# מכניקה סטטיסטית - תרגיל 5

**תאריך הגשה : 18.6.2013**

## 1 מודל איזינג בקירוב השדה הממוצע

בשיעור האחרון עסקנו במודל איזינג (Ising), וחישבנו את תכונותיו תחת קירוב השדה הממוצע. כעת נרצה לפתור בעיה דומה אך מעט יותר מסובכת. נעסוק בשריג המורכב מ-$L$ אתרים, כשכל אחד יכול להיות בשלושה מצבים $\sigma_i = -1, 0, 1$. לכל אתר יש $2d$ שכנים קרובים, כאשר $d$ מסמן את המימד המרחבי של השריג. ההמילטוניאן של המערכת מוגדר כ-

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

כאשר הסכום על $\langle i,j \rangle$ מסמן סכום על כל האתרים $i,j$ שהם שכנים קרובים. את המודל ננתח בצבר הקנוני.

1. כפי שעשינו בכיתה, נבצע את קירוב השדה הממוצע לפיו כל אתר עושה אינטראקציה עם ספין ממוצע שערכו $m$, כך ש-$\sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j \approx 2d \sum m \sigma_i$. רשמו את ההמילטוניאן המקורב וחשבו את פונקציה החלוקה כפונקציה של הפרמטר $m$.

2. חשבו את המגנטיזציה הממוצעת של האתר הראשון

$$\langle \sigma_1 \rangle = 1 \cdot P(\sigma_1 = 1) + 0 \cdot P(\sigma_1 = 0) - 1 \cdot P(\sigma_1 = -1).$$

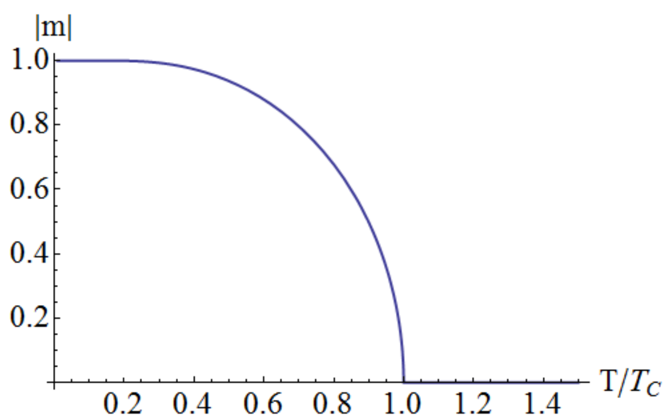
המגנטיזציה באתר זה צריכה משיקולי סימטריה להיות שווה למגנטיזציה בכל אתר. יותר חשוב מזה, היא צריכה להיות שווה ל-$m$ כדי שהקירוב שלנו יהיה עקבי. הוציא מהתנאי האחרון משוואה שתגדיר את ערכו של $m$ כתלות בטמפ'. המשוואה אמור להיות מהצורה

$$g(x) = Ax$$

כאשר $x = 2\beta J d m$. מיצאו את הקבוע $A$ ואת הצורה של הפונקציה $g(x)$.

3. בדקו ש-$x = 0$ הוא פתרון של המשוואה. שרטטו את הפונקציה $g(x)$ ורישמו במילים מהו התנאי ש-$x = 0$ הוא גם הפתרון היחיד של המשוואה. כדי לבדוק את התנאי הזה מתמטית עליכם לפתח את $g(x)$ סביב $x = 0$ עד לסדר $x$. הטמפ' בה $x = 0$ מפסיק להיות הפתרון היחיד היא הטמפ' הקריטית של המערכת, $T_c$. מהי הטמפ' הקריטית ?

4. כעת נרצה לבדוק את התלות של המגנטיזציה בטמפ' קצת מתחת למעבר. לשם כך נסתכל על טמפ' מהצורה $T = T_c(1 - \Delta)$. פתחו את המשוואה $g(x) = Ax$ סביב $x = 0$ עד לסדר $x^3$ וסביב $\Delta = 0$ עד לסדר ראשון ב-$\Delta$. חשבו מתוך הפתרון את $m(\Delta)$ בסביבת הנקודה הקריטית.




זהו השרטוט המלא של המגנטיזציה הממוצעת כפונקציה של הטמפ'. אתם חישבתם את הטמפ' הקריטית לפיה מנורמל הציר האופקי ואת ההתנהגות של המגנטיזציה ליד הטמפ' הקריטית.

## 2 מעבר פאזה במודל ריצ'רץ' ל-DNA

בתרגיל זה נחקור מודל פשטני ביותר של מולקולת DNA, ונראה שבטמפ' מסוימת ישנו מעבר פאזה בין המצב המוכר של סליל כפול המורכב משני גדילים, לבין מצב שבו הגדילים נפרדים זה מזה (מעבר פאזה זה נקרא מעבר דֶנָטורציה, ובמולקולות DNA אמיתיות הוא אכן מתרחש בטמפ' של בערך $90°C$). מטרת התרגיל להדגים כיצד באופן מתמטי מתקבלים מעברי פאזה בפיסיקה סטטיסטית קלאסית. התרגיל יכלול חישוב לא מסובך ביותר של מכניקה סטטיסטית קלאסית בצבר הקנוני.

