجريبي أنه إدا تم تسخين مادة حديدية فيرمغناطيسية فوق درجة حرارة معينة ، تسمى درجة حرارة كوري تختفي الخاصية المغناطيسية متحولة للمجال البار مغناطيسي ويرجع ذلك إلى أن التفاعل الذي يميل إلى محاذاة السبينات لم يعد قادرا على مقاومة التحريض الحراري الذي يميل إلى السبينات اتجاها عشوائيا.

في الواقع تعد الفيرومغناطيسية، عملية معقدة للغاية حيث تظهر المواد المغناطيسية بما يسمى بظاهرة التلاكؤ التي يمكن تلخيصها على النحو التالي الشكل(1 – 3)

يتم الانطلاق من مادة مغناطيسية مغنطتها معدومة وعندما يتم تطبيق حقل مغناطيسي خارجي ذو اتجاه ثابت تزداد مغنطة هذه المادة حتى تصل إلى قيمة حدية M_S تسمى بمغنطة التشبع . الآن إذا خفضنا الحقل المغناطيسي B فإن المغنطة تقل ولا تنعدم حتى عند انعدام الحقل الخارجي حيث تأخذ قيمة M_rالتي تشير الى المغنطة المتبقية ، لالغاء المغنطة نحتاج الى تطبيق حقل مغناطيسي خارجي B_C–موجه في الاتجاه المعاكس يدعى بالحقل القسري [2].

إذا قمنا بتخفيض Bالحقل المغناطيسي بدرجة كبيرة فإننا نصل إلى مغنطة التشبع $-M_S$ وإذا زادت قيمة الحقل B فان المغنطة تكون $-M_r$عند B=0وتختفي عند B = B_C وهذا قبل الوصول لقيمة التشبع M_S من اجل القيم الكبيرة ل B من خلال تأرجح الحقل المغناطيسي B فان المغنطة تصف دورة .تسمى بدورة التلاكؤ هذا يعني أن المغنطة لا تعتمد فقط على قيمة الحقل المطبق ولكن أيضا على تاريخ العينة [1]



الشكل (1 – 3) :ضاهرة التلاكؤ

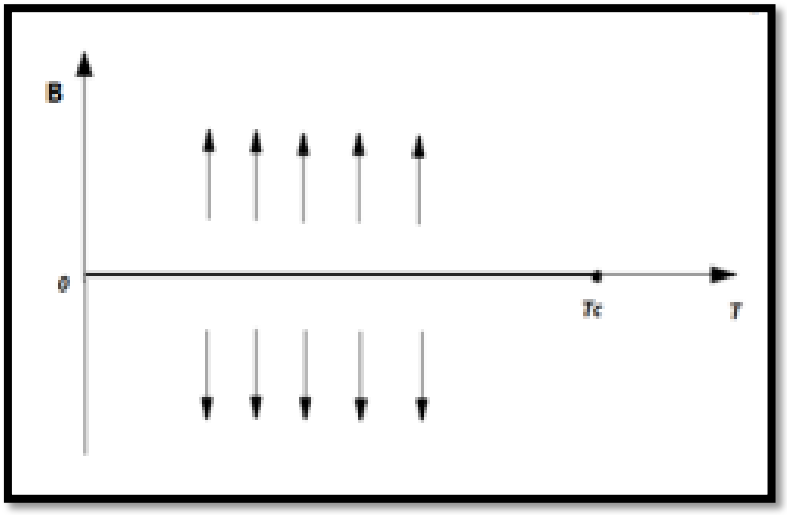
لشرح ظاهرة التلاكؤ قام العالم فايس سنة 1910 بافتراض أن المادة الفيرومغناطيسية تتكون من مجالات صغيرة على المستوى العياني لكنها كبيرة على المستوى المجهري ، تملك مغنطة تلقائية .وقد تم التأكد من هذه الفرضية تجريبيا عندما سمحت وسائل المراقبة بذالك .إذا تم تطبيق حقل مغناطيسي على عينة عند درجة حرارة اقل من كوري ، فان مجالات فايس تصل الى مغنطة التشبع . ان جميع العزوم

فيرومغناطيسية تحت درجة حرارة اقل من درجة حرارة كوري فان المجالات تصل مغنطتها الى حد التشبع، أي ان كل العزوم المغناطسية الجزئية للمجال تتوجه في اتجاه واحد ،في حين انه على المستوى العياني المغنطة بعيدة كل البعد عن الوصول الى قيمة التشبع وهذا لان العزوم المغناطيسية لمجالات فايس ليست موجهة في نفس الاتجاه لكن بتطبيق حقل مغناطيسي ذو شدة عالية يلاحظ زيادة تدريجية في المغنطة العيانية والتي لها اصلان مستقلان [5,2] :

اذا كان الحقل المغناطيسي ضعيف فان حجم مجالات فايس التي تتوجه في اتجاه الحقل المغناطيسي يزداد على حساب تلك التي تتوجه في الاتجاه الاقل تفضيلا.

أما إذا كان الحقل مغناطيسي ذو شدة عالية جدا فانه سيقوم بتدوير مجالات فايس آخذة الاتجاه الأكثر تفضيلا[4].

مخطط الانتقال الطوري لمادة فيرومغناطيسة نموذجية هو أبسط منه لمانع ،لذا سنعطي مخطط توضيحي كما يوضح الشكل (1 – 4) [2].



الشكل (1 – 4) :مخطط الإنتقال

1-3-ترتيب الانتقال الطوري :

توجد العديد من التصنيفات للانتقالات الطورية ، والتي بدورها تؤدي إلى نفس الترتيب في معظم الحالات ولكن توجد بعض الاختلافات عندما يكون هناك تغير في الطور، يتكون النظام في المرحلة الانتقالية من نظامين فرعين متجانسين –يطلق عليهما أطوار – لهما خصائص فيزيائية مميزة ويفصل بينهما سطح محدد ولتوضيح هذه النقطة يكفي أن نفكر في ظاهرة تبخير الماء حيث تثار قطرات من البخار داخل السائل في الغليان يمكن رؤية التغير المستمر في بعض الوسائط الشدية للنظام درجة الحرارة على سبيل المثال من مرحلة إلى أخرى نقول أن هناك مرحلة انتقال و الشيئ الذي يثير الاهتمام ويلفت النظر انه في المنطقة

المجاورة للانتقال هناك اختلاف بسيط في الوسائط العيانية يكفي لمراقبة التغيرات المهمة في حالة النظام.[9,2,1]

يمكننا التمييز بين نوعين من الانتقالات الطورية :

- ✓ النوع الأول :هناك توازن بين الطورين قي نقطة الانتقال هذه هي حالة انتقال الغاز السائل أو ذوبان جليد على سبيل المثال .
- ✓ النوع الثاني : يتم الانتقال من طور إلي آخر ولكن لا يتوازنا مع بعضهم البعض وكمثال على هذا النوع يتوافق مع الانتقال الفيرومغناطيسي–البارامغناطيسي أو الانتقال من موصل إلي شبه موصل .
- ✓ في النوع الأول من الانتقالات الطورية يكون هناك انقطاع للأنتروبي أي انه يحتاج إلي كمية من الحرارة .
- ✓ أما في النوع الثاني لا يحتاج إلي كمية من الحرارة ولكن غالبا ما يكون هناك شذوذ في السعة الحرارية للنظام عند التحول [1,6,8] .
- ❖ اقترح العالم إيرنفست التصنيف التالي :

الانتقالات الطورية من الدرجة الأولى هي تلك التي توجد بها انقطاع واحد على الأقل من المشتقات الأولى للدوال الترموديناميكية التي تصف النظام الطاقة الحرة أو الإنتالبي الحر .

إذا كانت المشتقة معنية بالأنتروبي فان : $\left(S = \left(\frac{\partial F}{\partial T}\right)_{V,N}\right)$

أما الانتقالات الطورية من الدرجة الثانية فهي تبدي عدم استمرارية في الكميات الفيزيائية المتعلقة بالمشتقات الثانية للطاقة الحرة في حين أن المشتقات الأولى مستمرة [1].

وفي عام 1937 اقترح العالم لاندو تصنيف آخر للانتقالات الطورية التي وصفناها بأنها مستمرة، ويستند في الحقيقة إلى أن هذا النوع من الانتقال مصحوب بتغير في تناظر النظام هذه هي الحالة على سبيل المثال الانتقالات المغناطيسية (الفيرو مغناطيسية –البارامغناطيسية) لأن النظام الفيرومغناطيسي لديه اتجاه مميز في الفضاء (مغنطة النظام)بينما الانتقال البارمغناطيسي متماثل المناحي .هذا ما أدى لاندو إلى اقتراح فكرة وسيط الترتيب الذي تكون قيمته معدومة في المرحلة الأكثر تناضرا عند درجة الحرارة عالية ويختلف عن الصفر في الطور الآخر بشكل عام المرحلة الأكثر تناضرا تكون عند درجة حرارة عالية .هناك انتقالات تحدث دون تغير التناضر وبالتالي لا يمكن تعريف وسيط الرتيب حسب مفهوم لاندو وكمثال على ذلك الانتقال سائل –غاز لان السائل والغاز لهما نفس نوع التناضر أي هما متماثلا المناحي مع ذلك فحتى هذه الأنظمة يعرف لها وسيط ترتيب يتقدم عند درجات الحرارة العالية أي عند الطور الغازي .

إن وسيط الترتيب بالنسبة إلي انتقال سائل –غاز هو الفرق بين الكثافتين $\rho_l - \rho_g$ وهو يختلف عن الصفر في جميع نقاط الخط الأزرق. ماعدا النقطة الحرجة C $(P_C = 217atm\,, T_C = 647K)$حيث تصبح خالية من الترتيب أي اقتراح لاندو الانتقال الطوري من الرتبة الأولى يؤدي إلي قفزة في وسيط الترتيب عدم الاستمرارية في حين أن الانتقالات ذات الرتب الأعلى أيضا مستمرة الموافقة إلى حالات عدم استمرارية انقطاع مشتق الدوال الترموديناميكية في هذه الأخيرة يكون الانتقال من الرتبة الثانية إذا كان المشتق غير متقطع .

ويشير هنا إلي أن هذه الانتقالات الطورية على أنها انتقالات مستمرة أو ظواهر حرجة [1,3]

ففي الأنظمة التي يوجد فيها انتقال طوري يكون فيه تنافس في الدوال الترموديناميكية التي تميزها كالطاقة الداخلية التي تميل إلي الترتيب والانتروبي الذي يفضل عكس ذالك [6,1]

1-4-وسيط الترتيب[2]:

لقد رأينا أنه أغلب الأحيان يمكن إدخال وسيط ترتيب في دراسة الإنتقالات الطورية، وهي خاصية مميزة للنظام المدروس والذي يسمح بتحديد ترتيب الإنتقال الطوري. إذا كان وسيط الترتيب غير معدوم فإنه غالبا ما يكون دليل على تكسر تناظر النظام [2].

عموما لا يكون تعريف وسيط الترتيب واضحا دوما ، بحيث أنه لا يمكن تعريفه أصلا في بعض الأنظمة.

هذا الأخير سنرمز له بالرمز m إذا لم نتحدث عن إنتقال طوري معين [1.7] .

في الحقيقة لا يوجد طريقة عامة لتحديد وسيط ترتيب النظام، لذلك يتم تحديده لكل حالة على حدا، فيأخذ إذا أشكالا مختلفة حيث يمكن أن يكون عدد سلميا أو شعاعا أو كائن رياضي معقد. يمثل وسيط الترتيب سمة مميزة في الإنتقال الطوري[6,9].

سنوضح هذا في الأمثلة الموالية :

- بالنسبة للإنتقال سائل –غاز فإن وسيط الترتيب هو الفرق بين كثافتي السائل والغاز $\rho_l - \rho_g$. الذي يعرف في هذه الحالة بعدد سلمي [7,1].
- بالنسبة للإنتقال الفيرومغناطيسي –البارا مغناطيسي وسيط الترتيب في هذه الحالة هو المغنطة M وهو يختلف عن الصفر تحت درجة حرارة كوري ومعدوم فوقها ، إن وسيط الترتيب لهذا النظام هو شعاع [4].

1-4-1-انكسار التناضر:

الطبيعة دائما لا تفضل الترتيب الأكثر إنتظاماعلى عكس التوقعات المادية ، عقد أرسطو أن مدارات الكواكب يجب أن تكون دوائر، وفي الوقت الحاضر أنها ليست كذلك.فان المسالة عند درجات الحرارة المخفضة تدخل في مرحلة لا تمتلك تناضر جوهريا للنظام تتموضع الذرات في شبكة بلورية مما يكسر أو ينتهك التغاير تحت المعيار العام الانتقالي لتدحرج الذرات في مادة فيرومغناطيسية عل طول موجة محددة منتهكة الثبات الدوارني وعندما يكون هانتونيين ثابت في ظل عملية تناظر "مكسور من تلقاء نفسه"هي عملية تناضر معينة [2]

انكسار التناضر	وسيط الترتيب	النظام
اللاتغاير تحت الدوران	مغنطة	فيرومغناطيسية
اللاتغاير تحت الدوران	ترنح المغنطة	ضد المغناطيسية
تماثل الفضاء	فرق الكثافة	تعايش سائل –غاز
اللاتغاير تحت المعيار العام	دالة موجة المكثفات	مائع فائق

1 -5-الاسس الحرجة [1] :

تتميز النقطة الحرجة باختلاف بعض الكميات الفيزيائية على سبيل المثال درجة الحرارة المحددة أو الحساسية المغناطيسية ، من المهم دراسة شكل هذه الاختلافات و هذه هي ميزات أساسية للنظام سنقدم متغير يمثل الانحراف النسبي للحرارة :

إن الفائدة من تعريف t بهذه الطريقة هي جعل النقاط الحرجة متكافئة، جميع الأنظمة لديها نفس درجة الحرارة المختزلة t=0

الأس الحرج الموافق لكل كمية فيزيائية $F(t)$ يعطي :

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

تصرف $F(t)$ في جوار النقطة الحرجة على بشكل $F(t)\sim|t|^{\lambda}$

هذا يعني أن $F(t)$ تتغير ك t لما $T\to 0$ لذا سنعطي الأسس الحرجة الأساسية للإنتقال الفيرومغناطيسي البار مغناطيسي و المبين في الجدول (1 – 1)

الجدول(1 – 1): الأسس الحرجة الأساسية للانتقال الفيرومغناطيسي -البارامغناطيسي [1].

السعة الحرارية (من اجل B=0)	$C_B \sim \lvert t\rvert^{-\alpha}$
المغنطة (من اجل B=0)	$M \sim(-t)^{\beta *}$
الحساسية الإيزومترية(B=0)	$\chi_T \sim \lvert t\rvert^{-\gamma}$
الازومترية الحرجة(t=0،B→ 0)	$B \sim \lvert M\rvert^{\delta}\,\mathrm{sgn}M$
طول الارتباط	
دالة الارتباط لجسمين عند(t=0)	$G(\mathbf{r}) \sim 1/r^{d-2+\eta}$

بنفس الطريقة تعطى الأسس الحرجة المرافقة للانتقال سائل غاز المبينة في الجدول (1 – 2)

الجدول(1 – 2) : الأسس الحرجة للانتقال سائل-غاز[1].

السعة الحرارية عند حجم ثابت	$Cv \sim \|t\|^{-\alpha}$
الفرق بين كثافتي السائل والغاز	
الانضغاط الايزوترمي	$KT \sim \|t\|^{-\gamma}$
إيزوترمية الحرجة	$p\text{-}\rho_c \sim \|\rho_l - \rho_g\|^{\delta} sgn(\rho_l - \rho_g)$
طول الارتباط	$\xi \sim \|t\|^{-\nu}$
دالة ارتباط جسمين	$G(\mathbf{r}) \sim 1/r^{d-2+\eta}$

ملاحظة :

من المهم الإشارة إلى أن الأسس الحرجة الموافقة لمقدار ترموديناميكي عند اخذ النهاية $t \to 0^+$ من اجل $T > T_C$ هو نفسه عند اخذ النهاية $t \to 0^-$ من اجل $T < T_C$.

