מודל איזינג חד מימדי

4.6.15

1 הקדמה

כמו שדובר בכיתה, מגנטיות הינה תופעה המלווה במעבר פאזה, שבו המגנט "בוחר" כיוון בצורה ספונטנית, ולכן התופעה נקראת שבירת סימטריה. מעבר לעניין הפיסיקלי בתופעת המגנטיות, מעבר פאזה מסוג זה מאוד נפוץ במערכות שונות והמודלים שנבנו כדי להסביר את תופעת המגנטיות נמצאו מועילים בהסבר - לפחות איכותי - של שלל תופעות אחרות. מודל אחד כזה - אולי הפשוט ביותר - הוא מודל איזינג, שבו "ספינים קלאסיים" (דרגות חופש בינאריות) באינטראקציה רק עם שכיניהם הקרובים (המודל מוגדר בסעיף הבא במדויק). בטמפרטורה אפס, המערכת תמצא במצב היסוד שלה, אבל במודל זה המצב "מנוון" - כל הספינים מצביעים באותו כיוון, אבל הכיוון יכול להיות או למעלה או למטה. שני מצבים אלה הם מצבים מסודרים, ולכן בטמפרטורה אפס, המערכת מסודרת. בטמפרטורה גבוהה, האנרגיה מאבדת מחשיבותה והמצב (המקרוסקופי) נקבע לפי מקסימום אנטרופיה, שהוא מצב בו המגנטיזציה היא אפס (למעשה, זהו המצב בו כל המיקרו־מצבים הם שווי הסתברות). השאלה היא מהי הטמפרטורה שבה המערכת עוברת ממצב מסודר (חלקית) למצב לא מסודר. בתרגול זה, נראה שבמודל החד מימדי, המעבר קורה בטמפרטורה אפס, כלומר עבור כל טמפרטורה סופית המערכת אינה מסודרת (במובן שספינים רחוקים מספיק הם בלתי תלויים, כמו שנגדיר בהמשך).

2 המודל

מודל איזינג מוגדר החד מימדי מוגדר על סריג חד מימדי (שרשרת) שבכל אתר סריג יש ספין $s_i \in \{-1, 1\}$, והאנרגיה של המערכת נתונה על ידי ההמילטוניאן

$$H = -J\sum_{i=1}^{N-1} s_i s_{i+1} - h\sum_{i=1}^{N} s_i \tag{1}$$

כאשר J הוא חוזק האינטראקציה בין הספינים, ו h הוא השדה המגנטי. בתרגול זה נפתור את המודל (נמצא את פונקציית החלוקה שלו) עבור המקרה $h = 0$ (כי זה יותר פשוט) למרות שיש פתרון מדוייק עבור כל h. כמו כן, לצורכי החישוב בהמשך, נתייחס למודל כללי יותר בו חוזק האינטראקציה יכול להיות תלוי באתר, כלומר ההמילטוניאן אליו נתייחס הוא

$$H = -\sum_{i=1}^{N-1} J_i s_i s_{i+1} \tag{2}$$

3 חישוב פונקציית החלוקה

בצבר הקנוני פונקציית החלוקה נתונה על ידי

$$Z(N) = \sum_{s_1}\sum_{s_2}\dots\sum_{s_N} e^{-\beta H} \tag{3}$$

כאשר כל סכום הוא על שני ערכים (± 1). ראשית נסכום על s_N, כלומר

$$\begin{aligned}
Z(N) &= \sum_{s_1}\sum_{s_2}\dots\sum_{s_{N-1}}\sum_{s_N}\exp\left(\beta\sum_{i=1}^{N-2} J_i s_i s_{i+1} + \beta J_{N-1}s_{N-1}s_N\right) \\
&= \sum_{s_1}\sum_{s_2}\dots\sum_{s_{N-1}}\exp\left(\beta\sum_{i=1}^{N-2} J_i s_i s_{i+1}\right)\left[\exp\left(\beta J_{N-1}s_{N-1}(-1)\right) + \exp\left(\beta J_{N-1}s_{N-1}(1)\right)\right] \\
&= \sum_{s_1}\sum_{s_2}\dots\sum_{s_{N-1}}\exp\left(\beta\sum_{i=1}^{N-2} J_i s_i s_{i+1}\right) 2\cosh\left(\beta J_{N-1}s_{N-1}\right)
\end{aligned} \tag{4}$$