את מולקולת ה-DNA נמדל (באופן לא מאוד ריאליסטי) כריצ'רץ': זוג הגדילים יכול להיפתח רק מקצה אחד, כך שכל הקשרים בין הגדילים עד נקודה מסוימת פתוחים, וכל הקשרים החל מנקודה זו ואילך סגורים (ראו איור בתחתית). נסמן ב-$N$ את מספר הקשרים (הפתוחים והסגורים) הכולל, וב-$n$ את מיקום הריצ'רץ' (כלומר, את מספר הקשרים הפתוחים). נניח כי לקשר סגור אפס אנרגיה, ואילו לקשר פתוח אנרגיה $\varepsilon > 0$. בנוסף, נניח כי קשר פתוח יכול להימצא באחד מ-$g$ מצבים שונים (בעלי אותה אנרגיה). בדרך זו אנו מביאים בחשבון (באופן גס מאוד) כי כל קשר פתוח מאפשר לגדילים גמישות גדולה יותר מאשר קשר סגור, ולכן לקשרים פתוחים יש יותר מצבים אפשריים מקשרים סגורים. הריצ'רץ' מצומד לאמבט חום בטמפ' $T$.

1. עבור $N \gg 1$ חשבו את פונקציית החלוקה של הריצ'רץ'. שימו לב שעבור טמפ' שונות אתם עשויים לקבל ביטוי אחר לחלוטין.

2. הראו כי מספר הקשרים הפתוחים הממוצע ניתן על ידי

$$\langle n \rangle = -\frac{1}{\beta}\frac{\partial \ln Z}{\partial \varepsilon}.$$

חשבו את אחוז הקשרים הפתוחים הממוצע $x \equiv \langle n \rangle / N$ בגבול $N \to \infty$ (באופן שקול, $x$ הוא המיקום היחסי הממוצע של הריצ'רץ'). הראו כי קיימת טמפ' קריטית אשר מתחתיה $x = 0$ (הריצ'רץ' סגור לגמרי) ומעליה $x = 1$ (הריצ'רץ' פתוח לגמרי). מיצאו את הטמפ' הקריטית, $T_c$.

3. אנו רואים שכאשר הטמפ' משתנה שינוי מזערי בין $T_c - \Delta T$ לבין $T_c + \Delta T$ (עבור $\Delta T$ קטן כרצוננו), מיקום הריצ'רץ' קופץ באופן לא רציף. קפיצה אי־רציפה זו של $x$ היא סימן היכר של מעבר פאזה. במערכת בגודל סופי, הקפיצה ב-$x$ כתלות בטמפ' רציפה אך חדה מאוד. לשם כך ציירו את $x$ בעזרת אקסל או כל תוכנה אחרת (לדוגמא www.wolframalpha.com) עבור $N = 5, 10, 20$ רצוי באותו הגרף עבור טמפ' שנמצאות בסביבת הטמפ' הקריטית. לשם השרטוט נבחר את ערכי הפרמטרים להיות $\epsilon = 1$, $g = 10$ ו־ $k_B = 1$.
תופעה זו נכונה באופן כללי: קפיצות אי־רציפות ממש קיימות רק במערכות בגודל אינסופי. עם זאת, במערכות סופיות אך גדולות מספיק, הקפיצה הרציפה כה חדה שבאופן מעשי לא ניתן להבדיל בינה לבין קפיצה אי־רציפה.

הערה: את הערך של הטמפ' הקריטית ניתן להבין באופן אינטואיטיבי על ידי השוואת ה"מחיר" האנרגטי של קשר פתוח עם ה"רווח" האנטרופי שלו. על כל קשר פתוח "משלמים" אנרגיה של $\varepsilon$, אך "מרוויחים" אנטרופיה של $s = k_B \ln g$ (שכן יש $g$ מצבים אפשריים לקשר הפתוח). מעבר הפאזה מתקבל כאשר $\varepsilon \approx Ts$ (זהו כמובן שיקול מאוד איכותי ולא ניתן להשתמש בו כדי למצוא ביטוי נכון לטמפ' הקריטית). כפי שמתרחש לרוב בפיסיקה סטטיסטית, התנהגות המערכת בגבול התרמודינמי נקבעת על ידי התחרות שבין האנרגיה לאנטרופיה. אולם במערכות שבהן נתקלנו בעבר, תחרות זאת בין האנרגיה לאנטרופיה לא הולידה מעברי פאזה. מדוע כאן היא כן? הסיבה היא שעד היום נתקלנו לרוב במערכות ללא אינטראקציות, שבהן המצב של כל חלקיק נקבע באופן בלתי תלוי במצב האחרים. בשל כך, התנהגות המערכת הממוצעת משתנה באופן רציף עם שינוי הטמפ'. במערכת שלנו, האילוץ שמחייב את כל הקשרים מלבד אחד להתנהג בדיוק כמו שכניהם יוצר אינטראקציה בין הקשרים השונים, והיא זו שמאפשרת את מעבר הפאזה.