6-1 -العالمية :

إن أهمية الأسس الحرجة تكمن في عدم تعلقها إلا بالخصائص العامة للنظام ولا تتعلق بتفاصيل التفاعلات وكذلك للأنظمة التي تملك تفاعلات قصيرة المدى كالسوائل أو المواد الفيرومغناطيسية[1].

إن الأسس الحرجة لا تتعلق إلا بالأبعاد المكانية للنظام وكذا بعد وسيط الترتيب ،وبالتالي فهي كميات جيدة لوصف نظام ما في جوار النقطة الحرجة وكذلك إختبار صلاحية النماذج.

إذا يمكن القول أنها تخضع إلى قوانين عالمية لأنها تسمح بتعريف أصناف للإنتقالات الطورية التي تبدو للوهلة الأولى مختلفة. وتستخدم كميتان لتحديد سلوك النظام بالقرب من النقطة الحرجة وهما : البعد المكاني و بعد وسيط الترتيب n قد يكون من الصعب تحديد هذا الأخير لأسباب تجريبية ونظرية على حد سواء ،الزوج(d,n) يحدد فئة عالمية. جميع الأنظمة التي تنتمي إلى نفس الفئة لها سلوك وحيد وأسس حرجة متماثلة على سبيل المثال من أجل n=1 d=3 يحد يكون لدينا الانتقال الطوري سائل -غاز[4,7].

اذا عدنا الى الانتقال الطوري غاز- سائل من المعلوم ان درجة الحرارة الحرجة تعتمد على السائل المعتبر والتفاعلات بين الذرات في حين أنه برسم منحنى التعايش للموائع عند النقطة الحرجة (من اجل كل درجة حرارة T قيمة الكثافةρ لكل طورا في مخطط ρ/ρ_c مقابل ل T/T_C نلاحظ ما يسمى با لمنحنى العالمي الذي يتم عليه وضع كل النقاط التجريبية الموافقة للعديد من الموائع المختلفة .

الأسس الحرجة المرفقة بالوسيط $\rho_l - \rho_g$ تتغير ك $(-t)^{\beta*}$ عند النقطة الحرجة حيث $\beta* = \frac{1}{3}$. يمكن تجريبيا ملاحظة أن قانون العالمية هذا غير محقق فقط في المنطقة المجاورة للنقطة الحرجة و لكن يتحقق 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 :

سعة الحرارية: C_V

الفرق بين الكثافتين: $\rho_l - \rho_g$

الانضغاط الإيزوتريمي : K_T

تتغير على الترتيب ك $|t|^{-\alpha}$ و$|-t|^{\beta^*}$ و$|t|^{-\gamma}$ في جوار النقطة الحرجة [1].

إن من مميزات الأسس الحرجة الثلاثة أنها مرتبطة ببعضها البعض ويمكن إثبات ذالك من خلال العلاقة التالية: $\alpha + 2\beta^* + \gamma = 2$, وهذا ما يسمى بالقانون السلمي .في حين أن الترموديناميك الكلاسيكي لا يؤدي إلا إلى المتراجحة $\alpha + 2\beta^* + \gamma \leq 2$ لكن في الحقيقة هذه المتراجحة تمثل أو تعتبر المساواة في حد ذاتها [5,4] .

الفصل الثاني :

المجموعة القانونية والمجموعة القانونية الصغرى

تمهيد :

الهدف الأساسي لعلم الترموديناميك هو دراسة الأنظمة الفيزيائية في حالة الإتزان الحراري وكيفية الوصول إليه وكذلك انتقال الأنظمة من حالة إلى أخرى و انتقالها من طور إلى آخر، ومعرفة الشروط و القيود التي تحكم هذه التحولات[3]

نستعمل المجموعة القانونية الصغرى من اجل دراسة نظام معزول ،وذالك من اجل وصف خصائصه الترموديناميكية ،لكن في الحقيقة بما أن الدراسة تتم في الإطار الذي تكون فيه الطاقة غير ثابتة، لذلك لابد من اللجوء لطريقة أخرى لوصف هده الخصائص .ان الدراسة لمثل هذا النظام تكون في إطار ما يسمى بالمجموعة القانونية.

سنقوم في هذا الفصل بدراسة المجموعة القانونية وسنتطرق أيضا إلى دالة التوزيع وعلاقتها بالدوال الترموديناميكية .

2-1-المجموعة القانونية الصغرى:

ليكن لدينا نظام فيزيائي مكون من N جسم محصور داخل حيز حجمه V وطاقته الكلية E عموما بتقريب

$\Delta E \ll E$.هذه الحالة الماكروسكوبية يوافقها عموما Ω حالة ميكروسكوبية وبحسب مسلمة تساوي الاحتمالات فإن النظام يمكنه أن يتواجد في أي حالة من هذه الحالات وبنفس الاحتمال $\frac{1}{\Omega}$،لدراسة هذا النظام وبدلا أن نتصور النظام ينتقل من حالة ميكروسكوبية إلى أخرى عبر الزمن يمكن أن نتصور أن لدينا Ω نسخة من النظام كل واحد منها تتواجد على حالة ميكروسكوبية مختلفة وفي نفس الحالة الماكروسكوبية هذه الأنظمة تشكل مجموعة تعرف بالمجموعة القانونية الصغرى الدراسة الترموديناميكية الإحصائية لهذه المجموعة تعتمد أساسا على حساب Ω من خلال معرفة N,V,E وعليه

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

K : ثابت بولتزمان

Ω (E): عدد الحالات الموافقة للنظام.

هذه الطريقة ملائمة عندما نتعامل مع درجات حرية متقطعة حيث إن حساب $\Omega(E)$ مسالة تركيبات مزج كما في كثير من الأمثلة المجموعة القانونية الصغرى لا يمكن استعمالها بسهولة لذالك سنحاول التطرق إلي المجموعة القانونية وهي الأكثر ملائمة [2].

2-2-المجموعة القانونية:

رأينا فيما سبق أن حساب عدد الحالات الميكروسكوبية الموافقة لحالة ماكروسكوبية معرفة بإعطاء V,N,E، حيث يمكننا استخلاص الخصائص الترموديناميكية للمادة ولكن في الواقع هناك إشكاليتان مع هذه الطريقة إشكالية تقنية رياضية وإشكالية عملية فيزيائية ،من الناحية التقنية وإذا استثنينا عدد محدود جدا من الحالات الخاصة فإن عملية حساب Ω مسألة رياضية معقدة جدا بل مستحيلة،من الناحية العملية الفيزيائية الطاقة الكلية للنظام ليس كمية سهلة القياس تجريبيا ولهذا فإن مسألة الاعتماد عليها كأحد متغيرات المسألة غير عملية

وبناءا عليه يصبح من الضروري البحث عن طريقة مناسبة نتجنب فيها الإشكاليتين المشار إليها وتتضمن الحل لهذه المشكل الذي يتمثل في استبدال الطاقة بدرجة الحرارة فهذه الأخيرة سهلة القياس ،كما يجب أن لا نضيف مسلمات جديدة ومن هنا تكون الانطلاقة اعتمادا على المجموعة القانونية الصغرى[1,2]. لنتصور نظام في اتصال حراري مع خزان حراري درجة حرارته T .

وفي حالة الإتزان الحراري و بإعتبار أن (الخزان +النظام) معزولين أي أن النظام لا يتبادل الحرارة إلا مع الخزان[5]. إن الطاقة الكلية يمكن كتابها على الشكل التالي:

$$E_{TOT} = E_{Res} + E_n \quad (2.2)$$

حيث E_{TOT}: الطاقة الكلية .

E_{Res} : طاقة الخزان الحراري.

E_n : طاقة النظام.

ليكن Ω_{TOT}عدد الحالات الميكروسكوبية الكلي (نظام+خزان)، بالتالي فإذا كانت طاقة النظام هي En فإن طاقة الخزان الحراري هي $E_{TOT} - En$ وعليه فإن احتمال تواجد النظام بهذه الطاقة هو :

$$P_n = \frac{\Omega_{Res}\,(E_{TOT} - E_n)}{\Omega_{TOT}} \quad (3.2)$$

Ω_{Res} :هي عدد الحالات الميكروسكوبية للخزان والتي لها طاقة E_{Res} .

لتكن E الطاقة المتوسطة للنظام،حيث :

$$< E >= \Sigma EnPn \quad (4.2)$$

بإضافة وطرح الحد E يمكن كتابة عبارة P_n كما توضح العلاقة التالية :

$$P_n = \frac{\Omega_{Res}\,(E_{TOT} - E + E - En)}{\Omega_{Res}} = \frac{\exp(\ln \Omega_{Res})}{\exp(\ln \Omega_{TOT})} \quad (5.2)$$

بما أن الخزان أكبر بكثير من النظام $E \ll E_{Res}$ فإن $E_{TOT} - E \gg E - E_n$ وعليهالمساهمة الفعلية تأتي من الطاقة المتوسطة، و بالتالي سنقوم بالنشر ونحصل على المعادلة التالية :

$$\ln \Omega_{Res}\,(\langle E\rangle_{Res} + E - E_n) =$$

$$= \ln \Omega_{Res}\,(\langle E\rangle_{Res}) + \frac{\partial \ln \Omega_{Res}\,(\langle E\rangle_{Res})}{\partial E_{Res}}\Big|_{\langle E\rangle_{Res}}^{(E-E_n)} + \cdots \quad (6.2)$$

لدينا $S = K \ln \Omega_{Res}$ و منه :

$$\ln \Omega_{Res}\,(\langle E\rangle_{Res} + E - E_n) = \frac{S_{Res}}{K} + \frac{1}{K}\frac{\partial S}{\partial E_{Res}}\Big|_{\langle E\rangle_{Res}} (E - E_n) \quad (7.2)$$

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

.ومنه تصبح المعادلة كالتالي :

$$\ln \Omega_{Res} \left(\langle E \rangle_{Res} + E - E_n\right) = \frac{S_{Res}}{K} + \frac{1}{KT}(E - E_n) \qquad (8.2)$$

$$P_n = \frac{\exp \frac{S_{Res}}{K} + \frac{1(E-E_n)}{KT}}{exp \frac{S_{TOT}}{K}} \qquad (9.2)$$

$$P_n = e^{\left[\frac{1}{K}(S_{Res} - S_{TOT}) + \frac{E}{KT}\right]} \times e^{-\frac{E_n}{KT}} = e^{-\frac{T(S_{Res} - S_{TOT}) + E}{KT}} e^{-\frac{E_n}{KT}} \qquad (10.2)$$

لدينا الطاقة الحرة F تساوي F=E−ST و $B=\frac{1}{KT}$ ومنه :

$$P_n = e^{\frac{1}{KT}[E-ST]} e^{-\beta E_n} \qquad (11.2)$$

$$= e^{\frac{F}{KT}} e^{-\beta E_n} \qquad (12.2)$$

احتمال الحصول على طاقة النظام E_n هي :

$$\sum_n P_n = 1 \qquad (13.2)$$

بعد التعويض تصبح المعادلة كالتالي :

$$\sum_n e^{\frac{F}{KT}} e^{-\beta E_n} = 1 \qquad (14.2)$$

$$e^{\frac{F}{KT}} \sum_n e^{-\beta E_n} = 1 \qquad (15.2)$$

$$\sum_n e^{-\beta E_n} = e^{-\frac{F}{KT}} \qquad (16.2)$$

في الفيزياء الإحصائية يسمي المقدار $\sum_n e^{-\beta E_n}$ بدالة التوزيع Zونكتب :

$$Z = \sum_n e^{-\beta E_n} \qquad (17.2)$$

2-3-دالة التوزيع :

حالة طيف متقطع تعطي دالة التوزيع بالشكل :

$$Z = \sum_n e^{-\beta E_n} \qquad (18.2)$$

رأينا سابقا بشكل عام انه اذا كان النظام تحت درجة حرارة فان احتمال أن يكون في حالة بطاقة E_n يعطي بالشكل:

$$P_n = \frac{e^{-\beta E_n}}{Z} \qquad (19.2)$$

أما في حالة ما اذا كان طيف مستويات الطاقة مستمرا او قريبة جدا من بعضها فيمكن كتابة Z على الشكل :

$$Z = \sum_n g_n e^{-\beta E_n} \qquad (20.2)$$

حيث g_n: انحلال المستوي

ويمكن كتابة Zعلي الشكل :

$$Z = \int W(E) e^{-\beta E_n} dE \qquad (21.2)$$

حيث (E) :هي كثافة حالات الطاقة E

$W(E)dE$:تمثل عدد الحالات الصغرى التي تكون طاقتها بين E و E+dE و

مهما كان طيف مستويات الطاقة في النظام من المهم أن نتذكر أن وظيفة دالة التوزيع يتم الحصول عليها عن طريق مجموع $e^{-\beta E_n}$ على كل الحالات الممكنة للنظام[8].

2-4-العلاقة بين Zوالدوال الترموديناميكية :

تعتمد دالة التوزيع على المستويات وعدد الجسيمات N وأيضا على الحجم V أي Z=Z(T, V,N).

سنرى انه بتعريف دالة التوزيع للنظام يمكن من خلالها حساب الكميات الترموديناميكية[7].

2-4-1-الطاقة الداخلية :

سنعمل هنا بإعتبار أن الحجم V وعدد الجسيمات N ثابتين.

$P(E_n)$ احتمال ان يكون في طاقة E_n هو :

$$P(E_n) = \frac{g_n e^{-\beta E_n}}{Z} \qquad (22.2)$$

اذن الطاقة المتوسطة تكتب :

$$U=\langle E\rangle=\sum_n E_n P(E_n) = \frac{1}{Z}\sum_n E_n e^{-\beta E_n} \quad (23.2)$$

$$\langle E\rangle = -\frac{1}{Z}\sum_n(-E_n)e^{-\beta E_n} \quad (24.2)$$

$$\langle E\rangle = -\frac{1}{Z}\sum_n \frac{\partial}{\partial\beta} e^{-\beta E_n} \quad (25.2)$$

$$\langle E\rangle = -\frac{1}{Z}\sum_n \frac{\partial}{\partial\beta} e^{-\beta E_n} \quad (26.2)$$

حيث :

$$Z=\sum_n e^{-\beta E_n} \quad (27.2)$$

$$\langle E\rangle = -\frac{1}{Z}\left(\frac{\partial Z}{\partial\beta}\right)_{V,N} \quad (28.2)$$

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

بتعويض $\frac{\partial}{\partial T} = -\frac{1}{KT}\frac{\partial}{\partial\beta}$ $\frac{\partial}{\partial\beta} = KT^2\frac{\partial}{\partial T}$, $\beta = \frac{1}{KT}$.

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

لقد رأينا في بداية الفصل أن المجموعة القانونية تجعل من الممكن وصف النظام في حالة توازن مع خزان حراري درجة حرارته T. بحيث اذا كانت تأرجحات الطاقة E حول القيمة المتوسطة للطاقة للطاقة $\langle E\rangle$ مهملة فانه يمكن تعويض المجموعة القانونية الصغرى بالقانونية للتحقق من هذا سنقوم بحساب الانحراف المعياري (ΔE)المرافق ل E

التغيير $(\Delta E)^2$يعرف ب $(\Delta E)^2 = \langle E^2\rangle - \langle E\rangle^2$:[1]

بما أن $\langle E\rangle$ معلومة يكفي حساب $\langle E\rangle^2$

$$\langle E^2\rangle = \sum_n E_n^2 P(E_n) = \frac{1}{Z}\sum_n E_n^2 e^{-\beta E_n} \quad (29.2)$$

بنفس الطريقة السابقة

$$E_n^2 e^{-\beta E_n} = -E_n\frac{\partial}{\partial\beta} e^{-\beta E_n} = -\frac{\partial}{\partial\beta} E_n e^{-\beta E_n} \quad (30.2)$$

$$=\left(\frac{\partial}{\partial\beta}\right)^2 e^{-\beta E_n} \quad (31.2)$$

$$\langle E^2 \rangle = \frac{1}{Z}\frac{\partial^2 Z}{\partial \beta^2} \quad (32.2)$$

نلاحظ أن :

$$\frac{\partial^2 Z}{\partial \beta^2} = \frac{\partial}{\partial \beta}\frac{1}{Z}\frac{\partial Z}{\partial \beta} + \frac{1}{Z^2}\left(\frac{\partial Z}{\partial \beta}\right)^2 \quad (33.2)$$

$$= \frac{\partial^2}{\partial \beta^2}\log Z + \langle E \rangle^2 \quad (34.2)$$

$$(\Delta E)^2 = \frac{\partial^2}{\partial \beta^2}\ln Z = -\frac{\partial \langle E \rangle}{\partial \beta} \quad (35.2)$$

$$(\Delta E)^2 = KT^2\left(\frac{\partial \langle E \rangle}{\partial T}\right)_{V,N} \quad (36.2)$$

$$= KT^2 C_V \quad (37.2)$$

حيث C_V : السعة الحرارية مع حجم ثابت .

