מכניקה סטטיסטית - תרגיל 5

תאריך הגשה : 18.6.2015

1 מעבר פאזה בגז ואן דר ואלס

בתרגיל זה נחשב את נקודת מעבר הפאזה בגז ואן דר ואלס ונראה כיצד הקשר בין נפח ולחץ מתנהגים סביב המעבר. כזכור, משוואת המצב של גז ואן דר ואלס היא

$$\left(P+\frac{a}{v^2}\right)(v-b)=k_BT \tag{1}$$

כאשר $v=\frac{V}{N}$ הוא הנפח לחלקיק. נרצה למצוא את טמפרטורת המעבר T_c, המוגדרת כטמפרטורה שמעליה $(T>T_c)$ הפונקציה $P(v)$ היא מונוטונית ומתחתיה $(T<T_c)$ לפונקציה מקסימום ומינימום. בטמפרטורה הקריטית T_c ל$P(v)$ יש נקודת פיתול עבור הנפח v_c וערכה בהתאמה הוא $P_c=P(v_c)$.

בכדי למצוא את נקודת הפיתול אפשר פשוט לדרוש שעבור $T=T_c$ ו $v=v_c$ שתי הנגזרות הראשונות של הפונקצייה $P(v)$ יתאפסו. במקרה של גז ואן דר ואלס המשוואות המתאימות הן ממעלה 3 ו4, ולכן קשות לפתרון (למרות שבשימוש בטריק מסויים אפשר לפתור אותן בקלות). לכן במקום זאת אנו מציעים דרך חלופית שקולה - וכללית יותר - לפתרון:

1. ראשית, כהכנה, כיתבו את פיתוח טיילור של הפונקציה $\frac{1}{(1+x)^2}$ עד לסדר שני (x^2). ניתן להשתמש בכך ש

$$\frac{1}{1-x}=1+x+x^2+O\left(x^3\right)$$

(סכום של סדרה הנדסית). שימו לב שאתם מתחשבים בשתי התרומות לאיבר מסדר שני.

2. בהנתן $T=T_c$ משוואה (1) מגדירה קשר בין P ל v. כדי לפתח את הקשר סביב נקודת הפיתול נגדיר $v=v_c+\delta v$ ו $P=P_c+\delta p$, ונצפה ש $\delta p=O\left(\delta v^3\right)$ (בגלל שזו נקודת פיתול, ולכן האיבר הלינארי והריבועי מתאפסים). הציבו את v ו P הנ"ל במשוואת המצב (1) ופתחו אותה לסדר שני ב δv (ולכן δp לא יופיע). התוצאה אמורה להראות כך

$$A+B\delta v+C\delta v^2+O\left(\delta v^3\right)=k_BT_c \tag{2}$$

(עליכם למצוא את A, B ו C)

3. מכיוון ש δv הוא כללי, כל סדר בפיתוח מגדיר משוואה סגורה. למשל, בצד ימין של המשוואה לא מופיע איבר הכופל את δv ואילו בצד שמאל המקדם הוא B, ולכן המשוואה הנובעת מסדר זה היא $B=0$. כיתבו את שלוש המשוואות הנובעות מפיתוח (2)

4. פתרו את שלוש המשוואות ומצאו את T_c, P_c ו v_c כפונקצייה של a ו b.

5. כתבו במפורש את הפונקצייה $P(v)$. בעזרת אקסל או תוכנה אחרת, יצרו גרפים של P כפונקציה של v עבור הפרמטרים $a=b=1$ בתחום $v\in[2,6]$ עבור 2 ערכי טמפרטורה מעל המעבר $(T>T_c)$, 2 ערכי טמפרטורה מתחת למעבר $(T<T_c)$ ועבור נקודת המעבר. כדאי לעבוד עם טמפרטורות החורגות בלא יותר מ10% מT_c (סעיף זה מהווה גם בדיקה מצויינת לתשובה של הסעיף הקודם).

2 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 בסריג המורכב מ-N אתרים, כשכל אחד יכול להיות בשלושה מצבים $\sigma_i=-1,0,1$. לכל אתר יש $2d$ שכנים קרובים, כאשר d מסמן את המימד של הסריג. 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 $\langle\sigma_j\rangle=m$, כך שההמילטוניאן של הספין ה-i ושכניו הקרובים הוא: $H_i=-J\sigma_i\sum_{j=1}^{2d}\sigma_j\approx-J2dm\sigma_i$. השתמשו בהמילטוניאן המקורב וחשבו את פונקציה החלוקה כפונקציה של הפרמטר m.

2. חשבו את המגנטיזציה הממוצעת של האתר הראשון

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

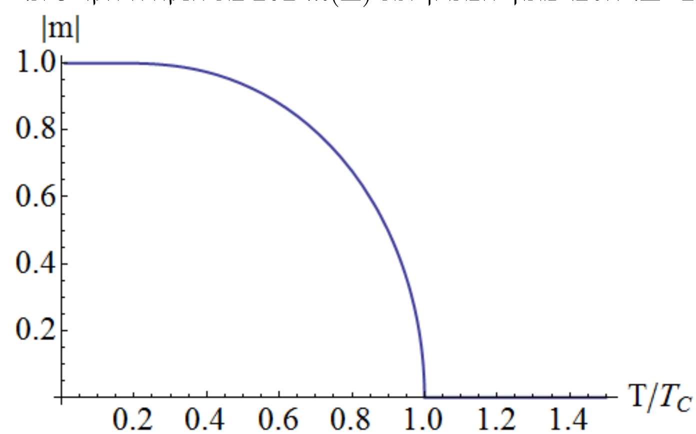
המגנטיזציה באתר זה צריכה משיקולי סימטריה להיות שווה למגנטיזציה בכל אתר. יותר חשוב מכך, היא צריכה להיות שווה ל־m כדי שהקירוב שלנו יהיה עקבי. הוציאו מהתנאי האחרון משוואה שתגדיר את ערכו של m כתלות בטמפ'. המשוואה אמורה להיות מהצורה

$$g(x) = Ax$$

כאשר $x = 2\beta Jdm$. 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 $T = T_c(1-\Delta)$ כאשר $\Delta \ll 1$ ולכן גם $m \ll 1$. פתחו את המשוואה $g(x) = Ax$ סביב $x=0$ עד לסדר x^3 וסביב $\Delta = 0$ עד לסדר ראשון ב־ Δ. 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.

5. בסעיף זה נחשב את הסוספטביליות המגנטית בקרבת מעבר הפאזה. הסוספטביליות המגנטית מתארת את התגובה של המגנטיזציה לשדה מגנטי חיצוני חלש h. היא מוגדרת ע"י: $\chi = \frac{\partial M}{\partial h}|_{h=0}$. לשם כך נוסיף שדה מגנטי להמילטוניאן, כלומר: $\mathcal{H} = -J\sum_{\langle i,j\rangle}\sigma_i\sigma_j - h\sum_i \sigma_i$.

- חיזרו על סעיפים 1 ו־2 וקבלו משוואה עבור m (התלויה ב־h).
- פתחו את הפונקציה $g(x)$ לסדר ראשון ב־m ו־h קטנים (m קטן מכיוון שנרצה לחקור את ההתנהגות ליד מעבר הפאזה, h קטן מכיוון שנרצה לחשב את הסוספטביליות), וקבלו ביטוי ל־ $m(h)$.
- חשבו את הסוספטביליות ובטאו אותה כפונקציה של $t \equiv T - T_c$.