מכיוון ש cosh היא פונקצייה סימטרית, יש לה אותו ערך אם s_{N-1} הוא $+1$ או -1, כלומר $\cosh\left(\beta J_{N-1}s_{N-1}\right)=\cosh\left(\beta J_{N-1}\right)$ ולכן

$$\begin{aligned} Z\left(N\right) &= 2\cosh\left(\beta J_{N-1}\right)\sum_{s_1}\sum_{s_2}...\sum_{s_{N-1}}\exp\left(\beta\sum_{i=1}^{N-2}J_is_is_{i+1}\right) \\ &= 2\cosh\left(\beta J_{N-1}\right)Z\left(N-1\right) \end{aligned} \tag{5}$$

קיבלנו נוסחת רקורסיה עבור $Z\left(N\right)$. עבור $N=2$ אנחנו מקבלים

$$\begin{aligned} Z\left(2\right) &= e^{\beta J_1(1\times1)}+e^{\beta J_1(-1\times1)}+e^{\beta J_1(1\times-1)}+e^{\beta J_1(-1\times-1)} \\ &= 4\cosh\left(\beta J_1\right) \end{aligned}$$

ולכן פתרון נוסחת הרקורסיה

$$Z\left(N\right)=2^N\prod_{i=1}^{N-1}\cosh\left(\beta J_i\right) \tag{6}$$

כאשר חוזק האינטראקציה איננו תלוי באתר ($J_i=J$) אנו מקבלים

$$Z\left(N\right)=2^N\cosh\left(\beta J\right)^{N-1} \tag{7}$$

4 גדלים נגזרים

בהנתן פונקציית החלוקה אפשר לחשב גדלים רבים אחרים. למשל, נראה מיד שהאנרגיה החופשית אנליטית (גזירה לכל סדר) ולכן אין מעבר פאזה.

4.1 אנרגיה חופשית

במקרה בו חוזק האינטראקציה קבוע, האנרגיה החופשית נתונה על ידי

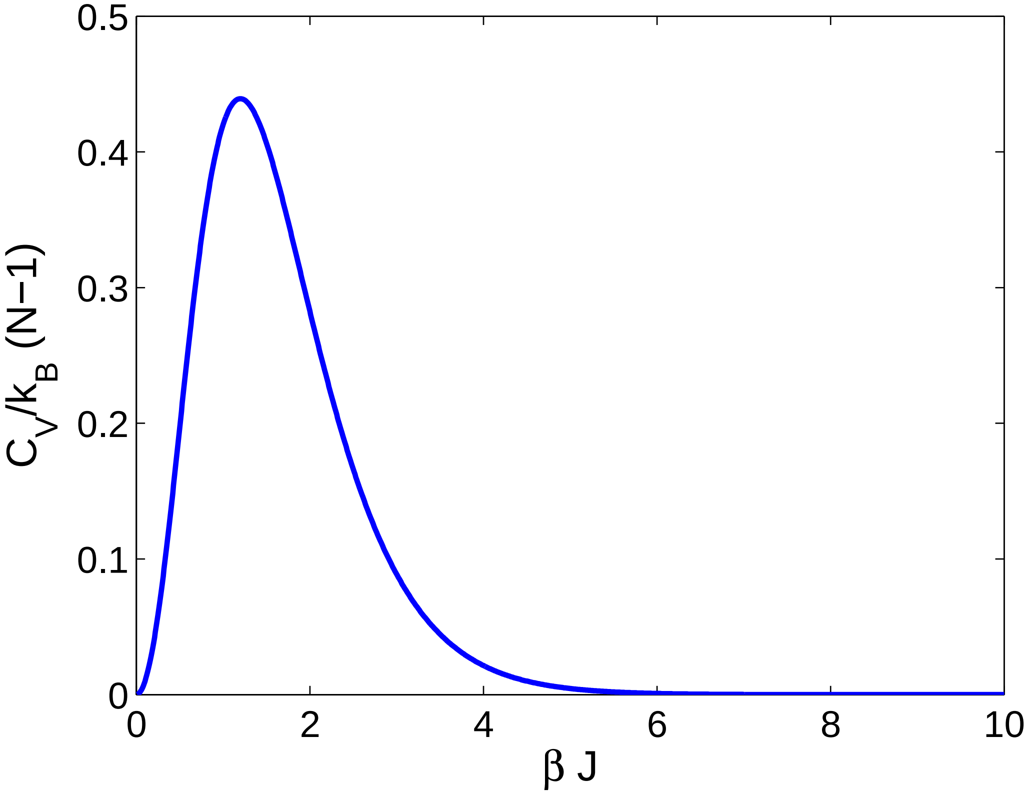
$$F=-k_BT\log Z=-k_BTN\log2-k_BTN\log\left(\cosh\left(\beta J\right)\right) \tag{8}$$

האנרגיה החופשית היא פונקצייה אנליטית של כל הפרמטרים ולכן אין מעבר פאזה. שימו לב שהאנרגיה החופשית מתבדרת כאשר $T\to0$ (מכיוון ש $\cosh\left(J/k_BT\right)\to\cosh\left(\infty\right)\to\infty$), ואכן, כפי שציינו בהתחלה, אפשר לחשוב על $T=0$ כנקודת מעבר הפאזה.