2-4-2- الضغط :

الآن و بإعتبار T وN ثابتتين وبإفتراض أن حجم النظام V يتغير من القيمة V الى القيمة V+dV بسبب التغير في مستويات الطاقة عندما يكون نظام المجموعة في حالة صغرى للطاقة E_n يتم اعطاء الضغط كالتالي :

$$P_n = -\left(\frac{\partial E_n}{\partial V}\right)_{\beta,N} \quad (38.2)$$

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

$$\langle P_n \rangle = \sum_n P_n P_n(E_n) \quad (39.2)$$

$$= \frac{1}{Z}\sum_n \left(\frac{\partial E_n}{\partial V}\right) e^{-\beta E_n} \quad (40.2)$$

نلاحظ أن :

$$\frac{\partial}{\partial V} e^{-\beta E_n} = -\beta e^{-\beta E_n}\frac{\partial E_n}{\partial V} \quad (41.2)$$

والتي تعطي :

$$\langle P\rangle = \frac{1}{\beta Z}\frac{\partial}{\partial V}\sum_n e^{-\beta E_n} \quad (42.2)$$

$$= \frac{1}{\beta Z}\frac{\partial Z}{\partial V} \quad (43.2)$$

أو

$$\langle P\rangle = \frac{1}{\beta}\left(\frac{\partial \ln Z}{\partial V}\right) \quad (44.2)$$

$$= KT\left(\frac{\partial \ln Z}{\partial V}\right)_{T,N} \quad (45.2)$$

عندما تكون N كبيرة تكون تأرجحات P حول $\langle P\rangle$ صغيرة جدا فإن قياسات الضغط تؤدي إلى القيمة $\langle P\rangle$ (والتي لا يمكن تميزها من القيمة الأكثر احتمالا $\tilde{P}$) لذلك عادة ما نرمز للكميات الترموديناميكية مثل $\langle P\rangle$و$\langle E\rangle$على الترتيب ب E وP. [1]

2-4-3-الانتروبي:

نفترض أن عدد الجسيمات ثابت و بالتالي دالة التوزيع لا تعتمد إلا على المتغيرين V و T أي أن

$$Z=Z(\beta,N) = Z(T,V) \quad (46.2)$$

نكتب التفاضل التام لدالة التوزيع على الشكل

$$d\log z = \frac{\partial \log z}{\partial \beta}d\beta + \frac{\partial \log z}{\partial V}dV \quad (47.2)$$

$$d\log z = -\langle E\rangle d\beta + \beta\langle P\rangle dV \quad (48.2)$$

$$d(\beta\langle E\rangle) = \langle E\rangle d\beta + \beta d\langle E\rangle \quad (49.2)$$

$$d(\log Z + \beta\langle E\rangle) = \beta(d\langle E\rangle + \langle P\rangle dV) \quad (50.2)$$

$$d\langle E\rangle = TdS - \langle P\rangle dV \quad (51.2)$$

$$d(\log Z + \beta\langle E\rangle) = \beta T dS = \frac{dS}{K} \quad (52.2)$$

وهو ما يقودنا إلى:

$$S=k\big(K(\log Z + \beta\langle E\rangle)\big) \quad (53.2)$$

نختار ثابت التكامل صفر لأنه عندما $\beta \to \infty$ فان $S \to K\log g_0$.

حيث : g_0 انحلال الحالة الأساسية (المبدأ الثالث للديناميكا الحرارية) [1]

2 -4-4- الطاقة الحرة :

يمكن كتابة المعادلة (45.2) على الشكل التالي :

$$\langle E\rangle - TS = -KT\log Z \qquad (54.2)$$

يمثل الطرف الأول من المعادلة تعريف الطاقة الحرة F لذلك :

$$F=-KT\log Z \qquad (55.2)$$

نقبل دون تفصيل أن العلاقة الأخيرة بين F و Z صالحة حتى اذا كان عدد الجسيمات غير ثابت[6,1]

2-4-5- السعة الحرارية : [6]

$$C_V = \left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_V = \left(\frac{\partial \langle E\rangle}{\partial T}\right)_V \qquad (56.2)$$

$$C_V = \left(\frac{\partial}{\partial T}\left(-\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta}\right)\right)_V \qquad (57.2)$$

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

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

2-4-6-المغنطة [1]:

$$\langle \mu\rangle = \frac{1}{\beta}\frac{\partial \ln Z}{\partial H} \qquad (60.2)$$

بالتعويض في العبارة نجد :

$$\langle \mu\rangle = \frac{1}{\beta}\frac{\partial \ln e^{\frac{-F}{KT}}}{\partial H} \qquad (61.2)$$

$$= \frac{1}{\beta}\frac{\partial\left(\frac{-F}{KT}\right)}{\partial H} \qquad (62.2)$$

$$= \frac{1}{\beta}\frac{\partial(-\beta F)}{\partial H} \qquad (63.2)$$

$$\langle \mu \rangle = -\frac{\partial F}{\partial H} \qquad (64.2)$$

2-5-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 ،ولكن غير صحيح للعديد من الجمل الأخرى وعلى الخصوص الكلاسيكية منها.

السؤال الذي يطرح هنا هو ما هو إحتمال أن يكون النظام بحالة محدة بين $(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N; \vec{p}_1, \dots, \vec{p}_N)$ و$(\vec{r}_1 + \overrightarrow{dr_1}, \dots, \vec{r}_N + \overrightarrow{drN}\ ; \vec{P}_1 + \overrightarrow{dP_1}, \dots, \vec{p}_N + \overrightarrow{dPN})$

ان حالة هذا النظام تعرف بوجودها في حيز حجمه $dr^3 \dots drN^3\ dP^3 \dots dPN^3$

$$dP = \frac{e^{-\beta H(\vec{P_i}, \vec{r_i})}}{Z}\ dr^3 \dots drN^3\ dP^3 \dots dPN^3 \qquad (65.2)$$

الملاحظ هو أنه 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 :

$$dP = \frac{e^{-\beta H(\vec{P_i}, \vec{r_i})}}{Z}\ \frac{dV}{h^{3N}} \qquad (66.2)$$

حيث :

$$dV = drN^3 dPN^3 \qquad (67.2)$$

من المعلوم أن :

$$\int dP = 1 \qquad (68.2)$$

حيث تصبح :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-\beta H}}{Z}\ \frac{dr^{3N} dP^{3N}}{h^{3N}} = 1 \qquad (69.2)$$

وبعدها نخرج Z من التكامل وتصبح

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

ومن ثم عبارة Z هي :

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

2-6-تطبيقات المجموعة القانونية :

نأخذ فقط البارامغناطيسية كتطبيق بسيط للمجموعة القانونية .

2-6-1-البارامغناطيسية :

نلاحظ هذه الظاهرة عندما تكون الذرة أو الجزيئات في مادة تملك عزم مغناطيسي دائم ،عندما تدور الالكترونات التي لها عزم مداري معدوم في المدارات الذرية أو الجزيئية غير المكتملة او من تراكب التأثيرين السابقين عندما توضع مادة البارامغناطيسية في المجال المغناطيسي B فتميل العزوم المغناطيسية M إلى التوجه في اتجاهه ،هذا يعني انه توجد علاقة بين العزم المغناطيسي و سبين الإلكترون .

تعطى معادلة العزم المغناطيسي M كتالي[1,4] :

$$M = g \frac{e}{2m} S \qquad (72.2)$$

سنعتبر في هذا النموذج الذي يتكون من N جسيم مثماثلين لا يوجد تفاعل فيما بينهم ،ستميل الجسيمات إلى اتجاه الحقل المغناطيسي إذا تم تطبيق مجال مغناطيسي ،لكن التحريض الحراري سيحاول تغير اتجاههم .

في ميكانيكا الكم يتوقع أن يكون هناك مستويين من الطاقة المحتملة لكل جسيم ،هذه الأخيرة تكون متعلقة بالعزم المغناطيسي:

$$E_{\uparrow} = MB \text{ و} E_{\downarrow} = -MB \qquad (73.2)$$

إذا كانت درجة حرارة الشبكة هي T فسنطبق المجموعة القانونية على كل جسيم من الشبكة لانها من الممكن تميزها .أن الجسيمات الأخرى تلعب دور الخزان الحراري .تكون الاحتمالات على ل↓ او ↑تساوي على التوالي [17]:

$$\mathcal{P}_{\uparrow} = \frac{1}{Z} e^{\frac{MB}{KT}} \text{ و} \mathcal{P}_{\downarrow} = \frac{1}{Z} e^{-\frac{MB}{KT}} \qquad (74.2)$$

حيث:

$$Z = e^{-\frac{MB}{KT}} + e^{\frac{KB}{KT}} \qquad (75.2)$$

نضع $x = \frac{MB}{KT}$ ،اذن :

$$Z = e^{-x} + e^{x} \quad \mathcal{P}_{\downarrow} = \frac{1}{Z} e^{-x} \quad \mathcal{P}_{\uparrow} = \frac{1}{Z} e^{x} \qquad (76.2)$$

لنحسب متوسط العزم المغناطيسي للجسيم :

$$\langle M\rangle = \frac{(M)\mathcal{P}_{\uparrow} + (-\mathrm{M})\mathcal{P}_{\downarrow}}{Z} = M\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{x}} - \mathrm{e}^{-\mathrm{x}}}{\mathrm{e}^{\mathrm{x}} + \mathrm{e}^{-\mathrm{x}}} \qquad (77.2)$$

$$\langle M\rangle = M\tan x = M\tan\frac{MB}{KT} \qquad (78.2)$$

إذا كانت T كبيرة $(KT \gg MB)$، $\mathrm{x}\to 0$ ، حيث : $\tan\frac{MB}{\mathrm{KT}} \to \frac{\mathrm{MB}}{\mathrm{KT}}$

$$\langle M\rangle = \frac{M^2B}{KT} \to 0 \qquad (79.2)$$

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 متساو في كلا الاتجاهين :

إذا كان $\mathrm{T}\to 0$ $(\mathrm{MB} \gg)$ $\mathrm{x}\to\infty$ ، $\tan\frac{MB}{\mathrm{KT}} \to 1$ حيث :

$$\langle M\rangle \to M \qquad (80.2)$$

لدينا $\mathcal{P}_{\downarrow} = 0$ و$\mathcal{P}_{\downarrow} = 1$ النظام في حالة الطاقة الأقل $(\mathrm{E}_{\uparrow} = -MB)$ بمان هناك جسيمات N لكل واحدة حجم فان متوسط العزوم المغناطيسية لكل وحدة حجم هو :

$$\langle M\rangle = N\langle M\rangle \qquad (81.2)$$

الحساسية المغناطيسية χ ومعامل التناسب بين $\langle M\rangle$ و B عندما تكون $\mathrm{B}\to 0$:

$$\langle M\rangle = \chi^{B} \qquad (82.2)$$

إذا $\mathrm{MB} \ll KT$ لدينا :

$$\chi = \frac{NM^2}{KT} \qquad (83.2)$$

حيث:

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

الفصل الثالث :

الأسس الحرجة في نموذج ايزينغ بإستعمال محاكاة مونتي كارلو

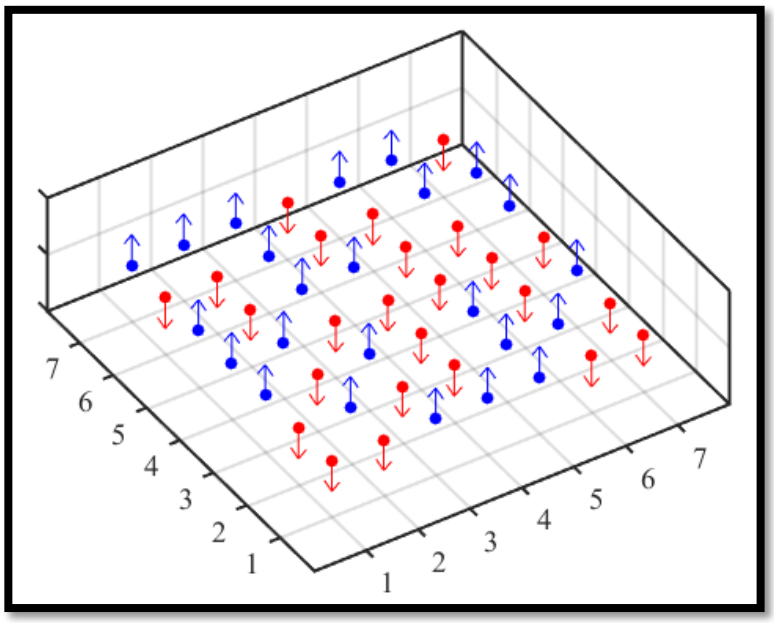
تمهيد :

تعرضنا في الفصلين السابقين لمفاهيم ونظريات في فيزياء وميكانيكا الاحصاء تهتم بدراسة تصرف الانظمة متعددة الاجسام وكيفية تقدير كمياتها الفيزيائية باستخدام دالة التوزيع تحت شروط مختلفة من ضغط ودرجة حرارة. في هذا الفصل سنرصد احد اهم التصرفات للانظمة متعددة الاجسام التي يعرض فيها التفاعل بين جسيماتها ظاهرة مهمة جدا تعرف باسم التحول الطوري[1]. الامثلة في الطبيعة عديدة، منها على سبيل المثال، تكثف الغاز وتحوله الى الطور السائل وكذلك ظهور الفيرومغناطيسية في الحديد. بصفة خاصة سندرس نموذج ايزينغ الذي يستخدم التفاعل بين السبينات الكلاسيكية لوصف التحول الطوري في المواد الممغنطة. يعد هذا النمودج حجر الزاوية في الفيزياء الاحصاصية لمحاكاة التحولات الطورية. عموما تتميز مثل هذه التحولات بتحول مفاجى من طور الى طور عند درجة حرارة معينة تعرف بالدرجة الحرجة، عندها يسود الغموض وتتقطع الكميات المرصودة ولايمكن حتى من اجل الانطمة ثلاثية الابعاد البيسطة تقدير الكميات الفيزيائية مثل المغنطة والحرارة النوعية. لذلك بجوار النقطة الحرجة توصف بشكل تقريبي الكميات الفيزيائية بقانون اسي مستمر لكل كمية فيزيائية ثم يقدر الاس الموافق لها. تعقيد هذه المسائل وعدم توفر الحلول الرياضية الدقيقة يفرض نهجا احصائيا في المحاكاة يعتمد على توليد الاعداد العشوائية لوصف تفاعل مثل هذه الانطمة مع الوسط. يعرف هذا النهج بطريقة مونتيي كارلو وسنستخدمه لدراسة نموذج ايزينغ في المغنطة ولتقدير الاسس الحرجة في المغنطة والسماحية المغناطيسية والحرارة النوعية.

3-1- نموذج ايزينغ وميكانيكا الاحصاء:

تعد المغناطيسية ظاهرة كمية في الاساس مكوناتها الرئيسية السبين والعزم الموافق له. تنتج هذه الظاهرة من تعاضد العزوم المغناطيسية المنفردة لتجمع هائل من الذرات في نفس الاتجاه لتتجلى في عزم مغناطيسي مقاس جهريا[7,1] .المسالة الاساسية في دراسة الفيرومغناطيسية هي فهم كيف يؤدي التفاعل بين السبينات الى هذه القبلة العامة لعزوم السبينات. كذلك، بما اننا نعرف ان هذه الظاهرة تختفي عند درجات حرارة عالية، نتسال مرة اخرى لماذا وكيف تتعلق ظاهرة المغناطيسية بدرجة الحرارة؟.

لفهم نموذج ايزينغ يمكن ان تخيل ان المعدن عبارة عن شبكة ثلاثية الابعاد تتموضع الذرات عند اركانها ولكل ذرة عزم مغناطيسي في اتجاه معين. للتبسيط المسالة نعتبر شبكة منتظمة من الذرات في بعدين كما في الشكل 3-1 وعند كل عقدة منها شعاع باتجاه كيفي يرمز للعزم المغناطيسي للذرة الموافقة. تجدر الاشارة هنا ان المعالجة الكمية التامة لهذا النموذج تتطلب ادراج جميع قواعد ميكانيكا الكم الخاصة بالعزم المداري للسبين وهو امر جد معقد يتعدى حدود هذه المذكرة. لذلك سنلجا لمجموعة من التقريبات دون ان نخل بالتصرف الفيزيائي العام لظاهرة المغنطة. سنفرض ان سبين كل ذرة ياخذ فقط اتجاهين: نحو الاعلى او نحو الاسفل على امتداد المحور z. وبالتالي السبين رقم i في النظام ياخذ فقط قيمة واحدة من اصل قيمتين $S_i = \pm 1$. كل سبين من هذه السبينات يسمى بسبين ايزينغ يتفاعل مع بقية السبينات في الشبكة: في المواد ذات الفيرومغناطيسية يفضل هذا التفاعل محاذاة السبينات في نفس الاتجاه زوجا بزوج وعلى مسافات كبيرة، بهذا تعرض هذه المواد ترتيبا طويل المدى للسبينات على امتداد عدد كبير من الذرات.



الشكل(3-1): مثال عن شبكة مربعة ابعادها 7x7 يمكن للسبين كل عقدة ان ياخد فيه الا اتجاهين.

ينشأ هذا الترتيب طويل المدى مناطق ممغنطة داخل المعدن تفرض على سبينات ذرات [18]الجوار ان تتنتظم معها في نفس الاتجاه وهذا على حساب الاثارة الحرارية التي تسعى دائما لتشتيت هذا الانتظام. في المواد الممغنطة يكون هذا التفاعل قويا مع ذرات الجوار وينخفض سريعا بزيادة المسافة بين السبينات. لذلك في ابسط نموذج لـ ايزينغ يقتصر التفاعل فقط مع ذرات الاجوار الاول فقط وتعطى حينئذ طاقة نظام السبينات بـالعلاقة:[10]

$$E = -J \sum_{<i,j>}^{N} S_i S_j \qquad (1.3)$$

حيث يجري الجمع على ذرات الجوار الاقرب لكل سبين. يرمز N لعدد السبينات الكلي في النظام و J ثابت التفاعل وهو يقيس شدة التفاعل بين السبينات ونفترضه مقدار موجب. من المفيد ان نتخيل ان احد الحالات المجهرية لنظام السبينات توافق توزيعا او تشكيلا معينا للسبينات على الشبكة. وبالتالي المعادلة السابقة تحدد طاقة النظام في احد هذه الحالات او التشكيلات المجهرية. المعادلة السابقة مع نظام السبينات الموصوف اعلاه تعرف بنموذج ايزينغ كما اقترحه ويليام لينز عام 1920 كموضوع دكتوراه على الطالب ايرنفست ايزينغ[12].

قبل ان نستطرد في الدراسة الكمية لنموذج ايزينغ ، نرى من المفيد ان نستبق بدراسة كيفية لتصرف تفاعل السبينات وفي طيها نذكر ببعض مفاهيم الميكانيك الاحصائي. اعتمادا على المعادلة 3-1، يكون لسبينين متجاورين طاقة تفاعل مقدارها $J-$ اذا كان لهما نفس الاتجاه و $J+$ اذا كانا متعاكسين. وعليه وبما ان J مقدار موجب فان ازواج السبينات المتجاورة تفضل تخفيض طاقتها باتخاذ نفس الاتجاه لسبيناتها. اذا كان كل سبين موازي لمجاوره فان كل سبين في الشبكة سيكون موازيا لكل السبينات الاخرى. ويتجلى هذا جهريا في عزم مغناطيسي محصل للعينة ويقال عن الانظمة اللتي تعرض مثل هذا التصرف في غياب حقل مغناطيسي خارجي مطبق ان لها ممغنطة تلقائية [10,4]. في الواقع هذا الانتضام طويل المدى ليس نهائيا على طول العينة بل تحد منه الاضطرابات الحرارية التي تسعى لتشتيت هذا التوجه المنتظم. لذلك سنفترض ان نظام السبينات

في توازن حراري مع منبع حراري درجة حرارته T وتوصف تصرفاته حينذ في ضل المجموعة القانونية. بانسياق الزمن يؤدي التفاعل مع المنبع الحراري ان تكتسب السبينات او تفقد طاقة ويتغير اتجاها، بهذا الشكل سيزور نظام السبينات عدة تشكيلات او حالات مجهرية بوتيرة عالية. وبالتالي سيعتمد التصرف المقاس تجريبيا لاي كمية فيزيائية على مدى الزمن الذي يقضيه النظام في هذه الحالات المجهرية اثناء زمن القياس وهو زمن كبير جدا بالمقارنة مع زمن الانتقالات من حالة مجهرية الى حالة مجهرية اخرى. لتقدير الكميات الفيزيائية مثل الطاقة $<E>$ والمغنطة $<M>$ للانظمة في توازن مع منبع حراري نحتاج لحساب توزيع احتمالي[7,9] :

$$P_{\propto}(\beta) = \frac{e^{-\beta E_{\alpha}}}{Z} \qquad (2.3)$$

حيث E_{α} تمثل طاقة النظام في الحالة المجهريه α، $\beta=1/kT$ مقلوب درجة الحرارة و k ثابت بلتزمان. Z دالة التوزيع للمجموعة القانونية المعرفة بـ:

$$Z = \sum_{\alpha} e^{-\beta E_{\alpha}} \qquad (3.3)$$

حيث يجري الجمع على جميع الحالات المجهرية للنظام. يمثل $P_{\propto}(\beta)$ احتمال تواجد النظام في الحالة المجهرية α. عدد الحالات المجهرية من اجل N سبين يساوي 2^N حالة مجهرية مختلفة. في الانظمة قيد الدراسة سنتعامل مع عدد سبينات عالي وبالتالي عدد الحالات المجهرية يكون عالي جدا ، الامر الذي يعقد المسالة ويجعل من الصعب حساب متوسط الكميات الفيزيائية مثل $<M>$ والتي تعطى بالعلاقة[1,4]:

$$< M >= \sum_{\propto} M_{\propto} P_{\propto}(\beta) \qquad (4.3)$$

حيث $M_{\propto} = \sum S_i$ تمثل العزم المغناطيسي للحالة المجهرية α. بشكل مشابه يمكن التعبير عن متوسط الكميات الفيزيائية الاخرى بدلالة الاحتمالات.$P_{\propto}(\beta)$

سنهتم في الاقسام الموالية بكيفية حساب مثل هذه الكميات بشكل فعال باستخدام خوارزمية متروبوليس بدل حسابها مباشرة بسبب العدد الهائل للحالات المجهرية وبسبب ان دالة التوزيع دالة حادة التغير.

لوصف تفاعل نظام السبينات مع الحقول الخارجية يضاف حد لمعادلة الطاقة (1.3) بالشكل[6]:

$$E = -J \sum_{<i,j>}^{N} S_i S_j - \mu H \sum_{i}^{N} S_i \qquad (5.3)$$

حيث H يرمز للحقل المغناطيسي الخارجي و للعزم المغناطيسي الموافق له. يؤدي هذا الحقل بالسبينات لتتوجه باتجاهه لتخفيض طاقتها.

3-2- طريقة محاكاة مونتييي كارلو و خوارزمية ميتروبوليس:

تتنبا نماذج الحقل المتوسط بوجود تحول طوري من الدرجة الثانية لنظام السبينات في بعدين لكن نتائجه خاطئة بجوار النقطة الحرجة Tc اذ لا تتنبا بالاس الصحيح. في بعد واحد تتنبأ هذه النظرية بوجود تحول طوري من الرتبة الثانية الا ان الحسابات الرياضية الدقيقة تبرهن على عدم وجود مثل هذا التحول. لذلك تدعو الحاجة الى الجوء الى مقاربات اخرى اكثر دقة تمكن من رصد السلوك الصحيح للتحول الطوري خاصة بجوار النقطة Tc. في هذا القسم سنعرض طريقة عمل احدى هذه المقاربات والمعروفة باسم طريقة محاكاة مونتيي كارلو [10,18]. هدفنا هو محاكاة الية تفاعل نظام السبينات مع المحيط. بلغة فيزياء الاحصاء عادة ما يسمى المحيط حمام الحرارة. هدف هذا الحمام هو تبادل الطاقة مع نظام السبينات ويؤدي به لحالة اتزان عند درجة حرارة T. بإكتساب النظام للطاقة من الحمام او صرفها اليه، تنقلب السبينات مسببة انتقال

النظام الى حالات مجهرية جديدة. كل حالة α من هذه الحالات المجهرية توافق ترتيبا معينا للسبينات $\{S_\alpha\}$. وبالتالي القيم المقاسة لكميات مثل المغنطة ستتعلق باحتمال تواجد النظام في مختلف حالاته المجهرية.

تسنخدم طريقة مونتي كارلو نهجا احصائيا لمحاكاة تبادل الطاقة بين نظام السبينات و حمام الحرارة. نبدأ من حالة النظام في حالة مجهرية معينة كما في الشكل 3-1. يحاكى التفاعل مع الحمام الحراري بالشكل التالي. يختار سبين معين من الشبكة و تحسب الطاقة اللازمة لقلبه E_{FLIP} . في هذا النظام قيد الدراسة ، تحسب هذه الطاقة باستخدام العلاقة 3-1. اذا كانت الطاقة E_{FLIP} سالبة (يعني اننا بإتجاه تخفيض طاقة النظام) يقلب السبين ويكون بهذا ان النظام قد انتقل الى حالة مجهرية مختلفة اكثر استقرارا . اذا كانت E_{FLIP} موجبة (يعني اننا بتجاه زيادة طاقة النظام) هنا يجب اتخاذ قرار معين. يولد عدد عشوائي r توزيعه منتظم في المجال [0,1] ثم يقارن مع معامل بلتزمان $e^{-E_{FLIP}/kT}$. اذا كان هذا المعامل اكبر من r يقلب السبين وتقبل الحالة المجهرية الجديدة، خلاف ذلك لا يقلب السبين ويبقى النظام في نفس الحالة المجهرية القديمة. هنا نكون قد اتممنا خطوة مونتي كارلو واحدة في الزمن. للحصول على خطوة جديدة يختار سبين جديد وتعاد الخطوات السابقة. تعاد هذي العملية عداد كبير من المرات حتى يأخذ كل سبين حظوظ كبيرة لتغيير اتجاهه.

يمكن النظر لكل خطوة من خطوات منت كارلو كتفاعل واحد مع حمام الحرارة. تأثير هذا التفاعل يتغير وفق لدرجة الحرارة بسبب تعلق معامل بلتزمان لاحتمال انقلاب سبين بدرجة الحرارة. في الحقيقة ما تم وصفه في الخطوات السابقة تمثل خطوات خوارزمية ميتروبوليس و هي خوارزمية تقوم بمعاينة للحالات المجهرية $\{S_i\}$ لنظام السبينات وفقا لتوزيع بولتزمان بشكل فعال جدا دون الحاجة لحساب دالة التقسيم Z والتي تعد احد اسباب التعقيد في حساب المقادير المتوسطة للكميات الفيزيائية. باستخدام هذه الخوارزمية في معاينة الحالات المجهرية تصبح القيم المتوقعة للاي كمية فيزيائية مثل M و E مجرد متوسطات حسابية على التشكيلات المعاينة:

$$< M >= \frac{1}{N_m}\sum_\alpha M_\alpha(\{S_\alpha\}) \qquad (6.3)$$

$$< E >= \frac{1}{N_m}\sum_\alpha E_\alpha(\{S_\alpha\}) \qquad (7.3)$$

حيث N_m عدد الحالات المجهرية $\{S_\alpha\}$ المعاينة وفقا لتوزيع بلتزمان. للقارى الملم بطريقة مونتي كارلو في المكاملة سيكتشف ان العبارة الاخيرة ما هي الا معاينة موجهة للتشكيلات السبينية وفقا لتوزيع بلتزمان. في الفيزياء الاحصائية $P_\alpha(\beta)$ دالة اسية للطاقة $e^{-\beta E_\alpha}$ حادة و سريعة التغير و ضيقة المجال معرفة في فضاء عالي الابعاد و M عموما دالة خطية او كثير حدود بطيئ التغير لدرجات الحرية في النظام . لذلك من الضروري جدا استخدام المعاينة الموجهة بدل المعاينة العشوائية المنتظمة عندما يهيمن فقط جزء صغير من فضاء التشكيلات على دالة التقسيم وهي الحالة الشائعة مع توزيع بلتزمان في الميكانيك الاحصائي عند درجات الحرارة ذات الاهتمام الواسع.