4.2 אנרגיה וקיבול חום

האנרגיה של המערכת נתונה על ידי

$$\begin{aligned} \left\langle E\right\rangle &= -\frac{\partial\log Z}{\partial\beta} \\ &= -\left(N-1\right)\frac{\partial}{\partial\beta}\log\left[\cosh\left(\beta J\right)\right] \\ &= -\left(N-1\right)J\frac{\sinh\left(\beta J\right)}{\cosh\left(\beta J\right)} \\ &= -\left(N-1\right)J\tanh(\beta J) \end{aligned} \tag{9}$$



איור 1: קיבול החום הסגולי כפונקציה של הטמפרטורה (כאשר חוזק האינטראקציה קבוע)

קיבול החום הוא

$$
\begin{aligned}
C_V &= \frac{\partial E}{\partial T} \\
&= -\left(N-1\right) J \frac{d\beta}{dT}\frac{\partial}{\partial\beta}\left[\frac{\sinh(\beta J)}{\cosh(\beta J)}\right] \\
&= \left(N-1\right)\frac{J}{k_B T^2} J \left[\frac{\cosh(\beta J)^2-\sinh(\beta J)^2}{\cosh(\beta J)^2}\right] \\
&= k_B\left(N-1\right)\left(\frac{\beta J}{\cosh\left(\beta J\right)}\right)^2 \qquad (10)
\end{aligned}
$$

קיבול החום הסגולי מופיע באיור 1. ניתן לראות שבטמפרטורות גבוהות ונמוכות קיבול החום קטן, ויש לו מקסימום כאשר $\beta J \sim 1$. זהו מצב דומה למערכת שתי רמות שראינו בתרגול קודם.

4.3 פונקציית קורלציה

בצורה דומה אפשר לחשב את פונקציית הקורלציה בין שני ספינים סמוכים:

$$C_k(1) \equiv \langle s_k s_{k+1} \rangle$$

$$
\begin{aligned}
&= \frac{1}{Z}\sum_{s_1}\sum_{s_2}...\sum_{s_{N-1}}\sum_{s_N} s_k s_{k+1} e^{-\beta H} = \frac{1}{Z}\sum_{s_1}\sum_{s_2}...\sum_{s_{N-1}}\sum_{s_N} s_k s_{k+1} e^{\beta \sum_{i=1}^{N-1} J_i s_i s_{i+1}} \\
&= \frac{\partial \log Z}{\partial(\beta J_k)} = \tanh(\beta J_k) \qquad (11)
\end{aligned}
$$

שימו לב שבעקרון פונקציית הקורלציה היא $C_k(1) = \langle s_k s_{k+1}\rangle - \langle s_k\rangle\langle s_{k+1}\rangle$ אבל מסימטריה נובע $\langle s_k\rangle = 0$ לכל k. כאשר הטמפרטורה שואפת לאינסוף, $C_k(1) \to \tanh(0) = 0$ וכאשר הטמפרטורה שואפת לאפס, $C_k(1) \to \tanh(\infty) = 1$. כדי ללמוד האם המערכת הופכת למסודרת בטמפרטורה כלשהי, נרצה לחשב את פונקציית הקורלציה כפונקציה של המרחק $C_k(r) \equiv \langle s_k s_{k+r}\rangle$. נשתמש בעובדה ש $s_i^2 = 1$ ולכן

$$
\begin{aligned}
C_k(r) &= \left\langle s_k s_{k+1}^2 s_{k+2}^2 ... s_{k+r-1}^2 s_{k+r}\right\rangle \\
&= \left\langle (s_k s_{k+1})(s_{k+1}s_{k+2})...(s_{k+r-1}s_{k+r})\right\rangle \\
&= \frac{\partial}{\partial(\beta J_k)}\frac{\partial}{\partial(\beta J_{k+1})}...\frac{\partial}{\partial(\beta J_{k+r-1})}\log Z = \prod_{i=k}^{k+r-1}\tanh(\beta J_i) \qquad (12)
\end{aligned}
$$

ואם נציב שחוזק האינטראקציה קבוע: $J_i = J$, נקבל

$$C_k(r) = \tanh(\beta J)^r \qquad (13)$$

מכיוון שכאמור $0 < \tanh(\beta J) < 1$ עבור $T > 0$ אנחנו מקבלים שפונקציית הקורלציה דועכת אקספוננציאלית עבור כל טמפרטורה חיובית. בטמפרטורה אפס, לעומת זאת, $C_k(r) = 1$, מה שמשקף את העובדה שהמצב הוא או שכל הספינים הם 1 או שהם -1, כלומר יש סדר. זהו הסימן של מעבר פאזה מגנטי, אבל במודל זה הוא קורה רק בטמפרטורה 0.