3-3- نموذج ايزينغ وتحولات الطور من الرتبة الثانية:

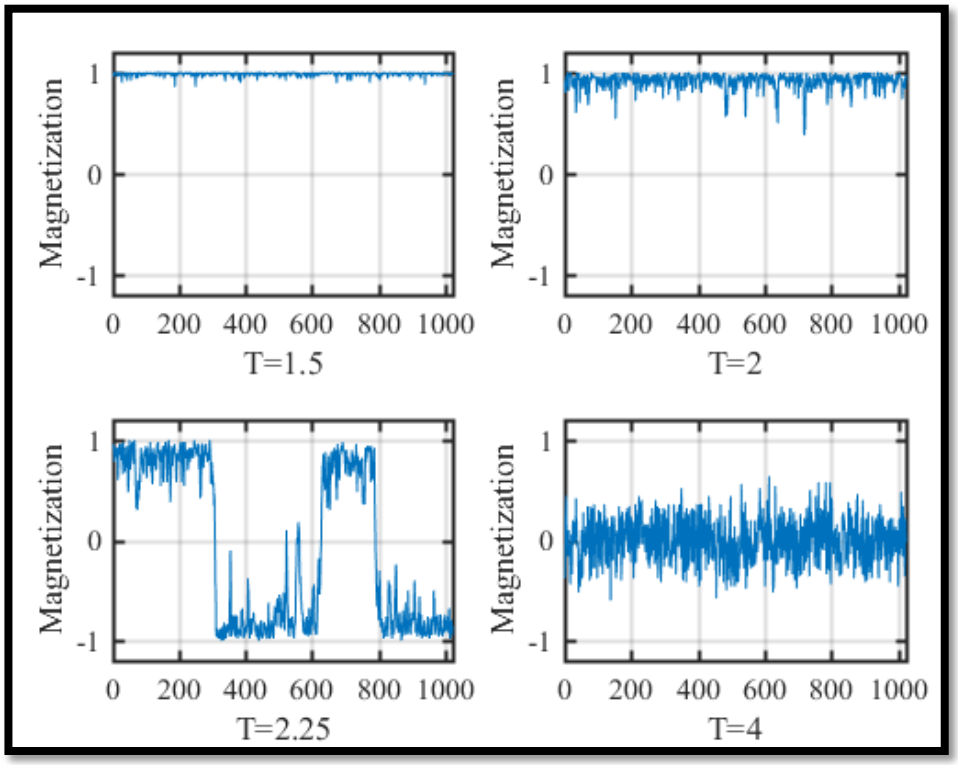
سنعمد في هذا القسم لاستخدام طريقة مونتيي كارلو التي ارسينا دعائمها في القسم السابق لدراسة سلوك نموذج ايزينغ وفحص تحولات الطور في النظام. سنصادف نوعين من تحولات الطور واالتي تصنف تحت اسم الرتبة الاولى والرتبة الثانية على الترتيب. وفقا لتعريف اهرنفاست للتحول الطوري، تتحدد رتبة التحول الطوري برتبة المشتقات بالنسبة لدرجة الحرارة المعرفة للكميات الفيزيائية(مثل الطاقة والحرارة

النوعية بدلالة الطاقة الحرة) التي تعاني انقطاعا او تباعدا لا نهائيا في سلوكها[1,18,2]. وسنسعى لعرض مثل هذه التحولات عن طريق الامثلة بدل اعطاء التعريفات العامة لهما والخوض في تفاصيلهما. نموذجنا هو نظام السبينات المعروض في الشكل 3-1. تتفاعل السبينات فيما بينها و مع الحقل المغناطيسي الخارجي وفقا لعلاقة الطاقة (5.3). سنهتم فقط بحالة غياب الحقل الخارجي $H=0$. في مايلي سنقيس الطاقة بوحدات Kb و نأخذ $J=1$ و بالتالي تكون T بدون وحدات. تعتمد الحسابات في هذا النموذج على استخدام قواعد طريقة مونتي كارلو الموصوفة في القسم السابق لمحاكاة نظام السبينات عن طريق عدة خطوات زمنية لها. و نقوم بذلك عن طريق برنامج طورناه بالتوازي بين بيئة C++ و بيئة MATLAB . خلال كل خطوة نختار سبين معين، ثم نحسب الطاقة الازمة لقلبه ثم نقرر قلبه او تركه كما هو حسب قيمة نسبة معامل بلتزمان الى عدد عشوائي توزيعه منتظم في المجال 0-1. يمكن اختيار السبين الابتدائي عشوائيا بشرط أن نعيد خطوات منت كارلو عدة مرات بشكل يعطي كل سبين فرصا عديدة للانقلاب و يضمن زيارة جميع السبينات في الشبكة. بعد كل دورة على جميع سبينات الشبكة نحسب العزم المغناطيسي الكلي $M=\sum S_i$ و الطاقة الكلية وفق للمعادلة 3-1. بسبب الطبيعة العشوائية لهذه القياسات نعيد هذه العملية عددا كبير من المرات ثم نحسب متوسط M و E على عدد هذه الخطوات للحصول على قيم متوافقة مع التوازن الحراري كما في المعادلات (6.3) و(7.3).

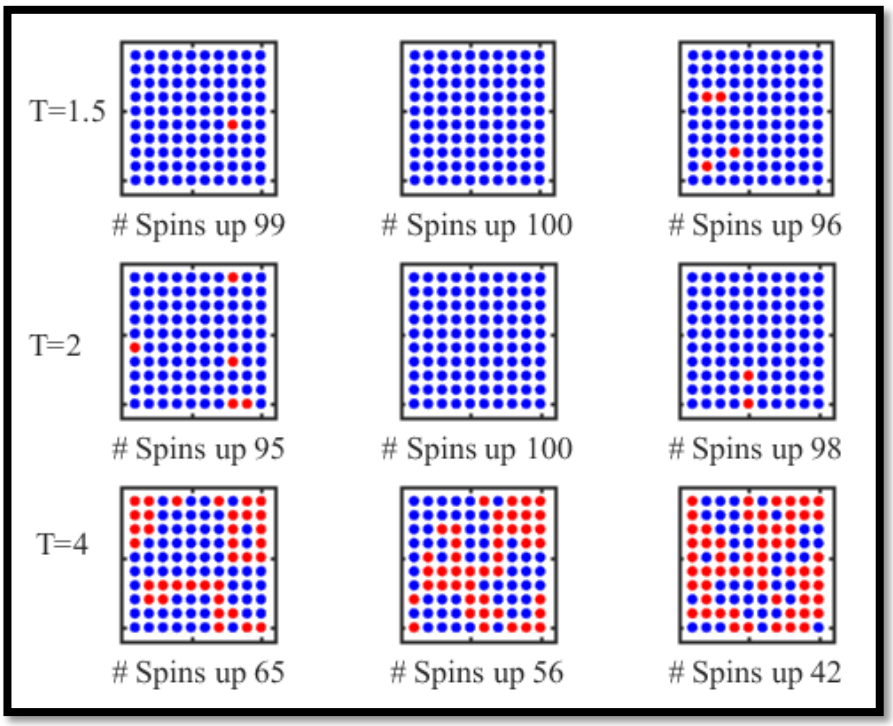
نظريا نريد أن نحسب سلوك الانظمة الكبيرة جدا ونحاكي الواقع الحقيقي. على سبيل المثال تحوي قطعة مغناطيس حقيقي على عدد هائل من السبينات من رتبة 10^{23}. بالاضافة الى ذلك، سيتضح ان تحولات الطور الموصوفة في الفقرات السابقة تتجلى فقط مع الانظمة الكبيرة جدا. لكن من جهة اخرى، السرعة والذاكرة المحدودة للحاوسيب المتوفرة اليوم تحد من عدد السبينات الممكن معالجته والمطلوب للحصول على محاكاة دقيقة. عمليا ابعاد الشبكات الممكن معالجتها لا يتعدى 10^4 سبين في حدود استطاعة الحاسوب المستخدم والزمن المرغوب للمحاكاة. لذلك في مثل هذه الانظمة المحدودة الابعاد يكون للسبينات الواقعة عند حدود الشبكات اثارا واضحة في النتائج النهائية مقارنة مع الانظمة الحقيقية. في الشبكات المربعة عدد الجوار للسبينات الواقعة عند الحدود يساوي ثلاثة اذا كانت عند الحواف او اثنان فقط اذا كانت عند الاركان. بما ان التفاعل السبيني يفرض على السبينات المتجاورة ان تسعى لتتجه في قبلة واحدة، فستكون درجة هذا التوجه اقل للسبينات عند الحواف منها عند الداخل بسبب قلة عدد الجوار. على الرغم من ان الانظمة الحقيقية لها كذلك حواف الا ان عدد السبينات عند الحواف اقل بكثير جدا من عددها في الداخل مقارنة بالشبكات الصغيرة. لذلك من المهم جدا في المحاكاة تخفيض تاثير الحواف قدر الامكان. احدى طرق تحقيق هذا يتم باستخدام شروط حدية دورية يصبح بها عدد الجوار لكل سبين يساوي اربعة ويتفاعل سبين معين عند حافة معينة مع سبين عند الحافة المقابلة له[10]. من المهم ان نشير ان سلوك الشبكات الصغيرة باستخدام الشروط الحدية الدورية لا يكافى سلوك الشبكات الكبيرة او ان استخدام الشروط الحدية الدورية يلغي تماما تاثير الحواف بل فقط يقلل منه. فالطريق الامثل هو ان نقوم بمحاكاة لشبكات بابعاد مختلفة ثم نقوم باستقراء سلوك الشبكات الكبيرة.

هدفنا هو دراسة سلوك نظام السبينات بجوار نقطة التحول الطوري، لذلك نبدأ المحاكاة عند درجة حرارة منخفضة نعلم عندها ان النظام سيكون في الحالة الفيرومغناطيسية. لذلك نختار تشكيل سبيني ابتدائي يوافق توجه عام للسبينات نحو الاعلى. ثم نستخدم خطوات مونتي كارلو لحساب المغنطة بدلالة خطوات مونتي كارلو الزمنية. يعرض الشكل 3-2 المغنطة المتوسطة بدلالة الزمن لشبكة ابعادها 10x10 سبين عند درجات مختلفة للحرارة. الزمن المشار اليه هنا ليس زمنا حقيقيا وهو من نتاج طريقة مونتي كارلو لان هذه الطريقة لا تستخدم قوانين الحركة على المستوى المجهري. كل خطوة زمنية في الشكل 3-2 توافق دورة كاملة

على سبينات الشبكة. عند درجات حرارة منخفضة تبقى المغنطة قريبة من قيمة التشبع الموافقة لحالة توازي جميع السبينات كما هو واضح من الشكل 3-3 الذي تهيمن فيه العقد الزرقاء الممثلة للاتجاه العلوي للسبينات. على الرغم من ان قواعد طريقة مونتي كارلو تودي الى تتضمن عملية قلب للسبينات الا ان الاضطرابات في قيمة M تعد ضعيفة. عندما ترفع درجة الحرارة الى T=2.0 القيمة المتوسطة لـ M تنخفض الى قيمة موافقة لـ 90 بالمائة من حالة التوزي العام السابقة لان معامل بلتزمان يرشح 10 بامائة من الحالات المجهرية بطاقات عالية. النظام عند هذه الدرجة لاتزال مغنطته حديدية الا ان درجة ترتيبه اقل منها عند درجات الحرارة المنخفضة و يدعم هذا ضهور بعض السبينات بلون احمر في الشكل 3-3. ونقصد بالترتيب هنا درجة التوجه العام للسبينات ويقاس بما يعرف بوسيط الترتيب. يخبرنا هذا الوسيط عن الطور الذي يتواجد فيه النظام. في حالة نظام السبينات تمثل القيمة الوسطية للمغنطة هذا الوسيط. نلاحظ كذلك من الشكل 3-2 ان الاضطرابات تزداد بشكل ملحوض بزيادة درجة الحرارة منذرة بتحول طوري قريب الحدوث او بشكل مكافئ باقتراب ظهور نقطة حرجة في سلوك النظام. كل نظام عند نقطة تحوله الحرجة يكون حساس جدا للاظطرابات وان كانت صغيرة بسبب ان خواصه تعاني تغيرا سريعا جدا استجابة للتغيرات في درجة الحرارة والحقل المغناطيسي الخارجي.



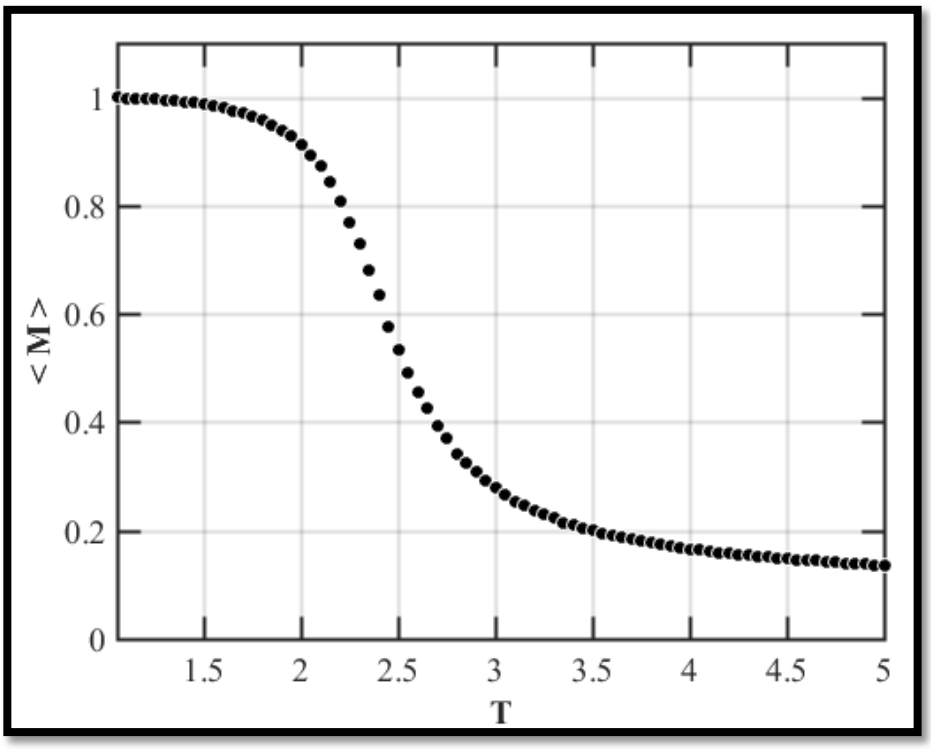
الشكل(3-2): المغنطة المتوسطة بدلالة الزمن لشبكة ابعادها 10x10 سبين عند درجات مختلفة للحرارة. لاحظ ان المغنطة منظمة بحيث توافق القيمة M=1 القبلة الموحدة لجميع السبينات.



الشكل(3-3): تشكيلات سبينية تم الحصول عليها بخوارزمية ميتروبولس لشبكة ابعادها 10x10 سبين عند ثلاث درجات حرارة مختلفة توافق الاشكال من اليمين الي اليسار عند كل درجة حرارة تشكيلات ناتجه عنثلاث خطوات متتالية بطريقة مونتي كارلو. العقد الزرقاء توافق سبينات نحو الاعلى والحمراء نحو الاسفل.

عنما نواصل التسخين الى T=2.25 تزداد الاظطرابات شدة وتترنح قيمة المغنطة بين M=±0.8. تبين الحسابات الدقيقة لأوسانجر على شبكة مربعة ان $T_c = 2J/\log(1+\sqrt{2}) \approx 2.27$ [18,1]مما يعني اننا قريبين جدا من الدرجة الحرجة للتحول. بمواصلة التسخين الى T=4 تنخفض سعة الاظطرابات وتكون متمركزة بجوار $M \sim 0$ مما يعني ان طور المغنطة الطردية مهيمن على النظام عند درجات حرارة اعلى بكثير من Tc. يدعم هذا الكلام انتشار العقد الحمراء في الشكل3-3 عندهذه الدرجة. بمقارنة سلوك النظام عند درجات الحرارة المختلفة في الشكل 3-2 يتضح ان الاظطرابات تكون اشد ما تكون بجوار Tc.

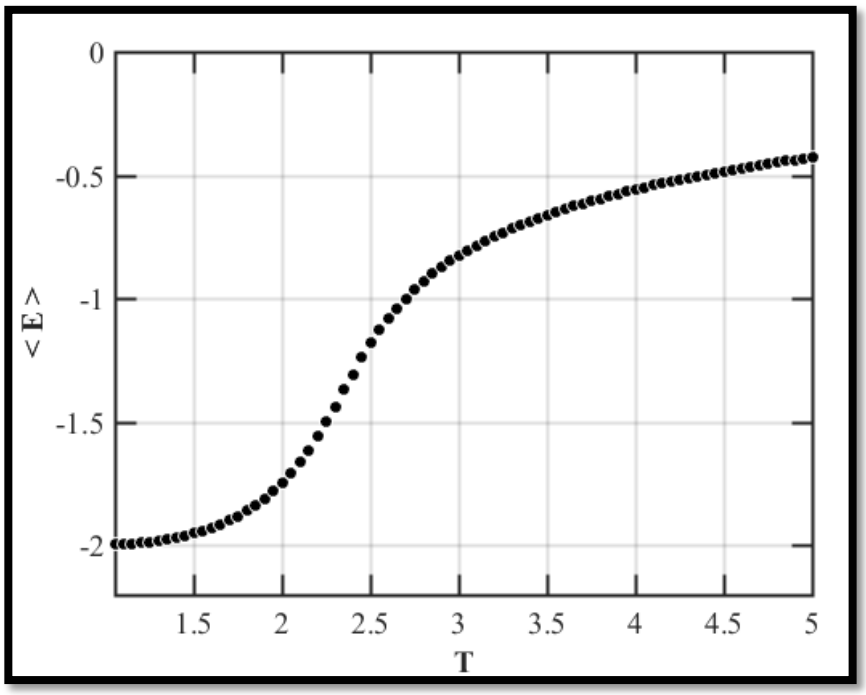
انطلاقا من نتائج المحاكاة عند درجات حرارة مختلفة يمكن حساب القيمة المتوسطة للمغنطة على طول مجال كامل من درجات الحرارة بضمها Tc كما في الشكل 3-4. على الرغم من أن النتائج تحوي بعض التشتت في القيم بسبب الأخطاء الاحصائية الناتجة عن توسيط البيانات كما في الشكل 3-3 الا ان M تنخفض بشكل سريع الى الصفر عند درجة حرارة T متوافقة مع القيمة الدقيقة لدرجة الحرارة الحرجة $T_c \approx$ 2.27. يمكن زيادة دقة هذه النتائج بزيادة عدد خطوات منت كارلو اللازم لحساب المتوسطات عند كل درجة حرارة. سيؤدي هذا الى تخفيض الاخطاء الاحصائية بمعدل متناسب مع $1/\sqrt{N_{steps}}$ حيث N_{steps}يمثل عدد خطوات منت كارلو الزمنية المستخدمة في الحسابات. يمكن كذلك زيادة دقة هذه النتائج بدراسة سلوك شبكات كبيرة ثم نستقرئ من النتائج سلوك الشبكات اللانهائية.



الشكل(3-4): المغنطة بدلالة درجة الحرارة لشبكة مربعة ابعادها 10x10 سبين. عند كل درجة حرارة نحصل على قيمة لـ M باخذ متوسطها على 200000 دورة من دورات مونتي كارلو.

من المهم أن نقارن نتائج طريقة منت كارلو في حساب المغنطة مع النتائج التي تتنبأ بها نظرية الحقل المتوسط[18]. رغم أن نتائج الطريقتين لها نفس الشكل العام الا أن طريقة الحقل المتوسط تتنبأ بقيم أعلى لـ Tc بمرتين. اضافة الى ذلك تنبآت نظرية الحقل المتوسط تشير أن M تؤول الى الصفر عند Tc بشكل تدريجي و هذا مخالف لما تتنبأ به طريقة منت كارلو.

الى حد الان الخاصية الوحيده التي أخذت بعين الاعتبار هي المغنطة، لكن يمكن تعلم الكثير من فحص الكميات الفيزيائية الاخرى. في الشكل 3-5 نعرض تغيرات الطاقة بدلاله درجة الحرارة. نحصل على هذه النتائج من نفس محاكاة المغنطة وبنفس الخطوات. عند درجات حرارة منخفضة، كل السبينات لها نفس القبلة وعليه سيكون لكل سبين طاقة تفاعل مقدراها $J=-1$ مع كل سبين من سبينات الجوار الاربعة. لذلك ينبغي ان تاخذ طاقة النظام الكلية عند $T=0$ القيمة $-4NJ/2$، حيث N يمثل عدد السبينات والمعامل 2 يظهر بسبب احتساب عدد الازواج مرتين عند حساب هذه الطاقة. نلاحظ من الشكل ان نتائج مونتي كارلو متفقة تماما مع هذه القيمة عند T=0. من جهة اخرى وعند درجات حرارة عالية جدا تكون لجميع السبينات توجهات عشوائية بمعدل سبينين نحو الاعلى وسبينين نحو الاسفل لكل سبين كجوار اقرب. لذلك يكون المتوسط الحراري للطاقة الكلية معدوما.



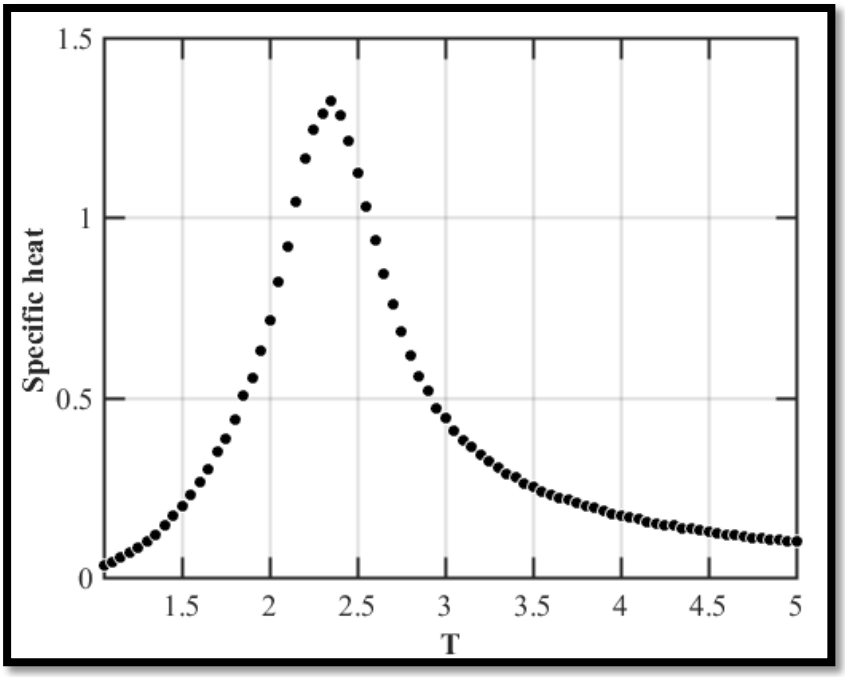
الشكل(3-5): المتوسط الحراري للطاقة بدلالة درجة الحرارة لشبكة مربعة ابعادها 10x10 سبين. تم الحصول على هذه النتائج من نفس محاكاة المغنطة في الشكل 3-4 وبنفس الخطوات. الطاقة هنا منظمة الى عدد السبينات الكلي في الشبكة $< E >/N$. عند درجات حرارة منخفظة توؤل الطاقة الى القيمة 2- وهي متفقة مع القيمة النظرية 2J- حيث J=1.

على الرغم من ان النتائج في الشكل3-5 تؤول نحو $< E >= 0$ عند درجات حرارة مرتفعة، الا انها تبقى تحت هذه القيمة حتى عند درجات حرارة اعلى بمرتين من الدرجة الحرجة. يستلزم هذا الامر ان توجهات الجوار الاقرب لكل سبين ليس عشوائيا تماما فوق Tc رغم ان نتائج حسابات المغنطة تشير الى توجه محصل على كامل الشبكة معدوم. تشير هذه المشاهدات الى ان توجه سبينات الجوار **مترابط** وهي ظاهرة مهمه جدا وهذا يدعمه الشكل 3-3 عند درجات حرارة عالية.

هذه الحجج تمكننا من فهم سلوك المتوسط الحراري للطاقة $< E >$ عند درجات الحرارة العالية و المنخفضة، لكن بجوار Tc يتعقد هذا السلوك. نلاحظ من الشكل 3-5 ان $< E >$ تعرض نقطة انعطاف بميل كبير جدا بجوار Tc. في الحقيقة، في الانظمة الحقيقة ذات الابعاد اللانهائية هذا الميل والمقدر بـ $d < E >/dT$ يكون لا نهائي عند T=Tc. نعلم من دروس الديناميكا الحرارية ان الحرارة النوعية ترتبط بالطاقة وفقا للعلاقة: $C = d < E >/dT$ ، ويعني هذا ان الحرارة النوعية تتباعد عن Tc. يعرض الشكل 3-6 تغيرات الحرارة النوعية بدلالة درجة الحرارة في شبكة ابعادها 10x10 سبين. يوجد نهجان في حساب الحرارة النوعية. النهج الاول يعتمد على اشتقاق متوسط الطاقة بالنسبة لدرجة الحرارة وهو نهج غير دقيق وغير مرغوب بسبب الفوضى الكبيرة للبيانات. اما الثاني فيعتمد على تقدير تباين $< E >$ بدلالة الزمن:

$$C = \frac{<E^2> - <E>^2}{kT^2} \qquad (8.3)$$

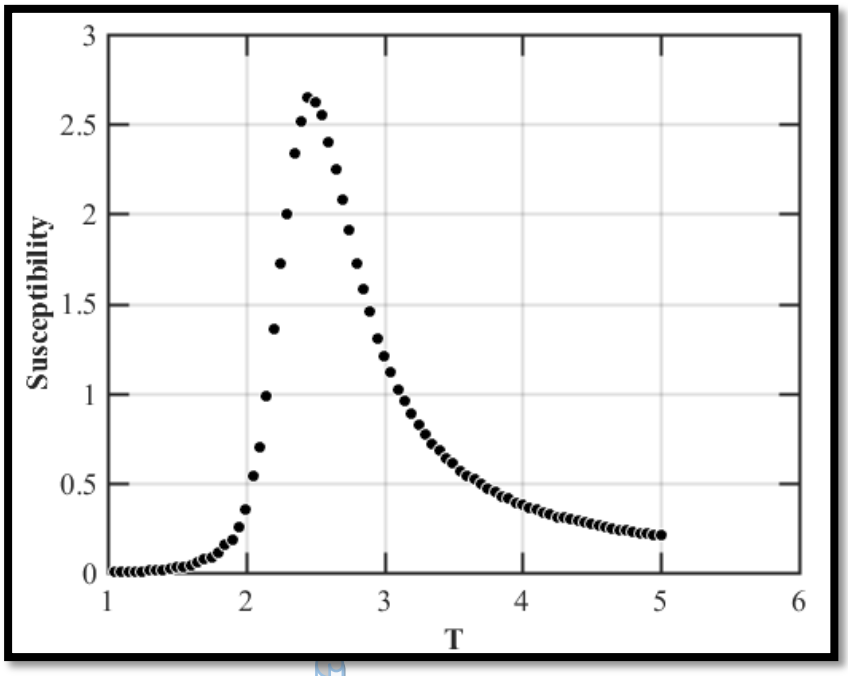
تبين هذه العلاقة ان القيمة النهائية في الحرارة النوعية عند التحول الطوري ترتبط ارتباطا مباشرا بالقيمة العظمى للاظطرابات الكبيرة بجوار Tc. في الشكل 3-6 تعرض الحرارة النوعية قمة عظمى بجوار Tc.



الشكل(3-6): الحرارة النوعية بدلالة درجة الحرارة لشبكة مربعة ابعادها 10x10 سبين. القيم هنا منظمة الى عدد السبينات الكلي في الشبكة $< C >/N$.

القيمة المشاهدة هنا غير متباعدة بسبب ان النظام محدود وغير نهائي، ونذكر كما اشرنا سابقا ان حالات التباعد في تحولات الطور هي خاصية مميزة للانظمة اللانهائية كما في المواد الحقيقة. تتباعد كذلك السماحية المغناطيسية χ في الانظمة الانهائية. يعرض الشكل 3-7 تقديرا لـ χ بحساب التباين في قيم المغنطة المتوسطة بالشكل:

$$\chi = \frac{<M^2>-<M>^2}{kT} \qquad (9.3)$$



الشكل(3-7): السماحية المغناطيسية χ بدلالة درجة الحرارة لشبكة مربعة ابعادها 10x10 سبين. القيم هنا منظمة الى عدد السبينات الكلي في الشبكة $< C > /N$.

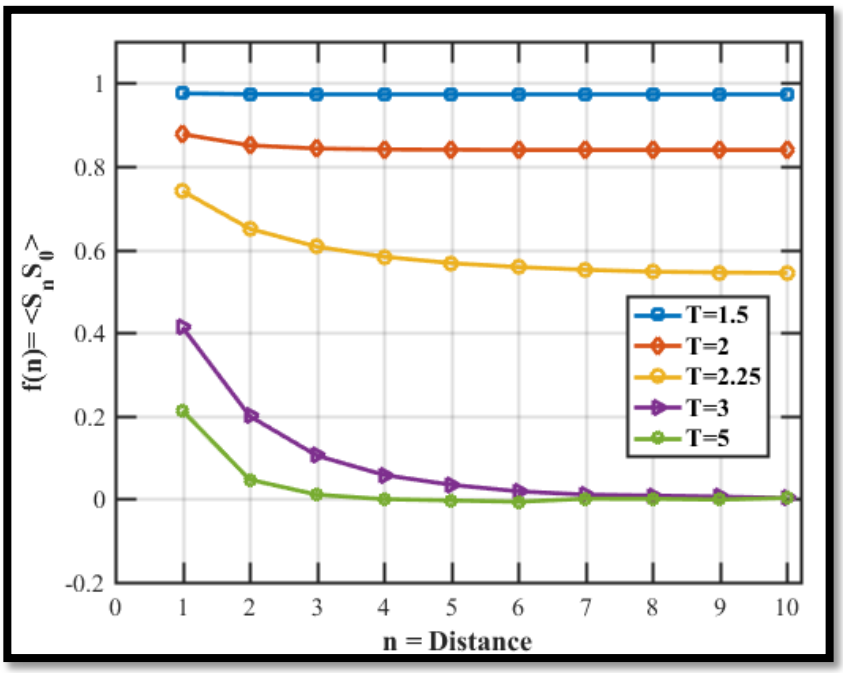
أشرنا في الفقرات السابقة حين عرضنا لمتوسط الطاقة بدلالة درجة الحرارة ان سلوك الطاقة بجوار Tc يوحي بوجوب وجود نوع من الترابط في التوجه النسبي للسبينات المتجاورة. يمكن فهم هذا السلوك ظواهريا بالشكل التالي. عند درجات حرارة اكبر من Tc تكون محصلة المغنطة معدومة وبالتالي يكون في المتوسط نصف السبينات متجه نحو الاعلى والنصف الاخر نحو الاسفل. في الحقيقة طاقة التفاعل بين السبينات المتجاورة ليست قوية كفاية لتنتج هذا التوجه المتجانس للسبينات. للتوضيح اكثر لنعتبر سبينا معينا S_0 متجها نحو الأعلى. و بما أن S_0=+1 بالتالي سيكون للسبينات المجاورة له طاقة دنيى اذا كانت جميع توجهاتهم مثله نحو الأعلى. لذلك حتى عند درجة الحرارة أعلى من Tc التي تفرض توجها متوسطا معدوما، سيبقى لهذه السبينات الأربعة احتمالا كافيا لتبقى موازية الى S_0 خلافا لحالة التضاد. تعتمد درجة هذا التوازي على درجة الحرارة و لكن تبقى غير معدومه حتى فوق Tc. يصح هذا الكلام لكل سبين من السبينات المجاورة لـ S_0. لنرمز لاحد هذه السبينات بـ S_1. الجوار القريب من S_1 بدوره سيحاول اخذ نفس الاتجاه مع S_1 و بما أن S_1 مرتبط مع S_0 فان هذا الترابط ومحاولة التوجه معا ستنتشر من سبين الى سبين من خلال الجوار المشترك. يمكن تقدير هذا الترابط عن طريق دالة الترابط التالية[1,4,10,18] :

$$f(n) =< S_n S_0 > \quad (10.3)$$

$$= \frac{1}{4N}\sum_{i,j} S(i,j)\cdot\big(S(i+n,j)+S(i-n,j)+S(i,j+n)+S(i,j-n)\big) \quad (11.3)$$

حيث S_n سبين يقع على بعد n خلية من S_0 و الأقواس تشير الى متوسط الحراري و الذي يمكن حسابه بعد بعد عدة خطوات مونتي كارلو. يرمز $S(i,j)$ إلى قيمة السبين عند الموضع الشبكي i,j. يمكن حساب هذه الدالة بان نختار اولا سبين مركزي S_0 ثم نحسب جداء $S_0 x S_n$ لجميع السبينات التي تبعد بالمسافة n عن السبين المركزي و نعيد الكرة على جميع السبينات كسبينات مركزية . بعد ذلك نحسب متوسط المقدار المتحصل عليه على عدد كبير من خطوات مونتي كارلو. نشير انه من أجل شبكة مربعه أبعادها LxL مع الشروط الحدية الدورية، المسافة القصوى بين سبينيين في نفس الصف أو العمود تساوي $L/2$ ، لان المسافة هنا تحسب بعدد الجوار الأقرب الذي يربط بين السبينيين.