מגדירים את אורך הקורלציה ξ באופן הבא:

$$C_k(r) = e^{-r/\xi}$$

מצאנו ש: $\xi^{-1} = -\log\big(\tanh(\beta J)\big)$.
ככל שהטמפרטורה יותר נמוכה, ξ יותר גדול. ב$T \to 0$, $\xi \to \infty$.

כיצד משפיע שדה מגנטי חיצוני חלש שפועל על הספין j על הספין i? ההמילטוניאן של המערכת כאשר על הספין s_i פועל שדה מגנטי h_i:

$$H = -J\sum_{j=1}^{N-1} s_j s_{j+1} - \sum_{j=1}^{N} h_j s_j$$

ערכו הממוצע של הספין ה־i:

$$\langle s_i\rangle = \frac{1}{Z}\sum_{\{s_i\}} s_i e^{-\beta H}$$

השינוי בממוצע של הספין ה־i כאשר מפעילים שדה מגנטי חלש על ספין j:

$$\left(\frac{\partial\langle s_i\rangle}{\partial(\beta h_j)}\right)_{h=0} = \langle s_i s_j\rangle - \langle s_i\rangle\langle s_j\rangle = C(|i-j|)$$

קיבלנו שהתגובה של תוחלת הספין i כאשר מדליקים שדה מגנטי חלש על הספין j שווה לפונקציית הקורלציה שחישבנו. לכן, כאשר ξ (אותו מצאנו קודם) גדול, פרטורבציה שמופעלת על ספין בודד משפיעה גם על ספינים מרוחקים.

5 מיפוי לגז סריג (Lattice Gas)

כאמור בהקדמה, המודלים למגנטיות מצאו שימושים במערכות שונות לגמרי. אחת הדוגמאות החשובות היא המיפוי של מערכת מגנטית (של ספינים קלאסיים) למודל למעבר גז־נוזל. הרעיון הוא שבהינתן טמפרטורה, התנע של חלקיקי הגז לא חשוב מבחינת מעבר הפאזה, ולכן מספיק להסתכל על מיקום החלקיקים. אם נעשה דיסקרטיזציה למרחב, נוכל לדמות את הנפח בו נמצא הגז לסריג. אם צפיפות אתרי הסריג גדולה מספיק, זה יהיה הגיוני להניח שבכל אתר סריג מצוי לכל היותר חלקיק בודד (עקב הדחייה במרחקים קצרים בין חלקיקים), כך שלכל אתר בסריג אפשר להצמיד משתנה ρ_i השווה ל 0 אם אין חלקיק באתר ול 1 אם יש. את אינטראקציית המשיכה בין חלקיקים (כמו בגז ואן דר ואלס) נמדל על ידי כך שהאנרגיה נמוכה יותר אם יש חלקיקים בשני אתרים סמוכים. במימד אחד ההמילטוניאן אז יהיה

$$H=-\tilde{J}\sum_{i=1}^{N-1}\rho_i\rho_{i+1} \tag{14}$$

אם נזהה

$$s_i=2\rho_i-1 \tag{15}$$

ונציב בהמילטוניאן (2) נקבל

$$\begin{aligned}H &= -J\sum_{i=1}^{N-1}\left(2\rho_i-1\right)\left(2\rho_{i+1}-1\right)\\ &= -4J\sum_{i=1}^{N-1}\rho_i\rho_{i+1}+2J\sum_{i=1}^{N-1}\rho_i+2J\sum_{i=1}^{N-1}\rho_{i+1}-J\left(N-1\right)\end{aligned}$$

בדרך כלל מניחים ש"מסה" (או מספר החלקיקים) $M=\sum\rho_i$ הוא גודל קבוע, ולכן עד כדי קבועים (שלא חשובים באנרגיה) ואברי שפה (שלא משפיעים על המעבר), המילטוניאן (2) והמילטוניאן (14) שווים תחת הזיהוי $\tilde{J}=4J$. לכן מעבר הפאזה פאראמגנט־פרומגנט יכול למדל מעבר פאזה של גז־נוזל. מתברר שבמקרה זה הדימיון הוא לא רק איכותי, אלא שישנם גם גדלים מדידים שזהים בשני המעברים.