يعرض الشكل 3-8 دالة الترابط عند درجة حرارة مختلفة. عند $T=1.5$ نجد أن $f(n)$ غير معدومه على مسافات كبيرة هذا لان مغنطة النظام غير معدومه و بالتالي حتى السبينات البعيده عن بعضها بكثير ستحاول في المتوسط أن تاخذ نفس الاتجاه. المهم هنا ليس القيمة المتوسطه لـ $f(n)$ بل الكمية التي تزداد بها $f(n)$ فوق هذه القيمة المتوسطة من اجل قيم صغيرة لـ n (مسافات صغيرة). عند درجة الحرارة المنخفظه هذه، نجد $f(n)$ تقريبا مستقله عن المسافة الفاصلة. نلاحظ هنا أن التوجه المتوسط يزداد بشكل طفيف عند مسافات صغيره وبالتالي في هذه الحالة قيمة الترابط والتي تقاس بالتوجه الاضافي بسبب التواجد في الجوار القريب تكون ضعيف و محدود على المدى القصير جدا. عند T=2. نجد عموما نفس السلوك بخلاف زيادة طفيفية على طول الفواصل القصيرة.



الشكل(3-8): دالة الترابط لشبكة ابعادها 20x20 سبين عند درجات حرارة مختلفة. المسافة بين السبينات محسوبة بدلالة خطوة الشبكة.

تتغير هذه الصورة بجوار Tc ويختلف سلوك دالة الترابط مقارنة بنظيره عند درجات الحرارة الواطئة في نقطتين. اولا الترابط النسبي عند المسافات القصيرة اكبر منه عند المسافات الطويلة. ثانية الترابط هنا طويل المدى لان $f(n)$ تتغير ببطيء شديد بزيادة المسافة **n**. برفع درجة الحرارة الى مدى اعلى من Tc بكثير مثلا عند T=5، تنخفض قيمة الترابط ويمتد فقط على مدى قصير.

3-4- الاسس الحرجة وسلوك الابعاد المنتهية في نموذج ايزينغ :

سنقوم في هذا القسم بدراسة ما يعرف بالظواهر الحرجة عن طريق دراسة سلوك الابعاد المنتهية في نموذج ايزينغ بواسطة طريقة محاكاة مونتي كارلو. رأينا في الاقسام السابقة، ان نموذج ايزينغ [14,15] في بعدين يملك في غياب الحقول المغناطيسية الخارجية تحولا طوريا من الرتبة الثانية. يعني هذا انه تحت درجة حرارة حرجة Tc يعرض هذا النموذج مغنطة تلقائية متوسطة تختلف عن الصفر، في حين تنعدم هذه المغنطة فوقها. والملاحظ في هذه المغنطة انها تتقارب من الصفر عند هذه الدرجة الحرجة بميل لا نهائي. مثل هذا السلوك يعد مثالا عن الظواهر الحرجة. تتميز هذه الظواهر بانعدام متغير او اكثر من متغيرات التحريك الحراري مثل المغنطة المتوسطة عند Tc. حضيت هذه الظواهر ولا تزال تحضى باهتمام واسع في الفيزياء بسبب الغموض الذي يكتنفها وعدم تحصيل فهم كافي عن مميزات وسلوك الانظمة بجوار Tc.

يعد نموذج ايزينغ في بعدين احد النماذج القليلة التي يمكن حلها حلا رياضيا دقيقا في الفيزياء الاحصائية وتملك تحولا طوريا غير بديهي[18,5]. بهذا يوفر هذا الحل معلومات دقيقة عن Tc والسلوك الدقيق بجوارها يمكننا من التحقق من نتائج محاكاة الشبكات الكبيرة وهل فعلا يتقارب سلوكها من سلوك الشبكات الحقيقية (الانهائية). وعلى اساس هذه المقارنة يمكن الاعتماد على المحاكاة في دراسة سلوك الانظمة التي لا تتوفر على حلول دقيقة مثل نموذج ايزينغ في ثلاثة ابعاد او اربعة ابعاد.

3-4-1-الاسس الحرجة والعالمية :

تنطوي نظريات الظواهر الحرجة على مفهوم اساسي يعرف بطول الترابط ξ. وهو مسافة تقيس مدى الترابط اوطول الترابط في النظام. طول الترابط يحدد المسافة التي على طولها يحافظ فيها النظام على خصائص معينة ناتجة عن ترابط التقلبات المجهرية لدرجات حريته مثل مواضع الذرات او التوجه النسبي للسبينات في نموذج ايزينغ . يتغير هذا الطول بتغير الشروط الخارجية. يمكن التعبير عن طول الترابط بدلالة دالة الترابط. في نموذج ايزينغ وبعيدا عن Tc تتناقص دالة الترابط بدلالة المسافة اسيا وفقا للعلاقة[18]:

$$f(n)\sim e^{-\frac{r_n}{\xi}} \qquad (12.3)$$

حيث تمثل r_n المسافة بين السبينات. كما اشرنا في الشكل 3-8، يزداد طول الترابط باقترابنا من Tc. يوافق بشكل تقريبي طول الترابط قطر المناطق المرتبة في بالنظام. بصفة عامة، باقترابنا من الدرجة الحرجة يتباعد طول الترابط في الشبكات الانهائية وفقا لقانون القوة التالي:

$$\xi(T)\sim \frac{1}{|T-T_c|^{\nu}} \qquad (13.3)$$

حيث υ مثال عن الاسس الحرجة. مباشرة عند النقطة الحرجة يتباعد طول الترابط $\xi = \infty$ وتنحدر دالة الترابط بقانون قوة يتعلق بالموضع فقط[10]. القيمة العالية لـ ξ تترجم حقيقة ان توجه سبين معين من الشبكة تشعر به السبينات البعيدة جدا. من جهة اخرى، القيمة الانهائية لـ ξ عند Tc تعني ان الترابط لا نهائي وبالتالي كل سبين من الشبكة يكون حساسا لتوجه اي سبين اخر من الشبكة. يعود التصرف الحرج والتقلبات الكبيرة في الكميات الحرارية مثل المغنطة والحرارة النوعية الى هذه الحساسية العالية جدا للنظام عند Tc. حقيقة ان نظاما مثل نظام ايزينغ والذي توصف طاقته بالتفاعل مع سبينات الجوار فقط وتؤدي الى طول ترابط لانهائي عند Tc، لا تزال حتى الساعة قضية يشوبها الغموض. بعبارة اخرى كيف يمكن للسبينات ان تنشر ترابطها على امتداد واسع جدا في حين ان تفاعلها يقتصر على سبينات الجوار الاقرب فقط. لذلك تتميز تحولات الطور من الرتبة الثانية بطول ترابط يمتد على كامل النظام.

بشكل مشابه يمكن وصف سلوك العديد من الكميات الفيزيائية بجوار Tc بقانون قوة باس مناسب. مثلا تغيرات M بجوار Tc من الاسفل تتحدد باس حرج β وفقا للعلاقة:

$$M(T)\sim(T_c - T)^{\beta} \qquad (14.3)$$

تتنبأ نظرية الحقل المتوسط [1,10]بأن $\beta = 1/2$ في حين أن القيمة الحقيقة في بعدين تساوي 1/8. نتائج طريقة منت كارلو في الشكل 3-4 لا تعطي نتيجة بعيدة جدا عن $\beta = 1/8$ لكنها تعد أقرب بكثير من الطرق الاخرى. نتائج محاكة طريقة منت كارلو على الشبكات الكبيرة جدا تعطي قيم قيربة جدا ل β الحقيقة ولا تختلف عنها الا بـ 1 % .

توصف كذلك الحرارة النوعية والسماحية المغناطيسية بقوانين مشابهة [14,15]:

$$C(T)\sim|T - T_c|^{-\alpha} \qquad (15.3)$$

$$\chi(T)\sim|T - T_c|^{-\gamma} \qquad (16.3)$$

حيث $\alpha = 0$ و$\gamma = -7/4$. لا يعني الاس المعدوم هنا ان التصرف ثابت بل يقصد به ان الحرارة النوعية تتباعد لوغرتميا بجوار Tc. وهذا ناتج فقط عن تعميم شكل قانون $C(T)$ ليناسب مع الشكل العام

للقوانين الاخرى. يتجلى سلوك هذا التباعد في شكل تزايد لقمة $C(T)$ بدلالة L لوغاريتميا: $C_{max}/N \sim \log L.$

مجموعة الاسس γ، ν، α،β الظاهرة في المعادلات السابقة (وأسس اخرى η وd لم نتطرق اليها تحدد كميات مشابهة للأنظمة المختلفة) تندرج ضمن فئات تعرف بالفئات العالمية، الانظمة التي تنتمي الى نفس الفئة العالمية تملك نفس الاسس الحرجة لكمياتها المتباعدة او المتقطعة. الفئة العالمية الواحدة لا تتعلق بالتفاصيل المجهرية لمكونات النظام والتفاعل فيما بينها. بل تتعلق فقط بأبعاد النظام ووسيط الترتيب. في حالة نموذج ايزينغ الاسس معروفة بدقة، والكثير من الفئات الاخرى تمت دراستها بشكل دقيق ومستفيض باستخدام مقاربات تحليلية وعددية على حد سواء. في اغلب الحالات ادق النتائج والتقديرات تنتج من طريقة محاكاة مونتي كارلو.

الاسس الحرجة ليست مستقلة عن بعضها البعض. وفقا للتنبات الرياضية ونتائج نظرية المجموعة المعاد تنضيمها في الاسس الحرجة[14,15]، ترتبط هذه الاسس بالعلاقات:

$$\gamma = \nu(2 - \eta) \qquad (17.3)$$

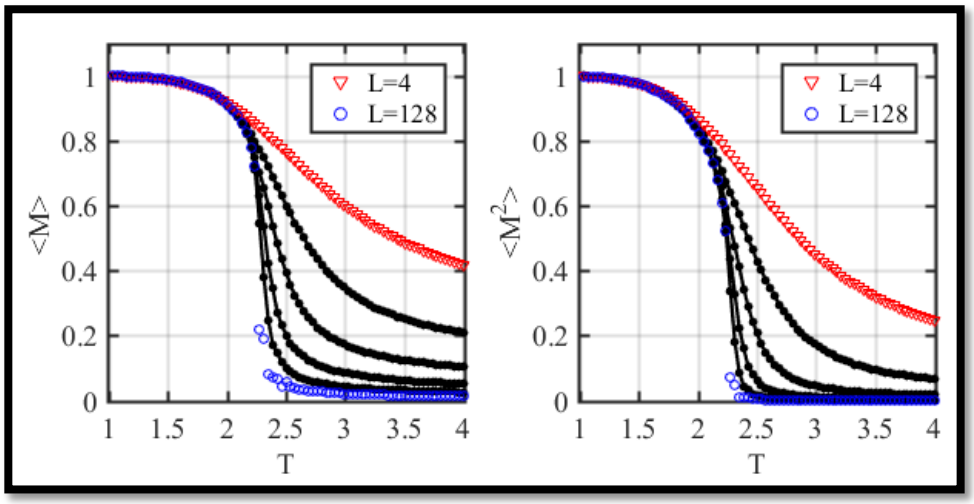
$$\nu d = 2 - \alpha \qquad (18.3)$$

$$\alpha + 2\beta + \gamma = 2 \qquad (19.3)$$

توفر هذه العلاقات اداة مفيدة في التحقق من نتائج المحاكاة.

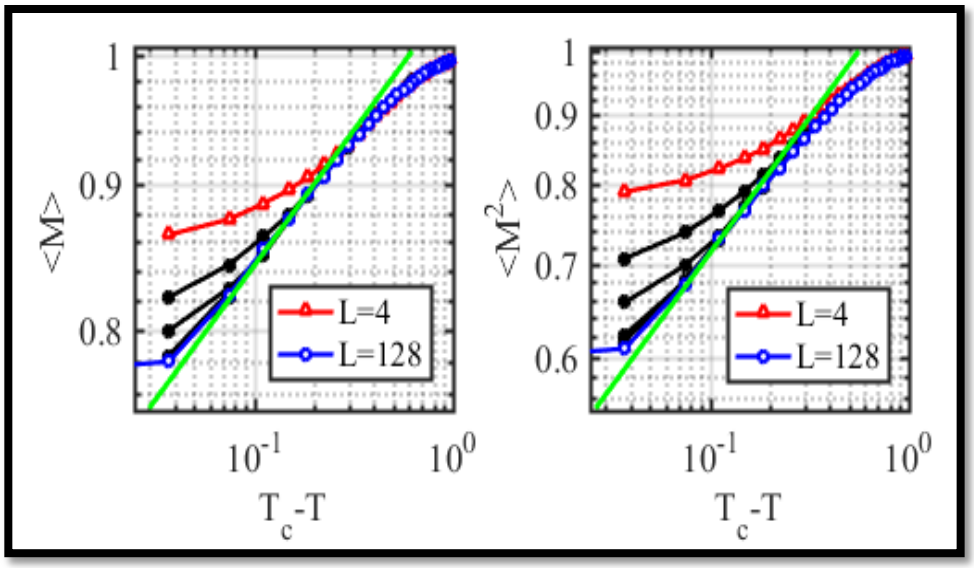
3-4-2-سلوك الابعاد المنتهية

من البديهي في الشبكات والانظمة المحدودة ان طول الترابط لا يفوق ابعاد النظام. وبالتالي القيم المتباعدة مثل الحرارة النوعية والسماحية المغناطيسية تتشبع وتستقر لما يقترب طول الترابط ع من L. كذلك وسيط الترتيب المقاس بـ $< |M| >$ او بـ $\sqrt{< M^2 >}$ لا ينعدم من اجل $T \geq T_C$ بل يعرض تحدبا وتحورا بدلالة درجة الحرارة حول المنطقة التي يفوق فيها طول الترابط الانهائي قيمة L. هذا التحدب في التحول الطوري و الناتج عن الابعاد المحدودة يعرضه الشكل 3-9.



الشكل(3-9): تغيرات المغنطة المتوسطة ومربعها بدلالة درجة الحرارة من اجل شبكات بمقاسات مختلفة بين $L = 4,8,16,32,64,128$. نلاحظ من اجل $L = 128$ تقطعا في الكمية المرصودة واقترابا من سلوك الشبكات الانهائية .

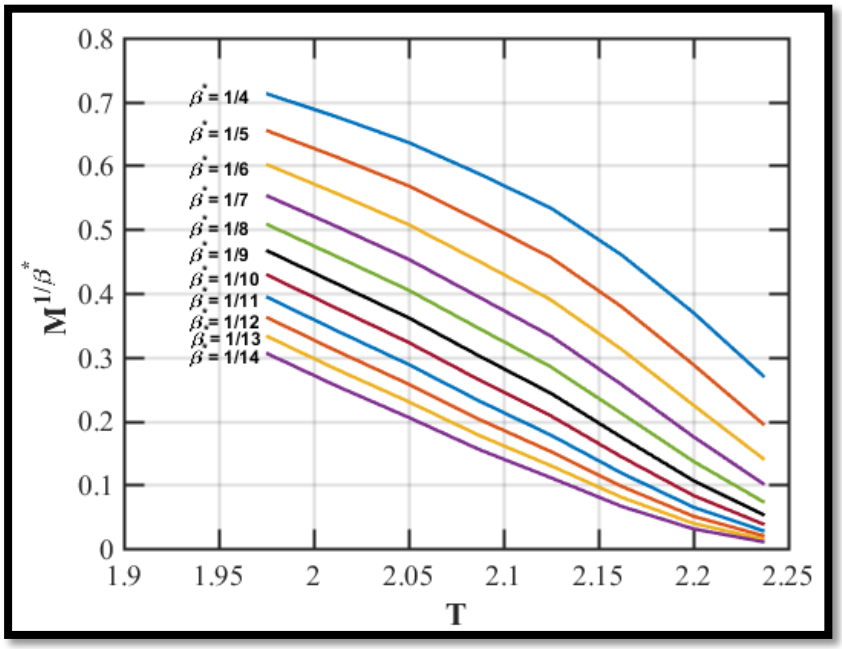
توجد عدة طرق لتقدير الاسس الحرجة من نتائج محاكاة مونتي كارلو. مثلا يمكن محاذاة نتائج محاكاة المغنطة للقانون $M(T)\sim(T_c-T)^{\beta}$ بطريقة التربيعات الدنيا غير الخطية لتقدير β وTc في آن واحد. تطبيق هذه الطريقة مباشرة تعد نوعا ما معقدة، لذلك يفضل استخدامها في الحالة الخطية بمحاذات النتائج للقانون $\log(M)\sim\beta\log(T_c-T)$ وهو خط مستقيم ميله β. لكن يعتري هذا النهج مشكلتين. أولا، ان قيمة Tc غير معروفة مسبقا بل يجب معرفة قيمتها قبل تقدير قيمة β. ثانيا، القانون السابق صالح فقط بجوار النقطة الحرجة، لذلك ستوجد انحرافات عن هذا القانون كلما ابتعدنا بدرجة الحرارة عن Tc ولا يمكن مسبقا معرفة حدود المجال الذي تكون فيه هذه الانحرافات صغيرة. يوجد نهجين لتجنب هذه المشاكل. اولهما يعتمد على رسم $M^{\frac{1}{\beta^*}}$ بدلالة T، حيث β^* تخمين ابتدائي لـ β. برسم هذه المنحنيات لعدة قيم لـ β^* عندها توافق قيمة β القيمة اللتي تنتج خطا مستقيما لما T تؤول الى Tc. تعد هذه الطريقة افضل طريقة لتقدير قيمة β بسبب انها لا تتطلب معرفة Tc وتعتمد فقط على خطية $M^{\frac{1}{\beta^*}}$ بدلالة T. ثانيهما يعمد الى رسم $\log(M)$ بدلالة $\log(T_c-T)$ لمجموعة من القيم التخمينية لـ Tc. القيمة المنشودة لـ Tc هي التي تؤدي الى خط مستقيم مستقيما لما T تؤول الى Tc والذي ميله يحدد قيمة β. للاشارة يمكن استخدام النتائج الدقيقة لنموذج ايزينغ في بعدين: $T_c=2J/\log(1+\sqrt{2})\approx 2.27$ والاسس $\alpha=0,\ \gamma=7/4,\ \beta=1/8,\ \nu=1$ للتحقق من تقارب نتائج الابعاد المحدودة. يعرض الشكل 3-10 نتائج الشكل السابق مرسومة بسلم لوغاترتمي للمحورين ويتضمن الشكل التصرف الخطي المتوقع بخط احظر في حالة الابعاد اللانهائية. نلاحظ من الشكل ان جميع المنحنيات تتقارب من التصرف الخطي المتوقع في المجال $T_c-T<0.2$.



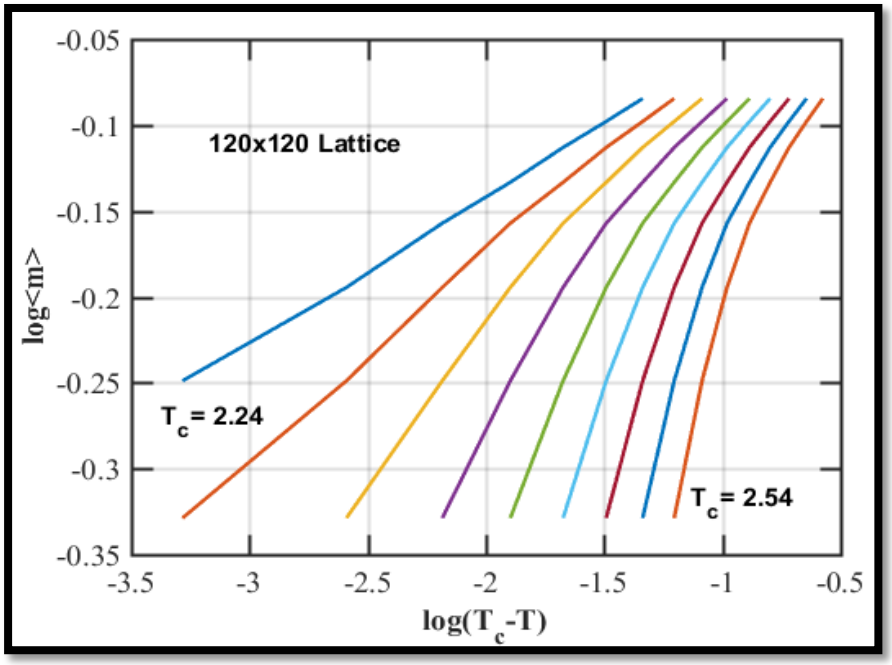
الشكل(3-10): تغيرات المغنطة المتوسطة ومربعها بدلالة T_c-T بسلم لوغارتمي للمحورين و من اجل شبكات بمقاسات مختلفة بين $L=4,8,16,32,64,128$. المستقيم بخط احظر يمثل التصرف الخطي المتوقع في حالة الابعاد اللانهائية: $\log(M)\sim\beta\log(T_c-T)$ و $\log(M^2)\sim2\beta\log(T_c-T)$.

مع ذلك، نلاحظ انه حتى من اجل البعد الكبير $L=128$ نرصد بعض الانحرافات عن التصرف الخطي النهائي المنشود. برفع ابعاد الشبكات يزيد زمن التنفيذ بشكل رهيب و نتوقع تقاربا اكبر وينحصر التحدب الناتج عن الابعاد المحدودة عند الجوار المباشر لـ Tc.

يعرض الشكل(3-11)تقديرا لقيمة β بطريقة $M^{\frac{1}{\beta^*}}$ من اجل $L = 128$. نلاحظ من الشكل ان القيمة المنشودة توافق $\beta^* = \frac{1}{9}$ وهي قريبة من القيمة الدقيقة. للمقارنة نعرض في الشكل 3-12 تقديرا لنفس القيمة بطريقة رسم $\log M$ بدلالة $\log(T_c - T)$. بحساب ميل المستقيم العلوي في هذا الشكل والموافق لـ Tc=2.24 نجد قيمة $\beta^* = 0.058092 \approx 1/12$ وهي قيمة بعيدة نسبيا عن سابقتها لان الطريقة الاولى ادق من هذه الطريقة.



الشكل(3-11): تقديرا لقيمة الاس β بطريقة $M^{\frac{1}{\beta^*}}$ من اجل $L = 128$. القيمة القريبة من الاسس الحقيقي توافق المستقيم الاسود بـ $\beta^* = 1/9$.



الشكل(3-12): تقديرا لقيمة الاس β ودرجة الحرارة الحرجة بطريقة $\log M$ من اجل $L = 128$. القيمة القريبة من الاسس الحقيقي توافق المستقيم الازرق العلوي بـ $\beta^* \approx 1/12$ و Tc=2.24.

اساس انحراف سلوك الابعاد المنتهية عن سلوك نظيراتها اللانهائية يتجلى حينما يقترب طول الترابط ξ من ابعاد النظام L. لدراسة تاثير هذا الانحراف على الكميات الفيزيائية نعبر عن تبعيتها لدرجة الحرارة بدلالة طول الترابط كمتغير. لهذه الغاية، نجد من المعادلة (13.3) :

$$|T - T_c| \sim \xi^{-1/\nu} \qquad (20.3)$$

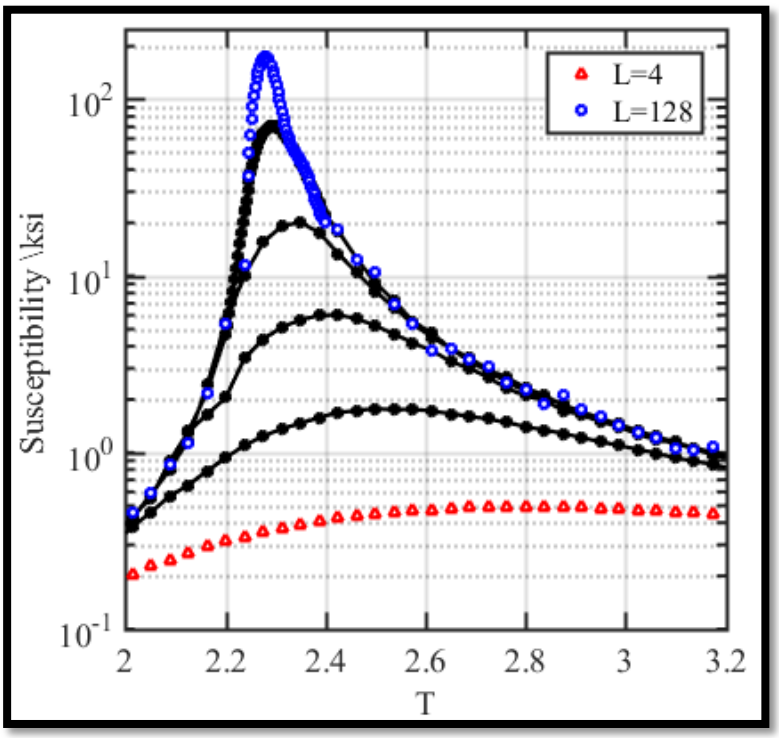
ومنه مثلا نعبر عن قانون السماحية المغناطيسية بالشكل:

$$\chi(\xi) \sim \xi^{\frac{\gamma}{\nu}} \qquad (21.3)$$

بهذا الشكل يمكن ان نحدد القيمة العظمى للسماحية بدلالة مقاس النظام L:

$$\chi(L) \sim L^{\frac{\gamma}{\nu}} \qquad (22.3)$$

يعرض الشكل تغيرات السماحية المغناطيسية بدلالة درجة الحرارة ولشبكات قي بعدين بقيم مختلفة للبعد L .بما ان قمة χ تزداد بشكل سريع جدا بدلالة L بسبب الاس الكبير $\gamma/\nu = 7/4$ الظاهر في المعادلة 22-3 يفضل استخدام سلم لوغارتمي لـ χ.



الشكل(3-13): السماحية المغناطيسية بدلالة درجة الحرارة ولشبكات قي بعدين بمقاسات مختلفة: $L =$ 4,8,16,32,64,128.

اذا اردنا ان ندرس نموذجا معينا وارتاينا ان نقدر له الاسس الحرجة و Tc، نكتب المعادلة(3-23)بالشكل $\log \chi(L) = a + \frac{\gamma}{\nu} \log (L)$ ثم نقدر النسبة $\frac{\gamma}{\nu}$ عن طريق محاذات خطية للوغارتم قمم $\chi(L)$.

كذلك وباختيارمناسب لـ Tc تكون من اجله الكمية $\log [|T - T_c|_{max}(L)]$ دالة خطية للمتغير $\log (L)$ يمكن ان نقدر ν ثم Tc ومن ثم γ باستخدام $\frac{\gamma}{\nu}$.

الخلاصة العامة

الخلاصة العامة

من خلال دراستنا لهذا العمل يمكننا الخروج بنقاط تتضمن خلاصة لكل فصل اهم هذه النقاط هي :

- ✓ فيما يخص الفصل الأول قمنا بتوضيح وشرح ظاهرة الإنتقالات الطورية كما وقفنا على بعض المفاهيم الأساسية المتمثلة في إنكسار التناضر و وسيط الترتيب والعالمية و الأسس الحرجة وعلاقتها بالدوال الترموديناميكية.
- ✓ أما فيما يخص الفصل الثاني فقد قمنا بالتفصيل في المجموعة القانونية الصغرى ورأينا أن الدراسة في مثل هذا الإطار تتم في حالات الطاقة الغير ثابتة، لذالك لا يمكننا الإستغناء على المجموعة القانونية لأنها الأكثر ملائمة .
- ✓ أما في الفصل الأخير فقد تطرقنا إلي تقدير الأسس الحرجة لنموذج ايزينغ إنطلاقا من نتائج محاكاته بطريقة مونتي كارلو بإستخدام خوارزمية ميتروبولس ،هذه الأسس الحرجة تتبع قوانين قوة بجوار النقطة الحرجة، وفي تقديريها إعتمدنا على عدة طرق منها طريقة $N^{\frac{1}{\beta}}$ وطريقة رسم وطريقة السلم اللوغارتمي للمحورين وتم الحصول على نتائج قريبة من الأسس الحقيقية في حدود أبعاد الشبكات الممكن محاكاتها بالحواسيب المتوفرة لدينا .

قائمة المصادر

قائمة المصادر

[1]Christian Ngô,Docteur ès sciences - Agrégé de l'université
Hélène Ngô ,Docteur ès sciences - Agrégée de l'université " Physique Statistique Introduction(3èdition) ", Dunod ,Paris,350 , 2008

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

[3]–التر موديناميك والميكانيك الاحصائي ,باديس يدري, معهد الفيزياء ,جامعة باجي مختار,عنابة ,الجزائر ,2015.

[4]M .Le Bellac,"Quantum and statistical Field Theory",oxford Science Publications,New York,606,1991.

[5] Kittel .C,introduction to solid state physics ,(6th edn).Wiley,New York .(1989).

[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 - 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.

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

[17] رجاء ضيف الله "الدراسة العددية لنموذج ايزينغ "،مذكرة ماستر،جامعة الوادي ، 2018/2017

[18]Morten Hjorth –Jensen ,"Computational Physics" ,University of Oslo 2011.

الملخص :

الهدف من هذه المذكرة هو دراسة الإنتقالات الطورية من الدرجة الثانية ،والتي تعرف بالظواهر الحرجة ، وقد خصصت الدراسة على الإنتقال الفيرومغناطيسي -البرامغناطيسي، لأنه المثال الأكثر

شيوعا.يعتبر نموذج ايزينغ نموذجا بالغ الأهمية لأنه المثال الأساسي للفيرومغناطيسية .تحتوي هذه المذكرة على ثلاث فصول ،الفصل الأول مخصص للمفاهيم العامة للإنتقالات الطورية،أما الثاني فقد خصص لدراسة المجموعة القانونية .أخيرا ،الفصل الثالث وهو الجزأ الأساسي في هذه المذكرة ،تم تخصيصه لدراسة عددية تم من خلالها تقدير الأسس الحرجة في نموذج ايزينغ إنطلاقا من نتائج محاكاته بطريقة مونتي كارلو بإستخدام خوارزمية ميتروبولس .

الكلمات المفتاحية :

الإنتقالات الطورية- الإنتقال الفيرومغناطيسي -البرامغناطيسي- الأسس الحرجة- نموذج ايزينغ - مونتي كارلو

الملخص :

الهدف من هذه المذكرة هو دراسة الإنتقالات الطورية من الدرجة الثانية ،والتي تعرف بالظواهر الحرجة ، وقد خصصت الدراسة على الإنتقال الفيرومغناطيسي -البرامغناطيسي، لأنه المثال الأكثر شيوعا.يعتبر نموذج ايزينغ نموذجا بالغ الأهمية لأنه المثال الأساسي للفيرومغناطيسية .

تحتوي هذه المذكرة على ثلاث فصول ،الفصل الأول مخصص للمفاهيم العامة للإنتقالات الطورية،أما الثاني فقد خصص لدراسة المجموعة القانونية .أخيرا ،الفصل الثالث وهو الجزأ الأساسي في هذه المذكرة ،تم تخصيصه لدراسة عددية تم من خلالها تقدير الأسس الحرجة في نموذج ايزينغ إنطلاقا من نتائج محاكاته بطريقة مونتي كارلو بإستخدام خوارزمية ميتروبولس .

الكلمات المفتاحية :

الإنتقالات الطورية- الإنتقال الفيرومغناطيسي -البرامغناطيسي- الأسس الحرجة- نموذج ايزينغ -مونتي كارلو

Summary :

The purpose of this memoir is to study phase transitions of the second class, known as critical phenomena, and the study is devoted to the electromagnetic-magnetic transmission, because it is the most common example. The Eising model is a very important model because it is the basic example of electromagnetic .This memoir contains three chapters, which is the main part of this memoior, was devoted to a numerical study in which the critical foundations of the Eizing model were assessed based on the results of simulated by Monte Carlo using the Metropolis algorithm.

key words :

Transient transitions - electromagnetic - electromagnetic - critical foundations - Eising model - Monte Carlo